



TI-1993/11

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS FISICAS

DEPARTAMENTO DE FISICA DE LA TIERRA, ASTRONOMIA Y ASTROFISICA I

MODELO LAGRANGIANO DE DIFUSION DE PARTICULAS  
POR EL METODO MONTE-CARLO

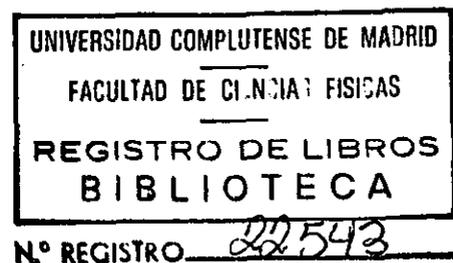
Memoria que para optar al grado de Doctor presenta

Rosa María GONZALEZ BARRAS

Director: M. Castro Muñoz de Lucas

TI-1993/11

1993



## AGRADECIMIENTOS

Quiero expresar mi agradecimiento a las siguientes personas, compañeros y amigos, que han facilitado la realización de la presente Memoria:

A Manuel de Castro Muñoz de Lucas, director del presente trabajo, por su apoyo constate y sus valiosas sugerencias.

A Adelaida Portela Lozano, por su valiosa ayuda en el proceso tipográfico.

A Encarna Serrano Mendoza, por su ayuda en la representación gráfica de datos.

A Miguel Angel Gaertner Ruiz-Valdepeñas y a Casimiro Fernández Galvín, por su colaboración en el campo de la Informática.

A Jose Manuel Redondo Apraiz, por sus sugerencias científicas.

Y en general, a todos mis compañeros del Departamento por su apoyo y por su interés en el trabajo que se presenta.

## PROLOGO

Se presenta un modelo bidimensional lagrangiano de dispersión de contaminantes basado en la técnica Monte-Carlo. El esquema que se ha diseñado permite modelar el comportamiento de un penacho de contaminantes en cualquier categoría de estratificación atmosférica.

En el capítulo 1 de la presente memoria se ofrece una síntesis de los modelos matemáticos que hasta la fecha han permitido simular el comportamiento de las sustancias emitidas desde un foco puntual.

En la primera parte del capítulo 2 se revisan los métodos y formulaciones que se utilizan actualmente para simular los procesos turbulentos que tienen lugar en la llamada Capa Límite Planetaria, mientras que la segunda parte se dedica a la descripción detallada de los modelos de partículas lagrangianos basados en la técnica Monte-Carlo para el tratamiento de la difusión y transporte de la contaminación atmosférica.

En el capítulo 3 se presenta el método seguido para diseñar el esquema propuesto, así como los resultados obtenidos en varios supuestos. Este capítulo se divide en tres partes:

- En la primera se analiza la influencia de diversos generadores de números aleatorios sobre este tipo de modelos de difusión aplicado a un penacho bidimensional.
- En la segunda parte se utiliza una versión unidimensional (vertical) del modelo para determinar la influencia de algunas magnitudes críticas en esta metodología. Sus resultados permiten elegir las condiciones más apropiadas que deben aplicarse con diferentes estratificaciones atmosféricas analizando el grado de ajuste del modelo según se definan estas magnitudes.
- En la tercera parte se especifica la versión bidimensional propuesta y se comparan sus resultados con los que se pueden obtener con el conocido modelo de penacho gaussiano para tres categorías de estabilidad atmosférica. Asimismo, se analiza el comportamiento de penachos en situaciones convectivas con un foco emisor en el suelo y en altura y, por último, se considera el caso de la difusión de un penacho bajo condiciones de "fumigación".

Finalmente en el capítulo 4 se ofrece un resumen de los aspectos del esquema lagrangiano presentado y de las conclusiones más significativas que se derivan de su aplicación.

# I N D I C E

1. INTRODUCCION .....	1
1.1. MODELOS DE DISPERSION ESTADISTICOS .....	3
1.2. MODELOS DE DISPERSION DETERMINISTAS.....	7
1.2.1. Modelos eulerianos .....	8
1.2.1.1. Soluciones analíticas .....	11
1.2.1.2. Soluciones numéricas .....	13
1.2.1.3. Esquemas de cierre de orden superior .....	14
1.2.1.4. Modelos caja .....	15
1.2.2. Modelos lagrangianos .....	16
1.2.3. Modelos gaussianos .....	21
1.2.3.1. Aplicaciones del modelo de penacho gaussiano ..	26
1.3. OBJETIVO DEL TRABAJO .....	27
2. METODOLOGIA .....	29
2.1. TEORIA DE LA CAPA LIMITE PLANETARIA.....	29
2.1.1. Altura de la Capa Límite.....	33
2.1.2. Varianzas de la velocidad del viento.....	34
2.1.3. Autocorrelaciones y correlaciones cruzadas.....	37
2.1.4. Escalas integrales de tiempo lagrangianas.....	39
2.2. MODELOS DE PARTICULAS.....	41
2.2.1. Elección del paso de tiempo.....	46
2.3. ESQUEMA LAGRANGIANO.....	47

3. SIMULACIONES.....	57
3.1. GENERACION DE DISTRIBUCIONES DE PROBABILIDAD DE LAS COMPONENTES DE LA VELOCIDAD.....	58
3.2. MODELO UNIDIMENSIONAL.....	69
3.2.1. Situaciones convectivas.....	70
3.2.2. Situaciones neutras.....	106
3.2.3. Situaciones estables.....	119
3.2.4. Fumigación.....	125
3.3. MODELO BIDIMENSIONAL.....	131
3.3.1. Comparación con un modelo de penacho gaussiano.....	132
3.3.2. Capa Límite Convectiva.....	137
3.3.2.1. Fuente emisora en el suelo.....	137
3.3.2.2. Fuente en altura (140 m).....	140
3.3.2.3. Comparación con el proyecto CONDORS.....	145
3.3.3. Fumigación.....	149
4. RESUMEN Y CONCLUSIONES.....	155
5. REFERENCIAS.....	159

## 1. INTRODUCCION.

La contaminación atmosférica, es decir la presencia de sustancias extrañas en la atmósfera o las alteraciones de las proporciones de sus componentes, por causas antropogénicas ha suscitado un gran interés desde comienzos de la década de los sesenta, aunque ya desde el siglo XII se conocen escritos con referencia a la calidad del aire. Esta toma de conciencia se debió a los efectos mensurables que las emisiones de origen urbano e industrial ejercen sobre la salud de los seres vivos y su entorno. No obstante, no debe olvidarse que la contaminación del aire también puede deberse a sustancias emitidas a la atmósfera por la naturaleza, que en ocasiones pueden llegar a ser perniciosas. Este trabajo se ceñirá exclusivamente a las emisiones antropogénicas y, en concreto, a su comportamiento dentro de la baja troposfera.

Los tres elementos que se tienen en cuenta en el problema de la contaminación atmosférica son la fuente de emisión, origen de las sustancias contaminantes, las características del transporte, dilución y transformación de dichas sustancias en el aire y el receptor donde se detecta su efecto nocivo. El procedimiento más apropiado para relacionar estos tres elementos es la aplicación de los llamados modelos de difusión atmosférica.

En todo proceso de modelado atmosférico es preciso realizar una distinción entre las diferentes escalas del transporte de los contaminantes en función de la distancia entre el receptor y el emisor:

- próximo a la fuente (< 1 km) (fuentes a nivel del suelo),
- a corta distancia (< 10 km) (fuentes elevadas),
- a distancia intermedia (entre 10 km y 100 km) y
- a larga distancia (> 100 km).

Una vez establecida la escala correspondiente al caso considerado, su simulación se puede plantear desde un punto de vista experimental, reproduciendo las condiciones de emisión y dispersión, y/o desde el conocimiento que se posee del medio dispersivo y de los fenómenos físico-químicos. Al primer procedimiento se le dá el nombre de modelado físico, mientras que al segundo se le conoce generalmente como modelado matemático, puesto que la descripción de los fenómenos que intervienen se realiza mediante el uso de expresiones matemáticas apropiadas. En general, este tratamiento conlleva ventajas en lo referente al coste económico y a la flexibilidad de poder simular cualquier proceso sin las restricciones que en algunos casos se pueden presentar en simulaciones reales o a escala. No obstante, el modelado matemático ha de apoyarse necesariamente en medidas u observaciones experimentales obtenidas durante el episodio considerado u otro similar, para poder verificar su grado de certeza evaluando el margen de error cometido. En concreto, la aplicación de un modelo matemático requiere un análisis técnico previo, que incluye el estudio del tipo de contaminante, su tiempo de permanencia promedio dentro del área considerada, las características de tal área y los equipos de que se debe disponer. Este análisis determina el modelo adecuado al caso, que será operativo después de un proceso de verificación para corregir o paliar al máximo sus posibles deficiencias. Dentro de las características del área se deben incluir las condiciones meteorológicas prevalentes que, a su vez, pueden establecerse a partir de datos observados o mediante los denominados modelos meteorológicos.

En algunos modelos de control de la contaminación atmosférica se requiere el uso previo de modelos meteorológicos con objeto de suministrar o preparar adecuadamente los valores de entrada o *input* que precisan. En esencia, los modelos meteorológicos proporcionan una descripción del campo de vientos y del régimen turbulento en el área estudiada. Se clasifican en:

- (1) modelos de semejanza que sirven para determinar parámetros meteorológicos, p.e. la altura de la capa de mezcla, o coeficientes de difusividad turbulenta, que no son directamente medibles y se han de inferir a partir de información meteorológica standard (p.e. Hunt y Simpson, 1982);
- (2) modelos de diagnóstico que realizan un análisis objetivo de los datos meteorológicos disponibles, mediante interpolaciones simples o complejas, pero que no pueden utilizarse para simular su evolución temporal (p. e. el modelo IBMAQ-2 de Shir y Sheih (1978), el modelo MATHEW de Sherman (1978) o el de Ludwig y Byrd (1980));
- (3) modelos de pronóstico que se utilizan para simular la evolución temporal del sistema atmosférico por medio de ecuaciones de conservación de masa, calor y cantidad de movimiento (p.e. Pielke, 1984 o Fernández, 1992).

Con independencia de la necesidad de un estudio previo de las condiciones meteorológicas de la zona a simular, los modelos matemáticos de difusión de contaminantes constituyen una de las técnicas que mayor atención ha recibido en los últimos lustros en el campo del medio ambiente atmosférico. Estos modelos, en función del enfoque del tratamiento de la contaminación atmosférica que se desee, pueden ser de tipo determinístico o de tipo estadístico. Los primeros simulan los fenómenos físicos entre el foco emisor y el receptor, mientras que los segundos establecen una relación entre concentraciones y emisiones registradas en el pasado, que se extrapola a condiciones futuras semejantes.

En la Figura 1.1. se ilustra esquemáticamente el procedimiento seguido por dos modelos deterministas (modelo gaussiano y modelo-K euleriano), dos modelos estadísticos (modelo autorregresivo y de regresión múltiple) y un modelo híbrido. En esta figura "E" representa la emisión, "MET" las variables meteorológicas, "MOD" el tipo de modelo donde el subíndice e indica modelo estadístico y d modelo determinista, "Co" representa la concentración observada, "Cp" la concentración prevista por el modelo. El subíndice t indica variabilidad temporal, t' representa el tiempo entre 1 y un valor máximo, t" el tiempo entre 0 y un valor máximo y s representa el espacio.

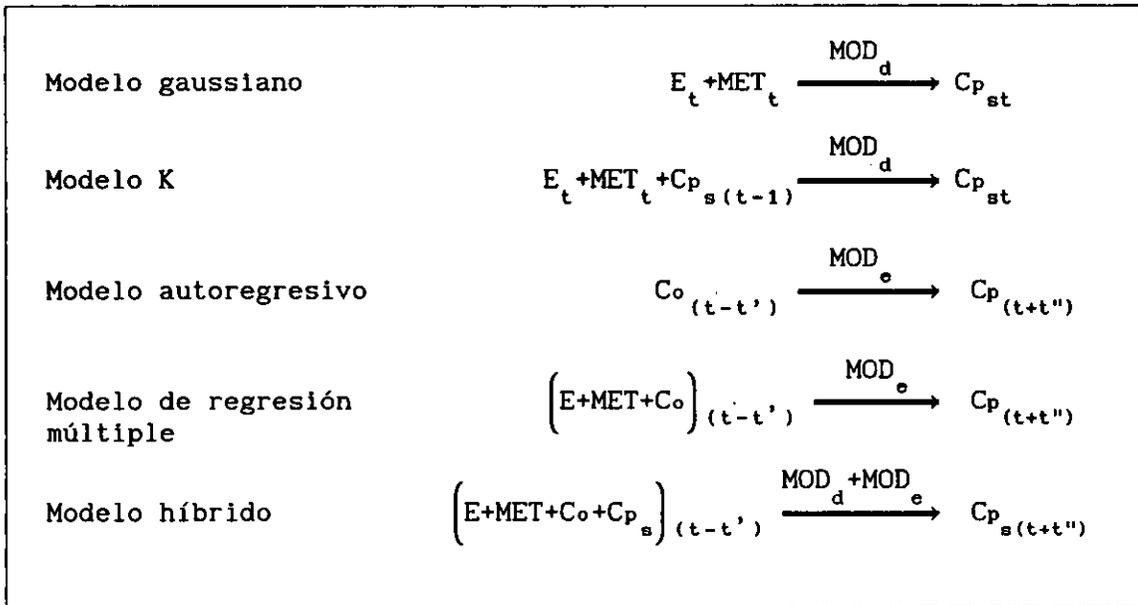


Figura 1.1. Representación esquemática de algunas metodologías matemáticas en contaminación. Tomado de Zannetti y Tombach (1986).

### 1.1. MODELOS DE DISPERSION ESTADISTICOS.

Como se ha indicado anteriormente, los modelos estadísticos se basan en relaciones semiempíricas de naturaleza estadística obtenidas a partir de medidas u observaciones en el pasado. Este tipo de modelos se utiliza para predicciones de corto alcance, con los que se pueden apreciar tendencias en la concentración de contaminantes en el aire. Zannetti y Tombach (1986) clasificaron los modelos estadísticos en las siguientes categorías:

- Distribuciones estadísticas de la concentración.
- Análisis de series temporales.
- Métodos mixtos determinístico-estadísticos.
- Modelos receptor.

El método de las distribuciones estadísticas de la concentración se basa en su aleatoriedad, caracterizada por su función de densidad de probabilidad (pdf) y la estructura de su autocorrelación. Esta última juega un papel fundamental en la variabilidad temporal de la concentración. El conocimiento de su pdf permite conocer la probabilidad de que se superen determinados niveles de calidad del aire establecidos en la legislación. Diversas pdf se han propuesto para la concentración, como son: la log-normal, Gamma, Pearson, etc. Georgopoulos y Seinfeld (1982) y Marani et al. (1986) discutieron y resumieron algunas de ellas y Surman et al. (1987) analizaron la estadística de los valores extremos de la distribución de la concentración, ya que es la que presenta mayor incertidumbre.

Los métodos de análisis de series temporales utilizan series de concentraciones registradas a lo largo de un periodo largo de tiempo para evaluar sus variaciones intrínsecas, sin explicarlas físicamente. Este tipo de modelos utilizan alguna de la siguientes técnicas:

- método de Box-Jenkins,
- análisis espectral,
- análisis de la regresión,
- análisis de la tendencia y
- análisis de componentes principales.

La metodología Box-Jenkins (Box y Jenkins, 1976) ha sido la más aplicada en el análisis de series temporales, tanto de medidas meteorológicas como de contaminantes. Simpson y Layton (1983) predijeron con este técnica concentraciones máximas de Ozono, Roy y Pellerin (1982) evaluaron tendencias, Zinsmeister y Redman (1980) la aplicaron a aerosoles y Murray y Faber (1982) analizaron la visibilidad.

Las técnicas espectrales (Jenkins y Watts, 1968) permiten identificar los ciclos de observaciones meteorológicas y de contaminación. Tilley y McBean (1973) y Trivikrama et al. (1976) mostraron la existencia de oscilaciones con periodos de 12, 24 y 72 horas en registros de la velocidad del viento, presión, temperatura y concentración de  $SO_2$ .

Los análisis de regresión son un tipo particular del análisis múltiple de las series temporales. En ellos se relacionan estadísticamente valores medidos de ciertas variables meteorológicas con las concentraciones observadas (Chock et al., 1975). Las variaciones estacionales y de tendencia también pueden ser consideradas en modelos de regresión múltiple (Buishand et al., 1988). El análisis por componentes principales lo aplicó Lin (1982) para calcular y predecir distribuciones de contaminantes.

El análisis de tendencia (Buishand et al., 1988) y el análisis de componentes principales (lin, 1982) se han aplicado en el cálculo de distribuciones de contaminantes y precipitaciones.

Los métodos de series temporales pueden aplicarse de dos maneras, la de ajuste y la de predicción. En la segunda los parámetros del modelo aplicado a un conjunto de medidas (p.e. coeficientes de regresión) se evalúan conociendo previamente dichos parámetros en otro conjunto de medidas. En el método de ajuste dichos parámetros sirven para evaluar el método de series temporales dentro de un mismo conjunto de medidas. Existen modelos de series temporales que de forma alternativa predicen y evalúan.

El tercer grupo lo componen los llamados modelos híbridos o mixtos, de tipo determinístico-estadístico, que utilizan métodos semiempíricos y filtros de Kalman en tiempo real. La formulación teórica de tales métodos se puede encontrar en Kalman (1960) y Jazwinski (1970). Los filtros de Kalman se basan en la recursividad del método de mínimos cuadrados, según se expone brevemente a continuación. Considérese el problema de regresión lineal

$$y = x \cdot a$$

en donde  $x$  es un conjunto de  $n$  variables linealmente independientes  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$  y  $a$  es un conjunto de coeficientes desconocidos  $(a_1, a_2, \dots, a_n)$ , ambas dependientes del tiempo. Si se dispone de  $k$  observaciones de las

variables  $x$  e  $y$ , podemos tener una estimación de  $a'_k$  del conocimiento de  $a$  por el procedimiento de mínimos cuadrados

$$a'_k = \left[ \sum_{i=1}^n x_i x_i \right]^{-1} \sum_{i=1}^n x_i y_i$$

Por tanto, si el número de observaciones  $k$  aumenta es necesario volver a aplicar esta ecuación. Para evitarlo se supone un método recursivo tal que  $a'_k$  sea la suma de su estimación en  $k-1$  observaciones ( $a'_{k-1}$ ) más un término que se basa en la nueva observación de  $y_k$  y  $x_k$ . Este método recursivo llega a la misma evaluación que mediante la expresión anterior. Posteriormente Kalman (1960) resolvió el problema general de estimar un conjunto de parámetros  $a_k$  en los que: (1)  $a_k$  representa la situación de un sistema dinámico, (2)  $a_k$  varía de acuerdo a un esquema estocástico global

$$a_k = F(k,k-1)a_{k-1} + G(k,k-1)w_k$$

donde  $F(k,k-1)$  es una matriz  $n \times n$  denominada de transición,  $G(k,k-1)$  es la matriz de entrada  $n \times n$  y  $w_k$  es un vector de variables aleatorias independientes de media cero y matriz de covarianza  $Q$  y de dimensión  $m$ . (3) las medidas de  $y_k = [y_1, y_2, \dots, y_p]_k$  pueden relacionarse linealmente con  $a_k$  mediante una ecuación observada del tipo

$$y_k = H_k a_k + v_k$$

donde  $H$  es una matriz de coeficientes de dimensiones  $p \times n$  y  $v$  es un vector de dimensión  $p$  que corresponde a los errores de medida indicados por variables aleatorias de media cero y matriz de covarianza  $R$ .

Estas ecuaciones del filtro de Kalman permite la aplicación de un método recursivo que estima  $a'_{k+j}$  a partir de  $a_{k+j}$  considerando únicamente las últimas observaciones de  $y_k$ , en vez de resolver en cada momento todo el problema por el método de mínimos cuadrados. Además, hace posible estimar la matriz de covarianza del error previsto  $a_{k+j} - a'_{k+j}$ , que refleja la exactitud de las estimaciones de  $a'_{k+j}$ .

El vector  $a_k$  refleja numéricamente el estado del sistema dinámico, como por ejemplo las concentraciones de contaminantes en la atmósfera. La matriz  $F$  refleja la representación determinista del fenómeno. En resumen, el filtro de Kalman proporciona un método para predecir la evolución de  $a_k$ , en el que se tienen en cuenta la componente determinista  $F$  (predictora) y las medidas  $y_k$  (correctoras).

Existen diferentes modelos con filtros de Kalman acompañados de otras metodologías como un modelo euleriano de tipo  $K$  (Bankoff y Hanzevack, 1975; Melli et al., 1981), o un modelo markoviano de primer orden (Zannetti y Switzer, 1979). Los filtros de Kalman, al igual que cualquier otra metodología, tienen sus limitaciones. La principal se relaciona con su gran

número de ecuaciones, que dá lugar a matrices con una excesiva dimensión. Por ello, se puede considerar un método alternativo que consiste en dividir el área de estudio en subzonas y aplicar a cada una de ellas el filtro.

Por último, haremos referencia a los llamados modelos receptor. Su metodología se basa en asignar la contribución de cada foco, o grupo de focos emisores, a las concentraciones registradas en un punto determinado sin tener en cuenta la dispersión de los contaminantes (Gordon, 1988). Es decir, mientras que los modelos de difusión calculan la contribución del foco al receptor en función de la emisión y de la acción dispersiva de la atmósfera, los modelos de receptores parten de las concentraciones observadas en el receptor y buscan posteriormente la aportación de cada una de las fuentes a cada uno de los contaminantes registrados,

$$c_{ik} = \sum_{j=1}^p a_{ij} D_{jk} E_{jk}$$

donde cada fuente  $p$  contribuye con  $c_{ik}$ ,  $a_{ij}$  es la fracción del componente  $i$  en la emisión del foco  $j$ ,  $D_{jk}$  corresponde al término de dispersión atmosférica y  $E_{jk}$  es el ritmo de emisión. El producto  $D_{jk} E_{jk}$  ( $=S_{jk}$ ) es la contribución total del foco  $j$  a la muestra  $k$  del receptor. Los modelos de dispersión suponen conocidos los valores de  $a_{ij}$ ,  $D_{jk}$  y  $E_{jk}$  y estiman la concentración  $c_{ik}$ , en cambio en este tipo de metodología la concentración y el valor de  $a_{ij}$  se conocen y el modelo debe evaluar la contribución total de cada foco a cada receptor.

Debido a su fuerte dependencia de los datos observados, en este tipo de modelos se deben tener muy en cuenta posibles errores de medida. En la actualidad hay un creciente interés en aplicar y desarrollar más esta metodología. Estos modelos se clasifican, según Henry et al. (1984), en cuatro categorías: conservación química de masa, modelos multivariantes, modelos microscópicos e híbridos fuente-receptor. Aproximadamente hace un lustro se propusieron un tipo de modelos receptor para contaminantes secundarios, no contemplados por las categorías anteriores exclusivas para contaminantes primarios, y fenómenos de deposición. La ecuación básica de esta metodología es

$$c_{irt} = \sum_{j=1}^p a_{ijt} D_{jrt} E_{jt} a_{ijrt}$$

donde  $c_{irt}$  es la concentración del contaminante  $i$  en la muestra recogida en el receptor  $r$  durante el intervalo de tiempo  $t$ ,  $a_{ijt}$  es el ritmo de emisión del contaminante  $i$  en la fuente  $j$ ,  $E_{jt}$  es la emisión total desde la fuente  $j$ ,  $D_{jrt}$  es el factor de dispersión de la fuente  $j$  al receptor  $r$  y  $a_{ijrt}$  refleja la pérdida o ganancia del contaminante  $i$  en el recorrido desde la fuente  $j$  al receptor  $r$ , tal que  $a_{ijrt}$  debe englobar la fracción de masa que se ha depositado y que se ha transformado químicamente en otro contaminante.

## 1.2. MODELOS DE DISPERSION DETERMINISTICOS.

Conceptualmente este tipo de modelos de difusión estima la concentración en la atmósfera de uno o varios contaminantes emitidos a ella, utilizando una técnica matemática que permite determinar su evolución espacial y temporal. Según sea el procedimiento matemático aplicado estos modelos se subclasifican en diferentes categorías. Los modelos de difusión determinísticos que han tenido, y siguen teniendo, mayor aplicabilidad son aquellos que suponen un perfil específico de concentración dentro de la nube de contaminantes que satisface la ecuación de una distribución de Gauss, por lo cual se les da el nombre de modelos gaussianos. Otros, en cambio, utilizan técnicas más complejas para estimar el transporte y dispersión que requieren su implementación en ordenadores, como son los llamados modelos eulerianos y lagrangianos. Los modelos eulerianos se basan en soluciones analíticas o numéricas de la ecuación de continuidad, mientras que la técnica lagrangiana se centra básicamente en la teoría estadística de la difusión turbulenta propuesta por Taylor.

La diferencia fundamental entre ambos tipos de modelos reside en el sistema de referencia que utilizan. La visión euleriana se basa en un sistema fijo al cual todo el movimiento del fluido se referencia. Por parte la visión lagrangiana establece un sistema de referencia móvil que acompaña a un elemento de fluido en su trayectoria. La Figura 1.2.1 muestra gráficamente la diferencia.

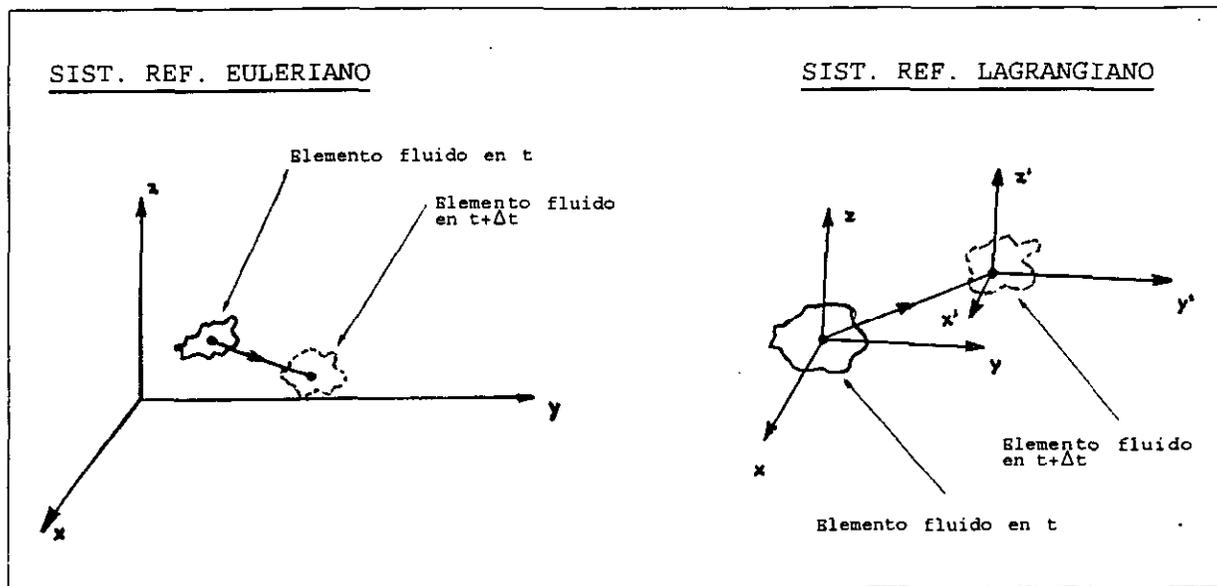


Figura 1.2.1. Sistemas de referencia euleriano y lagrangiano en el movimiento atmosférico.

La descripción euleriana es la más aplicada en el estudio del transporte de calor y masa de un fluido, mientras que la descripción lagrangiana se suele aplicar para conocer los cambios de concentración dentro del fluido. Cada una de estas dos aproximaciones constituyen una descripción válida de la difusión turbulenta, aunque ninguno puede actualmente facilitar una solución exacta. Diversos autores, especialmente

Lamb (referenciado en Longhetto, 1980), van Dop et al. (1985) y Sawford (1985), han analizado en profundidad ambas aproximaciones y las relaciones entre ellas. En la Tabla 1.2.1 se muestran esquemáticamente ambas metodologías.

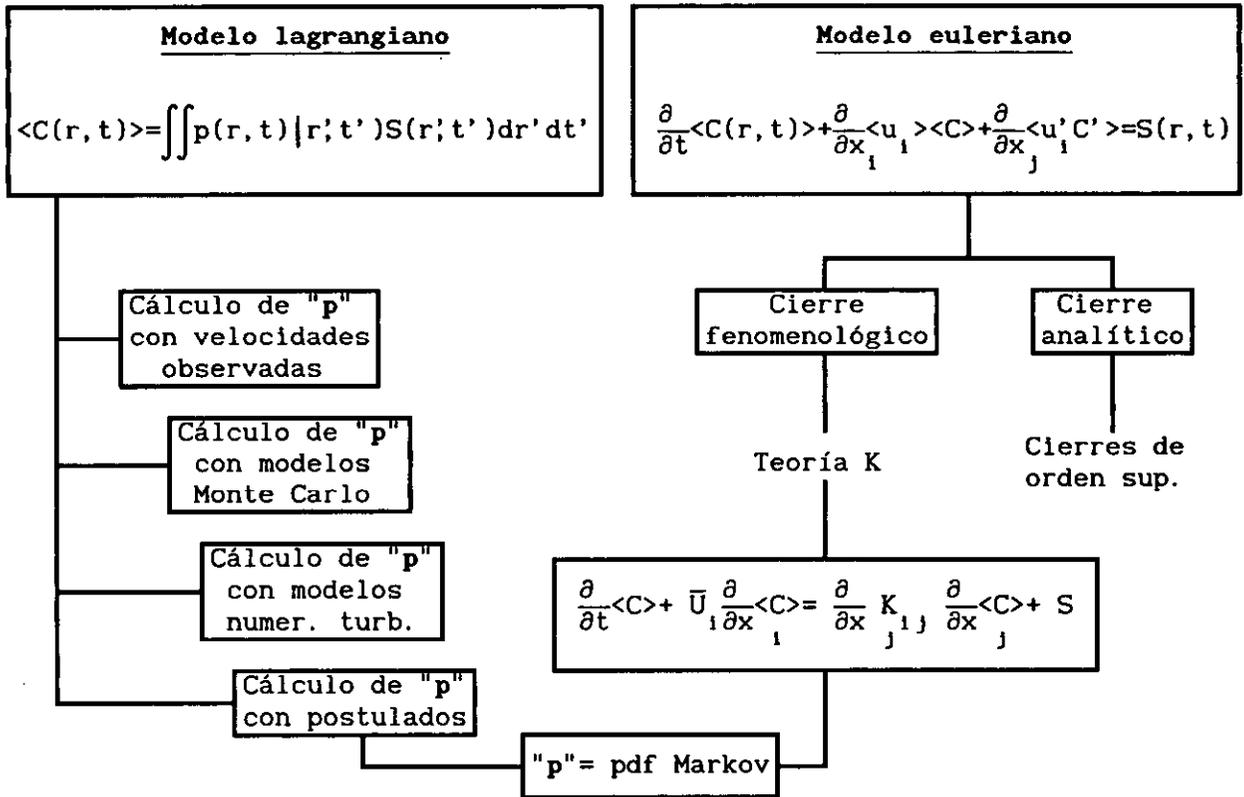


Tabla 1.2.1. Ilustración esquemática de la relación entre modelos lagrangianos y eulerianos (Longhetto, 1980)

En los casos de emisiones gases o partículas materiales desde chimeneas con una cantidad inicial de movimiento y temperaturas superiores a la del ambiente se ha de aplicar previamente un submodelo de tipo determinista. La consecuencia física de este fenómeno se cuantifica mediante el llamado *parámetro de sobreelevación*, definido como el desplazamiento vertical que experimenta el penacho antes de la dispersión (p.e. Briggs, 1984; Golay, 1982; Nieuwstadt y de Valk, 1987; van Haren y Nieuwstadt, 1989).

### 1.2.1. Modelos eulerianos.

La aproximación euleriana, como se ha indicado anteriormente, se basa en la conservación de masa o de la concentración por unidad de volumen "c" de un contaminante "i" en un determinado instante y lugar:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \nabla c_i + d \cdot \nabla^2 c_i + R_i + S_i \quad (1.2.1.1)$$

donde  $\vec{v}$  es el vector velocidad instantánea del fluido,  $d$  la difusividad molecular,  $\nabla$  el operador gradiente,  $\nabla^2$  el operador laplaciano,  $R$  refleja la creación/destrucción del contaminante por reacción química y  $S$  la fuente/sumidero del contaminante. El término  $d \cdot \nabla^2 c$  representa la difusión molecular y  $\vec{v} \cdot \nabla c$  es el término advectivo.

Además de ser necesario que el contaminante  $i$  satisfaga la ecuación de continuidad es preciso que la velocidad del fluido junto con la temperatura satisfagan, respectivamente, la ecuación de Navier-Stokes (conservación de la cantidad de movimiento) y la de conservación de energía. La resolución del sistema formado por, al menos, estas ecuaciones puede explicar los cambios experimentados por el vector velocidad, la temperatura del fluido y la concentración del contaminante, así como los efectos de tales variaciones sobre las demás variables. Sin embargo, cuando se estudia exclusivamente el comportamiento de contaminantes atmosféricos sólo es necesario resolver la ecuación de continuidad (ec. 1.2.1.1), salvo en situaciones en las que la presencia del contaminante afecte al comportamiento del fluido.

Si se considera que cada componente cartesiana  $j$  de la velocidad del fluido (donde  $v_1=dx/dt$ ;  $v_2=dy/dt$  y  $v_3=dz/dt$ ) depende del tiempo y del espacio,  $v_j$  puede representarse como suma de un valor medio  $\langle v_j \rangle$ , que se puede inferir de medidas experimentales o de modelos, y una fluctuación  $v'_j$  de naturaleza aleatoria, que supone una incertidumbre intrínseca al movimiento turbulento atmosférico, es decir

$$v_j = \langle v_j \rangle + v'_j \quad j=1,2,3$$

Por tanto, las concentraciones resultantes de cada contaminante  $i$ , obtenidas resolviendo la ecuación de continuidad, tendrán una componente aleatoria dependiente del espacio y del tiempo. Su determinación exacta no es posible, de la misma forma que no es posible calcular con precisión el valor de cualquier variable aleatoria en un experimento. Por ello se utiliza un método aproximado que consiste en determinar ciertas propiedades estadísticas de la concentración, en particular el llamado valor medio de conjunto  $\langle c \rangle$ , que se define como el promedio que se obtendría de un conjunto infinito de casos con iguales características atmosféricas. Esto supone una incertidumbre intrínseca del modelo de dispersión, ya que no puede predecir el valor real, sino un promedio teórico en espacio y tiempo. Así para cada contaminante  $i$

$$c_i = \langle c_i \rangle + c'_i$$

donde por definición  $\langle c'_i \rangle$  es nula.

Promediando la ecuación de continuidad de esta manera, se obtiene:

$$\frac{\partial \langle c_i \rangle}{\partial t} = -\langle v_j \rangle \cdot \nabla \langle c_i \rangle - \nabla \langle c'_i \cdot v'_j \rangle + d_i \cdot \nabla^2 \langle c_i \rangle + \langle R_i \rangle + S_i \quad j=1,2,3 \quad (1.2.1.2)$$

Aún en el caso más sencillo de un contaminante inerte ( $\langle R_i \rangle = 0$ ) este sistema de ecuaciones para cada componente  $j$  de la velocidad tiene más variables dependientes ( $\langle c \rangle$  y  $\langle c' \cdot v'_j \rangle$ ) que ecuaciones, lo que obliga a establecer un procedimiento aproximado de "cierre", característico de la turbulencia cuando se analiza desde el punto de vista euleriano, que no permite obtener una solución exacta de la concentración media.

Para tratar de resolver este problema, la alternativa más sencilla es establecer una relación entre la concentración media  $\langle c \rangle$  y los términos turbulentos  $\langle c' \cdot v'_j \rangle$ . El método que se sigue más frecuentemente, basado en el concepto de longitud de mezcla, se conoce con el nombre de Teoría K o Teoría del transporte de gradiente, según el cual se supone que:

$$\langle c' \cdot v'_j \rangle = -K \cdot \nabla \langle c \rangle \quad (1.2.1.3)$$

donde  $K$  es un término de difusividad turbulenta, representado por un tensor diagonal (3x3) cuyos elementos pueden estimarse a partir de un modelo meteorológico o inferirse de medidas meteorológicas. La difusividad turbulenta definida por la ecuación anterior varía generalmente en el tiempo y en el espacio.

Lamb (1973) evaluó las condiciones de validez de la ecuación (1.2.1.3) estableciendo que la Teoría K sólo es aplicable cuando  $(\tau_0 / T_c) \ll 1$ , donde  $\tau_0$  es el tiempo máximo en que un remolino atmosférico medio mantiene su integridad y  $T_c$  es la escala de tiempo de  $\langle c \rangle$ , tal que  $\partial \langle c \rangle / \partial t = \langle c \rangle / T_c$ . Es decir, este procedimiento sólo es aplicable cuando los cambios en  $\langle c \rangle$  tienen unas escalas mayores que las del transporte turbulento, una condición que normalmente no se cumple bajo condiciones de convección intensa ( $\tau_0 \gg T_c$ ). Por tanto, la ecuación (1.2.1.3) tiene una aplicabilidad limitada. Debido a ello se han desarrollado formulaciones más complejas (esquemas de cierre de orden superior) para evaluar  $\langle c' \cdot v'_j \rangle$ . Estos esquemas de cierre se discutirán en el apartado 1.2.1.3. Corsin (1974), al igual que Lamb (op. cit.), investigó las limitaciones de la suposición (1.2.1.3) sobretodo cuando la elección del tiempo medio es inadecuada. Varios esquemas de cierre de primer orden (Teoría K) se presentan y sus soluciones se analizan en Dobbins (1979) y en Kao (1984).

En los modelos basados en las ecuaciones (1.2.1.2) se hacen generalmente otras dos suposiciones: difusión molecular despreciable frente a la turbulenta,  $(\nabla \langle c'_i \cdot v'_j \rangle) \gg (d_i \cdot \nabla^2 \langle c_i \rangle)$ , y atmósfera incomprensible,  $\nabla \langle v'_j \rangle = 0$ . Con estas dos simplificaciones se obtiene la denominada *ecuación semiempírica de la teoría K de la difusión atmosférica*:

$$\frac{\partial \langle c_i \rangle}{\partial t} = - \langle v_j \rangle \cdot \nabla \langle c_i \rangle + \nabla \cdot (K_{jj} \nabla \langle c_i \rangle) + \langle R_i \rangle + S_i \quad (j=1,2,3) \quad (1.2.1.4)$$

donde los elementos de  $K_{ij}$  son cero si  $i \neq j$ , si los ejes de coordenadas coinciden con los ejes principales del tensor  $K$ . Existen numerosas formulaciones empíricas para la difusividad vertical  $K_{33}$  y para la difusividad horizontal  $K_{11} = K_{22}$  (p.e. McRae et al., 1982; Shir, 1973;

Bussinger y Ayra, 1974).

La ecuación de la teoría K de la difusión atmosférica puede integrarse analítica o numéricamente si se conocen las magnitudes  $\langle v_j \rangle$ , K y S y se imponen adecuadamente unas condiciones iniciales y de contorno para  $\langle c \rangle$ .

#### 1.2.1.1. Soluciones analíticas.

Las soluciones analíticas de la ecuación diferencial de la difusión turbulenta (1.2.1.4) sólo son posibles bajo determinadas suposiciones. Desde el comienzo de la década de los cincuenta numerosos investigadores han propuesto soluciones analíticas de la ecuación de difusión. Rounds (1955) y Smith (1957) encontraron soluciones para fuentes elevadas con diferentes perfiles de  $\langle v_1 \rangle$ , equivalente a la componente horizontal de la velocidad del viento, y valores del elemento  $K_{33}$  del tensor de difusividad turbulenta. Yeh y Huang (1975) y Demuth (1978) dedujeron soluciones más generales que las propuestas anteriormente por Rounds y Smith. La solución analítica de Demuth se implementó posteriormente por Tirabassi et al. (1986). Estas y otras soluciones han sido analizadas por diversos investigadores entre ellos Seinfeld (1986), Pasquill y Smith (1983) y Tirabassi et al. (1986).

En la Tabla 1.2.1.1.1. se muestran algunas de las soluciones de la ecuación de difusión turbulenta recopiladas por Seinfeld (1986), las cuales permiten conocer el valor de la concentración media  $\langle c \rangle$  a nivel del suelo y a cualquier distancia longitudinal x a sotavento de una fuente emisora de contaminación atmosférica. El subíndice x equivale al subíndice 1, el y equivale al 2 y el z equivale al 3.

Condiciones	Solución
Distribución inicial arbitraria $\langle c(x_0, y_0, z_0) \rangle$ , atmósfera ilimitada	$\langle c(x, y, z, t) \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2} [P_{xx}(t) P_{yy}(t) P_{zz}(t)]^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[ -\frac{(x-x_0-Ut)^2}{2P_{xx}(t)} - \frac{(y-y_0)^2}{2P_{yy}(t)} - \frac{(z-z_0)^2}{2P_{zz}(t)} \right] \langle c(x_0, y_0, z_0) \rangle dx_0 dy_0 dz_0$ $P_{xx}(t) = 2K_{xx}t \quad P_{yy}(t) = 2K_{yy}t \quad P_{zz}(t) = 2K_{zz}t$
Fuente puntual instantánea $\langle c(x_0, y_0, z_0) \rangle = \delta(x_0) \delta(y_0) \delta(z_0)$ , atmósfera ilimitada	$\langle c(x, y, z, t) \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2} [P_{xx}(t) P_{yy}(t) P_{zz}(t)]^{1/2}} \exp \left[ -\frac{(x-x_0-Ut)^2}{2P_{xx}(t)} - \frac{(y-y_0)^2}{2P_{yy}(t)} - \frac{(z-z_0)^2}{P_{zz}(t)} \right]$
Fuente puntual continua en el origen, atmósfera ilimitada	$\langle c(x, y, z) \rangle = \frac{1}{4\pi} (K_{yy}K_{zz}x^2 + K_{xx}K_{zz}y^2 + K_{xx}K_{yy}z^2)^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{U}{2K_{xx}} \left[ K_{xx}^{1/2} \left( \frac{x^2}{K_{xx}} + \frac{y^2}{K_{yy}} + \frac{z^2}{K_{zz}} \right)^{1/2} - x \right] \right\}$ <p>Cuando <math>x \gg \sqrt{y^2 + z^2}</math>,</p> $\langle c(x, y, z) \rangle = \frac{1}{4\pi(K_{yy}K_{zz})^{1/2}x} \exp \left[ -\frac{U}{4x} \left( \frac{y^2}{K_{yy}} + \frac{z^2}{K_{zz}} \right) \right]$
Fuente lineal continua sobre el eje $y$ , atmósfera ilimitada	$\langle c(x, z) \rangle = \frac{1}{2\pi(K_{xx}K_{zz})^{1/2}} K_0 \left[ \frac{U}{2} \left( \frac{y^2}{K_{xx}^2} + \frac{z^2}{K_{xx}K_{zz}} \right)^{1/2} \right] e^{Ux/2K_{xx}}$ <p><math>K_0(\cdot)</math> = función modificada de Bessel de tercer tipo            Cuando <math>Ux \gg K_{xx}</math> y <math>x \gg z</math>,</p> $\langle c(x, z) \rangle = \frac{1}{2(\pi K_{zz} U x)^{1/2}} e^{-Uz^2/4K_{zz}x}$
Fuente puntual continua $(0, 0, h)$ , plano reflectante $z=0 (K_{zz}=0)$	$\langle c(x, y, z) \rangle = \frac{1}{4\pi x (K_{yy}K_{zz})^{1/2}} e^{-Uy^2/4K_{yy}x} (e^{-U(z-h)^2/4K_{zz}x} + e^{-U(z+h)^2/4K_{zz}x})$
Fuente lineal continua en $x=0$ y $x=h (K_{xx}=0)$ , plano reflectante $z=0$	$\langle c(x, z) \rangle = \frac{1}{2(\pi U K_{zz} x)^{1/2}} (e^{-U(z-h)^2/4K_{zz}x} + e^{-U(z+h)^2/4K_{zz}x})$

Tabla 1.2.1.1.1. Soluciones analíticas de la ecuación de difusión atmosférica en turbulencia homogénea y estacionaria:  $\langle \vec{v} \rangle = (\langle u \rangle, 0, 0)$  y  $(K_{jj} = \text{cte en el espacio, } j=x, y, z)$ . De Seinfeld (1986).

Si se compara la concentración prevista por las soluciones de la tabla anterior con la observación experimental se observa, en la mayoría de los casos, la escasa concordancia entre ambas.

### 1.2.1.2. Soluciones numéricas.

Los métodos numéricos permiten obtener soluciones aproximadas de la ecuación de difusión atmosférica con menos restricciones que las analíticas. Estas técnicas de integración son:

- Métodos de diferencias finitas (Richtmyer y Morton, 1967)
- Métodos de elementos finitos (Strang y Fix, 1973)
- Métodos de elementos de contorno (Brebbia, 1978)

Las soluciones numéricas resultantes de la aplicación de cualquiera de los métodos anteriores dependen fuertemente de las condiciones de contorno y de los valores iniciales. Cuando se utiliza un método numérico se debe tener especial cuidado en inicializar correctamente todas las variables meteorológicas en el dominio computacional y definir correctamente la evolución temporal en los contornos. Estas técnicas también se utilizan en los modelos meteorológicos de pronóstico (Pielke, 1984).

Los métodos de diferencias finitas son las técnicas más utilizadas, aunque poseen algunas desventajas. El principal error de estos métodos es la aproximación del término advectivo,  $\langle v \rangle_j \cdot \nabla \langle c \rangle$ , que aumenta artificialmente el ritmo de la difusión de la concentración. Este problema numérico puede comprenderse fácilmente con el análisis del término advectivo en una dimensión:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \langle u \rangle_x \cdot \frac{\partial c}{\partial x} \quad (1.2.1.2.1)$$

cuya solución con un esquema de diferencias finitas de primer orden (centrado en el espacio) se puede aproximar como:

$$\frac{c_x^{t+1} - c_x^t}{\Delta t} = \langle u_x^t \rangle \frac{c_{x+1}^t - c_{x-1}^t}{2 \Delta x} \quad (1.2.1.2.2)$$

donde los subíndices indican la discretización espacial, con un tamaño de la malla de  $\Delta x$ , y los superíndices la discretización temporal, con un paso temporal

$\Delta t$ . El análisis de los términos truncados muestra que el error  $\epsilon$  generado por la aproximación de (1.2.1.2.2) es

$$\epsilon = \frac{\langle u \rangle_x \cdot \Delta x}{2} (1 - \langle u \rangle_x \cdot \Delta t / \Delta x) (\partial^2 c / \partial x^2) = D_n (\partial^2 c / \partial x^2)$$

El término  $D_n$  representaría la "difusión artificial", que es proporcional al tamaño de la malla  $\Delta x$ . En algunos casos esta difusión artificial puede tener el mismo orden de magnitud (e incluso superior) que la difusión atmosférica real, provocando una incorrecta determinación de la concentración media. Muchos investigadores han propuesto procedimientos para reducir  $\epsilon$ , como Egan y Mahoney, 1972; Runca y Sardei, 1975 (SHASTA); Pepper et al., 1979; entre otros. Otros autores como Chock y Dunker (1983) y Schere (1983) demostraron que ninguna aproximación por diferencias finitas puede ser válida con carácter general para todas las situaciones y que algunos

esquemas pueden producir una difusión artificial excesiva.

### 1.2.1.3. Esquemas de cierre de orden superior.

Debido a las limitaciones de la Teoría K se han desarrollado formulaciones más complejas para la resolución de la ecuación de la difusión atmosférica mediante esquemas de cierre de orden superior. Los dos esquemas de este tipo que han despertado más atención son: modelos de cierre de segundo orden (Lewellen y Teske, 1976) y las técnicas de simulación de grandes remolinos o *large-eddy simulation* (Nieuwstadt y de Valk, 1987).

El procedimiento para obtener un cierre de segundo orden consiste en expresar los nuevos términos de doble y triple correlación que aparecen al desarrollar la ecuación de difusión en función de variables del flujo medio. Usando estas aproximaciones Lewellen y Teske (1976) obtuvieron una ecuación diferencial para el flujo de masa turbulento que tiene un comportamiento dual según sea la escala del penacho comparada con la escala turbulenta. En el caso concreto del modelo de Lewellen y Teske, se manifiesta una mala predicción con algunos datos observados y, en cambio, una buena predicibilidad con los datos obtenidos en experiencias de laboratorio de Deardorff y Willis (1974). Por lo tanto, la aplicabilidad práctica de este tipo de cierre sigue siendo cuestionable (Enger, 1986).

Como describen Nieuwstadt y de Valk (op. cit.), un modelo de grandes remolinos calcula los movimientos turbulentos a gran escala resolviendo directamente un conjunto de ecuaciones modificadas de Navier-Stokes. Estas ecuaciones son:

- una ecuación filtrada de la cantidad de movimiento con términos subceldilla (subgrid),
- una ecuación filtrada de la temperatura con términos subceldilla,
- una ecuación de Poisson para la presión,
- ecuaciones de transferencia de gradiente para el cierre de todos los términos que describen los movimientos a escala subceldilla, y
- una ecuación de la energía subceldilla.

El término filtrado indica que no se tienen en cuenta los movimientos a escala inferior a la de la celdilla o grid.

Estas ecuaciones se resuelven por métodos de diferencias finitas con mallas entre 50 y 100 metros y pasos de tiempo de aproximadamente 5 segundos.

Nieuwstadt y de Valk (1987) utilizaron una ecuación de conservación que resolvieron simultáneamente con el modelo *large-eddy*. Esta aproximación permitió simular los experimentos de Willis y Deardorff (1981) con sustancias pasivas en condiciones convectivas. Lamb (1978) utilizó la salida del modelo de Deardorff (1974) para simular condiciones convectivas con sustancias sin flotabilidad. Sin embargo en simulaciones con penachos con flotabilidad la concordancia con los experimentos no es tan satisfactoria, aunque van Haren y Nieuwstadt (1989) modelaron razonablemente bien los experimentos de Carras y Williams (1984).

#### 1.2.1.4. Modelos caja.

Los modelos caja o modelos box se pueden clasificar en tres categorías:

- Modelos de caja única
- Modelos slug
- Modelos de caja múltiple

Este tipo de modelos se basa en la conservación de masa del contaminante dentro de una caja euleriana o caja fija. El concepto físico de la aproximación de estos modelos se representa gráficamente en la Figura 1.2.1.4.1.

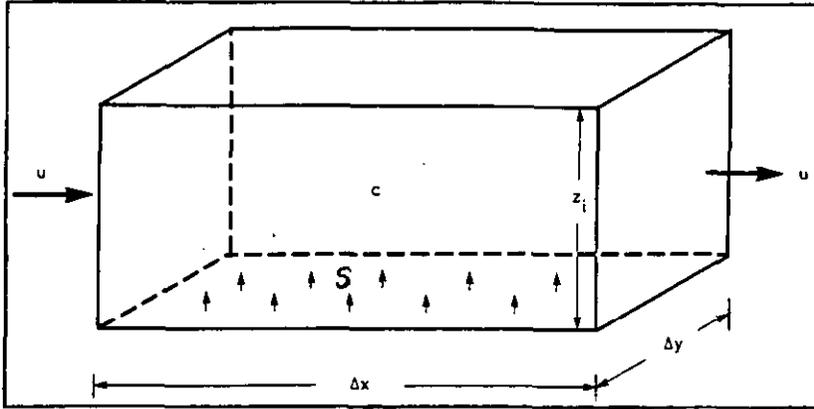


Figura 1.2.1.4.1. El modelo de única caja, donde  $S$  representa la emisión constante por unidad de área,  $u$  la velocidad del viento que es constante e inyecta en la caja aire limpio y  $c$  la concentración media dentro de la caja y variable en el tiempo.

La conservación de masa se expresa:

$$\frac{\partial}{\partial t} (cH) = S - c.H. \frac{u}{\Delta x} \quad (1.2.1.4.1)$$

Si se conoce la evolución temporal del espesor de la capa de mezcla  $H(t)$  es inmediata la determinación de la evolución temporal de la concentración de la caja (Venkatram, 1978).

Jensen y Peterson (1979) fueron los primeros en validar esta técnica, al compararla con concentraciones urbanas en donde la evolución de la capa de mezcla se obtuvo mediante un sondeador acústico o "SODAR".

Esta metodología se ha aplicado tanto a contaminantes inertes como a reactivos. En el caso de sustancias reactivas se le añade un término que engloba el equilibrio químico en la ecuación de conservación de masa dentro de la caja. En otros casos se han incorporado términos que reflejan la deposición seca/húmeda (Meszaros et al., 1978).

Venkatram, además de integrar la ecuación (1.2.1.4.1), demostró que el modelo caja tiene una fuerte carga inercial y, por lo tanto, no puede suministrar apropiadamente cambios rápidos ni en la velocidad " $u$ " ni en la emisión " $S$ ". Por ello, propuso el llamado modelo slug como una mejora del modelo caja, especialmente durante episodios de estancamiento. El modelo

slug permite que la concentración  $c$  varíe en la dirección horizontal longitudinal y en la vertical bajo la hipótesis de que la concentración no varía en la dirección horizontal transversal. Esto permite que la ecuación de conservación de masa en una única caja se exprese en dos dimensiones  $(x, z)$

$$\frac{\partial (cH)}{\partial t} + u \frac{\partial (cH)}{\partial x} = S \quad (1.2.1.4.2)$$

definiendo la concentración media en  $x$  como

$$\langle c(x) \rangle \cdot H = \int_0^{H(x)} c(x, z) \cdot dz \quad (1.2.1.4.3)$$

donde  $H(x)$  puede ser la altura de mezcla o el tamaño vertical del penacho generado por la emisión "S" a nivel del suelo.

La solución de las ecuaciones (1.2.1.4.2) y (1.2.1.4.3) muestra que, transcurrido un tiempo concreto después de que la emisión se interrumpe, la concentración media de toda la caja es nula. Con un modelo de caja única esta caída de concentración no se puede reproducir.

Gifford y Hanna (1973), entre otros, extendieron el concepto de caja única a simulaciones multicaja. En Stern (1976) se describe un modelo multicaja en su versión más sencilla. Las dos limitaciones principales de la aproximación multicaja son que no tiene en cuenta la dispersión horizontal y que supone mezcla instantánea en toda la caja, especialmente en la vertical. Estas aproximaciones proporcionan un ahorro en tiempo de cálculo y, en algunos casos, no perjudica la calidad de los datos de salida del modelo en regiones donde no se dispone de suficiente información meteorológica.

### 1.2.2. Teoría estadística de la turbulencia. Modelos lagrangianos.

La metodología lagrangiana consiste en el análisis del comportamiento de partículas que representan elementos de fluido o porciones de contaminantes gaseosos dentro de un flujo. La mezcla en un flujo turbulento se simula por el movimiento de las partículas que constituyen el fluido. En 1921, Taylor enfocó el estudio de la turbulencia desde este punto de vista, considerando un sistema lagrangiano de coordenadas en el caso de una emisión puntual de partículas dentro de un medio con turbulencia estacionaria y homogénea en el que la velocidad media es nula. Según este sistema de coordenadas la posición de cada partícula  $\vec{R}(\vec{r}_0, t) = x_1 \vec{i} + x_2 \vec{j} + x_3 \vec{k}$ , en el tiempo  $t$  es función de la posición  $\vec{r}_0$  en el instante inicial  $t_0$ . Definiendo cada componente de la velocidad lagrangiana de una partícula fluida en el tiempo  $t$  como

$$v_j = \frac{dx_j}{dt} \quad (j=1, 2, 3)$$

tenemos que:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle x_j^2 \rangle &= 2 \langle x_j \frac{dx_j}{dt} \rangle = 2 \langle x_j v_j \rangle = 2 \langle \left[ \int_0^t v_j(t') \cdot dt' \right] \cdot v_j \rangle = \\ &= 2 \int_0^t \langle v_j(t') \cdot v_j(t) \rangle dt' \end{aligned}$$

Si se supone que el régimen turbulento del flujo es estacionario  $\langle v_j^2 \rangle$ , la autocorrelación de  $v_j(t)$  y  $v_j(t')$  solamente es función de la diferencia de tiempo  $\Delta t = t - t'$ . Definiendo la autocorrelación como:

$$R_{v_j v_j}(\Delta t) = \frac{\langle v_j(t) \cdot v_j(t + \Delta t) \rangle}{\langle v_j^2 \rangle}$$

tenemos que

$$\frac{d}{dt} \langle x_j^2 \rangle = 2 \langle v_j^2 \rangle \int_0^t R_{v_j v_j}(\Delta t) \cdot d(\Delta t)$$

Integrando

$$\langle x_j^2(t) \rangle = 2 \langle v_j^2 \rangle \int_0^t dt' \int_0^{t'} R_{v_j v_j}(\Delta t) \cdot d(\Delta t)$$

se obtiene la evolución temporal de la varianza de cada partícula fluida.

Integrando por partes la expresión anterior

$$\langle x_j^2(t) \rangle = 2 \cdot \langle v_j^2 \rangle \cdot t \cdot \int_0^t (1 - \Delta t/t) R_{v_j v_j}(\Delta t) \cdot d(\Delta t)$$

Si "t" es pequeña comparada con la escala de autocorrelación de  $R_{v_j v_j}(\Delta t)$ , entonces  $R_{v_j v_j}(\Delta t) \approx 1$  en todo el dominio de la integral (Figura 1.2.2.1), obteniéndose que

$$\langle x_j^2(t) \rangle \approx \langle v_j^2 \rangle \cdot t^2$$

La raíz cuadrada de esta ecuación refleja un desplazamiento aleatorio que aumenta linealmente con el tiempo y es proporcional a la intensidad de las fluctuaciones turbulentas respecto al valor medio:

$$x_j'' \approx v_j'' \cdot t$$

donde con el superíndice '' se representa el carácter aleatorio de una variable.

Si "t" es grande comparada con la escala de autocorrelación se cumple que  $\Delta t/t$  es pequeña, dando lugar a

$$\langle x_j^2(t) \rangle \approx 2 \cdot \langle v_j^2 \rangle \cdot T_L \cdot t^2$$

donde

$$T_L = \int_0^\infty R_{v_j v_j}(\Delta t) \cdot d(\Delta t)$$

es la escala integral de tiempo determinada desde la autocorrelación lagrangiana  $R$ , también llamada "escala de tiempo lagrangiana".

Extrayendo la raíz cuadrada se obtiene finalmente:

$$x_j' \approx v_j' \cdot \sqrt{2T_L} \cdot \sqrt{t} \quad (t \gg T_L)$$

Esta ecuación refleja que el comportamiento en grandes intervalos de tiempo se asemeja a una trayectoria aleatoria, en la que la distancia recorrida por la partícula fluida se puede determinar por una serie de pasos aleatorios (no correlacionados). Dicha distancia es proporcional a la raíz cuadrada del tiempo. Esta similaridad se debe al hecho de que para grandes tiempos "t" las partículas fluídas se han "olvidado" de su comportamiento inicial ( $t=0$ ); a diferencia de lo que ocurre en pequeños tiempos en donde existe una cierta autocorrelación. En estos casos es aplicable la Teoría K con coeficientes de difusión turbulenta constantes.

Mediante análisis experimentales se ha deducido que la correlación  $R_{v_j v_j}$  se ajusta generalmente a una función exponencial  $\exp(-\Delta t/T_L)$  (Neumann, 1978 y Tennekes, 1979). Otro de los parámetros básicos de esta teoría es la escala de tiempo lagrangiana  $T_L$ , que es una magnitud difícil de medir directamente, debiendo determinarse a partir de medidas eulerianas. Existe una relación aproximada entre las escalas de tiempo euleriana  $T_E$  y lagrangiana  $T_L$ , como la propuesta por Pasquill (1974),

$$T_L = \beta T_E$$

donde ambas se relacionan a través de un coeficiente  $\beta$ , al que Pasquill asignó un valor igual a 4, mientras que Reid (1979) consideró que  $\beta=0.5/i$ , siendo  $i$  la intensidad de la turbulencia.

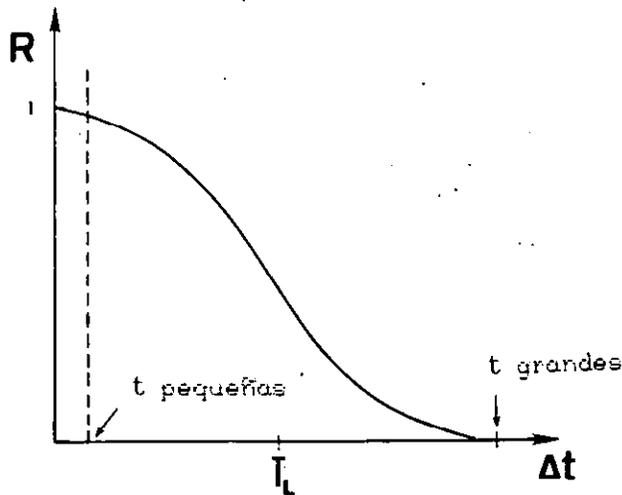


Figura 1.2.2.1. Función de autocorrelación en el tiempo.

Desde el punto de vista espacial cuando una "bocanada" (traducción del vocablo inglés puff) de sustancias contaminantes es transportada por el viento, tenderá a dispersarse debido a la acción de las fluctuaciones turbulentas de la velocidad del flujo atmosférico. En la figura 1.2.2.2. se muestra la dispersión de una bocanada bajo tres tipos de condiciones turbulentas. La figura 1.2.2.2a refleja una bocanada dentro de un campo turbulento en el que todos los remolinos son más pequeños que ella, distorsionándola debido a la incorporación de aire. En la figura 1.2.2.2b se observa como cuando el tamaño de la bocanada es inferior al tamaño de los remolinos turbulentos, éstos la trasladan diluyéndola muy lentamente hasta que, finalmente, la difusión molecular la disipa. La figura 1.2.2.2c refleja el comportamiento de una bocanada cuando su tamaño es similar al de los remolinos turbulentos; en este caso la bocanada se dispersará y distorsionará. En la atmósfera, debido a que siempre existen pequeños remolinos, la nube de contaminantes siempre se dispersará. En resumen, esta figura muestra que la dispersión de una bocanada depende de su tamaño frente a las escalas de longitud turbulentas. Al igual que sucede en el caso de emisiones instantáneas (bocanadas bien definidas), el tamaño de los remolinos turbulentos también influye en el comportamiento de un penacho continuo. Los remolinos de tamaño superior al del penacho tienden a transportarle, manteniéndolo prácticamente intacta su estructura espacial, aunque pueden distorsionarla (meandro), mientras que los más pequeños tienden a dispersarla.

El análisis teórico de la dispersión de un penacho puede estudiarse, por tanto, siguiendo el criterio estadístico de la difusión de una partícula fluida respecto a un eje fijo. Así, un penacho puede considerarse como un conjunto de partículas idénticas cuyo desplazamiento medio determina el comportamiento del penacho.

$$\begin{aligned}
\langle c(\vec{r}, t) \rangle = & \int_{-\infty}^{\infty} p(\vec{r}, t | \vec{r}_0, t_0) \cdot \langle c(\vec{r}_0, t_0) \rangle d\vec{r}_0 + \\
& + \int_{t_0}^t \int_{-\infty}^{\infty} p(\vec{r}, t | \vec{r}', t') \cdot S(\vec{r}', t) d\vec{r}' dt'
\end{aligned}
\tag{1.2.2.1}$$

donde el primer término derecho representa la distribución inicial de partículas presentes en el instante  $t_0$  y el segundo representa las partículas aportadas por las fuentes en el intervalo comprendido entre  $t_0$  y  $t$ .

Esta expresión es la ecuación fundamental de Lagrange de la concentración media de un contaminante inerte dentro de un fluido turbulento en el que existen fuentes de emisión. Si conocemos la concentración inicial,  $\langle c(\vec{r}_0, t_0) \rangle$ , y las emisiones de las fuentes  $S(\vec{r}', t)$ , la concentración dependerá únicamente de la evaluación de  $p(\vec{r}, t | \vec{r}', t')$ . La forma más empleada para esta función de densidad de probabilidad ha sido la fdp gaussiana.

Existen varios tipos de modelos que pueden considerarse como lagrangianos. La primera categoría corresponde a los denominados modelos caja, que suelen aplicarse en simulaciones con contaminantes fotoquímicos. La segunda categoría son los modelos de penacho segmentado gaussianos. En tercer lugar se encuentran los modelos "puff" gaussianos y, por último, están los modelos de partículas como el que se describe en la presente Memoria.

### 1.2.3. Modelos gaussianos.

En este tipo de modelos de difusión se presupone que en el seno de una nube de contaminantes emitidos desde un foco situado en las coordenadas  $(x_0, y_0, z_0)$  la distribución espacial de las concentraciones alrededor de su eje central se ajusta a una gaussina triple, de forma que

$$\langle c \rangle = \frac{S}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \cdot \exp \left( - \frac{(x-x_0)^2}{2 \sigma_x^2} - \frac{(y-y_0)^2}{2 \sigma_y^2} - \frac{(z-z_0)^2}{2 \sigma_z^2} \right)
\tag{1.2.3.1}$$

donde las  $\sigma$ 's representan las desviaciones típicas en las direcciones  $x$ ,  $y$ ,  $z$ , que son función de la distancia la fuente,  $S$  es la intensidad de la fuente contaminante y  $\langle c \rangle$  la concentración media en un punto  $(x, y, z)$ .

En la siguiente figura se refleja gráficamente las distribuciones

tridimensionales de la concentración media del contaminante a diferentes distancias de una fuente emisora puntual y continua, en un sistema de coordenadas orientado en la dirección del viento medio ( $\bar{U}$ ), que se supone coincide con el eje x del sistema de coordenadas.

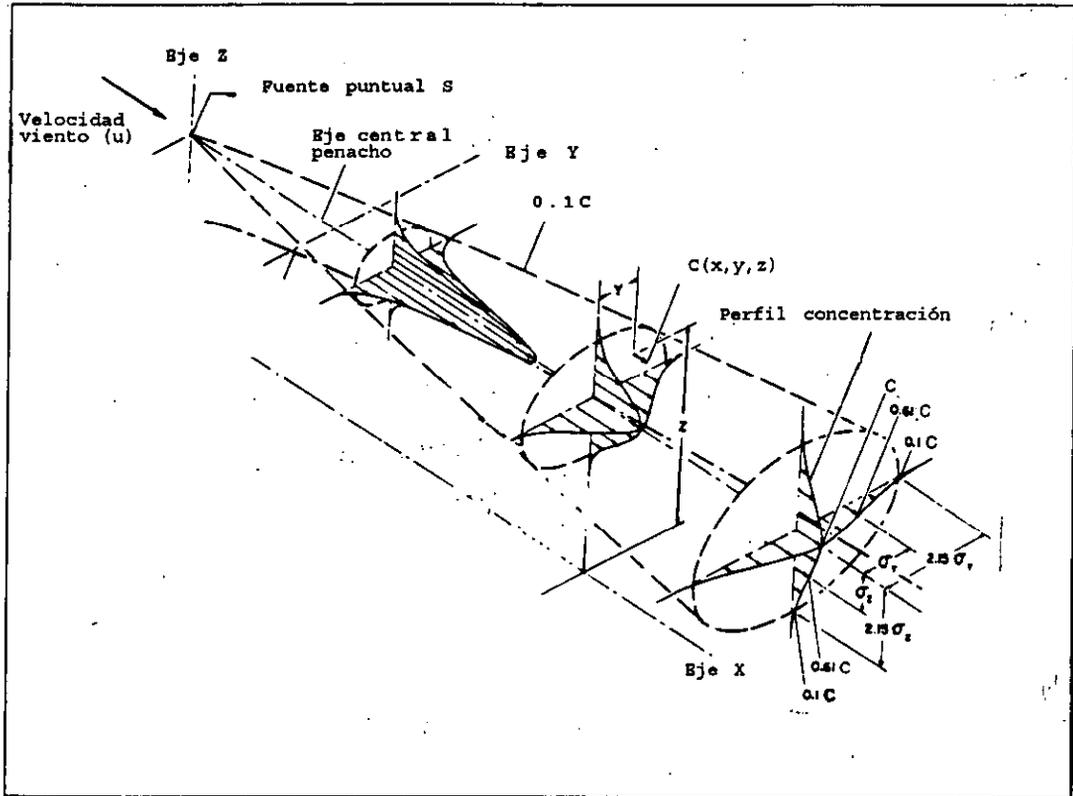


Figura 1.2.3.1. Penacho gaussiano.

En la Tabla 1.2.3.1 se muestran las expresiones de penachos gaussianos correspondientes a algunos casos particulares de dispersión de emisiones puntuales.

Fuente	Condiciones de contorno	Ecuación
1. Fuente puntual instantánea en $x_0$ . Viento medio, $\bar{u}_1 = U$ . Intensidad de la fuente = $S$ g	Ninguna	$\langle c(x, t) \rangle = \frac{S}{(2\pi)^{3/2} \sigma_1(t) \sigma_2(t) \sigma_3(t)}$ $\times \exp \left[ -\frac{(x-x_0-Ut)^2}{2\sigma_1^2(t)} - \frac{(x_2-x_0)^2}{2\sigma_2^2(t)} - \frac{(x_3-x_0)^2}{2\sigma_3^2(t)} \right]$
2. Fuente puntual continua en $x_0$ . Viento medio, $\bar{u}_1 = U$ . Intensidad de la fuente = $S$ g/s	Ninguna	$\langle c(x) \rangle = \frac{S}{2\pi \sigma_2(x_1-x_0) \sigma_3(x_1-x_0) U}$ $\times \exp \left[ -\frac{(x_2-x_0)^2}{2\sigma_2^2(x_1-x_0)} - \frac{(x_3-x_0)^2}{2\sigma_3^2(x_1-x_0)} \right]$
3. Fuente puntual instantánea en $x_0$ . Viento medio, $\bar{u}_1 = U$ . Intensidad de la fuente = $S$ g	Barrera reflectante (suelo) en $x_3 = 0$	$\langle c(x, t) \rangle = \frac{S}{(2\pi)^{3/2} \sigma_1(t) \sigma_2(t) \sigma_3(t)}$ $+ \exp \left[ -\frac{(x_1-x_0-Ut)^2}{2\sigma_1^2(t)} - \frac{(x_2-x_0)^2}{2\sigma_2^2(t)} \right]$ $+ \left\{ \exp \left[ -\frac{(x_3-x_0)^2}{2\sigma_3^2(t)} \right] + \exp \left[ -\frac{(x_3+x_0)^2}{2\sigma_3^2(t)} \right] \right\}$
4. Fuente puntual continua en $x_0$ . Viento medio, $\bar{u}_1 = U$ . Intensidad de la fuente = $S$ g/s	Barrera reflectante (suelo) en $x_3 = 0$	$\langle c(x) \rangle = \frac{S}{2\pi \sigma_2(x_1-x_0) \sigma_3(x_1-x_0) U}$ $+ \exp \left[ -\frac{(x_2-x_0)^2}{2\sigma_2^2(x_1-x_0)} \right]$ $+ \left\{ \exp \left[ -\frac{(x_3-x_0)^2}{2\sigma_3^2(x_1-x_0)} \right] + \exp \left[ -\frac{(x_3+x_0)^2}{2\sigma_3^2(x_1-x_0)} \right] \right\}$

Tabla 1.2.3.1. Ecuaciones de concentración media de una especie inerte en un régimen turbulento, estacionario y homogéneo. Los subíndices 1, 2 y 3 equivalen a los subíndices  $x$ ,  $y$  y  $z$  del texto. De Seinfeld (1978).

En las décadas de los sesenta y setenta estos modelos tuvieron su mayor auge, realizándose numerosas comparaciones con datos de observación que permitieron determinar su fiabilidad bajo diferentes condiciones atmosféricas y con diversos tipos de fuente (puntual, lineal y superficial). Partiendo de estos estudios la legislación de numerosos países estableció la aplicación de los modelos gaussianos como referencia para la mejora de la calidad del aire mediante el control de las fuentes emisoras de contaminantes urbanos e industriales, incluyendo a contaminantes peligrosos (p.e. gases densos), a pesar de que este tipo de modelos sólo resulta fiable bajo determinadas condiciones ideales: terreno llano, viento constante, turbulencia homogénea y estacionaria, contaminantes inertes y ausencia de deposición en el suelo. No obstante, teniendo en cuenta fundamentalmente la sencillez del procedimiento de cálculo que involucra, numerosos autores han propuesto diversas correcciones en la fórmula original con objeto de poder considerar casos con características diferentes a las ideales antes mencionadas. Sin embargo, cada vez se va adquiriendo un mayor consenso sobre las importantes limitaciones que presentan este tipo de modelos, de manera

que puede decirse que en la actualidad sólo resultan recomendables sólo si se consideran como una primera aproximación ("first guess") al problema del modelado del transporte y difusión de contaminantes atmosféricos.

Los modelos gaussianos no suelen considerarse encuadrados en los modelos eulerianos y lagrangianos, ya que desde cualquiera de estas dos metodologías es posible obtener un perfil gaussiano de la concentración de contaminantes en un penacho bajo ciertas condiciones ideales. Como ejemplo, a continuación se deducirá la expresión correspondiente a un penacho gaussiano emitido desde una fuente puntual instantánea dentro de un medio anisótropo, homogéneo y estacionario, utilizando ambas metodologías.

#### Desde metodología euleriana

En el caso de un contaminante inerte emitido en el seno de un fluido en reposo, la ecuación de conservación (ver ecuación (1.2.1.2)) es

$$\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t} = d \cdot \nabla^2 \langle c \rangle$$

donde  $\langle c \rangle$  representa la concentración media del contaminante,  $d$  el coeficiente de difusión, que se supone constante en cada dirección, y  $\nabla^2$  el operador laplaciano.

Por tanto la ecuación de conservación desarrollada será

$$\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t} = d_x \frac{\partial^2 \langle c \rangle}{\partial x^2} + d_y \frac{\partial^2 \langle c \rangle}{\partial y^2} + d_z \frac{\partial^2 \langle c \rangle}{\partial z^2}$$

Para una emisión instantánea desde  $(x_0, y_0, z_0)$  en  $t_0$ , en caso de una atmósfera infinita, la solución analítica es (Dobbins, 1979):

$$\langle c \rangle = \frac{S}{(4\pi (t-t_0))^{3/2} (d_x d_y d_z)^{1/2}} \cdot \exp \left( - \frac{(x-x_0)^2}{4d_x (t-t_0)} - \frac{(y-y_0)^2}{4d_y (t-t_0)} - \frac{(z-z_0)^2}{4d_z (t-t_0)} \right) \quad (1.2.3.2)$$

donde  $t$  es el tiempo transcurrido y  $S$  la emisión (g/s).

La semejanza de esta solución con la expresión del penacho gaussiano (1.2.3.1) permite relacionar las varianzas de la concentración media a una distancia de la fuente  $x-x_0 = U (t-t_0)$  con los coeficientes de difusión correspondientes:

$$\sigma_x^2 = 2 d_x (t-t_0) \quad \sigma_y^2 = 2 d_y (t-t_0) \quad \sigma_z^2 = 2 d_z (t-t_0)$$

Desde metodología lagrangiana

Partiendo de la ecuación fundamental de la dispersión lagrangiana, comentada en el apartado 1.2.2 :

$$\begin{aligned} \langle c(\vec{r}, t) \rangle = & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} p(\vec{r}, t | \vec{r}_0, t_0) \cdot \langle c(\vec{r}_0, t_0) \rangle d\vec{r}_0 + \\ & + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} p(\vec{r}, t | \vec{r}', t') \cdot S(\vec{r}', t) d\vec{r}' \end{aligned}$$

si se supone turbulencia homogénea y estacionaria, la probabilidad de transición "p" de una partícula depende exclusivamente de los desplazamientos en el tiempo y en el espacio y no de dónde o cuándo la partícula fué introducida en la corriente, es decir,  $p(\vec{r}, t | \vec{r}', t') = p(\vec{r} - \vec{r}', t - t')$ . Según las observaciones de Monin y Yaglom (1971) esta probabilidad de transición p obedece a una distribución gaussiana multidimensional:

$$p(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2} |P|^{1/2}} \exp\left(-\xi^T P^{-1} \xi / 2\right)$$

donde  $\xi^T$  es la matriz traspuesta del vector que tiene los siguientes elementos

$$\xi_i = x_i - x'_i - \langle x_i - x'_i \rangle \quad i=1,2,3$$

y donde  $P^{-1}$  y  $|P|$  son la matriz inversa y el determinante de la matriz P formada por los elementos

$$P_{ij} = \langle \xi_i \xi_j \rangle$$

En las aplicaciones de  $p(\vec{r} - \vec{r}', t - t')$  se supone que  $P_{ij} = 0$  para  $i \neq j$ , en cuyo caso su expresión se transforma, con  $\tau = t - t'$ , en

$$p(\vec{r} - \vec{r}', \tau) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2} \left( P_{11}(\tau) P_{22}(\tau) P_{33}(\tau) \right)^{1/2}} \exp\left[ -\frac{1}{2} \sum \frac{\xi_i^2}{P_{ii}(\tau)} \right]$$

Los elementos diagonales  $P_{ii}(\tau)$  se representan generalmente por  $\sigma_i^2(\tau)$ , dado que éstas son las varianzas de la distribución gaussiana. Por tanto, desde esta metodología lagrangiana también se obtiene la expresión clásica del penacho gaussiano emitido por una fuente puntual instantánea en régimen turbulento estacionario, homogéneo y anisótropo:

$$\langle c \rangle = \frac{S}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp \left( - \frac{(x-x_0)^2}{2 \sigma_x^2} - \frac{(y-y_0)^2}{2 \sigma_y^2} - \frac{(z-z_0)^2}{2 \sigma_z^2} \right)$$

### 1.2.3.1. Aplicaciones del modelo de penacho gaussiano.

La aplicación de la fórmula del penacho gaussiano se realiza utilizando valores de las desviaciones standard determinadas de forma semiempírica (Pasquill, 1961; Gifford, 1961. En Hanna et al. (1982) se puede encontrar un resumen. Tales formulaciones han permitido simular con cierto éxito las concentraciones medias en distancias a la fuente inferiores a 10 km, bajo condiciones atmosféricas muy favorables. Sin embargo, debido fundamentalmente a que sólo en raras ocasiones la turbulencia se puede considerar homogénea y estacionaria, las fórmulas del penacho gaussiano sólo pueden proporcionar una estimación del orden de magnitud de las concentraciones, de manera que en ocasiones los errores llegan a alcanzar valores inadmisibles. Por esta razón, algunos autores han intentado extender la aplicabilidad del método gaussiano a turbulencia no homogénea y/o no estacionaria, introduciendo algunas modificaciones en el método original. A modo de ejemplo, se comentan a continuación dos variaciones basadas en la metodología lagrangiana: la aproximación de penacho segmentado y la aproximación de bocanada o *puff*.

La aproximación llamada de penacho segmentado consiste en dividir al penacho en una serie de elementos independientes (segmentos o secciones) que evolucionan con el tiempo en función de las condiciones meteorológicas locales. Este método es válido en caso de difusión turbulenta localmente homogénea y estacionaria, con vientos superiores a 1 m/s, permitiendo una variación de la velocidad y dirección del viento horizontal.

La aproximación de bocanada se desarrolló para condiciones de turbulencia no estacionaria y no homogénea, teniendo la ventaja de poder simular situaciones de calma. Varios investigadores han discutido esta aproximación y, en función de sus conclusiones, han propuesto algunos algoritmos; entre los más interesantes se encuentran los de Sheih (1978) y Zannetti (1981).

Zannetti (1986) propuso una metodología mezcla entre ambas aproximaciones. Esta metodología está incorporada en un paquete informático denominado AVACTA II.

Además de los casos indicados en la Tabla 1.2.3.1, existen otros supuestos más complejos de penachos que han sido modelados con expresiones gaussianas, entre ellos está la simulación de la concentración dentro de estelas de edificios (Schulman y Hanna, 1986), atrapamiento de un penacho en valles (Harvey y Hamawi, 1986), difusión en zonas costeras (van Dop et al., 1979), difusión de gases densos (Spicer, 1985). También a las soluciones gaussianas se pueden incorporar efectos como la deposición seca/húmeda y transformaciones químicas sencillas.

No obstante, ha de tenerse en cuenta que todas estas modificaciones

introducidas en la expresión fundamental de los modelos gaussianos no permiten su aplicación de forma generalizada, pues se introdujeron esencialmente con vistas a simular situaciones particulares, después de numerosas comparaciones con observaciones reales "in situ".

### 1.3. OBJETIVO DEL TRABAJO.

A la vista de las importantes limitaciones que presentan los modelos de tipo gaussiano para simular el comportamiento de un penacho de contaminantes emitidos desde una fuente puntual continua, en este trabajo se aborda el problema proponiendo una metodología que se considera más adecuada, como es la que se basa en las técnicas lagrangianas. Como se ha comentado en los apartados anteriores existen otros métodos determinísticos para la simulación de la difusión y transporte de contaminantes, como son los modelos eulerianos de celdilla (grid). Sin embargo, este tipo de modelos no es capaz de resolver concentraciones de contaminantes a microescala, es decir a escalas inferiores al tamaño de la celdilla considerado. Asimismo, estos modelos basados en la hipótesis del transporte del gradiente sólo resultan aplicables en escalas espacio-temporales mucho mayores que las de la turbulencia.

La mejor alternativa para simular la dispersión de penachos cerca de una fuente puntual la constituyen los llamados modelos lagrangianos, que estiman las concentraciones en función de la distribución espacial de partículas emitidas, con la ayuda de funciones de densidad de probabilidad uni- o multi-variantes. Este tipo de modelos se ha desarrollado para simular procesos físicos de difusión en la atmósfera utilizando procesos estocásticos. Debido a su naturaleza, son particularmente apropiados para analizar la dinámica de fluidos turbulentos. Aunque la principal desventaja de estos modelos radica en la necesidad de conocer los valores de determinados parámetros turbulentos de origen lagrangiano, de difícil medida, sus ventajas más importantes frente a los eulerianos residen en que: (a) son versátiles y sencillos, (b) no requieren excesivo tiempo de cálculo, salvo cuando se considera un gran número de partículas, (c) permiten el tratamiento de emisiones desde fuentes puntuales o lineales debido a que consideran la difusión sobre escalas espacio-temporales pequeñas, (d) no presentan el problema de la difusión computacional ni de concentraciones negativas, y (e) el marco lagrangiano es el más natural para el modelado de la difusión turbulenta.

El objetivo de esta Tesis se dirige al desarrollo de un modelo lagrangiano de partículas según la técnica Monte-Carlo. El mayor esfuerzo se ha dedicado a resolver apropiadamente ciertos aspectos críticos que presentan este tipo de modelos, que sólo puede conseguirse después de analizar de forma exhaustiva posibles alternativas. El primero de ellos se refiere a la obtención de funciones de densidad de probabilidad desde generadores de números aleatorios, de manera que un generador inadecuado puede invalidar por completo los resultados que se consigan. En segundo lugar, existe un conjunto de variables que pueden alterar el comportamiento del esquema, entre ellas se puede citar la elección del paso de tiempo, las relaciones empíricas de algunos parámetros de la turbulencia atmosférica (p.e., desviación estándar y escala integral de tiempo lagrangiana). Por último, las condiciones de contorno e iniciales determinan de forma crítica los resultados finales. Este trabajo se centra inicialmente en los efectos de estas variables, donde sus influencias pueden llegar a ser determinantes.

En la bibliografía no existe ningún tipo de comprobación similar a la que se presenta aquí, salvo la realizada por Baerentsen y Berkowicz (1984) para analizar un aspecto parcial, como es el comportamiento de la velocidad en función de la altura.

Además de estos análisis de sensibilidad que se llavan a cabo utilizando una versión unidimensional (según la dirección vertical) del modelo, a causa del menor esfuerzo de cálculo que conlleva, se ha propuesto una nueva versión bidimensional, introduciendo una modificación en la primera ecuación del esquema correspondiente a la componente vertical del viento, que consideramos mejora el esquema propuesto por Zannetti (1991), que ha servido de base al modelo aquí desarrollado.

Como consecuencia de no disponer de datos observacionales con la calidad y complección suficientes para verificar el modelo, se ha procedido a comparar sus resultados con los obtenidos de un modelo de penacho gaussiano en condiciones ideales de difusión, las únicas bajo las que se considera que éste ofrece resultados más ajustados a la realidad. No obstante, también se ha contrastado cualitativamente el comportamiento del modelo con las descripciones de simulaciones a escala en laboratorio bajo condiciones más complejas, así como con los resultados obtenidos por otros modelos lagrangianos en estos casos.

Uno de los aspectos originales que se presenta en este trabajo es que, gracias al análisis de sensibilidad realizado, se ha podido simular el desdoblamiento de penachos emitidos desde chimeneas elevadas bajo condiciones de fuerte convección. A pesar de las evidencias observacionales, no se conoce ninguna referencia bibliográfica donde este comportamiento singular haya sido tratado.

Finalmente se analizan los resultados obtenidos con el modelo propuesto en un caso típico de fumigación del penacho, una compleja situación con características turbulentas claramente no estacionarias, imposible de simular satisfactoriamente con modelos más sencillos. Para ello se ha acoplado este modelo de partículas a uno unidimensional de pronóstico de la capa límite planetaria que se ha ejecutado bajo este supuesto.

## 2. METODOLOGIA.

La mayoría de los fenómenos de contaminación aérea ocurren en la parte más baja de la atmósfera que incluye la llamada capa límite planetaria. La descripción de los procesos difusivos y de intercambio que tienen lugar en esta zona de la atmósfera, así como la parametrización de los flujos turbulentos, constituirá la base de la primera parte de este capítulo. La difusión vertical turbulenta de la cantidad de movimiento, del calor o la masa es uno de los factores más importantes en el desarrollo de circulaciones atmosféricas. La necesidad de parametrizar adecuadamente dichos procesos ha dado lugar a que muchos investigadores en la actualidad los utilicen en sus modelos, sobretodo para observar los efectos de la turbulencia a diferentes distancias del suelo.

La segunda parte se centra en la descripción del modelo lagrangiano de partículas, explicando la metodología basada en la técnica Monte-Carlo y los aspectos críticos que plantea este tipo de modelos, a la luz de los conocimientos actuales.

### 2.1. TEORIA DE LA CAPA LIMITE PLANETARIA

La teoría sobre capas límites fué introducida por Prandtl en 1904 y aplicada en sus orígenes al campo de la Aerodinámica. En Física de Fluidos se llama *capa límite* a la región de un líquido o gas en contacto con una superficie material, en la que tiene lugar un intercambio de cantidad de movimiento, calor o masa entre dicha superficie y el fluido. Por analogía, con este concepto, a la región de la atmósfera donde se detecta un efecto directo de la superficie terrestre (sólida o líquida) se la conoce con el nombre de *capa límite atmosférica* (en adelante denominada de forma abreviada como CLP).

En general, se considera que en la CLP el flujo es completamente turbulento, de manera que en cualquier punto de ella se observan típicamente variaciones bruscas en el valor de la velocidad, la presión, la temperatura o la humedad del aire. El efecto de la fricción superficial, el calentamiento del suelo y la evaporación se transmite a toda la capa límite atmosférica de forma rápida y eficiente como consecuencia del mecanismo de mezcla turbulenta. Sin la turbulencia estos intercambios se producirían a consecuencia de procesos moleculares con magnitudes entre mil y un millón de veces menores.

La CLP abarca sólo una pequeña fracción de la atmósfera, dependiendo de un gran número de factores como el calentamiento del suelo, la rugosidad superficial, el viento, etc. Su espesor varía entre 30 y 3000 metros en latitudes medias, sin embargo, en las proximidades al Ecuador su determinación es difícil. Existen también casos en los que es difícil establecer la altura de la CLP en las latitudes medias, como en invierno sobre zonas continentales y durante el verano en zonas desérticas.

Generalmente la CLP se suele dividir verticalmente en varias subcapas caracterizadas por diferentes parámetros de escala (Holtslag y Nieuwstadt, 1986; Castro et al., 1991):

1. La subcapa más próxima al suelo con una altura correspondiente a la rugosidad superficial,  $z_0$ , se denomina *capa interfacial* o *capa*

*laminar*. En esta capa el efecto de la turbulencia es lo bastante pequeño como para que el flujo no se vea esencialmente afectado por ella, sino por la estructura de los elementos rugosos del terreno. El transporte de la cantidad de movimiento, de calor y vapor de agua dependen casi por completo de la viscosidad y las difusividades moleculares de calor y humedad. Cuando la superficie es lisa a esta capa se le da el nombre de *capa viscosa*, mientras que con suelo rugoso se llama *capa rugosa*. Si los elementos rugosos consisten en vegetación, más o menos permeable al flujo del aire, se la denomina *capa vegetal*. El espesor de la capa viscosa no supera el milímetro, pero el de la capa vegetal puede llegar a ser del orden de metros dependiendo de la altura de los elementos rugosos.

En la capa interfacial la parametrización de los flujos suelo-atmósfera se realiza generalmente aplicando el análisis de semejanza usando los Números adimensionales de Reynolds (Re), Prandtl (Pr) y Schmidt (Sc) (Deardorff, 1974; Brutsaert, 1988).

2. *La capa superficial* se encuentra entre la cima de los elementos rugosos del suelo y una altura variable que corresponde aproximadamente al 10% inferior de la CLP. En esta capa los flujos de cantidad de movimiento, de calor y humedad se consideran independientes de la altura, aunque en realidad varían en menos de un 20%, y en ella el efecto de la viscosidad, de los obstáculos y de Coriolis se consideran despreciables (Panofsky y Dutton, 1984).

La parametrización de los flujos turbulentos de cantidad de movimiento, calor y humedad se realiza mediante la aplicación de la teoría de semejanza de Monin-Obukhov (Monin y Obukhov, 1954; Businger et al., 1971; Pruitt et al., 1973; Brost, 1979; entre otros). Una ventaja de esta teoría es que varios parámetros de escala (velocidad de fricción " $u_*$ ", longitud de Monin-Obukhov "L") muestran un comportamiento universal que es función de la relación entre la altura y la longitud de Monin-Obukhov ( $z/L$ ).

3. *La capa de transición o capa de Ekman* ocupa el resto de la CLP. En ella el viento es prácticamente independiente de la naturaleza de la superficie, aproximándose paulatinamente al de la llamada atmósfera libre, donde su valor viene determinado por el balance entre el gradiente horizontal de presión y la fuerza de Coriolis (viento geostrófico). A lo largo de la capa de transición el viento medio va cambiando de dirección con la altura, de manera que finalmente en su extremo superior se aproxima al viento geostrófico, al tiempo que la magnitud de los flujos turbulentos disminuye drásticamente con la distancia al suelo.

Cuando existe una intensa actividad convectiva junto al suelo (convección libre), los efectos de los términos de presión y Coriolis resultan comparativamente pequeños y se observa en la capa de transición una gran actividad termo-convectiva; en tales condiciones a la CLP se la conoce con el nombre de *capa de mezcla* o *capa de convección libre*. En estos casos la cima suele coincidir con una inversión térmica elevada.

Deardorff (1970) introdujo los parámetros que caracterizan esta capa. El primero de ellos es la altura de la capa de mezcla "H", el segundo una escala para la velocidad llamada velocidad convectiva " $w_*$ " que

depende del flujo de calor superficial " $Q_o$ " y la flotabilidad ( $g/T_a$ ), donde  $T_a$  es la temperatura del aire junto al suelo

$$w_* = \left( \frac{g}{T_a} \cdot Q_o \cdot H \right)^{1/3}$$

y el tercero la escala de la temperatura que corresponde a la relación entre el flujo de calor y la velocidad convectiva.

Las parametrizaciones se derivan de teorías aproximativas para lograr el cierre del sistema de ecuaciones que rigen el comportamiento de la CLP, basadas en el principio de conservación de la masa, cantidad de movimiento, calor y vapor de agua en un volumen elemental de aire. En este sistema se tienen en cuenta los procesos de naturaleza turbulenta, tan importantes en la CLP. Debido a que este sistema posee más incógnitas que ecuaciones es necesario suponer hipótesis que permiten obtener la solución del sistema. Este es el llamado problema de cierre, que constituye el principal obstáculo para el desarrollo de una teoría general y rigurosa de la turbulencia. Para lograr el cierre del sistema se han propuesto varias teorías y aproximaciones, ninguna de las cuales ha resultado totalmente satisfactoria. Estas aproximaciones se han clasificado en dos grupos: las aproximaciones de cierre de primer orden, donde los términos de divergencia turbulenta se especifican en función de variables conocidas, y las de cierre de segundo orden o superior que determinan tales términos mediante la resolución de ecuaciones adicionales.

Las dos aproximaciones que constituyen los esquemas de cierre de primer orden son la hipótesis de viscosidad turbulenta o Teoría K propuesta por Boussinesq y la hipótesis de la longitud de mezcla de Prandtl, que no se describen en este trabajo (se pueden encontrar, p.e., en Arya, 1982). Estas aproximaciones se basan en la hipotética analogía entre las transferencias molecular y turbulenta, conocida por el nombre de "teoría del transporte-gradiente", debido a que en ella los flujos o transporte turbulento se relacionan con gradientes de los promedios de las variables.

Con esquemas de cierre superior se pueden eliminar algunos de los problemas que presentan las aproximaciones de cierre de primer orden bajo condiciones convectivas, sin embargo estos esquemas de cierre no pueden modelar correctamente situaciones con estratificación estable. Wyngaard y Coté (1974), Zeman (1981), Wyngaard (1982) y Mellor y Yamada (1982), entre otros, proponen diferentes técnicas de cierre de orden superior.

Las dificultades anteriormente mencionadas han dado lugar a otras metodologías que permiten obtener las relaciones entre los flujos turbulentos y los gradientes de las variables y propiedades del aire en la CLP. Dentro de estas metodologías se encuentra la Teoría de semejanza de Monin-Obukhov. En Castro et al. (1991) se sintetizan un gran número de parametrizaciones de la CLP.

Las parametrizaciones indicadas son aplicables a la CLP terrestre, sin embargo en la CLP marina pueden no ser aplicables en ciertos casos. En Businger (1985) puede encontrarse una revisión de las parametrizaciones para la capa límite marina que se utilizan en la actualidad.

## Teoría de semejanza de Monin-Obukhov

En el caso de que la estratificación térmica del aire junto al suelo tenga carácter neutro o indiferente se supone que el flujo vertical de la cantidad de movimiento es constante

$$\langle u'w' \rangle = - u_*^2$$

Considerando la Hipótesis de viscosidad turbulenta, la ecuación que rige el comportamiento vertical de la componente horizontal del viento medio " $\langle u \rangle$ " en una capa superficial neutra es el conocido perfil logarítmico

$$\langle u \rangle = \frac{u_*}{k} \ln \frac{z}{z_0}$$

siendo  $k$  la constante de von Karman que tiene un valor de 0.4 y  $z_0$  la rugosidad superficial, cuyo valor depende de las características del suelo. En Arya (1982) se puede encontrar situaciones en las que este perfil se debe corregir.

En el caso de que la estratificación térmica de aire junto al suelo no tenga carácter neutro, habría que tener también en cuenta el efecto del empuje hidrostático como consecuencia del gradiente vertical de densidad. La hipótesis de semejanza de Monin y Obukhov (op. cit.) se basa en que las características turbulentas y del flujo medio en la capa superficial dependen únicamente de cuatro variables independientes: la altura " $z$ ", la velocidad de fricción " $u_*$ ", el flujo de calor cinemático superficial " $Q_0$ " y la flotabilidad ( $g/T_a$ ). Monin y Yaglom (1971) indican que en este caso se pueden ignorar otras variables como la difusión molecular y la rugosidad. Con estas cuatro variables se puede definir una escala de longitud de la flotabilidad conocida como *longitud de Monin-Obukhov* (sin incluir el efecto del vapor de agua presente en el aire)

$$L = \frac{-u_*^3}{k \cdot (g/T_a) \cdot Q_0}$$

donde  $g$  es la aceleración de la gravedad, y el número adimensional

$$\zeta = \frac{z}{L}$$

Este número adimensional da idea de la importancia relativa de los efectos térmicos frente a los mecánicos sobre la generación de la turbulencia en la capa superficial. En consecuencia, otros números adimensionales similares, como el de Richardson local ( $R_1$ ) y de "bulk" deben ser función de  $\zeta$ . Así, en condiciones de inestabilidad  $\zeta = R_1$  y en condiciones de estabilidad

$$\zeta = \frac{R_1}{1 - 5R_1}$$

donde el número de Richardson local se define como

$$R_1 = \frac{g}{s^2} \frac{\partial \theta}{\partial z}$$

siendo "s" la cizalla vertical del viento y  $\theta$  la temperatura potencial.

La longitud de Monin-Obukhov caracteriza el tipo de estratificación de la atmósfera. Cuando el flujo cinemático de calor es positivo, estratificación inestable, el valor de L es negativo, mientras que en estratificación estable es positivo.

De esta manera, cualquier variable turbulenta, si se la normaliza mediante una adecuada combinación de escalas de velocidad ( $u_*$ ), de temperatura potencial ( $\theta_* = -Q_0/u_*$ ) y de humedad específica ( $q_* = -Q/u_*/\rho$ ; siendo Q el flujo de humedad desde la superficie y  $\rho$  la densidad del aire), debe ser una función única del número adimensional  $\zeta$ . Estas relaciones de semejanza se basan en la denominadas *funciones universales*, que se determinan mediante procedimientos teóricos o empíricos. En Arya (1982) se puede encontrar diversas expresiones de tales funciones universales.

Frecuentemente no se puede disponer de medidas *in situ* de algunos de los parámetros atmosféricos que caracterizan la CLP, por lo que se han desarrollado técnicas que los infieren a partir de información meteorológica estándar en superficie (van Ulden y Holtslag, 1985). En los apartados siguientes se describirán las expresiones de algunos de los parámetros de la CLP basados en técnicas semiempíricas.

### 2.1.1. Altura de la Capa Límite.

Su altura depende de las características reinantes en la región. En condiciones de indiferencia o neutralidad su altura se determina (cuando no existe ninguna medida de inversión) por la expresión de Panosky y Dutton (1984)

$$H = k_1 \frac{u_*}{f}$$

siendo la estimación de  $k_1$  de 0.15 a 0.25 y f el parámetro de Coriolis.

Si existe inversión en altura y su límite inferior no supera el valor de H, se tomará este límite como la altura de la CLP neutra.

En estratificaciones estables, como por ejemplo una inversión nocturna con base en el suelo, la altura de la CLP estable se considera como el límite establecido por la inversión, aunque se han medido alturas superiores (André et al., 1978).

Sin necesidad de desarrollar modelos complejos como los propuestos por André et al. (op. cit.), se han establecido expresiones sencillas como la propuesta por Zilitinkevich (1972)

$$H = a \sqrt{\frac{u_* L}{f}}$$

donde  $a$  es una constante de valor aproximadamente igual a 0.4 (Brost y Wyngaard, 1978; Garrat, 1982). Caughey et al. (1979) ajustaron adecuadamente los datos de Minnesota con un valor de 0.7. Hanna (1982) indica que su valor es de 0.25.

Algunos autores han comprobado su validez y otros por el contrario sugieren que sus resultados insatisfactorios se deben a las imprecisiones con que se determinaron  $u_*$  y  $L$  (Brost y Wyngaard, 1978).

Verkatram (1980) expresa la altura de la CLP estable para latitudes medias como

$$H = 2.4 \times 10^3 \times u_*^{3/2}$$

En estratificaciones inestables, la altura de la CLP se determina mediante expresiones más complejas como la indicada por Panosky y Dutton (1984).

Finalmente, respecto a la altura de la capa de mezcla existe una manera sencilla de establecerla, olvidando la dinámica turbulenta y enfocando la evolución temporal de su altura desde el estudio termodinámico (Stull, 1991).

### 2.1.2. Varianzas de la velocidad del viento

Existen medidas experimentales de las varianzas de cada una de las componentes del viento que han permitido deducir expresiones en cualquiera de las estratificaciones de la CLP. Considerando la hipótesis de que cada componente de la velocidad se puede expresar mediante la suma de un valor medio y una perturbación, la varianza de la componente y la perturbación coincide. Diversos autores han establecido expresiones para las varianzas que posteriormente se han considerado en modelizaciones matemáticas. En el siguiente esquema exponemos diversas relaciones semiempíricas de la desviación estándar de cada componente de la velocidad, en donde el símbolo "+" indica que el autor la aplicó en su modelo o simplemente la referencia. Estas relaciones empíricas se han establecido desde medidas eulerianas, sin embargo según demuestra Legg (1983), y anteriormente Lumley en 1962 (referenciado en Sawford, 1985), estas expresiones pueden ser expresiones válidas para las desviaciones estándar lagrangianas. La mayoría de los autores consideran esta igualdad (Pasquill y Smith, 1983).

Estratificación ESTABLE

$\sigma_{u'}$	$\sigma_{v'}$	$\sigma_{w'}$	Autor
$2.3u_* (1-z/H)$		$1.5u_* (1-z/H)$	Caughey et al., 1979
$2.0u_* (1-z/H)$	$1.3u_* (1-z/H)$	$1.3u_* (1-z/H)$	Hanna, 1982
$2.3u_*$		$R_{1s}$ (coefic. indicado por los autores)	Hurley y Physick, 1991 <sup>+</sup>

Estratificación INDIFERENTE O NEUTRA

$\sigma_{u'}$	$\sigma_{v'}$	$\sigma_{w'}$	Autor
		$1.3u_*$	Hall, 1975 <sup>+</sup>
$2.0u_* \exp(-3fz/u_*)$	$1.3u_* \exp(-2fz/u_*)$	$1.3u_* \exp(-2fz/u_*)$	Hanna, 1982 <sup>+</sup>
$2.4u_*$	$1.9u_*$	$1.25u_*$	Panofsky y Dutton, 1984
$2.3u_*$		$R_{1s}$ (coefic. indicado por los autores)	Hurley y Physick, 1991 <sup>+</sup>

Estratificación INESTABLE

$\sigma_u'$	$\sigma_v'$	$\sigma_w'$	Autor
		$1.1u_*  z/kL ^{1/3}$	Hall, 1975 <sup>+</sup>
$u_* (12+0.5 H/L )^{1/3}$	$u_* (12+0.5 H/L )^{1/3}$	$1.3u_* (1+3 z/L )^{1/3}$	Panofsky et al, 1977 (capa superficial)
$u_* (12+0.5 H/L )^{1/3}$	$u_* (12+0.5 H/L )^{1/3}$	$0.96w_* (3z/H-L/H)^{1/3}$ para $z/H < 0.03$	Hanna, 1982 <sup>+</sup>
		$\min(0.96w_* (3z/H-L/H)^{1/3},$ $0.763w_* (z/H)^{0.175})$ para $0.03 < z/H < 0.4$	
		$0.722w_* (1-z/H)^{0.207}$ para $0.4 < z/H < 0.96$	
		$0.37w_*$ para $0.96 < z/H < 1.0$	
			Wilczak y Phillips, 1986
$c \cdot w_* \{0.5[2-(z/H)^{1/2}] + 0.3(z/H)^{1/2}\}^{1/2}$		$w_* \{1.8(z/H)^{2/3} [1-0.91(z/H)]\}^{1/2}$	
$c \cdot w_* \{0.5[2-(z/H)^{1/2}] + 0.3(z/H)^{1/2}\}^{1/2}$ (c es el valor superficial de $\sigma_u'/w_*$ )			
$u_* (12+0.5 H/L )^{1/3}$		$K/\lambda_{m,w} A$ (K-difusividad turbulenta) ( $\lambda_{m,w}$ -longitud de onda en w) (A-un coeficiente)	Hurley y Physick, 1991 <sup>+</sup>
		Todos estos valores están indicados por los autores.	

### 2.1.3. Autocorrelaciones y correlaciones cruzadas

La Teoría Estadística debida a Taylor, como ya se reflejó en el apartado 1.2.2., se centró en el tratamiento de los flujos turbulentos homogéneos e isotrópicos; en tales flujos las fluctuaciones de presión y velocidad son estadísticamente independientes de la posición y de la orientación, lo que simplifica la descripción estadística. Taylor en su Teoría Estadística introdujo la representación espectral de la turbulencia y el concepto de covarianzas y función de correlación en la velocidad

$$R_{u_i u_j} = \langle u_i(t), u_j(t+\tau) \rangle$$

$$R_{u_i u_j} = \langle u_i(t), u_j(t+\tau) \rangle / \sigma_{u_i} \cdot \sigma_{u_j}$$

entre dos componentes de la velocidad en dos instantes diferentes  $t$  y  $t+\tau$ . La variable  $\tau$  es equivalente en este apartado a  $\Delta t$  del apartado 1.2.2. Las autocovarianzas ( $i=j$ ) y covarianzas cruzadas ( $i \neq j$ ) son integrables y sus transformadas de Fourier son las denominadas densidad espectral y densidad co-espectral.

Una de las propiedades interesantes de la covarianza o correlación es

$$R_{u_i \dot{u}_j} = - \frac{\partial}{\partial \tau} R_{u_i u_j}(\tau)$$

que refleja la correlación entre la velocidad "u" y la aceleración "ü", término que según van Dop et al. (1985) debe incluirse en simulaciones de turbulencia no homogénea y no estacionaria.

Las medidas eulerianas y lagrangianas en flujos turbulentos de altos números de Reynolds han mostrado que ambos autocorrelogramas temporales tienen una forma similar y su diferencia se debe a la escala de tiempo utilizada en cada caso. Ambos autocorrelogramas se pueden aproximar a una función exponencial (Neumann, 1968; Hall, 1975; Tennekes, 1979 y Hanna et al., 1982), como se muestra en la Figura 2.1.3.1 del autocorrelograma lagrangiano, en donde con pequeñas diferencias de tiempo  $\tau$ , posteriormente reflejadas por  $\Delta t$ , tiende a 1 y para grandes pasos de tiempo tiende a cero.

$$R_{u_i u_i}(\tau) = \exp\left[-\frac{\tau}{T_{u_i}}\right] \quad (2.1.3.1)$$

donde T corresponde a la escala de tiempo,  $T=T_E$  en un estudio euleriano y  $T=T_L$  en un estudio lagrangiano.

Aunque Smith (1968) indicó que la autocorrelación temporal R debe satisfacer la condición  $dR/d\tau=0$  en  $\tau=0$  para evitar la posibilidad de aceleraciones infinitas, Snyder y Lumley (1971) y posteriormente Pasquill (1974) muestran que aunque la aproximación exponencial no cumple la condición anterior, no introduce grandes errores en el tratamiento markoviano de la turbulencia, siendo más importante la expresión correcta de la escala de tiempo. Deardorff y Peskin (1970) analizaron la forma exponencial de la función de autocorrelación lagrangiana para las tres

componentes. En la Figura 2.1.3.1 se muestra gráficamente (puntos) la aproximación exponencial (2.3.1.1) y la autocorrelación temporal lagrangiana (línea continua) de su modelo. En dicha figura se puede observar que para grandes intervalos de tiempo  $\tau$ , la autocorrelación es negativa con independencia de la componente de la velocidad, especialmente la autocorrelación de la tercera componente; estos autores suponen que en este caso las reflexiones de las partículas en la parte más baja de la Capa Límite Convectiva tienen un papel importante. Otros autores, como por ejemplo, Gifford (1982), Lee y Stone (1983) y Li y Meroney (1985) analizaron las relaciones entre las autocorrelaciones eulerianas y lagrangianas calculadas desde simulaciones Monte Carlo con las estimadas por aproximaciones analíticas mucho más complejas que la sencilla expresión exponencial.

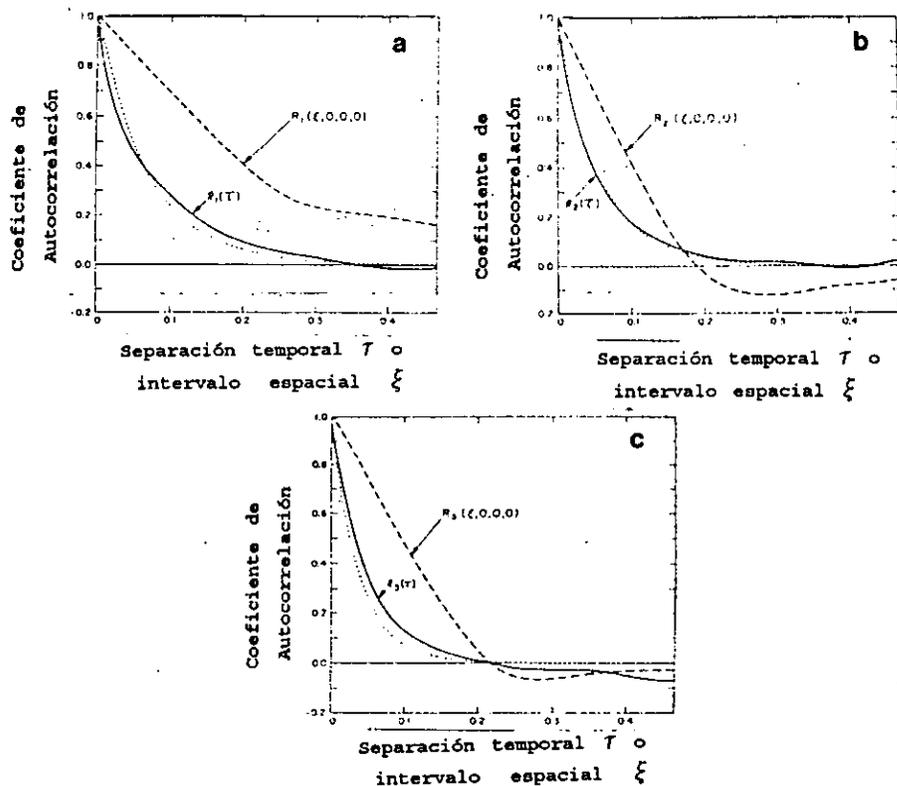


Figura 2.1.3.1. Funciones de autocorrelación para la componente de la velocidad en la dirección (a) x, (b) y, (c) z. La línea continua representa la autocorrelación temporal lagrangiana en  $z=0.25$  y la línea punteada la aproximación exponencial de la autocorrelación. De Deardorff y Peskin (1970)

Respecto a las covarianzas cruzadas temporales entre las fluctuaciones de la componente horizontal y vertical del viento, se define en el suelo que

$$\langle u'w' \rangle = -u_*^2$$

Esta expresión se debe corregir con la altura para cualquier categoría de estratificación.

En situaciones estables (Experimentos en Minnesota, Caughey et al., 1979) esta magnitud tiene la siguiente variabilidad vertical, donde  $z$  representa a la altura y  $H$  la altura de la CLP estable:

$$\langle u'w' \rangle = -u_*^2 (1-z/H)^2$$

Stull (1991) referencia otras expresiones para esta covarianza

aplicables a un subconjunto de capas límite estables, como por ejemplo:

$$\langle u'w' \rangle = -u_*^2 [1 - (z/H)^{0.7}]$$

$$\langle u'w' \rangle = -u_*^2 (1 - z/H)$$

En categoría de estratificación neutra, Stull (op. cit.) propone la siguiente expresión, donde H es la altura de esta capa límite:

$$\langle u'w' \rangle = -u_*^2 (1 - z/H)$$

En situaciones inestables los perfiles de esta covarianza cruzada muestran gran variabilidad, incluso decreciendo con la altura (Kaimal et al., 1976). Sin embargo, se suele simplificar y considerarla constante e igual a la velocidad de fricción (Ley y Thomson, 1983). Stull (1991) propone una expresión más compleja

$$\langle u'w' \rangle = -u_*^2 (1 - z/H) + \langle u'w' \rangle_{z=H} \cdot z/H$$

Zannetti (1991), sin embargo, propone una relación única para todos los tipos de estratificación atmosférica

$$\langle u'w' \rangle = -u_*^2 (1 - z/H)$$

Anfossi et al. (1988) aplican esta misma dependencia de la covarianza cruzada con la altura, aunque indican que la concentración en las proximidades del suelo no varía respecto al caso en el que no se incluye esta covarianza.

#### 2.1.4. Escalas integrales de tiempo lagrangianas.

Se conoce que los correlogramas y el espectro euleriano y lagrangiano son semejantes en su forma y sólo difieren en sus escalas de tiempo,  $T_E$  y  $T_L$  respectivamente. La relación  $T_L/T_E$  es constante y se la conoce por la variable  $\beta$ , como se indicó en el apartado 1.2.2.

En turbulencia homogénea y estacionaria la escala de tiempo lagrangiana para la componente vertical ( $T_{Lw}$ ) se considera proporcional a la escala de longitud euleriana  $L_E$  (Pasquill y Smith, 1983), tal que

$$T_{Lw} = \beta \frac{L_E}{\sigma_w} \quad (\text{con } \beta \text{ entre } 0.35 \text{ y } 0.8, \text{ según estos autores})$$

La Teoría Estadística de Taylor para turbulencia homogénea establece que la difusividad turbulenta a grandes distancias de la fuente puede expresarse como  $K_m = \sigma_w^2 T_{Lw}$ , donde  $K_m$  se puede determinar como  $0.4u_* z / \phi_m(z/L)$ , siendo  $\phi_m(z/L)$  la función universal de la Teoría de Similaridad. Sin embargo, la mayoría de los autores determinan las escalas de tiempo lagrangianas basándose en las escalas eulerianas. En el siguiente esquema se muestran algunas expresiones de las tres escalas de tiempo en función de la categoría de estratificación atmosférica.

Estratificación ESTABLE

$T_{Lu}$	$T_{Lv}$	$T_{Lw}$	Autor
$0.15H(z/H)^{0.5}/\sigma_u$		$0.10H(z/H)^{0.8}/\sigma_w$	Hanna, 1982 <sup>+</sup>
	$0.07H(z/H)^{0.5}/\sigma_v$		
		$ku_*z/\{(1+5z/L)\sigma_w^2\}$	Ley y Thomson, 1983
$0.12\lambda_{m,u}/\sigma_u$		$\beta T_{E,w}$	Hurley y Physick, 1991 <sup>+</sup>
$(\lambda, \beta, T_E)$ se indican por los autores y dependen de la estratificación)			

Estratificación INDIFERENTE O NEUTRA

$T_{Lu}$	$T_{Lv}$	$T_{Lw}$	Autor
		$cz/\langle u \rangle$	Hall, 1975 <sup>+</sup>
$0.5z/\sigma_u/(1+15fz/u_*)$		$0.5z/\sigma_w/(1+15fz/u_*)$	Hanna, 1982 <sup>+</sup>
	$0.5z/\sigma_v/(1+15fz/u_*)$		
$0.12\lambda_{m,u}/\sigma_u$		$\beta T_{E,w}$	Hurley y Physick, 1991 <sup>+</sup>
$(\lambda, \beta, T_E)$ se indican por los autores y dependen de la estratificación)			

Estratificación INESTABLE

$T_{Lu}$	$T_{Lv}$	$T_{Lw}$	Autor
			Hanna, 1982 <sup>+</sup>
$0.15H/\sigma_u$	$0.15H/\sigma_v$	$0.1z/\sigma_w/(0.55+0.38(z-z_r)/L)$ para $z/H < 0.1, -(z-z_r)/L < 1$	
		$0.59z/\sigma_w$ para $z/H < 0.1, -(z-z_r)/L > 1$	
		$0.15H(1-\exp\{-5z/H\})/\sigma_w$ para $z/H > 0.1$	
		$ku_*z(1-16z/L)^{1/2}/\sigma_w^2$	Ley y Thomson, 1983
$0.12\lambda_{m,u}/\sigma_u$		$\beta T_{E,w}$	Hurley y Physick, 1991 <sup>+</sup>
$(\lambda, \beta, T_E)$ se indican por los autores y dependen de la estratificación)			

## 2.2. MODELOS DE PARTICULAS

La técnica de partículas actualmente es una de las metodologías que en la última década más se ha desarrollado debido al avance de los sistemas informáticos. En el modelado de partículas se propone la discretización de un sistema físico y su éxito radica en el potencial computacional que aporta y en su amplio rango de aplicaciones desde la escala atómica, como la Dinámica molecular, a la escala astronómica como la Dinámica de galaxias (Hockney y Eastwood, 1981). En la difusión de contaminantes este tipo de modelado requiere un tratamiento numérico muy difícil de plasmar en los modelos eulerianos y, en cambio, sencillo con un enfoque lagrangiano.

La base de los modelos de partículas es suponer que un conjunto de *partículas ficticias*, discretización del sistema físico, pueden simular el comportamiento de una determinada variable (masa, calor, ...). El movimiento de cada una de estas partículas ficticias está gobernado por una velocidad determinista y una velocidad aleatoria, dando lugar a una única trayectoria dentro de un abanico infinito. Sin embargo, al elegir un conjunto de partículas el comportamiento global no está influido de manera determinante por cada una de las velocidades aleatorias, aportándonos un conocimiento del proceso.

Hockney y Eastwood (op. cit.) clasificaron a los modelos de partículas en tres categorías:

- Modelos partícula-partícula o modelos PP, en los que todas las fuerzas existentes entre las partículas se determinan en cada paso de tiempo.
- Modelos partículas-malla (modelos PM), en los que la dinámica se determina usando una ecuación del campo o potencial en cada celdilla de una malla.
- Modelos híbridos (modelos PP-PM), en los que las fuerzas se desdoblán en una componente calculada por el método PP y en otra componente de variabilidad más lenta determinada dentro de cada una de las celdillas.

Hockney y Eastwood además de clasificar los modelos de partículas, establecieron otras tres categorías que determinaban la relación entre las partículas o elementos reales y las partículas ficticias, ya que esta relación en cualquier sistema discreto es fundamental para interpretar los resultados de la simulación:

- Correspondencia una a una (p.e. en Dinámica molecular)
- Equiparación de elementos fluidos (p.e. vórtices) a partículas (Pearson et al., 1983 en flujos estratificados)
- Superpartículas que corresponden a partículas ficticias que representan a una conjunto de partículas reales de similares características.

Los modelos de partículas han podido simular la estructura espiral de galaxias, la dinámica del plasma y representaciones de la turbulencia en fluidos. En el caso concreto de la simulación de la dispersión atmosférica de contaminantes (por ejemplo, en el medio marino Rodriguez et al., 1993; y en el medio aéreo Zannetti y Al-Madani, 1983) se puede caracterizar de dos formas. La primera es la aproximación de una única partícula en los que el movimiento de cada una de ellas es independiente del

resto y la estadística que la gobierna corresponde a la estadística de una sola partícula. La segunda aproximación es de dos partículas y se aplica cuando se desea reproducir una dispersión relativa, por ejemplo la dispersión de un puff en relación a su centro de masas. La estadística de este segundo método es más compleja que la del primero (Durbin, 1980a; Lamb, 1981; Gifford, 1982 (ver también Sawford, 1984); Sawford, 1983; entre otros). Nuestro esquema es un esquema con la aproximación de una única partícula. Este tipo de modelos son aplicables a flujos turbulentos con altos números de Reynolds ( $Re \gg$ ), que generalmente es lo que ocurre en la atmósfera, donde se puede desprestigiar los efectos moleculares (Monin y Yaglom, 1971) y considerar que cada partícula viaja con la velocidad del fluido.

Los métodos de partículas aplicados a la contaminación atmosférica, en los que la emisión y dispersión se modela por un conjunto de partículas ficticias, siguiendo generalmente el método de superpartículas, definen sus velocidades con las denominadas pseudovelocidades o velocidades equivalentes,  $\vec{v}_e$ , que tienen en cuenta el transporte debido al flujo medio, las fluctuaciones turbulentas de origen aleatorio y la difusión molecular (si no se omite). Ejemplos de esta composición son los trabajos de Smith (1968) y Hall (1975) y Lamb (1978) que simuló la turbulencia vertical con partículas cuya velocidad era suma de una velocidad suministrada por el modelo de Deardorff (1974) y una velocidad estocástica que describe el efecto de sus fluctuaciones a escala subceldilla, no suministradas por el modelo de Deardorff.

Las partículas ficticias se mueven en cada paso de tiempo,  $\Delta t = (t_j - t_{j-1})$ , con una velocidad  $\vec{v}_e$ . Si una partícula está situada en  $\vec{r}(t_0)$  en el instante  $t_0$ , su nueva posición en el tiempo  $t_1$  ( $> t_0$ ) vendrá dada por

$$\vec{r}(t_1) = \vec{r}(t_0) + \int_{t_0}^{t_1} \vec{v}(r, t) \cdot dt$$

donde  $\vec{v}$  es el viento instantáneo en cada punto  $\vec{r}$  de la trayectoria de la partícula entre  $t_0$  y  $t_1$ . Las características atmosféricas hacen que sea prácticamente imposible conocer el viento instantáneo debido a las componentes aleatorias provocadas por los remolinos turbulentos; por ello se considera el viento equivalente  $\vec{v}_e$ .

$$\vec{v}_e = \frac{1}{(t_1 - t_0)} \int_{t_0}^{t_1} \vec{v}(r, t) \cdot dt$$

el cual traslada directamente a la partícula desde  $\vec{r}(t_0)$  a  $\vec{r}(t_1)$  en el intervalo de tiempo  $(t_1 - t_0)$ . La Figura 2.2.1 muestra gráficamente la diferencia entre ambos movimientos. Cuanto menor sea el paso de tiempo mayor será el acercamiento entre ambas trayectorias.

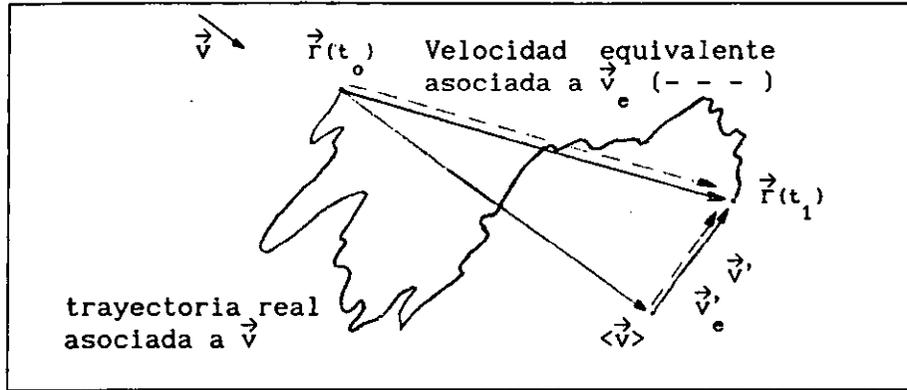


Figura 2.2.1. Trayectoria de una partícula real y una partícula ficticia.

La imposibilidad de conocer la velocidad equivalente de las medidas eulerianas de viento obliga a definir otra aproximación, tal que:

$$\vec{v}_e = \langle \vec{v} \rangle + \vec{v}'$$

donde  $\langle \vec{v} \rangle$  es la velocidad media euleriana del viento en la posición de la partícula y  $\vec{v}'$  es una velocidad difusiva. El término  $\langle \vec{v} \rangle$  representa nuestra comprensión determinista del transporte medio y que puede determinarse en función de interpolaciones del viento observado dentro del área en estudio o desde los modelos meteorológicos. El término  $\vec{v}'$  corresponde a una perturbación numérica introducida artificialmente que engloba todas las características de los remolinos más pequeños que no están incluidos en el campo medio de velocidad. Esta variable es la base de cualquier modelo lagrangiano de partículas.

Actualmente existen dos maneras de evaluar el valor de la perturbación del viento ( $\vec{v}'$ ); la primera es una aproximación determinista por el método de partículas dentro de una malla (Lange, 1978):

$$\vec{v}' = - \frac{K}{c} \cdot \vec{\nabla} c$$

donde K es el coeficiente de difusión turbulenta y c la concentración. Con esta metodología la variabilidad temporal de la concentración influye en el movimiento de cada una de las partículas.

El segundo método es la aproximación estadística o de Monte Carlo, más flexible que la determinista. Según esta metodología  $\vec{v}'$  se calcula desde generadores de números aleatorios, gracias al conocimiento estadístico que se posee de las fluctuaciones de la velocidad euleriana,  $\vec{v}'$ . Aunque la naturaleza de ambas velocidades difiere esta hipótesis del esquema estadístico de  $\vec{v}'$  es plausible gracias a que ambas se pueden expresar mediante un proceso de Markov. Hay varias maneras de justificar la aplicabilidad de cadenas de Markov. Primero, por su simplicidad en donde sólo es necesario la varianza de la velocidad y la autocorrelación; segundo, por los argumentos teóricos (van Dop et al., 1985; Haworth y Pope, 1986) que relacionan las ecuaciones de Navier-Stokes con este tipo de modelos para

turbulencia con altos números de Reynolds (Sawford, 1986); y la tercera, su concordancia con observaciones (Hanna, 1979). Si se extiende esta hipótesis a  $\vec{v}'_e$ , Smith (1968) la consideró en un estudio de un movimiento condicionado, tenemos que

$$\vec{v}'_e(t_1) = R_e(\Delta t) \cdot \vec{v}'_e(t_0) + \vec{v}''_e(t_1) \quad (2.1)$$

$R_e(\Delta t)$  contiene las autocorrelaciones de las componentes de  $\vec{v}'_e$  que se supone constante en el paso de tiempo  $\Delta t = t_1 - t_0$ . Es equivalente a la autocorrelación lagrangiana  $R_L$ . El término  $\vec{v}''_e$  es un vector completamente aleatorio.

La ecuación (2.1) es la expresión más sencilla para determinar  $\vec{v}'_e$  y en donde se puede apreciar la improbabilidad de que dos partículas, aún partiendo de la misma posición, lleguen a ubicarse en el mismo lugar en el mismo instante. Esta ecuación, además, nos indica que el desplazamiento de cualquiera de las partículas no está influenciado por el desplazamiento del resto, lo cual computacionalmente hace que este esquema sea muy rápido ya que no necesita evaluar las fuerzas interactivas entre las partículas.

Es necesario establecer condiciones iniciales para evaluar la velocidad de cada partícula, la autocorrelación y la componente aleatoria.

Suponiendo que  $\vec{v}''_e$  es un vector puramente aleatorio cuyas componentes, independientes entre sí, se distribuyen según una distribución normal de media cero y varianza en cada dirección (en turbulencia homogénea, estacionaria e isotrópica):

$$\sigma_{u'}^2 = \sigma_{u'}^2 [1 - R_{eu}^2] \quad \sigma_{v'}^2 = \sigma_{v'}^2 [1 - R_{ev}^2] \quad \sigma_{w'}^2 = \sigma_{w'}^2 [1 - R_{ew}^2]$$

El conocimiento de las varianzas de las componentes aleatorias de la velocidad equivalente requiere conocer las varianzas de las perturbaciones eulerianas del viento.

Una vez determinada la nueva velocidad de la partícula asociada al instante  $t_1$ ,  $\vec{v}'_e(t_1) = \langle \vec{v} \rangle + \vec{v}'_e(t_1)$ , su nueva posición será

$$\vec{r}(t_2) = \vec{r}(t_1) + \vec{v}'_e(t_1) \cdot (t_2 - t_1)$$

La ecuación (2.1) corresponde a la discretización por diferencias finitas de la ecuación de Langevin, ampliamente utilizada en simulaciones de dispersión turbulenta lagranginas (Durbin, 1980a, 1983; Legg y Raupach, 1982; Legg, 1983). En la componente vertical la ecuación de Langevin se expresa como

$$dw' = a \cdot dt + b \cdot \eta$$

donde  $a$  y  $b$  son coeficientes que dependen de la escala de tiempo lagrangiana ( $T_{LW}$ ) y  $\eta$  es un proceso estocástico de ruido blanco (gaussiano). Algunas propiedades de esta ecuación se sintetizan en la Tabla 2.2.1.

---

Escala de tiempo $T_{Lw}$	$R_L = \exp(-\Delta t/T_{Lw})$
En el subrango inercial	$R_L = 1 - \Delta t/T_{Lw}$ con $\Delta t \ll T_{Lw}$
En turb. 3D con Re altos, aceleración se correlaciona con $t_k = Re^{-1/2} \cdot T_{Lw}$	Aceleración es un ruido blanco con $t \gg t_k$
Distribución de velocidad	$p(w)$ gaussina

---

*Tabla 2.2.1. Propiedades de la ec. de Langevin en turbulencia homogénea y estacionaria. Re - número de Reynolds,  $t_k$  escala de tiempo de Kolmogorov,  $T_{Lw}$  escala de tiempo lagrangina de la componente vertical,  $p(w)$  función de densidad de probabilidad y  $\Delta t$  el paso de tiempo. De Sawford (1985).*

La aplicación correcta de la ecuación 2.1 exige varias condiciones. La primera se refiere a la memoria del proceso, la segunda a las incertidumbres estadísticas de la concentración media y de la varianza de la posición y la tercera afecta al factor computacional. Estas tres condiciones exigen un paso de tiempo menor a la escala de tiempo lagrangiana, un número mínimo de partículas ficticias y un número mínimo de pasos de tiempo estimable en función del problema que se desea modelar. Las tres condiciones se especificarán en el apartado 2.2.1.

En el caso de turbulencia no homogénea, p.e. CLP inestable, la ecuación de Langevin es útil incorporándola algunos términos. Ejemplos de estos modelos son los de Hall (1975), Reid (1979) y Ley (1982) que muestran una acumulación incorrecta de partículas cerca del suelo o en zonas donde la varianza de la velocidad vertical es muy pequeña. Para evitar esta acumulación Legg y Raupach (1982) y Ley y Thomson (1983) fueron uno de los primeros en incorporar el gradiente de dicha varianza. Thomson (1984) y de Baas et al. (1986) además tuvieron en cuenta los momentos de orden superior (sesgo y curtosis) de la función de densidad normal. van Dop et al (1985) explica por qué es aconsejable incorporar estos momentos en flujos turbulentos no homogéneos, así cómo evitar algunas incorrecciones que han derivado en el establecimiento de diferentes criterios (Thomson, 1986, 1986, 1987; van Dop et al., 1985; Durbin, 1983, 1984; Egbert y Baker, 1984).

Las principales ventajas del tratamiento lagrangiano frente al tratamiento euleriano son el ahorro computacional, la eliminación de los errores numéricos (de difusión y dispersión) asociados a la discretización matemática de los modelos euleriano y que apenas se requiere de restricciones físicas (no existen ecuaciones de conservación) ya que cada partícula puede determinarse por sus coordenadas, masa, tamaño, etc. Los únicos parámetros necesarios son la varianza de las fluctuaciones de la velocidad del viento y las funciones de correlación lagrangianas.

### 2.2.1. Elección del paso de tiempo

Aproximar la trayectoria equivalente a la real y, además, minimizar los efectos de memoria asociados a los modelos lagrangianos de partículas exige una correcta elección del paso de tiempo. La aceleración de un elemento de fluido está correlacionada en escalas de tiempo próximas a la escala de tiempo de Kolmogorov ( $t_k$ ), si el paso de tiempo es inferior a dicha escala de tiempo ( $\Delta t \leq t_k$ ) la velocidad no puede describirse mediante una cadena Markoviana (Legg y Raupach, 1982; Ley, 1982; van Dop et al., 1985). Sin embargo, Wilson y Zhuang (1989) consideran que no es necesario establecer tal límite. Con respecto al límite superior todos los autores coinciden en que el  $\Delta t$  debe ser menor que la escala de tiempo lagrangiana  $T_{Lw}$  ( $\Delta t/T_{Lw} \ll 1$ ). Wilson y Zhuang (1989) hace un análisis detallado de los errores asociados a diversos valores de  $\Delta t/T_{Lw}$  en turbulencia homogénea. van Dop et al. (1985) lo extiende a todo tipo de turbulencia y su estudio se centra en el espectro de la aceleración. Zannetti (1986) lo justifica en función de la variación de los parámetros meteorológicos. Si el paso de tiempo supera la escala de tiempo lagrangiana los modelos de partículas no proporcionan una correcta evaluación de la concentración (Wilson et al., 1981; van Dop et al., 1985), salvo en zonas próximas a la fuente que se puede evaluar mediante una expresión gaussiana (Durbin y Hunt, 1980).

A continuación se presentan los diferentes pasos de tiempo propuestos por algunos autores. Esta síntesis complementa la indicada por Ley (1982).

#### Turbulencia homogénea

Jonas y Bartlett (1972)	$\Delta t = 2$ segundos
Sawford (1985) propone que	$\Delta t < 0.1 T_{Lw}$
Thomson (1987)	$\Delta t = \min \left( 0.05 T_{Lw}, 0.1 \sigma_w /  a  \right)$ (*)
Brusasca et al. (1989)	$\Delta t = 2$ y 10 segundos

#### Turbulencia no homogénea

Wilson et al. (1981)	$\Delta t = T_{Lw} / 8$
Legg y Raupach (1982)	$\Delta t \leq 0.2 T_{Lw}$
Legg (1983)	$\Delta t = 0.1 T_{Lw}$
Davis (1983)	$\Delta t \leq 0.2 T_{Lw}$
Zannetti y AlMadani (1983)	$\Delta t \leq 10$ segundos
Garrett y Smith (1984)	$\Delta t \leq 60$ segundos
Thomson (1984)	$\Delta t \leq 0.01 T_{Lw}$
de Baas et al. (1986)	$\Delta t \leq 0.05 T_{Lw}$
Thomson (1987)	$\Delta t = \min \left( 0.05 T_{Lw}, 0.1 \sigma_w /  a , 0.01 \sigma_w /  w' \partial \sigma_w / \partial z  \right)$ (*)

(\*) a viene definido en Hurley y Physick (1993)

Walklate (1987)	$\Delta t \leq 0.1T_{LW}/b$	(flotabilidad negativa)
	b depende de la desviación de la velocidad vertical del aire y de la velocidad media relativa entre la partícula y el aire.	
Zhuang et al (1989)	$\Delta t = 0.1\min(T_{LW}, \tau)$	
	$\tau$ es un tiempo asociada a cada partícula	
Sawford (Ref. en Hurley y Physick, 1991)	$\Delta t = 0.02\min\left(T_{LW}, \sigma_w/ a , \sigma_w/ w' \partial \sigma_w / \partial z \right)$	
Hashem y Parkin (1991)	$\Delta t \leq 0.1T_{LW}$	(flotabilidad negativa)

Además de elegir correctamente el paso de tiempo, Joynt y Blackman (1976) indican que el incremento del número de partículas en las simulaciones lagrangianas disminuye las incertidumbres que acompañan al cálculo de la concentración. Durbin (1980a) estima estas incertidumbres y las asociadas a la varianza  $\sigma_z^2 = \langle Z^2(t) - Z^2(0) \rangle$  siendo proporcionales a la inversa de la raíz cuadrada del número de partículas ( $\langle c(z,t) \rangle \approx N^{-1/2}$ ). Sawford (1985) estima un número mínimo de 5000 partículas para una simulación unidimensional. Otro factor que se debe considerar es el número mínimo de pasos de tiempo; según Sawford (1985), en turbulencia homogénea y con un  $\Delta t = 0.1T_{LW}$ , es necesario al menos entre 50 y 100.

### 2.3. ESQUEMA LAGRANGIANO.

El tratamiento lagrangiano de la difusión de contaminantes del apartado 2.2 no incluye los efectos de la cizalla del viento característicos de la CLP. Estos efectos tienen su origen en la variación vertical, en dirección y magnitud, del viento medio, por la variación vertical de la intensidad de las fluctuaciones del viento, correlación casi nula entre las fluctuaciones horizontales del viento ( $\langle u'v' \rangle = 0$ ) y por una correlación negativa entre las fluctuaciones vertical y horizontal ( $\langle u'w' \rangle < 0$ ). En Stull (1991) se pueden encontrar expresiones empíricas no nulas para las correlaciones cruzadas diferentes a  $\langle u'w' \rangle$ . Uno de los primeros investigadores que propusieron la incorporación de los efectos de cizalla en un modelo de partículas fue Zannetti (1981; 1984; Zannetti y Al-Madani, 1983) con un modelo tridimensional; posteriormente Ley (1982) y Legg (1983) lo consideraron en modelos bidimensionales. Legg, además, incorporó el sesgo en la función de densidad de probabilidad del viento.

Zannetti (1986) expandió su esquema introduciendo todas las funciones de correlación cruzada entre las componentes de la velocidad del viento, lo cual representa una dependencia entre las componentes de la fluctuación del viento. El sistema de ecuaciones es, estando  $\vec{v}'_e$  representado desde ahora por

el vector  $\vec{V}'$ . El sistema para las tres componentes de la velocidad es:

$$\begin{aligned} u'(t+\Delta t) &= f_1 u'(t) + u''(t+\Delta t) \\ v'(t+\Delta t) &= f_2 v'(t) + f_3 u'(t+\Delta t) + v''(t+\Delta t) \\ w'(t+\Delta t) &= f_4 w'(t) + f_5 v'(t+\Delta t) + f_6 u'(t+\Delta t) + w''(t+\Delta t) \end{aligned} \quad (2.3.1)$$

donde  $u''$ ,  $v''$  y  $w''$  corresponden a funciones de densidad de probabilidad (fdp) gaussianas de media cero y varianzas  $\sigma_{u''}^2$ ,  $\sigma_{v''}^2$  y  $\sigma_{w''}^2$ , no correlacionadas entre sí.

Si el proceso de Monte Carlo definido por el sistema de ecuaciones (2.3.1) es estacionario en cada paso de tiempo y teniendo en cuenta, siendo  $N$  el número total de datos, que las varianzas de las fluctuaciones se expresan como

$$\sigma_{u'}^2 = \frac{\sum u'^2}{N}, \quad \sigma_{v'}^2 = \frac{\sum v'^2}{N}, \quad \sigma_{w'}^2 = \frac{\sum w'^2}{N},$$

sus funciones de correlación

$$R_{u',v'}(0) = \frac{\langle u'v' \rangle}{\sigma_{u'} \sigma_{v'}}, \quad R_{u',w'}(0) = \frac{\langle u'w' \rangle}{\sigma_{u'} \sigma_{w'}}, \quad R_{v',w'}(0) = \frac{\langle v'w' \rangle}{\sigma_{v'} \sigma_{w'}},$$

y sus funciones de autocorrelación

$$R_{u',u'}(\Delta t) = \frac{\langle u'^2 \rangle}{\sigma_{u'}^2}, \quad R_{v',v'}(\Delta t) = \frac{\langle v'^2 \rangle}{\sigma_{v'}^2}, \quad R_{w',w'}(\Delta t) = \frac{\langle w'^2 \rangle}{\sigma_{w'}^2}$$

Multiplicando las tres ecuaciones del sistema (2.3.1) respectivamente por  $u'(t)$ ,  $v'(t)$  y  $w'(t)$  y teniendo en cuenta que p.e.  $\langle u'(t)u'(t) \rangle = \sum u'^2(t)/N$ , obtendremos promediando las siguientes ecuaciones

$$\begin{aligned} R_{u',u'} \cdot \sigma_{u'}^2 &= f_1 \cdot \sigma_{u'}^2 \\ R_{v',v'} \cdot \sigma_{v'}^2 &= f_2 \cdot \sigma_{v'}^2 + f_3 \cdot f_1 \cdot R_{u',v'} \cdot \sigma_{u'} \sigma_{v'} \\ R_{w',w'} \cdot \sigma_{w'}^2 &= f_4 \cdot \sigma_{w'}^2 + f_5 \left[ f_2 \cdot R_{v',w'} \cdot \sigma_{v'} \sigma_{w'} + f_3 \cdot f_1 \cdot R_{u',w'} \cdot \sigma_{u'} \sigma_{w'} \right] + \\ &\quad + f_6 \cdot f_1 \cdot R_{u',w'} \cdot \sigma_{u'} \sigma_{w'} \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

Volviendo a multiplicar las dos primeras ecuaciones del sistema (2.3.1) respectivamente por  $v'(t)$ ,  $w'(t)$  y de nuevo la primera por  $w'(t)$ , obtendremos promediando las siguientes ecuaciones

$$\begin{aligned} \langle u'(t+\Delta t).v'(t) \rangle &= f_1.R_{u',v'}\sigma_{u'}\sigma_{v'} \\ \langle v'(t+\Delta t).w'(t) \rangle &= f_2.R_{v',w'}\sigma_{v'}\sigma_{w'} + f_3.f_1.R_{u',w'}\sigma_{u'}\sigma_{w'} \\ \langle u'(t+\Delta t).w'(t) \rangle &= f_1.R_{u',w'}\sigma_{u'}\sigma_{w'} \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

Por último, si tomamos las varianzas del sistema de ecuaciones (2.3.1) conoceremos finalmente las expresiones de los coeficientes  $f_1$ ,  $f_2$ ,  $f_3$  y las varianzas de los términos aleatorios  $\sigma_{u''}^2$  y  $\sigma_{v''}^2$

$$\begin{aligned} \sigma_{u'}^2(t+\Delta t) &= f_1^2.\sigma_{u'}^2(t) + \sigma_{u''}^2(t+\Delta t) \\ \sigma_{v'}^2(t+\Delta t) &= f_2^2.\sigma_{v'}^2(t) + f_3^2.\sigma_{u'}^2(t) + \sigma_{v''}^2(t+\Delta t) + 2f_2f_3\langle v'(t)u'(t+\Delta t) \rangle \\ \sigma_{w'}^2(t+\Delta t) &= f_4^2.\sigma_{w'}^2(t) + f_5^2.\sigma_{v'}^2(t) + f_6^2.\sigma_{u'}^2(t) + \sigma_{w''}^2(t+\Delta t) + \\ &+ 2f_4f_5\langle w'(t)v'(t+\Delta t) \rangle + 2f_4f_6\langle w'(t)u'(t+\Delta t) \rangle + \\ &+ 2f_5f_6.R_{u',v'} \end{aligned}$$

Las expresiones de los tres primeros coeficientes  $f$  y las varianzas de los términos aleatorios serán:

$$\begin{aligned} f_1 &= R_{u',u'} \\ f_2 &= \frac{R_{v',v'} - R_{u',u'}R_{u',v'}^2}{1 - R_{u',u'}^2R_{u',v'}^2} \\ f_3 &= \frac{R_{u',v'}\sigma_{v'}(1 - R_{u',u'}R_{v',v'})}{\sigma_{u'}(1 - R_{u',u'}^2R_{u',v'}^2)} \\ \sigma_{u''}^2 &= \sigma_{u'}^2(1 - f_1^2) \\ \sigma_{v''}^2 &= \sigma_{v'}^2(1 - f_2^2) - f_3^2\sigma_{u'}^2 - 2f_1f_2f_3R_{u',v'}\sigma_{u'}\sigma_{v'} \end{aligned}$$

Los coeficientes  $f_4$ ,  $f_5$  y  $f_6$  se determinan de la resolución del sistema

lineal, mediante el método de la inversa de la matriz, que además permite el conocimiento de la varianza de la tercera componente aleatoria. El sistema es:

$$\begin{pmatrix} A_{44} & A_{45} & A_{46} \\ A_{54} & A_{55} & A_{56} \\ A_{64} & A_{65} & A_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_4 \\ f_5 \\ f_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_4 \\ B_5 \\ B_6 \end{pmatrix}$$

donde

$$A_{44} = \sigma_w^2,$$

$$A_{45} = f_2 \cdot R_{v,w} \sigma_v + f_3 \cdot f_1 \cdot R_{u,w} \sigma_u,$$

$$A_{46} = f_1 \cdot R_{u,w} \sigma_u,$$

$$A_{54} = f_1 \cdot R_{u,w} \sigma_w,$$

$$A_{55} = f_1 \cdot f_2 \cdot R_{u,v} \sigma_v + f_1 \cdot f_3 \cdot R_{u,u} \sigma_u + f_3 \sigma_u (1 - f_1^2)$$

$$A_{56} = f_1 \cdot R_{u,u} \sigma_u + \sigma_u (1 - f_1^2)$$

$$A_{64} = f_2 \cdot R_{v,w} \sigma_v \sigma_w + f_1 \cdot f_3 \cdot R_{u,w} \sigma_u \sigma_w,$$

$$A_{65} = f_2 \cdot R_{v,v} \sigma_v + f_3 \cdot R_{u,v} \sigma_u \sigma_v + \sigma_v^2$$

$$A_{66} = f_1 \cdot f_2 \cdot R_{u,v} \sigma_u \sigma_v + f_3 \cdot \sigma_u^2$$

$$B_4 = R_{w,w} \sigma_w,$$

$$B_5 = R_{u,w} \sigma_w,$$

$$B_6 = R_{v,w} \sigma_v \sigma_w,$$

Por tanto la varianza aleatoria de la tercera componente del viento es:

$$\begin{aligned} \sigma_w^2 = & \sigma_w^2 (1 - f_4^2) - f_5^2 \sigma_v^2 - f_6^2 \sigma_u^2 - 2f_4 f_5 \left[ f_2 R_{v,w} \sigma_v \sigma_w + f_3 f_1 R_{u,w} \sigma_u \sigma_w \right] - \\ & - 2f_4 f_6 f_1 R_{u,w} \sigma_u \sigma_w - 2f_5 f_6 R_{u,v} \sigma_u \sigma_v, \end{aligned}$$

En este esquema se considera que el eje X sigue la dirección del viento y, por tanto, el eje X varía a lo largo de la trayectoria de la partícula, especialmente en la vertical (Zannetti, 1984)

$$\begin{aligned}\langle \vec{v} \rangle &= \langle u \rangle \vec{i} \\ \vec{v}' &= u' \vec{i} + v' \vec{j} + w' \vec{k}\end{aligned}$$

Finalmente el nuevo desplazamiento de cada una de las partículas tendrá las siguientes componentes:

$$\begin{aligned}x(t+2\Delta t) &= x(t+\Delta t) + \langle u(t+\Delta t) \rangle \cdot \Delta t + u'(t+\Delta t) \cdot \Delta t \\ y(t+2\Delta t) &= y(t+\Delta t) + v'(t+\Delta t) \cdot \Delta t \\ z(t+2\Delta t) &= z(t+\Delta t) + w'(t+\Delta t) \cdot \Delta t\end{aligned}$$

Una vez conocidas todas las incógnitas, es necesario conocer los valores de  $\sigma_{u'}$ ,  $\sigma_{v'}$ ,  $\sigma_{w'}$ ,  $R_{u'u'}$ ,  $R_{v'v'}$ ,  $R_{w'w'}$ ,  $R_{u'v'}$ ,  $R_{u'w'}$  y  $R_{v'w'}$ . Estas magnitudes pueden inferirse desde observaciones o expresiones semiempíricas, como se indica en el apartado anterior.

Este esquema lagrangiano válido para todo el espacio puede simplificarse a dos dimensiones, como es el esquema que se propondrá. Además, cualquier esquema lagrangiano permite permutar las fluctuaciones de velocidad en el orden que se deseen, teniendo cuidado en determinar correctamente los nuevos coeficientes f,  $\sigma''$ , A y B. En concreto, en el esquema que se propone la primera ecuación del sistema corresponde a la fluctuación de la componente vertical de la velocidad ( $w'$ ) y la segunda a la fluctuación horizontal ( $u'$ ), para que no se altere, principalmente, el ajuste de  $w'$  a la función de densidad de distribución considerada, sobretodo en condiciones convectivas (apartado 3.2). El esquema que se propone es el siguiente:

$$w'(t+\Delta t) = g_1 w'(t) + w''(t+\Delta t)$$

$$u'(t+\Delta t) = g_2 u'(t) + g_3 w'(t+\Delta t) + u''(t+\Delta t)$$

donde:

$$g_1 = R_{w'w'}$$

$$g_2 = \frac{R_{u'u'} - R_{w'w'} R_{u'w'}^2}{1 - R_{w'w'}^2 R_{u'w'}^2}$$

$$g_3 = \frac{R_{u'w'} \sigma_{u'} (1 - R_{w'w'} R_{u'u'})}{\sigma_{w'} (1 - R_{w'w'}^2 R_{u'w'}^2)}$$

$$\sigma_{w''}^2 = \sigma_{w'}^2 (1 - g_1^2)$$

$$\sigma_{u''}^2 = \sigma_{u'}^2 (1 - g_2^2) - g_3^2 \sigma_w^2 - 2 g_1 g_2 g_3 R_{u',w'} \sigma_{u'} \sigma_w$$

$$R_{u',w'}(0) = \frac{\langle u'w' \rangle}{\sigma_{u'} \sigma_w} = \frac{-u_*^2}{\sigma_{u'}(z=0) \sigma_w(z=0)} \left[ 1 - \frac{z}{H} \right]$$

$$R_{u',u'}(\Delta t) = \frac{\langle u'^2 \rangle}{\sigma_{u'}^2} = \exp \left( - \frac{\Delta t}{T_{Lu}} \right)$$

$$R_{w',w'}(\Delta t) = \frac{\langle w'^2 \rangle}{\sigma_w^2} = \exp \left( - \frac{\Delta t}{T_{Lw}} \right)$$

Este esquema necesita una función de densidad de distribución para cada una de las componentes de la velocidad, condiciones de contorno e iniciales.

De las observaciones eulerianas se conoce que en turbulencia homogénea y estacionaria, el comportamiento de cada una de las componentes de la velocidad se distribuyen según una distribución normal de media cero (Monin y Yaglom, op. cit.). Por ejemplo para la componente vertical

$$p(w) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma_w} \cdot \exp \left( - \frac{w^2}{2 \sigma_w^2} \right)$$

Sin embargo, las situaciones turbulentas no son tan ideales como por ejemplo en el desarrollo de una capa convectiva. En estos casos la distribución de la componente vertical no corresponde a una gaussiana y su tercer momento (sesgo) es positivo a lo largo de toda la CLP. Diversos experimentos en laboratorio (Willis y Deardorff, 1974, 1976, 1978) y observaciones (Taconet y Weill, 1982; Caughey et al, 1983) han demostrado su naturaleza no gaussiana, en donde su "zona negativa" ocupa mayor área que su "zona positiva". Esta organización de la componente vertical de la velocidad del viento se debe al tipo de movimiento en las capas convectivas caracterizado por fuertes velocidades ascendentes pero que ocupan menor área horizontal que las velocidades descendentes que son de menor intensidad. Lamb (1982) propuso una expresión para  $p(w)$ , otros en cambio han utilizado otros métodos para incorporar el sesgo en un modelo lagrangiano, tales como Legg (1983) y Thomson (1984). Baerentsen y Berkowicz (1984) con objeto de poder simular con su esquema de partículas el comportamiento atmosférico en capas convectivas y, en cierta manera basándose en Lamb (op. cit.), propusieron desdoblar la  $p(w)$  en dos fdp gaussianas de medias  $w_+$  y  $-w_-$  y desviaciones  $\sigma_+$  y  $\sigma_-$ ; donde el subíndice + representa el movimiento ascendente y el subíndice - el movimiento descendente. Esta expresión de  $p(w)$  se ha aplicado en multitud de esquemas lagrangianos como los de Luhar y Britter (1989) y

Hurley y Physick (1993). Baerentsen y Berkowicz desdoblan la función de densidad de probabilidad de la componente vertical de la velocidad en dos fdp gaussianas de diferente media y varianza:

$$p(w) = a_+ \cdot p_+(w) + a_- \cdot p_-(w)$$

donde

$$p_+(w) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma_+} \cdot \exp \left( - \frac{(w - w_+)^2}{2 \sigma_+^2} \right)$$

$$p_-(w) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma_-} \cdot \exp \left( - \frac{(w + w_-)^2}{2 \sigma_-^2} \right)$$

siendo  $a_+$  y  $a_-$  las frecuencias relativas de ocurrencia de los movimientos ascendente y descendente.

Con el conocimiento de la fdp de cualquier componente de la velocidad se puede simular situaciones de estratificación estables y neutras (fdp gaussiana) y estratificaciones inestables (fdp de Baerentsen y Berkowicz).

En condiciones convectivas, las partículas ascendentes vendrán determinadas por la velocidad media  $w_+$ , la varianza  $\sigma_{w,+}^2$ , la escala de tiempo lagrangiano  $T_{Lw+}$  y la correlación lagrangiana  $R_+$ . Las partículas descendentes tendrán una velocidad media  $w_-$ , la varianza  $\sigma_{w,-}^2$ , la escala de tiempo lagrangiano  $T_{Lw-}$  y la correlación lagrangiana  $R_-$ . Las expresiones de estas nuevas variables se determinan a través del cálculo de los tres primeros momentos de la  $p(w)$  y de la función de distribución. Las expresiones de estas magnitudes son equivalentes a las propuestas por Thomson (1984).

$$w_- = \sigma_- = \left[ (S_w^6 + 8\sigma_w^6)^{1/2} - S_w^3 \right] / 4\sigma_w^2$$

$$w_+ = \sigma_+ = \sigma_w^2 / 2w_-$$

$$a_- = w_+ / (w_- + w_+)$$

$$a_+ = w_- / (w_- + w_+)$$

$$T_{Lw} = a_+ \cdot T_{Lw+} + a_- \cdot T_{Lw-}$$

$$R_{\pm} = \exp(-\Delta t / T_{Lw\pm})$$

siendo  $S_w^3$  el sesgo que puede determinarse de observaciones o relaciones semiempíricas (Lenschow et al., 1980). La suposición de que  $\sigma_{\pm} = w_{\pm}$  impuesta por Baerentsen y Berkowicz (op. cit.) para obtener algunas de las expresiones anteriores es analizada por Luhar y Britter (1989), determinando que es correcta.

En la figura 2.3.1 se muestra la variabilidad vertical de alguna de estas magnitudes, donde H indica la altura de la capa límite convectiva. La línea discontinua considera la desviación estándar propuesta por Hanna (1982). La línea continua considera la desviación elegida por Baerentsen y Berkowicz.

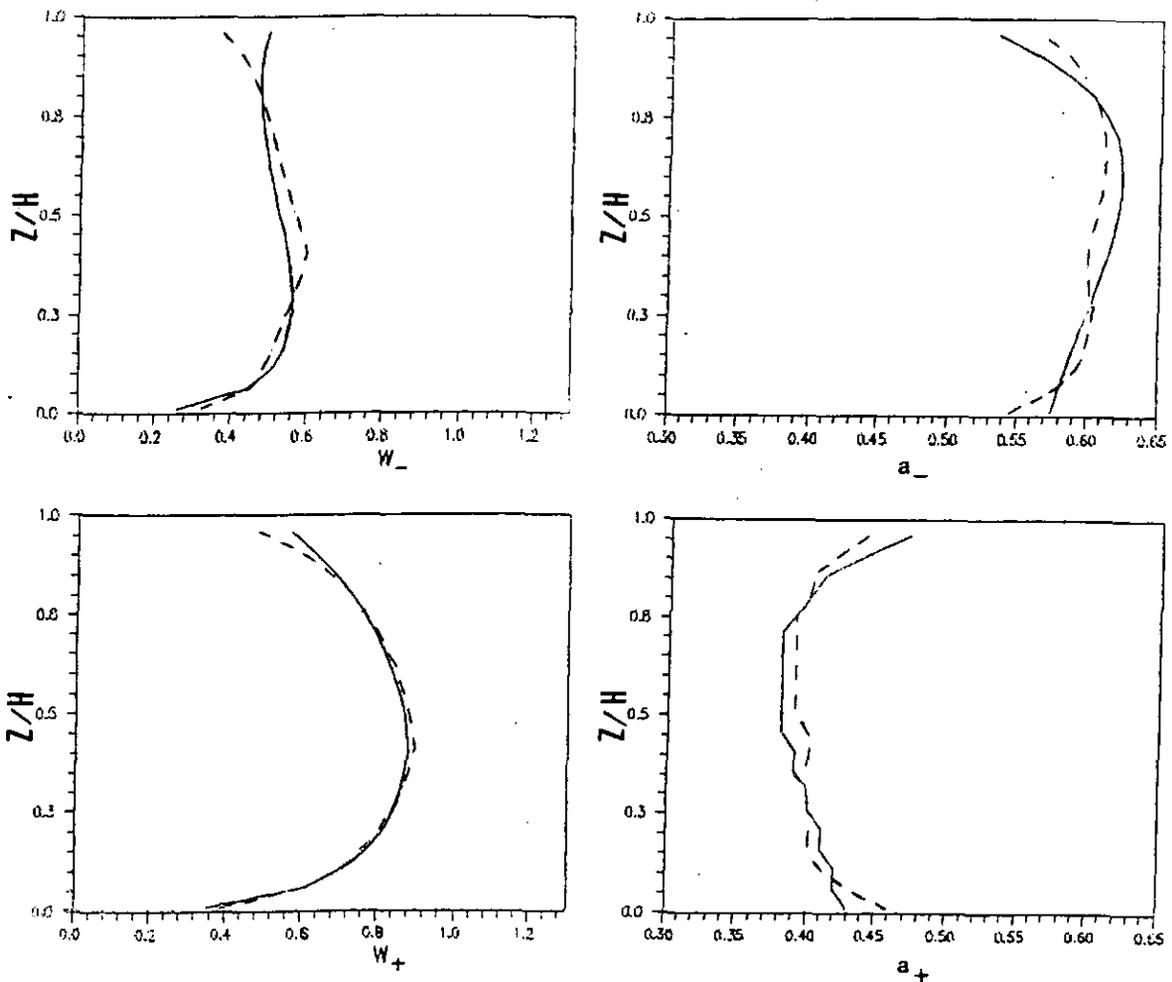


Figura 2.3.1. Evolución vertical de las variables  $w_-$ ,  $w_+$ ,  $a_-$  y  $a_+$ .  $H$  representa la altura de la capa convectiva y  $Z$  la altura. Función de densidad de probabilidad propuesta por Baerentsen y Berkowicz (1984) con la desviación estándar de Hanna, 1982 (línea discontinua) y desviación utilizada por Baerentsen y Berkowicz (línea continua).

Con independencia del tipo de condiciones turbulentas que se deseen simular, todos los modelos lagrangianos de partículas deben partir con unas condiciones iniciales previamente establecidas, lo cual implica un conocimiento de las posiciones iniciales de las partículas y, principalmente, de las fluctuaciones de las componentes de su velocidad. Mientras que para establecer las posiciones iniciales de las partículas sólo es necesario conocer las características de la fuente, para las fluctuaciones iniciales se deben proponer condiciones artificiales. Dos alternativas posibles son: (1) dar valores nulos y (2) asignar una fluctuación inicial en base a una función de densidad gaussiana  $\eta$  de media cero y varianza unidad:

$$(1) \quad u'(0) = 0, \quad w'(0) = 0$$

$$(2) \quad u'(0) = \eta \sigma_u [x(0)], \quad w'(0) = \eta \sigma_w [z(0)]$$

En el capítulo 3 se verán, entre otros, los efectos de las condiciones iniciales de las fluctuaciones y que no han sido abordados con anterioridad a nuestro trabajo.

Las condiciones de contorno es otra de las necesidades de un modelo lagrangiano, determinadas en función de las características atmosféricas que se deseen simular, p. e. fumigación, capa convectiva, etc. Para cualquiera de ellas podemos elegir entre diversas posibilidades. En las denominadas condiciones de contorno de reflexión imperfecta se supone que en los contornos de la capa límite (por ejemplo suelo y/o altura de la inversión) las partículas que indican o intentan sobrepasar uno de los dos límites se reflejan en los mismos cambiando únicamente su posición. En las condiciones de reflexión imperfecta la reflexión de las partículas incidentes no sólo afecta a la posición, sino también a la fluctuación vertical de su velocidad. Estas son las condiciones de contorno más utilizadas en los modelos de partículas. Venkatram (1983) propone para esta última tres posibilidades diferentes. En el esquema propuesto las condiciones elegidas son las de reflexión perfecta, tal y cómo se indica en la Figura 2.3.2. Aunque según Hurley y Physick (1993), en turbulencia no homogénea, en concreto convectivas, estas condiciones de contorno deben modificarse para que sean consistentes con la distribución de probabilidad de la componente vertical de la velocidad., tal que

$$\text{Reflexión en el suelo } w' = -w'_a / a_+$$

$$\text{Reflexión en la capa de mezcla } w' = -w'_a / a_-$$

Sin embargo, nosotros no hemos encontrado ninguna diferencia al considerar que tras la reflexiones  $w' = |w'|$  en el suelo y  $w' = -|w'|$ , en situaciones convectivas.

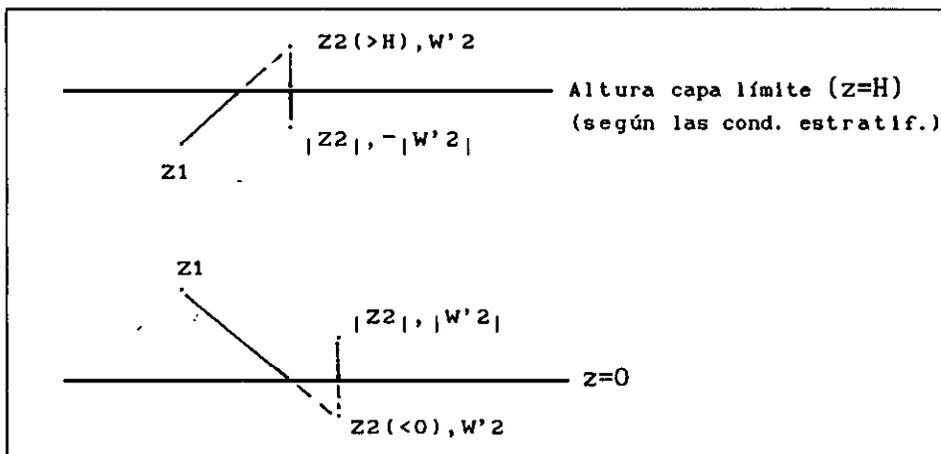


Figura 2.3.2. Posibles condiciones de contorno.

### 3. SIMULACIONES

En este capítulo se presentan los resultados del estudio llevado a cabo, el cual se ha clasificado en tres partes bien diferenciadas.

En la primera parte se analiza el comportamiento de los generadores de números aleatorios, dado que dichos números son la base para la creación de una distribución de probabilidad normal o gaussiana de media cero y varianza uno. El estudio se centra en la influencia del generador en el esquema bidimensional lagrangiano. (El mismo análisis se realizó en el esquema unidimensional, aunque no se muestra en la presente memoria. Las conclusiones son las mismas que en el caso bidimensional.) Respecto al modelo lagrangiano en dos dimensiones, y atendiendo a la posibilidad de implementarlo en cualquier ordenador, se decidió trabajar con un único generador para todo el proceso, aunque en algunos ordenadores se pueda acceder a dos librerías, en cuyo caso se asociaría cada una de ellas a una componente de la velocidad. Estas librerías dependen bien de la potencia del lenguaje informático Fortran o bien son librerías externas como, por ejemplo, las librerías NAG.

La dificultad que plantea elegir un único generador para la creación de la distribución normal en el modelo bidimensional reside en que se deben tomar alternativamente bloques de números aleatorios, cada uno de los cuales va a determinar un punto de la fdp generada asociada a cada componente de la velocidad.

La segunda parte de este capítulo se centra en la verificación del esquema lagrangiano. Para ello se supone una "capa límite" unidimensional dentro de la cual se debe mantener, temporalmente, la uniformidad de una distribución inicial de partículas. En esta versión unidimensional se analizan los puntos críticos que pueden afectar al comportamiento de las partículas según sea la estratificación atmosférica. El primer punto crítico corresponde al paso de tiempo  $\Delta t$ , aunque la elección del paso de tiempo ya haya sido analizado por otros autores (apartado 2.2.2). Otra magnitud que puede tener influencia en un esquema lagrangiano son las relaciones empíricas de las variables varianza y escala de tiempo lagrangianas y en situaciones convectivas, también, el sesgo. Este estudio ha permitido descartar algunas expresiones que han sido utilizadas por algunos autores y elegir las que se consideran más convenientes según la estratificación atmosférica. El tercer punto se refiere a las condiciones de contorno. Las condiciones iniciales también constituyen un aspecto importante en este tipo de metodología. Con anterioridad a estudio no existe ninguno en la bibliografía que refleje la influencia de estos tres últimos puntos. Otro factor que puede determinar el comportamiento de las partículas bajo estas condiciones corresponde a la que se ha denominado velocidad media de arraste y que está relacionada con el gradiente vertical de la varianza de la componente vertical de la velocidad del viento.

La elección o determinación del rango de validez de cualquiera de las magnitudes o condiciones indicadas anteriormente se establece con el análisis de la distribución vertical de partículas y el ajuste a la función de densidad de probabilidad de la componente de la velocidad (p.e., gaussiana) en todas las alturas.

La última parte del capítulo está dedicada al esquema lagrangiano bidimensional. En un primer paso se comparan los resultados obtenidos con

los correspondientes a un modelo de penacho gaussiano, para tres categorías de estratificación atmosférica. Posteriormente, se analizan los resultados obtenidos con el esquema lagrangiano propuesto en situaciones atmosféricas convectivas con fuentes emisoras a diferentes niveles verticales. Y, por último, se refleja el comportamiento de un penacho continuo en condiciones de fumigación. Para ello se ha enlazado el esquema propuesto con un modelo de pronóstico. La fumigación de un penacho también ha sido estudiada en la versión unidimensional.

### 3.1. GENERACION DE DISTRIBUCIONES DE PROBABILIDAD DE LAS COMPONENTES DE LA VELOCIDAD.

El importante crecimiento de la aplicación de la técnica Monte Carlo en diversas áreas de la Física ha hecho que se haya dedicado un gran esfuerzo en la investigación de su fiabilidad en simulaciones físicas. Este tipo de estudios se basa en la detección de posibles errores de tipo estadístico, computacional o sistemático, empleando diferentes metodologías, como son la estadística, la de representación binaria (*bit level test*) o las fenomenológicas. Estos errores dependen a su vez de múltiples factores que, aunque en algunos casos sean bien conocidos (Ferrenberg et al., 1991), entrañan dificultades añadidas, como las indicadas por Ferrenberg et al. (1992) y Vattulainen et al. (1993) tras el análisis de varios generadores de números aleatorios, que son la base de la técnica Monte Carlo. Por tal razón, en este apartado se describirá el generador utilizado en el presente estudio.

La formulación del esquema lagrangiano que se sigue en este trabajo exige la creación de distribuciones de probabilidad de las componentes de la velocidad semejantes a las funciones de densidad de probabilidad (fdp) teóricas, lo cual se puede conseguir a partir de generadores de números aleatorios. Por tanto, inicialmente se debe suponer que la bondad de la fdp generada va a depender de la bondad del generador y del número de puntos deseados para definirla. Vattulainen et al. (1993) analizaron, entre otros, dos de los generadores aleatorios con los que se va a trabajar: RAND y GOSFAF (librería NAG), contrastando su bondad a partir de diversos tipos de test. En el estudio del generador RAND los autores mencionados observaron una dependencia fuerte de la implementación del algoritmo, lo que impidió que superara algunos de los tests anteriormente citados. En cambio, el generador GOSFAF no presentaba ninguno de estos problemas, siendo uno de los dos generadores de números aleatorios recomendados por Vattulainen (op. cit.). Sin embargo, en el presente estudio no se han encontrado discrepancias significativas entre el uso de uno u otro generador, como se verá en este apartado.

En nuestro caso, el esquema que se utiliza requiere la semejanza de la distribución generada con una fdp gaussiana de media cero y varianza unidad:  $N(0,1)$ . Para ello se generan  $N$  números aleatorios dentro del intervalo  $[0,1]$ , y se aplica el teorema central del límite a cada bloque consecutivo

de  $n$  números ( $n \ll N$ ,  $n > 6$ ), obteniendo para cada bloque un valor  $\xi$  que viene dado por :

$$\xi = \frac{\sum_{i=1}^n x_i - \sum_{i=1}^n \mu_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^n \sigma_i^2}}$$

En general,  $x_i$  designa a una variable aleatoria,  $\mu_i$  a su media y  $\sigma_i^2$  a su varianza. En nuestro caso,  $x_i$  son los valores de los números aleatorios del bloque, siendo  $\mu_i$  y  $\sigma_i^2$  la media y la varianza de la población de la cual han sido extraídos dichos números. Como se trata de una distribución de probabilidad definida uniforme en el intervalo  $[0,1]$ ,  $\mu_i = 0.5$  para todo  $i$ , y  $\sigma_i^2 = 1/12$  para todo  $i$ .

Dado que nuestro esquema lagrangiano depende directamente de la semejanza de la distribución generada con la fdp teórica, o lo que es lo mismo, del grado de ajuste entre dichas distribuciones, se debe analizar la dependencia de la bondad del ajuste con respecto a :

- (a) el número de puntos  $\xi$ ,
- (b) el número  $n$  de números aleatorios empleados para obtener  $\xi$
- (c) la inicialización del generador.

Las figuras que se presentan para dicho análisis se basan en simulaciones bidimensionales ( $x, z$ ) durante un periodo temporal de quinientas veces el paso de tiempo. En estas simulaciones se ha elegido el generador de números aleatorios RAND, supuestamente más desfavorable, implementado en el ordenador Convex de la UCM, y se ha ido modificando la cantidad de puntos  $\xi$ , el número  $n$  de aleatorios agrupados para establecer un valor de  $\xi$  y la inicialización del generador. En la Tabla 3.1.1 se muestra un resumen de las condiciones físicas de la simulación. Para la construcción de las fdp de cada uno de los movimientos de las partículas ficticias se eligieron bloques alternativos de  $n$  números aleatorios consecutivos, primero para la componente horizontal aleatoria de la velocidad ( $u_{\eta}''$ ) y después para la componente vertical ( $w_{\eta}''$ ) de cada una de las partículas ficticias emitidas en cada paso de tiempo. Se ha comprobado que la situación de alternancia en estos análisis es similar a considerar el mismo generador con diferente inicialización para cada una de las componentes, dentro del límite de validez que se señala posteriormente. Esta alternancia se analizó debido a posibles problemas en simulaciones bidimensionales. Con simulación unidimensional se obtienen las mismas conclusiones, lo cual implica la independancia de la elección de bloques de aleatorios alternativos o consecutivos.

Generador de aleatorios	RAND
Implementación en	Convex C-210
<u>Simulación física</u>	
Viento medio $\langle u \rangle$ (m/s)	1.72
Grado de estratificación	Estabilidad
Rugosidad superficial (m)	0.20
Emisión (part/paso tiempo)	1
Paso de tiempo (s)	2
Tiempo final (s)	1000.
Movimientos totales	500
Altura fuente (m)	240.

Tabla 3.1.1. Condiciones de simulación bidimensional.

- (a) En primer lugar se analiza la influencia del número de puntos  $\xi$  de la distribución. Como se observa en la tabla 3.1.1, el total de partículas ficticias emitidas desde el foco, junto con el tiempo final, establecen el número de movimientos o pasos de tiempo que realiza cada una de ellas; por ejemplo, en esta simulación la partícula #1, al ser la primera en emitirse, realiza quinientos movimientos, mientras que la partícula #191 hace trescientos diez. Es decir, el número de movimientos equivale al número de puntos  $\xi$  de la distribución gaussiana observada para las dos componentes de la velocidad. En las Figuras 3.1.1 y 3.1.2 se muestran los valores medios y las desviaciones típicas de las dos componentes aleatorias de la velocidad para todas las partículas ficticias. Se puede observar que a mayor número de movimientos de la partícula, la distribución se asemeja más a una fdp normal. Esta característica manifiesta la imposibilidad de mejorar la condición de aleatoriedad en las velocidades de aquellas partículas que se han emitido en los instantes finales de la simulación. En concreto, y tras sucesivos estudios, se ha establecido un límite a partir del cual la distribución observada se considera que no tiene fiabilidad suficiente. Este límite en el número de movimientos es de 150. Es decir, para aquellas partículas que se hayan trasladado un número de veces inferior a dicho límite existe poca certeza de que sus componentes aleatorias de velocidad establezcan una  $N(0,1)$ . Sin embargo, salvo en simulaciones con pocos movimientos, no contempladas en este trabajo, el efecto global en el modelado es inapreciable, debido a que estas partículas son las que se sitúan en las proximidades de la fuente de emisión y no determinan significativamente el comportamiento del penacho.

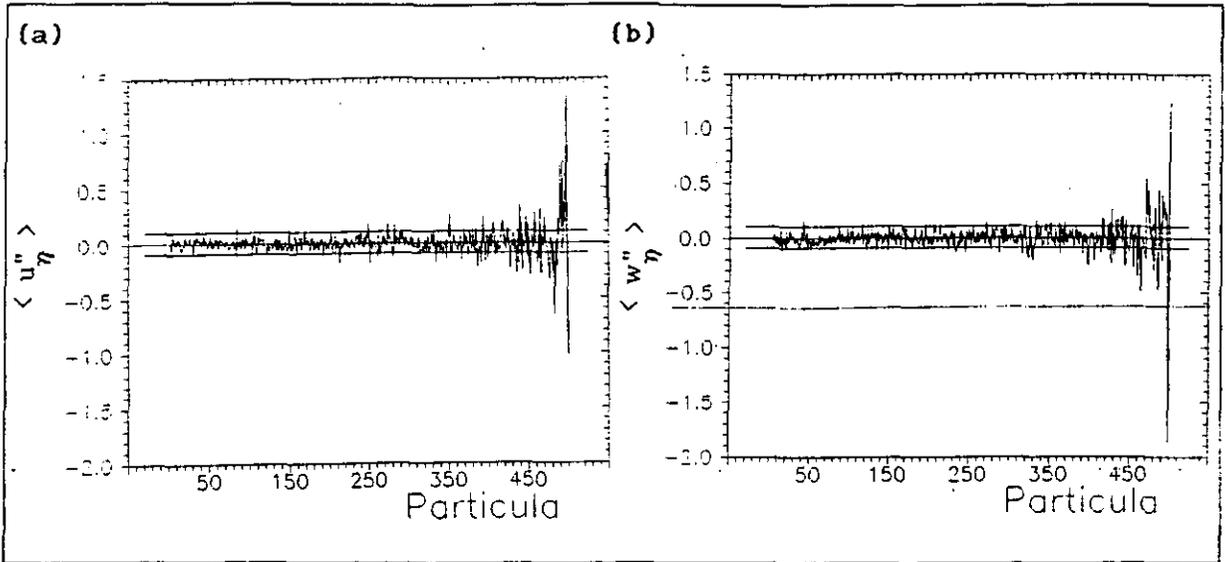


FIGURA 3.1.1. Valor medio de la componente aleatoria de la velocidad, (a)  $u''_{\eta}$  (b)  $w''_{\eta}$ , para cada partícula. Valor inicial de la serie aleatoria igual a 1 y  $n$  igual a 120. Las líneas continuas horizontales corresponden a los valores de 0.1, 0 y -0.1.

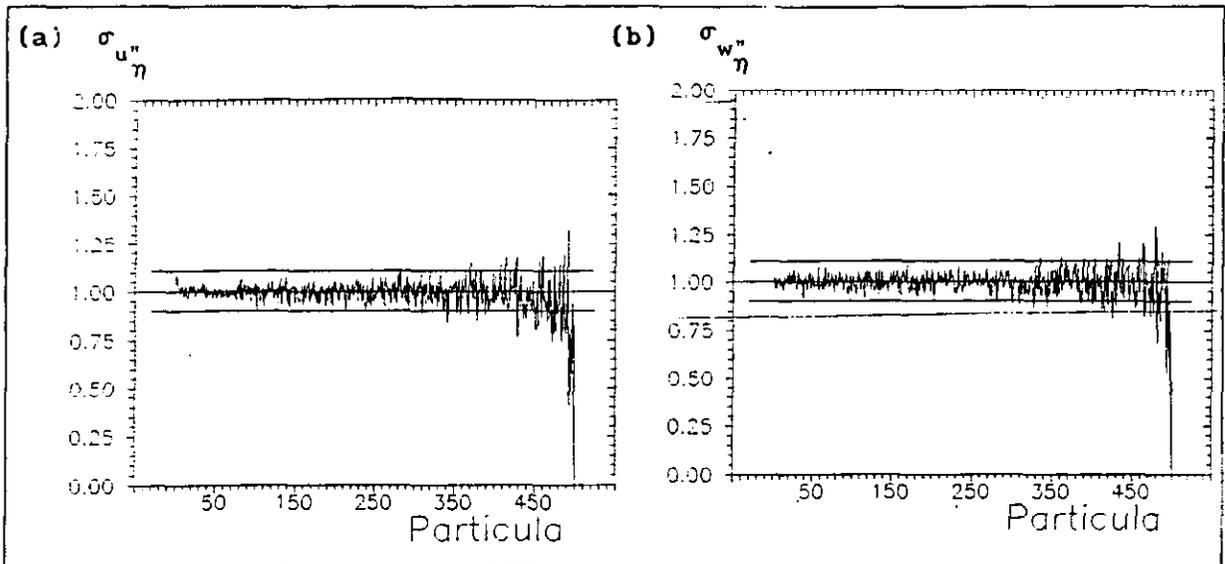


FIGURA 3.1.2. Desviación típica de la componente aleatoria de la velocidad, (a)  $u''_{\eta}$  (b)  $w''_{\eta}$ , para cada partícula. Valor inicial de la serie aleatoria igual a 1 y  $n$  igual a 120. Las líneas continuas horizontales corresponden a los valores de 1.1, 1 y 0.9.

En la Figura 3.1.3 se puede observar que el límite establecido no depende de la bondad del generador, en este caso el GOSFAF. Por tanto, el generador de números aleatorios, bien sea RAND o GOSFAF, no condiciona el comportamiento global de la nube de partículas ficticias. Equivalente resultado se obtuvo con el generador RAND de un Risk 6000 y de un HP Apollo.

- (b) La influencia del número de aleatorios  $n$ , escogidos para generar la distribución normal, no modifica el resultado observado en el análisis del número de puntos  $\xi$ . Las Figuras 3.1.4 y 3.1.5 confirman de nuevo la existencia del límite en el número de movimientos (superior a 150).
- (c) Por último, queda comprobar la dependencia de las distribuciones generadas según el valor inicial asignado a la serie aleatoria. Al igual que en el caso anterior, en el bloque media-desviación de las Figuras 3.1.6A y 3.1.6B no se aprecia nada que contradiga el límite establecido para el número  $\xi$ , aún siendo este caso el más desfavorable. Esta independencia del valor inicial coincide con lo obtenido por Vattulainen et al. (1993).

Por tanto, del análisis de posibles influencias en la obtención de una distribución de media cero y varianza unidad a partir de series de números aleatorios, se puede deducir que el número de puntos elegidos de la distribución observada es el único factor determinante de la bondad de la misma, estableciéndose un límite que pudiera depender del tipo de generador, aunque no se ha detectado en los dos utilizados en este trabajo. Por consiguiente, se considera necesario analizar previamente el generador en cualquier modelo basado en la aplicación de generadores de números aleatorios.

Una vez establecida gráficamente la semejanza entre la gaussiana teórica y la distribución generada para cada una de las partículas ficticias, se debe contrastar mediante un test estadístico, como es el test de  $\chi^2$ . En la Figura 3.1.7 se encuentran representadas la fdp teórica (línea continua) y la distribución observada (línea discontinua) para dos partículas. La partícula #1 ha realizado 500 movimientos y la #191 310. Esta última se ha elegido para detectar alguna posible irregularidad de la región de aceptación en caso de un número de movimientos menor a 350. El generador de aleatorios es el RAND del ordenador Convex.

El test  $\chi^2$  confirma la aceptación de la hipótesis nula (distribución  $N(0,1)$ ) al menos en un 70% del total de partículas emitidas, con un nivel de significación de  $\alpha=0.05$  (95% de confianza). En concreto, para las partículas #1 y #191 el test estadístico  $\chi^2$  es, respectivamente, 1.01 y 5.69 para la componente aleatoria horizontal de la velocidad  $u''_{\eta}$ , y 9.27 y 7.62 para la componente aleatoria vertical  $w''_{\eta}$ . El 30% restante corresponde a aquellas

partículas que se encuentran más próximas a la fuente, y por tanto no son las que caracterizan el comportamiento del penacho.

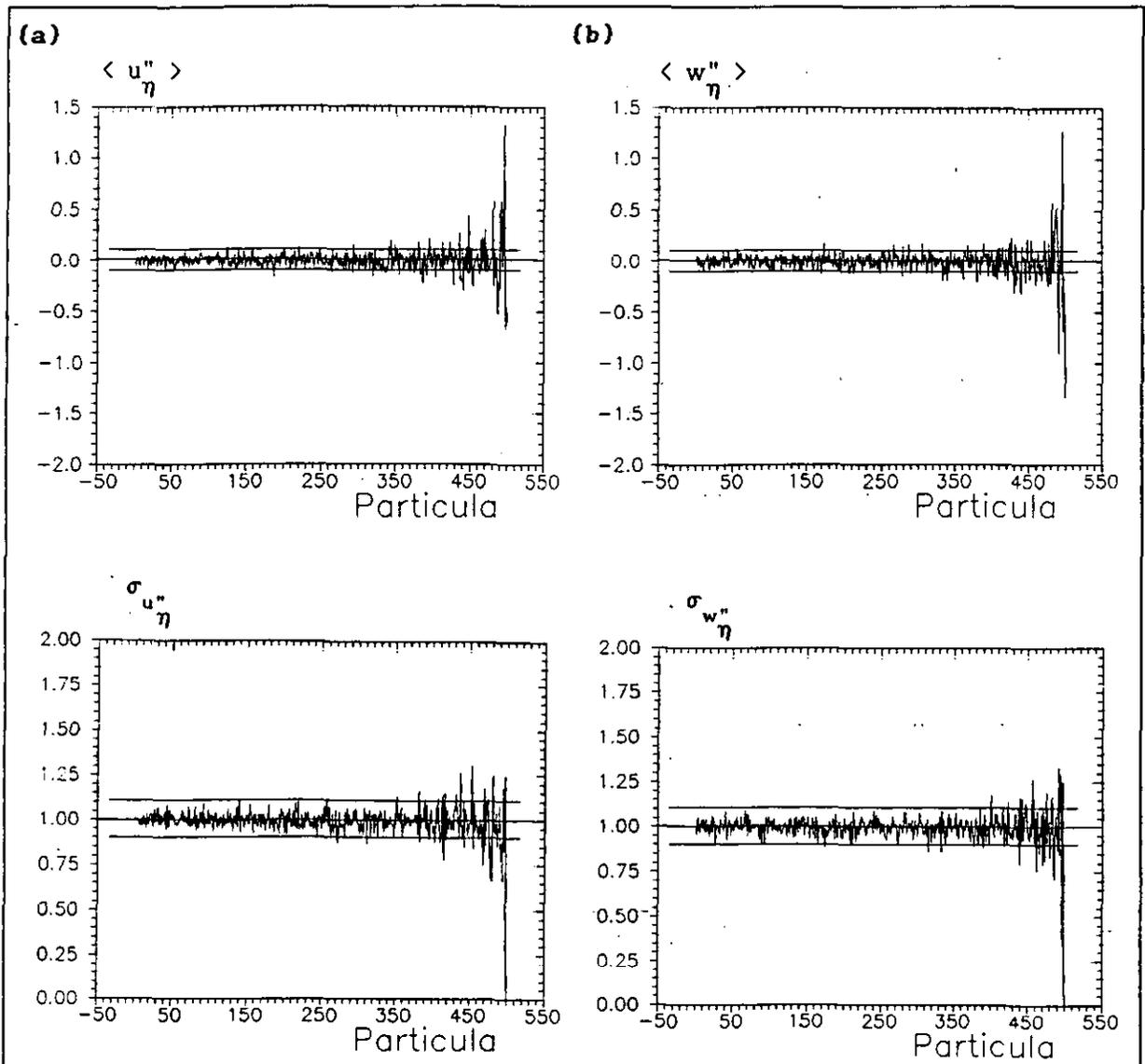


FIGURA 3.1.3. Valor medio y desviación standard de la componente aleatoria de la velocidad, (a)  $u''_{\eta}$  (b)  $w''_{\eta}$ , para cada partícula. Valor inicial de la serie aleatoria igual a 1, n igual a 120 y el generador es G05FAF.

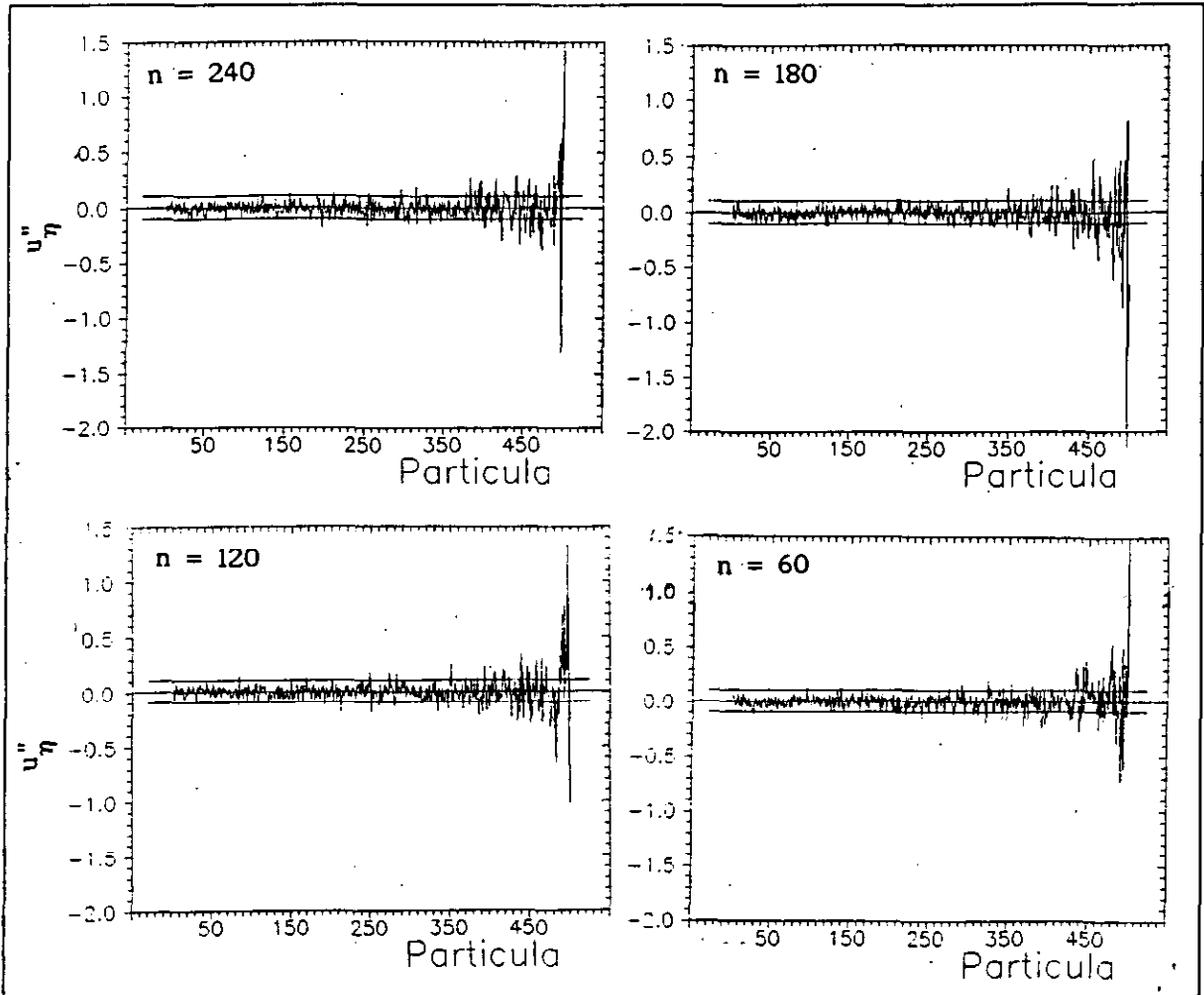


FIGURA 3.1.4. Valor medio de la componente aleatoria de la velocidad  $u''_{\eta}$  para cada partícula. Valor inicial de la serie aleatoria igual a 1 y  $n$  el indicado.

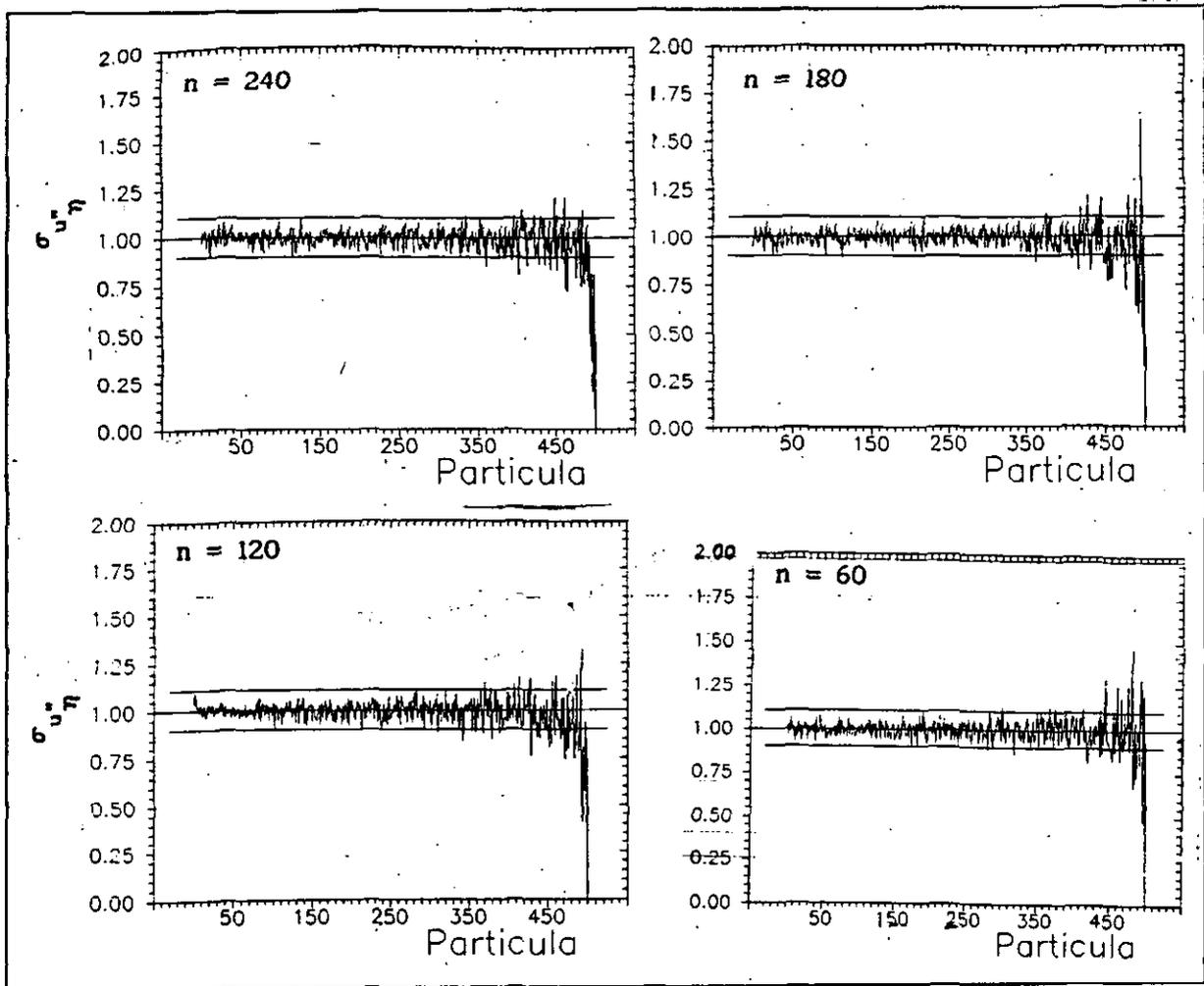


FIGURA 3.1.5. Desviación standard de la componente aleatoria de la velocidad  $u''_{\eta}$  para cada partícula. Valor inicial de la serie aleatoria igual a 1 y  $n$  el indicado.

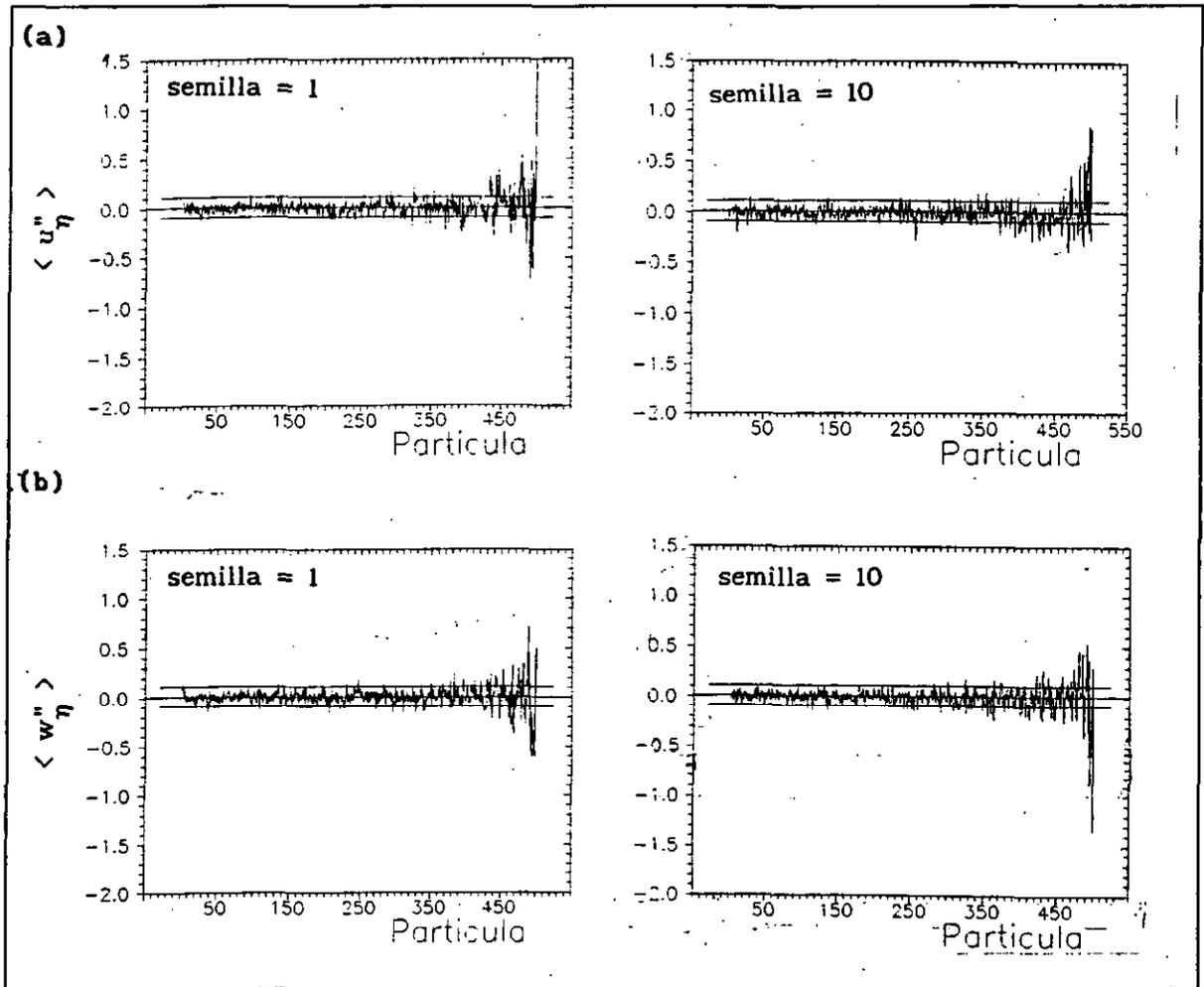


FIGURA 3.1.6A. Valor medio de la componente aleatoria de la velocidad, (a)  $u''_{\eta}$  (b)  $w''_{\eta}$ , para cada partícula. Valor inicial de la serie aleatoria indicado por semilla y  $n$  igual a 60.

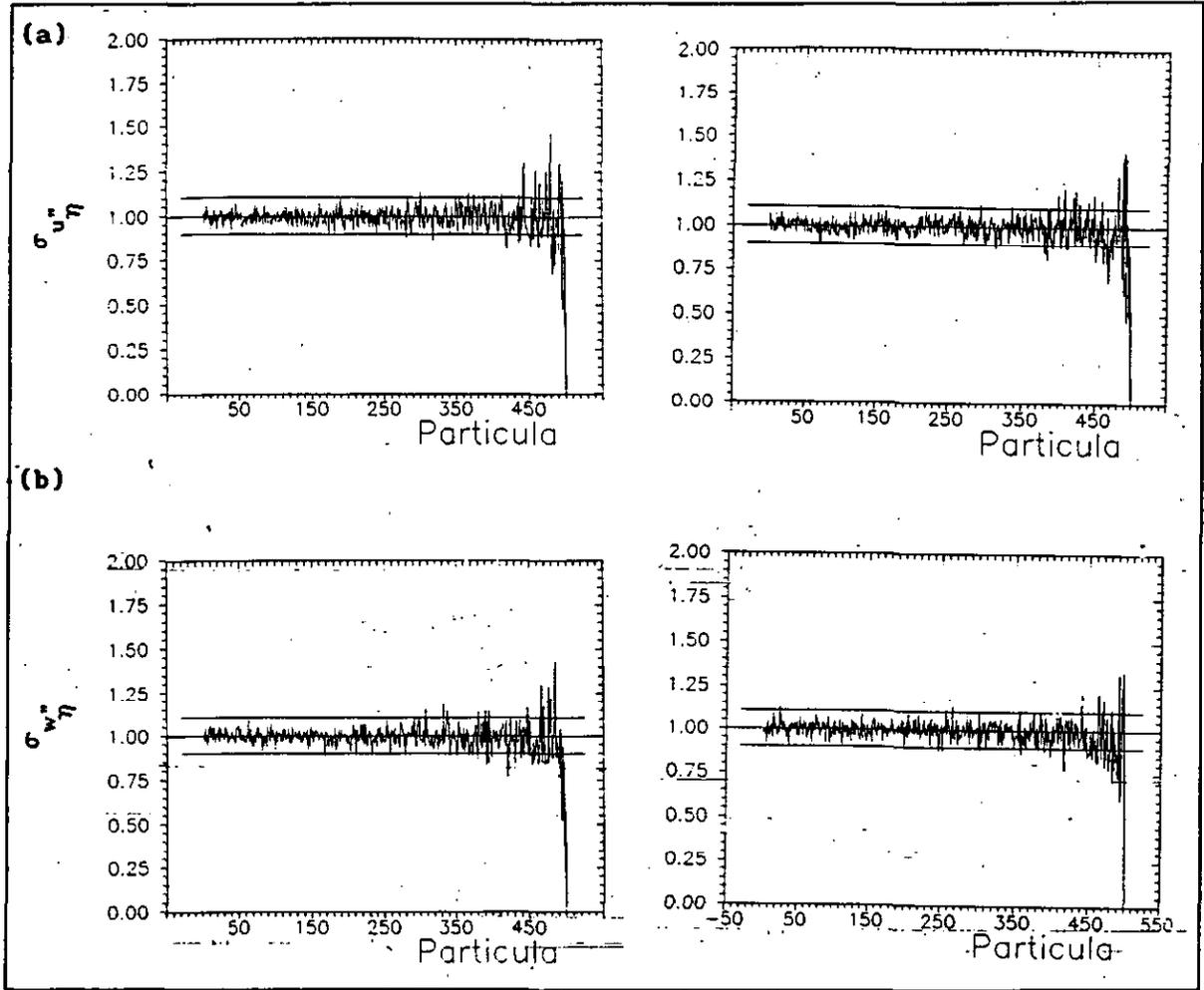


FIGURA 3.1.6B. Desviación standard de la componente aleatoria de la velocidad, (a)  $u''_{\eta}$  (b)  $w''_{\eta}$ , para cada partícula. Valor inicial de la serie aleatoria indicado por semilla y  $n$  igual a 60.

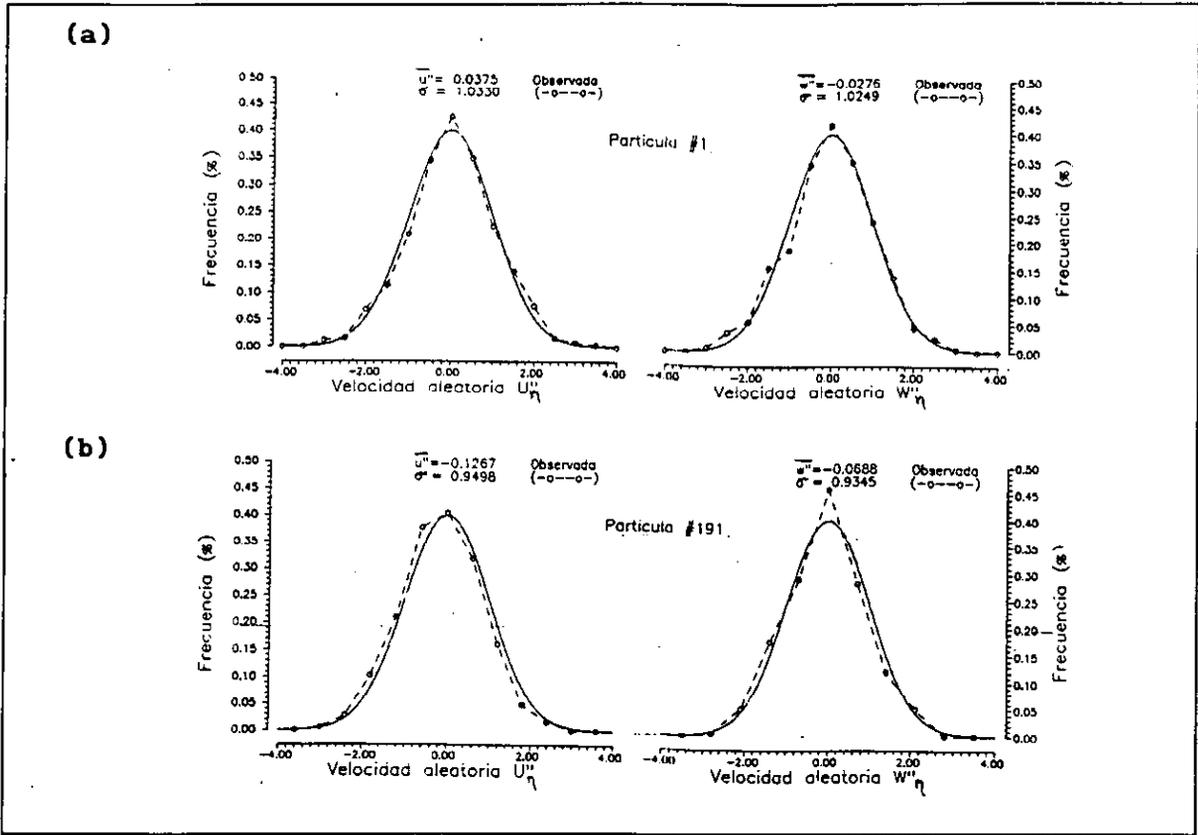


Figura 3.1.7. Función de densidad de probabilidad teórica  $N(0,1)$  (línea continua) y observada (línea discontinua) para las dos componentes aleatorias de la velocidad,  $u''_{\eta}$  y  $w''_{\eta}$ , en las partículas (a) #1 y (b) #191. Los valores de la media y desviación standard observadas están indicados en la parte superior.

### 3.2. Modelo unidimensional.

Como se indicó en apartado 2.2, los modelos lagrangianos comenzaron con la resolución matemática de la ecuación de Langevin aplicada a una sola dimensión. En la ecuación de Langevin el término aleatorio (ruido blanco) representa el efecto de la turbulencia sobre la partícula durante un intervalo de tiempo  $dt$  (Lin y Reid, 1962). La resolución de esta ecuación es un proceso de Markov de primer orden, que debe completarse en condiciones turbulentas no homogéneas, como corresponde a situaciones de fuerte estratificación o situaciones convectivas.

El esquema unidimensional con el que se va a trabajar es un esquema clásico dentro de la modelización lagrangiana del tipo Monte-Carlo y la dirección elegida es la componente vertical, por ser la que más depende de la situación turbulenta. Así, mientras que bajo situaciones estables y neutras el término aleatorio se ajusta aproximadamente a una fdp gaussiana, en situaciones convectivas no se observa este comportamiento.

El esquema de Monte-Carlo en la dimensión vertical para cada una de las partículas es

$$w'(t+\Delta t) = f \cdot w'(t) + w''(t+\Delta t)$$

donde  $f$  representa la autocorrelación  $R_{w,w}(\Delta t) = \exp(-\Delta t/T_{Lw})$  y  $w''$  corresponde a una fdp, en general, gaussiana de media cero y varianza  $\sigma_{w''}^2 = \sigma_w^2 (1-f^2)$ . Conocida la perturbación de la velocidad vertical a la altura  $z(t+\Delta t)$ , la velocidad vertical vendrá dada por la suma de dicha perturbación más la velocidad media

$$w(t+\Delta t) = \langle w \rangle + w'(t+\Delta t),$$

por tanto el nuevo desplazamiento de la partícula en el intervalo de tiempo  $\Delta t$  es

$$z(t+2\Delta t) = z(t+\Delta t) + w'(t+\Delta t) \cdot \Delta t$$

Como se mencionó al inicio de este Capítulo, además de la elección del generador de números aleatorios, los modelos lagrangianos de partículas presentan una serie de aspectos críticos que afectan decisivamente en los resultados que se obtengan de las simulaciones. Por ello, a continuación se realizará una verificación del esquema, considerando diferentes condiciones iniciales y de contorno, diversos pasos de tiempo, así como distintas expresiones para determinar los valores de las varianzas y las escalas de tiempo lagrangianas. En los siguientes subapartados se realizará esta verificación de forma separada para casos con estratificación inestable, neutra y estable. Finalmente, se considerará un caso de fumigación, es decir de evolución entre una estratificación estable a una inestable. el efecto de diferentes esquemas para tales condiciones. En el caso de estratificación inestable, se considerarán dos tipos de distribución de las fluctuaciones de la velocidad vertical, y posteriormente se aplicarán los esquemas elegidos a la situación neutra, la estable y finalmente la de fumigación.

### 3.2.1. Situaciones convectivas.

El comportamiento de la difusión turbulenta en la Capa Límite Convectiva (CLC) da lugar a que, en estas circunstancias, se observen elevadas concentraciones en las proximidades del suelo a grandes distancias de la fuente. Estas distribuciones son difícilmente reproducibles por los modelos gaussianos (Willis y Deardorff, 1976) o por los modelos eulerianos con cierre de primer orden (Willis y Deardorff, 1978), por lo que se han propuesto otras metodologías como los modelos eulerianos de cierre superior (Lewellen y Teske, 1976) o los modelos lagrangianos del tipo Monte-Carlo, como el descrito en el Capítulo 2, que se centra fundamentalmente en la elección de una determinada distribución para cada una de las componentes de la velocidad. Aunque inicialmente Monin y Yaglom (1971) supusieron una fdp normal, los experimentos en laboratorio de Willis y Deardorff (1974) y las observaciones de campo realizadas por Taconet y Weill, 1982 y Caughey et al., 1983, entre otros, mostraron que la distribución de la componente vertical de la velocidad en situaciones convectivas no es gaussiana, ya que tiene una moda negativa y un alargamiento de la cola de la distribución en la región de valores positivos (Lamb, 1982). Estas dos características son el resultado del tipo de movimiento característico en la CLC. Los movimientos parece que se organizan en dos grupos, uno corresponde a los ascensos en el seno de las células convectivas, caracterizados por unas fuertes velocidades verticales y el otro a las regiones de subsidencia locales que poseen velocidades verticales descendentes de menor magnitud que el movimiento ascendente.

Para simular el este tipo de movimientos dentro de la CLC nos hemos basado en la metodología propuesta por Baerentsen y Berkowicz (1984), donde la distribución de velocidades verticales se desdobra en dos fdp gaussianas de medias  $w_+$  y  $-w_-$  y desviaciones  $\sigma_+$  y  $\sigma_-$ ; donde el subtipo + representa el movimiento ascendente y el subtipo - el movimiento descendente.

En el apartado 2.3 se definieron estas variables junto con  $a_+$ ,  $a_-$  y las fdp  $P_+$  y  $P_-$ , de manera que,

$$P(w) = a_+ \cdot P_+(w) + a_- \cdot P_-(w)$$

Si en vez de desdoblar los movimientos convectivos verticales se supusiese un único tipo de distribución según una fdp gaussiana de media cero y desviación  $\sigma_w$ , resultaría,

$$P(w) = P(0, \sigma_w^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma_w} \cdot \exp\left(-\frac{w^2}{2 \sigma_w^2}\right)$$

A continuación se compararán los resultados obtenidos con ambos tipos de distribución de velocidades turbulentas verticales, bajo diferentes condiciones. Este estudio comparativo consistirá en analizar la consistencia física de ambos métodos, que requiere que una distribución inicial uniforme de partículas se mantenga a lo largo de la simulación y a lo largo de toda la capa límite (Sawford, 1986). En esta comparación ambos esquemas se inician con una distribución de 10000 partículas, repartidas uniformemente

por toda la CLC (H=1000 m) y considerando los siguientes valores para las variables: la longitud de rugosidad  $z_0 = 0.01$  m, la escala de la velocidad convectiva  $w_* = 1.6$  m/s, la longitud de Monin-Obukhov  $L = -5$  m, suponiendo en todos los casos partículas sin flotabilidad. La varianza de las fluctuaciones de la componente vertical del viento elegida para estas simulaciones corresponde a la relación semiempírica obtenida en medidas experimentales en la CLC y en ensayos con tunel de viento (Lenschow, 1970; Izumi y Caughey, 1976 (referenciada en Baerentsen y Berkowicz, op. cit.)):

$$\sigma_w^2 = 1.54 w_*^2 \left( \frac{z}{H} \right)^{2/3} \exp \left( -\frac{2z}{H} \right) \quad (3.2.1.1)$$

Igualmente se ha seleccionado la relación propuesta también por Baerentsen y Berkowicz para la escala de tiempo lagrangiana:

$$T_{LW} = \sigma_w^2 / 2\varepsilon_t \quad (3.2.1.2)$$

donde  $\varepsilon_t$  es el ritmo de disipación turbulenta. Baerentsen y Berkowicz indicaron que un valor en el rango entre 0.02 y 0.08 no condiciona el esquema, por lo que se ha elegido finalmente un valor de  $0.05 \text{ kgm}^2/\text{s}^3$ .

#### A. Simulaciones con una distribución $P(0, \sigma_w^2)$

Como se ha dicho anteriormente, la distribución inicial corresponde a 10 partículas/metro situadas de forma uniforme en toda la CLC. En este tipo de simulaciones las fluctuaciones iniciales de la velocidad de cada partícula se determinan en función de su altura según una fdp normal:

$$w'(t=0) = P(0, \sigma_w^2(t=0))$$

En primer lugar se analizarán los resultados obtenidos con unas condiciones de contorno en el suelo y el tope de la CLC correspondientes a "reflexión imperfecta", es decir sólo cambia la altura "z" de cada partícula al aproximarse a los bordes superior e inferior, y el paso de tiempo (*time step*) es de 0.03 segundos. Esta simulación se considerará como "caso de referencia". Posteriormente, se compararán los resultados con otros supuestos, variando las condiciones de contorno, los pasos temporales y las fluctuaciones de velocidad iniciales de cada partícula.

En la simulación de referencia (figura 3.2.1.1) lo primero que se manifiesta es que cuanto mayor sea el periodo de ejecución mejor es el ajuste de la distribución de las velocidades a una fdp gaussiana independientemente de la altura considerada. Este efecto no se ha visto reflejado anteriormente en ninguna bibliografía. Baerentsen y Berkowicz (1984) realizaron este tipo de comprobación en su esquema y Lamb (1982) en cambio reflejó la distribución  $(P(z/H).w_*.t)$ , pero ninguno de ellos obtuvo este comportamiento. En la figura 3.2.1.1a se consideran las velocidades deducidas por el esquema entre las alturas de 90 m y 110 m y la fdp teórica

a la altura de 100 m. Las velocidades resultantes se agruparon en 20 intervalos con un rango de  $w/w^*$  igual a 0.2. La figura 3.2.1.1b corresponde a aquellas partículas situadas entre 240 m y 260 m y la fdp teórica a 250 m. El nivel de significación es de 0.05 para tiempos superiores a 22.5 segundos (equivalente a 750 movimientos) a la altura de 100 m, mientras que en la altura de 250 m es necesario para ello superar los 75 segundos. Por tanto, el ajuste a una fdp gaussiana, además de depender del tiempo transcurrido, se ve influido por el número de partículas que se han situado a una determinada altura, ("N. de casos" de la Tabla 3.2.1.1), consecuencia directa del comportamiento aleatorio de la velocidad de las partículas. La Tabla 3.2.1.1 concreta los cuatro primeros momentos de las distribuciones de velocidad adimensional teórica y resultante del esquema en función del tiempo y a las alturas de 100 m y 250 m.

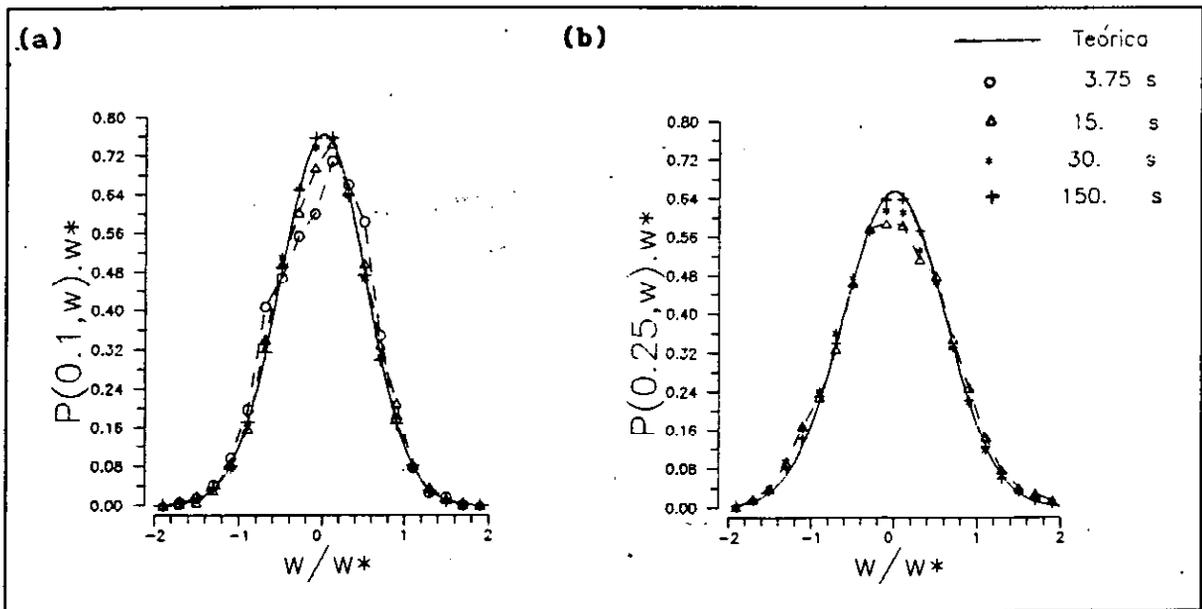


Figura 3.2.1.1. Evolución temporal de la distribución de velocidad de las partículas generada por el esquema entre (a) las alturas de 90 m y 110 m y (b) las alturas de 240 m y 260 m. Las líneas continuas representan las pdf teóricas a las alturas de 100m y 250 m.

(a)	Teórica (—)	3.75 seg ( o )	15.0 seg ( Δ )	30.0 seg ( * )	150.0 seg ( + )
Media	0.0000	0.0000	0.0148	-0.0106	-0.0088
Desv. Stand.	0.5212	0.5435	0.5247	0.5163	0.5190
Sesgo	0.0000	-0.1077	0.0075	-0.0193	-0.0292
Curtosis	0.0000	-0.3318	-0.2391	-0.0939	-0.0011
N. de casos z ∈ (90,110) m		24789	101556	210902	1044593

(b)	Teórica (—)	15.0 seg ( Δ )	30.0 seg ( * )	150.0 seg ( + )
Media	0.0000	0.0037	-0.0245	-0.0117
Desv. Stand.	0.6087	0.6520	0.6330	0.6176
Sesgo	0.0000	0.0599	0.0736	-0.0085
Curtosis	0.0000	-0.1635	-0.1105	-0.0290
N. de casos z ∈ (240,260) m		98988	192283	992843

Tabla 3.2.1.1. Cuatro primeros momentos de función de la distribución teórica y de las distribuciones de la velocidad resultantes en función del tiempo (a) de la Figura 3.1.1.1a y (b) de la Figura 3.1.1.1b.

Finalmente, en la figura 3.2.1.2 se representan las concentraciones instantáneas y medias, normalizadas con la concentración inicial, frente a  $\Delta z/H$  desde el inicio de la simulación hasta el tiempo indicado. Ambas concentraciones se normalizan respecto a las concentraciones iniciales (10 partículas/m) en intervalos  $\Delta z$  de 10 m. En esta figura se observa que desde los comienzos de la simulación existe una acumulación de partículas en la parte superior e inferior de la CLC, que posteriormente se amplifica con un cierto acrecentamiento en la zona superior.

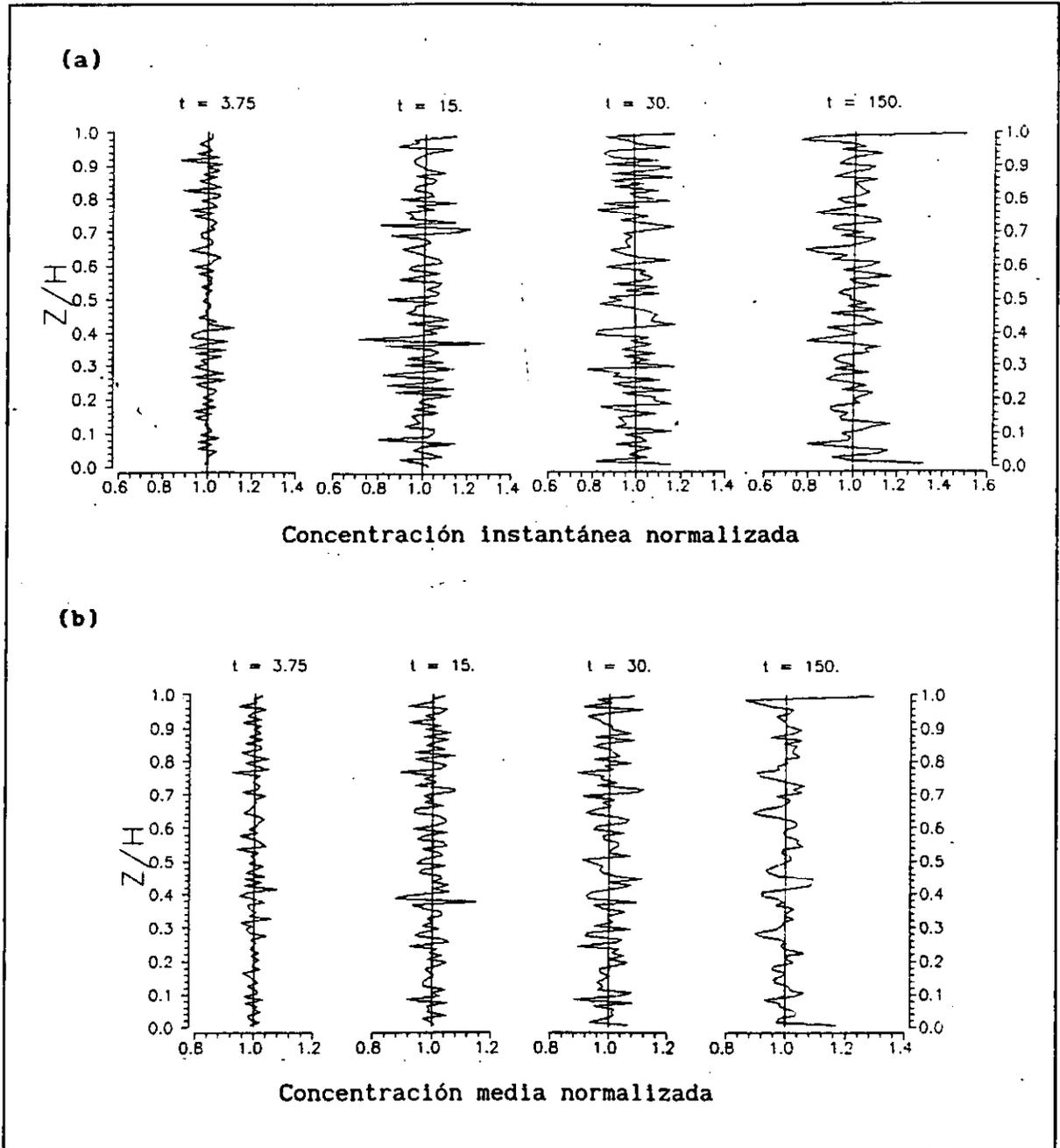


Figura 3.2.1.2. (a) Distribución normalizada e instantánea de partículas en los tiempos, en segundos, indicados por  $t$ . (b) Distribución normalizada y media de partículas entre el instante inicial y el tiempo indicado, en segundos, por  $t$ .

Aparte de estas regiones de acumulación, no se ve ninguna tendencia a que las partículas se agrupen en otras áreas, como se refleja en la figura 3.2.1.3, en donde se representa la distribución vertical media de las partículas desde el instante inicial hasta 150 segundos con un  $\Delta z$  igual a 10 metros, salvo en los límites superior e inferior de la CLC donde es igual a 1 metro.

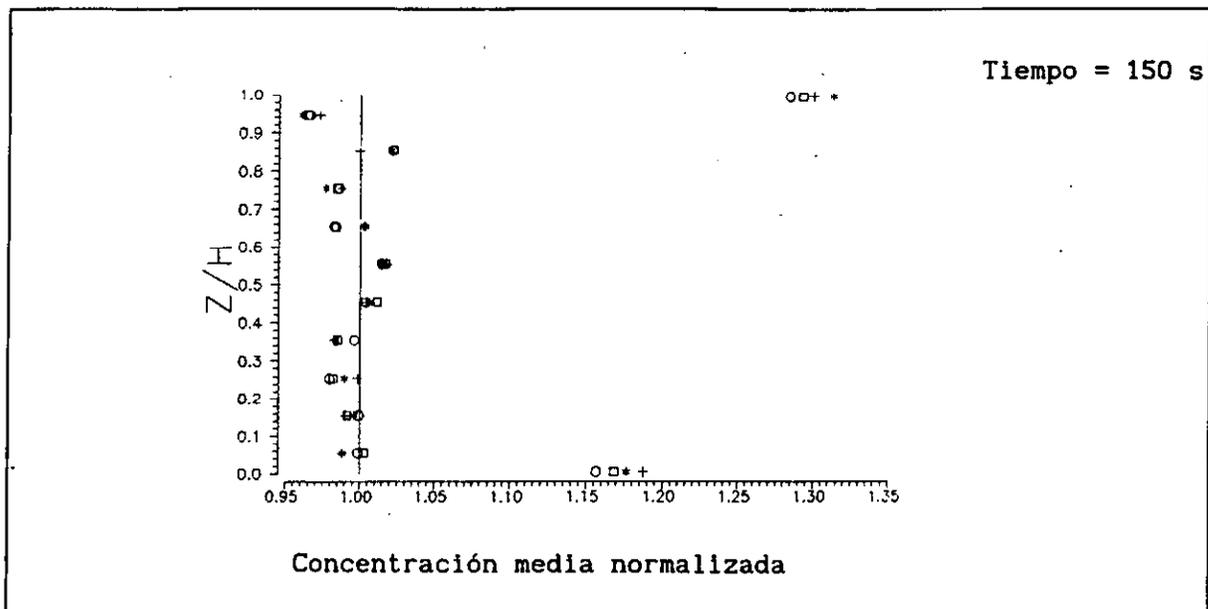


Figura 3.2.1.3. Distribución vertical media de partículas con fluctuaciones iniciales de velocidad nulas (o) y diferentes pasos temporales ( $\square$  para  $\Delta t=0.03$  s, \* para  $\Delta t=0.3$  s y + para  $\Delta t=3$  s) entre el instante inicial y 150 segundos.

A continuación se presentan los resultados de simulaciones variando las condiciones de contorno, considerando dos supuestos: (1) las partículas que intenten sobrepasar los límites de la CLC permanecerán un determinado tiempo en los mismos, dependiendo del signo de la fluctuación de la velocidad, y (2) condiciones de "reflexión perfecta", es decir, reflexión especular en la altura  $z$  de la partícula y cambio de signo de la fluctuación de su velocidad.

En el primer caso de condición de contorno los tiempos de permanencia tienen relación directa con los sucesivos nuevos valores de las fluctuaciones de velocidad; es decir, si una partícula se encuentra en el suelo, únicamente un valor positivo de la fluctuación de su velocidad hará posible su elevación, ya que su velocidad media es nula. Por consiguiente la probabilidad de separación de los contornos de la CLC es la misma que la probabilidad de que tengamos un valor positivo/negativo de la función de densidad de probabilidad (50%). Como se refleja en la figura 3.2.1.4 los resultados no difieren significativamente de los de la simulación de referencia, ni tan siquiera en los primeros movimientos. La comprobación se realizó con las distribuciones de velocidad de las partículas y con sus concentraciones instantáneas. En la figura 3.2.1.4 se representa lo sucedido entre 90 m y 110 m.

Sin embargo, con condiciones de contorno de reflexión perfecta se aprecia únicamente una disminución de la concentración en la parte superior de la CLC (figura 3.2.1.4).

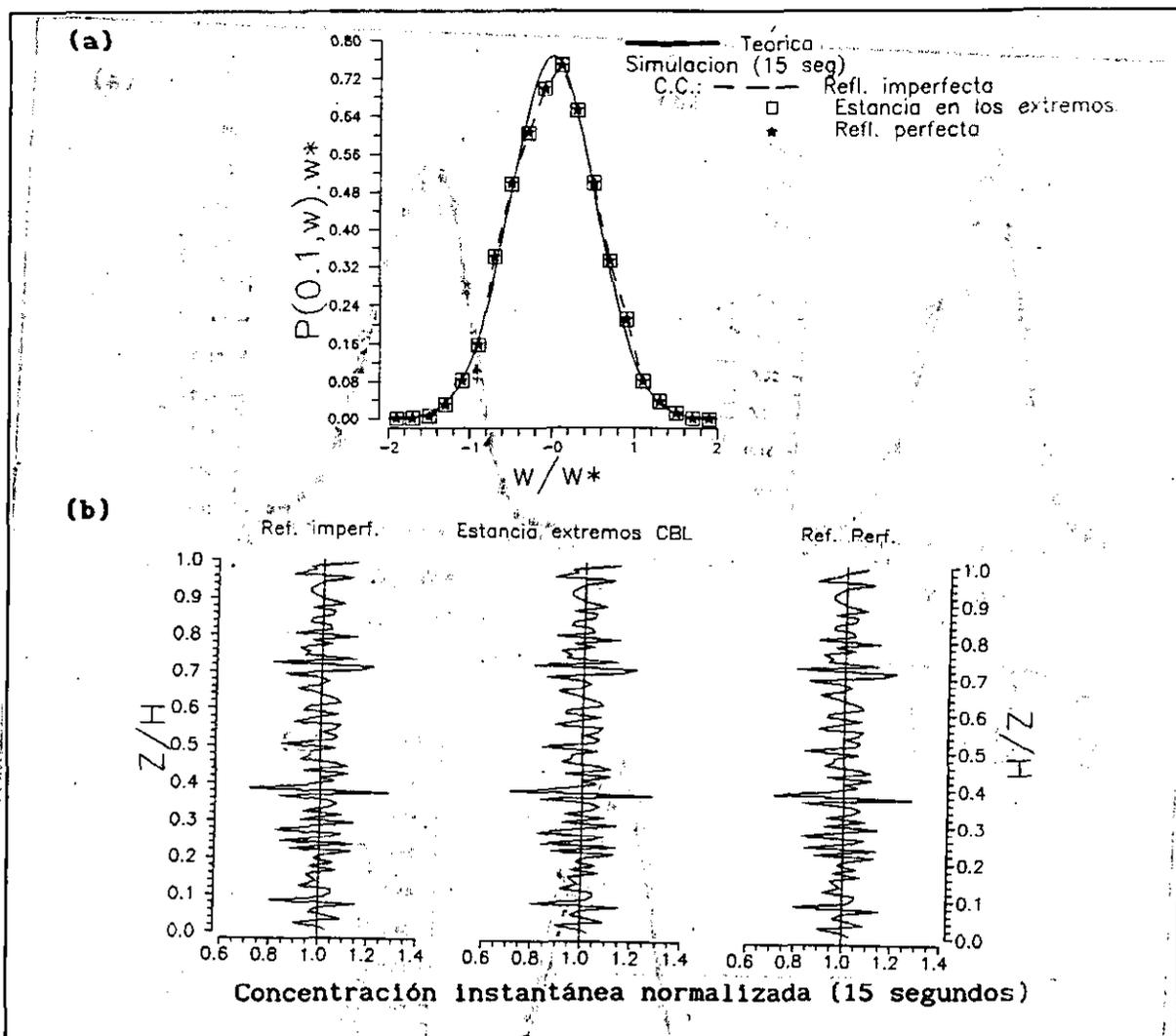


Figura 3.2.1.4. Distribución de (a) velocidad para  $z/h$  igual a 0.100 y (b) concentración adimensional de partículas a los 15 segundos. La línea continua (—) corresponde a la pdf teórica, la línea discontinua (- - -) a las condiciones de contorno de reflexión imperfecta (simulación inicial), □ a las condiciones de estancia en los contornos en función del valor de la fluctuación de la velocidad y \* para reflexión perfecta.

partículas generadas por el avance entre las alturas de las siguientes pasadas de tiempo al  $t = 15$  segundos. Otro factor que influye en el comportamiento de las partículas es el paso de tiempo asignado a cada uno de sus movimientos. En las figuras 3.2.1.5, 3.2.1.6 y 3.2.1.7 se pueden observar, respectivamente, los resultados de las simulaciones con pasos de tiempo de 0.3, 3 y 30 segundos. Este último paso temporal supera el máximo valor aconsejado por todos autores (ver apartado 2.2.2). La figura 3.2.1.5 contiene los ajustes de las distribuciones de la velocidad, la figura 3.2.1.6 las concentraciones instantáneas normalizadas y la figura 3.2.1.7 las concentraciones medias normalizadas. Los cuatro primeros momentos de estas distribuciones se presentan en la Tabla 3.2.1.2. Mientras en las concentraciones medias no se refleja ninguna influencia, salvo con un  $\Delta t = 30$  s, en las concentraciones instantáneas se manifiesta una dependencia, aproximándose más a la concentración inicial con el aumento del paso de tiempo en la simulación.

(a)

	Teórica (—)	3.90 seg ( o )	15.0 seg ( Δ )	30.0 seg ( * )	150.0 seg ( + )
Media	0.0000	-0.0019	-0.0022	0.0133	-0.0119
Desv. Stand.	0.5212	0.5376	0.5188	0.5264	0.5238
Sesgo	0.0000	-0.0065	0.0402	-0.0561	-0.0255
Curtosis	0.0000	-0.2299	-0.0923	0.0022	0.0008
N. de casos $z \in (90,110)$ m		2617	10313	20794	98482

(b)

	Teórica (—)	3.0 seg ( o )	15.0 seg ( Δ )	30.0 seg ( * )	150.0 seg ( + )
Media	0.0000	-0.0120	0.0073	0.0152	-0.0079
Desv. Stand.	0.5212	0.5680	0.5307	0.5321	0.5262
Sesgo	0.0000	-0.0702	-0.0195	0.0523	-0.0586
Curtosis	0.0000	-0.4424	-0.1141	-0.1508	-0.0536
N. de casos $z \in (90,110)$ m		200	1014	2087	9755

(c)

	Teórica (—)	30.0 seg ( * )	150.0 seg ( + )
Media	0.0000	-0.0120	0.0151
Desv. Stand.	0.5212	0.5680	0.5309
Sesgo	0.0000	-0.0702	-0.0837
Curtosis	0.0000	-0.4424	-0.1521
N. de casos $z \in (90,110)$ m		200	980

Tabla 3.2.1.2. Los cuatro primeros momentos de la distribución teórica y de las distribuciones de velocidad en función del tiempo para la relación  $z/H$  igual a 0.100 de la Figura 3.2.1.5. El paso de tiempo es de (a) 0.3 segundos, (b) 3 segundos y (c) 30 segundos.

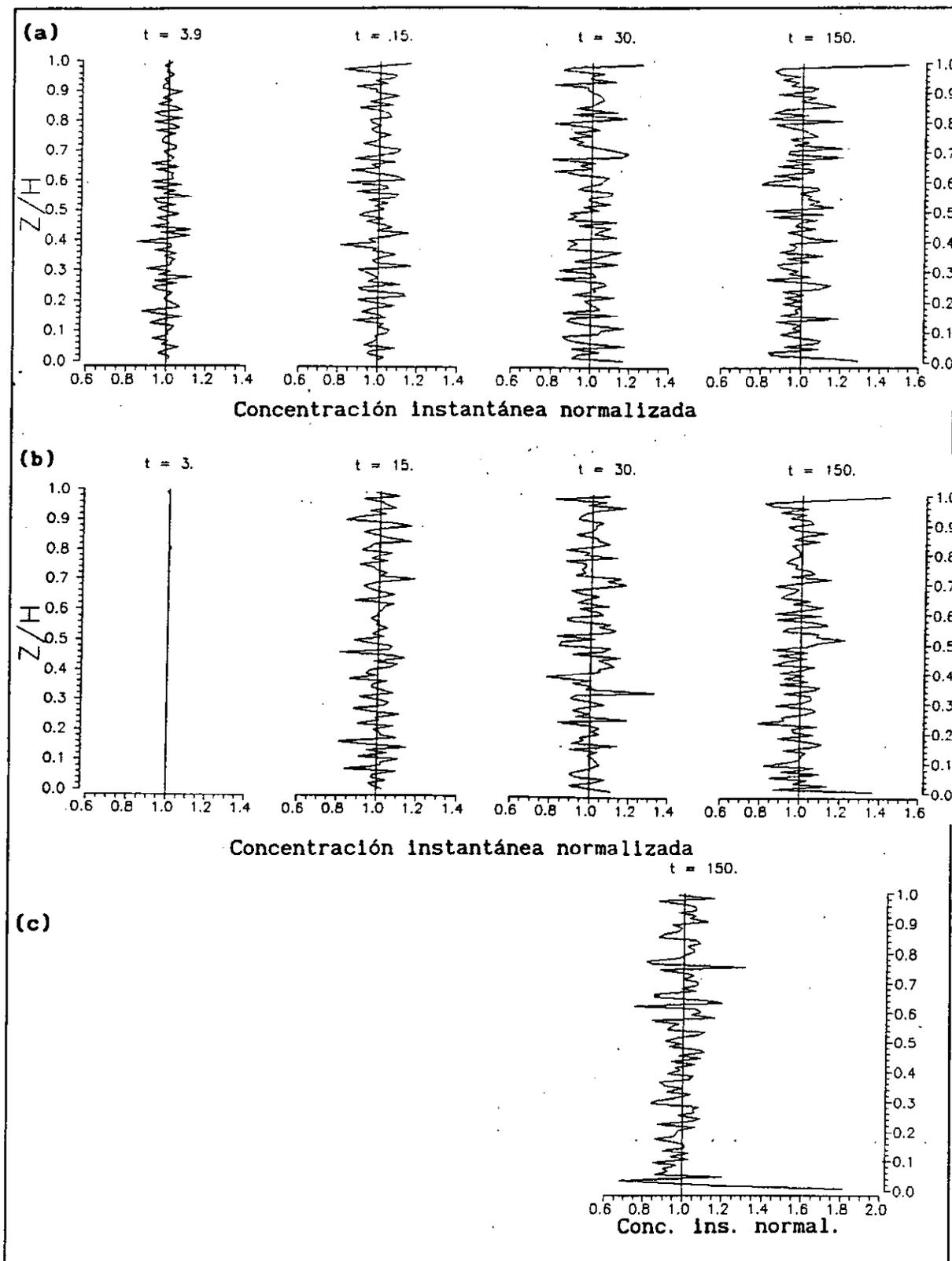


Figura 3.2.1.6. Evolución vertical y temporal, en segundos, de la concentración instantánea normalizada generada por el esquema con los siguientes pasos de tiempo (a) 0.3 s, (b) 3 s y (c) 30 s.

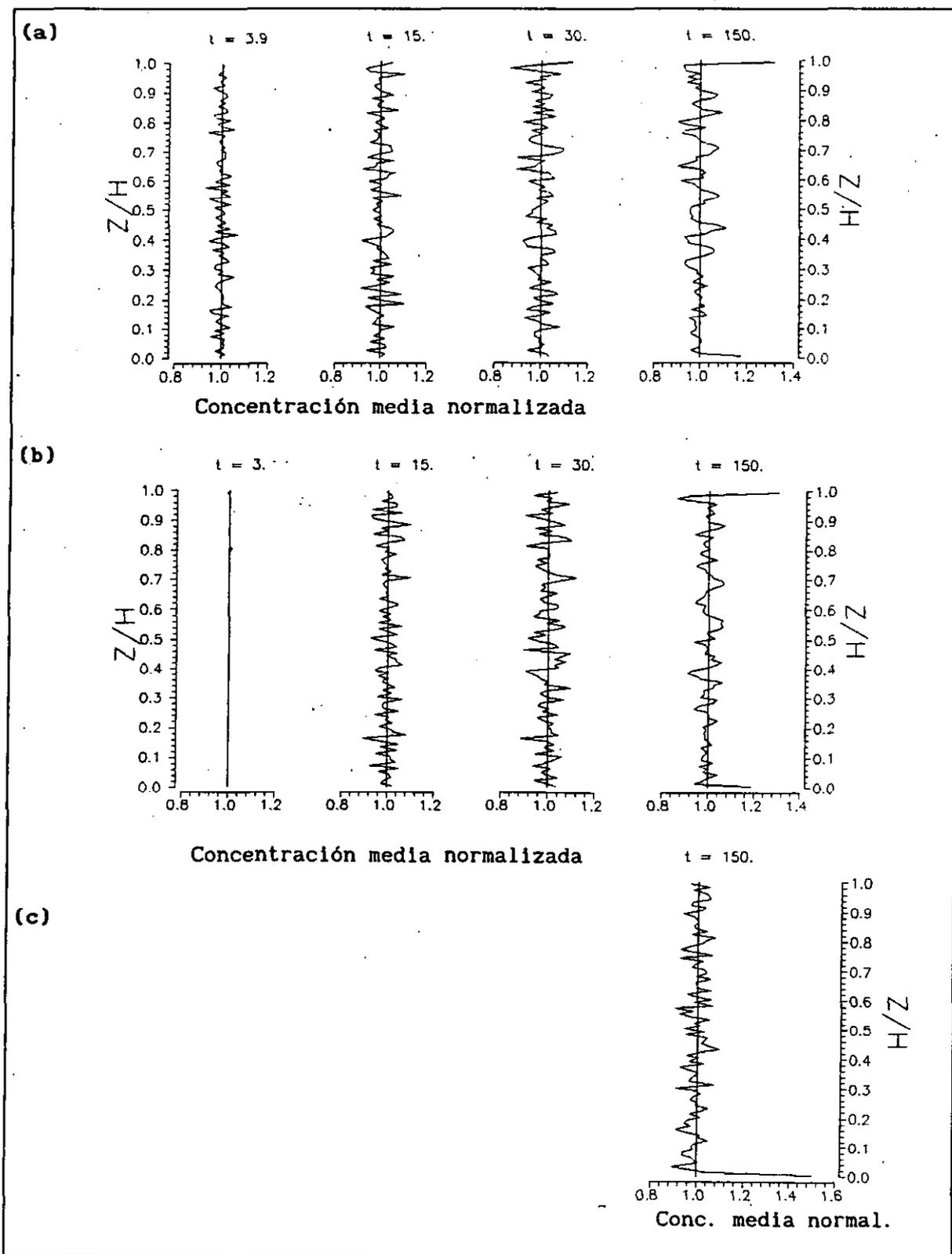


Figura 3.2.1.7. Evolución vertical y temporal, en segundos, de la concentración media normalizada, entre 0 y  $t$ , generada por el esquema con los siguientes pasos de tiempo (a) 0.3 s, (b) 3 s y (c) 30 s.

La tercera variación en el esquema con respecto a la simulación de referencia corresponde a las condiciones iniciales. Como se recordará, en dicha simulación las condiciones iniciales para las fluctuaciones de la velocidad de cada partícula correspondían a una fdp normal de media cero y desviación  $\sigma_w$ . En las figuras 3.2.1.8, 3.2.1.9 y 3.2.1.10 se presentan los resultados correspondientes a los casos en que las partículas parten con fluctuaciones de velocidad nulas. En la Tabla 3.2.1.3 se indican los cuatro primeros momentos de las distribuciones en función del tiempo.

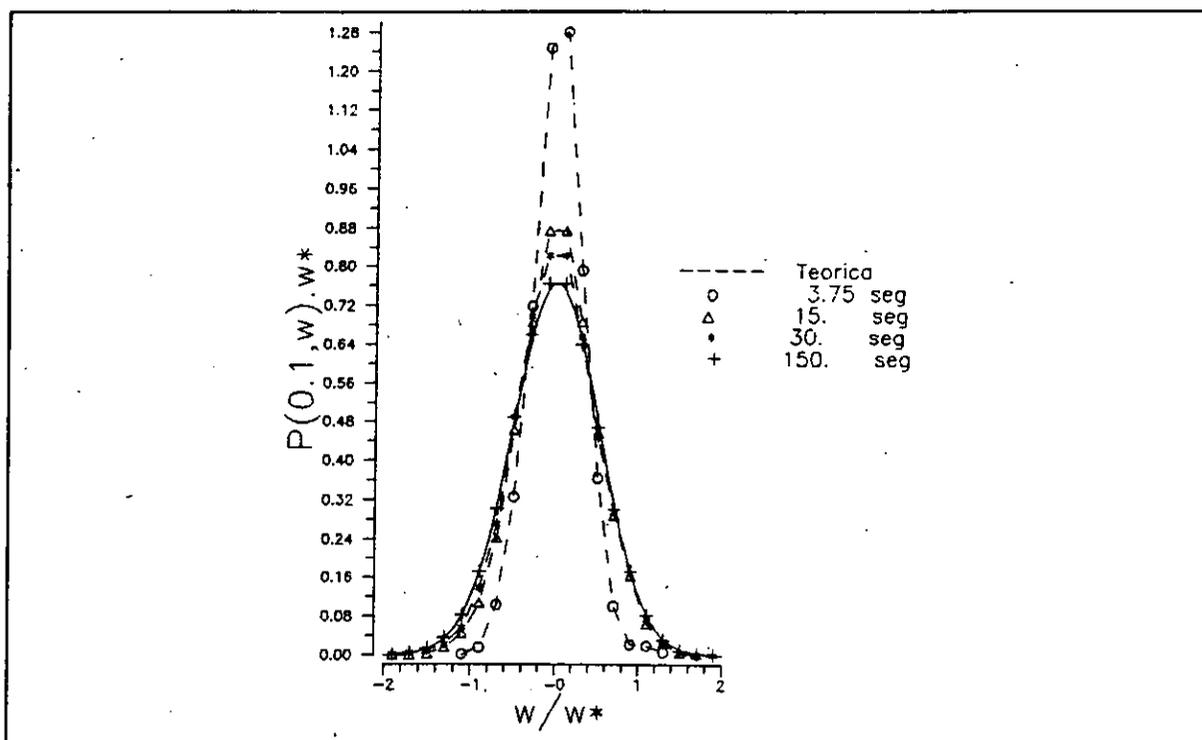


Figura 3.2.1.8. Evolución temporal de la distribución de velocidad de las partículas generada por el esquema entre las alturas de 90 m y 110 m, eligiendo fluctuaciones iniciales de velocidad nulas.

	Teórica (—)	3.75 seg (o)	15.0 seg (Δ)	30.0 seg (* )	150.0 seg (+)
Media	0.0000	0.0153	0.0236	0.0029	-0.0080
Desv. Stand.	0.5212	0.3155	0.4615	0.4858	0.5168
Sesgo	0.0000	0.1631	0.0748	-0.0019	-0.0321
Curtosis	0.0000	0.5143	0.0531	0.0721	-0.0015
N. de casos $z \in (90, 110) \text{ m}$		25065	100865	204432	1016451

Tabla 3.2.1.3. Los cuatro primeros momentos de la distribución teórica y de las distribuciones de velocidad en función del tiempo para  $z/H$  igual a 0.100. Fluctuaciones iniciales de velocidad nulas.

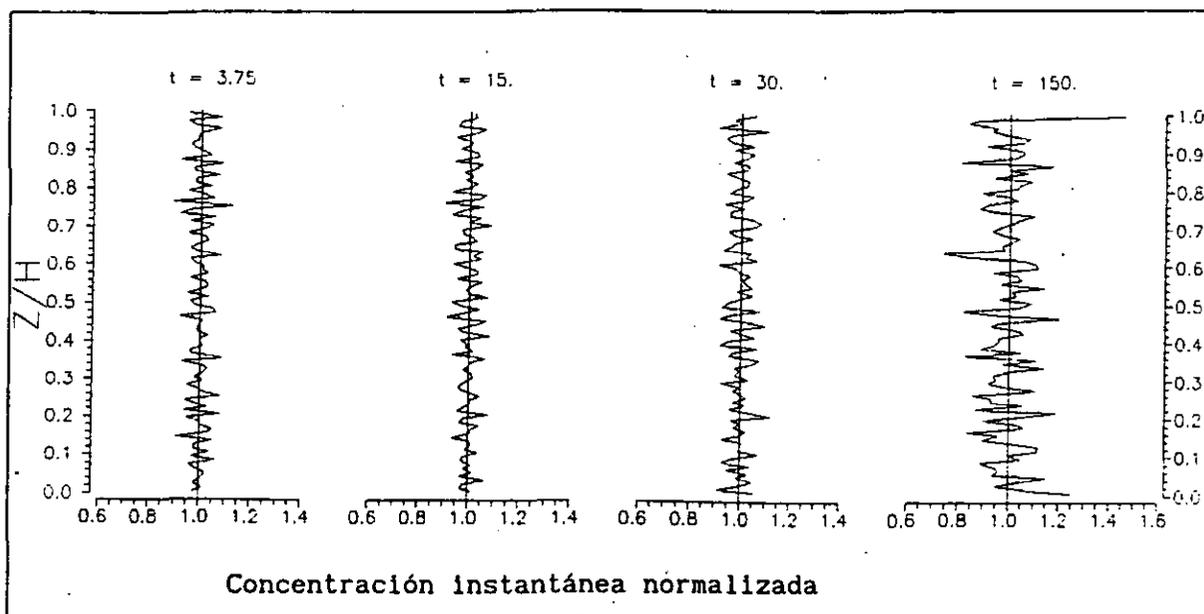


Figura 3.2.1.9. Evolución vertical y temporal, en segundos, de la concentración instantánea normalizada. Fluctuaciones iniciales de velocidad nulas.

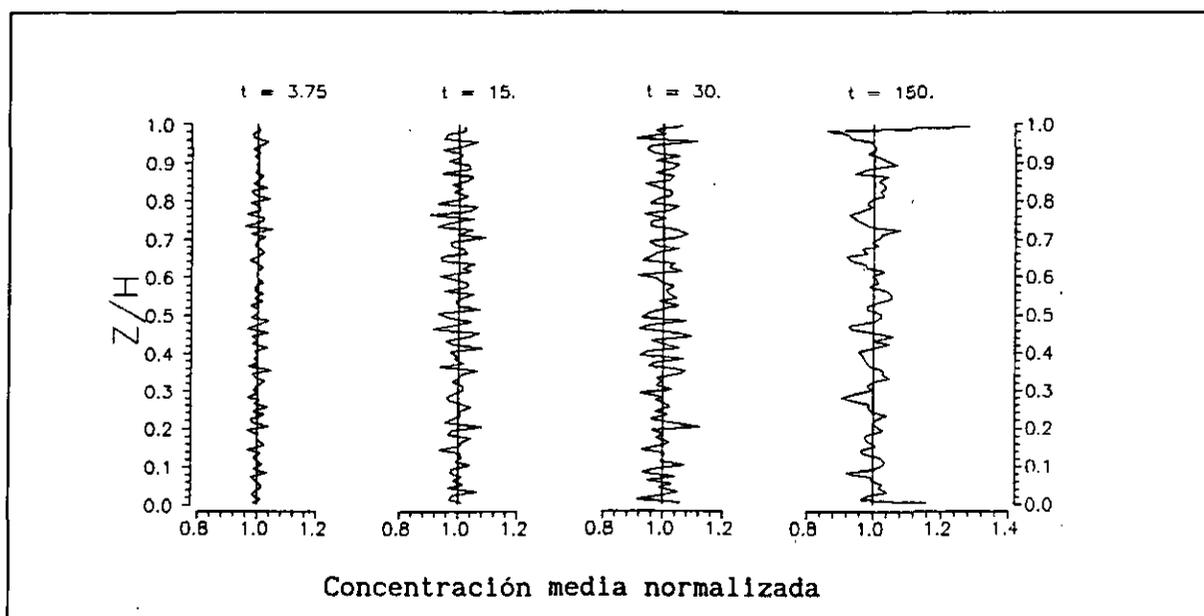


Figura 3.2.1.10. Evolución temporal, en segundos, de la concentración media normalizada, entre 0 y t. Fluctuaciones iniciales de velocidad nulas.

Al comparar las figuras 3.2.1.1a y 3.2.1.8 se manifiesta que el esquema con condiciones iniciales según una gaussiana presenta con anterioridad un mejor ajuste a la fdp teórica (nivel de confianza del 95%), aunque el número de casos sea similar (comparar tablas 3.2.1.1a y 3.2.1.3). Sin embargo se observa que existe menor fluctuación de la concentración en los primeros 75 segundos cuando la fluctuación inicial de la velocidad es nula, demostrando la alta sensibilidad del esquema a las condiciones iniciales. Si bien la inicialización nula aporta una fuerte estabilidad del esquema en los

"primeros movimientos", el comportamiento a posteriori responde muy similarmente al caso con inicialización gaussiana. En consecuencia, creemos que existen dos razones para elegir esta última inicialización, la primera es el ajuste de la distribución a la fdp teórica y la segunda es que se parte con la misma filosofía del esquema: función de distribución gaussiana. En el subapartado B se reflejará de nuevo este comportamiento.

Otras consideraciones a tener en cuenta son las expresiones semiempíricas de la varianza de la velocidad vertical y la escala de tiempo lagrangiana. Sin embargo, como los resultados son similares, el análisis de la influencia de la elección de tales expresiones se realizará en el caso de condiciones convectivas con dos tipos de movimiento en la CLC (subapartado B), así como bajo situaciones neutras (apartado 3.2.2) y con situación estable (apartado 3.2.3).

**B. Simulaciones con  $a_+P_+(w_+, \sigma_+^2) + a_-P_-(-w_-, \sigma_-^2)$**

En este subapartado se presentan los resultados de las simulaciones correspondientes al caso en que se considera a la función de densidad de probabilidad como suma de dos distribuciones gaussianas. Esto permite reorganizar el comportamiento atmosférico convectivo en dos tipos de movimiento diferenciados (ascendente y descendente) y a su vez conjuntados. Para adecuar convenientemente la distribución de la velocidad de las partículas a cualquier altura se deben cumplir las siguientes relaciones,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(w)dw = 1 \quad \Rightarrow \quad a_+ + a_- = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} w P(w)dw = 0 \quad \Rightarrow \quad a_+w_+ - a_-w_- = 0$$

(3.2.1.3)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} w^2 P(w)dw = \sigma_w^2 \quad \Rightarrow \quad a_+(\sigma_+^2 + w_+^2) + a_-(\sigma_-^2 + w_-^2) = \sigma_w^2$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} w^3 P(w)dw = S_w^3 \quad \Rightarrow \quad 3a_+w_+\sigma_+^2 + a_+w_+^3 - 3a_-w_-\sigma_-^2 - a_-w_-^3 = S_w^3$$

donde las tres últimas representan los tres primeros momentos.

Las expresiones de las frecuencias relativas  $a_+$  y  $a_-$ , de las velocidades medias para cada tipo de movimiento  $w_+$  y  $w_-$  y de sus varianzas  $\sigma_+$  y  $\sigma_-$  ya se han expuesto anteriormente. A continuación se presenta la correspondiente a la variable  $S_w^3$ , el momento de tercer orden. De la misma

manera que existen diferentes expresiones empíricas para la varianza, también se pueden considerar diversas relaciones para  $S_w^3$ , algunas de las cuales se indican en la tabla 3.2.4.1. Sin embargo, para las simulaciones que presentamos se ha seleccionado la expresión utilizada por Baerentsen y Berkowicz (1984) para la CLC:

$$\frac{S_w^3}{W_*^3} = 0.8 \frac{z}{H} \left( 1 - \frac{z}{H} \right) \left( 1 + 0.667 \frac{z}{H} \right)^{-1} \quad (3.2.1.4)$$

que se ajusta con cierta fiabilidad a los datos obtenidos por Lenschow et al. (1980), y también hemos comprobado funciona mejor en nuestro esquema.

Expresiones	Referencias
$1.4 W_*^3 \left( \frac{z}{H} \right) \exp \left( -2.5 \frac{z}{H} \right)$	de Baas et al. (1986)
$0.8 W_*^3 \left( \frac{\sigma_w^2}{W_*^2} \right)^{3/2}$	Luhar y Britter (1989)
$c \sigma_w^3 \quad c \in ( 0.4, 0.8 )$	Hurley y Physich (1993)

Tabla 3.2.1.4. Expresiones semiempíricas del momento de tercer orden.

El cierre del sistema de ecuaciones (3.2.1.3) se establece considerando que  $\sigma_+ = w_+$  y  $\sigma_- = w_-$ . Según el análisis de Luhar y Britter (1989) este cierre es correcto.

El análisis en este subapartado consistirá inicialmente en ver el comportamiento de este esquema unidimensional, que parte del supuesto de que la componente vertical de la velocidad de cada una de las partículas se debe distribuir según la suma de dos fdp gaussianas de diferentes medias ( $w_+, -w_-$ ) y varianzas ( $\sigma_+^2, \sigma_-^2$ ), con diferentes condiciones iniciales y de contorno, con otra distribución vertical de  $\sigma_w$ , y diversos pasos de tiempo.

En estas simulaciones se consideran las siguientes condiciones iniciales (condiciones iniciales de tipo gaussiano). El tipo de movimiento con el que partirá inicialmente cada partícula "p" estará en función de las frecuencias relativas de la fdp teórica, es decir de  $a_+$  y  $a_-$ , que a su vez dependen de la altura a la que se encuentre la partícula:  $-a_-(z_p) \leq \mu \leq a_+(z_p)$ , siendo  $\mu$  un número aleatorio perteneciente a la distribución uniforme  $(-a_-, a_+)$ . Si  $\mu$  es mayor (menor) que cero la partícula partirá inicialmente

con un movimiento ascendente con velocidad media  $w_+$  (descendente con velocidad media  $-w_-$ ). Si  $\mu$  es igual a cero su velocidad media es nula. Una vez asignado el tipo de movimiento a cada partícula "p", la fluctuación de su velocidad inicial vendrá dada por:

$$w'_p(t=0) = \eta \cdot \sigma [z_p(t=0)]$$

donde  $\eta$  es un valor correspondiente a una gaussiana de media cero y varianza unidad y  $\sigma$  será la desviación estándar  $\sigma_+$ ,  $\sigma_-$  ó  $\sigma_w$ , según el tipo de movimiento que se haya asignado previamente a la partícula "p".

Las condiciones de contorno se considerarán más adelante según la simulación.

Antes de comenzar la simulación, con las condiciones de contorno e iniciales previamente establecidas, se debe cumplir, independientemente de la altura, la relación  $N_+/N_- = a_+/a_-$ , donde  $N_+$  y  $N_-$  representan el número total de partículas de cada tipo de movimiento a la altura deseada. Se ha comprobado esta relación para todos los niveles verticales, obteniéndose un error máximo de  $\pm 0.01$ .

En todas estas simulaciones se ha considerado un paso de tiempo de tres segundos, que como se comprobó en el anterior subapartado resulta satisfactorio.

La elección de la varianza y escala de tiempo lagrangianas, como se reflejará más adelante, es otro factor que debe tenerse en cuenta para este tipo de modelos. Salvo cuando se especifique, las relaciones de estas dos variables son, para el:

$$\text{Movimiento ascendente: } \left\{ \begin{array}{l} \sigma_+^2 = \sigma_w^4 / 4 \sigma_-^2 \\ T_{L+} = \sigma_+^2 / \epsilon_t \end{array} \right.$$

$$\text{Movimiento descendente: } \left\{ \begin{array}{l} \sigma_-^2 = \left[ (S_w^6 + 8 \sigma_w^6)^{1/2} - S_w^3 \right]^2 / 16 \sigma_w^4 \\ T_{L-} = \sigma_-^2 / \epsilon_t \end{array} \right.$$

$$\text{Movimiento con veloc. media nula: } \left\{ \begin{array}{l} \sigma_w^2 = 1.54 w_*^2 \left( \frac{z}{H} \right)^{2/3} \exp \left( - \frac{2z}{H} \right) \\ T_{Lw} = \sigma_w^2 / 2 \epsilon_t \end{array} \right.$$

donde  $\epsilon_t$  representa el ritmo de disipación turbulenta y es igual a  $0.05 \text{ kg.m}^2/\text{s}^3$ .

A continuación se analizarán los resultados obtenidos con estas condiciones iniciales, considerando diferentes condiciones de contorno e incorporando algunas variables, no definidas hasta el momento.

- Caso a): Se considera que tanto el suelo como el tope de la CLC son zonas transparentes para las partículas, lo que viene a resultar una capa convectiva "ilimitada".
- Caso b): Tras de la reflexión en cualquiera de ambos límites sólo cambia la altitud de la partícula, lo que corresponde a condiciones referidas anteriormente como de reflexión "imperfecta".
- Caso c): En los contornos superior e inferior cambia tanto la altitud como el signo de la componente vertical
- Caso d): En ambos contornos cambian la altitud y el tipo de movimiento asignado a cada partícula (nueva condición de contorno).
- Caso e): Como en el caso d), pero incorporando el efecto de variación en altura de la desviación y de la escala de tiempo lagrangiana según señalan Legg y Raupach (1982) (velocidad media de arrastre). En este caso, el esquema completo para cada partícula "p" es:

$$w_p(t) = \langle w \rangle_p + w'_p(t) + \left( T_{Lw} \frac{\partial \sigma_w^2}{\partial z} + \sigma_w^2 \frac{\partial T_{Lw}}{\partial z} \right) \left( 1 - \exp(-\Delta t / T_{Lw}) \right)_p$$

- Caso f): Como el caso e), añadiendo el efecto del gradiente de las velocidades medias  $w_+$  y  $-w_-$  (Baerentsen y Berkowicz, 1984).  
Dicho efecto permite cambiar el movimiento de la partícula en cada paso de tiempo. Para ello se elige un número aleatorio  $\mu$  de una distribución uniforme (0,1), tal que si  $\mu < [(-\partial \langle w \rangle_p / \partial z) \cdot \Delta t]$  la partícula cambia su movimiento y, por tanto, su velocidad media  $\langle w \rangle_p$  ( $w_+$  o  $-w_-$ ).
- Caso g): Como en el caso f), añadiendo un cambio de signo de la fluctuación de la velocidad de la partícula.

En las figuras 3.2.1.11 se presentan las concentraciones instantáneas normalizadas correspondientes a todos estos casos.

Como cabía esperar, en el caso a) se observan dos sumideros de partículas en los extremos de la CLC que van afectando a otros niveles a medida que transcurre el tiempo. Este fenómeno se ha observado con independencia de las condiciones turbulentas que se hayan impuesto por encima o por debajo de la capa considerada ( $z/H \leq 0$  y  $z/H \geq 1$ ). Sin embargo en los casos b) y c), más realistas en los que no es posible traspasar los límites de la CLC, se observa una igualdad de comportamiento con respecto al caso a), salvo en los primeros y últimos 10 metros. En caso d), donde se obliga a las partículas a una reflexión de su altura y cambio de movimiento,

se reduce notablemente la acumulación de partículas en el límite superior de la CLC y en menor medida en su límite inferior. Esto es debido a la relación entre las reflexiones totales en el suelo y en la altura máxima, que en el caso concreto de 147 segundos es de 430 a 604. En los casos b) y c) era prácticamente 1, 6553 en el suelo frente a 6330 en la cima de la CLC. Estas últimas condiciones de contorno muestran, por tanto, una mayor movilidad de partículas en toda la CLC. Respecto al comportamiento de la velocidad se puede considerar que los ajustes son aceptables con un nivel de confianza del 90% si nos alejamos de los contornos de la capa límite (Figuras 3.2.1.12).

En el caso e), comparado con el caso d), se aprecia un descenso de partículas de aproximadamente un 15% a los 150 segundos en los límites de la CLC, que en momentos próximos al instante inicial puede considerarse despreciable. En el caso f), al incorporar el gradiente vertical de la velocidad media de cada partícula, sus efectos son notorios desde los inicios, uniformizando más la concentración en toda la capa, especialmente en el tiempo máximo de 150 segundos que se presenta en las figuras. Como se observa, el resultado del último caso es mucho mejor. Finalmente, en el caso g) se observa que en el tope de la CLC hay menor fluctuación de la concentración instantánea, mejorándose este comportamiento con respecto al caso f), ya que se aprecia un ligero déficit sólo en los últimos 10 metros.

En las figuras 3.2.1.12 se observan las evoluciones temporales de las distribuciones de las velocidades de las partículas a tres alturas en todos los casos. En ellas se aprecia que las distribuciones correspondientes a los casos a) - d) muestran, en general, un buen ajuste (nivel de confianza del 90%) que se mejora, como ya se indicó en el subapartado A, con el transcurso del tiempo. Estos niveles de confianza se consiguen en todos los niveles de la CLC salvo en los treinta metros próximos al suelo en donde se llega a un nivel de significación de 0.15, reflejando la necesidad de mejorar las condiciones de contorno artificiales en los límites de la CLC. En el caso f), con la incorporación del gradiente de velocidad media, se mejora notablemente este comportamiento. Sin embargo, donde se consiguen mejores resultados es en el caso g). En la tabla 3.2.1.5., al final de este apartado, se puede consultar los valores de los cuatro primeros momentos de la distribución de velocidad obtenida y de la fdp teórica a las alturas adimensionales de 0.01 y 0.99 en los casos f) y g).

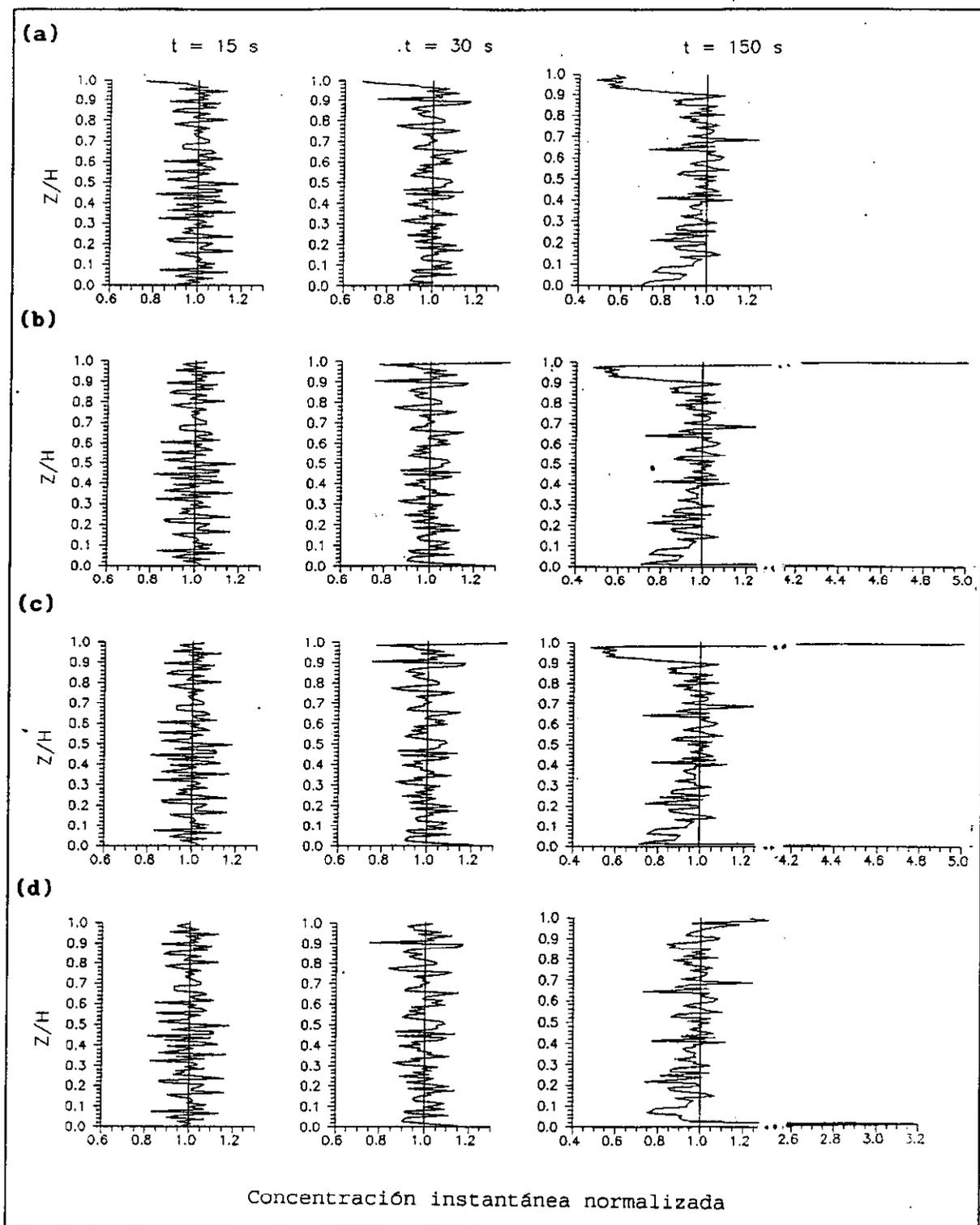


Figura 3.2.1.11. Concentraciones instantáneas normalizadas en función del tiempo  $t$  y la altura adimensional  $z/H$ , donde  $H$  es la altura máxima de la CBL. (a) no existe suelo ni altura máxima de la CBL. Considerando el suelo y altura máxima de CBL, las condiciones de contorno son: (b) reflexión en altura de la partícula, (c) reflexión en altura y signo de la velocidad de la partícula y (d) reflexión en altura y velocidad media de la partícula.

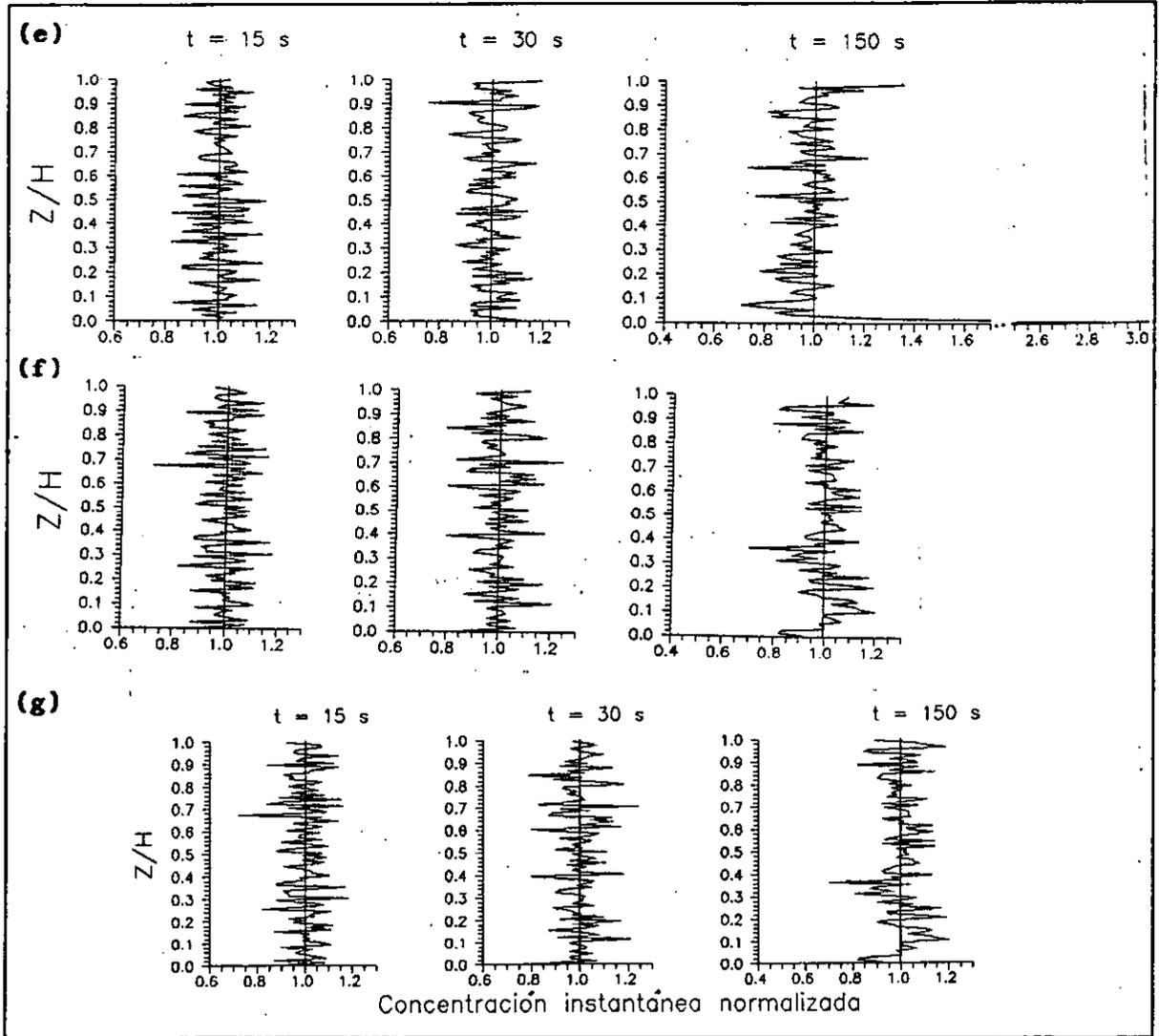


Figura 3.2.1.11 (cont.). Concentraciones instantáneas normalizadas en función del tiempo  $t$  y la altura adimensional  $z/H$ , donde  $H$  es la altura máxima de la CLC. (e) Incorporando gradientes verticales de varianza y escala de tiempo lagrangiana. (f) Incorporando a (e) el gradiente vertical de la velocidad media. (g) Incorporando a (f) cambio de signo de la fluctuación de la velocidad tras la reflexión.

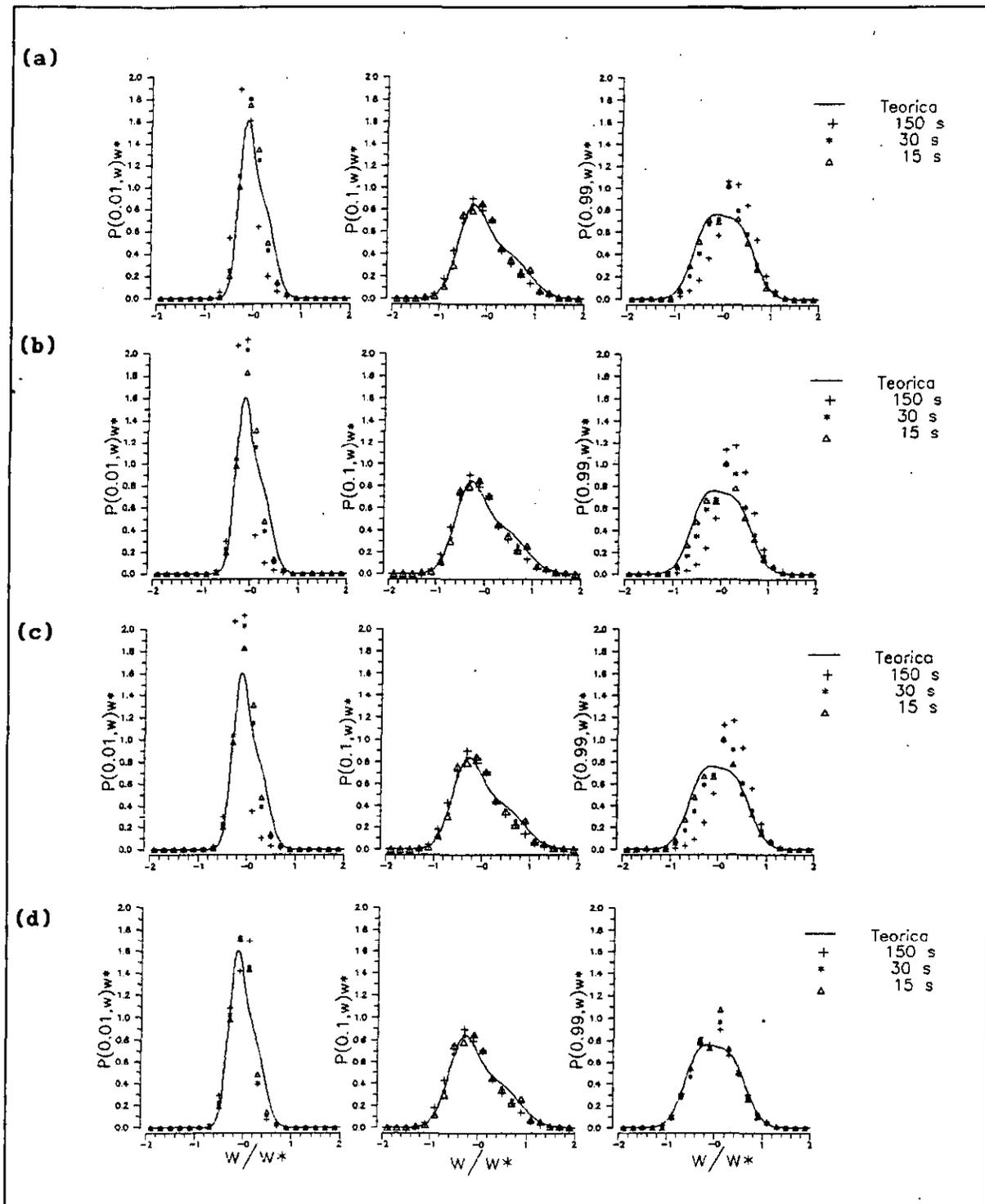


Figura 3.2.1.12. Distribuciones de la velocidad adimensional  $w/w^*$  en función del tiempo  $t$  a las alturas adimensionales de 0.01, 0.1 y 0.99. (a) no existe suelo ni altura máxima de la CLC. Con existencia de suelo y altura máxima de CLC: (b) reflexión en altura, (c) reflexión en altura y signo de la velocidad y (d) reflexión en altura y cambio en la velocidad media.

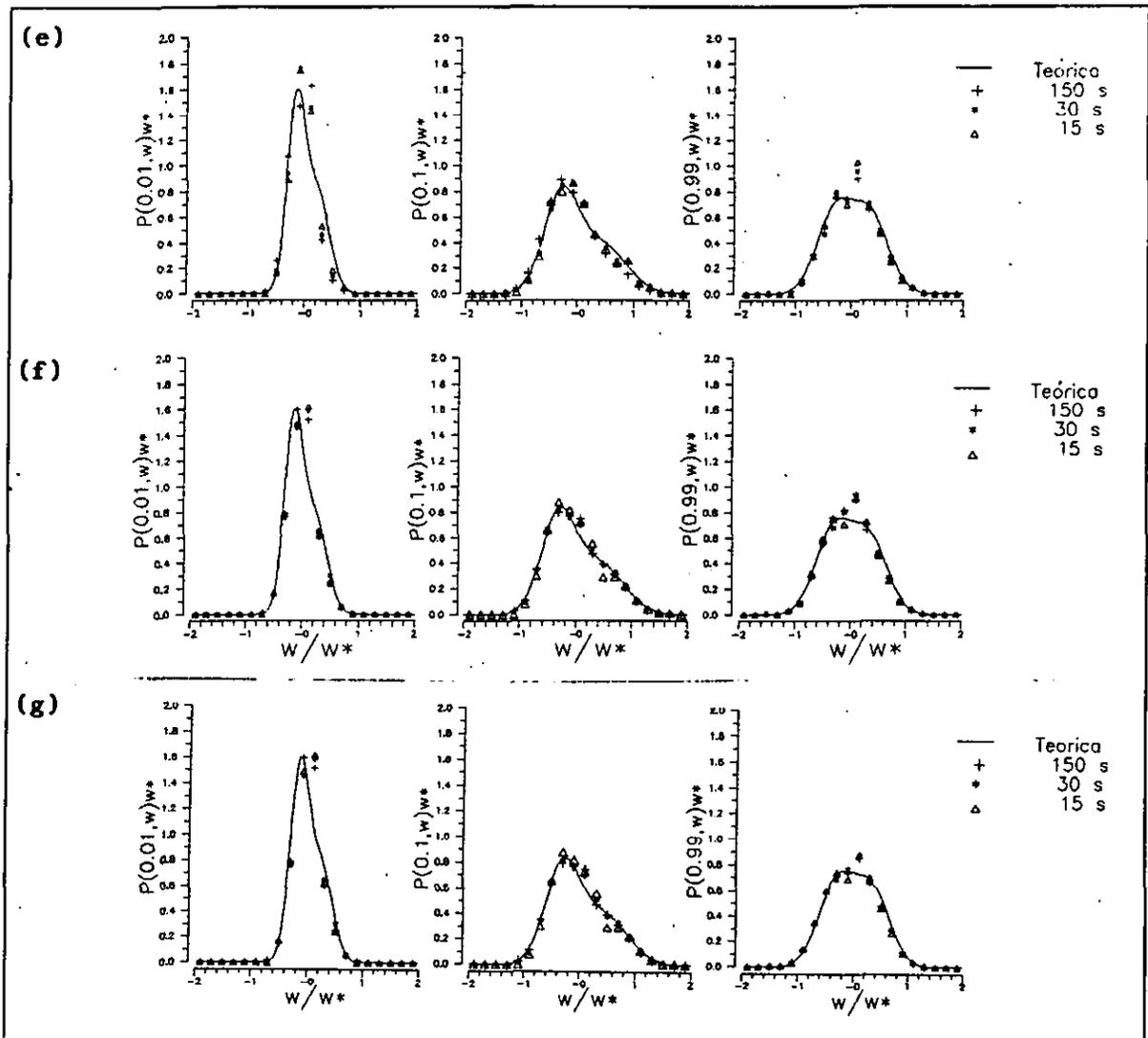


Figura 3.2.1.12 (cont.). Distribuciones de la velocidad adimensional  $w/w^*$  en función del tiempo  $t$  a las alturas adimensionales de 0.01, 0.1 y 0.99. (e) Incorporando gradientes verticales de varianza y escala de tiempo lagrangiana. (f) Incorporando a (e) el gradiente vertical de la velocidad media. (g) Incorporando a (f) cambio de signo de la fluctuación de la velocidad tras la reflexión.

En las figuras 3.2.1.13 se presenta las evoluciones temporales del centro de masa de todos los casos, considerando que la masa de las partículas es la misma. En la distribución inicial el centro de masa se situaba a 500 m. El centro de masa se determina como

$$\langle z \rangle = \frac{\sum_n z_n}{N}$$

siendo  $N$  el número total de partículas (=10000).

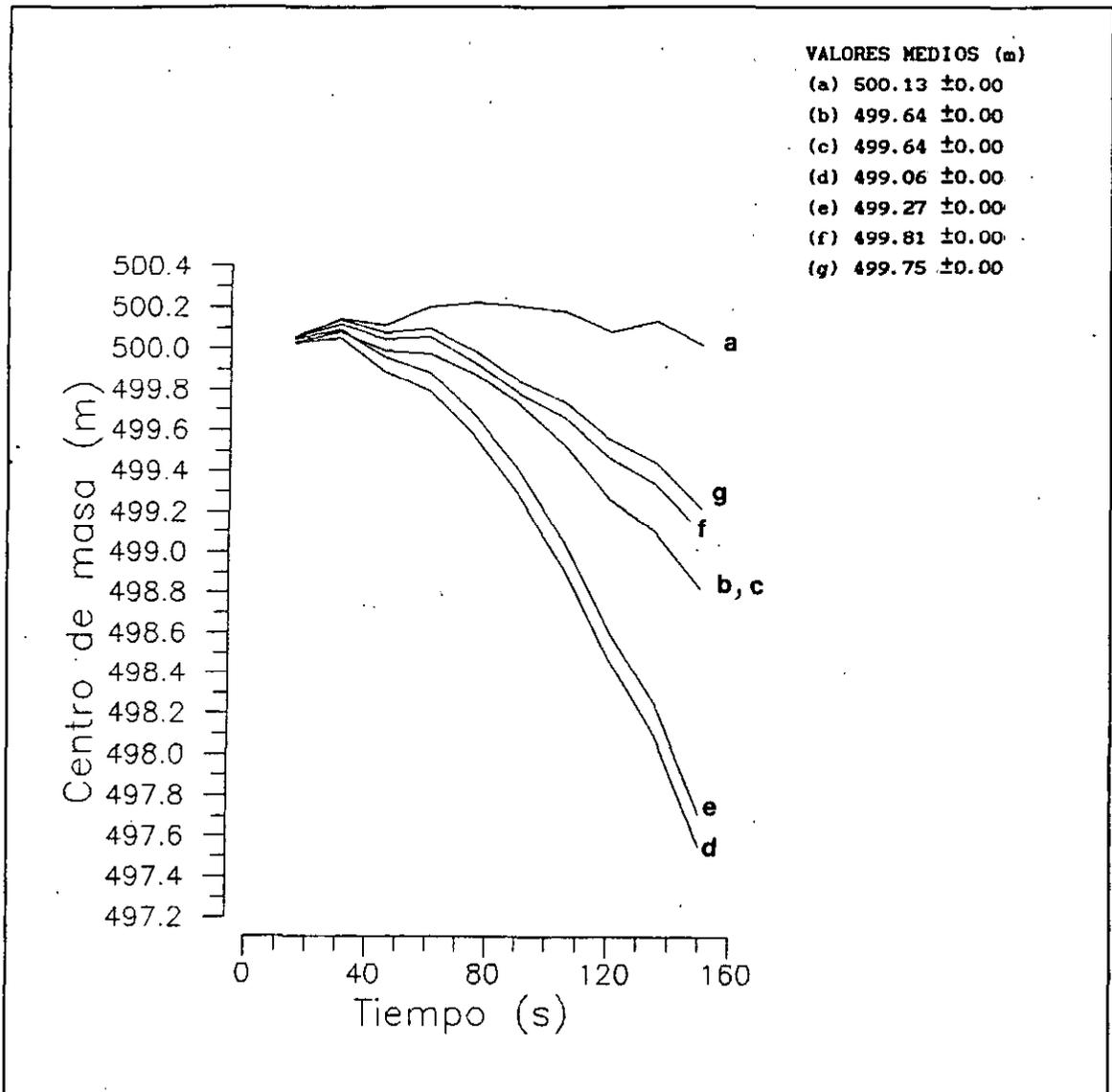


Figura 3.2.1.13. Evolución temporal del centro de masa de las simulaciones indicadas en la Figura 3.2.1.11. Los valores medios de cada simulación se acompañan al margen.

En esta figura se observa, casos b), c) y d), las condiciones de contorno repercuten en el comportamiento del centro de masa, que desciende de forma monótona con el transcurso del tiempo. Sin embargo, en el caso a) el centro de masa (c.d.m.) se mantiene prácticamente en el mismo nivel lo que indica que se escapan el mismo número de partículas por arriba que por abajo. La incorporación de la velocidad media de arrastre, caso e), hace que el centro de masa del sistema de partículas tenga el mismo comportamiento temporal, aunque ligeramente más alto, que cuando no se tiene en cuenta, caso d). Sin embargo, se aprecia con la incorporación del gradiente vertical de la velocidad media que la variación temporal del c.d.m. evoluciona de manera distinta, con una velocidad del descenso bastante menor y más estable. En el caso g) el comportamiento del c.d.m. es similar al caso f).

Por último, en lo referente a los casos estudiados, en la figura 3.2.1.14 se muestra el comportamiento, en altura, de la concentración media entre el instante inicial y el tiempo final de simulación para los casos e)

y f). En estas figuras se observa el mismo comportamiento cerca de los límites de la capa límite que los reflejados por las figuras correspondientes de concentración instantánea en el tiempo final (figura 3.2.1.11), aunque las fluctuaciones verticales de la concentración media sean de menor intensidad.

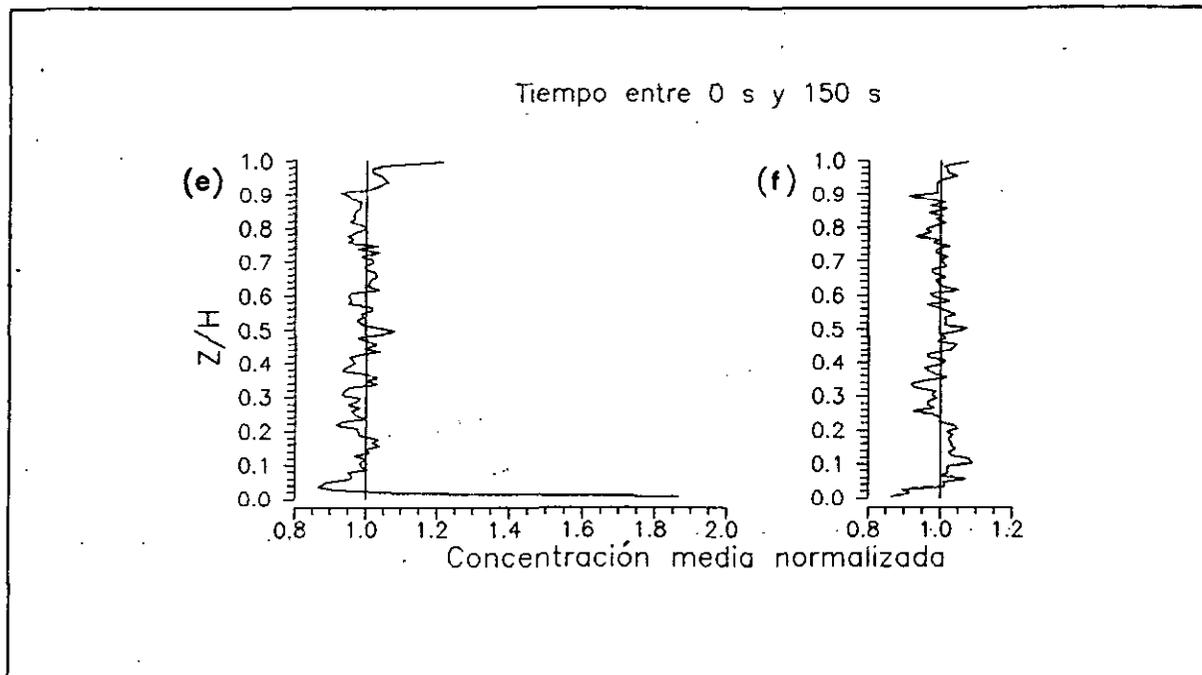


Figura 3.2.1.14. Evolución vertical de las concentraciones medias normalizadas desde 0 a 150 s. (e) Condiciones de contorno de reflexión en altura y cambio de movimiento y velocidad media de arrastre, (f) incorporando a (e) el gradiente de la velocidad media.

Con el penúltimo esquema, caso f), se repitió la simulación con fluctuaciones de velocidad inicial nulas. La figura 3.2.1.15 contiene la variación vertical de la concentración y la figura 3.2.1.16 las distribuciones de la velocidad obtenidas con el esquema. En la Tabla 3.2.1.6 se especifican los cuatro primeros momentos de las distribuciones a la altura de 100 m junto con las obtenidas en el caso f). Comparando estas figuras con las figuras 3.2.1.11f y 3.2.1.12f se constata nuevamente la fuerte dependencia del esquema lagrangiano a las condiciones iniciales. Si las fluctuaciones iniciales son nulas el esquema produce mayor estabilidad en la distribución vertical de concentración hasta que ha transcurrido un determinado número de pasos de tiempo ( $\approx 80$ ); posteriormente el esquema es prácticamente independiente de las condiciones iniciales. Por otra parte, coincidiendo con lo indicado en el subapartado A, se aprecia un empeoramiento en el ajuste de la distribución de velocidad a la fdp teórica. Por consiguiente, se ha decidido que es mejor mantener la opción de condiciones iniciales de origen gaussiano.

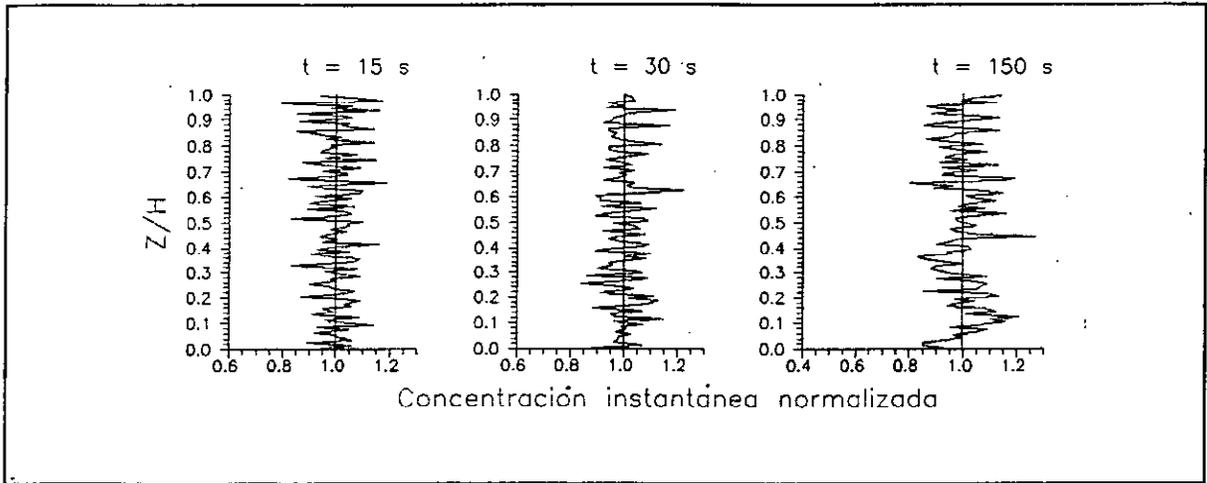


Figura 3.2.1.15. Concentraciones instantáneas normalizadas en el tiempo  $t$ . Fluctuaciones de velocidad iniciales nulas respecto al caso f).

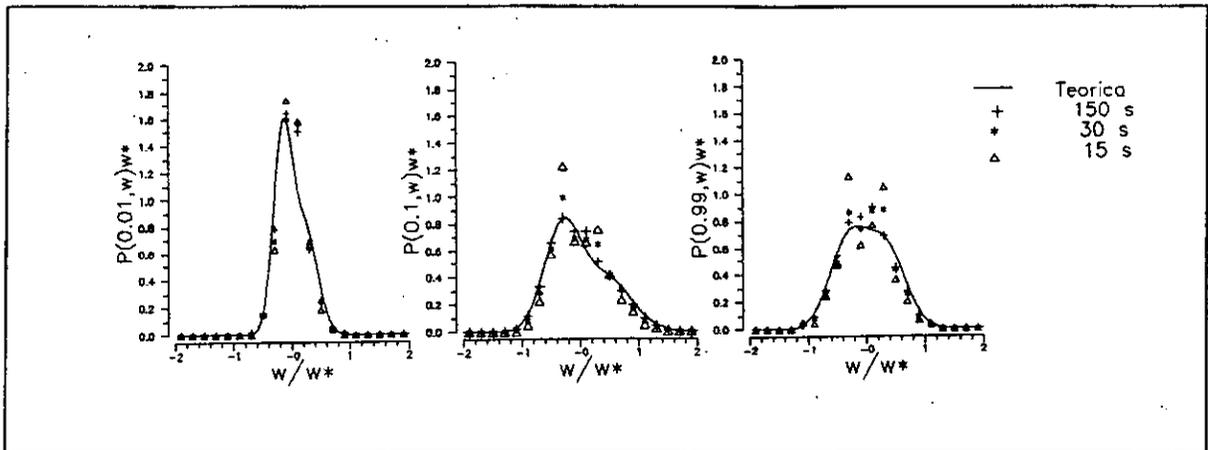


Figura 3.2.1.16. Distribuciones de velocidad adimensional en función del tiempo para las alturas adimensionales de 0.01, 0.1 y 0.99. Fluctuaciones iniciales de velocidad nulas respecto al caso f).

Finalmente, respecto a las condiciones de contorno, Hurley y Physick (1993) establecieron unas nuevas formulaciones que incorporan, como una aproximación, el efecto del sesgo en las reflexiones en los límites de la CLC. Estas nuevas condiciones hacen que la fluctuación de la velocidad reflejada sea igual al producto de la fluctuación de la velocidad incidente por el cociente  $a_+/a_-$ , para la altura máxima de la CLC, o por el cociente  $a_-/a_+$  para la reflexión en el suelo. Sin embargo, al considerar estas nuevas condiciones de contorno se observó que no condicionaban, en absoluto, los resultados obtenidos en la simulación anterior y en la indicada como caso g), discrepando de las mejoras que sugieren los autores.

Otra de las modificaciones que se realizaron en todos los casos, fué considerar la velocidad media ascendente y descendente constantes e iguales a  $0.6w_*$  y  $-0.4w_*$ , aplicadas por Anfossi et al. (1988) que se basaron en las observaciones de Yamamoto et al. (1982). Estos autores demostraron que la velocidad media ascendente de un penacho convectivo es constante en toda la

CLC y varía entre 0.5 y 0.6 m/s. En la figura 3.2.1.17 se presentan las evoluciones temporales y verticales de la concentración del caso g) con estas nuevas velocidades medias. Esta figura confirma la validez de esta hipótesis, aunque existe una cierta acumulación de partículas cerca de los límites de la CLC. Los ajustes de las distribuciones de velocidad obtenidas a la fdp teórica muestran un nivel de confianza superior al 90% en todas las alturas, aunque en las proximidades a los extremos de la CLC este nivel de confianza es menor.

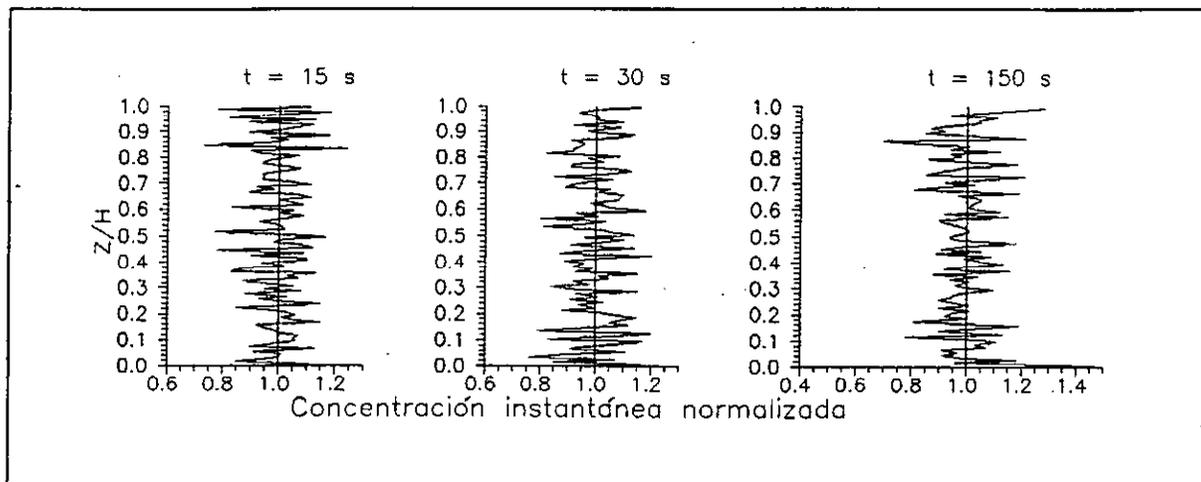


Figura 3.2.1.17. Evolución vertical y temporal de la concentración suponiendo que la velocidad media ascendente es  $0.6 w_c$  y la descendente es de  $-0.4 w_c$  para el caso g).

Respecto a la velocidad media de arrastre, Baerentsen y Berkowicz (1984) propusieron una velocidad media diferente a la propuesta por Legg y Raupach (1982) y que se basa en el desarrollo de Taylor de la fluctuación media de velocidad

$$\langle w \rangle_{\text{drift}} = (\partial \sigma^2 / \partial z) \cdot \Delta t / 2$$

tomando como  $\sigma^2$  las varianzas correspondientes al movimiento ascendente y descendente. La figura 3.2.1.18 indica que se alcanza únicamente mayor uniformidad en aproximadamente los cuarenta primeros metros respecto al caso g), sin existir otro cambio sustancial.

Finalmente a la velocidad media de arrastre propuesta por Legg y Raupach (1982) se incorporó la diferencia del tipo de movimiento a la varianza y escala de tiempo. En la figura 3.2.1.19 se muestran los resultados de este nuevo esquema. Confrontando esta figura con las figuras 3.2.1.12g y 3.2.1.18 se aprecian diferencias únicamente en las cercanías del suelo. Las distribuciones de la velocidad, en esta simulación, se ajustan a la fdp teórica con nivel de confianza superior al 90% a cualquier altura. En la tabla 3.2.1.7, al final del apartado, se indican los cuatro primeros momentos de las distribuciones de la figura 3.2.1.20. Los efectos en el centro de masa no son importantes, como se refleja en la figura 3.2.1.21.

En resumen, la incorporación al esquema de cualquiera de las tres velocidades medias de arrastre puede considerarse igual de aceptable. Las

condiciones de esta última simulación son las elegidas para condiciones convectivas.

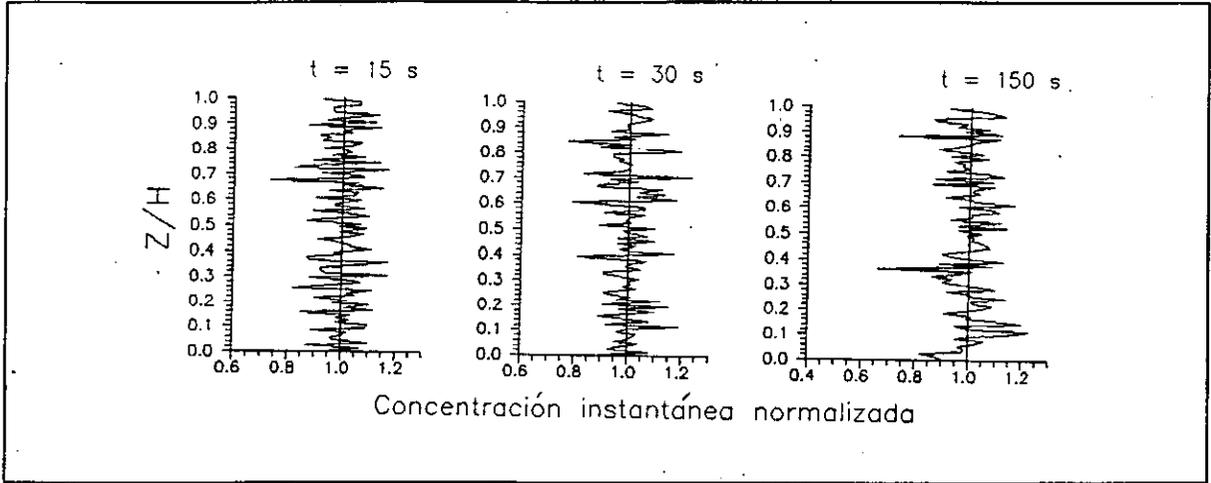


Figura 3.2.1.18. Distribución vertical de la concentración considerando la velocidad de arrastre propuesta por Baerentsen y Berkowicz (1984).

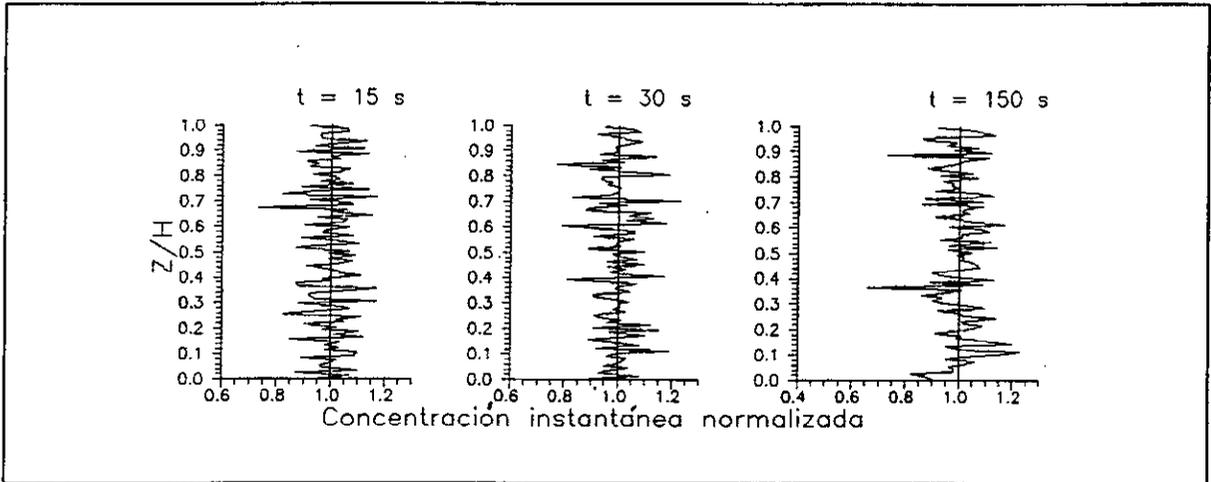


Figura 3.2.1.19. Distribución vertical de la concentración, considerando la velocidad de arrastre propuesta por Ley y Raupach (1982) y siguiendo el criterio de Baerentsen y Berkowicz (1984).

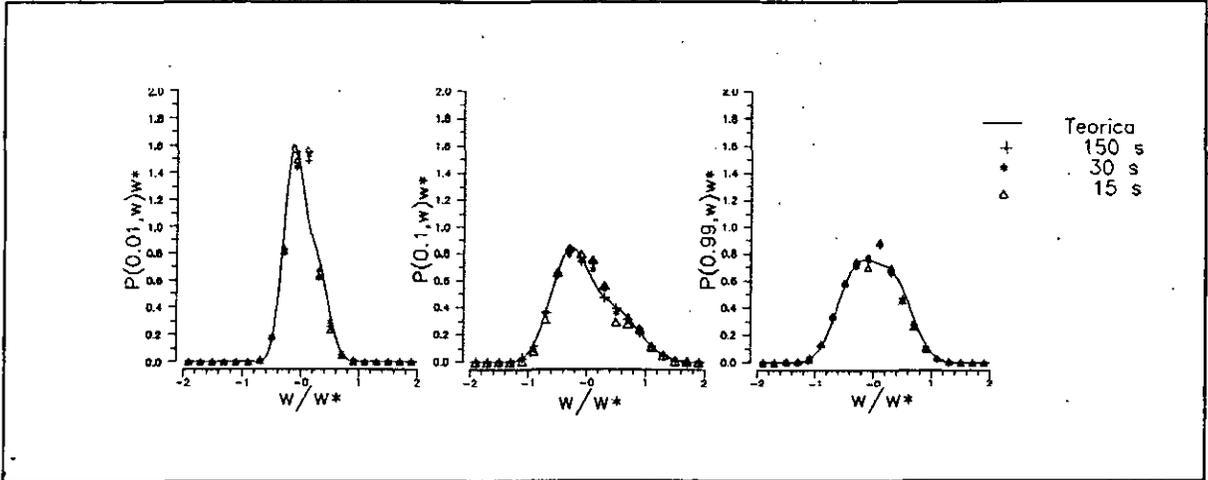


Figura 3.2.1.20. Distribuciones de velocidad en función del tiempo para las alturas adimensionales 0.01, 0.1 y 0.99. Los criterios se indican en la figura 3.2.1.19.

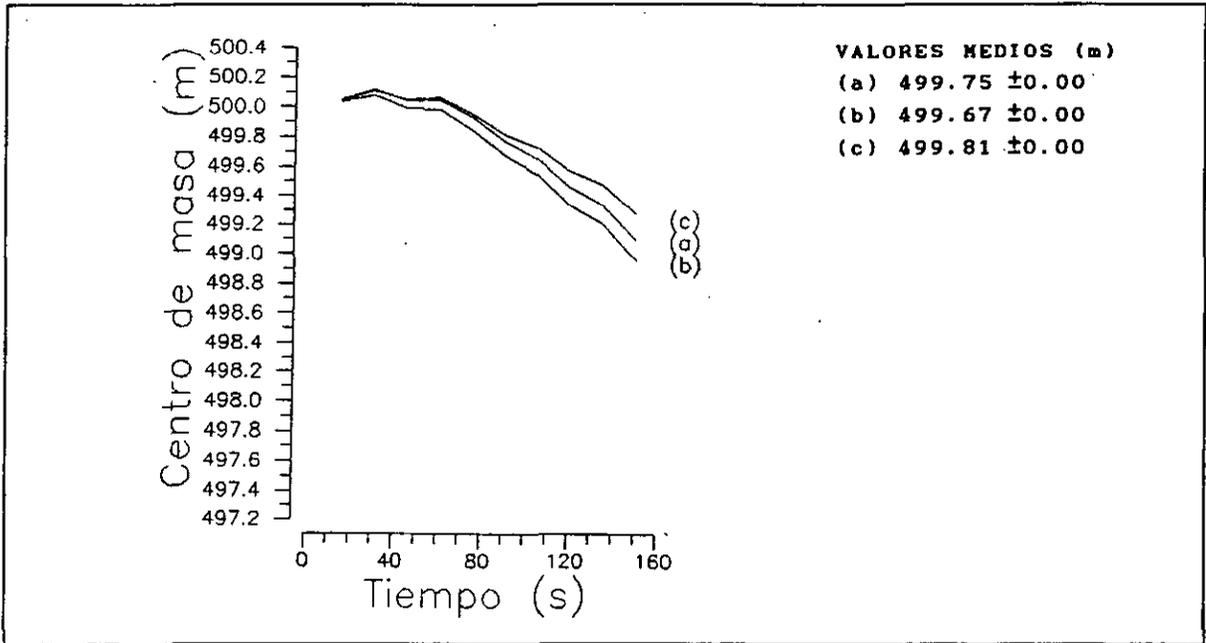


Figura 3.2.1.21 Evolución temporal del centro de masa de las simulaciones (a) caso g), (b) indicada en por la figura 3.2.1.18 y (c) por la figura 3.2.1.19. Los valores medios de cada simulación se acompañan al margen.

La elección del paso de tiempo, aunque no se reflejará en este apartado, es un factor a tener en cuenta principalmente porque se mejoran notablemente los ajustes de las distribuciones, debido a que se consigue ampliar la serie (número de casos) en un instante determinado. Este estudio reflejó los mismos resultados que el indicado en el subapartado A.

La relación semiempírica de la varianza de la velocidad y de la escala de tiempo lagrangianas condicionan el comportamiento del esquema, al igual

que la relación del momento de tercer orden ( $S_w^3$ ) o sesgo ( $S_w^3/\sigma_w^3$ ), sobre todo cuando la relación semiempírica de la varianza o de la escala de tiempo lagrangianas es diferente según la altura. El esquema presenta deficiencias importantes con las relaciones propuestas por Hanna (1982) para situaciones inestables y aplicadas por Zannetti (1991) y Anfossi et al (1988) en sus modelos. Estas anomalías que afectan al comportamiento de las partículas están directamente relacionadas con la continuidad de sus funciones, principalmente las relativas a la varianza, no recomendando aquellas relaciones semiempíricas que presenten discontinuidad en las mismas. Cuando se eligen las varianzas propuestas por Hanna (1982) el comportamiento de las partículas es bastante anómalo en las alturas adimensionales de 0.4 y 0.96 (puntos de discontinuidad), tal y como indica la figura 3.2.1.22. En la tabla 3.2.1.5 se muestran las diferencias entre esta simulación y la correspondiente al caso g).

Si las expresiones para cualquiera de estas variables no presentan discontinuidades, sobretodo la de la varianza, el comportamiento de las partículas no es anómalo; aunque se ve condicionado por la expresión empírica elegidas, así como por los valores de las variables de las que depende (p.e. escala de velocidad convectiva). Un ejemplo se muestra en la figura 3.2.1.23, en donde se reflejan los resultados de la concentración en altura con el momento de tercer orden referenciado por Luhar y Britter (1989).

De este estudio se puede concluir que la elección de las expresiones de estas tres variables puede ser determinante en el comportamiento de las partículas, recomendado su elección con base en un esquema unidimensional. Las expresiones finalmente seleccionadas para estas tres variables corresponden a las ecuaciones (3.2.1.1), (3.2.1.2) y (3.2.1.4).

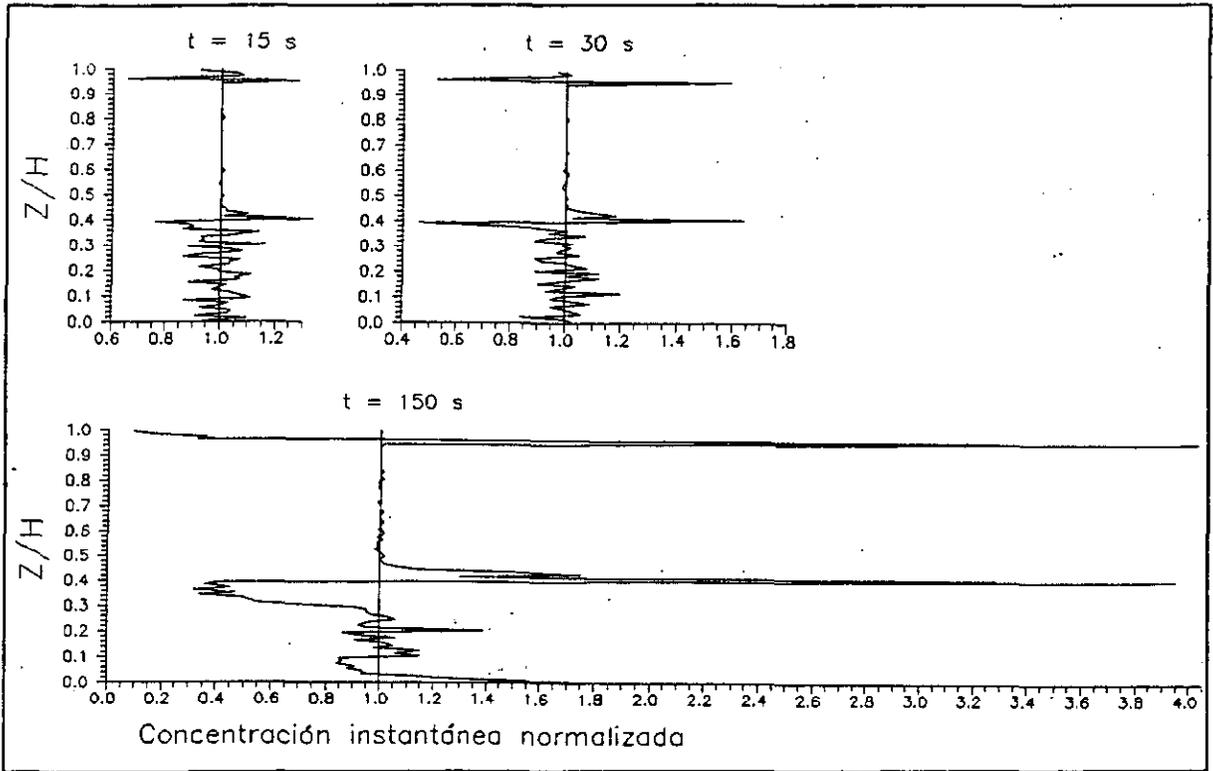


Figura 3.2.1.22. Distribución vertical de la concentración normalizada en los tiempos  $t$  indicados. Se considera la desviación de velocidad propuesta por Hanna (1982).

	Cuantificación del total de partículas un paso de tiempo antes de los					
	(a)			(b)		
	15 s	30 s	150 s	15 s	30 s	150 s
Cambio movimiento de + a - / - a +	14/40	40/81	219/447	39/3	106/11	537/49
Reflexiones suelo/H <sub>CLC</sub>	8/33	11/68	49/365	14/28	21/58	260/187
Ascend/Descend	4035/5965	4017/5983	3935/6065	1811/8189	1728/8272	1408/8592

Tabla 3.2.1.5. Relaciones entre el número de partículas indicadas al margen izquierdo de la tabla para las simulaciones con varianza (a) ec. 3.2.1.1 y (b) propuesta por Hanna (1982). En ambas la escala de tiempo lagrangiana y el momento de tercer orden corresponde a las ecuaciones 3.2.1.2 y 3.2.1.4.

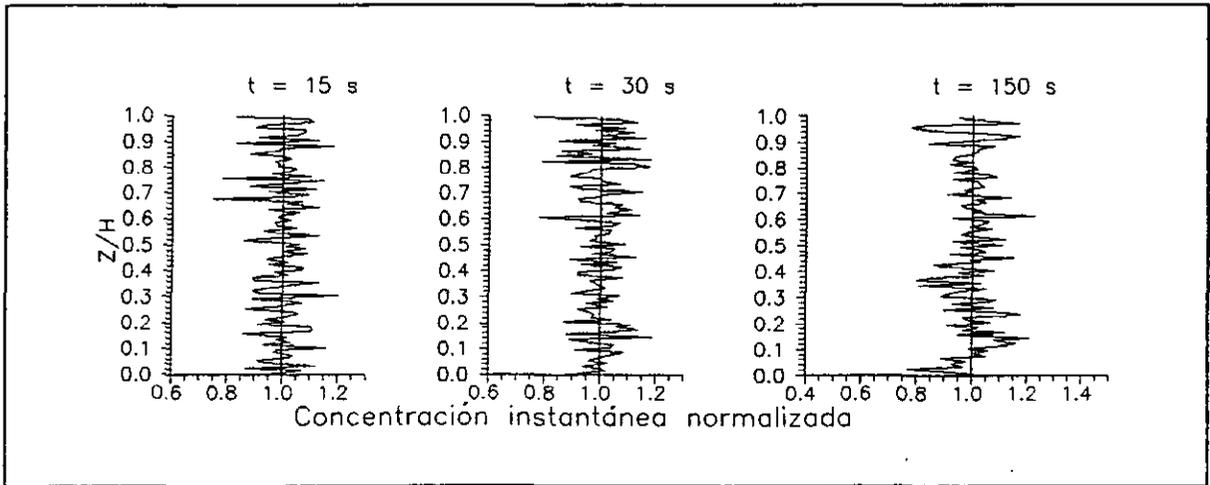


Figura 3.2.1.23. Evolución temporal y vertical de la concentración. Las condiciones son iguales a las de la simulación correspondiente a la figura 3.2.1.19 con la expresión del momento de tercer orden de Luhar y Britter (1989).

Aunque se han presentado los efectos de algunas simulaciones en la evolución del centro de masa, también se ha estudiado en la relación de la componente del esquema que describe la influencia del estado turbulento

anterior ( $\overline{f \cdot w''(t-\Delta t)}$ ) frente al término aleatorio o gaussiano ( $\overline{w''(t)}$ ). La línea representa el valor medio para el conjunto de todas las partículas. Los efectos son iguales a los de otras capas límites o situaciones atmosféricas. En esta relación la variable que más determina la proporcionalidad entre ambas es la varianza (expresión semiempírica o condiciones atmosféricas). El paso de tiempo no infuye en el valor medio de esta relación y el resto de las condiciones tampoco.

Para concluir estos análisis, se confrontará el esquema propuesto con el esquema propuesto (simulación de la figura 3.2.1.19) por Baerentsen y Berkowicz (1984) bajo las mismas condiciones. En la Figura 3.2.1.24 se aprecia que el esquema que se propone en este trabajo es más estable que el de los otros autores, ya que existe mucha menor variabilidad vertical de la concentración. Ambos esquemas se ajustan correctamente a la fdp teórica.

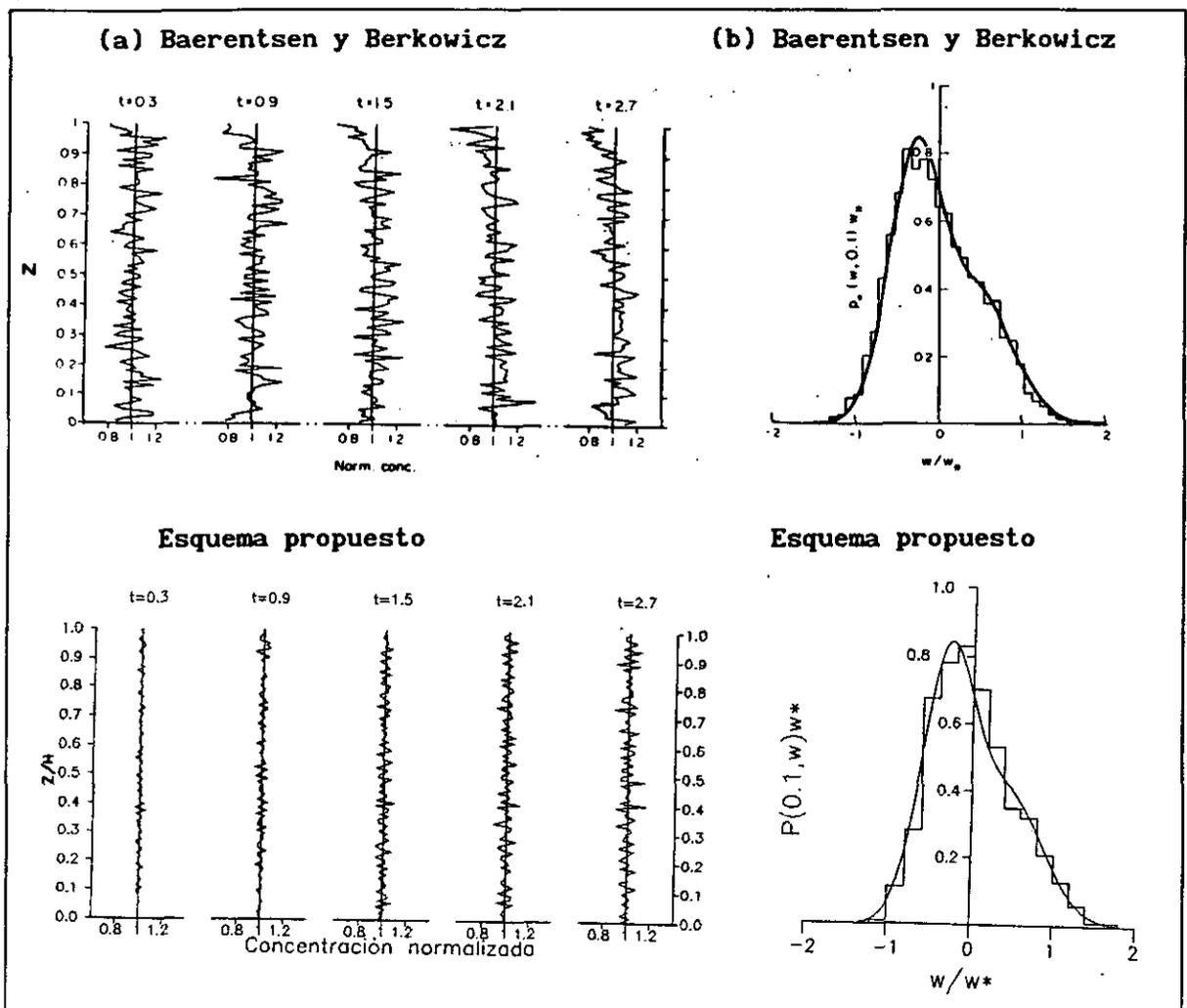


Figura 3.2.1.24. (a) Distribución vertical de la concentración instantánea en función del tiempo. (b) Distribución de velocidad.

La comparación entre los resultados aportados por el esquema finalmente propuesto, simulación correspondiente a la figura 3.2.1.19, con los resultados suponiendo un comportamiento único y gaussiano, figura 3.2.1.6b del subapartado A, refleja una mejora considerable cuando se considera un comportamiento no gaussiano para las velocidades verticales en

estratificaciones inestables o convectivas (realista). Esta mejora se muestra en la concentración de partículas próxima a los extremos de la CLC; además de representar adecuadamente el comportamiento de los movimientos verticales en esta capa atmosférica.

(Caso g)		Teórica (—)	15.0 seg ( Δ )	30.0 seg ( * )	150.0 seg ( + )
Media		0.0000	0.0078	0.0174	0.0035
Desv. Stand.		0.2705	0.2437	0.2496	0.2451
Sesgo		0.3972	0.2705	0.2503	0.3451
Curtosis		-0.2556	0.1582	0.0935	0.5248
N. de casos z ∈ (0,20) m			1011	2002	8916
		Teórica (—)	15.0 seg ( Δ )	30.0 seg ( * )	150.0 seg ( + )
Media		0.0000	-0.0337	-0.0259	-0.0254
Desv. Stand.		0.4629	0.4492	0.4502	0.4512
Sesgo		0.0480	0.0162	-0.0111	0.0361
Curtosis		-0.4842	-0.3782	-0.4007	-0.4387
N. de casos z ∈ (980,1000)m			995	1991	9866

(Caso f)		Teórica (—)	15.0 seg ( Δ )	30.0 seg ( * )	150.0 seg ( + )
Media		0.0000	0.0078	0.0174	0.0035
Desv. Stand.		0.2705	0.2437	0.2496	0.2451
Sesgo		0.3972	0.2705	0.2503	0.3451
Curtosis		-0.2556	0.1582	0.0935	0.5248
N. de casos z ∈ (0,20) m			1011	2002	8916
		Teórica (—)	15.0 seg ( Δ )	30.0 seg ( * )	150.0 seg ( + )
Media		0.0000	-0.0160	-0.0017	-0.0157
Desv. Stand.		0.4029	0.4346	0.4331	0.4305
Sesgo		0.0480	0.0496	-0.0066	0.0878
Curtosis		-0.4842	-0.3613	-0.3632	-0.3453
N. de casos z ∈ (980,1000)m			995	1998	10455

Tabla 3.2.1.6. Cuatro primeros momentos de las distribuciones reflejadas en las figuras 3.2.1.11g y 3.2.1.11f para las alturas adimensionales de  $z/H=0.01$  y  $0.99$ .

(Caso f) con  
cond. inic. nulas

	Teórica (—)	15.0 seg ( Δ )	30.0 seg ( * )	150.0 seg ( + )
Media	0.0000	-0.0097	0.0029	-0.0031
Desv. Stand.	0.5213	0.4323	0.4742	0.4943
Sesgo	0.4773	0.4910	0.4185	0.4408
Curtosis	-0.2145	-0.0721	-0.1769	-0.1851
N. de casos z ∈ (90,110) m		1036	2073	10607

(Caso f)

	Teórica (—)	15.0 seg ( Δ )	30.0 seg ( * )	150.0 seg ( + )
Media	0.0000	0.0068	0.0068	-0.0035
Desv. Stand.	0.5213	0.4847	0.4999	0.4974
Sesgo	0.4773	0.5855	0.4466	0.4735
Curtosis	-0.2145	-0.0406	-0.2547	-0.2352
N. de casos z ∈ (90,110) m		1048	2078	10563

Tabla 3.2.1.7. Cuatro primeros momentos de las distribuciones reflejadas en la figura 3.2.1.16 y figura 3.2.1.12f, respectivamente. Altura adimensional igual a 0.1.

	Teórica (—)	15.0 seg ( Δ )	30.0 seg ( * )	150.0 seg ( + )
<b>Media</b>	0.0000	0.0009	0.0116	0.0021
<b>Desv. Stand.</b>	0.2705	0.2476	0.2549	0.2506
<b>Sesgo</b>	0.3972	0.1833	0.2137	0.3095
<b>Curtosis</b>	-0.2556	0.2439	0.0905	0.3962
<b>N. de casos z ∈ (0,20) m</b>		1015	2017	9052

	Teórica (—)	15.0 seg ( Δ )	30.0 seg ( * )	150.0 seg ( + )
<b>Media</b>	0.0000	0.0112	0.0129	-0.0002
<b>Desv. Stand.</b>	0.5213	0.4901	0.5088	0.5048
<b>Sesgo</b>	0.4773	0.5643	0.4369	0.4447
<b>Curtosis</b>	-0.2145	-0.0716	-0.2839	-0.2485
<b>N. de casos z ∈ (90,110) m</b>		1047	2070	10444

	Teórica (—)	15.0 seg ( Δ )	30.0 seg ( * )	150.0 seg ( + )
<b>Media</b>	0.0000	-0.0339	-0.0271	-0.0255
<b>Desv. Stand.</b>	0.4629	0.4458	0.4462	0.4453
<b>Sesgo</b>	0.0480	0.0231	0.0031	0.0324
<b>Curtosis</b>	-0.4842	-0.3589	-0.3818	-0.3938
<b>N. de casos z ∈ (980,1000)m</b>		995	1990	9838

Tabla 3.2.1.8. Cuatro primeros momentos de las distribuciones indicadas en la Figura 3.2.1.20.

### 3.2.2. Situaciones neutras.

En la capa límite atmosférica con estratificación neutra (en adelante referida como CLN) los movimientos turbulentos presentan mayor homogeneidad: Las tensiones turbulentas son prácticamente constantes con la altura, mientras que las escalas de longitud y de tiempo aumentan linealmente. No obstante, posiblemente a causa de la poca frecuencia con que se observa este tipo de estratificación en la baja atmósfera, existen pocos estudios experimentales de campo sobre las características turbulentas de la CLN. En algunas modelizaciones lagrangianas que simulan bajo condiciones neutras la dispersión de contaminantes se considera que la desviación estándar  $\sigma_w$  es constante con la altura y proporcional a la velocidad de fricción  $u_*$ , mientras que la escala de tiempo lagrangiana es una función lineal de la coordenada vertical. Sin embargo, en el presente estudio hemos analizado otras expresiones, que como se verá ofrecen mejores resultados. Para la desviación estándar de la componente vertical del viento se ha probado también la expresión deducida por Wyngaard et al. (1974) aplicando un modelo de cierre de segundo orden,

$$\sigma_w = 1.3u_* \exp(-2fz/u_*)$$

donde  $f$  es el parámetro de Coriolis que, en nuestra latitud tiene un valor aproximado a  $9.5 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ . Mientras que en el caso de la escala de tiempo lagrangiana se ha probado también la expresión deducida por Hanna (1968). Este autor, a partir de medidas con torres meteorológicas, observó que el máximo de la longitud de onda en el espectro de energía de la componente vertical en una capa neutra es proporcional a la altura cerca del suelo, aproximándose asintóticamente a un valor proporcional a  $G/f$  en alturas superiores, donde  $G$  es el viento geostrofico. Tras sucesivas aproximaciones estableció que la escala de tiempo lagrangiana para la CLN es

$$T_{Lw} = \frac{0.5z/\sigma_w}{1+15 fz/u_*}$$

De forma similar a como se procedió en el apartado anterior dedicado a condiciones convectivas, en el caso de situaciones neutras se va a examinar la sensibilidad del modelo a diversas características. En los resultados obtenidos con diferentes condiciones iniciales se ha observado el mismo comportamiento que el indicado en situaciones convectivas; es decir, las condiciones iniciales sensibilizan el esquema fundamentalmente en los primeros instantes, no influyendo posteriormente. Respecto a las condiciones de contorno se ha confirmado la ventaja de considerar reflexión perfecta, ya que favorece la uniformidad de la concentración en la parte superior de la CLP Neutra. Como estas conclusiones coinciden con las obtenidas con una CLC, en este apartado referido a una CLN sólo se comparará el comportamiento del modelo con diferentes pasos temporales, y otras expresiones para  $\sigma_w$  y  $T_{Lw}$ .

En consecuencia, en todas estas simulaciones se mantiene la distribución vertical de 10 partículas/m, fluctuaciones iniciales de la velocidad gaussianas y condiciones de contorno de reflexión perfecta, es decir reflexión en la altura de la partículas y cambio de signo en su fluctuación de velocidad. La velocidad de fricción se supone igual a 0.2 m/s y 1000 m la altura del tope de la CLN.

## EFECTO DEL PASO DE TIEMPO

Aunque este tipo de análisis comparativo ya se ha efectuado en el caso de condiciones convectivas (apartado 3.2.1A), hemos considerado conveniente incluirlo también aquí puesto que algunas de las conclusiones obtenidas difieren de aquellas.

En todas estas simulaciones se han utilizado las expresiones de Wyngaard et al. para la desviación estándar vertical y de Hanna para la escala de tiempo lagrangiana, que se han mencionado más arriba. En las figuras 3.2.2.1 se observan las distribuciones verticales de la concentración instantánea con la concentración inicial, en función del periodo de simulación, para los pasos de tiempo de 3 s, 0.3 s y 0.03 s. En esta figura se confirma nuevamente un comportamiento instantáneo diferente, que no se manifiesta cuando se consideran concentraciones medias (figura 3.2.2.2). Respecto a las distribuciones de la velocidad adimensional  $w/1.6$  (normalización igual a la de las situaciones convectivas) no se aprecian las diferencias encontradas en las situaciones convectivas simuladas con una **fdp** gaussiana. Se observa que esa diferencia está directamente relacionada con la desviación estándar, tal que cuanto menor sea ésta mejor es el ajuste entre la distribución de velocidad y la **fdp** teórica sin que se haya podido justificar desde otro punto de vista. El paso de tiempo en estos casos no llega a tener influencia (figura 3.2.2.3).

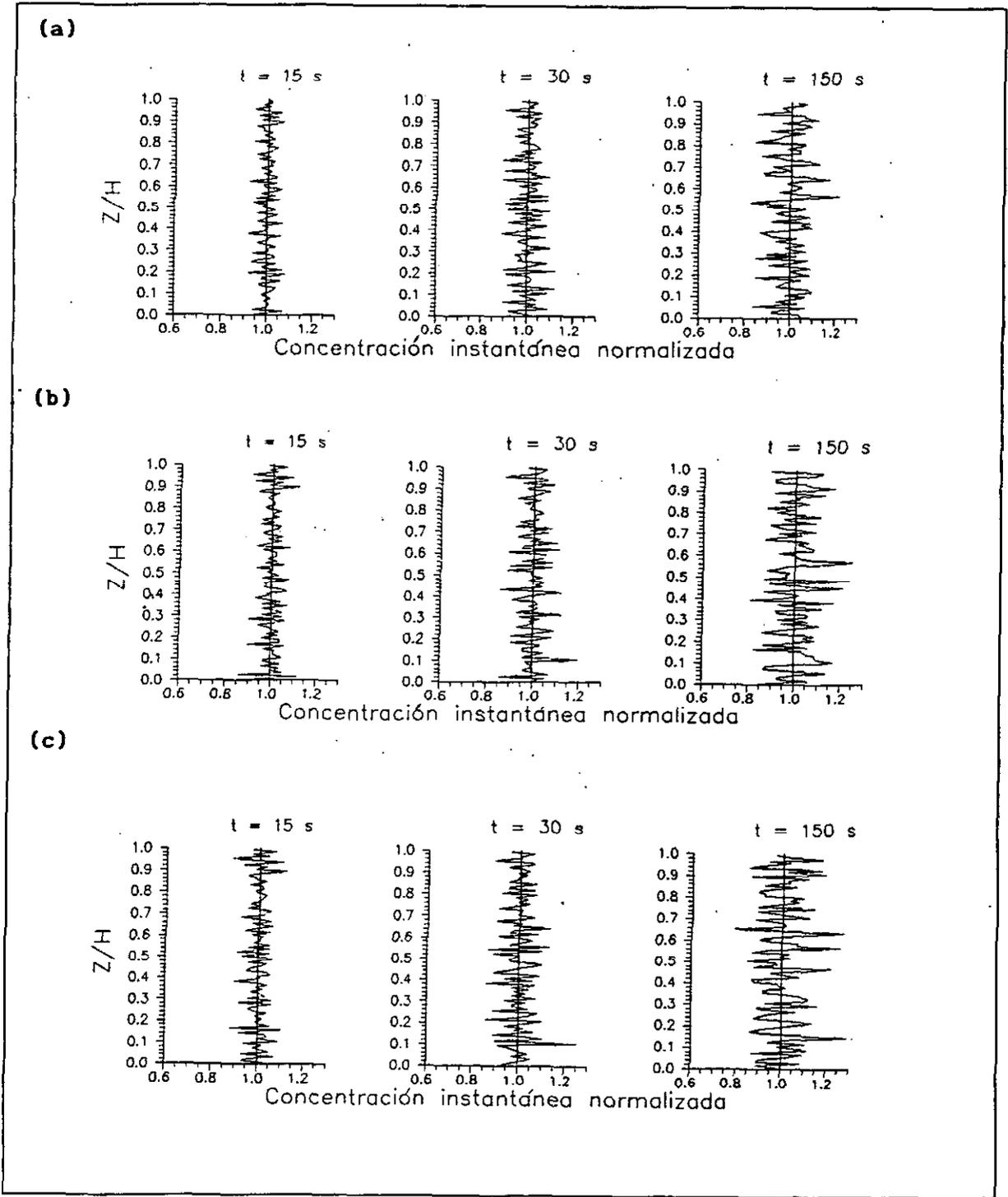


Figura 3.2.2.1. Distribución vertical de la concentración instantánea normalizada en función del tiempo  $t$ . Los pasos de tiempo son: (a) 3 s, (b) 0.3 s y (c) 0.03 s.

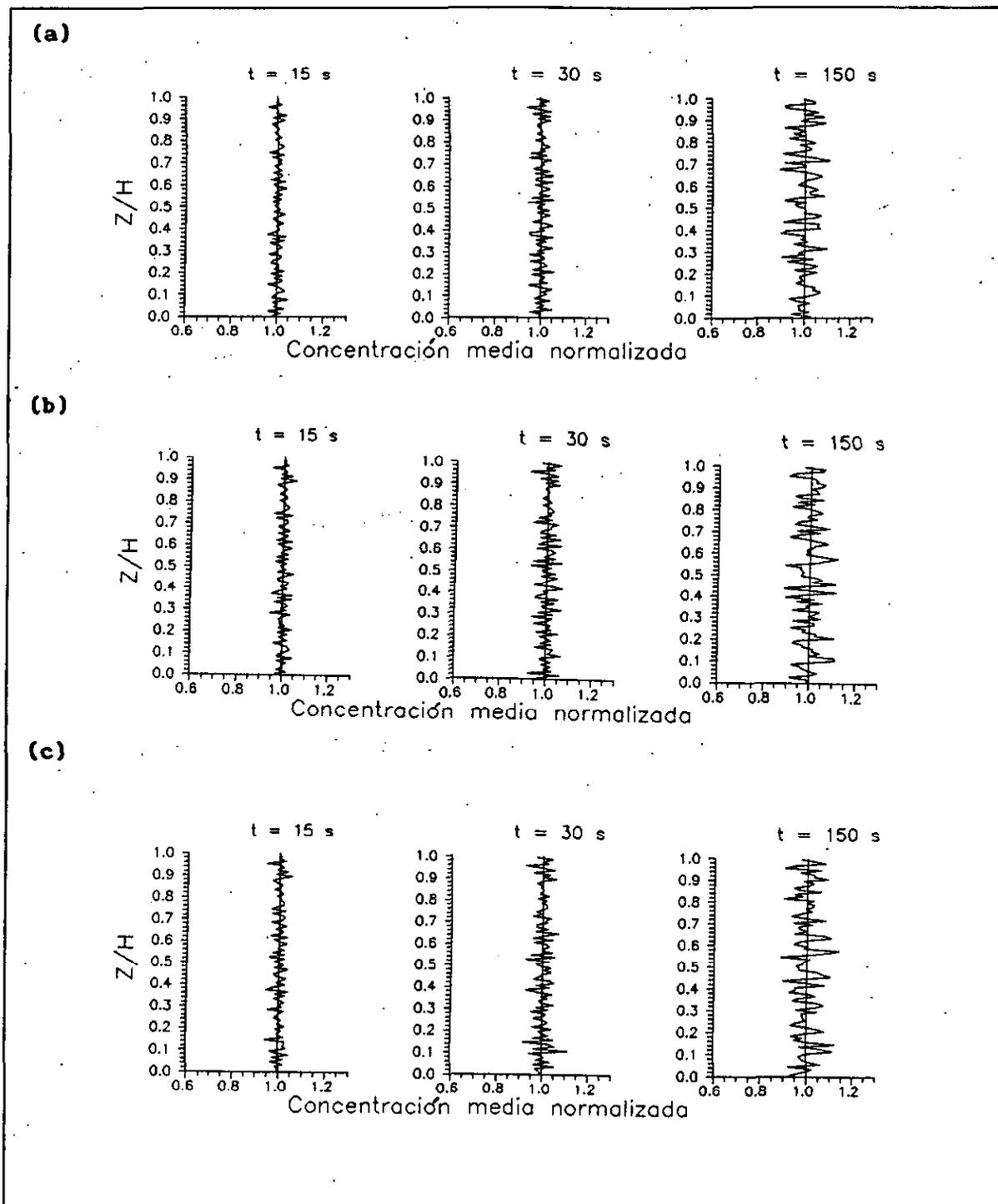


Figura 3.2.2.2. Distribución vertical de la concentración media normalizada desde el instante inicial al tiempo  $t$ . Los pasos de tiempo son: (a) 3 s, (b) 0.3 s y (c) 0.03 s.

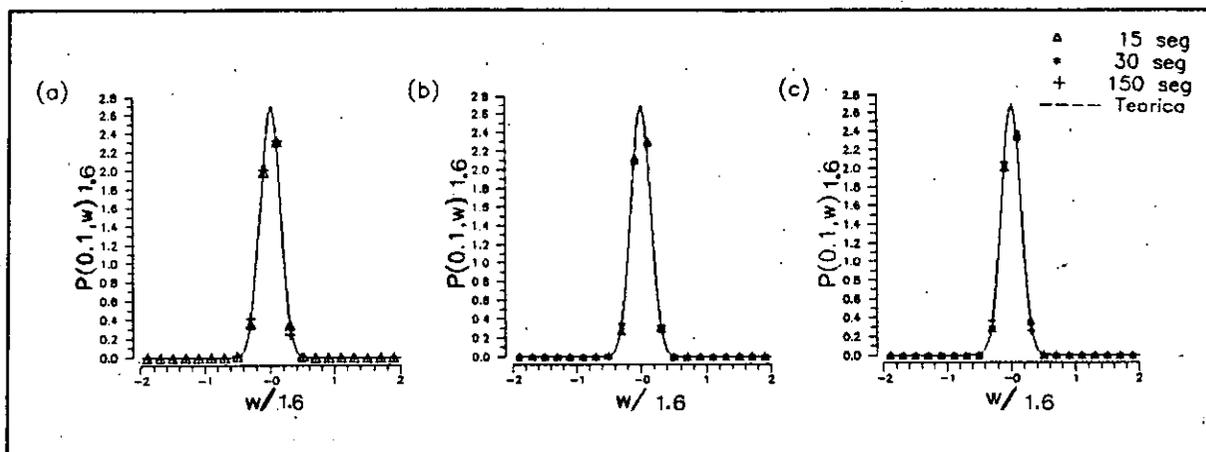


Figura 3.2.2.3. Distribución de la velocidad adimensional  $w/1.6$  en función del tiempo  $t$  para la altura adimensional  $z/H=0.100$ . Los pasos de tiempo son: (a) 3 s, (b) 0.3 s y (c) 0.03 s.

Respecto a las distribuciones de la velocidad en las zonas límitrofes a los extremos de la CLN se confirma la independencia de las condiciones de contorno artificiales impuestas, coincidiendo con las observaciones en situaciones convectivas con una fdp gaussiana. En la tabla 3.2.2.1 se reflejan los cuatro primeros momentos de estas distribuciones únicamente en condiciones de reflexión perfecta y en los límites de la CLN. La fdp teórica corresponde a las alturas de 10 m, 100 m y 990 m y las distribuciones de velocidad observada se establecen, respectivamente, entre 0 m y 20 m, entre 90 m y 110 m y entre 980 m y 1000 m.

(a)	Teórica (—)	15.0 seg ( Δ )	30.0 seg ( * )	150.0 seg ( + )
Media	0.0000	-0.0102	-0.0119	-0.0114
Desv. Stand.	0.1610	0.1547	0.1524	0.1560
Sesgo	0.0000	-0.2386	-0.2352	-0.1887
Curtosis	0.0000	0.1396	0.0532	0.1525
N. de casos $z \in (0,20) m$		1000	1987	9889

(b)	Teórica (—)	15.0 seg ( Δ )	30.0 seg ( * )	150.0 seg ( + )
Media	0.0000	0.0063	0.0062	-0.0056
Desv. Stand.	0.1479	0.1482	0.1447	0.1465
Sesgo	0.0000	-0.1162	-0.1040	-0.2842
Curtosis	0.0000	0.0231	0.0412	0.0420
N. de casos $z \in (90,110) m$		995	2021	10265

(c)	Teórica (—)	15.0 seg ( Δ )	30.0 seg ( * )	150.0 seg ( + )
Media	0.0000	-0.0083	-0.0085	-0.0053
Desv. Stand.	0.0639	0.0609	0.0614	0.0618
Sesgo	0.0000	-0.4762	-0.4153	-0.4054
Curtosis	0.0000	0.2729	-0.0425	-0.3480
N. de casos $z \in (980,1000)m$		1002	2015	10228

Tabla 3.2.2.1. Cuatro primeros momentos de las distribuciones de velocidad y pdf gaussiana en función del tiempo. Las alturas adimensionales son  $z/H$  (a) 0.01, (b) 0.1 y (c) 0.99. El paso de tiempo es de 3 segundos.

El centro de masa en situaciones neutras evoluciona temporalmente de manera opuesta que en convectivas. Mientras que en las últimas el centro de masa descendía en el tiempo, en las neutras se incrementa. Este comportamiento no sólo está determinado por la relaciones de la desviación o la escala de tiempo lagrangianas, sino también, de forma más importante, por la diferencia en el tipo de movimiento representado por la función de densidad. En la figura 3.2.2.4 se puede apreciar lo mencionado anteriormente; aunque se manifiesta una ligera dependencia con la elección del paso de tiempo puede considerarse despreciable. Transcurridos 150 segundos tan sólo existe una diferencia absoluta de 9 cm entre dos pasos de tiempo cuya relación sea igual a diez (p.e. entre 0.3 s y 3 s). Esta

evolución no puede ajustarse a una función sencilla, ya que existen discrepancias en determinados intervalos de tiempo, por ejemplo como muestra la figura entre los 50 s y 100 s en el paso de tiempo de 0.3 segundos.

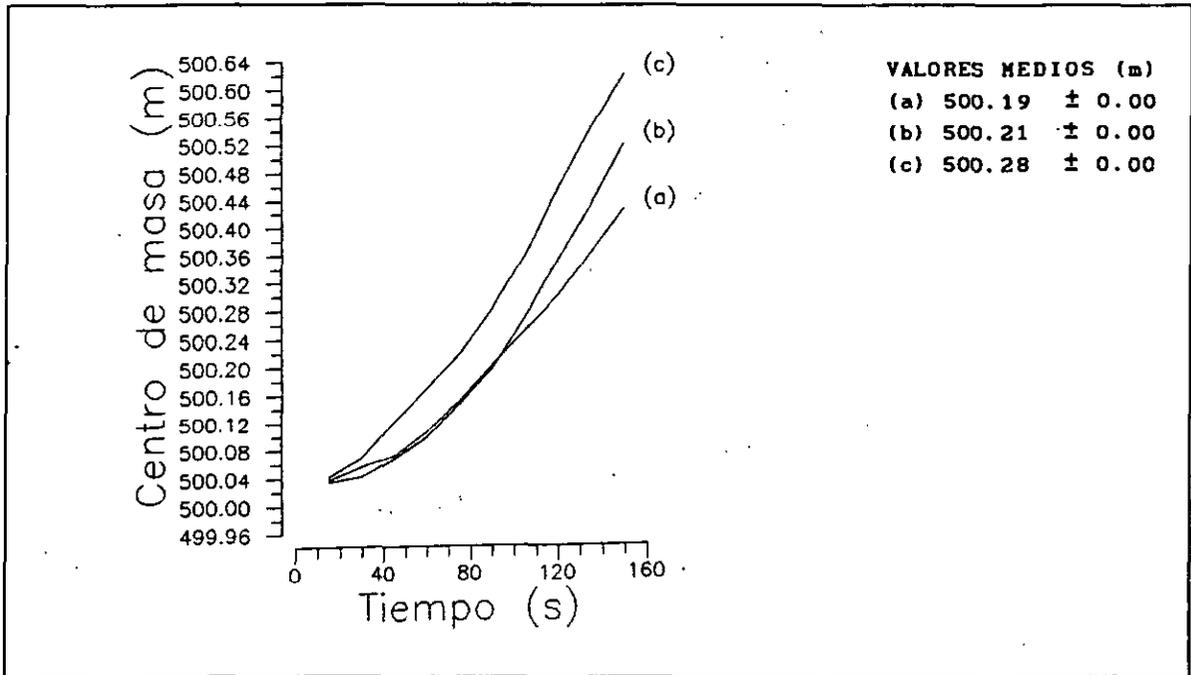


Figura 3.2.2.4. Evolución temporal del centro de masa. El incremento de tiempo es de (a) 3 s, (b) 0.3 s y (c) 0.03 s.

#### EFFECTO DE LAS VARIABLES $\sigma_w$ y $T_{Lw}$

El hecho de que los parámetros meteorológicos,  $T_{Lw}$  y  $\sigma_w$ , dependan de la velocidad de fricción hace que el valor de ésta condicione el comportamiento de las partículas. En las dos simulaciones siguientes se han elegido los valores de 0.1 m/s y 0.05 m/s. En la figura 3.2.2.5 se presenta la evolución vertical de las concentraciones instantáneas a los 15, 30 y 150 segundos cuando el paso de tiempo es de 3 s. Cuando la velocidad de fricción desciende en magnitud, la escala de tiempo responde con un aumento y la desviación con un descenso. Debido principalmente a esta disminución de la desviación el esquema se hace más estable en el sentido de que la concentración se mantiene más cerca de su valor inicial. Este resultado se refleja igualmente cuando se selecciona la desviación estándar igual a  $1.3u_*$  (Pasquill, 1974), que corresponde al valor máximo de la expresión de Wyngaard (1974) para  $u_* \approx 2fz$  m/s, y considerado por Ley (1982) para simular la difusión de contaminantes en capas neutras (figura 3.2.2.5B). Todas las distribuciones de la velocidad se ajustan a la teórica en todos los niveles verticales y con un nivel de confianza del 99%. La elección de la escala de tiempo, aunque no se refleja explícitamente, también condiciona el comportamiento de las partículas en cada paso de tiempo.

Conjuntando este estudio con el del apartado 3.2.1. respecto a estas dos variables meteorológicas se confirma la importancia de la correcta

elección de las mismas siendo necesario, si se desea aplicar este modelo en cualquier zona, concretar lo más acertadamente posible sus expresiones empíricas mediante sondeos en altura. Por consiguiente, cualquier tipo de modelo de difusión que requiera cualquier expresión o dato de variables meteorológicas necesita calibrarse en la zona mediante el conocimiento más exacto de los parámetros turbulentos.

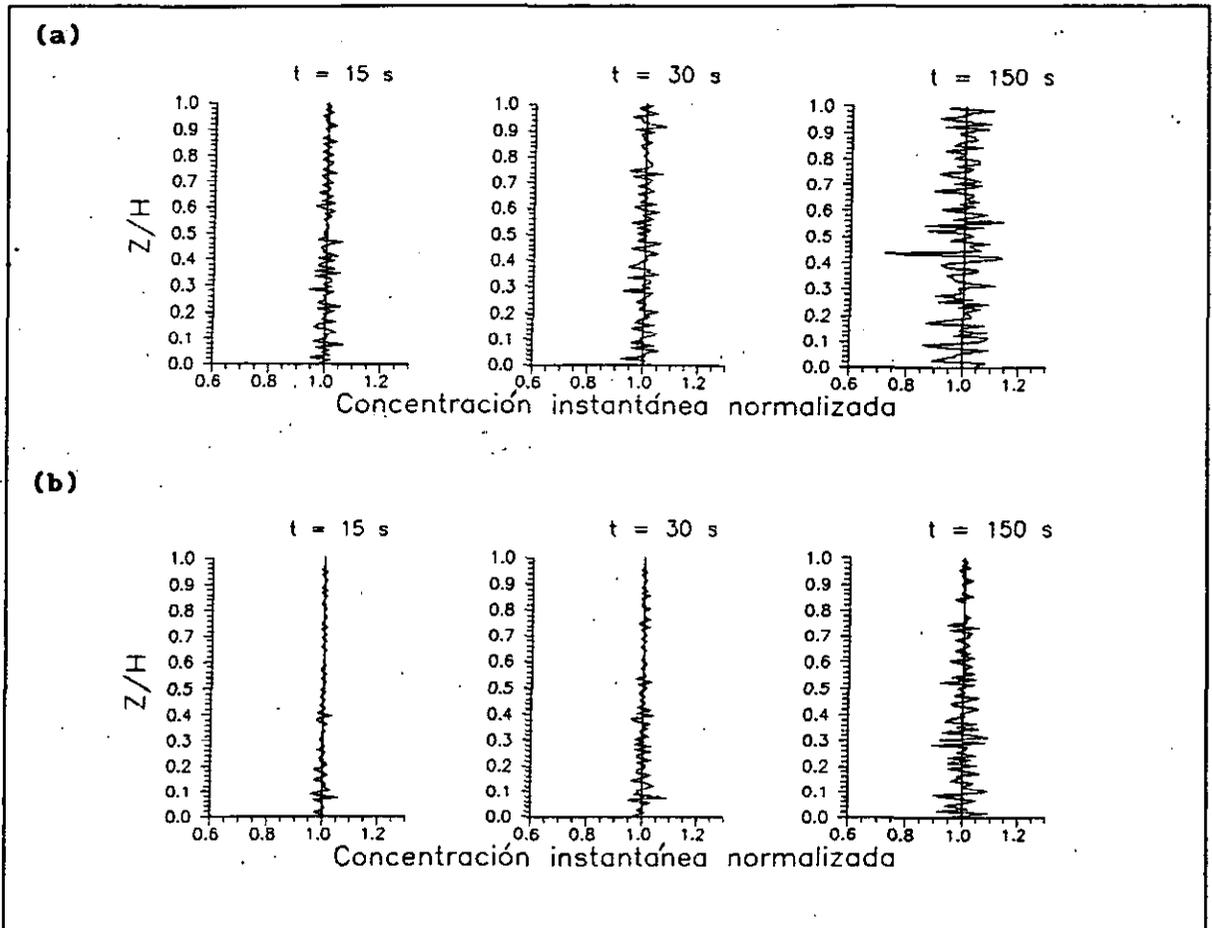


Figura 3.2.2.5. Distribución vertical de la concentración instantánea normalizada en función del tiempo  $t$ . La velocidad de fricción es de: (a) 0.1 m/s y (b) 0.05 m/s.

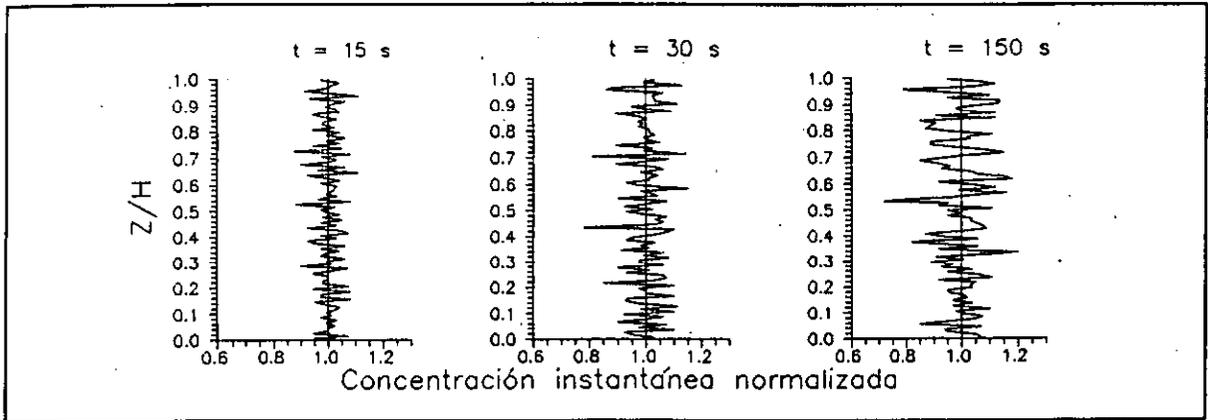


Figura 3.2.2.5B. Distribución vertical de la concentración instantánea normalizada en función del tiempo  $t$ . La desviación estándar de Pasquill (1974).

La evolución del centro de masa, aunque siempre se eleva en el tiempo, presenta la particularidad de que su ascenso difiere según sea el valor de la velocidad de fricción, llegando a ser casi nula en la simulación de  $u_* = 0.05$  m/s (figura 3.2.2.6). Si la desviación estándar corresponde a la propuesta por Pasquill, la elevación del centro de masa es diferente, pues presenta un valor máximo, a partir del cual decrece, como se muestra en la figura 3.2.2.6B.

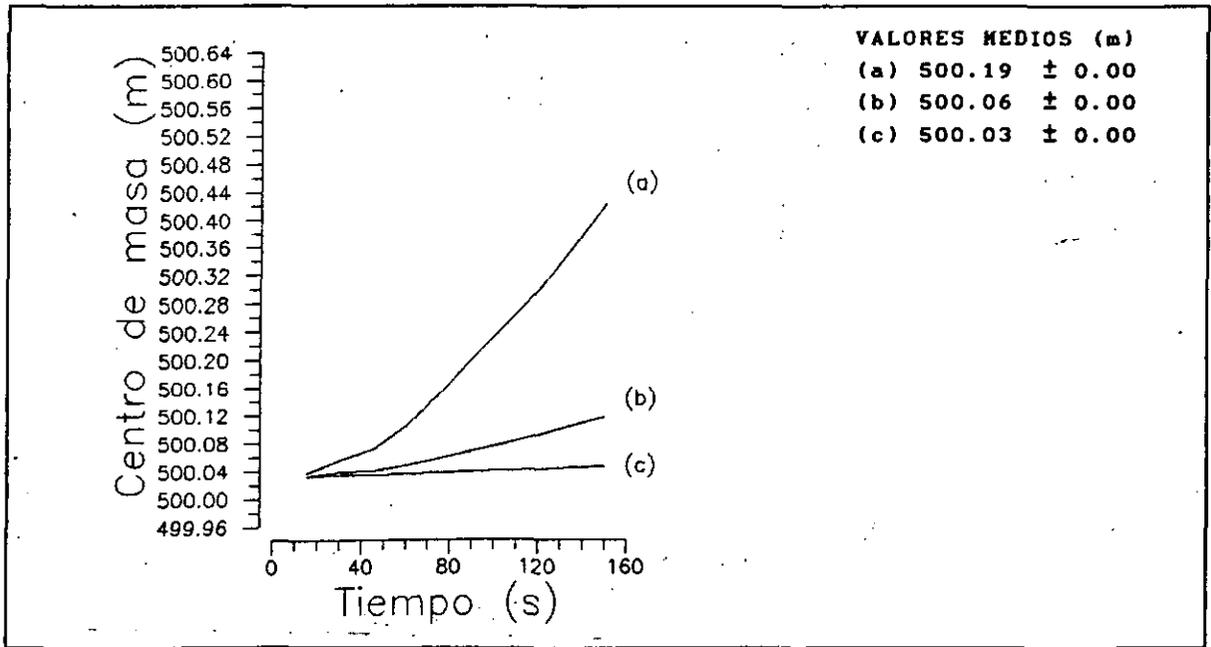


Figura 3.2.2.6. Evolución temporal del centro de masa para las velocidades de fricción de (a) 0.2 m/s, (b) 0.1 m/s y (c) 0.05 m/s.

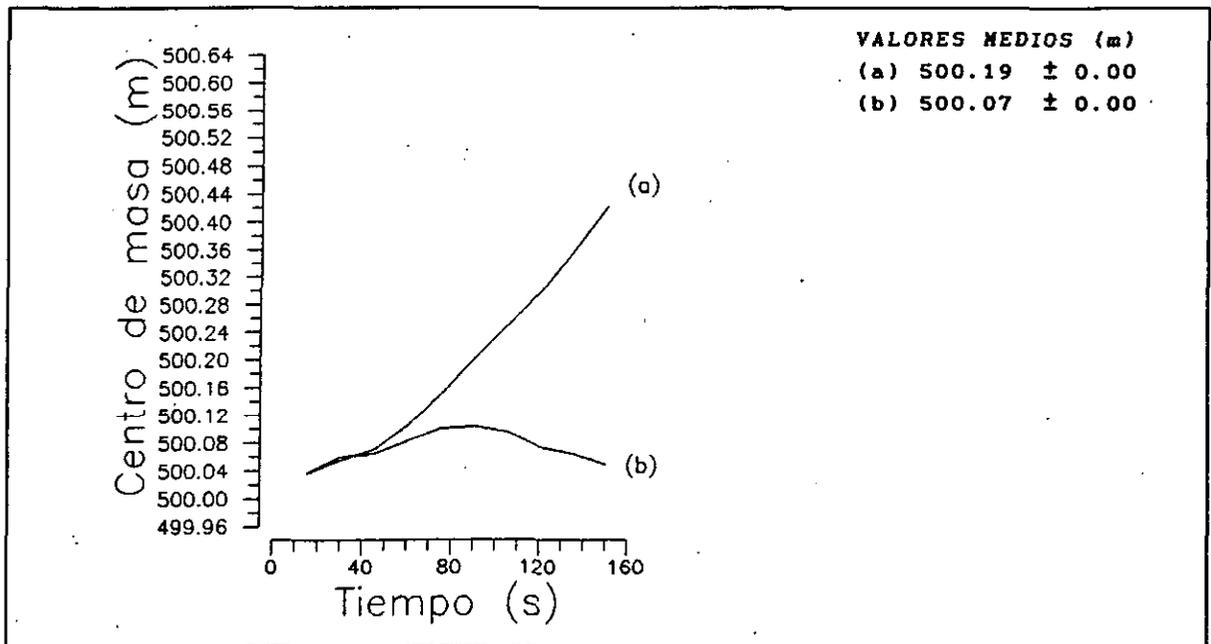


Figura 3.2.2.6B. Evolución temporal del centro de masa para las velocidades de fricción de (a) 0.2 m/s y (b) desviación estándar de Pasquill (1974).

Por último se representa gráficamente (figura 3.2.2.7) la relación entre los valores medios de la turbulencia en el instante anterior ( $\overline{F1.W'(t-1)}$ ) con los valores medios de la componente aleatoria turbulenta en el instante  $t$  ( $\overline{W''(t)}$ ). Esta relación manifiesta el peso que cada una de estas magnitudes posee en la determinación de la fluctuación de la velocidad en un instante dado. Como se observa es más determinante el efecto de la turbulencia en el instante anterior que el término de origen aleatorio, sin

embargo el peso varía en función de la velocidad de fricción del ambiente, teniendo una influencia mayor cuando se incrementa la velocidad de fricción. En la figura 3.2.2.7B se representa esta relación considerando la desviación estándar de Pasquill (op. cit.). Cuando se considera la expresión de la desviación estándar de Wyngaard la diferencia entre la componente turbulenta en el paso anterior y la componente turbulenta de origen aleatorio decrece con la disminución de la energía turbulenta referenciada por este parámetro, reduciendo el término turbulento anterior y aproximándole al valor de su componente aleatoria, incluso hasta el punto en el que estos dos términos en vez de compensarse (signos opuestos) se sumen (igualdad en sus signos). Respecto al valor medio en estas variables se manifiesta un incremento con el descenso de la desviación estándar asociada a la disminución de la velocidad de fricción. En el caso de considerar la desviación propuesta por Pasquill (op. cit.) constante con la altura e igual a 0.26 m/s, estos dos términos tienden a potenciar la turbulencia en el instante  $t$  gracias a la igualdad de sus signos.

Este estudio se llevó a cabo con los tres pasos de tiempo de 3 s, 0.3 s y 0.03, con la desviación de Wyngaard y la velocidad de fricción de 0.2 m/s. En estas tres simulaciones se manifestó el carácter compensatorio entre la turbulencia en el instante anterior y la componente aleatoria. Aunque sus valores medios oscilaban debido al número de datos de cada una de las simulaciones; aproximadamente -7 con 51 datos para 3 s, -11.3 con 501 datos para 0.3 s y -9.9 con 5001 datos para 0.03 s, se puede considerar que no existe una importante dependencia de este valor medio con el paso de tiempo.

Al seleccionar otras expresiones para la escala de tiempo lagrangiana se observó que la relación entre estas dos componentes turbulentas de la velocidad variaba en magnitud, debido a su influencia en la fluctuación turbulenta de velocidad en el instante anterior, de tal manera que una escala de tiempo menor incrementaba el valor de la fluctuación en un paso anterior y viceversa.

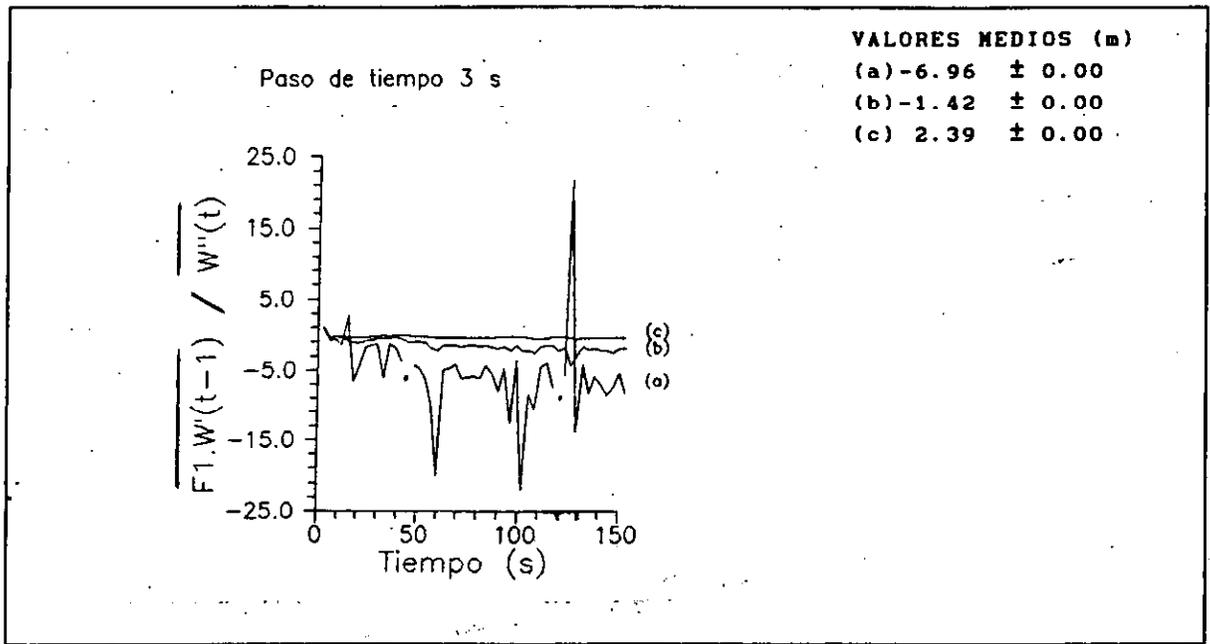


Figura 3.2.2.7. Evolución temporal de la relación entre la fluctuación de velocidad en el paso de tiempo anterior y la componente aleatoria, para las velocidades de fricción iguales a (a) 0.2 m/s, (b) 0.1 m/s y (c) 0.05 m/s.

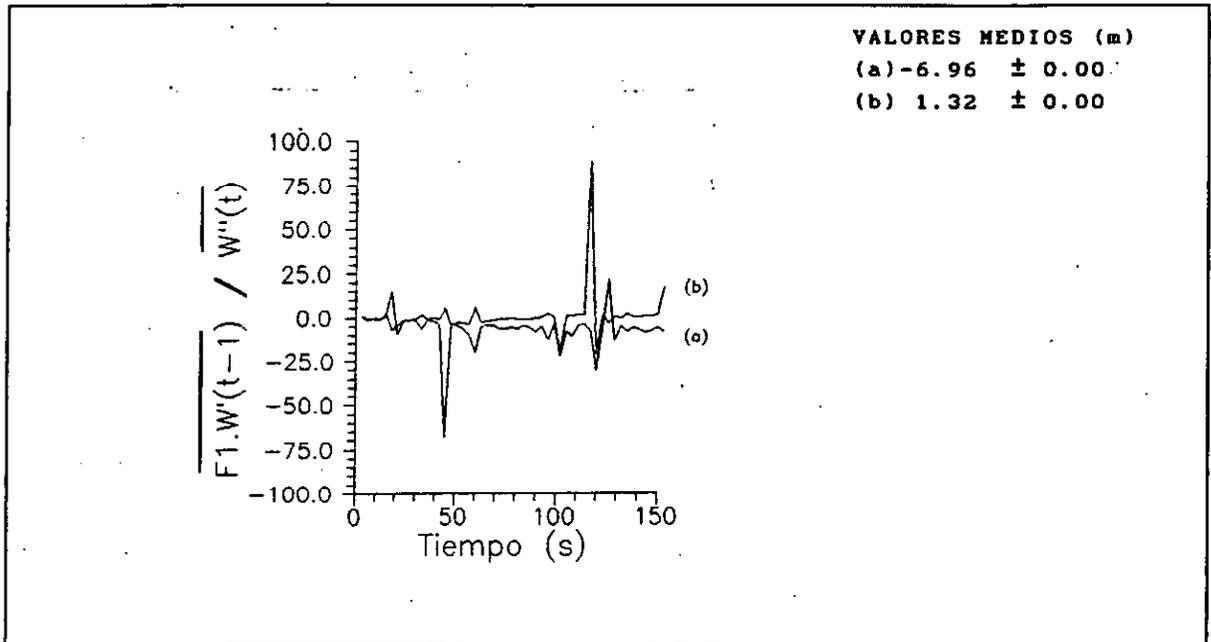


Figura 3.2.2.7B. Evolución temporal de la relación entre la fluctuación de velocidad en el paso de tiempo anterior y la componente aleatoria, para la desviación estándar de (a) Wyngaard (1974) con  $u_* = 0.2$  m/s y (b) con la de Hanna (1974).

### VELOCIDAD MEDIA DE ARRASTRE

Por último se expondrá el efecto producido cuando se considera la velocidad media de arrastre. En las simulaciones que se presentan se ha considerado la velocidad de arrastre propuesta por Legg y Raupach (1982) con un paso de tiempo de 3 segundos. La primera considera la desviación de Pasquill (1974) y la segunda la de Wyngaard (1974). En la figura 3.2.2.8 se refleja una disminución de la concentración de las partículas en los dos límites de la CLN, siendo más notorio en las cercanías al suelo y con la desviación de Wyngaard. Por tanto, la incorporación de la velocidad de arrastre, tan útil en condiciones convectivas, no debe incorporarse en situaciones neutras ya que anula la uniformidad de la distribución de partículas en las cercanías al suelo. Esta herramienta matemática, que representa físicamente el efecto asociado con el gradiente vertical de energía turbulenta, permite descender la acumulación de partículas en los límites de cualquier tipo de CLP, añadiéndolas una velocidad ascendente.

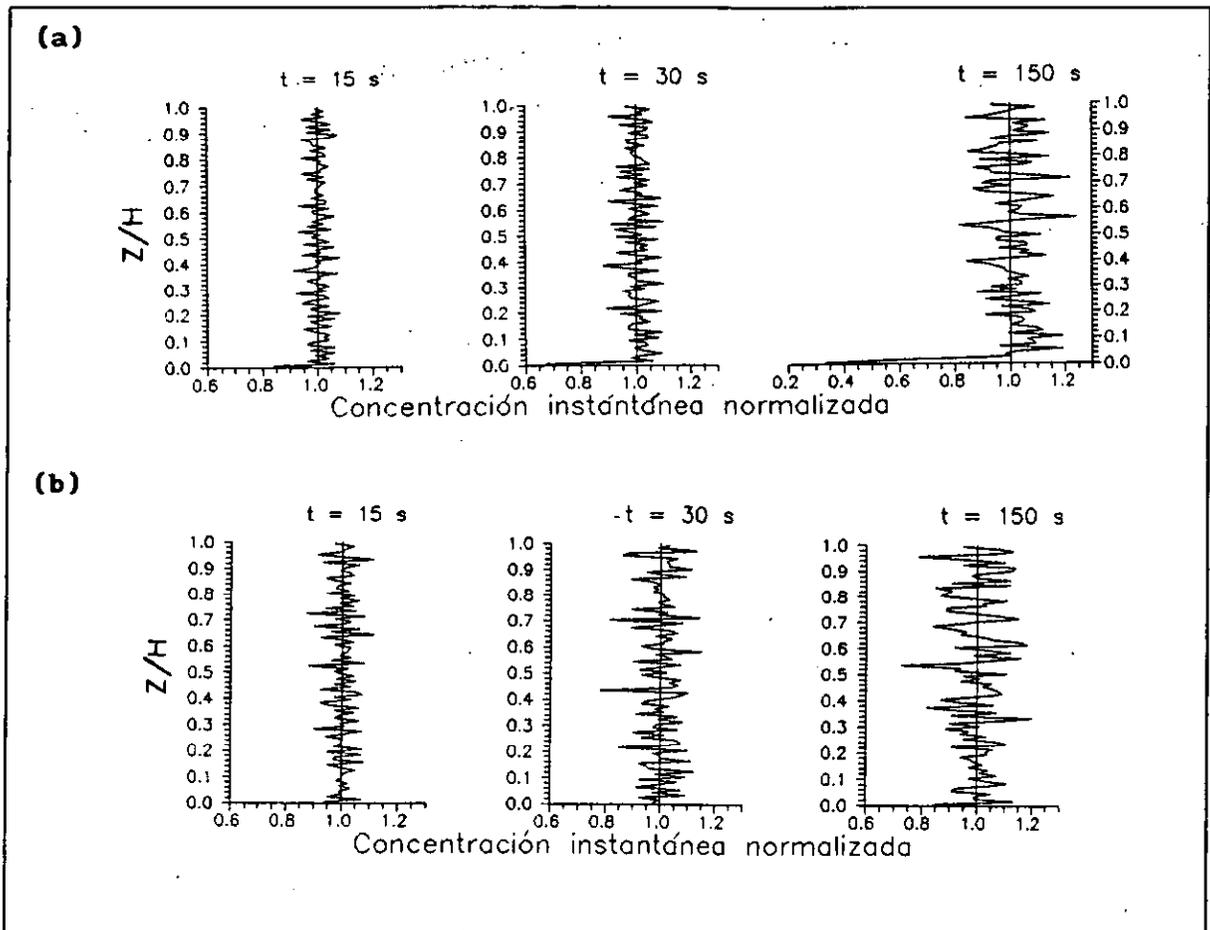


Figura 3.2.2.8. Distribución vertical de la concentración instantánea normalizada en función del tiempo  $t$ . Se incorpora la velocidad media de arrastre según Legg y Raupach (1982) con las desviaciones estándar de (a) Wyngaard (1974) y (b) Pasquill (1974).

### 3.2.3. Situaciones estables.

Las investigaciones teóricas y experimentales de la CLC y la CLN han permitido el desarrollo de procedimientos adecuados para simular diferentes procesos físicos bajo estas condiciones. Sin embargo, no ocurre lo mismo en el caso de una CLP con estratificación estable (de ahora en adelante denominada de forma abreviada como CLE). En la CLE la competencia entre el efecto generador de la cizalla y el destructivo de la flotabilidad y la disipación viscosa provoca que las intensidades turbulentas sean muy inferiores a las registradas en capas convectivas o neutras (Venkatram, 1988). Sin embargo, se ha observado que la turbulencia en la CLE no tiene un comportamiento estacionario, tendiendo a tener un carácter intermitente y variando su espesor con el tiempo (Wyngaard, 1988; Anfossi 1989). Una dificultad añadida es la evaluación experimental de los parámetros turbulentos en el seno de una CLE, a causa principalmente de la presencia de ondas de gravedad en las fluctuaciones del viento. El caso de condiciones estables con vientos muy cercanos a la calma es aún más complejo y menos estudiado. Cuando estas condiciones prevalecen, se observa que las fuertes fluctuaciones de la dirección del viento dan lugar a una oscilación o "meandreo" del penacho y a estructuras turbulentas muy complejas, lo que complica extraordinariamente el modelado difusivo de los contaminantes en el seno de una CLE. En este caso, concretamente, la difusión se aleja mucho de ser estacionaria y homogénea, no siendo aceptable ningún tipo de modelización gaussiana o modelos K (Sangendorf y Dickson, 1974; referenciado por Brusasca et al., 1992). Santomauro et al. (1978) encontraron que, en caso de un penacho de tipo gaussiano, los valores de  $\sigma_y$  para la categoría E de Pasquill-Gifford, entre 50 m y 1000 m de distancia de la fuente, son mucho mayores que en condiciones neutras e inestables. La amplificación de las fluctuaciones de la velocidad del viento da lugar a un espectro del viento lateral en el que la parte de alta frecuencia debida a la turbulencia es mucho menos energética que la zona de bajas frecuencias (Lumley y Panofsky, 1964)

A continuación se analizarán los efectos que producen dos expresiones diferentes para determinar la varianza de la componente vertical, así como tres valores distintos de la velocidad de fricción, lo que supone considerar tres perfiles verticales del viento horizontal.

En todas ellas se supone inicialmente una distribución uniforme de 10000 partículas a lo largo de la CLE, que se considera con un espesor de 1000 m (H). La rugosidad es de 0.01 m., la longitud de Monin-Obukhov de 5 m. El paso de tiempo es de 3 segundos. Las condiciones iniciales para la fluctuación de velocidad corresponden a una fdp gaussiana de media cero y desviación  $\sigma_w$ . Las condiciones de contorno son de reflexión perfecta. Se supone que los momentos de orden superior (relacionados con el sesgo y la curtosis) son nulos. La escala de tiempo lagrangiana se determina mediante las relación semiempírica de Hanna (1982):

$$T_{Lw} = 0.1 \frac{H}{\sigma_w} \left( \frac{z}{H} \right)^{0.8}$$

Con las condiciones anteriores se han realizado dos

simulaciones, con valores de  $\sigma_w$  determinados por:

$$\sigma_w = 1.3u_* (1-z/H) \quad \text{propuesta por Hanna (op. cit.)}$$

y

$$\sigma_w = 1.3u_* (1-z/H)^{0.75} \quad \text{propuesta por Venkatram (1988)}$$

En la figura 3.2.3.1. se puede observar en ambos casos un comportamiento uniforme de la concentración, lo cual parece indicar que no es necesario incorporar momentos de orden superior a la varianza. Los ajustes de las distribuciones observadas de velocidad con la fdp normal tienen niveles de confianza superiores al 95% en todas las alturas, incluidas las cercanas a los límites de la CLE. Por otra parte, no se aprecian diferencias significativas en el comportamiento del esquema con las dos expresiones, aunque con la expresión de Hanna se obtiene una mayor uniformidad de la concentración en la vertical.

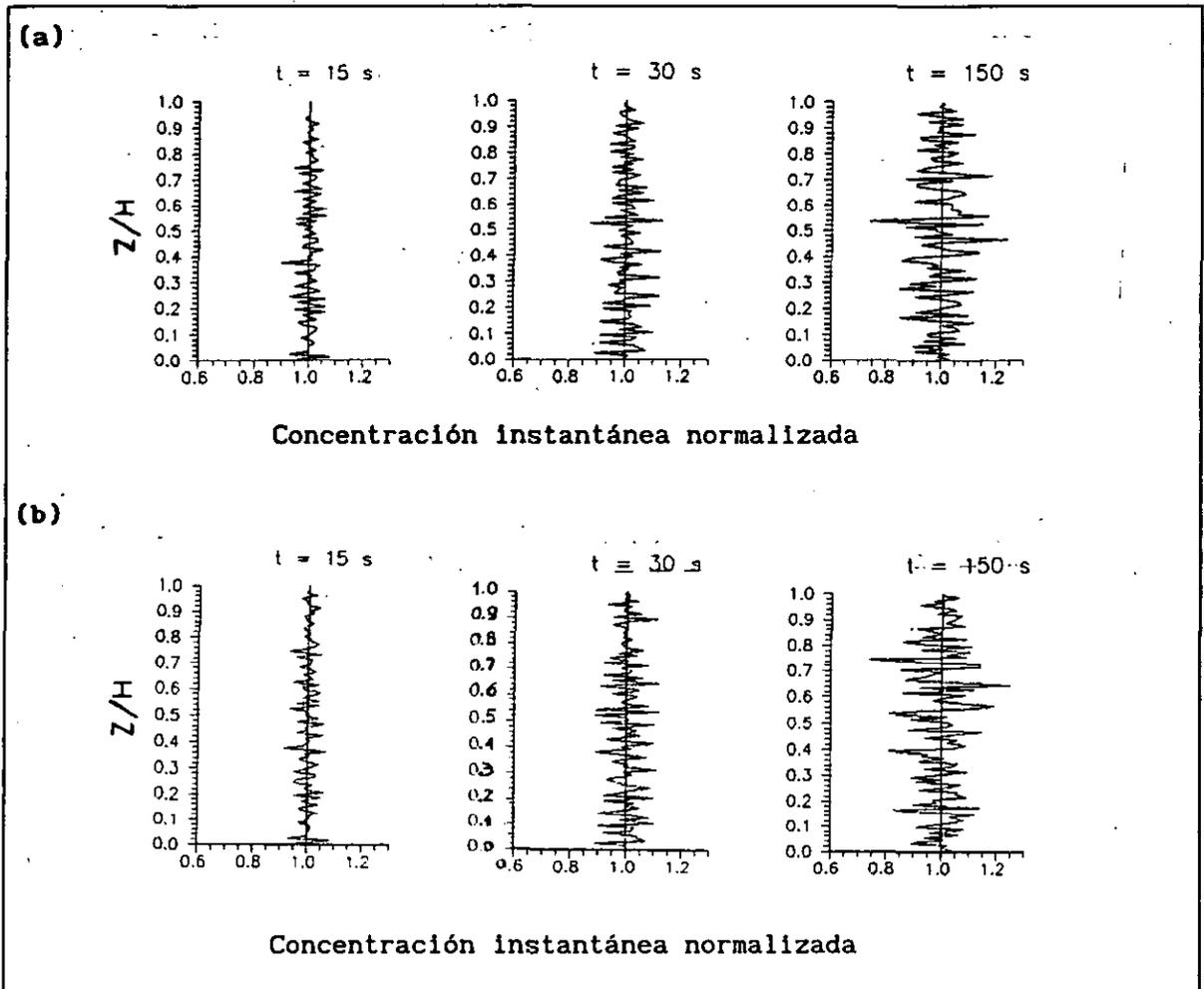


Figura 3.2.3.1. Evolución vertical de la concentración instantánea normalizada en los tres tiempos indicados por t. Desviación estándar propuesta por (a) Hanna (1982) y (b) Venkatram (1988).

La evolución temporal del centro de masa en ambas simulaciones se representa en la figura 3.2.3.2., donde se aprecia un ascenso ligeramente más rápido con valores menores de la varianza, es decir con la expresión de Venkatram. No obstante, la diferencia es demasiado pequeña para tomarla en consideración.

En la figura 3.2.3.3. se compara el efecto introducido por los dos valores de  $\sigma_w$  en las contribuciones de la componente aleatoria ( $w''$ ) al valor de  $w'$  en el instante  $t$ , en promedio extendido a todo el conjunto de partículas, lo que se realiza analizando los valores de la razón:

$$\frac{f_1 w'(t-1)}{w''(t)}$$

observándose, de nuevo, un comportamiento similar.

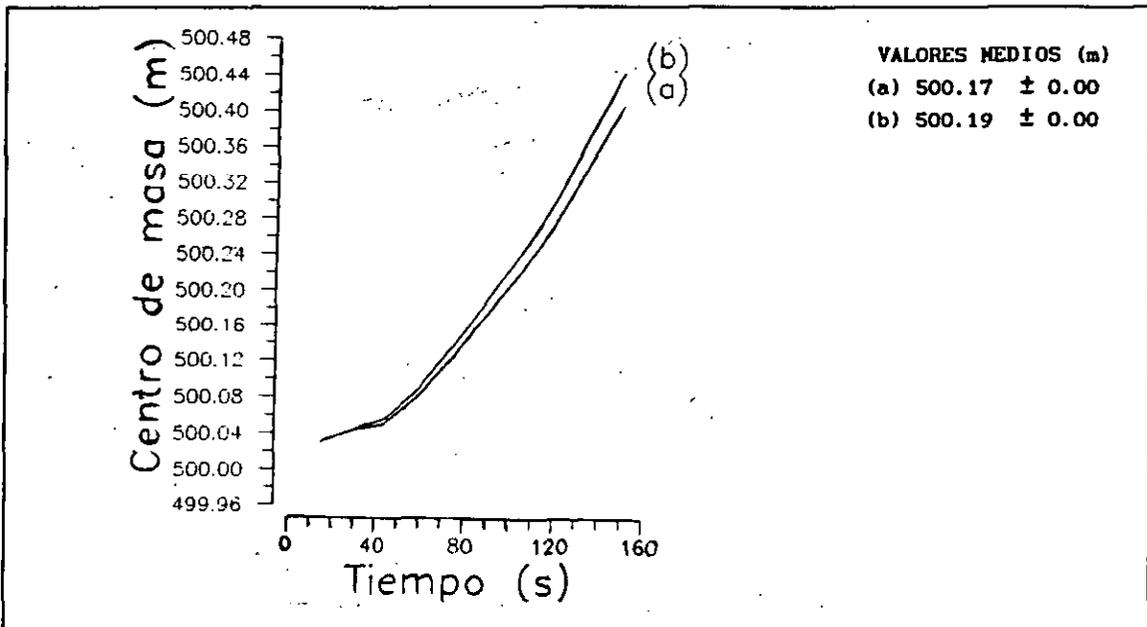


Figura 3.2.3.2. Evolución temporal del centro de masa para la desviación (a) Hanna (1982) y (b) Venkatram (1988).

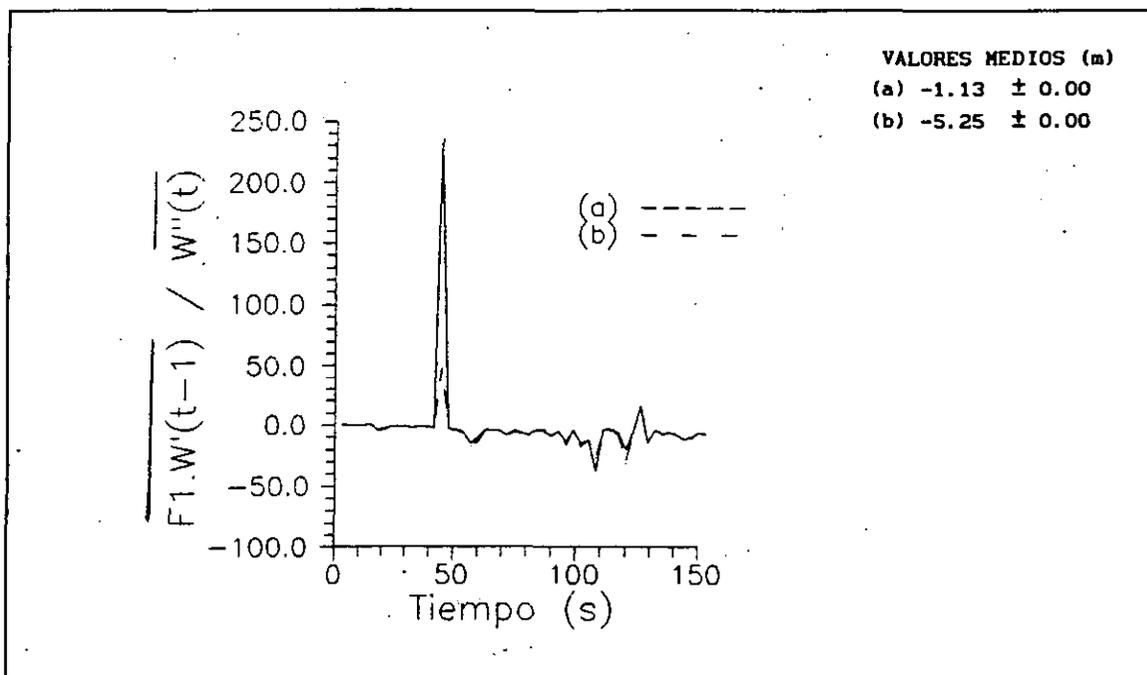


Figura 3.2.3.3. Evolución temporal de la relación entre la turbulencia en el instante anterior y su componente aleatoria. La desviación corresponde (a) Hanna (1982) y (b) Venkatram (1988).

A continuación se analizará el efecto que producen diferentes valores de la velocidad de fricción. Concretamente, los valores considerados son, además del de 0.2 m/s, 0.05 m/s y 0.01 m/s, que se traducen en tres perfiles verticales de velocidad horizontal, según la expresión de Businger et al. (1971):

$$v_{10m} = \frac{u_*}{k} \left[ \ln \left( 1 + \frac{10}{z_0} \right) + \frac{47}{L} \right]$$

donde  $k$  es la constante de Von Karman,  $z_0$  la rugosidad superficial y  $L$  la longitud de Monin-Obukhov. En estos experimentos se ha elegido el valor de  $\sigma_w$  propuesto por Hanna. En la figura 3.2.3.4. se representan las concentraciones instantáneas, normalizadas a lo largo de la altura adimensional  $z/H$ , con las dos últimas velocidades de fricción (0.05 y 0.01 m/s), mientras que en la figura 3.2.3.1.a. antes presentada, corresponde a una  $u_* = 0.2$  m/s. Como era de esperar, a menor velocidad de fricción, es decir menos cizalla vertical del viento horizontal, se observa una menor fluctuación turbulenta de partículas. Por lo que se refiere a la evolución del centro de masa, la figura 3.2.3.5 pone de manifiesto su notable dependencia con la la cizalla del viento horizontal en los primeros 150 segundos de simulación. Dicha dependencia tiene un carácter exponencial.

Finalmente, al igual que se hizo anteriormente, se analiza la influencia del valor de la velocidad de fricción sobre la razón

$$\overline{f_1 w'(t-1) / w''(t)}$$

comprobándose que a menos cizalla esta relación es mucho más pequeña (compárense las figuras 3.3.3.3.a. y 3.2.3.6.). Esto indica que cuanto menor sea turbulencia mecánica, más contribuirá el término aleatorio  $w''$  y menos la autocorrelación.

Por último, hay que señalar que el efecto que en este caso de estratificación estable producen diferentes condiciones iniciales y de contorno es similar al observado en los apartados 3.2.1. y 3.2.2., por lo que no se presenta. Esto mismo ocurre en caso de considerar diversos pasos temporales.

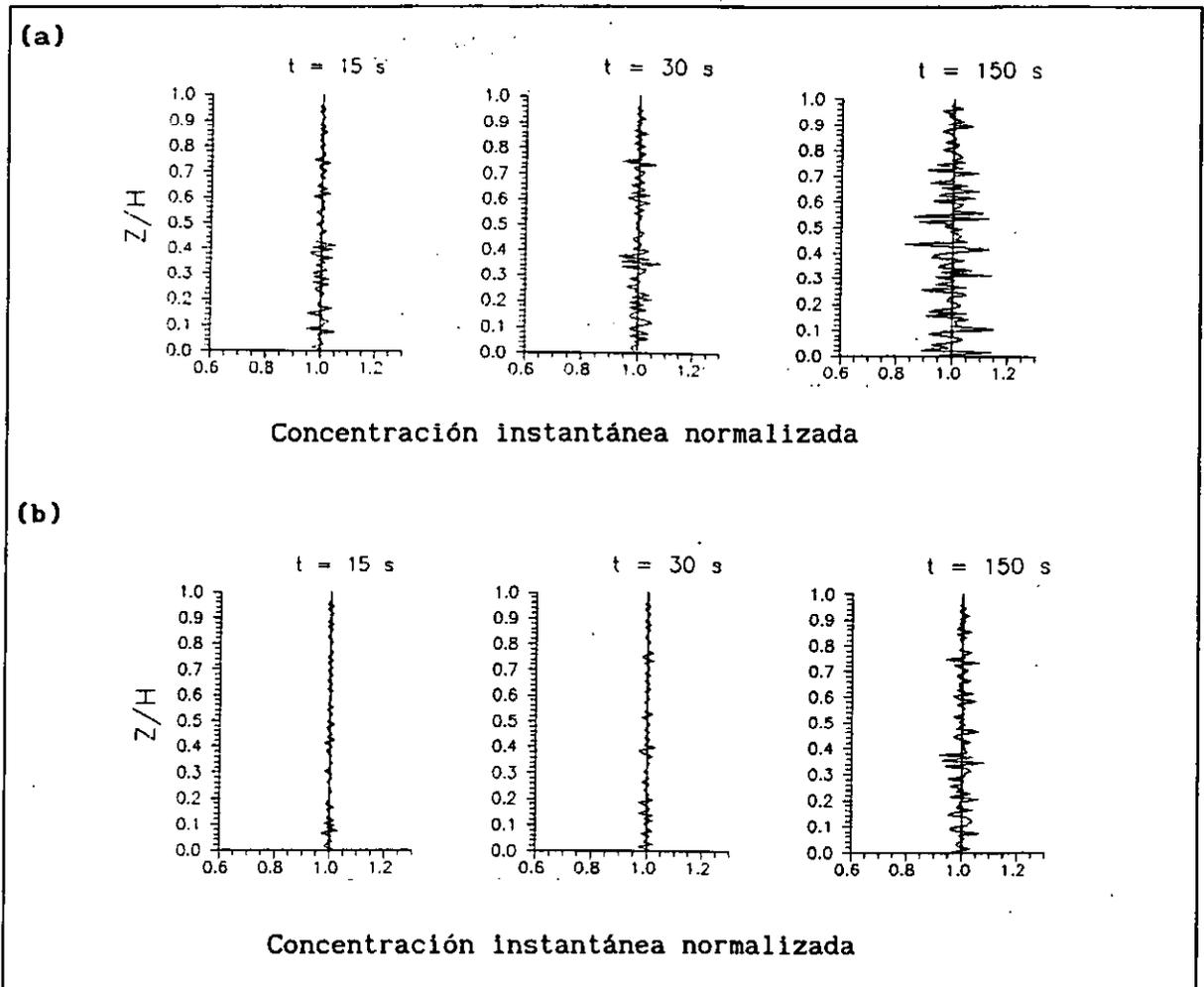


Figura 3.2.3.4. Evolución vertical de la concentración instantánea normalizada en los tres tiempos indicados por  $t$ . Velocidad de fricción (a)  $0.05$  m/s y (b)  $0.01$  m/s.

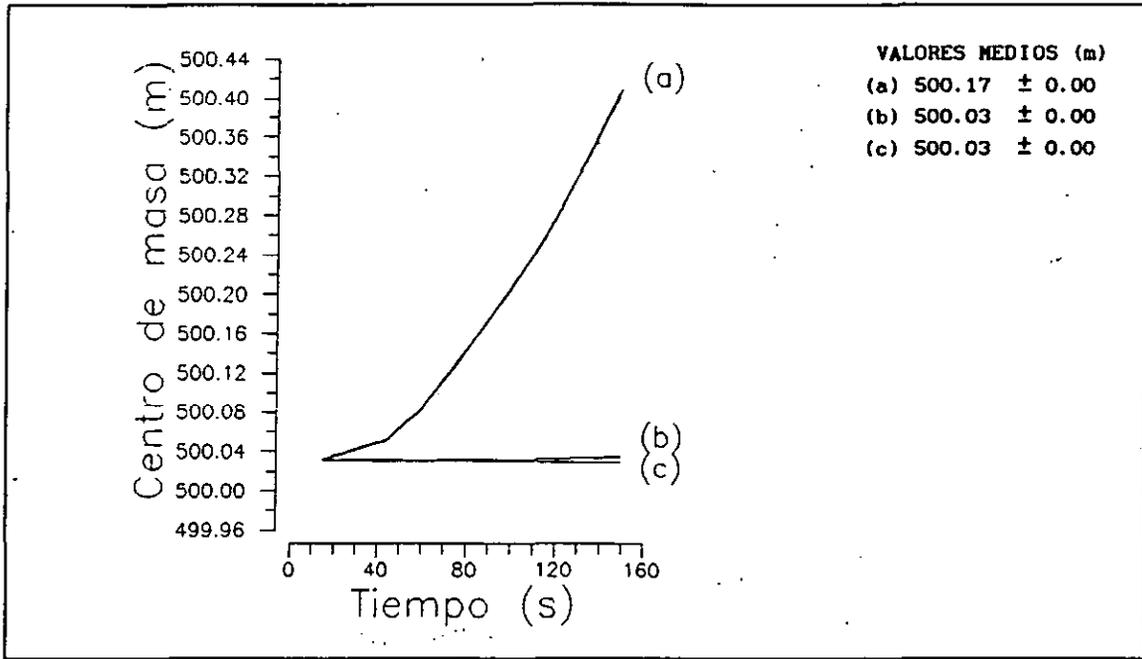


Figura 3.2.3.5. Evolución temporal del centro de masa para la velocidad de fricción (a) 0.2 m/s, (b) 0.05 m/s y (c) 0.01 m/s.

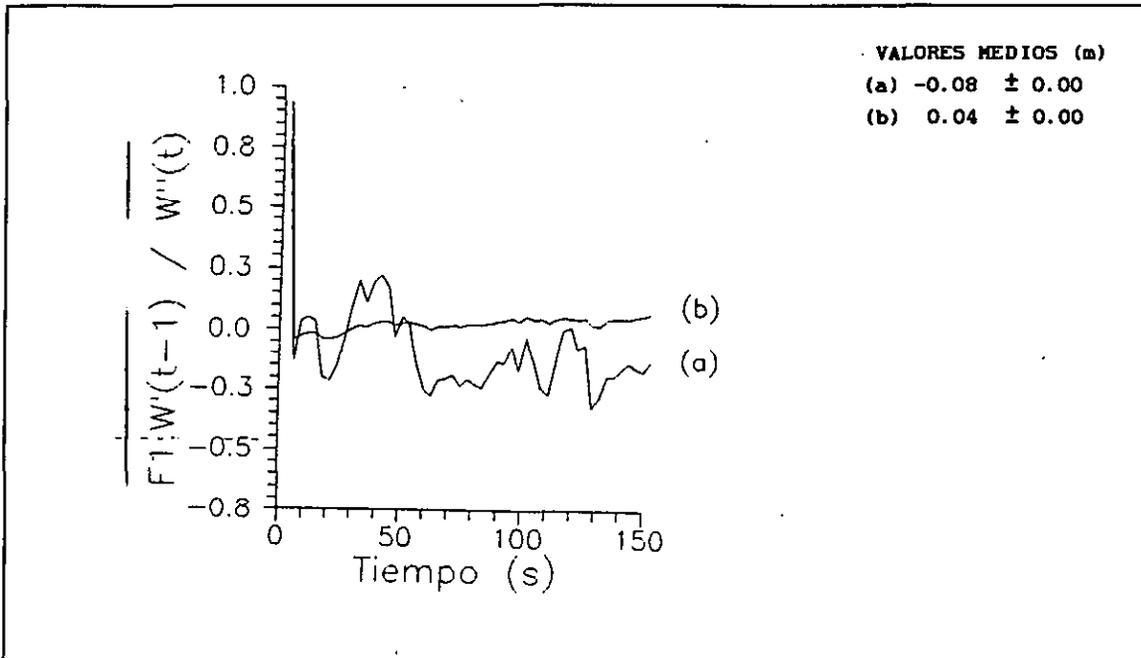


Figura 3.2.3.6. Evolución temporal de la relación entre la turbulencia en el instante anterior y su componente aleatoria. Velocidad de fricción (a) 0.05 m/s y (b) 0.01 m/s.

#### 3.2.4. Fumigación.

Tras la puesta del sol la temperatura del aire en las cercanías del suelo comienza a descender por pérdida radiativa de onda larga, extiéndose progresivamente dicho enfriamiento a las capas de aire superiores. Este proceso da lugar a que se forme una capa de inversión térmica junto al suelo, cuyo espesor crece durante la noche. Con la salida del Sol al amanecer, el suelo se empieza a calentar produciéndose un flujo de calor sensible ascendente por convección que va destruyendo por abajo la capa de inversión. De esta manera, se origina una capa donde se observa una mezcla convectiva muy eficiente en la vertical, cuya cima va alcanzando alturas más elevadas a lo largo de la mañana. El crecimiento vertical de esta capa de mezcla o capa convectiva puede llegar a alcanzar el nivel donde se encuentra una fuente de contaminantes, que anteriormente emitía en el seno de una capa con estratificación estable. En esta circunstancia, los contaminantes atrapados en la inversión se mezclan con las capas de aire inferiores, llegando a afectar a las proximidades del suelo, dando lugar a niveles elevados de concentración de contaminantes. A este proceso se le denomina "fumigación".

Mediante experiencias en laboratorio, Manins (1977) estudió de forma cualitativa el proceso de fumigación, lo que contribuyó a clarificar varios aspectos de los procesos que provocan la erosión de la inversión nocturna junto al suelo. Posteriormente, Deardorff y Willis (1982) llevaron a cabo experimentos de fumigación con "penachos" en un túnel de agua. Por su parte, Segal et al. (1982, 1988) investigaron la fumigación enlazando un modelo de pronóstico que describía la CLP con un modelo euleriano de tipo K, que posteriormente en el año 1988 sustituyeron por un esquema de tipo lagrangiano. Hurley y Physick (1991) analizaron el comportamiento de cuatro modelos lagrangianos en condiciones de fumigación, confirmando la gran utilidad de la metodología lagrangiana en el tratamiento de fumigación de penachos.

En este apartado se analizan los resultados que se obtienen de una simulación unidimensional con el modelo lagrangiano propuesto, observando el efecto que sufriría una determinada distribución vertical de partículas por el avance vertical de una capa convectiva.

Las condiciones de la simulación son las siguientes:

La distribución inicial de partículas se refleja en la siguiente tabla:

	$\Delta Z$ (m)	Part/m	Total partículas
1 <sup>a</sup> Capa	0-50	8	400
2 <sup>a</sup> Capa	50-100	12	600
3 <sup>a</sup> Capa	100-150	20	1000
4 <sup>a</sup> Capa	150-200	30	1500
5 <sup>a</sup> Capa	200-295	68.5	6500
6 <sup>a</sup> Capa	> 295	0	0

Inicialmente se supone que existe una capa convectiva con un espesor de 40 metros, cuyo tamaño aumenta linealmente a razón de 5.5 cm/s , de manera que al finalizar la simulación (17280 segundos) su cima alcanza la altura de 1000 metros. El paso de tiempo es de tres segundos.

Dentro de la capa de mezcla el esquema lagrangiano aplicado corresponde a las propuestas al final del apartado 3.2.1., subapartado B (con sesgo en la vertical). Por encima de esta capa no se considera ningún de partículas, con objeto de poder analizar más claramente el efecto exclusivo del crecimiento de la capa de mezcla.

En la Figura 3.2.4.1 se representan los sucesivos valores de la concentración vertical expresada en número de partículas/100 en capas con un espesor de 10 metros.. En ella se observa que dentro de la capa de mezcla tienden a distribuirse uniformemente en toda ella. Esto obliga a que la concentración media de partículas junto al suelo aumente progresivamente en el transcurso del tiempo. Una vez que la cima de la capa de mezcla rebasa el nivel superior de la distribución inicial de partículas, la concentración junto al suelo disminuye progresivamente ya que cesan las nuevas incorporaciones de partículas a la capa convectiva.

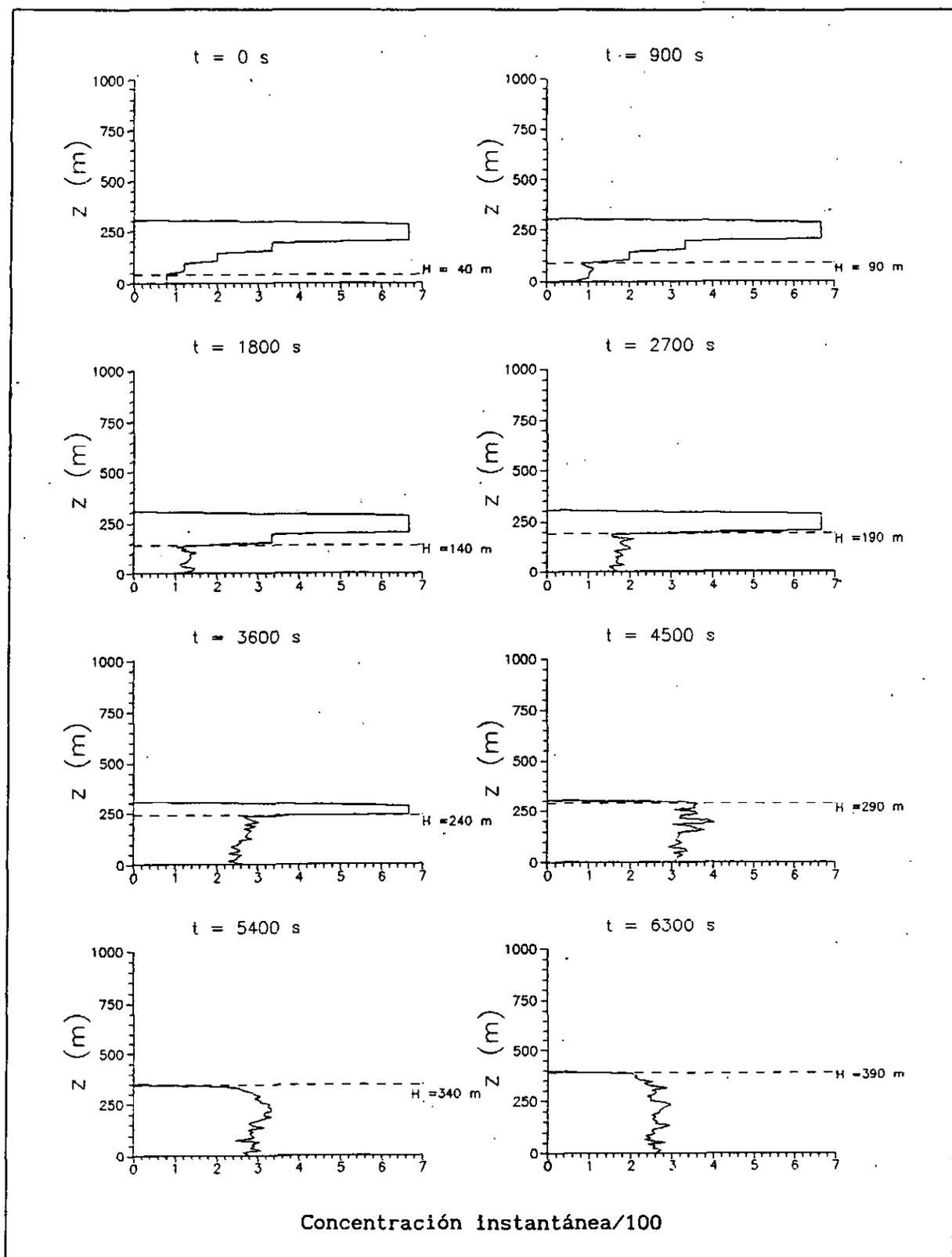


Figura 3.2.4.1. Evolución en el tiempo,  $t$ , de la concentración vertical instantánea de partículas con el avance de la capa de mezcla. La concentración se referencia a una concentración igual a 100 part/m.

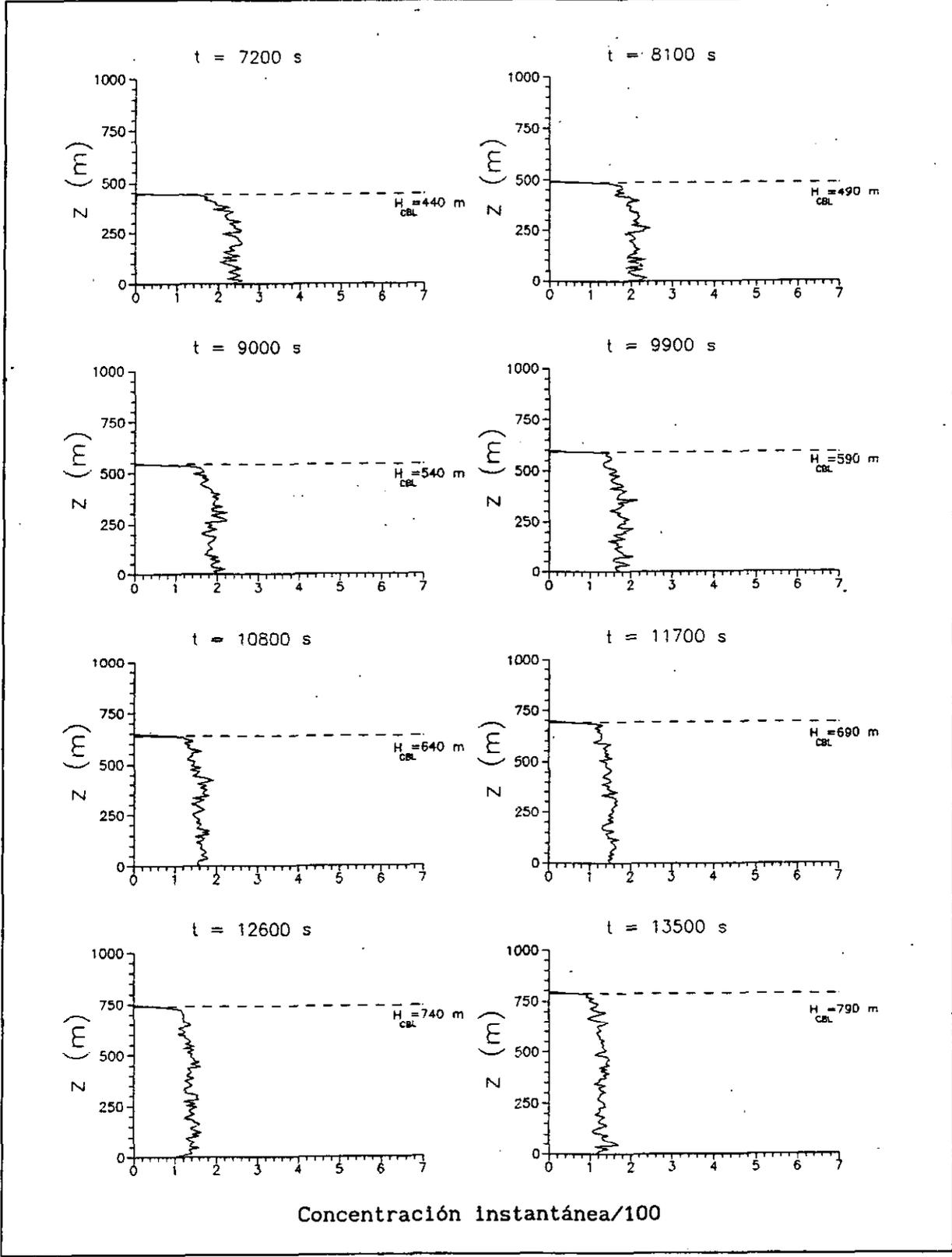


Figura 3.2.4.1 (cont). Evolución en el tiempo,  $t$ , de la concentración vertical instantánea de partículas con el avance de la capa de mezcla. La concentración se referencia a una concentración igual a 100 part/m.

La evolución temporal del centro de masa, como se observa en la figura 3.2.4.2, cambia de tendencia después de la capa de mezcla alcance el límite superior de la distribución inicial de partículas. Mientras que inicialmente el centro de masa va descendiendo, por la incorporación progresiva de un mayor número de partículas desde arriba, al cesar dicha incorporación se observa un ascenso muy pronunciado.

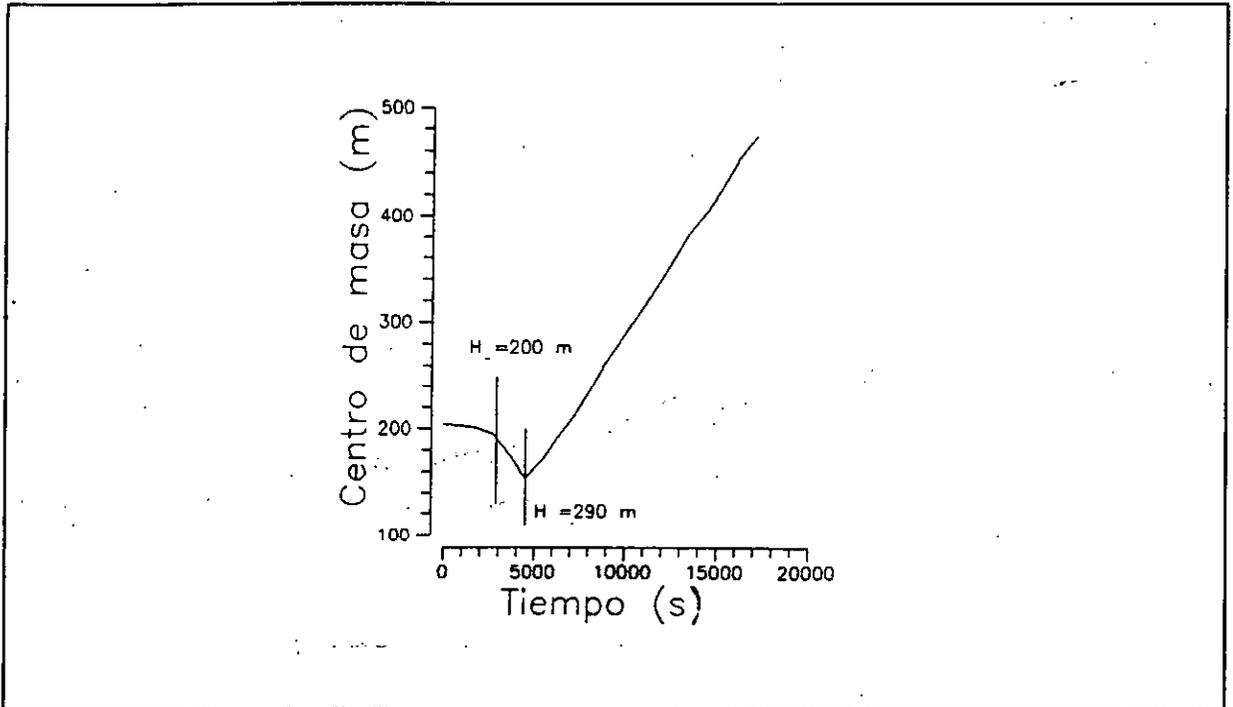


Figura 3.2.4.2. Evolución temporal del centro de masa en las condiciones de fumigación establecidas en el texto.

Por último, en la figura 3.2.4.3. se representan las distribuciones de velocidad adimensional  $w/w_0$  entre 10 y 30 m, desde el instante inicial hasta el tiempo indicado. En ella se observa que tales distribuciones corresponden a una fdp con sesgo, al igual que se observó en el apartado 3.2.1.B.

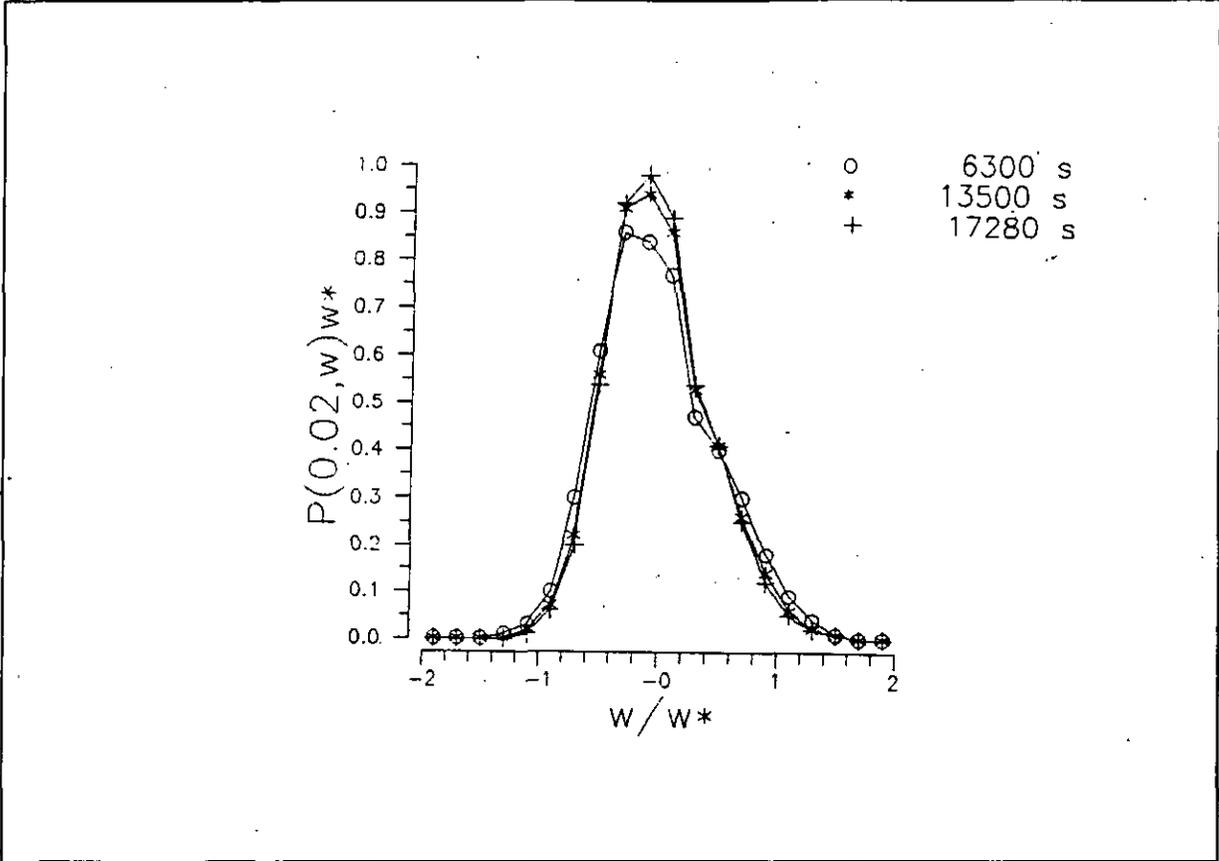


Figura 3.2.4.3. Evolución temporal desde el instante inicial de la distribución de velocidad adimensional ( $w/w_*$ ).

### 3.3. MODELO BIDIMENSIONAL.

El esquema lagrangiano que se propone, como ya se indicó en el apartado 2.3, es el siguiente:

$$w'(t+\Delta t) = g_1 w'(t) + w''(t+\Delta t)$$

$$u'(t+\Delta t) = g_2 u'(t) + g_3 w'(t+\Delta t) + u''(t+\Delta t)$$

donde:

$$g_1 = R_{w,w},$$

$$g_2 = \frac{R_{u,u} - R_{w,w} R_{u,w}^2}{1 - R_{w,w}^2 R_{u,w}^2}$$

$$g_3 = \frac{R_{u,w} \sigma_u (1 - R_{w,w} R_{u,u})}{\sigma_w (1 - R_{w,w}^2 R_{u,w}^2)}$$

$$\sigma_{w''}^2 = \sigma_w^2 (1 - g_1^2)$$

$$\sigma_{u''}^2 = \sigma_u^2 (1 - g_2^2) - g_3^2 \sigma_w^2 - 2 g_1 g_2 g_3 R_{u,w} \sigma_u \sigma_w$$

$$R_{u,w}(0) = \frac{\langle u'w' \rangle}{\sigma_u \sigma_w} = \frac{-u_*^2}{\sigma_u(z=0) \sigma_w(z=0)} \left[ 1 - \frac{z}{H} \right]$$

$$R_{u,u}(\Delta t) = \frac{\langle u'^2 \rangle}{\sigma_u^2} = \exp \left( - \frac{\Delta t}{T_{Lu}} \right)$$

$$R_{w,w}(\Delta t) = \frac{\langle w'^2 \rangle}{\sigma_w^2} = \exp \left( - \frac{\Delta t}{T_{Lw}} \right)$$

Una vez determinadas las fluctuaciones de las componentes de la velocidad de cada una de las partículas que constituyen el sistema físico, se calcula el vector velocidad de cada partícula como la suma del vector velocidad media más el vector fluctuación correspondiente. Multiplicando cada componente del vector velocidad por el paso de tiempo se obtiene el desplazamiento longitudinal y transversal que realizará cada partícula desde su posición anterior.

De acuerdo con el análisis de los aspectos críticos de este tipo de modelos lagrangianos realizado en el anterior apartado con una versión unidimensional, a continuación se resumen las condiciones introducidas en este esquema bidimensional. Como condiciones de contorno se eligen las de

reflexión perfecta para los casos de estratificación neutra y estable, mientras que en estratificación inestable o convectiva se añade el cambio de movimiento. Las condiciones iniciales se establecen, igualmente, en función de la estratificación atmosférica, de manera que en condiciones neutras y estables las fluctuaciones iniciales de la velocidad de cada partícula son valores correspondientes a una fdp gaussiana de media cero y desviación estándar  $\sigma_u$  y  $\sigma_w$  (iguales a las correspondientes a  $u'$  y  $w'$ ), y en condiciones convectivas se incorpora, además, un movimiento inicial (ascendente o descendente) a cada una de las partículas que constituyen el sistema.

Las expresiones empíricas de las desviaciones estándar y las escalas de tiempo lagrangianas correspondientes a las dos componentes de la velocidad son las elegidas en el estudio unidimensional, dependiendo de la categoría de estabilidad de la estratificación atmosférica. En situaciones convectivas, además, se debe considerar el sesgo, cuya expresión empírica está referenciada en Baerentsen y Berkowicz (1984).

La velocidad media de arrastre se considera únicamente en estratificaciones atmosféricas convectivas. Su expresión corresponde a la propuesta por Legg y Raupach (1982), pero incorporando las indicaciones de Baerentsen y Berkowicz (op. cit.) según sea el tipo de movimiento de la partícula.

En estratificación estable o neutra la función de densidad de probabilidad es una gaussiana de media cero y desviación estándar correspondiente. En estratificación atmosférica inestable la fdp es la propuesta por Baerentsen y Berkowicz (op. cit.).

### 3.3.1. Comparación con un modelo de penacho gaussiano.

Como anteriormente se ha señalado, los modelos de penacho gaussiano sólo ofrecen resultados satisfactorios en caso de condiciones atmosféricas ideales, bajo las cuales la concentración media de contaminantes emitidos desde una fuente puntual se adecua a una distribución gaussiana. Estas condiciones ideales corresponden a la siguiente situación: turbulencia atmosférica estacionaria y homogénea, velocidad de viento constante en altura y superior a 1 m/s, terreno llano sin obstáculos, reflexión especular del penacho en el suelo, y contaminantes inertes sin flotabilidad. De acuerdo con lo señalado en anteriores apartados, la expresión para calcular la distribución de concentraciones en caso de un penacho bidimensional (en el plano x,z), con reflexión perfecta en el suelo, emitido desde un foco a una altura "h" sobre el suelo y arrastrado por un viento medio igual a  $\bar{U}$  siguiendo el eje x, resulta

$$c(x, z) = \frac{S}{(2\pi)^{1/2} \bar{U} \sigma_z} \left[ \exp\left(-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right]$$

Uno de los aspectos más críticos de los modelos de penacho gaussiano está en las expresiones que se elijan para valorar el parámetro  $\sigma_z$ . Existen numerosas expresiones propuestas por diversos autores, establecidas generalmente a partir de medidas de concentración en situaciones reales. En

la tabla 14.2 de Seinfeld (1986) se puede encontrar las expresiones más utilizadas. De entre ellas se han elegido las propuestas por Klug (1969), ya que corresponden a concentraciones promedio en periodos de 10 minutos, lo que evita realizar simulaciones prolongadas con el modelo lagrangiano para comparar sus resultados con los del penacho gaussiano, objetivo que se persigue en este apartado. Concretamente los valores del parámetro sigma se calculan mediante la expresión:

$$\sigma_z = c \cdot x^d$$

donde x representa la distancia longitudinal a la fuente emisora y los coeficientes dependen de la categoría de estabilidad de Pasquill. En este caso concreto se han considerado las categorías B, D y E correspondientes, respectivamente, a estratificaciones de carácter moderadamente inestable, neutra y moderadamente estable, de manera que:

<u>Categoría</u>	<u>c</u>	<u>d</u>
B	0.072	1.021
D	0.140	0.727
E	0.217	0.610

Las restantes condiciones de la simulación con el penacho gaussiano son:

- Altura sobre el suelo del foco emisor: 55 m
- Potencia de la emisión: 50 g/s
- Velocidad media del viento a 10 m de altura: 4 m/s

Como en los modelos de penacho gaussiano se supone viento constante con la altura, el valor correspondiente a  $\bar{U}$  en la expresión matemática debe ser el observado a la altura del foco emisor. Por ello, para cada categoría de estabilidad se ha deducido tal valor a partir de las expresiones del gradiente vertical del viento de Businger, mencionadas en el apartado 2.1. que se incluyen en la figura 3.3.1.1. De acuerdo con ello, resulta  $\bar{U} = 7.3$  m/s para la categoría E,  $\bar{U} = 5.2$  m/s para la D y  $\bar{U} = 4.3$  m/s para la B.

Los resultados obtenidos con la ecuación de penacho gaussiano se compararán con los resultados proporcionados por el modelo lagrangiano de partículas con las siguientes condiciones de simulación:

Altura de la fuente emisora: 55 m  
 Rugosidad superficial: 0.03 m.  
 Emisión: 5 partículas por segundo.  
 Masa de cada partícula: 10 g  
 Paso de tiempo: 1 segundo.  
 Viento medio a 10 m sobre el suelo: 4 m/s.

Con ese valor del viento medio, la nube de partículas lagrangianas se puede considerar como penacho continuo a distancias inferiores a 2500 m del foco emisor, cuando el periodo de simulación es de cuarenta minutos, según recomiendan Hanna et al. (1982).

En el modelo lagrangiano de partículas se suponen los perfiles verticales de viento de Businger mencionados en el apartado 2.1., que se representan en la figura 3.3.1.1. La variabilidad vertical del viento solamente se impone a alturas inferiores a la cima de la CLP. Por encima de esta altura se supone viento constante con la altura, con un valor

correspondiente al de la cima de la CLP.

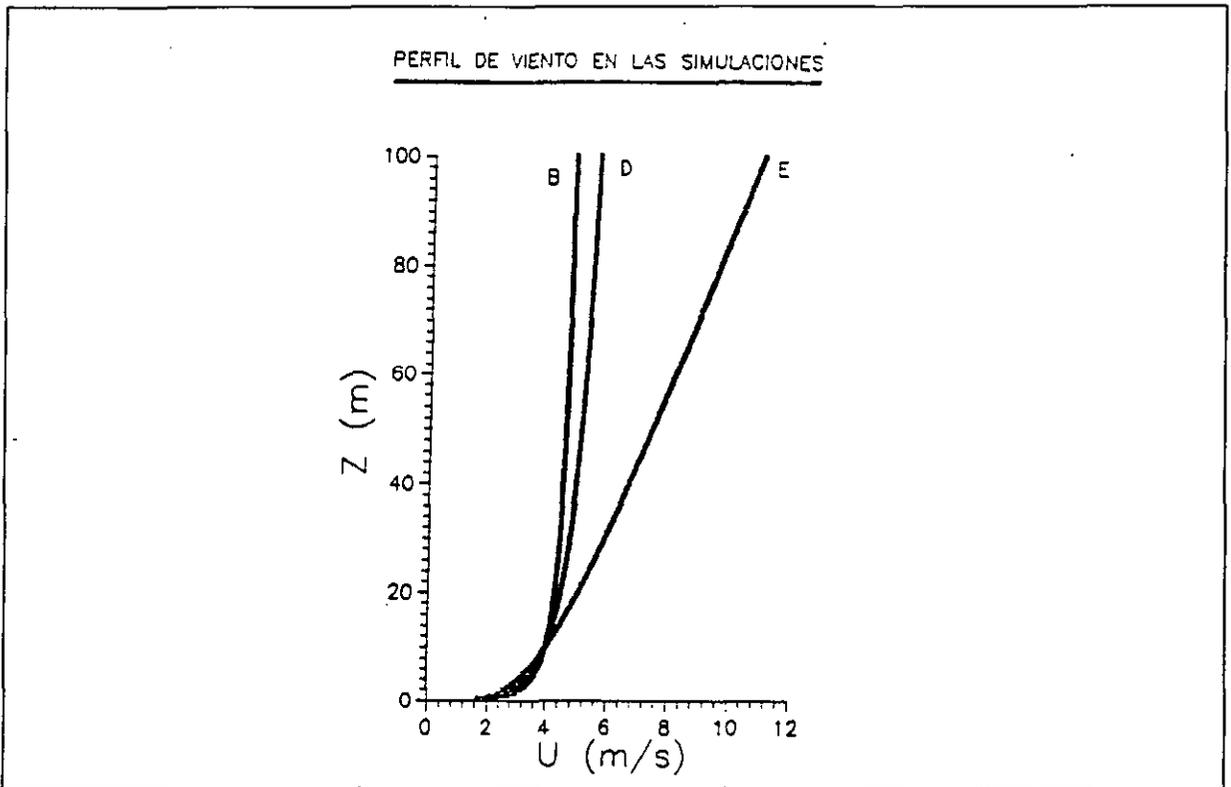


Figura 3.3.1.1. Perfiles de la velocidad horizontal del viento en las categorías B, D y E, considerando que su valor es de 4 m/s a 10 m de altura.

Las velocidades de fricción ( $u_*$ ) resultantes de estos perfiles de viento para cada categoría de estabilidad son: para la categoría B 0.33 m/s, para la categoría D 0.28 m/s y para la categoría E 0.23 m/s. Asimismo, las longitudes de Monin-Obukhov (L) en las tres categorías son: -14.3 m para la categoría B, valor infinito para la D y 50.0 m para la E.

Los espesores de la CLP en cada categoría de estabilidad son:

Categoría B	$H = 1000 \text{ m}$
Categoría D	$H = 0.2 u_* / f = 584.3 \text{ m}$
Categoría E	$H = 0.4 (u_* L / f)^{1/2} = 87.6 \text{ m}$

siendo  $f$  el parámetro de Coriolis.

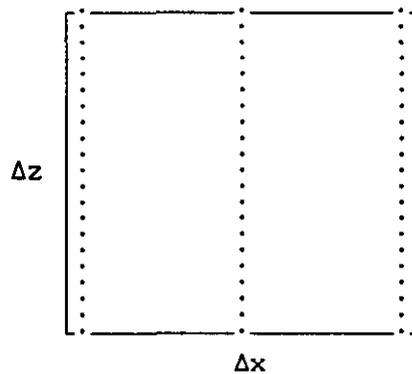
Para las desviaciones estándar y escalas de tiempo lagrangiana se consideran las propuestas en el capítulo 3.2. según la categoría de estabilidad, suponiendo unos valores de fondo a alturas superiores al 90% de la cima de la CLP, que corresponden a los valores de estas variables a  $0.9 \cdot H$ .

Las condiciones iniciales y de contorno del modelo lagrangiano corresponden a las seleccionadas en el capítulo 3.2. para cada una de las

estratificaciones atmosféricas. En condiciones inestables se tiene en cuenta la velocidad media de arrastre.

Las concentraciones promedio se realizan recontando las partículas presentes dentro de celdillas con una tamaño uniforme de  $\Delta x = 50$  m y  $\Delta z = 10$  m a lo largo de un periodo de 10 minutos (entre 20 y 30 minutos desde el inicio de la simulación), dividiendo posteriormente ese número por el area de cada celdilla ( $500 \text{ m}^2$ ) y por el número total de pasos de tiempo a lo largo de dicho periodo (600).

Para comparar este resultado con el de un modelo de penacho gaussiano hay que tener en cuenta que en éste se determina la concentración media en zonas puntuales. Por ello, se han calculado con la expresión del penacho gaussiano los valores de concentración en 60 puntos dentro de cada cuadrícula de  $\Delta x=50$  m,  $\Delta z=10$  m, según se indica en este gráfico,



realizando posteriormente un promedio aritmético. Si se deseara mayor precisión, el número de puntos debe incrementarse. Este procedimiento permite la comparación del modelo de penacho gaussiano con el modelo lagrangiano.

En la figura 3.3.1.2. se muestran los resultados obtenidos con ambos modelos: (a) para el modelo de penacho gaussiano y (b) para el modelo de partículas lagrangiano. En ella se aprecia la semejanza en la distribución de concentraciones que resulta con ambos modelos, aunque existen algunas discrepancias en los valores numéricos de concentración. Esto puede deberse a que, como se ha comentado más arriba, el procedimiento para asignar concentraciones es diferente en ambos casos. Tampoco debe olvidarse que, aunque se ha intentado que todas las condiciones atmosféricas fueran iguales en ambas simulaciones, en el caso del modelo lagrangiano no ha sido posible considerar un viento constante en altura como en el de penacho gaussiano.

En la categoría estable E, se observa un comportamiento similar, aunque a la altura de la fuente la concentración media lagrangiana es superior cuantitativamente a la gaussiana y llega a mayores distancias.

En la categoría de estratificación neutra D, también, se observan semejanzas, aunque se aprecia que a la altura de la fuente el modelo lagrangiano ofrece una mayor concentración cerca de la misma.

Finalmente, en la categoría de estratificación B se refleja un comportamiento algo menos similar que en los otros dos casos, en especial cerca del suelo donde el modelo de partículas refleja una mayor

concentración cerca de la fuente ( $x < 700$  m) y menores valores a distancias superiores. Estas diferencias más marcadas bajo categoría inestable eran de esperar por cuanto es bien conocido que los resultados que ofrece un modelo gaussiano en estas condiciones de estratificación son deficientes.

No obstante, a pesar de las diferencias observadas entre los resultados de ambos modelos, en parte achacables a los distintos métodos de cuantificar la concentración media por unidad de área y perfiles verticales del viento, puede considerarse que bajo ciertas condiciones ideales el modelo de partículas se comporta de modo semejante al de penacho gaussiano. Esto refleja la superioridad del primero frente al segundo, por cuanto no requiere la imposición de hipótesis poco realistas.

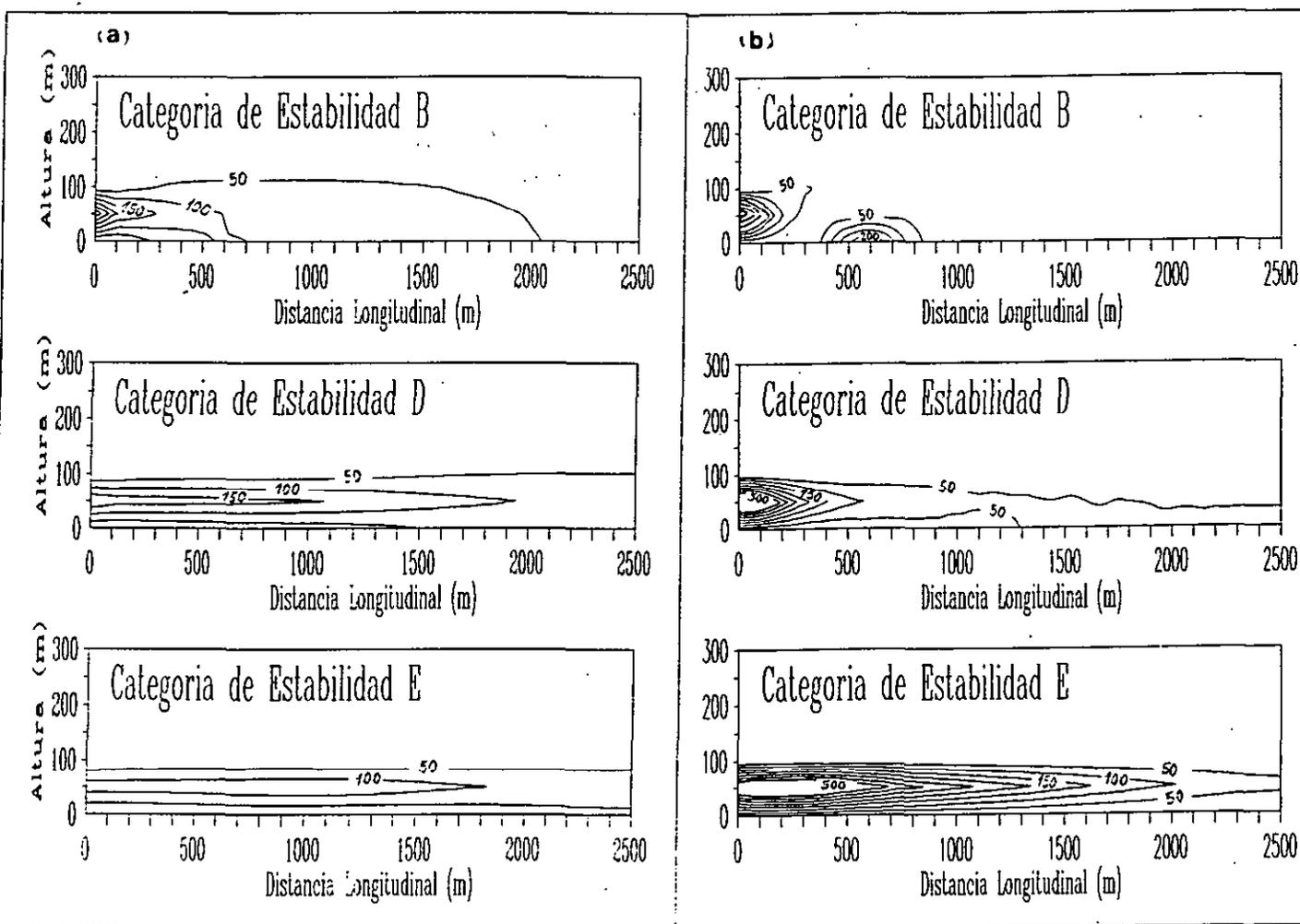


Figura 3.3.1.2. Isolíneas de concentración media de un penacho continuo. (a) Modelo gaussiano y (b) modelo de partículas lagrangiano. La isolínea de concentración máxima es de  $350 \mu\text{g}/\text{m}^2$ , la mínima de  $50 \mu\text{g}/\text{m}^2$  y el intervalo es de  $50 \mu\text{g}/\text{m}^2$ .

### 3.3.2. Capa Límite Convectiva.

Actualmente se poseen suficientes evidencias de que el comportamiento de penachos en condiciones convectivas difiere en función de la altura de la fuente (Willis y Deardorff, 1976, 1978; Brigg, 1993; entre otros). Cuando la fuente se encuentra cerca del suelo, o no supera un cierto tamaño, que posiblemente sea función de la intensidad de la convección, el penacho de contaminantes asciende de forma continua, de manera que la concentración en el suelo decrece monótonicamente con la distancia al foco. Sin embargo, los penachos emitidos desde fuentes puntuales cuya altura supere dicho tamaño crítico, son abatidos hacia abajo, de forma que a cierta distancia del foco es donde se observan las máximas concentraciones junto al suelo. En este apartado se intentará simular dicho comportamiento con la versión bidimensional del modelo de partículas lagrangiano que se propone, aplicándolo a dos penachos emitidos de forma continua desde una foco junto al suelo y otro a una altura de 240 metros.

Las condiciones consideradas en ambos casos fueron:

- (\*) Condiciones de contorno: Reflexión perfecta más cambio en el tipo de movimiento en el suelo y altura CLC.
- (\*) Condiciones iniciales: Fluctuaciones de las dos componentes de la velocidad de dos fdp gaussianas. Asignación de un tipo de movimiento a todas las partículas que van a configurar el penacho.
- (\*) Varianza y escala de tiempo lagrangiana: Expresiones de Hanna (1982).
- (\*) Velocidad media de arrastre: Propuesta por Legg y Raupach (1982) siguiendo el criterio de Baerentsen y Berkowicz (1984).
- (\*) Función de densidad de distribución de velocidad: Para la componente horizontal una fdp gaussiana y la propuesta por Baerentsen y Berkowicz para la componente vertical.
- (\*) Velocidad de emisión: 5 partículas por segundo
- (\*) Paso de tiempo: 0.2 segundos
- (\*) Velocidad de fricción: 0.2 m/s
- (\*) Longitud de Monin-Obukhov: - 5 m
- (\*) Rugosidad superficial: 0.2 m
- (\*) Espesor de capa convectiva: 1000 m

#### 3.3.2.1. Fuente emisora en el suelo.

En la figura 3.3.2.1.1. se muestra en tres momentos concretos la situación instantánea de las partículas que constituyen el penacho. A los diez minutos, y con anterioridad, ya se manifiesta la tendencia ascendente del penacho, que se confirma en tiempos posteriores. Otra de las características que se pone de manifiesto en estos tres instantes es la fuerte acumulación de partículas en el suelo y alrededor de la fuente, incluso en distancias horizontales negativas ( $\pm 75$  m a los 30 min). Este

comportamiento ascensional del penacho se ha observado en los experimentos de laboratorio de Willis y Deardorff (1976), los cuales situaron el foco a las alturas adimensionales de 0.067 y 0.050, equivalentes a 67 m y 50 m si la altura de la capa convectiva es de 1000 m.

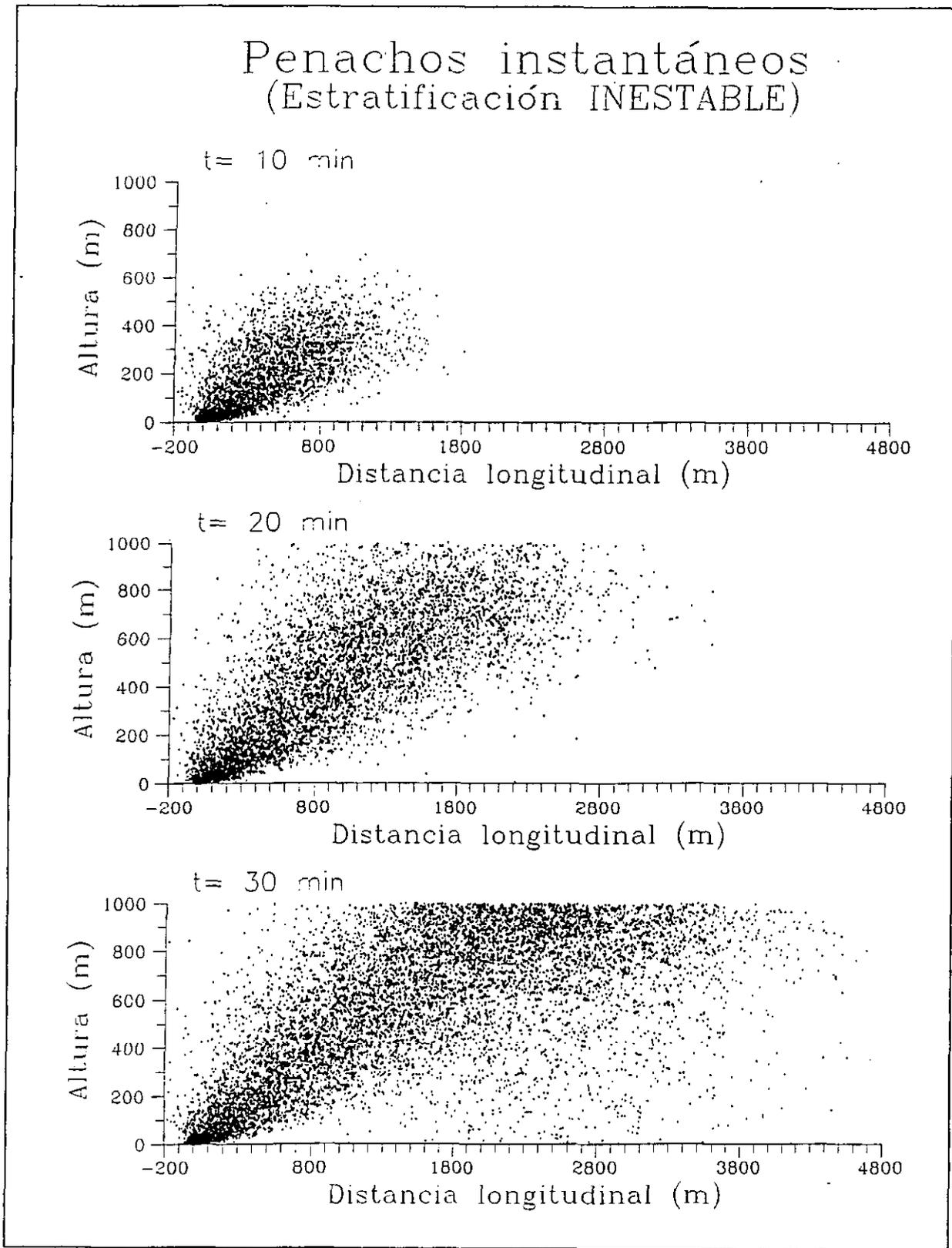


Figura 3.3.2.1.1. Penachos instantáneos a 10 min, 20 min y 30 min.

En la figura 3.3.2.1.2. se representan las isolíneas de concentración media, en partículas por metro cuadrado, en un intervalo de tiempo entre  $t_0$  y  $t_1$ . Además de confirmarse los resultados antes comentados de los penachos instantáneos, se observa que la pendiente del eje del penacho aumenta con el tiempo. En la figura se representan isolíneas que expresan número de partículas  $\times 10^{-3}/m^2$ . Para obtener la concentración en  $mg/m^2$ , se debe multiplicar ese número por la masa asignada a cada partícula.

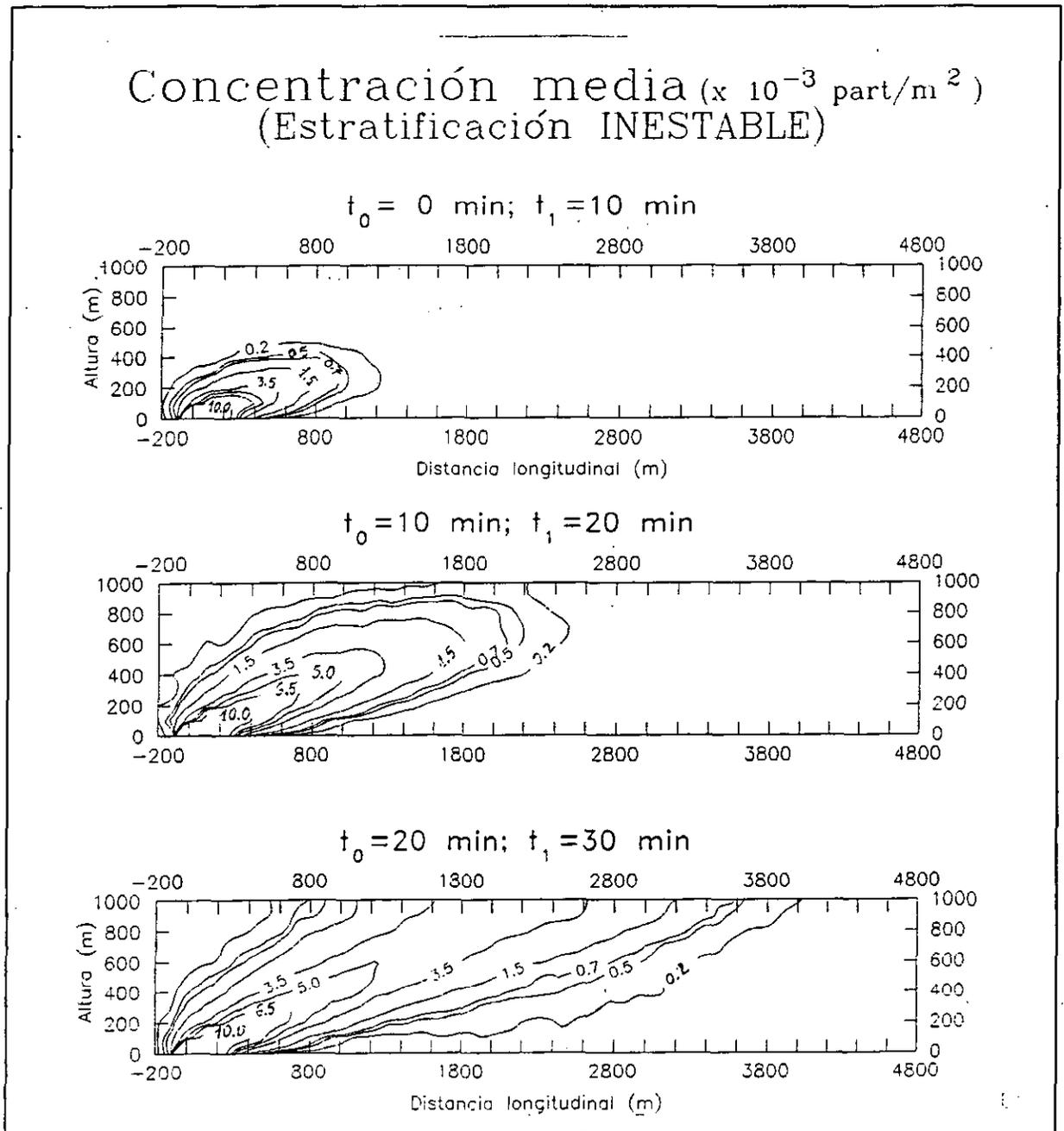


Figura 3.3.2.1.2. Isolíneas de concentración media de diez minutos.

### 3.3.2.2. Fuente en altura (240 m).

En la figura 3.3.2.2. se representan tres penachos instantáneos a 10, 20 y 30 minutos. El comportamiento del penacho difiere del anterior, lo que concuerda con el comportamiento observado en la realidad y en experimentos de laboratorio a escala, como se ha comentado más arriba. Mientras que en el caso del foco situado junto al suelo el penacho asciende continuamente, en caso de un foco a 240 m de altura la mayor parte del penacho resulta abatido hacia el suelo mientras que otra parte menos importante asciende, es decir el penacho se desdobra en dos. Este desdoblamiento provoca que a distancias superiores a 300 m, la distribución vertical de concentración tenga dos máximos.

La concentración máxima cerca del suelo no se sitúa en las proximidades de la fuente, sino a distancias superiores a los 500 m., mientras que a partir de aproximadamente de 1100 metros la concentración desciende con rapidez.

## Penachos instantáneos (Estratificación INESTABLE)

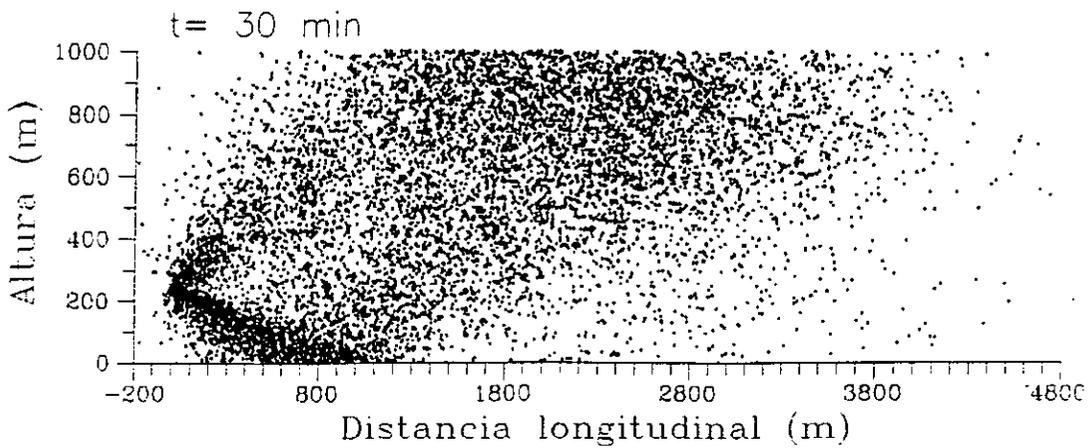
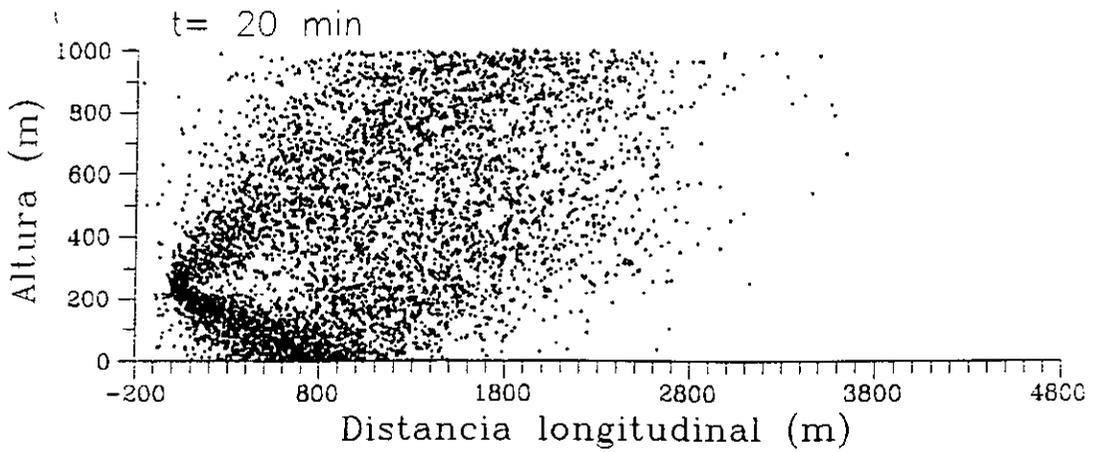
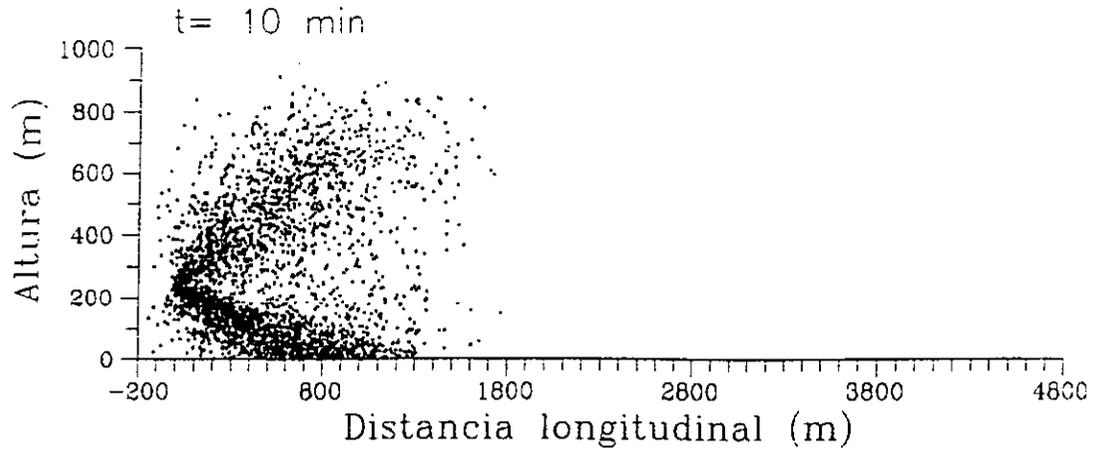


Figura 3.3.2.2.1. Penachos instantáneos a 10 min, 20 min y 30 min.

En la figura 3.3.2.2.2 se muestran las isolíneas de concentración media en intervalos de diez minutos. En ella se observa claramente el abatimiento hacia el suelo del penacho, así como el pequeño desdoblamiento en la vertical, de forma que, en el intervalo temporal entre 20 y 30 minutos, el valor máximo junto al suelo se alcanza a una distancia entre 700 y 800 metros a sotavento de la fuente. A partir de esa zona el penacho vuelve a elevarse, decreciendo notablemente la concentración de partículas junto al suelo. En esta figura se pone también de manifiesto un pequeño desdoblamiento del penacho en la vertical.

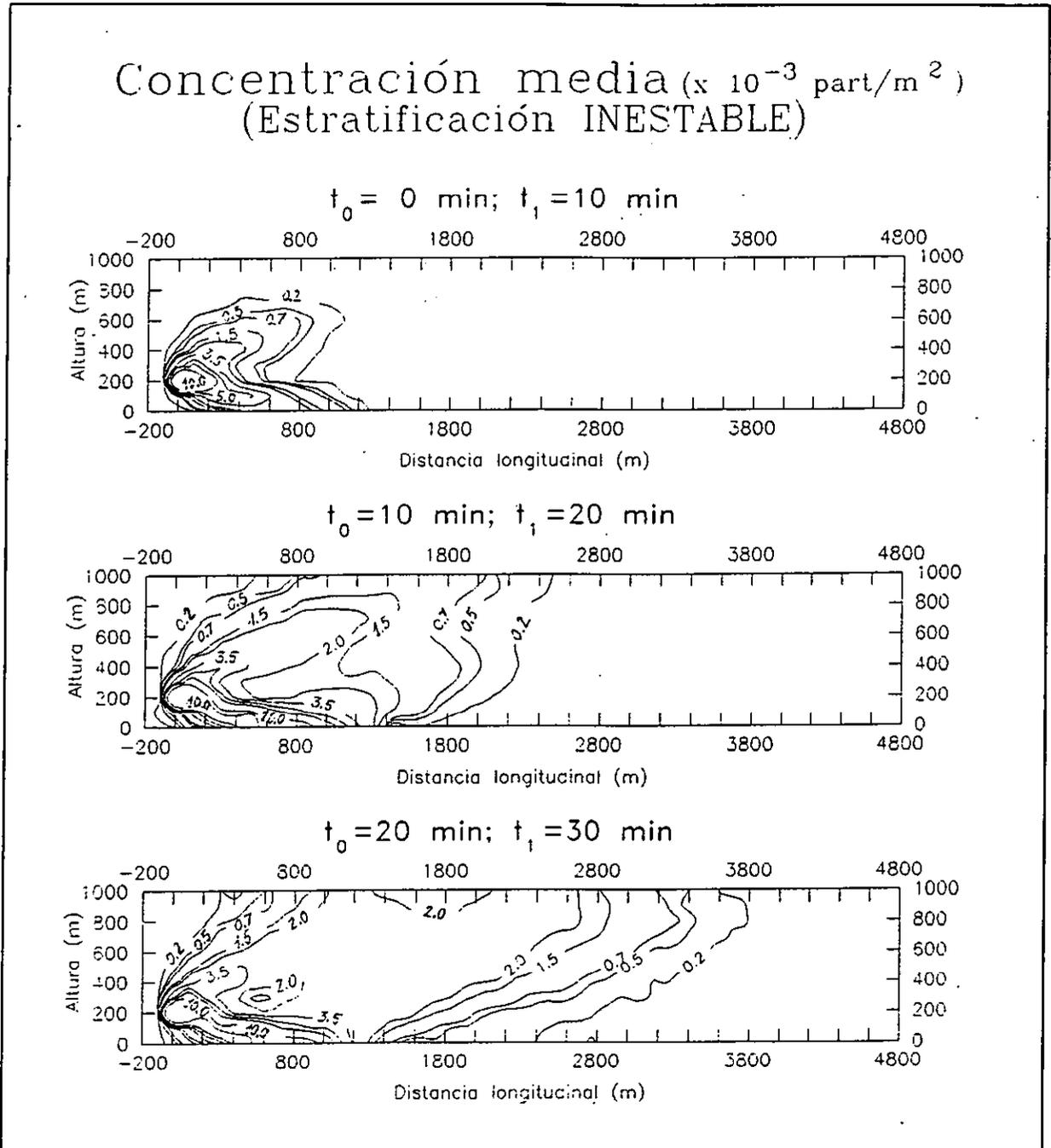


Figura 3.3.2.2.2. Isolíneas de concentración media cada diez minutos.

Con objeto de observar este efecto más claramente, en la figura 3.3.2.2.3. se representan las distribuciones horizontales de la concentración media entre el suelo y 50 metros de altura, en periodos de 10 minutos, obtenidas en las simulaciones con el foco emisor situado junto al suelo y a 240 m de altura. En el primer caso se observa un fuerte pico de concentración en  $x=0$ , que decrece casi exponencialmente hasta llegar a ser nula a distancias superiores a 500 metros. También se aprecia que en distancias negativas, es decir a barlovento del foco, existe una pequeña concentración de partículas. En los experimentos CONDORS realizados en atmósfera libre, que se comentan en el siguiente apartado, Eberhard y Moninger (1988) y Briggs (1993) también han obtenido concentraciones no nulas a barlovento de focos emisores junto al suelo.

En el caso de que el foco se sitúe a 240 m de altura, el máximo de concentración en las cercanías al suelo se encuentra en torno a 800 metros, como ya se ha comentado. A partir de los 1500 metros la concentración media tiende a ser uniforme (ver curva a). Esta uniformidad está motivada por la eficacia de mezcla de los movimientos convectivos, como se indicó en el apartado 3.2.1. Willis y Deardorff (1976) analizaron la concentración vertical de partículas a diversas distancias de la fuente y observaron esta misma tendencia a la uniformidad bajo condiciones de mezcla convectiva.

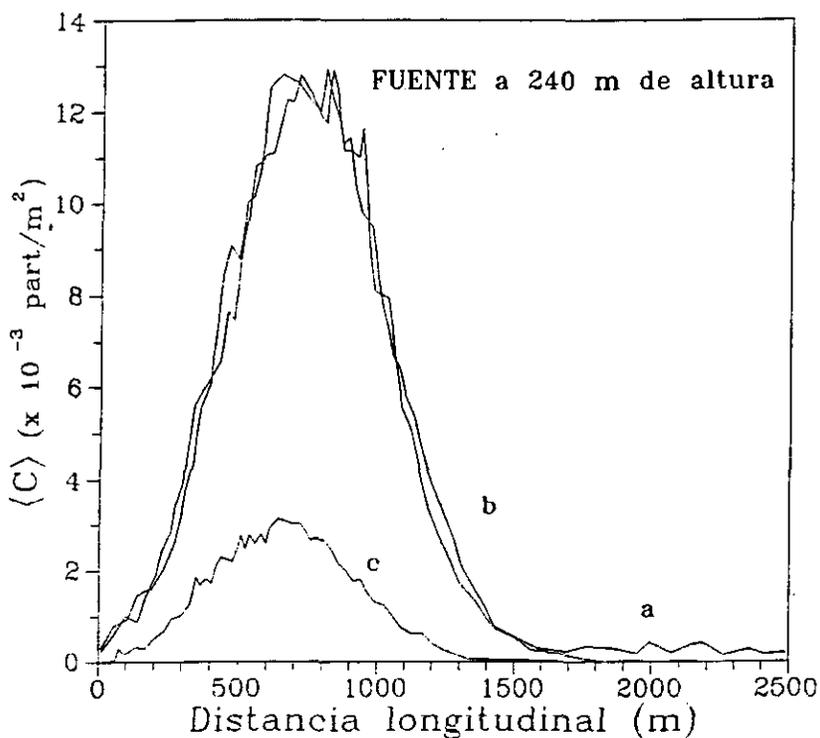
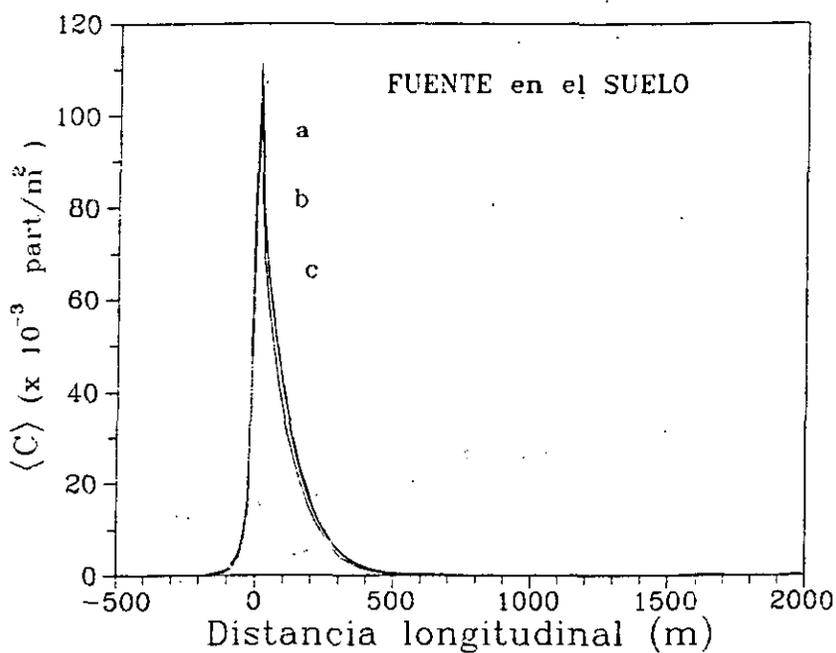


Figura 3.3.2.2.3. Concentración media entre el suelo y 50 metros. El intervalo de tiempo en el que se establece la concentración media es: (a) entre 30 y 20 minutos, (b) entre 20 y 10 minutos y (c) entre 0 y 10 minutos.

Por último, en la figura 3.3.2.2.4. se representan las trayectorias del centro de masa en ambos experimentos, poniéndose de manifiesto que en el caso de foco junto al suelo el penacho se eleva siguiendo una trayectoria con mayor pendiente. En ambos casos se observa que a partir de una determinada distancia, el centro de masas del penacho se mantiene a una altura constante. Baerentsen y Berkowicz (op. cit.), entre otros, obtienen los mismos resultados con su modelo.

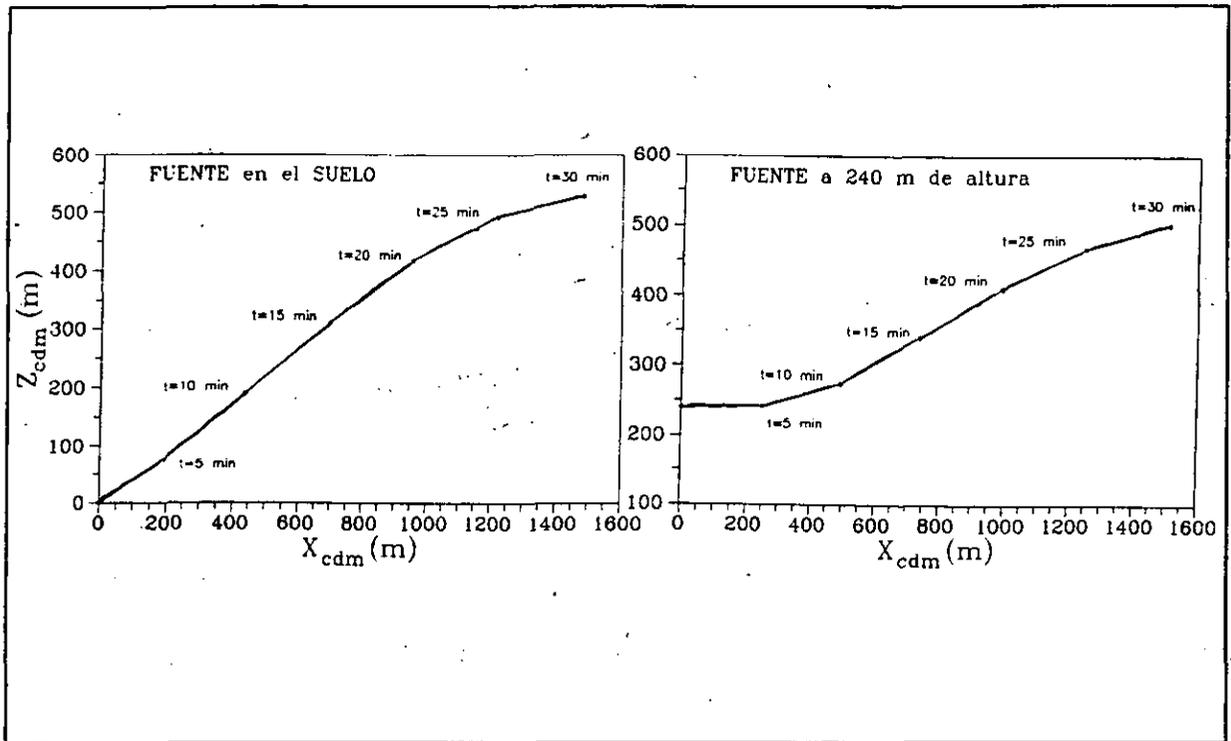


Figura 3.3.2.2.4. Trayectoria del centro de masa.

En las series CONDORS de medidas de concentración de penachos en condiciones convectivas (Eberhard y Moninger, 1988 y Briggs, 1993) se han obtenido concentraciones no nulas en distancias negativas. Estas distancias son iguales a las que se obtienen en nuestra simulación ( $\approx -200$ m). Sin embargo, no se indica el desdoblamiento del penacho que se simula. No obstante, este desdoblamiento de penachos se ha observado en la realidad bajo condiciones convectivas.

### 3.3.2.3. Comparación con el proyecto CONDORS.

Para tratar de verificar los resultados obtenidos en caso de fuente elevada, a continuación se van a comparar con los datos recogidos en una de las más recientes observaciones realizadas en atmósfera libre bajo condiciones convectivas.

Los experimentos del proyecto CONDORS se diseñaron para tratar de confirmar el comportamiento no gaussiano de los penachos observados en laboratorio. Esta serie de experimentos se llevaron a cabo en Boulder (Colorado, USA) durante dos campañas, la primera en Septiembre de 1982 y la

segunda en Agosto y Septiembre de 1983. La primera parte de estos experimentos de campo se publicaron en 1988 por Eberhard y Moninger, aunque en su artículo no reflejan datos suficientes sobre las características no gaussianas como para tratar de simularlos con un modelo. Sin embargo, en la segunda parte publicada recientemente por Briggs (1993) se describen con mayor detalle los ensayos realizados durante la segunda campaña, lo que nos ha permitido realizar una simulación con el modelo lagrangiano descrito en esta Memoria bajo las mismas condiciones atmosféricas observadas en la realidad.

Para ello, se ha elegido concretamente el experimento número 34 realizado el 31 de Agosto de 1983. Este experimento se realizó emitiendo de forma continua durante 50 minutos una nube de partículas metálicas de pequeño tamaño desde una altura de 280 metros, cuyo comportamiento fué seguido mediante un radar. Las otras condiciones del experimento fueron:

viento medio en toda la capa convectiva  $\bar{U} = 1.9$  m/s  
altura de la capa límite  $H = 1100$  m  
escala de velocidad convectiva  $w_* = 1.88$  m/s

Considerando estos datos, se estableció el resto de las variables de entrada que precisa el modelo lagrangiano bidimensional. Ante el desconocimiento de la rugosidad superficial se consideró un valor de 0.10 m, lo que implica una velocidad de fricción de 0.237 m/s, y una longitud de Monin-Obhukov de -5.5 m.

La emisión de partículas considerada en el modelo lagrangiano es de 4 partículas por segundo y el paso de tiempo de 0.25 segundos, de forma que a lo largo de los cincuenta minutos del experimento se deben emitir 12000 partículas. Finalmente, para simular este caso se consideraron dos condiciones iniciales diferentes:

- a) Suponiendo que  $u'(t-1)$  y  $w'(t-1)$  en  $t=0$  no son nulas, que corresponde a la seleccionada en las simulaciones unidimensionales del apartado 3.2.1.
- b) Suponiendo que inicialmente  $u'(t-1)=w'(t-1)=0$ .

En la figura 3.3.2.3.1. se pueden observar los resultados obtenidos con el modelo propuesto en las dos simulaciones mencionadas junto con los del experimento CONDORS. Estos últimos se presentan con dos figuras, una correspondiente a las observaciones reales, promediadas a lo largo de la dirección transversal al viento medio, y la otra despues de efectuar una corrección para no tener en cuenta el efecto de la velocidad de deposición gravitatoria de las partículas metálicas (0.3 cm/s) en el comportamiento del penacho, utilizando un método llamado CPP que se describe en Briggs (op. cit.). En todas estas figuras el eje de abscisas representa la distancia normalizada  $(w*/U)(x/H)$ , el de ordenadas la altura normalizada  $z/H$  y las isolíneas corresponden a una concentración normalizada, que se determina según la expresión  $(H \cdot U/E) \cdot c$ , siendo "c" la concentración.

Esta comparación pone de manifiesto que las dos simulaciones con el modelo reproducen de forma satisfactoria el abatimiento hacia el suelo del

penacho en las proximidades de la fuente, tal como se aprecia en las observaciones. Sin embargo, hay un aspecto que difiere según se considere una u otra simulación. El desdoblamiento del penacho que resulta en el caso con las condiciones iniciales que mejores resultados ofrecen en simulaciones unidimensionales, no aparece en las observaciones CONDORS antes de efectuar ninguna corrección por deposición. Mientras que en el caso con condiciones iniciales más simples el resultado de la simulación se ajusta notablemente bien al del experimento CONDORS sin corrección. Pero si se consideran los resultados de las observaciones CONDORS corregidas por el efecto de deposición, la simulación que parece ajustarse mejor es la del caso con las condiciones iniciales antes seleccionadas. No obstante, hay que tener en cuenta la advertencia de Briggs sobre la fiabilidad del método de corrección CPP, que aconseja no considerar el pequeño desdoblamiento que resulta, achacándolo a causas numéricas espúreas.

En la misma figura 3.3.2.3.1 se presentan también resultados obtenidos por otros autores en experimentos y simulaciones de penachos elevados en condiciones convectivas. Concretamente, se incluyen los resultados de Willis y Deardorff (1976), que corresponden a una simulación a escala en un tanque de agua, y los obtenidos para este mismo caso por Lamb (1979) aplicando un modelo de "large-eddies". En ambos casos se aprecia el abatimiento del penacho hacia el suelo, sin que se observe ninguna bifurcación en la vertical.

En consecuencia, parece que el modelo propuesto simula mejor estos casos con unas condiciones iniciales más simples de las que se eligieron en el apartado. Luego, la selección de un determinado esquema o condición realizada con una versión unidimensional del modelo, no implica que éste sea también el más apropiado cuando la simulación se extiende a dos dimensiones.

Sin embargo, el aspecto fundamental del comportamiento observado por penachos elevados bajo condiciones atmosféricas convectivas (su abatimiento hacia el suelo en las proximidades de la fuente) es simulado de forma satisfactoria por el modelo descrito en esta Memoria. Las discrepancias entre las observaciones experimentales y los resultados del modelo con unas determinadas condiciones iniciales deben considerarse con un carácter secundario. Además, no deben olvidarse otras posibles causas responsables de tales discrepancias, entre las que podrían señalarse: (1) La distinción entre un penacho continuo y una bocanada), (2) La comparación entre los resultados de un modelo bidimensional con los de una proyección en el plano X-Z de un penacho tridimensional promediados temporalmente. El espectro de la turbulencia en dos y tres dimensiones difiere notablemente dentro de la CLP. (3) Los valores de la longitud de Monin-Obuhkov y de la velocidad de fricción introducidos en el modelo, de los que dependen magnitudes tan decisivas en el esquema como la varianza y escala de tiempo lagrangianas, no se corresponden con los de las observaciones.

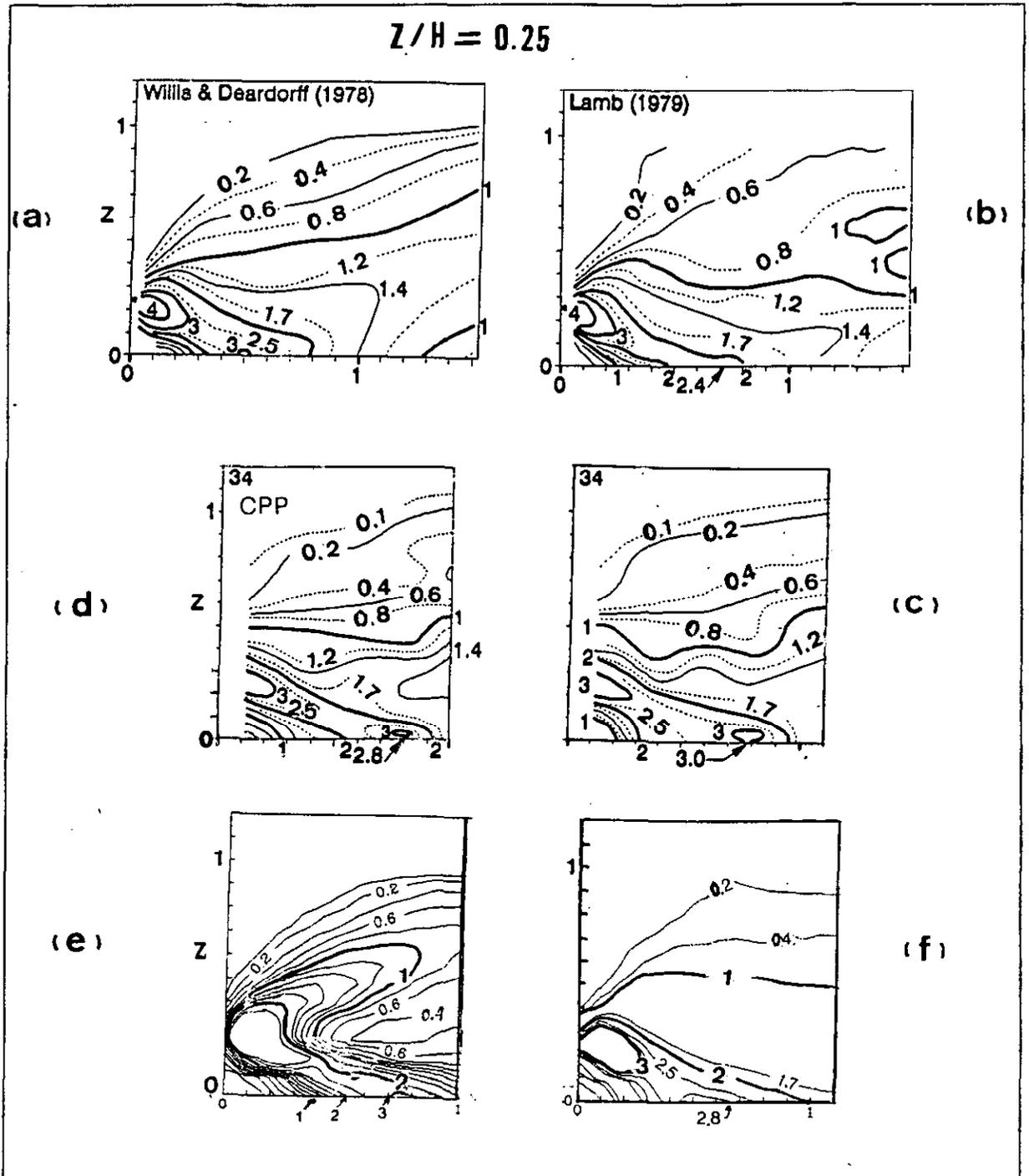


Figura 3.3.2.3.1. Resultados obtenidos por diferentes autores en comparación con los del modelo propuesto, en el caso de un penacho continuo bajo condiciones convectivas. (a) Simulaciones con tanque de agua de Willis y Deardorff (1976). (b) Simulaciones con un modelo "large-eddy" de Lamb (1979). (c) Experimento 34 del proyecto CONDORS, sin corrección por deposición. (d) Igual que (c) con corrección por el método CPP. (e) Simulación bidimensional con el modelo propuesto, con condiciones iniciales simples. (f) Igual que (e), con condiciones iniciales elegidas en el apartado 3.2.1. Las isolíneas son de concentración normalizada  $(H \cdot U/E) \cdot c$ , el eje de abscisas corresponde a distancias normalizadas  $(w^*/U)(x/H)$  y el de ordenadas a una altura normalizada  $(z/H)$ .

### 3.3.3. FUMIGACION.

El fenómeno de fumigación provoca la introducción progresiva de un penacho, inicialmente emitido en el seno de una capa estable, en una capa convectiva de espesor creciente (capa de mezcla). Como consecuencia de los movimientos convectivos en esta capa el penacho se mezcla en la vertical, dando como resultado elevadas concentraciones de contaminantes junto al suelo, de forma similar a como se ha reflejado en el apartado anterior.

Se han observado tres tipos de situaciones de fumigación. El primero, ya descrito en el Apartado 3.2.4, corresponde a la rotura de la inversión nocturna. El segundo es la fumigación que se produce en las costas en zonas costeras, también denominada fumigación advectiva, en donde el aire se mueve desde una región de baja turbulencia (rugosidad pequeña y/o condiciones estables sobre el mar) a una región de fuerte turbulencia (capa convectiva sobre el suelo). Ejemplos de la metodología lagrangiana del tipo Monte-Carlo aplicadas a casos de fumigación costera son los modelos de Kostrykov y Novitskii (1986) y Luhar y Britter (1990). Por último, existe un tercer tipo que aparece en áreas urbanas en donde existe una fuente de calor artificial. La simulación que presentamos en este apartado, al igual que en la simulación unidimensional, corresponde al primero de estos tres tipos.

Para realizar este experimento se acopla el modelo lagrangiano propuesto con un modelo meteorológico unidimensional de pronóstico (Fernández, 1992). Este modelo de pronóstico suministra ciertas magnitudes necesarias al modelo lagrangiano. Concretamente el modelo meteorológico proporciona la evolución temporal de la velocidad de fricción, el flujo de calor, la longitud de Monin-Obukov, la altura de la capa de mezcla y el viento horizontal en altura. Las condiciones de insolación consideradas en el modelo de pronóstico corresponden a un día 10 de Octubre, en una latitud de 40° N y sobre un suelo con las siguientes características:

Albedo: 0.21

Emisividad de onda larga: 0.92

Rugosidad superficial: 0.1 m

Inercia térmica del suelo:  $1463 \text{ J.m}^{-2}.\text{K}^{-1} \text{ s}^{-1/2}$

Este modelo discretiza verticalmente el dominio considerado en cuarenta capas de 25 m de espesor cada una. La ejecución con el modelo de pronóstico se inicia a medianoche, de manera que a la salida del sol la distribución vertical de la temperatura simulada es la que se presenta en la figura 3.3.3.1. En ella también se incluye la evolución temporal del espesor de la capa de mezcla proporcionado por el modelo meteorológico.

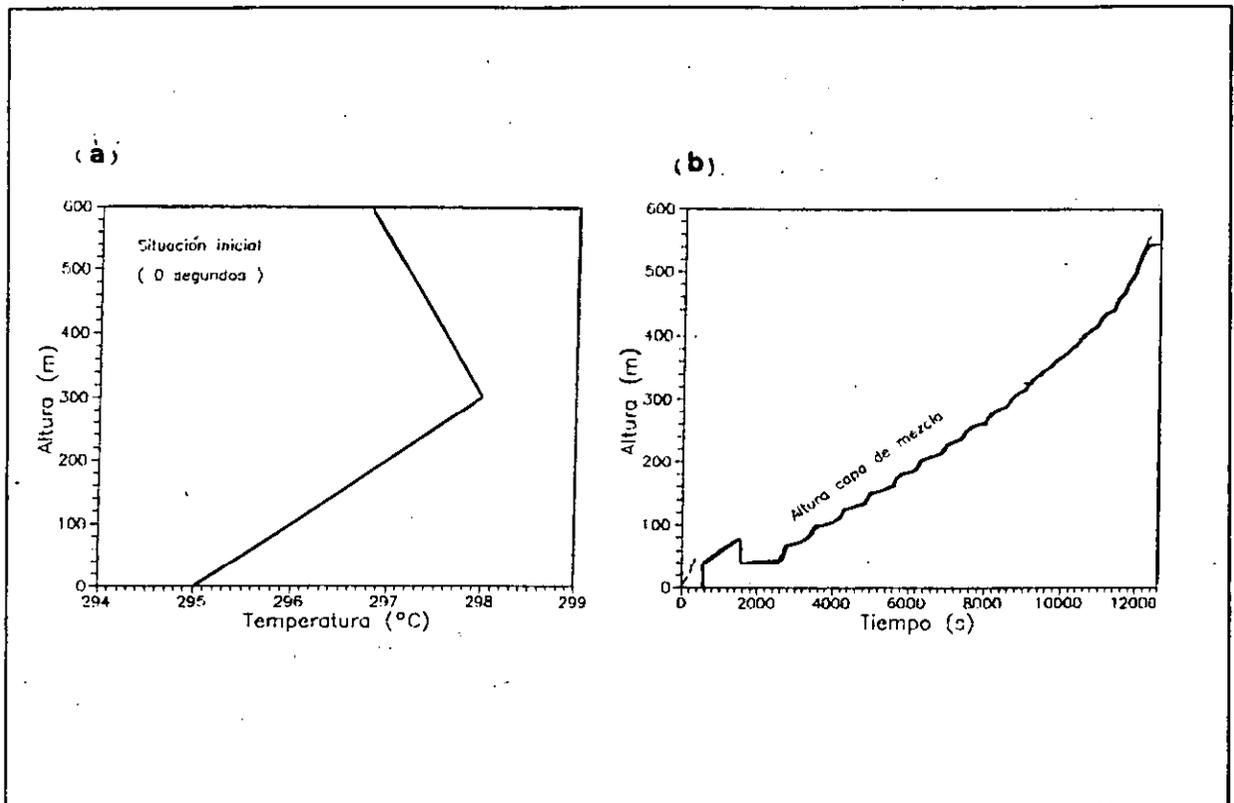


Figura 3.3.3.1. (a) Distribución térmica vertical simulada por el modelo meteorológico al amanecer (b) Evolución temporal del espesor de la capa de mezcla.

Las condiciones en que se realiza el modelo lagrangiano de partículas son las siguientes:

- (\*) Altura de la fuente: 60 m
- (\*) Velocidad de emisión: 2 partículas por segundo
- (\*) Paso de tiempo: 1 segundo
- (\*) Condiciones iniciales: Las que resultan de una simulación a lo largo de 2 horas de un penacho continuo emitido en una capa con estratificación muy estable :velocidad de fricción igual a 0.00795 m/s, altura de la CLP igual a 3.9 m y longitud de Monin-Obukov de 1.1 m. (Figura 3.3.3.2.a).
- (\*) Condiciones de contorno: De reflexión perfecta más cambio del tipo de movimiento dentro de la capa de mezcla.
- (\*) Parámetros de difusión: Obtenidos con las expresiones correspondientes a condiciones convectivas, con los datos de entrada suministrados por el modelo meteorológico. Por encima del 90% del espesor de la CLP se consideran unos valores de fondo constantes.  
Se suponen fdp gaussianas para las dos componentes de la velocidad (es decir sin sesgo en la vertical)

En la figuras 3.3.3.2. se muestra la evolución cada treinta minutos de la nube de partículas. En ellas se puede observar claramente el efecto de la fumigación sobre el penacho. Inicialmente (fig. b) la dispersión vertical es pequeña, ya que la capa convectiva no alcanza la altura de la fuente. Pero a partir del momento en que el tope de la capa convectiva supera la altura de la fuente, la dispersión vertical aumenta considerablemente, llegando a afectar al suelo a una cierta distancia a sotavento. Finalmente, se aprecia que las partículas se distribuyen de forma casi uniforme a lo largo de la CLP. En cada una de estas figuras se incluyen los valores del espesor de la capa de mezcla.

Con objeto de realizar una simulación más realista, se repitió el experimento anterior pero considerando ahora una fdp vertical con sesgo, al igual que en los experimentos realizados en apartados anteriores bajo condiciones convectivas. En la figura 3.3.3.3. se refleja la evolución temporal e instantánea del penacho en ambas simulaciones. En ella se pone de manifiesto que, mientras en el experimento sin sesgo el eje del penacho se mantiene más o menos paralelo al suelo, cuando se considera el sesgo el eje asciende dentro de la capa convectiva, dando lugar finalmente a una distribución vertical más uniforme.

En la figura 3.3.3.4 se reflejan las isolíneas de concentración media en treinta minutos en el periodo de 3600 y 9000 segundos, suponiendo que cada una de las partículas tiene una masa de 1 gramo. En (a) se muestra el resultado del experimento sin sesgo vertical y en (b) el que corresponde a unas condiciones óptimas establecidas en el estudio de la convección unidimensional (subapartado 3.2.1.B). En la primera de ellas, (a), se vuelve a manifestar el paralelismo al suelo del eje del penacho, provocando un aumento de la concentración por debajo de los cien metros con respecto a la situación (b). Analizando la simulación (b), además, se manifiesta una mayor apertura del penacho respecto a (a), lo que representa una concentración superior a partir de los cien metros. Además, se continúa manteniendo la progresiva elevación del eje que es causante del descenso de concentración junto a suelo, a cualquier distancia de la fuente. Esta tendendia del eje del penacho a ascender se ha observado con penachos tipo "puff" situados a la altura de 67 m, que han sido modelados por Willis y Deardorff (1976) en laboratorio y por otros esquemas lagrangianos como, por ejemplo, el propuesto por Baerentsen y Berkowicz (1984).

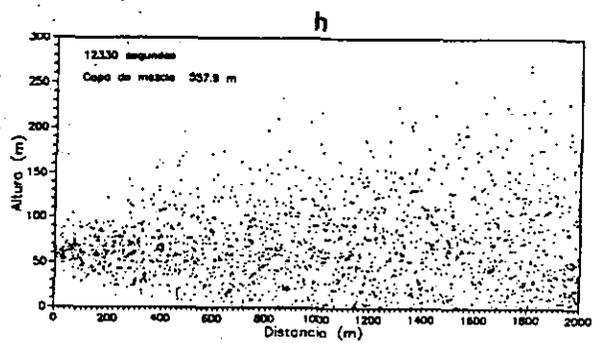
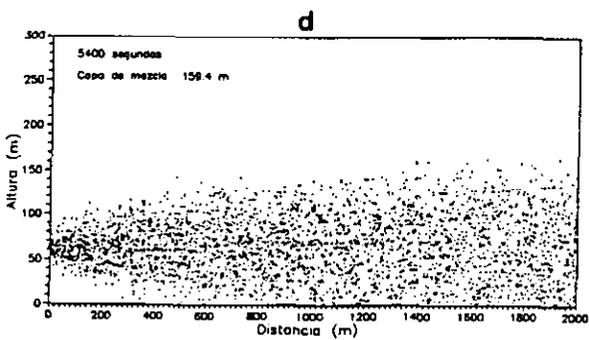
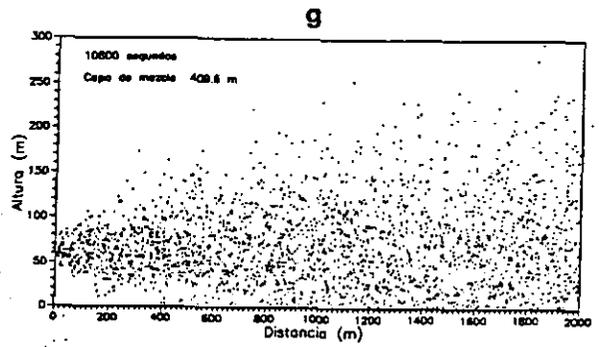
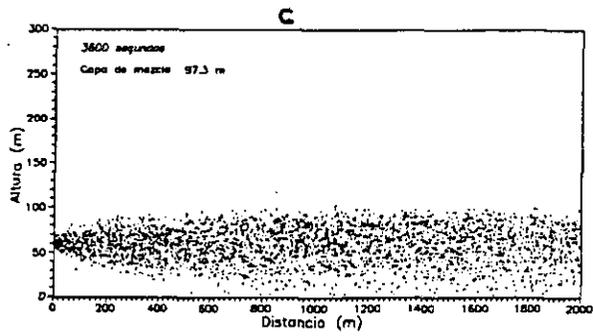
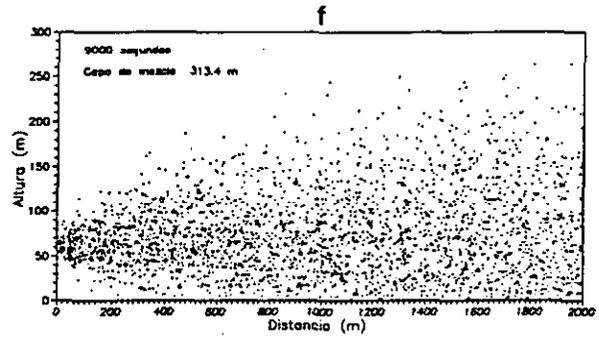
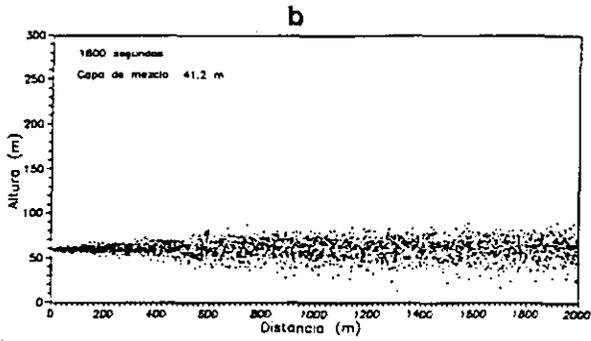
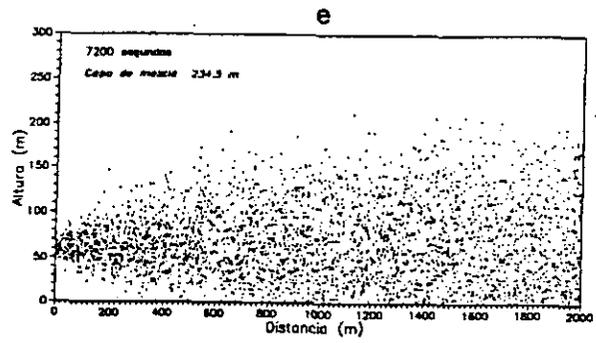
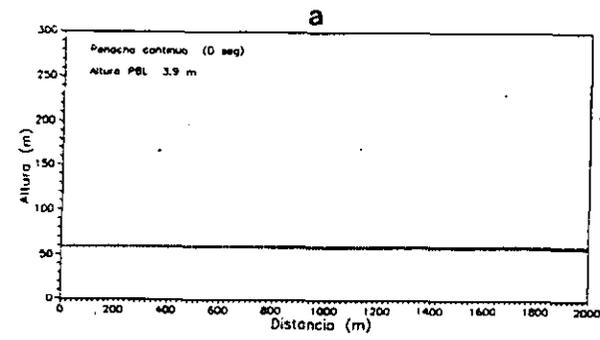


Figura 3.3.3.2. (a) Penacho inicial. (b-h) Evolución del penacho cada treinta minutos.

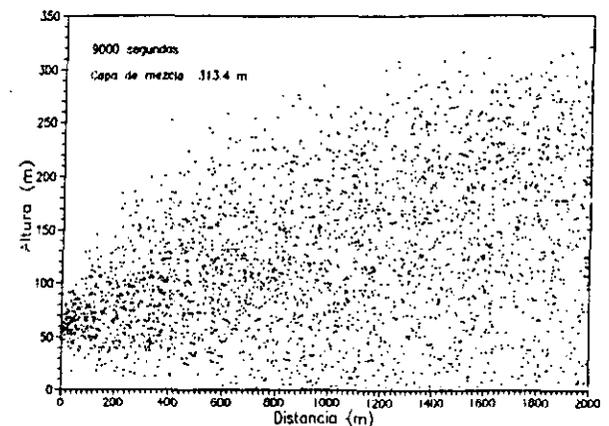
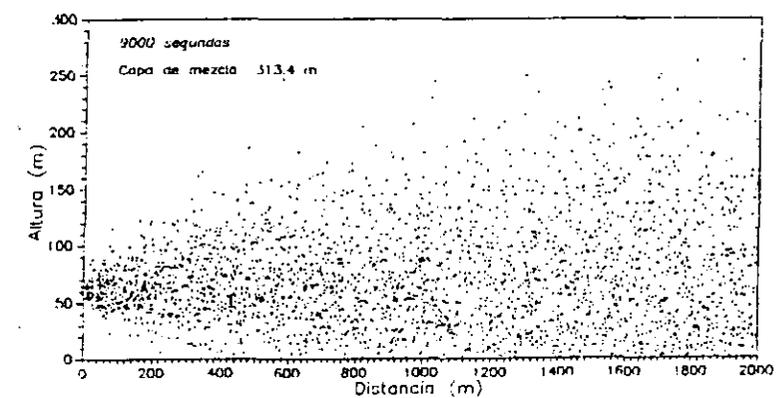
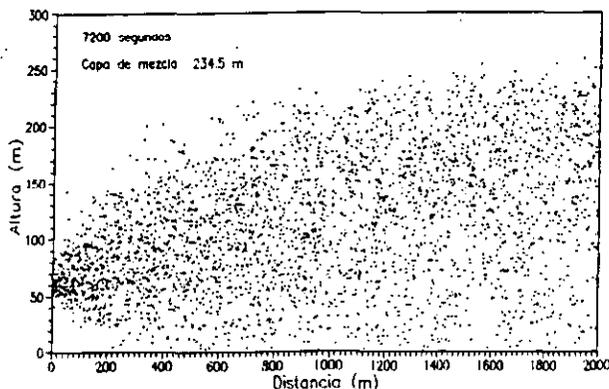
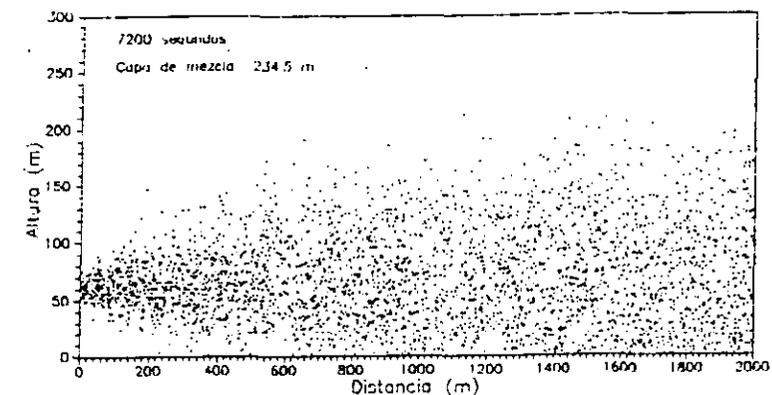
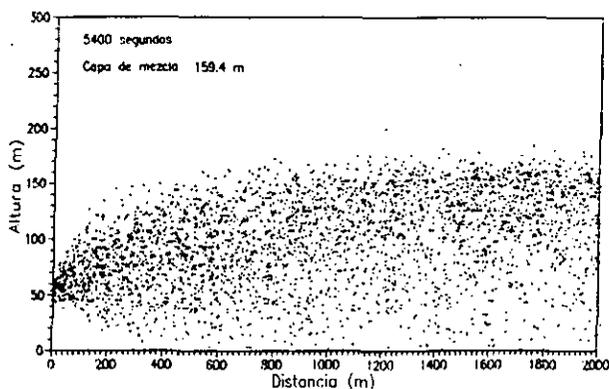
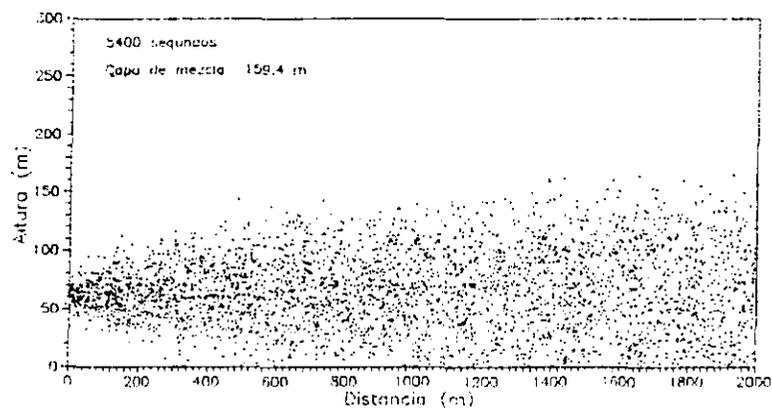
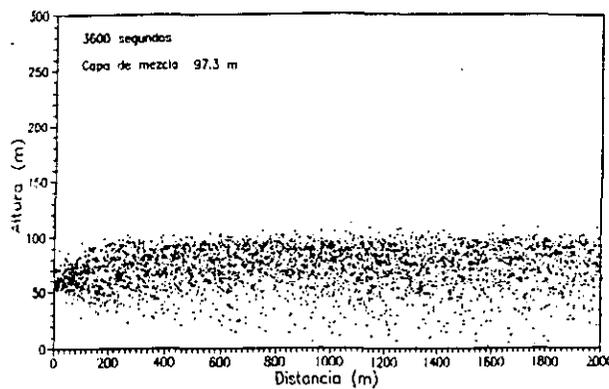
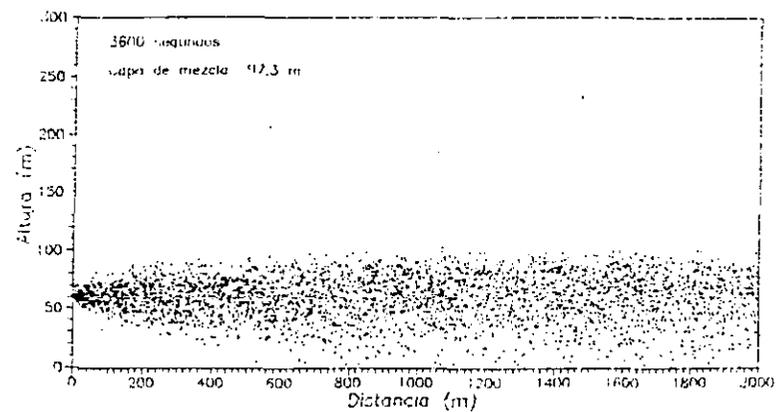
**a****b**

Figura 3.3.3.3. Distribución instantánea de partículas en los tiempos indicados (s). (a) Suponiendo un perfil gaussiano para la velocidad vertical y (b) siguiendo las indicaciones propuestas para condiciones convectivas.

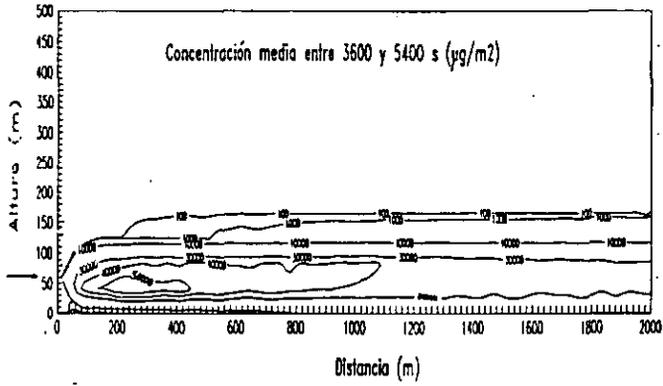
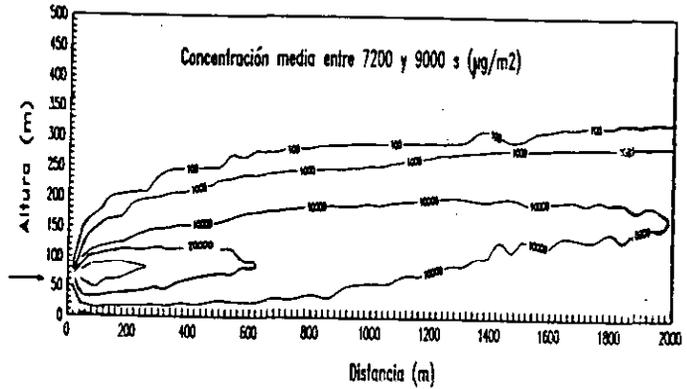
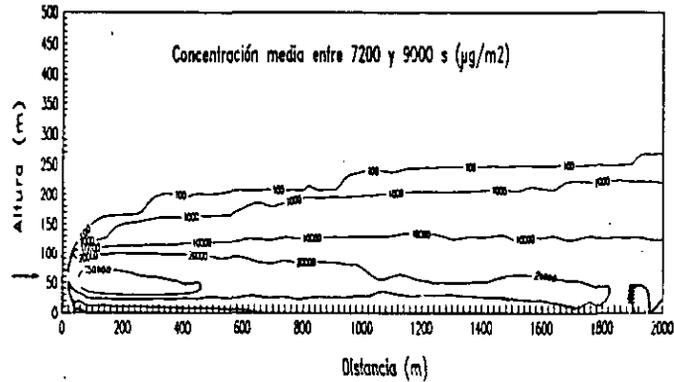
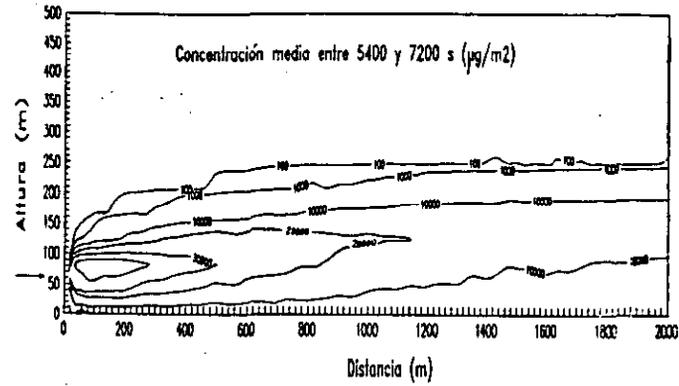
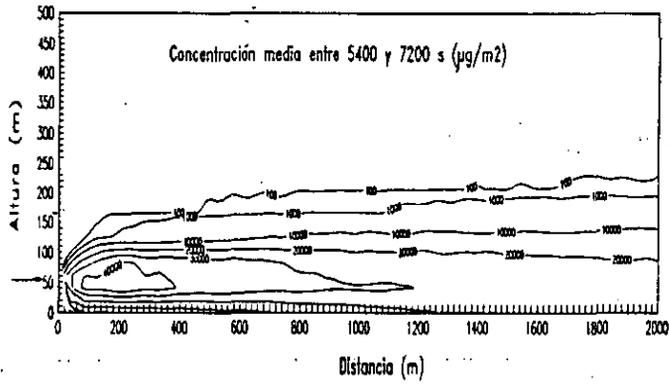
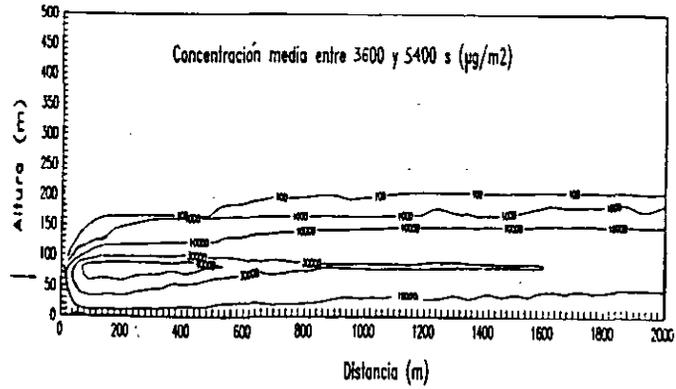
**a****b**

Figura 3.3.3.4. Isolíneas de concentración media cada treinta minutos entre los periodos de tiempo indicados (s). (a) Suponiendo un perfil gaussiano para la velocidad vertical y (b) siguiendo las indicaciones propuestas para condiciones convectivas.

#### 4. RESUMEN Y CONCLUSIONES.

En esta Memoria se ha presentado un modelo lagrangiano de partículas utilizando un método Monte-Carlo, para la simulación matemática del transporte y difusión de un penacho de contaminantes emitido por una fuente puntual continua, bajo diferentes estratificaciones atmosféricas.

A continuación se resumen de forma esquemática las conclusiones que se derivan de los diferentes análisis y técnicas utilizados para el desarrollo de dicho modelo físico-matemático.

#### GENERACION DE FUNCIONES DE DENSIDAD DE PROBABILIDAD

1. El conjunto de número de aleatorios escogido para generar las distribuciones de las dos componentes de la velocidad y la inicialización del generador de números aleatorios no condicionan el ajuste entre tales distribuciones y las pdf teóricas. Este resultado se ha obtenido con todos los generadores de números aleatorios considerados en este estudio.
2. Las partículas deben recorrer al menos trescientos cincuenta movimientos para que el ajuste de sus distribuciones de velocidad (horizontal y vertical) a fdp teóricas supere el nivel de confianza del 90%. En consecuencia, para modelar un penacho de contaminantes deben emitirse un número de partículas muy superior a 350.

#### MODELO UNIDIMENSIONAL

Con objeto de comprobar que no se produce una acumulación ficticia de partículas en ningún nivel, se han llevado a cabo una serie de comprobaciones con la versión unidimensional del modelo lagrangiano, analizando el efecto que producen diversos aspectos, tales como:

- a)- El paso de tiempo.
- b)- Condiciones iniciales.
- c)- Condiciones de contorno.
- d)- Expresiones semiempíricas para las variables varianza y escala de tiempo lagrangiana.
- e)- Velocidad media de arrastre.
- f)- Gradiente vertical de la velocidad media
- g)- Funciones de densidad de probabilidad (fdp)
- h)- Comportamiento del centro de masa del conjunto de partículas.
- i)- Importancia relativa de los términos de autocorrelación y aleatorio de carácter gaussiano en el cálculo del desplazamiento de las partículas

(a) Paso de tiempo.

El esquema tiene el mismo comportamiento con pasos temporales inferiores a tres segundos.

(b) Condiciones iniciales.

A las fluctuaciones de la velocidad de cada partícula en el instante inicial se les asignan valores derivados de una gaussiana. Con tales condiciones iniciales la distribución vertical de partículas es satisfactoriamente uniforme.

(c) Condiciones de contorno.

En caso de capa límite con carácter estable o neutra, la condición de contorno más favorable corresponde a reflexión perfecta (reflexión especular en altura y cambio de signo de la fluctuación de la velocidad). En capa límite convectiva, además de la reflexión perfecta, se cambia el sentido del movimiento.

(d) Expresiones empíricas para determinar la varianza y la escala de tiempo lagrangianas.

En caso de capa límite estable las expresiones elegidas corresponden a las propuestas por Hanna (1982). En capa límite neutra se selecciona para la desviación estándar de la velocidad vertical la propuesta por Wyngaard et al (1974) y para la escala de tiempo la de Hanna (1968). En capa límite convectiva se recomiendan las expresiones aplicadas por Baerentsen y Berkowicz (1984). No se recomiendan las de Hanna (1982), debido a las discontinuidades que presentan ambas expresiones.

(e) Velocidad media de arrastre.

Esta velocidad representa la influencia del gradiente vertical de la varianza, produciendo un ascenso de las partículas situadas en las proximidades al suelo, donde dicho gradiente es máximo. Solamente debe considerarse esta velocidad de arrastre en condiciones convectivas, pues en las otras provoca un déficit inadmisibles de partículas junto al suelo. Se considera la propuesta por Legg y Raupach (1982) en la que se se tiene en cuenta el sentido del movimiento vertical de cada partícula.

(f) Gradiente vertical de velocidad media

En caso de capa límite convectiva, se consideran los gradientes verticales de las velocidades medias ascendente  $w_+$  y descendente  $w_-$  deducidos por Baerentsen y Berkowicz (1984). Estos gradientes pueden inducir un cambio del sentido en el movimiento vertical de cada partícula, siendo su efecto notablemente superior cerca de los contornos de la capa límite, en especial del inferior. Esto contribuye notablemente a la uniformidad vertical de las partículas.

(g) Las funciones de densidad de probabilidad más idóneas son:

En caso de capa límite estable o neutra una gaussiana con media cero y varianza lagrangiana correspondiente. En capa límite convectiva no se puede considerarse gaussiana, proponiéndose como

más adecuada la recomendada por Baerentsen y Berkowicz (1984).

(h) Centro de masa del sistema de partículas.

En los casos de capa límite estable y neutra, el centro de masa asciende muy lentamente, depende su velocidad del paso de tiempo y de las expresiones elegidas para la varianza de la velocidad. En caso de capa convectiva, depende además de las expresiones de la varianza y escala de tiempo lagrangianas que se consideren.

(i) Relación  $\overline{f_1 w'(t-\Delta t)} / \overline{w''(t)}$ .

Depende del valor de la velocidad de fricción y de la expresión empírica para calcular la varianza de la velocidad, con cualquier estratificación en la capa límite.

### MODELO BIDIMENSIONAL

Con objeto de verificar el esquema lagrangiano propuesto, se han realizado diferentes comparaciones con resultados obtenidos con un modelo de penacho gaussiano, así como con observaciones reales bajo condiciones convectivas. Finalmente, se ha simulado un caso de fumigación, después de acoplar este esquema a un modelo de pronóstico de la capa límite planetaria.

#### **Comparación del modelo de partículas con un modelo de penacho gaussiano:**

Este análisis se ha realizado porque el modelo de penacho gaussiano es el de uso más generalizado, a pesar de las limitaciones que tiene su aplicación. Por este motivo, en ambas simulaciones se han considerado condiciones ideales: Turbulencia estacionaria y homogénea, terreno llano, contaminantes no reactivos sin flotabilidad ni deposición en el suelo. No obstante, mientras en el modelo de penacho gaussiano se considera viento constante con la altura, esta condición no ha sido posible incorporarla al modelo lagrangiano debido a las características del esquema. Los resultados que se consiguen con ambos modelos ofrecen numerosas semejanzas, es especial en caso de estratificaciones estables y neutras. Sin embargo, bajo condiciones convectivas el modelo de partículas da como resultado una distribución menos "uniforme" que el de penacho gaussiano. Este resultado concuerda con la consideración general del mal comportamiento de éste último modelo en este tipo de estratificaciones.

#### **Comparación del modelo de partículas con observaciones en condiciones convectivas.**

En este caso se han considerado unos experimentos realizados en Boulder (EEUU), que se conocen con el nombre de CONDORS. En ellos se siguieron mediante sensores remotos nubes artificiales emitidas desde diferentes alturas. Los datos de entrada del modelo de partículas se han recogido de Briggs (1993), procurando que coincidieran con los observados. No obstante, al no haber

referencia de los valores de rugosidad del suelo, se ha considerado un valor correspondiente a un terreno similar al lugar donde se realizaron estos experimentos ( $z_0 = 0.1$  m).

En caso de que la fuente emisora se sitúe junto al suelo, el comportamiento del penacho simulado es cualitativamente igual al de las observaciones: Se aprecia una elevación creciente del eje del penacho con la distancia a la fuente.

Sin embargo, en caso de fuente con gran elevación (280 metros sobre el suelo), los resultados del modelo concuerdan en parte con las observaciones. El efecto más importante, como es el abatimiento hacia el suelo del penacho en las proximidades de la fuente, es modelado de forma muy satisfactoria. Sin embargo, en las observaciones no se aprecia un efecto de desdoblamiento del penacho en la vertical, tal como resulta del modelo. Esta discrepancia parece relacionada con las condiciones iniciales consideradas, por cuanto con otras diferentes dicho desdoblamiento no se aprecia. No obstante, cuando los resultados de las observaciones se corrigen por el efecto de deposición gravitatoria de la nube artificial, aparece un pequeño desdoblamiento, que los mismos autores no toman en consideración achacándolo a problemas numéricos. De todas formas, hay que tener en cuenta que los resultados obtenidos con este modelo bidimensional no son estrictamente comparables con las observaciones tridimensionales.

#### **Simulación de un caso de fumigación.**

Finalmente, se ha realizado una simulación de una situación más compleja, como es la de un caso de fumigación, en el que la turbulencia no tiene carácter estacionario ni homogéneo. Con objeto de disponer de valores realistas de las características atmosféricas en este caso, se ha realizado una simulación previa utilizando un modelo meteorológico de pronóstico unidimensional, aplicado a un caso típico de fumigación.

Los resultados que se obtienen con el modelo de partículas pueden considerarse acordes con el comportamiento que normalmente se observa en un penacho continuo sometido al efecto de una capa convectiva que evoluciona verticalmente.

## 5. REFERENCIAS.

- André, J.C.; G. de Moor; P. Lacarrère; G. Therry y R. du Vachar. (1978). Modeling the 24-hour evolution of the mean and turbulent structures of the planetary boundary layer. *J. Atm. Sci.*, 35, 1861-1883.
- Anfossi, D. (1989). A discussion on nocturnal temperature profiles. *Atmos. Environ.*, 23, 1177-1186.
- Anfossi, D.; G. Brusasca y G. Tinarelli. (1988). Sensitivity analysis of a Monte Carlo atmospheric diffusion model. *Il Nuovo Cimento*, 11, 13-29.
- Arya, S.P. (1982). Atmospheric boundary layers over homogeneous terrain, en *Engineering Meteorology*. E. Plate (Ed). Elsevier Scientific Publ. Co.
- Baerentsen, J.H. y R. Berkowicz (1984). Monte Carlo simulation of plume dispersion in the convective boundary layer. *Atmos. Environ.*, 18, 701-712.
- Bankoff, S.G. y E.L. Hanzevack (1975). The adaptive filtering transport model for prediction and control of pollutant concentration in an urban airshed. *Atmos. Environ.*, 18, 701-712.
- Box, G.E. y G.M. Jenkins (1976). *Time Series Analysis, Forecasting and Control*. San Francisco. Holden-Day.
- Brebbia, C.A. (1978). *The Boundary Element Method for Engineers*. London. Pentech Press.
- Briggs, G.A. (1984). Plume rise and buoyancy effects , en *Atmospheric Science and Power Production*. B. Randerson (ed.). U.S. Department of Energy. Report DOE/TIC-27601 (DE84005177).
- Briggs, G.A. (1993). Plume dispersion in the convective boundary layer. Part II: Analyses of CONDORS field experiment data. *J. Appl. Meteor.*, 32, • 1388-1425.
- Brost, R.A. (1979). Comments on turbulent exchange coefficients for sensible heat and water vapor under advective conditions. *J. Appl. Meteor.*, 18, 378-380.
- Brost, R.A. y J.C. Wynwaard (1978). A model study of the stably stratified planetary boundary layer. *J. Atm. Sci.*, 35, 1427-1440.
- Brusasca, G.; G. Tinarelli y D. Anfossi (1989). Comparison between the results of a Monte Carlo atmospheric diffusion model and tracer experiments. *Atmos. Environ.*, 23, 1263-1280.
- Brusasca, G.; G. Tinarelli y D. Anfossi (1992). Particle model simulation of diffusion in low wind speed stable conditions. *Atmos. Environ.*, 26A, 707-723.
- Brutsaert, W. (1988). *Evaporation into the Atmosphere*. Dordrecht. D. Reidel Publ. Co.

- Buishand, T.A.; G.T. Kempen; A.J. Frantzen, H.F. Reijnders y A.J. van den Eshof (1988). Trend and seasonal variations of precipitation chemistry data in the Netherlands. *Atmos. Environ.*, 22, 339-348.
- Businger, J.A. (1985). The marine boundary layer from air-sea interface to inversion. NCAR Tech. Note, NCAR/TN-252STR. Nat. Cen. Atmos. Res., Boulder. USA.
- Bussinger, J.A. y S.P. Ayra (1974). Heights of the mixed layer in the stable, stratified planetary boundary layer. *Adv. Geophys.*, 18A, 73-92.
- Businger, J.A.; J.C. Wyngaard; Y. Izuhi y E.I. Badley (1971). Flux-profile relationships in the atmospheric surface layer. *J. Atmos. Sci.*, 28, 181-189.
- Carras, J.N. y D.J. Williams (1984). Experimental studies of plume dispersion in convective conditions. *Atmos. Environ.*, 18, 135-144.
- Castro, M; R. González y A. Portela (1991). Parametrización de la capa límite atmosférica en los modelos numéricos de pronóstico meteorológico. *Física de la Tierra*, 3, 103-138.
- Caughey, S.J.; J.C. Wyngaard y J.C. Kaimal (1979). Turbulence in the evolving stable boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, 36, 1041-1052.
- Caughey, S.J.; H. Kitchen y J.R. Leighton (1983). Turbulence structure in convective boundary layers and implications for diffusion. *Boundary-Layer Meteor.*, 25, 345-352.
- Chock, D.P.; T.R. Terrel y S.B. Levitt (1975). Time-series analysis of Riverside, California air quality data. *Atmos. Environ.*, 9, 978-993.
- Chock, D.P. y A.M. Dunker (1983). A comparison of numerical methods for solving the advection equation. *Atmos. Environ.*, 17, 11-24.
- Corsin S. (1974). Limitations of gradient transport models in random walks and in turbulence. *Adv. Geophys.*, 18A, 25-60.
- Davis, P.A. (1983). Markov chain simulations of vertical dispersion from elevated sources into the neutral planetary boundary layer. *Boundary-Layer Meteor.*, 26, 355-376.
- de Baas, A.F.; H. van Dop y F.T.M. Nieuwstadt (1986). An application of the Langevin equation for inhomogeneous conditions to dispersion in a convective boundary layer. *Quarterly J. Roy. Meteor. Soc.*, 112, 165-180.
- Deardorff, J.W. (1970). A three-dimensional numerical investigation of the idealized planetary boundary layer. *Geophys. Astrophys. Fluid Dyn.*, 1, 377-410.
- Deardorff, J.W. (1974). Three-dimensional numerical study of the height and mean structure of a heated planetary boundary layer. *Boundary-Layer Meteor.*, 7, 81-106.
- Deardorff, J.W. y R.L. Peskin (1970). Lagrangian statistics from numerically integrated turbulent shear flow. *The Physics of Fluids*, 13, 584-595.

- Deardorff, J.W. y G.E. Willis (1974). Physical modeling of diffusion in the mixed layer. *Proceedings, Symposium en Atmospheric Diffusion Air Pollution* patrocinado por American Meteorological Society, Santa Barbara, USA.
- Deardorff, J.W. y G.E. Willis (1982). Ground-level concentrations due to fumigation into an entraining mixed layer. *Atmos. Environ.*, 16, 1159-1170.
- Demuth, C. (1978). A contribution to the analytical steady solution of the diffusion equation for line sources. *Atmos. Environ.*, 12, 1255-1258.
- Dobbins, R.A. (1979). *Atmospheric Motion and Air Pollution*. New York. Interscience Publications, John Wiley & Sons.
- Draxler, R.R. (1976). Determination of atmospheric diffusion parameters. *Atmos. Environ.*, 10, 99-105.
- Durbin, P.A. (1980a). A stochastic model of two-particle dispersion and concentration fluctuations in homogeneous turbulence. *J. Fluid Mech.*, 100, 279-302.
- Durbin, P.A. (1980b). A random flight model of inhomogeneous turbulent dispersion. *Phys. Fluids*, 23, 1328-1332.
- Durbin, P.A. (1983). *Stochastic processes and turbulent diffusion*. NASA reference publication 1103 (Lewis Research Center). Cleveland, OH.
- Durbin, P.A. (1984). Comentarios al artículo de Wilson et al. (1981) y Legg y Raupach (1982). *Boundary-Layer Meteorol.*, 29, 409-411.
- Durbin, P.A y J.C.R. Hunt (1980). Dispersion from elevated sources in turbulent boundary layers. *Journal de Mécanique*, 19, 679-695.
- Eberhard, W.L., W.R. Moninger y G.A. Briggs (1988). Plume dispersion in the convective boundary layer. Part I: CONDORS field experiment and example measurements. *J. Appl. Meteorol.*, 27, 599-616.
- Egan, B.A. y J.R. Mahoney (1972). Numerical modeling of advection and diffusion of urban area source pollutants. *J. Appl. Meteorol.*, 11, 312-322
- Egbert, G.D. y M.B. Baker (1984). Comentarios al artículo 'The effect of Gaussian particle-pair distribution functions in the statistical theory of concentration fluctuations in homogeneous turbulence' por B.L. Sawford (1983). *Quarterly J. Roy. Meteor. Soc.*, 110, 1195-1199.
- Enger, L. (1986). A higher order closure model applied to dispersion in a convective PBL. *Atmos. Environ.*, 20, 879-894.
- Fernández, C. (1992). *Desarrollo y aplicación de un modelo bidimensional para la simulación numérica de la atmósfera a mesoescala*. Tesis doctoral. Fac. Ciencias Físicas. Universidad Complutense. Madrid.
- Ferrenberg A.M., D.P. Landau and K. Binder (1991). Statistical and Systematic Errors in Monte Carlo Sampling. *J. Stat. Phys.* 63, 867-882.

- Ferrenberg A.M., D.P. Landau and Y.J. Wong (1992). Monte Carlo Simulations: Hidden Errors from "Good" Random Number Generators. *Physical Review Letters* 69, 3382-3384.
- Garrat J.R., (1982). Observations in the nocturnal boundary layer. *Boundary-Layer Meteor.*, 22, 21-48.
- Garrett, A.J. y F.G. Smith (1984). Two-dimensional simulations of drainage winds and diffusion compared to observations. *J. Climate Appl. Meteor.*, 23, 597-610.
- Georgopoulos, P.G. y J.H. Seinfeld (1982). Statistical distributions of air pollutant concentrations. *Environ. Sci. & Technol*, 16, 401A-415A.
- Gifford, F.A. (1961). Use of routine meteorological observation for estimating atmospheric dispersion. *Nucl. Saf.*, 2, 47-57.
- Gifford, F.A. (1982). Horizontal diffusion in the atmosphere: Lagrangian-dynamical theory. *Atmos. Environ.*, 16, 505-512.
- Gifford, F.A. y S.R. Hanna (1973). Modeling urban air pollution. *Atmos. Environ.*, 7, 131-136.
- Golay, M.W. (1982). Numerical modeling of buoyant plumes in a turbulent, stratified atmosphere. *Atmos. Environ.*, 16, 2373-2381.
- Gordon, G.E. (1988). Receptor models. *Environ. Sci & Tech.*, 22, 1132-1145.
- Hall, C.D. (1975). The simulation of particle motion in the atmosphere by a numerical random-walk model. *Quat. J. Roy. Meteor. Soc.*, 101, 235-244.
- Hall, C.D. (1975). The simulation of particle motion in the atmosphere by a numerical random-walk model *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 101, 235-244.
- Hanna, C.D. (1968). A method of estimating vertical eddy transport in the planetary boundary layer using characteristics of the vertical velocity spectrum. *J. Atmos. Sci.*, 25, 1026-1032.
- Hanna, S.R. (1979). Some statistics of Lagrangian and Eulerian wind fluctuations. *J. Appl. Meteor.*, 18, 518-525.
- Hanna, S.R. (1982). Applications in air pollution modeling en *Atmospheric turbulence and air pollution modelling*. F.T.M. Nieuwstadt and H. van Dop (eds.). Dordrech. D. Reidel Publ. Co.
- Hanna, S.R.; G.A. Briggs y R.P. Hosker (1982). Handbook on *Atmospheric Diffusion*. Technical Information Center. U.S. Department of Energy. DOE/TIC-11223 (DE82002045).
- Harvey, Jr, R.B., and J.N. Hamawi (1986). A modification of the Gaussian dispersion equation to accommodate restricted lateral dispersion in deep river valleys. *APCA Note-Book*, 36, 171-185.
- Hashem, A. y C.S. Parkin (1991). A simplified heavy particle random-walk model for the prediction of drift from agricultural sprays. *Atmos. Environ.*, 25A, 1609-1614.

- Haworth, D.C. y S.B. Pope (1986). A generalised Langevin model for turbulent flows. *Phys. Fluids*, 29, 387-405.
- Henry, R.C.; C.W. Lewis; P.K. Hopke y H.I. Williamson (1984). Review of receptor model fundamentals. *Atmos. Environ.*, 18, 1507-1515.
- Hockney, R.W. y J.W. Eastwood (1981). *Computer Simulation Using Particules*. New York. McGraw-Hill, Inc.
- Holtslag, A.A.M. y F.T.M. Nieuwstadt (1986). Scaling the atmospheric boundary layer. *Boundary-Layer Meteor.*, 36, 201-209.
- Hunt, J.C.R. y J.E. Simpson (1982). Atmospheric boundary layers over non-homogeneous terrain en *Engineering Meteorology*. E.J. Plate (ed). Amsterdam. Elsevier Scientific Publ. Co.
- Hurley, P. y W. Physick (1991). A lagrangian particle model of fumigation by breakdown of the nocturnal inversion. *Atmos. Environ.*, 25A, 1313-1325.
- Hurley, P. y W. Physick (1993). A skewed homogeneous lagrangian particle model for convective conditions. *Atmos. Environ.*, 27A, 619-624.
- Jazwinski, A.H. (1970). *Stochastic Processes and Filtering Theory*. New York. Academic Press.
- Jenkins, G.M. y D.G. Watts (1968). *Spectral Analysis and Its Applications*. San Francisco. Holden-Day.
- Jensen, N.O. y E.L. Peterson (1979). The box model and the acoustic sounder, a case study. *Atmos. Environ.*, 13, 717-720.
- Jonas, P.R. y J.T. Bartlett (1972). The numerical simulation of particle motion in a homogeneous field of turbulence. *J. Computational Phys.*, 9, 290-302.
- Joynt, R.C. y D.R. Blackman (1976). A numerical model of pollutant transport. *Atmos. Environ.*, 10, 433-442.
- Kaimal, J.C.; J.C. Wyngaard; D.A. Haugen; O.R. Coté; Y. Izumi; S.J. Caughey y C.J. Readings (1976). Turbulence structure in the convective boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, 33, 2152-2169.
- Kalman, R.E. (1960). A new approach to linear filtering and prediction problems. *J. Basic Eng.*, 35-108.
- Kao, S.K. (1984). Theories of atmospheric transport and diffusion, en *Atmospheric Science and Power Production*. Barryl Randerson (ed.). U.S. Department of Energy. Report DOE/TIC-27601 (DE84005177). USA.
- Klug, W. (1969). A method for determining diffusion conditions from synoptic observations. *Staub-Reinhalt. Luft*, 29, 14-20.
- Kostrykov, A.A. y M.A. Novitskii (1986). Numerical modeling of pollutant distribution under condition of breeze circulation. *Meteorologiya i Gidrologiya*, 6, 42-52.

- Lamb, R.G. (1973). Note on application of K-theory to turbulent diffusion problems involving chemical reaction. *Atmos. Environ.*, 7, 235.
- Lamb, R.G. (1978). A numerical simulation of dispersion from an elevated point source in the convective planetary boundary layer. *Atmos. Environ.*, 12, 1297-1304.
- Lamb, R.G. (1981). A scheme for simulating particle pair motions in turbulent fluid. *J. Computational Phys.*, 39, 329-346.
- Lamb, R.G. (1982). Diffusion in the convective boundary layer, en *Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modeling*. F.T.M. Nieuwstadt y H. van Dop (Eds). Dordrecht. D. Reidel Publ. Co. 159-229.
- Lange, R. (1978). ADPIC-A three-dimensional particle-in-cell model for the dispersal of atmospheric pollutants and its comparison to regional tracer studies. *J. Appl. Meteor.*, 17, 320-329.
- Lee, J.T. y G.L. Stone (1983). Eulerian-Lagrangian relationships in Monte-Carlo simulations of turbulent diffusion. *Atmos. Environ.*, 17, 2483-2487.
- Legg, B.J. (1983). Turbulent dispersion from an elevated line source: Markov chain simulations of concentration and flux profiles. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 109, 645-660.
- Legg, B.J. y M.R. Raupach (1982). Markov-chain simulation of particle dispersion in inhomogeneous flows: the mean drift velocity induced by a gradient in eulerian velocity variance. *Boundary Layer Meteor.*, 24, 3-13
- Lenschow, D.H. (1970). Airplane measurements of planetary boundary layer structure. *J. Appl. Meteor.*, 9, 874-884.
- Lenschow D.H.; J.C. Wyngaard y W.T. Pennell (1980). Mean field and second-moment budgets in a barocline convective boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, 37, 1313-1326.
- Lewellen, W.S y M.E. Teske (1976). Second-order closure modeling of diffusion in the atmospheric boundary layer. *Boundary-Layer Meteor.*, 10, 69-90.
- Ley, A.J. (1982). A random walk simulation of two-dimensional turbulent diffusion in the neutral surface layer. *Atmos. Environ.*, 16, 2799-2808.
- Ley, A.J. y D.J. Thomson (1983). A random walk model of dispersion in the diabatic surface layer. *Quarterly J. Roy. Meteor. Soc.*, 109, 867-880.
- Li, W.W. y R.N. Meroney (1985). Re-examination of Eulerian-Lagrangian turbulence relationships. *Atmos. Environ.*, 19, 853-855.
- Lin, C.C. y W.H. Reid (1962). Turbulent flow, en *Handbuch der Physik VIII/2*. Springer. Berlín.
- Lin, G.Y. (1982). Oxidant prediction by discriminant analysis in the south coast air basin of California. *Atmos. Environ.*, 16, 135-143.

- Longhetto, A. (1980) *Atmospheric Planetary Boundary Layer Physics*. A. Longhetto (ed.). Nueva York. Elsevier.
- Ludwig, F.L. y G. Byrd (1980). An efficient method for deriving mass-consistent flow fields from wind observations in rough terrain. *Atmos. Environ.*, **14**, 585-587.
- Luhar, A.K. y R.E. Britter (1989). A random walk model for dispersion in inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. *Atmos. Environ.*, **23**, 1911-1924.
- Lumley, J.L. y H.A. Panofsky (1964). *The structure of atmospheric turbulence*. Interscience Publications. New York.
- Manins, P.C. (1977). Fumigation and a laboratory experiment. *Weather*, **32**, 221-228.
- Marani, A., I. Lavagnini, C. Buttazzoni (1986). Statistical study of air pollutant concentrations via generalized gamma distributions. *JAPCA*, **36**, 1250-1254.
- McRae, G.J., W.R. Goodin y J.H. Seinfeld (1982). Development of a second generation mathematical model for urban air pollution. I. Model formulation. *Atmos. Environ.*, **16**, 679-696.
- Melli, P.; P. Bolzern; G. Fronza y A. Spirito (1981). Real-time control of sulphur dioxide emissions from an industrial area. *Atmos. Environ.*, **15**, 653-666.
- Mellor, G.L. y T. Yamada (1982). Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems. *Rev. Geophys. Space Phys.*, **20**, 851-875.
- Meszaros, E., G. Varhelyi y L. Haszpra (1978). On the atmospheric sulfur budget over Europe. *Atmos. Environ.*, **12**, 2273-2277.
- Monin, A.S. y A.M. Obukhov (1954). Basic laws of turbulent mixing in the ground layer of the atmosphere. *Trans. Geophys. Inst. Akad., Nauk USSR* **151**, 163-187.
- Monin, A.S. y A.M. Yaglom (1971). *Statistical Fluid Mechanics*. Cambridge. M. I. T.
- Murray, L.C. y R.J. Faber (1982). Time series analysis of an historical visibility data base. *Atmos. Environ.*, **16**, 2299-2308.
- Neumann, J. (1978). Some observations on the simple exponential function as a lagrangian velocity correlation function in turbulent diffusion. *Atmos. Environ.*, **12**, 1965-1968.
- Nieuwstadt F.T. y J.P. de Valk (1987). A large eddy simulation of bouyant and non-bouyant plume dispersion in the atmospheric boundary layer. *Atmos. Environ.*, **21**, 2573-3587.
- Panofsky, H.A. y J.A. Dutton (1984). *Atmospheric Turbulence*. New York. Jonh Wiley.

- Panofsky, H.A.; H. Tennekes; D.H. Lenschow y J.C. Wyngaard (1977). The characteristics of turbulent velocity components in the surface layer under convective conditions. *Bound. Layer Meteor.*, 11, 355-362.
- Pasquill, F. (1961). The estimation of the dispersion of windborne materia. *Meteorol. Mag.*, 90, 33-49.
- Pasquill, F. (1974). *Atmospheric Diffusion*. Segunda edición. New York. John Wiley & Sons.
- Pasquill, F. y F.B. Smith (1983). *Atmospheric Diffusion*, Tercera Edición. New York. Halsted Press, John Wiley & Sons.
- Pearson, H.J; J.S. Puttock y J.C.R. Hunt (1983). A statistical model of fluid-element motions and vertical diffusion in a homogeneous stratified turbulent flow. *J. Fluid Mech.*, 129, 219-249
- Pepper, D.W., C.D. Kern y P.E. Long, Jr. (1979). Modeling the dispersion of atmospheric pollution using cubic splines and Chapeau functions. *Atmos. Environ.*, 13, 223-237.
- Pielke, R.A. (1984). *Mesoscale Meteorological Modeling*. Orlando, Florida. Academic Press.
- Pruitt, W.O.; D.L. Morgany F.J. Lourence (1973). Momentum and mass transfers in the surface boundary layer. *Quarterly J. Roy. Meteor. Soc.*, 99, 370-389.
- Reid, J.D. (1979). Markov chain simulations of vertical dispersion in the neutral surface layer for surface and elevated releases. *Boundary Layer Meteor.*, 16, 3-22.
- Richtmyer, R.D. y K.W. Morton (1967). *Difference Methods for Initial-Value Problems*. New York. Interscience Publications, John Wiley & Sons.
- Rodriguez, C.; A. Santana y I. Padilla (1993). Un modelo de dispersión de partículas en el medio marino, en *Segundo Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería*. M. Casteleiro y F. Navarrina (eds). Barcelona. Sociedad Española de Métodos Numéricos en Ingeniería.
- Rounds, W. (1955). Solutions of the two-dimensional diffusion equation. *Trans. Am. Geophys. Union*, 36, 395-411.
- Roy, R. y I. Pellerin (1982). On long term air quality trends and intervention analysis. *Atmos. Environ.*, 16, 161-169.
- Runca, E. y F. Sardei (1975). Numerical treatment of the dependent advection and diffusion of air pollutants. *Atmos. Environ.*, 9, 69-80.
- Santomauro, L.; P. Bacci; A. Longhetto; D. Anfossi y R. Richiardone (1978). Experimental evaluation of diffusion parameters at local scale by means of no-lift balloons. *J. Appl. Meteor.*, 17, 1441-1449.
- Sawford, B.L. (1983). The effect of Gaussian particle-pair distribution functions in the statistical theory of concentration fluctuations in

- homogeneous turbulence. *Quarterly J. Roy. Meteor. Soc.*, 109, 339-354.
- Sawford, B.L. (1984). The basis for, and some limitations of, the Langevin equation in atmospheric relative dispersion modelling. *Atmos. Environ.*, 11, 2405-2411.
- Sawford, B.L. (1985). Lagrangian statistical simulation of concentration mean and fluctuation fields. *J. Climate Appl. Meteor.*, 24, 1152-1166.
- Sawford, B.L. (1986). Generalized random forcing in random-walk turbulent dispersion models. *Phys. Fluids*, 29, 3582-3585.
- Schere, K.L. (1983). An evaluation of several numerical advection schemes. *Atmos. Environ.*, 17, 1897-1907.
- Schulman, L.L. y S.R. Hanna (1986). Evaluation of downwash modification to the industrial source complex model. *JAPCA*, 36, 256-264.
- Seinfeld, J.H. (1978). *Contaminación Atmosférica. Fundamentos físicos y químicos*. Madrid. Instituto de estudios de administración local.
- Seinfeld, J.H. (1986). *Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution*. New York. John Wiley & Sons.
- Segal, M.; Y. Mahrer y R.A. Pielke (1982). A numerical model study of plume fumigation during nocturnal inversion break-up. *Atmos. Environ.*, 16, 513-519.
- Segal, M.; R.A. Pielke; R.W. Arritt; D. Moran; C.H. Yu y D. Henderson (1988). Application of a mesoscale atmospheric dispersion modelling system to the estimation of SO<sub>2</sub> concentrations from major elevated sources in Southern Florida. *Atmos. Environ.*, 22, 1319-1334.
- Sheih, C.M. (1978). A puff pollutant dispersion model with wind shear and dynamic plume rise. *Atmos. Environ.*, 12, 1933-1938.
- Sherman, C.A. (1978). A mass consistent model for wind fields over complex terrain. *J. Appl. Meteor.*, 17, 312-319.
- Shir, C.C. (1973). A preliminary numerical study of atmospheric turbulent flows in the idealized planetary boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, 30, 1327-1339.
- Shir, C.C. y L.J. Sheih (1978). Study of parametric effects on the SO<sub>2</sub> concentration in St. Louis by a numerical simulation. *Atmos. Environ.*, 12, 1087-1096.
- Simpson, R.W. y A.P. Layton (1983). The prediction of the numbers of violations of standards and the frequency of air pollution episodes using extreme value theory. *Atmos. Environ.*, 17, 1649-1654.
- Smith, F.B. (1957). The diffusion of smoke from a continuous elevated point source into a turbulent atmosphere. *J. Fluid Mech.*, 2, 49-58.
- Smith, F.B. (1968). Conditioned particle motion in a homogeneous turbulent

- field. *Atmos. Environ.*, 2, 491-508.
- Snyder, W.H. y J.L. Lumley (1971). Some measurements of particle velocity autocorrelation functions in a turbulent flow. *J. Fluid Mech.*, 48, 41-71
- Spicer, T. O. (1985). *Mathematical Modelling and Experimental Investigation of Heavy than Air Gas Dispersion*. Ph. D. Thesis. Arkansas. USA.
- Stull, R.B. (1991). *An introduction to Boundary Layer Meteorology*. Tercera edición. Dordrecht. Kluwer Academic Publ.
- Stern, A.C. (1976). *Air Pollution*. 3rd Edition. Volume 1. New York. Academic Press.
- Strang, G. y G. Fix (1973). *An Analysis of the Finite Element Method*. New York. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs.
- Surman, P.G., J. Boderó y R.W. Simpson (1987). the prediction of the numbers of violations of standards and the frequency of air pollution episodes using extreme value theory. *Atmos. Environ.*, 21, 1843-1848.
- Taconet, O. and A. Weill (1982). Vertical velocity field in the convective boundary layer as observed with an acoustic Doppler sodar. *Boundary-Layer Met.*, 23, 133-151.
- Tennekes, H. (1979). The exponential lagrangian correlation function and turbulent diffusion in the inertial subrange. *Atmos. Environ.*, 13, 1565-1567.
- Thomson, D.J. (1984). Random walk modelling of diffusion in inhomogeneous turbulence. *Quarterly J. Roy. Meteor. Soc.*, 110, 1107-1120.
- Thomson, D.J. (1986a). A random walk model of dispersion in turbulent flows and its application to dispersion in a valley. *Quarterly J. Roy. Meteor. Soc.*, 112, 511-530.
- Thomson, D.J. (1986b). On the relative dispersion of two particles in homogeneous stationary turbulence and the implications for the size of concentration fluctuations at large times. *Quarterly J. Roy. Meteor. Soc.*, 112, 890-894.
- Thomson, D.J. (1987). Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows. *J. Fluid Mech.*, 180, 529-556.
- Tilley, T. y G.A. McBean (1973). An application of spectrum analysis to synoptic-pollution data. *Atmos. Environ.*, 7, 793-801.
- Tirabassi, T., M. Tagliazuca y P. Zannetti (1986). KAPPA-G. a non-Gaussian plume dispersion model: Description and evaluation against tracer measurements. *JAPCA*, 36, 592-596.
- Trivikrama, S.R., P.I. Samson y A.R. Pedadda (1976). Spectral analysis approach to the dynamics of air pollutants. *Atmos. Environ.*, 10, 375-379.
- van Dop, H., R. Steenkist y F.T.M. Nieuwstadt (1979). Revised estimates for

- continuous shoreline fumigation. *J. Appl. Meteor.*, **18**, 133-137.
- van Dop, H.; F.T.M. Nieuwstadt y J.R.C. Hunt (1985). Random walk models for particle displacements in inhomogeneous unsteady turbulent flows. *Phys. Fluids*, **28**, 1639-1653.
- van Haren, L. y F.T. Nieuwstadt (1989). The behaviour of passive and buoyant plumes in a convective boundary layer, as simulated with a large-eddy model. *J. Appl. Meteor.*, **28**, 818.
- van Ulden, A.P. y A.A.M. Holtslag (1985). Estimation of atmospheric boundary layer parameters for diffusion applications. *J. Climate Appl. Meteor.*, **24**, 1196-1207.
- Vattulainen I., K. Kankaala, J. Saarinen and T. Ala-Nissila. (1993, comunicación personal). A Comparative Study of some Pseudorandom Number Generators.
- Venkatram, A. (1978). An examination of box models for air quality simulation. *Atmos. Environ.*, **12**, 2243-2249.
- Venkatram, A. (1980). Estimating the Monin-Obukhov length in the stable boundary layer for dispersion calculations. *Boundary-Layer Meteor.*, **19**, 481-485.
- Venkatram, A. (1983). On dispersion in the convective boundary layer. *Atmos. Environ.*, **17**, 529-533.
- Venkatram, A. (1988). Dispersion in the Stable Boundary Layer. En *Lectures on Air Pollution Modeling*. A. Venkatram y J.C. Wyngaard (Eds.). Am. Met. Soc. Boston.
- Walklate, P.J. (1987). A random-walk model for dispersion of heavy particles in turbulent air flow. *Boundary-Layer Meteor.*, **39**, 175-190.
- Wilczak, J.M. y M.S. Phillips (1986). An indirect estimation of convection boundary layer structure for use in pollution dispersion models. *J. Climate Appl. Meteor.*, **25**, 1609-1624.
- Willis, G.E. y J.W. Deardoff (1974). A laboratory model of the unstable planetary boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, **31**, 1297-1307.
- Willis, G.E. y J.W. Deardoff (1976). A laboratory model of diffusion into the convective planetary boundary layer. *Quarterly J. Roy. Meteor. Soc.*, **102**, 427-445.
- Willis, G.E. y J.W. Deardoff (1978). A laboratory study of dispersion from an elevated source within a modeled convective planetary boundary layer. *Atmos. Environ.*, **12**, 1305-1311.
- Willis, G.E. y J.W. Deardoff (1981). A laboratory model of diffusion into the convection planetary boundary layer. *Quart. J. Royal Meteor. Soc.*, **102**, 427-445.
- Wilson, N.R. y R.H. Shaw (1977). A higher-order closure model for canopy flow. *J. Appl. Meteor.*, **16**, 1198-1205.

- Wilson, J.D.; G.W. Thurtell y G.E. Kidd (1981). Numerical simulation of particle trajectories in inhomogeneous turbulence, I: Systems with constant turbulent velocity scale. *Boundary-Layer Meteor.*, 21, 295-313.
- Wilson, J.D. y Y. Zhuang (1989). Restriction on the timestep to be used in stochastic lagrangian models of turbulent dispersion. *Boundary-Layer Meteor.*, 49, 309-316.
- Wyngaard, J.C. (1982). Boundary layer modeling, en *Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling*. F.T.M. Nieuwstadt y H. van Dop (eds). Dordrecht. D. Reidel Publ. Co.
- Wyngaard, J.C. (1988). Dispersion in the Stable Boundary Layer. En *Lectures on Air Pollution Modeling*. A. Venkatram y J.C. Wyngaard (Eds.). Am. Met. Soc. Boston.
- Wyngaard, J.C. y O.R. Coté (1974). The evolution of a convective planetary boundary layer a higher-order-closure model study. *Boundary-Layer Meteor.*, 7, 289-308.
- Yamamoto, S.; M. Gamo y O. Yokoyama (1982). Observational study on the fine structure of the Convective Atmospheric Boundary Layer. *J. Meteor. Soc. Japan*, 60, 882-888.
- Yeh, G.T. y C.H. Huang (1975). Three-dimensional air pollutant modeling in the lower atmosphere. *Boundary-Layer Meteor.*, 9, 381-403.
- Zannetti, P. (1981a). An improved puff algorithm for plume dispersion simulation. *J. Appl. Meteor.*, 20, 1203-1211.
- Zannetti, P. (1981b). Some aspects of Monte Carlo type modeling of atmospheric turbulent diffusion. *Preprints de Seventh AMS conference on Probability and Statistics in Atmospheric Sciences*, 71-74. Monterey, USA.
- Zannetti, P. (1984). New Monte Carlo scheme for simulating Lagrangian particle diffusion with wind shear effects. *Appl. Math. Modelling*, 8, 188-192.
- Zannetti, P. (1986). Monte-Carlo simulation of auto- and cross-correlated turbulent velocity fluctuations (MC-LAGPAR II Model). *Environ. Software*, 1, 26-30.
- Zannetti, P. (1986). A new mixed segment-puff approach for dispersion modeling. *Atmos. Environ.*, 20, 1211-1130.
- Zannetti, P. (1991). *Air Pollution Modeling. Theories. computational methods and available software*. New York. Computational Mechanics Publications.
- Zannetti, P. y N. Al-Madani (1983). Simulation of transformation, buoyancy and removal processes by Lagrangian particle methods. *Proceedings, 14th International Technical Meeting on Air Pollution Modeling and its Application*, 77-86. Copenague.
- Zannetti, P. y P. Switzer (1979). The Kalman filtering method and its application to air pollution episode forecasting. Trabajo presentado en

APCA Specialty Conference on Quality Assurance in Air Pollution Measurement. Nueva Orleans. USA.

Zannetti, P. y I. Tombach (1986). Critical survey of mathematical models of atmospheric pollution transport and deposition. Volume I: Main Report. AeroVironment Report AV-FR-85/525. Monrovia. USA.

Zeman, O. (1981). Progress in the modelling of planetary boundary layers. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **13**, 253-272.

Zhuang, Y.; J.D. Wilson y E.P. Lozowski (1989). A trajectory-simulation model for heavy particle motion in turbulent flow. *Journal of Fluids Engineering*, **111**, 492-494.

Zilintinkevich, S.S. (1972). On the determination of the height of the Ekman boundary layer. *Boundary-Layer Meteor.*, **3**, 141-145

Zinsmeister, A.R. y T.C. Redman (1980). A time series analysis of aerosol composition measurements. *Atmos. Environ.*, **14**, 201-215.