

# Formulación de un modelo lagrangiano de partículas para simular la difusión de contaminantes atmosféricos. I

*Rafael Méndez Tejeda, Ph.D.  
Departamento de Ciencias Naturales, UPPR*

## Sinopsis

Uno de los aspectos más relevantes de la atmósfera es su capacidad para transportar substancias, calor o impulso de movimiento verticalmente desde unos niveles a otros. Esta propiedad adquiere una importancia fundamental en la tropósfera desde el punto de vista dispersivo, ya que las emisiones efectuadas desde el suelo quedarían atrapadas sobre la superficie terrestre de no existir los movimientos dispersivos. Por lo tanto, es muy importante estudiar detalladamente dos aspectos de la atmósfera, los mecánicos y los térmicos, a través de los cuales es posible determinar su capacidad dispersiva. En el primer caso se considera sólo el carácter térmico de la atmósfera, de forma que la distribución vertical del aire determina por si misma el estado dispersivo de la atmósfera. Por otro lado están los parámetros de estabilidad que toman en cuenta tanto el carácter mecánico como el térmico de la atmósfera. Este transporte de partículas y gases se estudia a través del conocimiento de las variables meteorológicas y se conoce como lluvia seca o lluvia húmeda.

En este primer artículo discutiremos el fenómeno denominado fumigación, el cual ocurre cuando hay inversión térmica en la superficie. Analizaremos el comportamiento de la capa de la mezcla y los mecanismos de turbulencia.

## Formulation of a Lagrangian model of particles to simulate the diffusion of atmospheric contaminants. I

### Abstract

One of the most relevant aspects the atmosphere is its capacity for transporting substances, heat or momentum vertically among different levels. This property is of fundamental importance in the troposphere because otherwise emissions from the ground will be trapped just above the ground. Thus, it is very important to study in detail the mechanical and thermal aspects of the atmosphere through which we can calculate its dispersive capacity. In the first case we only consider the thermal aspect of the atmosphere, in such a way that the vertical distribution of the air determines by itself the dispersive state of the atmosphere. Moreover, the stability states consider the mechanical and the thermal aspects of the atmosphere. The removal of particulate as gas at the air surface is described in meteorological transport models by the terms dry and wet deposition.

This, the first of a series of articles, analyzes the phenomenon known as fumigation, which takes place when a thermal inversion occurs at the surface. We will also study the behavior of the atmosphere boundary layer and the turbulence mechanics.

### Introducción

El fenómeno denominado fumigación ocurre cuando la inversión térmica pegada al suelo, la cual se desarrolla durante la noche, se va destruyendo desde abajo a consecuencia del calentamiento del suelo y da lugar a un flujo ascendente de calor sensible que produce turbulencia convectiva en un estrato de aire que se llama "capa de mezcla". Según el espesor de esta capa convectiva crece va incorporando los contaminantes que se encuentran en la inversión térmica o por encima de ésta, mezclándolos de forma casi uniforme. Esto da lugar a los característicos

máximos de concentración de contaminantes que se observan en las primeras horas de la mañana.

El modelo para la fumigación se refiere a un procedimiento capaz de determinar la evolución del viento según la altura, el espesor de la capa de mezcla, los intercambios turbulentos de calor y la cantidad de movimiento. El método más adecuado para ello se basa en la aplicación de modelos lagrangianos de partículas acoplados a modelos de pronóstico que proporcionan valores a lo largo del tiempo de las variables meteorológicas necesarias (Hernández y cols., 1996). Hurley y Physick (1991) presentan una relación actualizada de varias formulaciones de este tipo de modelos.

Los modelos clásicos de penacho gaussiano tratan incorrectamente el proceso de fumigación, pues usan la hipótesis de mezcla uniforme instantánea en toda la capa de la mezcla y tienen en cuenta sólo la evolución del espesor de dicho estrato (Turner, 1970). A partir de experiencias realizadas en tanques de agua Deardorff y Willis (1982) desarrollaron un modelo matemático que, aunque seguía utilizando suposiciones del método de penacho gaussiano, proporcionaba resultados más satisfactorios.

La presión atmosférica del planeta está en un campo gravitacional; por lo tanto, su densidad decrece con la altitud. En general, el movimiento vertical es muy pequeño y la hipótesis de equilibrio hidrostático es un buen punto de partida. Si  $\rho$  es la densidad y  $P$  la presión a la altitud  $z$  medida verticalmente hacia arriba, donde  $H$  es la altura de la capa tendremos:

$$p = p_0 \exp\left[-\int_0^z \frac{dz}{H}\right] \quad (1)$$

Por otro lado, los parámetros de estabilidad atmosféricos son números adimensionales que nos permiten relacionar los aspectos térmicos y

## Mendez/Modelo lagrangiano simular difusión

mecánicos de la atmósfera. Uno de los más conocidos es el número de Richardson, que se representa como:

$$R_i = \frac{g}{\theta} \frac{\frac{\partial \theta}{\partial z}}{\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)^2} \quad (2)$$

donde  $\theta$  es la temperatura potencial, definida según la ecuación (3)

$$\theta = T \left( \frac{1000}{p} \right)^{\frac{R}{C_p}} \quad (3)$$

Los restantes parámetros en la ecuación (2) son:  $C_p$  es el calor específico a presión constante;  $R$  es la constante general de los gases y  $\partial u / \partial z$  representa la cizalla del viento, es decir, la variación vertical con su velocidad media. Cuando se hace un estudio detallado hay que considerar la capa límite, la solución de Ekman, a la que se puede considerar, en primer lugar, la transferencia de momento en la capa suponiendo una situación en que solamente exista cizalla vertical del viento medio, por lo que no se consideran las tensiones de gradientes horizontales. Esta es una situación en la que el viento pasa por encima de la capa del límite geostrófico y los gradientes horizontales de temperatura pueden pasarse por alto.

Los modelos de partículas lagrangianos son el procedimiento más al día y capaz de discretizar numéricamente un sistema físico. Este tipo de modelos maneja de una forma sencilla los términos del transporte cuyo tratamiento numérico presenta graves problemas en los modelos de celdillas eulerianos. En los modelos de partículas lagrangianos que se utilizan para modelar, las partículas, cada una de ellas con una determinada cantidad de contaminante, se mueven siguiendo el flujo. Este movimiento se produce mediante la asignación de unas pseudovelocidades ficticias que se pueden

calcular por métodos determinísticos (Lange, 1978) o con las técnicas Montecarlo (Zannetti, 1986). Las últimas presentan una serie de ventajas sobre los primeros, entre las cuales se destaca la de no necesitar el concepto de celdilla, lo que permite una mayor resolución espacial y temporal. Para calcular las seudovelocidades se tienen en cuenta:

1. el transporte debido a la velocidad media del fluido
2. las fluctuaciones aleatorias turbulentas de los componentes del viento
3. la difusión molecular, si fuera necesario.

En este estudio se aplica un modelo lagrangiano de partículas que se describe a continuación, junto con un modelo unidimensional de la capa límite planetaria. Para el caso se desarrolla un penacho continuo elevado. Para mayor sencillez, la simulación se realiza en dos dimensiones (  $x, z$  ), teniendo en cuenta que el fenómeno de fumigación es un proceso que tiene lugar fundamentalmente en el sentido vertical.

### Descripción del modelo de partículas

El movimiento de cada partícula se determina mediante el cálculo de su posición espacial en intervalos de tiempo, de manera que si una partícula en el punto  $x(t)$  en el instante  $t$ , transcurrido el tiempo se hallara en el punto que define la ecuación (4).

$$X(t + \delta t) = x(t) + \int_t^{t+\delta t} u [x(t), t] dt \quad (4)$$

donde  $u$  es la velocidad instantánea del viento en cada punto  $x(t)$  de la trayectoria de la partícula entre  $t$  y  $t + \Delta t$ . Si el valor de  $u$  se supiera

exactamente en cada punto y en cada instante sólo sería necesario la ecuación anterior. Sin embargo, la turbulencia atmosférica hace imposible determinar el valor como consecuencia del carácter aleatorio de sus componentes. Para resolver este problema se supone un viento equivalente

$$u_e = \int_t^{t+\delta t} u [x(t), t] dt \quad (5)$$

que mueve la partícula directamente de  $x(t)$  a  $x(t+\Delta t)$  en el intervalo de tiempo  $\Delta t$ . A lo largo de la trayectoria en ese periodo temporal,  $u$  se puede expresar como la suma de un valor constante  $\langle u_L \rangle$  más una fluctuación  $u'_L(t)$ , donde el subíndice L indica que son valores lagrangianos. Por tanto:

$$u_e = \langle u_L \rangle + \int_t^{t+\delta t} u'(t) dt \quad (6)$$

Por semejanza con la aproximación de Reynolds, se puede definir una pseudovelocidad

$$u_e = \langle u_e \rangle + u'_e \quad (7)$$

donde  $\langle u_e \rangle$  es la mejor estimación de, por ejemplo, el viento medio euleriano en  $x(t)$  y es una pseudovelocidad difusiva. Es decir,  $\langle u_e \rangle$  representa una expresión determinista del transporte medio, cuyo valor se basa en medidas eulerianas, mientras que  $u'_e$  es una perturbación numérica diferente para cada partícula.

El cálculo de esta perturbación artificial durante cada intervalo de tiempo y para cada partícula se realiza mediante una aproximación estadística ( Método Monte-Carlo), de manera que:

$$u'_e(t+\Delta t) = R_e(\Delta t) u'_e(t) + u''_e(t+\Delta t) \quad (8)$$

donde  $R_e(\Delta t)$  representa la autocorrelación euleriana de las velocidades  $u'_e$  con desfase  $\Delta t$  y  $u''_e$  es puramente aleatorio.

En el caso del modelo bidimensional utilizado en este artículo, las pseudovelocidades se obtienen mediante la resolución de las ecuaciones:

$$u'_e(t+\Delta t) = f_1 u'_e(t) + u''_e(t+\Delta t) \quad (9)$$

$$w'_e(t+\Delta t) = f_2 w'_e(t) + f_3 u'_e(t+\Delta t) + w''_e(t+\Delta t) \quad (10)$$

en las cuales  $u''_e$  y  $w''_e$  son ruidos gaussianos de media cero. Los coeficientes  $f_1$ ,  $f_2$  y  $f_3$  se calculan suponiendo un proceso cuasi estacionario, de manera que:

$$f_1 = R_{u'}(\Delta t) \quad (11)$$

$$f_2 = \frac{[R_{w'}(\Delta t) - f_1 R_{u'w'}^2(0)]}{[1 - f_1^2 R_{u'w'}(0)]} \quad (12)$$

$$f_3 = \frac{R_{u'w'}(0) \sigma_w [1 - R_w(\Delta t)]}{[\sigma_u (1 - f_1^2 R_{u'w'}(0))]} \quad (13)$$

para los cuales  $\sigma_u$  y  $\sigma_w$  son las derivaciones estándares de las componentes perturbadas de la velocidad, los parámetros  $R_u$  y  $R_w$  son sus autocorrelaciones y  $R_{u'w'}$  la correlación cruzada. Estas variables se determinan mediante las relaciones semiempíricas propuestas por Hanna (1982), en función de los perfiles verticales del viento, el flujo de calor desde el suelo, la rugosidad del terreno y el espesor de la capa de mezcla. Tales valores los proporciona en cada instante el modelo unidimensional de la capa límite planetaria. La descripción completa del modelo se encuentra en Hernández y cols. (1996).

### Condiciones de contorno y resultados

El dominio del modelo se extiende 2000 metros en la horizontal y 1000 metros en la vertical. La fuente se sitúa a 60 metros del suelo, con una emisión de 20 partículas cada 10 segundos cada una de ellas representando una masa de 1 gramo. Se supone que el penacho tiene una flotabilidad nula y no tiene deposición en el suelo (reflexión de partículas). Las condiciones atmosféricas iniciales la da el modelo de la capa límite planetaria al amanecer (fig. 1), después de ejecutarse a partir de la medianoche. Este modelo considera 40 capas con un espesor de 25 metros. Las condiciones del suelo se resumen en: albedo 21%, emisividad de onda larga 92%, rugosidad de 0.1 m, inercia térmica  $1463 \text{ Jm}^{-2} \text{ K}^{-1} \text{ S}^{1/2}$  y contenido de humedad correspondiente a 23%. Las condiciones de insolación corresponden al mes de noviembre en la latitud  $40^\circ \text{ N}$ .

También se considera un perfil logarítmico de acuerdo con las ecuaciones de Businger. La capa límite planetaria se ha tomado de acuerdo con las condiciones establecidas por Monin-Obukhov, recomendadas por Garratt, 1982 y usadas por Fernández y Castro (1991).

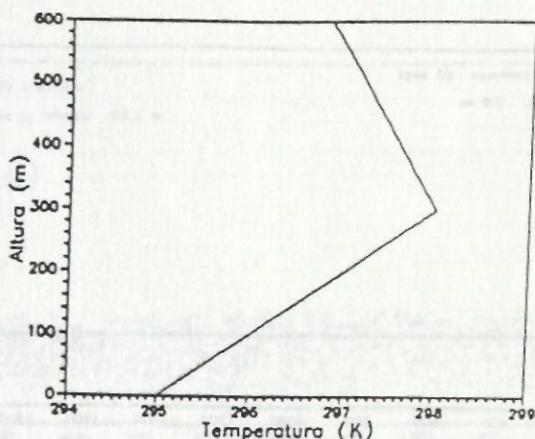


Figura 1. Perfil vertical de temperatura

Las figuras 2a-2h muestran los resultados más significativos de la simulación. Se pueden observar las características de la nube de partículas en diferentes instantes de la simulación que evidencia claramente el fenómeno de la fumigación. Inicialmente la extrema estabilidad de estratificación determina que el penacho tenga una forma de cinta con concentraciones muy elevadas. Luego de 430 segundos desde el amanecer se inicia un cambio en el crecimiento de la capa límite planetaria (fig. 2a), bajo condiciones de turbulencia mecánica, de manera que a los 980 segundos tiene un espesor de 327 metros. En ese momento se evidencia una anchura del penacho, aunque no alcanza el suelo. Pasados 530 segundos desde la situación de crecimiento rápido se observa el inicio de la convección libre, a partir de cuyo momento la capa de mezcla experimenta un crecimiento, al principio irregular y después de forma prácticamente exponencial (fig. 3).

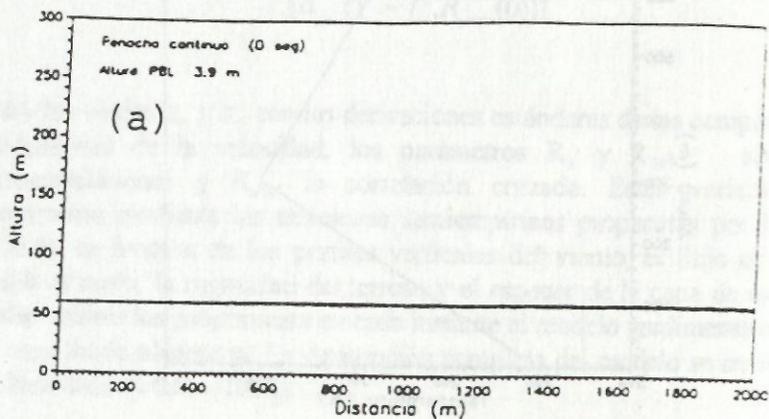


Figura 2a. Penacho continuo

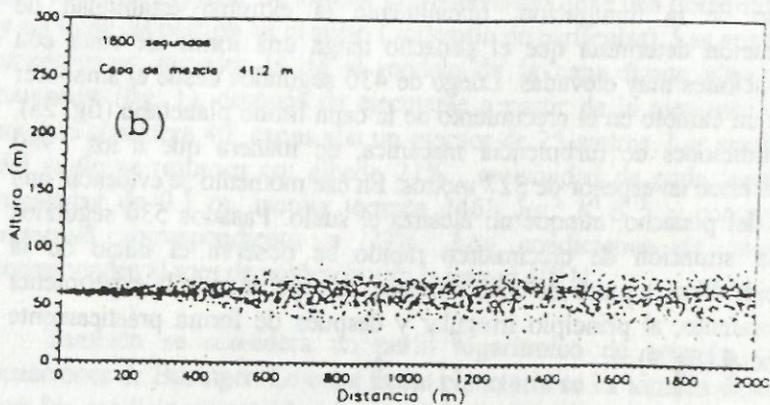


Figura 2b. Capa de mezcla a 41.2 metros

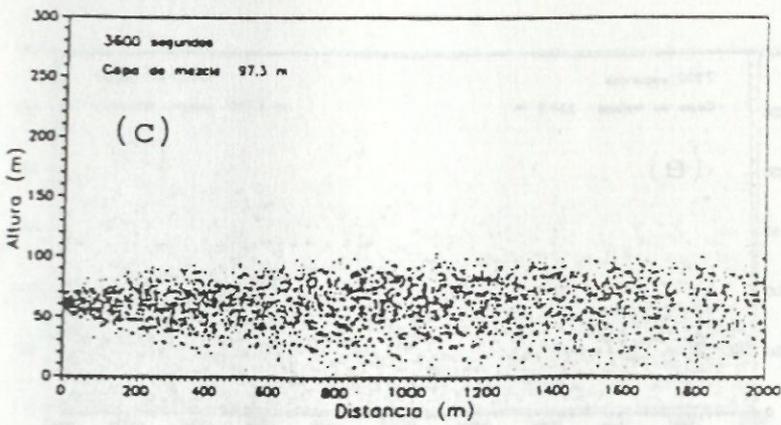


Figura 2c. Capa de mezcla a 97.3 metros

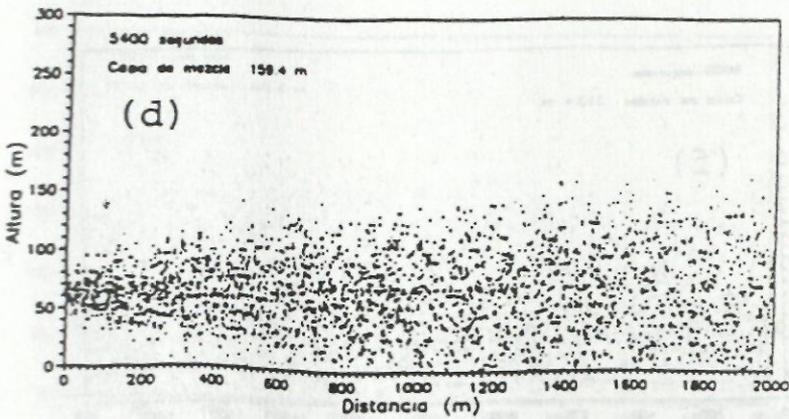


Figura 2d. Capa de mezcla 159.4 metros

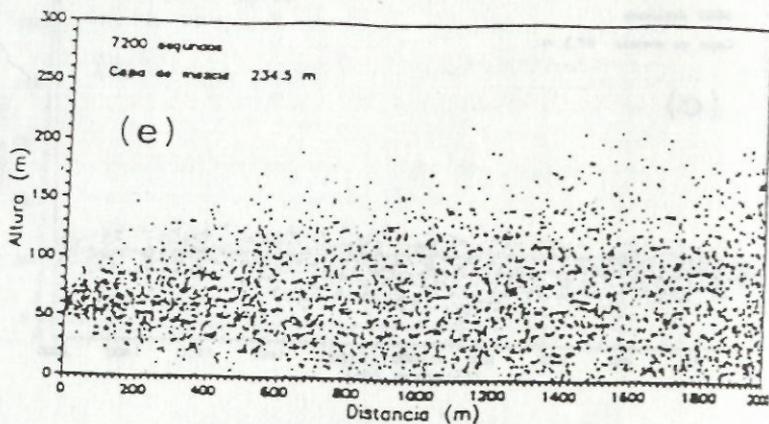


Figura 2e. Capa de mezcla a 234.5 metros

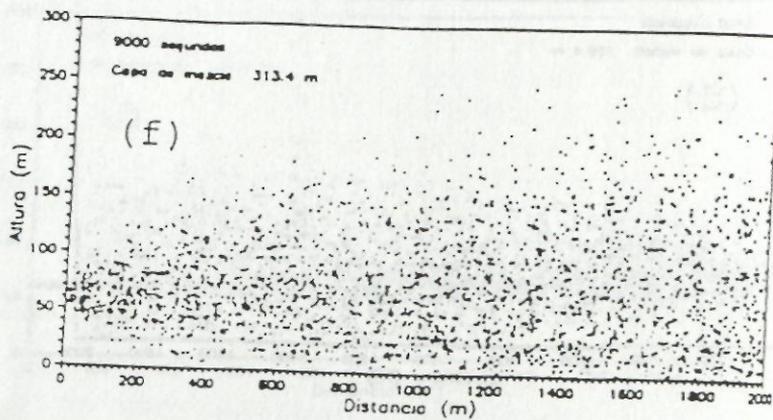


Figura 2f. Capa de mezcla a 313.4 metros

Museo y Archivo UFFM

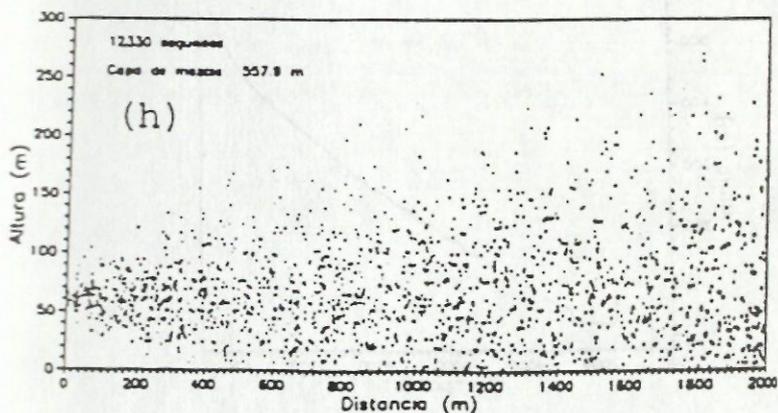


Figura 2g. Capa de mezcla a 409.6 metros

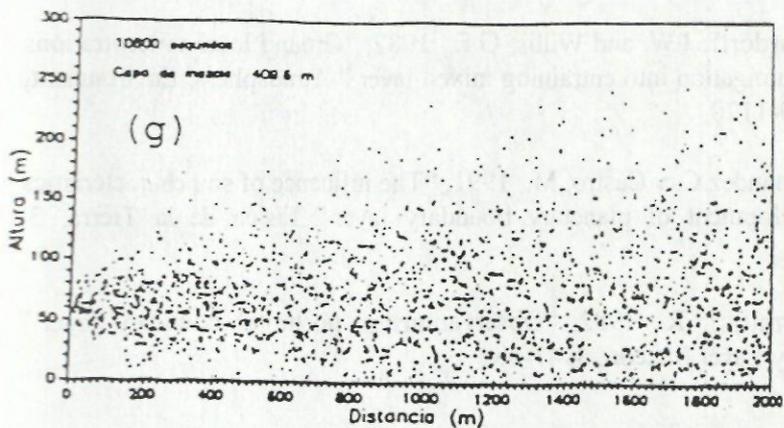


Figura 2h. Capa de mezcla a 507.8 metros

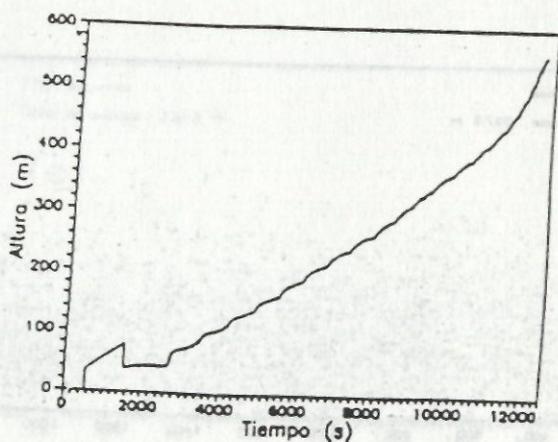


Figura 3. Evolución temporal de la capa límite planetaria

### Referencias

Deardorff, J.W. and Willis, G.E., 1982, "Ground level concentrations due to fumigation into entraining mixed layer." *Atmospheric Environment*, 16, 1159-1170.

Fernández C. y Castro, M., 1991, "The influence of soil characteristics on development of planetary boundary layer." *Física de la Tierra*, 3, 159-178.

Garratt, J. R., 1982, "Observations in nocturnal boundary layer." *Boundary Layer Meteorol.*, 3, 47-58.

Hanna, S.R., 1982, *Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modeling*, Eds. F.T.M. Nieuwstadt and H. van Dop. D. Reidel Publishing Company. Dordrecht. 275-310.

Hernández, E.M.; Méndez Tejada, R. and Rúa, A., 1997, "Physical Model of Long-Range Transport. (submitted)." *Journal Geophysical Research*.

Hurley P. and Physick, W., 1991, "A Lagrangian particle model of fumigation by breakdown of nocturnal inversion." *Atmospheric Environment*, 25A, 1313-1325

Lange R., 1978, "ADPIC - A three dimensional particle in cell model for the dispersal of atmospheric pollutants and its comparison to regional tracer studies", *J. of Applied Meteorology*, 17, 320-329.

Turner D.B., 1970, "Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates. U.S. Environment Protection Agency", Office of Air Programs Publications. No. AP- 26, 35-36.

Zannetti P, 1986, "Monte-Carlo simulation of auto and cross-correlated turbulent velocity fluctuations (MC- LAGPAR II Model).", *Environmental Software*, 1, 99-103.