

## COMPUTATIONAL TOOLS FOR THE SIMULATION OF ATMOSPHERIC POLLUTION EVENTS

### HERRAMIENTAS COMPUTACIONALES PARA LA SIMULACIÓN DE EPISODIOS DE CONTAMINACIÓN ATMOSFÉRICA

César A. Aguirre<sup>1,2,3</sup>, Armando B. Brizuela<sup>1,3</sup> y Leonardo E. Hildt<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigación Científicas y de Transferencia de Tecnología a la Producción (CICyTTP – CONICET), Materi y España, 3105 Diamante, Entre Ríos, Argentina.

<sup>2</sup>Facultad de Ciencia y Tecnología. Universidad Autónoma de Entre Ríos (FCyT-UADER), Ruta Nac. 11, Km. 10,5, 3100 Oro Verde, Entre Ríos, Argentina, leonardohildt@gmail.com

<sup>3</sup>Facultad de Ciencias Agropecuarias. Universidad Nacional de Entre Ríos (FCA-UNER), Ruta Pcial. 11 Km, 3100 Oro Verde, Entre Ríos, Argentina, cesar.aguirre@cicytpp.org.ar, armando.birzuela@gmail.com

---

**ABSTRACT.** The present work briefly details the theoretical aspects of numerical methods for the simulation of turbulent transport and dispersion of gases into the atmospheric boundary layer. Later, we show some laboratory experiments of plume dispersion emitted from contaminant sources and the results of the computational simulation tool in comparison with laboratory simulations. Finally, we present a simulation of a hypothetical delocalisation of an open dump close to the city of Paraná in the province of Entre Ríos, Argentina. The results shown include gas concentrations, as well as their geographical distribution from a downwind source, under the most unfavourable meteorological situation.

**KEY WORDS.** Atmospheric contamination. Large-eddy simulation.

**RESUMEN.** En este trabajo se presentan brevemente los aspectos teóricos sobre los que se basan los métodos numéricos para la simulación de transporte turbulento de gases y dispersión atmosférica. Posteriormente, se muestran algunos casos de validación de los resultados de distribución de concentración de gases emanados de fuentes de contaminación con experiencias de mediciones de laboratorio y por último se presenta una simulación de polución correspondiente a una hipotética relocalización del basurero a cielo abierto en las cercanías de la ciudad de Paraná, Provincia de Entre Ríos. Se muestran los resultados de la concentración de gases y su distribución geográfica corriente abajo de las fuentes de emisión considerando la situación meteorológica más desfavorable para ambos casos.

**PALABRAS CLAVES.** Contaminación atmosférica. Simulación de los grandes torbellinos.

#### INTRODUCCIÓN

En los últimos años se ha manifestado en diversos organismos gubernamentales y organizaciones civiles la necesidad de evaluar, reducir y legislar las emanaciones atmosféricas de las fábricas, industrias y del parque automotor con el fin de mitigar las enfermedades respiratorias de los ciudadanos que habitan en las grandes ciudades y en cercanías de parques industriales, fábricas, usinas, etc. Además,

#### INTRODUCTION

In the last few years diverse governmental and civic organisations have expressed the need to evaluate, reduce and legislate atmospheric emanations from factories, industries and motor vehicles so as to mitigate respiratory illnesses in residents living in large cities close to industrial zones. Moreover, there is increased concern for the efficient management of toxic waste generated by man. In this sense, various developed countries

es notoria la creciente preocupación por la gestión eficiente de los desechos tóxicos y los generados por el hombre. En este sentido, varios países desarrollados cuentan con una gestión eficiente de separación de residuos con el fin de recuperar algunos de ellos utilizando plantas destinadas a tal fin con la consecuente reducción de volumen de los mismos y economía de los recursos, generando una verdadera cadena de comercialización y reinserción. Sin embargo, en otros países todavía existen los basurales a cielo abierto en los cuales se incineran los desechos provocando la emanación de gases, humo y olores desagradables que se dispersan en la atmósfera o en ciertos días en los que se presentan condiciones meteorológicas particulares, son transportados hacia la ciudad con la consecuente contaminación del aire. Los estudios de impacto ambiental de futuros parques industriales, usinas o relocalización de basurales a cielo abierto son necesarios con el fin de minimizar los riesgos de contaminación y mejorar la calidad de vida de los habitantes y reducir los efectos nocivos de los compuestos químicos en los vegetales y deterioro de materiales. Estos estudios se basan en simulaciones de dispersión de las emanaciones de gases y compuestos químicos y su distribución geográfica considerando la situación más desfavorable desde el punto de vista de las condiciones meteorológicas. Las herramientas de simulación computacional para la predicción de los fenómenos de dispersión y contaminación atmosférica han sido desarrolladas en los últimos años con este fin. Una de ellas es la Simulación de los Grandes Torbellinos (SGT) que permite resolver las ecuaciones de la mecánica de fluidos para las grandes escalas de movimiento realizando una discretización del dominio denominado mallado de cálculo. Estas técnicas permitieron obtener resultados de la dinámica de las grandes escalas del flujo bajo condiciones de geometría compleja (Dudhia, 1993; Schiestel, 1993; Akselvoll & Moin, 1995 y Wang, 2000), en flujos denominados "de canal" desarrollados en túneles de viento, donde se estudian las condiciones que imponen las paredes sólidas (Van Driest, 1956; Clark, 1968; Deardorff, 1970; Kreplin & Eckleman, 1979; Moin & Kim, 1982; Bardina *et al.*, 1983; Piomelli *et al.*, 1989; Bagwell *et al.*, 1993; Cabot, 1995; Balaras *et al.*, 1996; Cabot, 1996; Baggett, 1997; Cabot, 1997; Baggett *et al.*, 1997 y Cabot & Moin, 2000) y en los que pueden encontrarse en la atmósfera libre

count on efficient management of waste separation so as to recuperate some of them through plants made for this end; with the consequent reduction in volume of waste and economy of resources generating a veritable chain of commercialization and reinsertion. However, in other countries there still exist open air waste dumps where the burning of waste provokes gas emanation, smoke and disagreeable odours that are dispersed in the atmosphere or, on certain days, when particular meteorological conditions prevail are transported towards the city causing air pollution. Studies on the atmospheric impact of future industrial zones, factories or the delocalisation of open air waste dumps are necessary to minimise and reduce harmful effects of chemical compounds on vegetation and deterioration of material. These studies are based on the simulation of dispersion of gas and chemical compounds and their geographic distribution considering the most unfavourable situation from the meteorological viewpoint. The computational simulation tools for the prediction of dispersion phenomena and atmospheric pollution have been developed in the last years for this purpose. One of these is the Large-Eddy Simulation (LES) which allows solving the equations of the fluid mechanics for large scale movement. These techniques permitted to obtain results on the dynamics of the large flow scales under complex geometric conditions (Dudhia, 1993; Schiestel, 1993; Akselvoll & Moin, 1995 and Wang, 2000) in "channel flow" developed in wind tunnels where the conditions imposed by solid walls are studied (Van Driest, 1956; Clark, 1968; Deardorff, 1970; Kreplin & Eckleman, 1979; Moin & Kim, 1982; Bardina *et al.*, 1983; Piomelli *et al.*, 1989; Bagwell *et al.*, 1993; Cabot, 1995; Balaras *et al.*, 1996; Cabot, 1996; Baggett, 1997; Cabot, 1997; Baggett *et al.*, 1997 and Cabot & Moin, 2000) as well as those found in the open atmosphere (Mason, 1989; Schmidt & Schumann, 1989; Esmaili & Piomelli, 1993 and Xue *et al.*, 2000). The effects of small scales unresolved by the LES technique are considered in the closure models. These are called sub-grid effects and have been studied by Smagorinsky (1963), Deardorff (1973), Clark (1977), Speziale (1985), Mason & Callen (1986), Germano *et al.* (1991), Lilly (1992), Zang *et al.* (1993), Vreman *et al.* (1994) and Porté-Agel *et al.* (2000). In any case it is necessary to simulate not only the effect of small scales on those that are bigger but also the trajectory that a fluid particle carrier of chemical species would have, and which, in addition to the large scales is also influenced by the movement of small scales. The lagrangian models which follow fluid particles are

(Mason, 1989; Schmidt & Schumann, 1989; Esmaili & Piomelli, 1993 y Xue *et al.*, 2000). Los efectos de las pequeñas escalas no resueltas por la técnica SGT son tenidos en cuenta en las condiciones de cierre de las ecuaciones de Navier-Stokes. Éstos son denominados efectos de sub-malla y han sido estudiados por Smagorinsky (1963), Deardorff (1973), Clark (1977), Speziale (1985), Mason & Callen (1986), Germano *et al.* (1991), Lilly (1992), Zang *et al.* (1993), Vreman *et al.* (1994) y Porté-Agel *et al.* (2000). De todas maneras, es necesario simular no sólo el efecto de las pequeñas escalas sobre las más grandes sino también la trayectoria que tendría una partícula fluida portadora de especies químicas y que, además de las grandes escalas, es también influenciada por el movimiento de las pequeñas escalas. Los modelos de tipo lagrangiano de seguimiento de partículas fluidas son acoplados a la SGT con el fin de simular estas trayectorias. Una hipótesis de estudio está basada en que estas trayectorias pueden ser descompuestas en las correspondientes a las grandes escalas y las pequeñas escalas que siguen las leyes del movimiento browniano (Bachelier, 1900; Langevin, 1908; Durbin, 1980; Durbin, 1983). Los modelos estocásticos lagrangianos permiten simular el comportamiento de las pequeñas escalas bajo la hipótesis de isotropía estadística (Pope, 1983; Van Dop *et al.*, 1986; Haworth & Pope, 1986; Thomson, 1987; Pope, 1994; Michelot, 1996; Pozorski & Minier, 1998; Pope, 2000 y Vinkovic *et al.*, 2006a) y de anisotropía considerando la influencia del suelo (Aguirre & Brizuela, 2008). Los mismos han sido utilizados para la simulación de trayectorias de partículas fluidas reactivas (Gao & O'Brien, 1993; Colucci *et al.*, 1998; Aguirre *et al.*, 2003; Vinkovic *et al.*, 2006b;) o sólidas (Zhuang *et al.*, 1989; Aguirre *et al.*, 2002; Aguirre *et al.*, 2004). Estos métodos de simulación han sido validados con la ayuda de experiencias en túneles de viento de dispersión de gases pasivos y partículas sólidas de distinta masa y volumen (Raupach *et al.*, 1980; Fackrell & Robins, 1982; Bultjes, 1983; Arya *et al.* 1987; Gong, 1991), gases reactivos (Raupach *et al.*, 1991; Li *et al.*, 1992; Brown & Bilger, 1996; Li & Bilger, 1996 y Tanière *et al.*, 1997) y en atmósfera estratificada estable (Zegadi *et al.*, 1994).

Estas herramientas son factibles de utilizar para estudios de impacto ambiental, proporcionando resultados aproximados de futuros escenarios de ubicación de usinas, parques industriales y

coupled to the LES with the aim of simulating these trajectories. A hypothesis of study is based on that these trajectories can be decomposed in those corresponding to the large and the small scales which follow the laws of brownian movement (Bachelier, 1900; Langevin, 1908; Durbin, 1980; Durbin, 1983). The lagrangian stochastic models permit the simulation of small scales following the hypothesis of statistical isotropy (Pope, 1983; Van Dop *et al.*, 1986; Haworth & Pope, 1986; Thomson, 1987; Pope, 1994; Michelot, 1996; Pozorski & Minier, 1998; Pope, 2000 and Vinkovic *et al.*, 2006a) and of anisotropy considering the influence of the ground (Aguirre & Brizuela, 2008). The same have been used for the simulation of trajectories of reactive fluid particles (Gao & O'Brien, 1993; Colucci *et al.*, 1998; Aguirre *et al.*, 2003; Vinkovic *et al.*, 2006b;) or solids (Zhuang *et al.*, 1989; Aguirre *et al.*, 2002; Aguirre *et al.*, 2004). These simulation methods have been validated with the help of experiments in wind tunnels of passive gas dispersion and solid particles of differing mass and volume (Raupach *et al.*, 1980; Fackrell & Robins, 1982; Bultjes, 1983; Arya *et al.* 1987; Gong, 1991), reactive gases (Raupach *et al.*, 1991; Li *et al.*, 1992; Brown & Bilger, 1996; Li & Bilger, 1996 and Tanière *et al.*, 1997) and in stable stratified atmosphere (Zegadi *et al.*, 1994).

These tools could be used for studies on environmental impact, giving approximate results in future scenarios with regard to the location of factories, industrial parks and open air waste dumps. In the present study, firstly, theoretical aspects on which the numerical methods for the simulated turbulent transport of gases and atmospheric dispersion are based are detailed. Then, some laboratory cases are presented to evaluate results of the tool used, comparing those with experimental measurements of concentrations of gas emanated by contaminant sources and lastly, a study with a real scale of pollution corresponding to emissions by an open air waste dump close to the city of Paraná, in the Province of Entre Ríos, Argentina, is presented. The results of the concentration of gases and their geographic distribution downwind respect to the emission sources considering the most unfavourable meteorological situation in both cases are shown.

## METHODOLOGY RESOLUTION OF THE LARGE SCALES (LES)

The LES technique is an important tool for the study of the transport of gases and particles in the atmospheric boundary layer because it permits to

basureros a cielo abierto. En el presente trabajo se detallan en primer lugar los aspectos teóricos sobre los que se basan los métodos numéricos para la simulación de transporte turbulento de gases y dispersión atmosférica. Luego se presentan algunos casos de laboratorio con el fin de evaluar los resultados de la herramienta comparando los mismos con mediciones experimentales de concentración de gases emanados de fuentes de contaminación y por último se presenta un caso de estudio de contaminación a escala real que corresponde a las emisiones de un basural a cielo abierto en las cercanías de la ciudad de Paraná, Provincia de Entre Ríos, Argentina. Se muestran los resultados de la concentración de gases y su distribución geográfica corriente abajo de las fuentes de emisión considerando la situación meteorológica más desfavorable para ambos casos.

### METODOLOGÍA RESOLUCIÓN DE LAS GRANDES ESCALAS (SGT)

La técnica SGT es una importante herramienta para el estudio del transporte de gases y partículas en la capa límite atmosférica ya que permite obtener una descripción tridimensional del campo de viento para simular el transporte de estos contaminantes. La misma se basa en considerar la resolución de las ecuaciones de balance de masa, cantidad de movimiento y energía de las escalas turbulentas más grandes ya que éstas son las responsables de la mayor parte de la energía involucrada en estos fenómenos de transporte. En este trabajo se ha utilizado el código ARPS (Advanced Regional Prediction System) en su versión 5.2.12 desarrollado por CAPS (Center of Analysis and Prediction of Storms) de la Universidad de Oklahoma (USA), cuyos programas fuentes escritos en FORTRAN 90 se encuentran disponibles en la página <http://www.caps.ou.edu/ARPS>. Este modelo no sólo simula el campo de viento, sino que posee sub-modelos de flujo de calor y vapor de agua, formación de nubes y precipitación. Para ello tiene en cuenta la orografía y cobertura del terreno como así también las condiciones iniciales tanto del suelo como de la capa límite atmosférica. Si bien los modelos de sub-malla *Smagorinsky Standard* (*Smagorinsky*, 1963) modificado por Lilly (1967) y 1,5 TKE (Turbulent Kinetic Energy) propuesto por Schumann (1975) y modificado por Deardorff (1980) para el cálculo del tensor de *Reynolds* de sub-malla brindan

obtain a three-dimensional description of the wind field to simulate the transport of these contaminants. The technique is based on the resolution of the equations of mass balance, quantity of movement and energy of the largest turbulent scales, because these are the responsible for the greater part of the energy involved in these transport phenomena. The ARPS (Advanced Regional Prediction System) code in its 5.2.12 version developed by the CAPS (Center of Analysis and Prediction of Storms) of the Oklahoma University (USA) was used in this study. Their programmes-sources, written in FORTRAN 90, are available at <http://www.caps.ou.edu/ARPS>. This model not only simulates the wind field but also has sub-models of heat and vapour flow, cloud formation and rainfall. For this, the orography and land cover are considered as well as the initial conditions of the ground and the atmospheric boundary layer. Even though the sub-grid models *Smagorinsky Standard* (*Smagorinsky*, 1963) modified by Lilly (1967) and 1.5 TKE (Turbulent Kinetic Energy) proposed by Schumann (1975) and modified by Deardorff (1980) for the calculation of the sub-grid scale tensor of *Reynolds* give satisfactory results for meteorological meso-scale applications, they are not sufficient to describe phenomena of turbulent transport, diffusion and chemical reactions that occur in pollution episodes with an acceptable precision level. Therefore, the code has been modified by Aguirre (2005) including the option of the calculation of the tensor of sub-grid of *Reynolds* with the *Smagorinsky dynamic* method (Germano *et al.*, 1991) and it has been coupled with a stochastic lagrangian model of tracking of fluid particles validated by Aguirre & Brizuela (2008) with experiments measuring CO<sub>2</sub> concentrations emitted upwind from a hill with a slight slope carried out by Gong (1991) in a wind tunnel.

The equations of mass balance, of quantity of movement and of energy are resolved using the scheme of finite differences centred on a cell of *Arakawa C-grid* type and use a system of curved line coordinates that follow the variations of the terrain. The atmospheric model takes into account the compressibility of the flow. The numerical scheme used to obtain the solution of the differential equations is of 4th order centred of the explicit type while that used to integrate the equations of pressure and vertical component of the air speed is implicit of *Crank-Nicholson* type.

The equations of mass balance and quantity of movement are applied to the field of velocity and to the scale magnitudes (potential temperature  $\theta$  and relation of water mix in the three states). The LES

resultados satisfactorios para las aplicaciones meteorológicas de meso-escala, no son suficientes para describir con un grado de precisión aceptable los fenómenos de transporte turbulento, difusión y reacciones químicas que ocurren en los episodios de polución. Es por ello que este código ha sido modificado por Aguirre (2005) incluyendo la opción del cálculo del tensor *Reynolds de sub-malla* por el método Smagorinsky dinámico (Germano et al., 1991) y se ha acoplado con un modelo estocástico lagrangiano de seguimiento de partículas fluidas que ha sido validado por Aguirre & Brizuela (2008) con experiencias de medición de concentración de CO2 emitidas a barlovento de una colina de suave pendiente realizadas por Gong (1991) en túnel de viento.

Las ecuaciones de balance de masa, de cantidad de movimiento y de energía son resueltas utilizando el esquema de diferencias finitas centradas sobre una celda de tipo *Arakawa C-grid* y utiliza un sistema de coordenadas curvilíneo que sigue las variaciones del terreno. El modelo atmosférico tiene en cuenta la compresibilidad del flujo. El esquema numérico utilizado para obtener la solución de las ecuaciones diferenciales es de 4° orden centrado de tipo explícito mientras que el utilizado para integrar las ecuaciones de presión y componente vertical de la velocidad del aire es implícito de tipo *Crank-Nicholson*.

Las ecuaciones de balance de masa y cantidad de movimiento son aplicadas al campo de velocidades y a las magnitudes escalares (temperatura potencial  $\theta$  y relación de mezcla de agua en los tres estados). La técnica SGT implica la resolución de las escalas del flujo turbulento mayores a una escala  $\Delta$  que se debe encontrar en el rango inercial de la cascada de energía de *Kolmogorov*. Esto involucra el uso de una operación de filtrado espacial con un filtro pasa bajo:

$$f^{\oplus}(x_i, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x_i', t) G(x_i' - x_i) dx_i' \tag{1}$$

donde  $G(x_i)$  es la función de convolución cuyas propiedades son:  $G(x_i) = G(-x_i)$  y  $\int_{-\infty}^{+\infty} G(x_i) dx_i = 1$ . Esta operación de filtrado aplicada al campo de velocidades puede ser vista como una descomposición del mismo en grandes escalas (resueltas por SGT)  $u_i^{\oplus}$  y pequeñas escalas residuales (no resueltas)  $u_i^{\ominus}$ :

$$u_i = u_i^{\oplus} + u_i^{\ominus} \tag{2}$$

technique implies the resolution of the turbulent flow scales greater than a  $\Delta$  scale that has to be found in the inertial range of the energy cascade of *Kolmogorov*. This involves the use of an operation of spatial filtering with a low-pass filter.

$$f^{\oplus}(x_i, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x_i', t) G(x_i' - x_i) dx_i' \tag{1}$$

where  $G(x_i)$  is the function of convolution whose properties are:  $G(x_i) = G(-x_i)$  and  $\int_{-\infty}^{+\infty} G(x_i) dx_i = 1$ . This filtering operation, applied to the field of velocities, can be seen as a decomposition of the filtering on large scales (solved by LES)  $u_i^{\oplus}$  and small residual scales (unsolved)  $u_i^{\ominus}$ :

$$u_i = u_i^{\oplus} + u_i^{\ominus} \tag{2}$$

The filter operation applied to the transport equations results:

$$\frac{\partial u_j^{\oplus}}{\partial x_j} = 0 \tag{3}$$

$$\frac{\partial u_i^{\oplus}}{\partial t} + \frac{\partial(u_i^{\oplus} u_k^{\oplus})}{\partial x_j} = g_i \bar{B}^{\oplus} - \frac{\partial p^{\oplus}}{\partial x_i} + 2 \epsilon_{ijk} \Omega_j u_k^{\oplus} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} \tag{4}$$

where  $B$  represents the effects of hydrostatic push,  $\Omega$  is the angular velocity of the earth,  $\tau_{ij}$  represents the viscosity of the sub-grid due to the energy contribution of the unsolved scales by LES (named sub-grid stress tensor) and  $T_{ij}$  is the tensor of tensions of the molecular viscosity. The bar over the magnitudes denotes that the variable has been pondered by the density of the air  $\rho$  evaluated at a height  $z$  above the ground ( $f_i = \rho_z f_i$ ).

The superscript  $\oplus$  refers that the magnitude has been filtered with a low-pass filter of spatial scale  $\Delta$  according to (1).

The transport equation applied to scalar  $\phi$  results:

$$\frac{\partial \bar{\phi}^{\oplus}}{\partial t} + \frac{\partial(u_i^{\oplus} \bar{\phi}^{\oplus})}{\partial x_j} = - \frac{\partial \tau_{\phi i}}{\partial x_j} + S_{\phi} \tag{5}$$

where  $S_{\phi}$  represents the sources or sinks of the scalar  $\phi$ .

For the resolution of the tensor of tensions of the sub-grid or the viscosity of the sub-grid, ARPS has two alternatives: one is the use of a model at a gradient from the resolved scales, named the Smagorinsky model (Smagorinsky, 1963). The second option is, from an estimation of the kinetic turbulent energy of the sub-grid (1.5 TKE) resolved with a transport

La operación de filtro aplicada a las ecuaciones de transporte resulta:

$$\frac{\partial \bar{u}_i^\oplus}{\partial x_j} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i^\oplus}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_i^\oplus \bar{u}_k^\oplus)}{\partial x_j} = g_i \bar{B}^\oplus - \frac{\partial \bar{p}^\oplus}{\partial x_i} + 2 \epsilon_{ijk} \Omega_j \bar{u}_k^\oplus - \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{T}_{ij}}{\partial x_j} \quad (4)$$

donde  $B$  representa los efectos del empuje hidrostático,  $\Omega$  es la velocidad angular de la tierra,  $T_{ij}$  representa la viscosidad de sub-malla debido al aporte de energía de las escalas no resueltas por SGT (denominado tensor de tensiones de sub-malla) y  $\bar{T}_{ij}$  es el tensor de tensiones de la viscosidad molecular. La barra sobre las magnitudes denota que la variable ha sido ponderada por la densidad del aire  $\bar{\rho}$  evaluada a la altura  $z$  sobre el terreno ( $f_i = \rho_z f_i$ ). El superíndice  $\oplus$  explicita que la magnitud ha sido filtrada con un filtro pasa bajo de escala espacial  $\Delta$  según (1).

La ecuación de transporte aplicada a un escalar  $\phi$  resulta:

$$\frac{\partial \bar{\phi}^\oplus}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_i^\oplus \bar{\phi}^\oplus)}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{\tau}_{\phi i}}{\partial x_j} + S_\phi \quad (5)$$

donde  $S_\phi$  representa las fuentes o sumideros del escalar  $\phi$ .

Para la resolución del tensor de tensiones de submalla o viscosidad de submalla, ARPS dispone de dos alternativas: Una es utilizar un modelo a gradiente a partir de las escalas resueltas, denominado modelo de Smagorinsky (Smagorinsky, 1963). La segunda opción es a partir de una estimación de la energía cinética turbulenta de submalla (1.5 TKE) resuelta con una ecuación de transporte donde los términos de producción, difusión, gravedad y disipación son obtenidos a partir de modelos a gradiente propuestos por Deardorff (1980).

Una descripción más detallada del código ARPS puede encontrarse en Xue *et al.* (1995) y Xue *et al.* (2000).

### MODELO ESTOCÁSTICO LAGRANGIANO (MEL)

Para obtener una descripción más realista de las trayectorias de partículas fluidas que transportan las especies químicas en régimen turbulento debe realizarse la simulación de las pequeñas escalas no resueltas por SGT. Es decir, se simula el movimiento

equation where the terms of production, diffusion, gravity and dissipation are obtained from models at a gradient proposed by Deardorff (1980).

A more detailed description of the ARPS code can be found in Xue *et al.* (1995) and Xue *et al.* (2000).

### STOCHASTIC LAGRANGIAN MODEL (SLM)

To obtain a more realistic description of the trajectories of fluid particles that transport the chemical species in a turbulent regimen, the small scale simulation unresolved by LES must be carried out. That is, the movement of the particles in the interior of an element of the grid is simulated. For this the Langevin equation can be used:

$$\frac{dU_i}{dt} = h_i(U_i, t) + q_i(U_i, t)\eta(t) \quad (6)$$

where  $h_i(U_i, t)$  is the deterministic term of the velocity  $U_i$  of a fluid particle and  $q_i(U_i, t)$  is the random term that, making an analogy with the Brownian movement, is linked to the statistical properties of the turbulence.  $\eta(t)$  is a random variable whose mean value is null and covariance  $\langle \eta(t')\eta(t'') \rangle = \delta_{ij}\delta(t'-t'')$ . This property suggests that  $\eta$  is neither correlated in space nor time, that is, it follows a *Markov* process.

To obtain the terms of the Langevin equation the following hypotheses are proposed:

- The small scales of the turbulence are statistically isotropic, that is, they lose the memory of the geometry of the whirlwind that originated them.
- They are found far from the kinetic energy production zone in the energy spectrum, placed after the inertial range.
- There is transference of energy from large scales towards small ones, which is dissipated by molecular viscosity.

The stochastic simulation model of small scales is based on those hypotheses. The first is not completely sustainable in closeness to solid walls or to the ground. For this reason an anisotropic model will be used. The last hypothesis suggests that a relationship exists between the results of the LES and the coefficients of the Langevin model of the equation (6). In this way, these terms are calculated dynamically in each cell and for each time step from the results of the LES. Consequently, the fluid particle moves inside the cell of the calculation grid following the evolution of the large scales resolved by LES to which is added a fluctuation that simulates the behaviour of the small scales of movement produced in its interior. The decomposition of the velocities field of each fluid

de las mismas al interior de un elemento de la malla. Para esto puede ser utilizada la ecuación de Langevin:

$$\frac{dU_i}{dt} = h_i(U_i, t) + q_i(U_i, t)\eta(t) \quad (6)$$

donde  $h_i(U_i, t)$  es el término determinístico de la velocidad  $U_i$  de una partícula fluida y  $q_i(U_i, t)$  es el término aleatorio que, haciendo una analogía con el movimiento Browniano, está ligado a las propiedades estadísticas de la turbulencia.  $\eta(t)$  es una variable aleatoria cuyo valor medio es nulo y covarianza  $\langle \eta(t')\eta(t'') \rangle = \delta_{ij}\delta(t'-t'')$ . Esta propiedad sugiere que  $\eta$  no está correlacionada ni en el espacio ni en el tiempo, es decir, sigue un proceso de Markov.

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

a) Las pequeñas escalas de la turbulencia son estadísticamente isotrópicas, es decir, pierden la memoria de la geometría del torbellino que las originó.

b) Las mismas se encuentran lejos de la zona de producción de energía cinética en el espectro de energía, ubicándose luego del rango inercial.

c) Existe una transferencia de energía desde las grandes escalas hacia las pequeñas, disipándose la misma por viscosidad molecular.

En estas hipótesis se basa el modelo estocástico de simulación de las pequeñas escalas. La primera no es del todo sustentable en cercanías de paredes sólidas o cerca del suelo. Por esta razón será utilizado un modelo anisotrópico. La última hipótesis propone que existe una relación entre los resultados de la SGT y los coeficientes del modelo de Langevin de la ecuación (6). De esta forma, estos términos son calculados dinámicamente en cada celda y para cada paso de tiempo a partir de los resultados de la SGT. Por ende, la partícula fluida

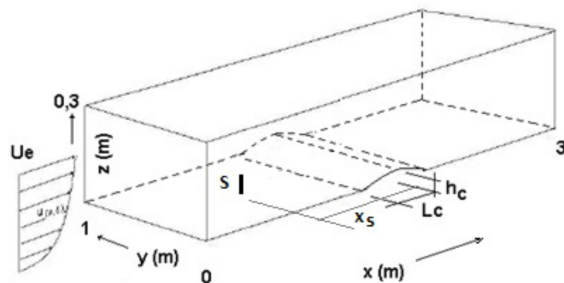


Figure 1. Scheme of Gong's experiment (1991).

Figura 1. Esquema de la experiencia de Gong (1991).

particle can be expressed as:

$$U_i(x_i, t) = u_i^\oplus(x_i, t) + u_i^\ominus(x_i, t) \quad (7)$$

To obtain the coefficients of the equation (6), the transport equation of the density of filtered probability of the velocities field, called the Fokker-Planck equation, can be used:

$$\frac{\partial P_L}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_i} [U_i(x_i, t)P_L] - \frac{\partial}{\partial u_i} [h_i(U_i, t)P_L] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial u_i \partial u_j} [q_{ik}(U_i, t)q_{jk}(U_j, t)P_L] \quad (8)$$

If in (8) the decomposition (7) is used and the derivatives of the velocity field resolved by LES are replaced by the terms expressed in the relation (4), the following is obtained:

$$\frac{\partial P_L}{\partial t} = -u_k^\oplus \frac{\partial P_L}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_k} [u_k^\ominus P_L] - g_k B^\oplus \frac{\partial P_L}{\partial u_i} + \frac{\partial p^\oplus}{\partial x_i} \frac{\partial P_L}{\partial u_i} - 2\epsilon_{ijk} \Omega_j \frac{\partial}{\partial u_i} [u_k^\oplus P_L] - \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k} \frac{\partial P_L}{\partial u_i} - \frac{\partial}{\partial u_i} [u_j u_j^\oplus P_L] + \frac{1}{2} C_0 \epsilon \frac{\partial^2 P_L}{\partial u_i \partial u_j} \quad (9)$$

where the random term of the equation (6) has been assigned as a function of the dissipation rate  $\epsilon$  of this turbulent energy (Pope, 1994). In this term  $C_0$  is the constant of Kolmogorov whose value has been taken as 2.1 (Kolmogorov, 1941). In this way, the random term of the equation (6) becomes:

$$q_{ij} = \sqrt{C_0 \epsilon} \delta_{ij} \quad (10)$$

and the determinist term of (6) can be found by association between the (8) and the (9) considering that the derivatives with respect to the velocity and space are interchangeable:

$$h_i(U_i, t) = g_k B^\oplus - \frac{\partial p^\oplus}{\partial x_k} + 2\epsilon_{ijk} \Omega_j u_k^\oplus + \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k} + \alpha_{ij} u_j^\oplus \quad (11)$$

In the equation (11) it remains to determine the tensor  $\alpha_{ij}$  only. This will depend on the statistical characteristics of the turbulence. For the most complex case, these characteristics are of non-stationary, inhomogeneous and anisotropic flow, as those developed in the atmospheric boundary layer on a rough and heterogeneous terrain close to the ground surface. For this case, the equation of the tensor according to Aguirre & Brizuela (2008) is the following:

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{2K^\ominus} \frac{dK^\ominus}{dt} \delta_{ij} - \left(\frac{3}{4} C_0\right) \frac{\epsilon}{K^\ominus} \delta_{ij} + \left(\frac{R_{ij}}{2K^\ominus} - \frac{\delta_{ij}}{3}\right) \frac{\epsilon}{K^\ominus} \quad (12)$$

where  $K^\ominus$  represents the kinetic turbulent energy of

se desplaza por el interior de la celda de la malla de cálculo siguiendo la evolución de las grandes escalas resueltas por SGT y se le adiciona una fluctuación que simula el comportamiento de las pequeñas escalas de movimiento producidas en el interior de la misma. La descomposición del campo de velocidades de cada partícula fluida puede expresarse como:

$$U_i(x_i, t) = u_i^{\oplus}(x_i, t) + u_i^{\ominus}(x_i, t) \quad (7)$$

Para obtener los coeficientes de la ecuación (6) se puede utilizar la ecuación de transporte de la densidad de probabilidad filtrada del campo de velocidades, denominada ecuación de *Focker-Plank*:

$$\frac{\partial P_L}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_i} [U_i(x_i, t) P_L] - \frac{\partial}{\partial u_i} [h_i(U_i, t) P_L] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial u_i \partial u_j} [g_{ik}(U_i, t) q_{jk}(U_j, t) P_L] \quad (8)$$

Si en (8) se utiliza la descomposición (7) y se reemplazan las derivadas de campo de velocidad resultado por SGT por los términos expresados en la relación (4) se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_L}{\partial t} = & -u_i^{\oplus} \frac{\partial P_L}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} [u_i^{\oplus} P_L] - g_{ik} B^{\oplus} \frac{\partial P_L}{\partial u_i} + \frac{\partial P^{\oplus}}{\partial x_i} \frac{\partial P_L}{\partial u_i} - 2 \epsilon_{ijk} \Omega_j \frac{\partial}{\partial u_i} [u_k^{\oplus} P_L] - \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k} \frac{\partial P_L}{\partial u_i} \\ & - \frac{\partial}{\partial u_i} [u_i u_j^{\oplus} P_L] + \frac{1}{2} C_0 \epsilon^{\oplus} \frac{\partial^2 P_L}{\partial u_i \partial u_j}, \end{aligned} \quad (9)$$

donde se ha optado por asignar al término aleatorio de la ecuación (6) como función de la tasa de disipación  $\mathcal{E}$  de esta energía turbulenta (Pope, 1994). En este término  $C_0$  es la *constante de Kolmogorov* cuyo valor se ha tomado igual a 2,1 (Kolmogorov, 1941). De esta forma, el término aleatorio de la ecuación (6) toma la forma:

$$q_{ij} = \sqrt{C_0 \mathcal{E}} \delta_{ij} \quad (10)$$

y el término determinista de (6) puede encontrarse por asociación entre la (8) y la (9) considerando que las derivadas respecto de la velocidad y del espacio son permutables entre sí:

$$h_i(U_i, t) = g_{ik} B^{\oplus} - \frac{\partial P^{\oplus}}{\partial x_i} + 2 \epsilon_{ijk} \Omega_j u_k^{\oplus} + \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k} + \alpha_{ij} u_j^{\oplus} \quad (11)$$

En la expresión (11) sólo falta determinar el tensor  $\alpha_{ij}$ . El mismo dependerá de las características estadísticas de la turbulencia. Para el caso más complejo, estas características son de flujo no estacionario, inhomogéneo y anisotrópico, como

sub-grid which is obtained using a transport equation whose terms are calculated according to Deardorff (1980),  $\mathcal{E}$  is the molecular dissipation rate of the kinetic turbulent energy of sub-grid and  $R_{ij}$  is the Reynolds tensor of sub-grid or turbulent viscosity of sub-grid. The last term is obtained using the turbulent diffusivity models from the resolution of the large scales. More details of this resolution can be found in Aguirre *et al.* (2006a, 2006b) and Aguirre & Brizuela (2008).

## RESULTS

### COMPARISON WITH EXPERIMENTS OF LABORATORY MEASUREMENTS

#### Description of Gong's experiment (1991)

Gong & Ibbetson (1989) carried out measurements of mean velocity and air flow fluctuation in the neutral turbulent layer produced in the wind tunnel of the Department of Agriculture of the University of Reading (Great Britain) using the methodology of generation of turbulent flow of Counihan (1969). The reserchers installed a rubber sheet on the floor of the tunnel to simulate a rough floor and a hill with a slight slope. Details of the geometry of the tunnel and the simulated hill can be found in Gong & Ibbetson (1989). Gong (1991) measured concentrations of a passive gas (carbon dioxide) incorporating a nearly point source upwind of a bi-dimensional symmetrical hill placed transversally to the air flow direction as shown in Figure 1. The characteristic data of the boundary layer generated in the laboratory, the diameter and height of the gas emission source as well as its position are:

- Thickness of boundary layer:  $\delta = 300.00$  mm
- Mean velocity of exterior flow of the boundary layer:  $U_e = 8.00$  m/s
- Velocity of friction:  $u_* = 0.44$  m/s
- Parameter of ground roughness:  $Z_0 = 0.17$  mm
- Height of emission source of  $CO_2$ :  $Z_s = 13$  mm.
- Diameter of the emission source:  $d_s = 1.35$  mm.
- Distance between the emission source and hill crest:  $X_s = 350.00$  mm.
- Height of hill crest:  $h_c = 31.00$  mm.
- Distance between crest and foot of hill:  $L_c = 200.00$  mm.
- Mean  $CO_2$  concentration at the exit of the emission source:  $C_{CO_2}^0 = 400.00$  ppm.

The measurements of gas concentration were made on the plane of axial symmetry containing the emission source, obtaining mean value profiles in five positions:



los que se desarrollan en la capa límite atmosférica sobre un terreno rugoso y heterogéneo cerca de la superficie del suelo. Para este caso, la expresión del tensor según Aguirre & Brizuela (2008) es la siguiente:

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{2K^\theta} \frac{dK^\theta}{dt} \delta_{ij} - \left(\frac{3}{4} C_0\right) \frac{\epsilon}{K^\theta} \delta_{ij} + \left(\frac{R_{ij}}{2K^\theta} - \frac{\delta_{ij}}{3}\right) \frac{\epsilon}{K^\theta} \quad (12)$$

donde  $K^\theta$  representa la energía cinética turbulenta de submalla que es obtenida utilizando una ecuación de transporte cuyos términos se calculan según Deardorff (1980),  $\epsilon$  es la tasa de disipación molecular de la energía cinética turbulenta de submalla y  $R_{ij}$  es el tensor Reynolds de submalla o viscosidad turbulenta de submalla. Este último es obtenido con un modelo a gradiente a partir de la resolución de las grandes escalas. Más detalles de esta resolución pueden encontrarse en Aguirre et al. (2006a, 2006b) y Aguirre & Brizuela (2008).

### RESULTADOS COMPARACIÓN CON EXPERIMENTOS DE MEDICIONES EN LABORATORIO Descripción de la experiencia de Gong (1991)

Gong & Ibbetson (1989) realizaron mediciones de los valores de velocidad media y fluctuación del flujo de aire en capa límite neutra turbulenta producida en el túnel de viento del laboratorio del Departamento de Agricultura de la Universidad de Reading (Gran-Bretaña) utilizando la metodología

$$x - x_{s=} \begin{cases} 150 \text{ mm: foot, upwind} \\ 250 \text{ mm: halfway uphill, upwind} \\ 350 \text{ mm: crest} \\ 450 \text{ mm: halfway uphill, downwind} \\ 550 \text{ mm: foot, downwind} \end{cases}$$

Below is the comparison between the experimental measurements and the results of the simulation using the coupled model LES-SLM considering the hypothesis of statistically inhomogeneous and anisotropic turbulence for the tensor  $\alpha_{ij}$  (12). Besides, numeric simulations were carried out without using the stochastic model for sub-grid turbulence, that is, that in this case the particles only followed the trajectories imposed by the LES.

### Results of the simulation of Gong's experiment (1991)

To begin the simulation, the results of the boundary layer dynamics obtained at 8 seconds were used. These results suffice to consider that the flow is in a permanent and stable state (Aguirre et al., 2007). From this moment, began the injection of fluid particles. For statistical calculations the results were considered after an additional 4 seconds to obtain a permanent state of the particles within the domain of the calculations. The total physical time simulated was 100 seconds. The rate of injection of particles was fixed at 50000 particles per second. The temporal evolution of the quantity of fluid particles in the domain of the calculations shows that close to 130000 are present

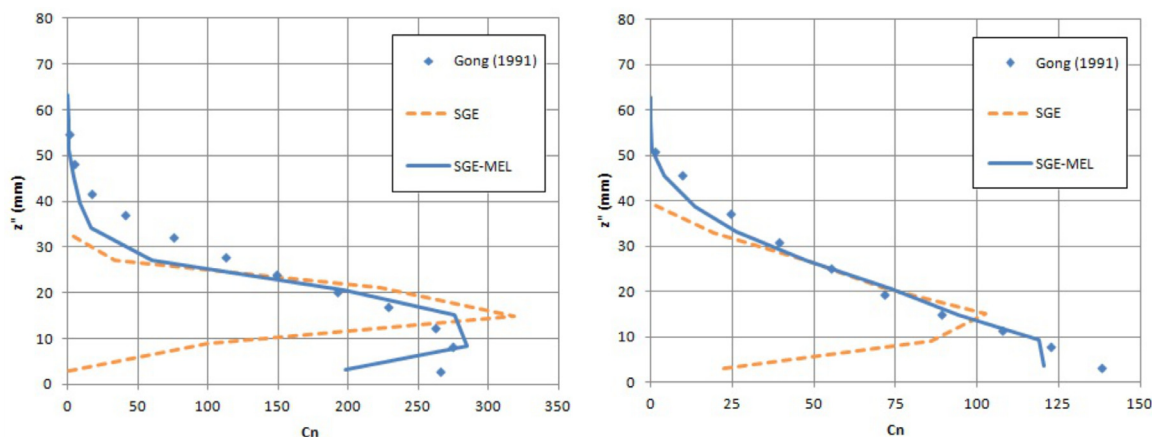


Figure 2. Profiles of normalised concentrations upwind hill. Right:  $x - x_s = 250$  mm (halfway on the hill). Left:  $x - x_s = 150$  mm (foot of the hill)

Figura 2. Perfiles de concentración normalizada a barlovento de la colina. Derecha:  $x - x_s = 250$  mm (media loma de la colina). Izquierda:  $x - x_s = 150$  mm (pie de la colina)

de generación de flujo turbulento de Counihan (1969). Los investigadores instalaron sobre el piso del túnel una hoja de caucho para simular un suelo rugoso y una colina de suave pendiente. Detalles de la geometría del túnel y de la colina simulada pueden encontrarse en Gong & Ibbetson (1989). Gong (1991) realizó mediciones de concentración de un gas pasivo (anhídrido carbónico) incorporando una fuente casi puntual corriente arriba de una colina simétrica bidimensional ubicada transversalmente a la dirección del flujo de aire como se muestra en la Figura 1. Los datos característicos de la capa límite generada en laboratorio, el diámetro y altura de la fuente de emisión del gas como así también posición de la misma son:

- Espesor de la capa límite:  $\delta = 300,00$  mm
- Velocidad media del flujo exterior a la capa límite:  $U_e = 8,00$  m/s
- Velocidad de fricción:  $u_* = 0,44$  m/s
- Parámetro de rugosidad del suelo:  $Z_0 = 0,17$  mm
- Altura de la fuente de emisión de  $CO_2$ :  $Z_s = 13,00$  mm.
- Diámetro de la fuente de emisión:  $d_s = 35$  mm.
- Distancia entre la fuente de emisión y la cima de la colina:  $X_s = 350,00$  mm.
- Altura de la cima de la colina:  $h_c = 31,00$  mm.
- Distancia entre la cima y el pie de la colina:  $L_c = 200,00$  mm.
- Concentración media de  $CO_2$  a la salida de la fuente de emisión:  $C_{CO_2}^0 = 400,00$  ppm.

in a permanent state. The total quantity of particles injected for the entire simulation time was 10125151. The author of the experiment presented the results of gas concentration normalized  $C_n = \frac{C\delta U_e^2}{z u_*^2 C_{CO_2}^0}$  where  $C$  is the gas concentration and  $u_*$  is the velocity of the air at the height of the emission source. The figures 2, 3 and 4 show the profiles of the mean concentration using LES and LES-SLM.

Figure 5 shows concentration at ground level (left) and the standard deviation of the height of the centre

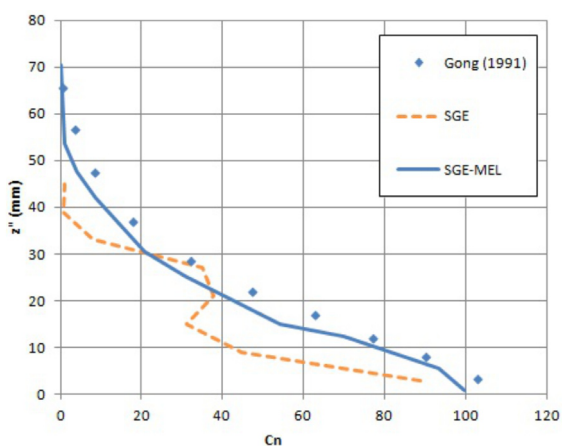


Figure 3. Profiles of mean concentration at the crest of the hill at  $x - x_s = 350$  mm.

Figura 3. Perfiles de concentración media en la cima de la colina a  $x - x_s = 350$  mm.

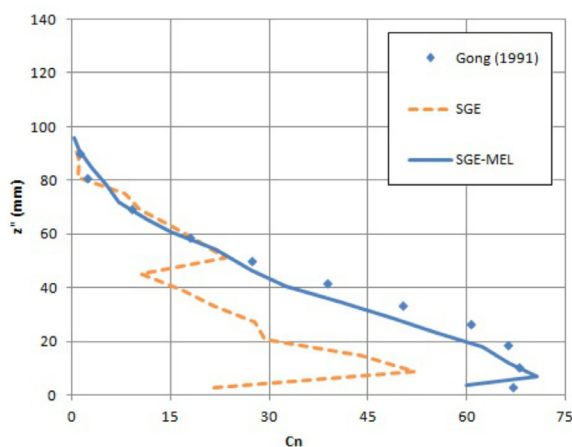
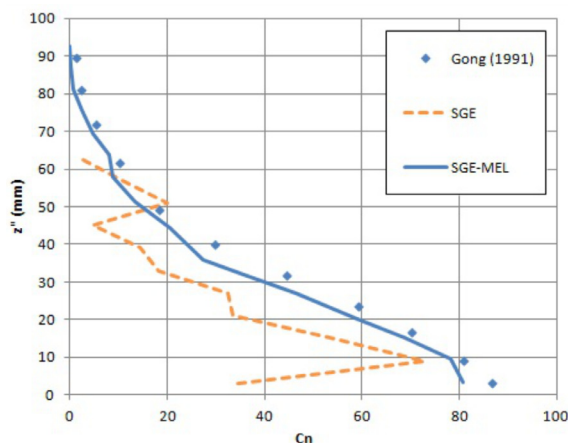


Figure 4. Profiles of normalised concentration downwind hill. Left:  $x - x_s = 450$  mm (halfway on the hill). Right:  $x - x_s = 550$  mm (foot of the hill).

Figura 4. Perfiles de concentración normalizada a sotavento de la colina. Izquierda:  $x - x_s = 450$  mm (media loma de la colina). Derecha:  $x - x_s = 550$  mm (pie de la colina).

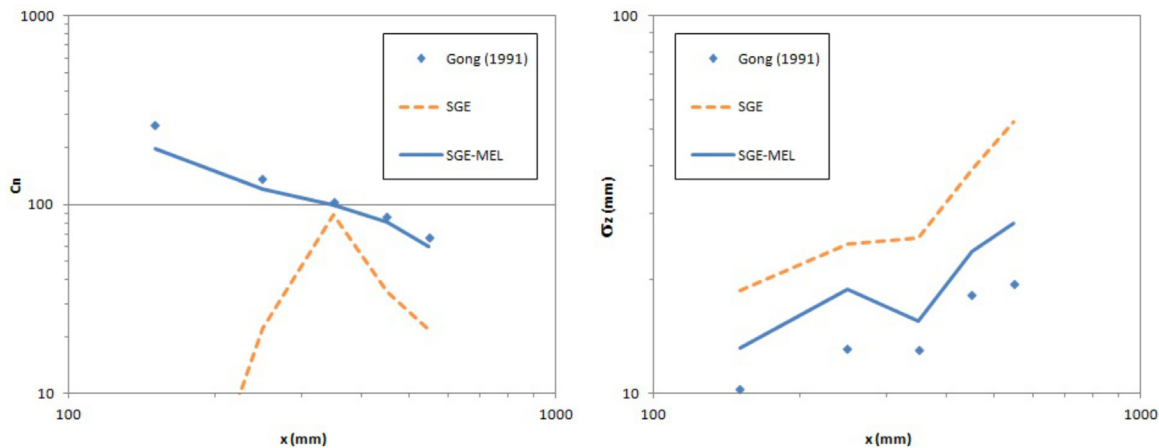


Figure 5. Normalised mean concentration at ground level (left) and standard deviation from the height of the gas plume centre (right).

Figura 5. Concentración media normalizada a nivel de suelo (izquierda) y desvío estándar de la altura del centro de la pluma de gas (derecha).

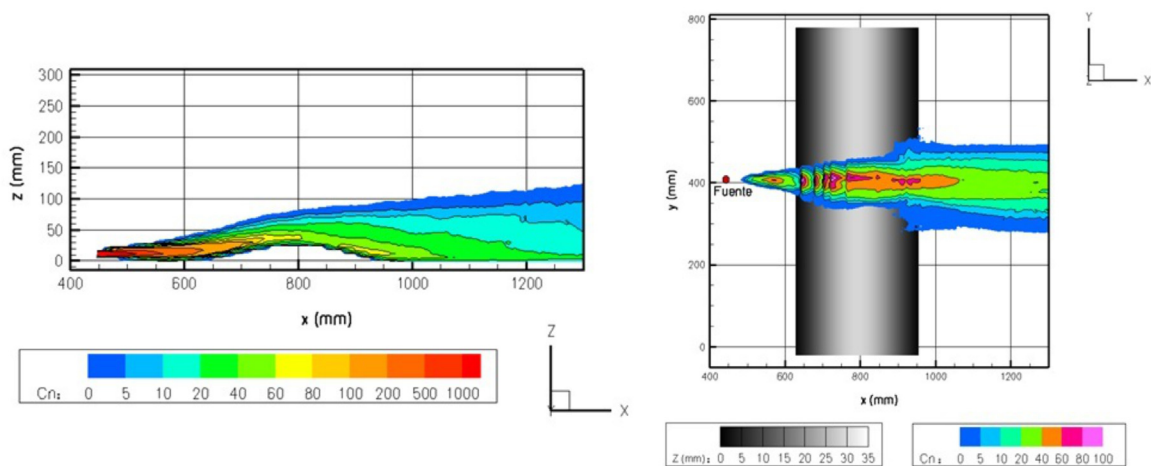


Figure 6. Mean gas concentration values simulated with LES-SLM. Left: on the axial plane containing the source. Right: at ground level.

Figura 6. Valores de concentración media de gas simulados con SGT-MEL. Izquierda: sobre el plano axial que contiene a la fuente. Derecha: a nivel de suelo.

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

- $x - X_s$  { 150 mm: foot, upwind
- 250 mm: halfway uphill, upwind
- 350 mm: crest
- 450 mm: halfway uphill, downwind
- 550 mm: foot, downwind

of the gas plume on the axial plane that contains the emission source (right).

Figure 6 shows the mean concentration levels of the gas plume on the axial plane containing the source (left) and the same at ground level (right), both of which correspond to the case of non-stationary, inhomogeneous and anisotropic sub-grid turbulence (LES-SLM) that presents better results in comparison with the experimental measurements.

A continuación se presenta la comparación entre las mediciones experimentales y los resultados de la simulación utilizando el modelo acoplado SGT-MEL considerando la hipótesis de turbulencia estadísticamente inhomogénea y anisotrópica para el tensor  $\alpha_{ij}$  (12). Además, se realizaron simulaciones numéricas sin utilizar el modelo estocástico para turbulencia de submalla, es decir que en este caso las partículas sólo siguieron las trayectorias impuestas por el SGT.

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

Para la inicialización de la simulación se han utilizado los resultados de la dinámica de la capa límite obtenidos a 8,00 s que son suficientes para considerar que el flujo se encuentra en régimen permanente y estabilizado (Aguirre et al., 2007). A partir de ese momento, se ha comenzado a inyectar partículas fluidas. Para los cálculos estadísticos se han considerado los resultados luego de 4,00 s adicionales para obtener un régimen permanente de las mismas dentro del dominio de cálculo. El tiempo físico total simulado fue de 100 s. El ritmo de inyección de partículas ha sido fijado en 50000 partículas por segundo. La evolución temporal de la cantidad de partículas fluidas en el dominio de cálculo muestra que cerca de 130000 están presentes en régimen permanente. La cantidad total de partículas inyectadas para todo el tiempo de simulación ha sido de 10125151. El autor de la experiencia presentó los resultados de concentración de gas normalizados  $C_n = \frac{C\delta U_s^2}{z, \mu^2 C_{CO_2}^0}$  donde C es la concentración de gas y  $U_s$  es la velocidad del aire a la altura de la fuente de emisión. Las Figuras 2, 3 y 4 muestran los perfiles de la concentración media usando SGT y SGT-MEL.

La Figura 5 muestra el valor de concentración a nivel de suelo (izquierda) y el desvío estándar de la altura del centro de la pluma de gas sobre el plano axial que contiene a la fuente de emisión (derecha).

La Figura 6 muestra los niveles de concentración media de la pluma de gas sobre el plano axial que contiene a la fuente (izquierda) y los mismos a nivel de suelo (derecha), ambos corresponden al caso de turbulencia de submalla inhomogénea y anisotrópica no estacionaria (SGT-MEL) que presenta mejores resultados en comparación con las mediciones experimentales.

## SIMULATION OF ATMOSPHERIC POLLUTION OF THE OPEN AIR WASTE DUMP IN PARANÁ

### Description of the case to be simulated

In this case the results presented are on the use of the LES-SLM model in the simulation of the wind field and gas dispersion emanated from a relocated hypothetical place of the present open air waste dump of the city of Paraná, province of Entre Ríos. In this case, only the emission of gases (without solid particles) is considered, as though the emission source were distributed on an area at ground level. In this case, the modules simulating the heat flow between the elements of the ground surface and the atmospheric boundary layer were activated. This is because those modules act actively in the generation and modification of the turbulent transport of these gases. ARPS has sub-models that allow the inclusion of data of the ground surface that mostly influence in the resolution of the wind field. Some of these are heat and water vapour flow in the ground-atmosphere interphase, terrain elevations, microphysical models of clouds formation and rainfall. In this study, microphysical models that involve water phase changes were not activated, that is, the atmosphere was considered to have low humidity content. On the contrary, data on temperature of ground surface, type of vegetation, Normalised Vegetation Index and terrain relief were included.

### Data, initial conditions and boundary conditions for the LES

The data to begin the simulation model of the large scales were obtained from the analysis of the LANDSAT 5 TM satellite images from the 22nd of December, 2010, a day on which wind from the east was recorded. From the images of the TM sensor mounted on the satellite, energy data reflected by the red, green and near-infrared bands were obtained. These bands are suitable for making a classification that allows distinguishing vegetation types and calculation of the Normalised Index. Using an equivalency table between the types of vegetation and the characteristic roughness coefficient, the roughness of the ground was obtained (except in the urbanised areas where this coefficient is estimated as a function of the height of buildings). The thermal emission band allowed obtaining an image of the temperature of the elements of the land surface. As for the profile of the meteorological variables, the wind was measured at 10 metres from the INTA station of Paraná to generate an approximate wind profile from the surface up to 2000 metres in height.



Figure 7: Geographic location of the city of Paraná. ★ Present site of the open air waste dump. ▲ Hypothetic place of waste dump relocation.

Figura 7: Ubicación geográfica de la ciudad de Paraná. ★ Sitio actual del basurero a cielo abierto. ▲ Sitio de hipotética relocación del basural

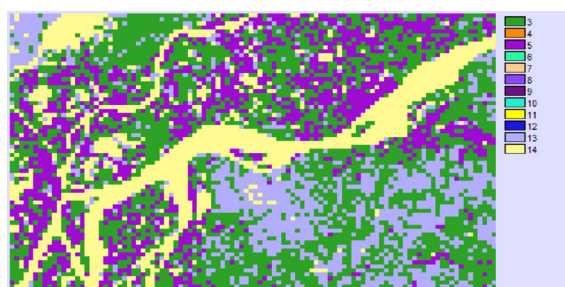


Figure 8: Type of vegetation.  
Figura 8: Tipo de vegetación.

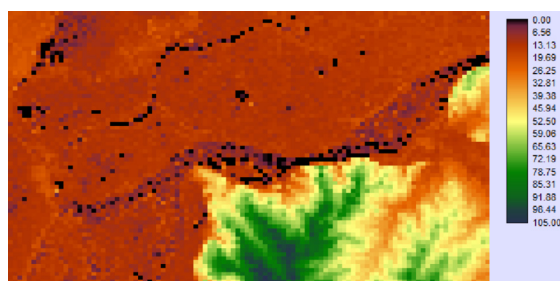


Figure 9: Digital model of elevation in metres.  
Figura 9: Modelo digital de elevación en metros.

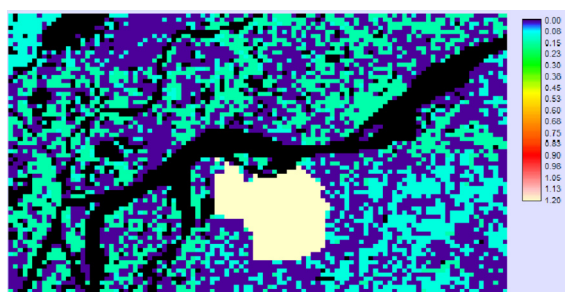


Figure 10: Parameter of roughness  
Figura 10: Parámetro de rugosidad.

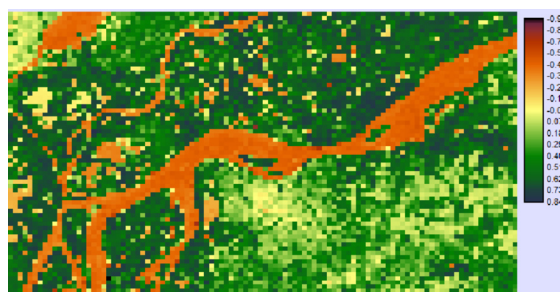


Figure 11: Normalised Difference Vegetation Index.  
Figura 11: Índice de Vegetación Normalizado.

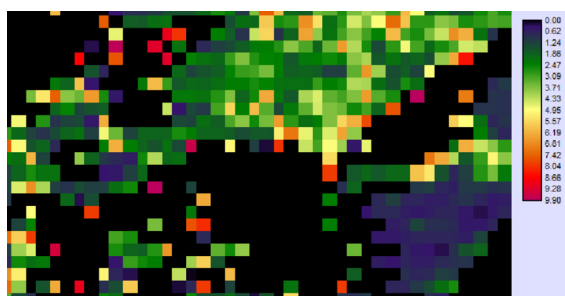


Figure 12: Leaf Area Index.  
Figura 12: Índice de área foliar.

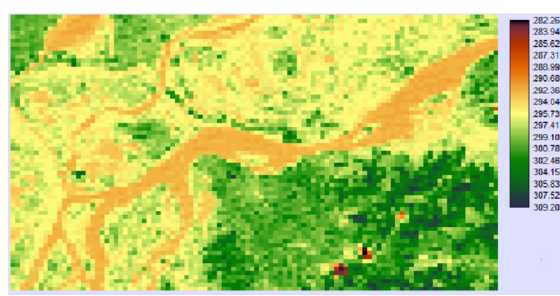


Figure 13: Temperature of the surface in °K.  
Figura 13: Temperatura de la superficie en °K.

## SIMULACIÓN DE POLUCIÓN ATMOSFÉRICA DEL BASURAL A CIELO ABIERTO DE PARANÁ

### Descripción del caso a simular

En este caso se presentan los resultados de la utilización del modelo SGT-MEL en la simulación del campo de viento y dispersión de gases emanados desde un hipotético lugar de relocalización del actual basural a cielo abierto de la ciudad de Paraná, provincia de Entre Ríos. Para este caso, se considera sólo la emisión de gases (sin partículas sólidas) como si fuese una fuente de emisión distribuida sobre el terreno a nivel del suelo. Para este caso se han activado los módulos que simulan los flujos de calor entre los elementos de la superficie del suelo y la capa límite atmosférica ya que éstos intervienen en forma activa en la generación y modificación del transporte turbulento de estos gases. ARPS posee submodelos que permiten incluir los datos de la superficie del suelo que mayormente influyen en la resolución del campo de viento. Flujos de calor y vapor de agua en la interfase suelo-atmósfera, elevaciones del terreno, modelos microfísicos de formación de nubes y precipitación son algunos de ellos. No se activaron en este trabajo los modelos microfísicos que involucran cambios de fase del agua, es decir, se considera atmósfera con bajo contenido de humedad. Por el contrario, se incluyen los datos de temperatura de la superficie del suelo, tipo de vegetación, Índice de Vegetación Normalizado y relieve del terreno.

For the temperature profile, the use of isentropic atmosphere was chosen. The boundary conditions are of *Neumann* type for the entire run of the simulation. The horizontal spatial resolution of the calculation grid for the simulation of the large scales is 310x310 metres, while in the vertical, the average height of the cells of calculation is 66 metres, being 1 metre close to the ground and gradually increasing according to a hyperbolic tangent function until reaching 132 metres at the highest domain of the simulation. Due to the great spatial variability of the initial terrain data, the time slot of the simulation was fixed at 0.2 seconds to ensure the convergence of the numeric solution of the equations of mass balance, movement quantity and potential temperature. The reduced time slot for the resolution of the pressure equation was fixed at 0.1 seconds.

Figure 7 shows an image of the location of the city of Paraná. Here, the present location and the probable place of relocalisation of the city's open air waste dump can be seen.

Figure 8 shows the type of vegetation according to the typology of *Olson World Ecosystem Classes* (Olson *et al.*, 1983). Figure 9 shows the digital model of elevation obtained from the MODIS-TERRA satellite data, Figure 10 presents the roughness parameter of the ground obtained from a reclassification of the type of vegetation with the aid of Table 1, except in the urban area. Figure 11 shows the Normalised Difference Vegetation Index, processed from MODIS-TERRA

Table 1: Types of vegetation according to Olson World Ecosystem Classes and roughness parameter.

Tabla 1: Tipos de vegetación según Olson World Ecosystem Classes y parámetro de rugosidad.

Vegetation Type	Definition	Olson World Ecosystem Classes	Grass/tree	Roughness
01	Desert	01 08 50 69 71	Grass	0.002
02	Tundra	42 53	Grass	0.020
03	Grassland	16 30 37 40 52	Grass	0.010
04	Grassland with shrub cover	02 41 43 49	Grass	0.100
05	Grassland with tree cover	58	Tree	0.150
06	Deciduous forest	24 25 26 27 29 56 61	Tree	0.750
07	Evergreen forest	06 20 21 22 23 24 47 48 57 60 62	Tree	1.000
08	Rain forest	32 33 54	Tree	2.000
09	Ice	17 70	Grass	0.005
10	Cultivation	28 31 36 38 39 55	Grass	0.020
11	Bog or marsh	44 45	Grass	0.020
12	Dwarf shrub	59 63 64	Grass	0.060
13	Semidesert	51	Grass	0.040
14	Water	00 65 66 67 68 72 73	Grass	0.001

**Datos, condiciones iniciales y condiciones de borde para el SGT**

Los datos para la inicialización del modelo de simulación de las grandes escalas han sido obtenidos a partir del análisis de imágenes del satélite LANDSAT 5 TM del 22 de diciembre de 2010, día en que se registró viento proveniente del sector este. A partir de las imágenes del sensor TM montado en el satélite se obtuvieron los datos de energía reflejada por las bandas del rojo, verde e infrarrojo cercano. Estas bandas son propicias para realizar una clasificación que permita distinguir los tipos de vegetación y calcular el Índice Normalizado. Utilizando una tabla de equivalencia entre los tipos de vegetación y el coeficiente de rugosidad característica se obtuvo la rugosidad del suelo (salvo en las áreas urbanizadas donde se estima este coeficiente en función de la altura de las construcciones). La banda de emisión térmica permitió obtener una imagen de temperatura de los elementos de la superficie del terreno. En cuanto al perfil de las variables meteorológicas, se procedió a utilizar la medición de viento a 10 metros de la estación INTA Paraná para generar un perfil de viento aproximado desde superficie hasta 2000 metros de altura. Se optó por utilizar atmósfera isoentrópica para el perfil de la temperatura. Las condiciones de borde son de tipo *Neumann* durante toda la corrida de la simulación. La resolución espacial horizontal de la malla de cálculo para la simulación de las grandes escalas es de 310x310 metros, mientras que en la vertical, la altura promedio de las celdas de cálculo es de 66 metros, adoptando cerca del terreno una dimensión de 1 metro y aumentando gradualmente este valor según una función tangente hiperbólica hasta llegar a 132 metros al tope del dominio de simulación. Debido a la gran variabilidad espacial de los datos iniciales en el terreno, el paso de tiempo de la simulación fue fijado en 0,2 segundos para asegurar la convergencia de la solución numérica de las ecuaciones de balance de masa, cantidad de movimiento y temperatura potencial. El paso de tiempo reducido para la resolución de la ecuación de la presión se fijó en 0,1 segundos.

La Figura 7 muestra una imagen de la ubicación de la ciudad de Paraná. En ella se puede apreciar la ubicación actual y de relocalización probable del basurero a cielo abierto de la ciudad.

La Figura 8 muestra el tipo de vegetación según la tipología de *Olson World Ecosystem Classes* (Olson

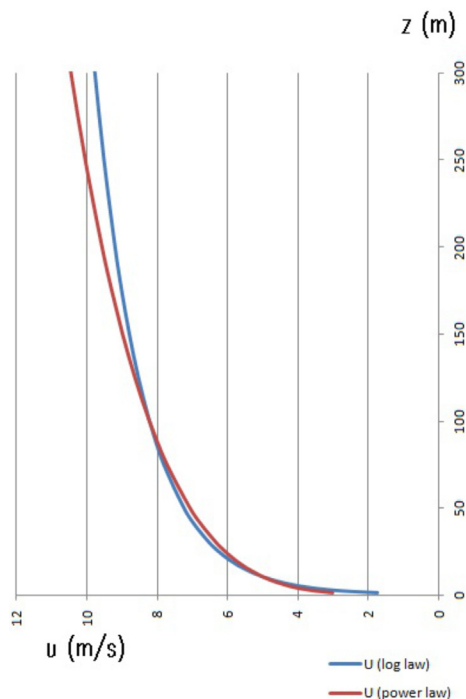


Figure 14: Mean wind profile imposed as an initial condition.

Figura 14: Perfil de viento medio impuesto como condición inicial.

images with a spatial resolution of 1 Kilometre and Figure 12 corresponds to the Leaf Area Index. Figure 13 presents the surface temperature of the terrain processed with the help of the thermic band of the LANDSAT 5 satellite following the methodology of Pérez *et al.* (2003). Table 1 shows the typology of the vegetation *Olson World Ecosystem Classes* and the association that was used to obtain the roughness parameter of the ground.

Figure 14 presents the mean wind profile imposed as an initial condition. Below 100 metres of height a profile of logarithmic type is imposed and over this height a profile that follows the potential law of the wind:

$$\begin{cases}
 u_1^\oplus = -\frac{u_*}{k} \ln\left(\frac{z}{z_0}\right) & \text{si } 10z_0 < z \leq 100 \\
 u_1^\oplus = -u_{1(z=100)}^\oplus \left(\frac{z}{100}\right)^{1/4,6} & \text{si } z > 100 \\
 u_1^\oplus = -\frac{z}{10} \frac{u_*}{k} \frac{\ln(10)}{z_0} & \text{si } z \leq 10z_0
 \end{cases} \quad (13)$$

et al., 1983). La Figura 9 muestra el modelo digital de elevación obtenido a partir de datos del satélite MODIS-TERRA, la Figura 10 presenta el parámetro de rugosidad del suelo obtenido a partir de una reclasificación del tipo de vegetación con ayuda de la Tabla 1, salvo en el área urbana. La Figura 11 muestra la imagen de Índice de Vegetación Normalizado, producto procesado a partir de imágenes de MODIS-TERRA con una resolución espacial de 1 Kilómetro y la Figura 12 corresponde al índice de área foliar. La Figura 13 presenta la imagen de temperatura de la superficie del terreno procesada con ayuda de la banda térmica del satélite LANDSAT 5 siguiendo la metodología de Pérez et al. (2003). La Tabla 1 muestra la tipología de la vegetación *Olson World Ecosystem Classes* y la asociación que se utilizó para obtener el parámetro de rugosidad del suelo.

La Figura 14 presenta el perfil de viento medio impuesto como condición inicial. Debajo de los 100 metros de altura se impone un perfil de tipo logarítmico y por encima de esta altura un perfil que sigue la ley potencial del viento:

$$\begin{cases} u_1^\oplus = -\frac{u_*}{k} \ln\left(\frac{z}{z_0}\right) & \text{si } 10z_0 < z \leq 100 \\ u_1^\oplus = -u_{1(z=100)}^\oplus \left(\frac{z}{100}\right)^{1/4,6} & \text{si } z > 100 \\ u_1^\oplus = -\frac{z u_* \ln(10)}{10 k z_0} & \text{si } z \leq 10z_0 \end{cases} \quad (13)$$

donde  $u_1^\oplus$  es la velocidad media del viento en la dirección oeste-este,  $u_*$  es la velocidad de fricción cuyo valor es de 0,5638 m/s,  $z_0$  es el parámetro de rugosidad promedio del área de estudio cuyo valor es de 0,288 metros y  $K$  es la constante de Von Kármán, de valor 0,4. Los valores de la velocidad de fricción y del exponente de la ley potencial del viento fueron obtenidos de forma que la velocidad del viento a 10 metros coincida con la velocidad media de los registros de la estación INTA Paraná el 22 de diciembre de 2010, es decir  $u_{1(z=10)}^\oplus = 5$  m/s.

El perfil de temperatura potencial inicial es constante e igual a 300°K (26,85°C).

where  $u_1^\oplus$  is the mean wind velocity in the west-east direction,  $u_*$  is the friction velocity whose value is 0.5638 m/s,  $z_0$  is the average roughness parameter of the area studied whose value is 0.288 metres and  $k$  is the Von Kármán constant whose value is 0.4. The values of friction velocity and the exponent of the potential law of the wind were obtained so that the wind velocity at 10 metres coincides with the mean velocity of the records of the INTA station in Paraná on the 22<sup>nd</sup> of December, 2010, that is  $u_{1(z=10)}^\oplus = 5$  m/s.

The initial potential temperature profile is constant and equal to 300°K (26.85°C).

#### Data, initial conditions and boundary conditions for the fluid particles (SLM)

The fluid particles were placed at random within a square of 300 metres on each side and from a height of 0.5 metres above the ground in the position that is indicated as the possible place of relocalisation of the open air waste dump in the city of Paraná shown in Figure 7. New particles are placed within the zone in each time slot while the others are transported by the wind flow. In this way, 10 particles were released in each time slot ( $\Delta t = 0,2$  seconds), that is, the flow of fluid particles injected on the site is 50 particles per second. When a particle reaches the ground it is assumed to be retained there owing to the roughness, and therefore remains on the impact site for the rest of the simulation. To find the impact site of the particle on the ground, a system of equations is resolved. This system arises from the intersection of a plane in a space whose vertices are next to the zero cell with a straight line passing through two points; one is the position of the fluid particle before the impact and the other is the position that the particle would have if the ground plane were non existent. This system of equations is resolved to obtain the point P(x,y,z) from the general equation of the plane (14) and the general equation of the straight line (15).

$$\begin{vmatrix} x - x_1 & y - y_1 & z - z_1 \\ x_2 - x_1 & y_2 - y_1 & z_2 - z_1 \\ x_3 - x_1 & y_3 - y_1 & z_3 - z_1 \end{vmatrix} = 0 \quad (14)$$

$$\frac{x - x_5}{x_6 - x_5} = \frac{y - y_5}{y_6 - y_5} = \frac{z - z_5}{z_6 - z_5} \quad (15)$$

During the simulation, the positions of all the



**Datos, condiciones iniciales y condiciones de borde para las partículas fluidas (MEL)**

Las partículas fluidas fueron ubicadas aleatoriamente dentro de un cuadrado de 300 metros de lado y desde una altura de 0,5 metros del suelo en la posición que se indica como posible relocalización del basural a cielo abierto de la ciudad de Paraná que se muestra en la Figura 7. En cada paso de tiempo nuevas partículas son ubicadas en la zona mientras las demás son transportadas por el flujo de viento. De esta forma se lanzaron 10 partículas en cada paso de tiempo ( $\Delta t = 0,2$  segundos), es decir, el flujo de partículas fluidas inyectadas en el sitio es de 50 partículas por segundo. Cuando una partícula llega al suelo se supone que queda retenida debido a la rugosidad por lo que queda en el sitio del impacto por el resto de la simulación. Para ubicar el lugar del impacto de la partícula con el terreno, se resuelve el sistema de ecuaciones que surge de la intersección de un plano en el espacio cuyos vértices son los vecinos de la celda de cota cero con una recta que pasa por dos puntos, uno es la posición de la partícula fluida antes del impacto y el otro punto es la posición que tendría la misma si el plano del suelo no existiese. Se resuelve el sistema de ecuaciones planteado para obtener el punto  $P(x,y,z)$  a partir de la ecuación general del plano (14) y la ecuación general de la recta (15).

fluid particles existing in the calculation domain are recorded, in a post-processing stage, to analyse, their concentration at a level of 2 metres above the ground (level of respiration). The total simulation time was 30 real minutes. The first 10 seconds were used to achieve the permanent state and to stabilise the calculation. After this, 50 particles per second were released from the emission zone. Therefore, 89500 particles were released that were then used for the calculation of the

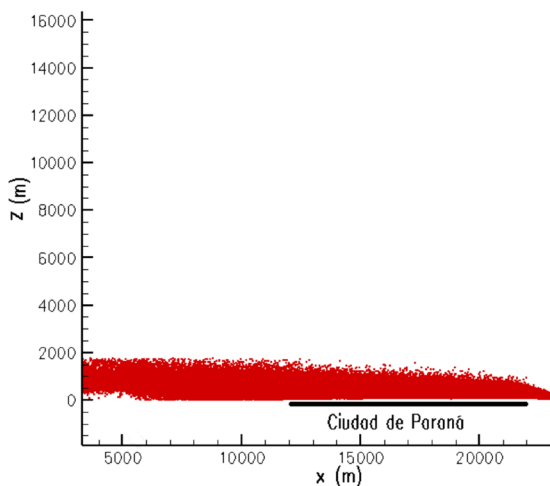


Figure 15: View from the south of the plume of fluid particles at t = 30 minutes.

Figura 15: Vista desde el sur de la pluma de partículas fluidas a t = 30 minutos.

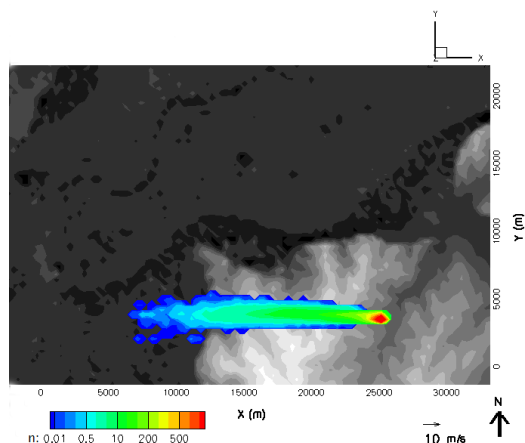


Figure 16: View from above the mean concentration plume (particles) calculated at a height of 2 metres above the ground, from the initial time to t = 30 minutes and the digital elevation model.

Figura 16: Vista superior de la pluma de concentración media (partículas) calculada a 2 metros de altura desde el instante inicial hasta t = 30 minutos y el modelo digital de elevación.

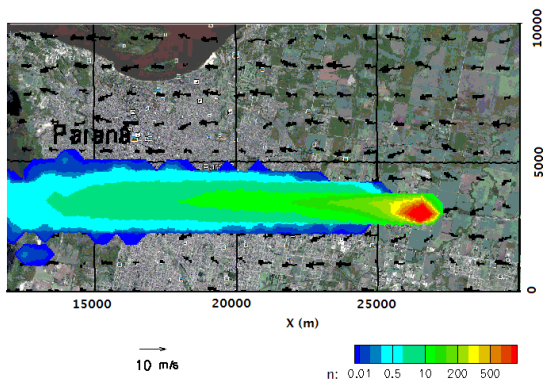


Figure 17: View from above the mean concentration plume (particles) calculated at 2 metres above the ground from the initial time to t = 30 minutes on an aerial photograph of Paraná.

Figura 17: Vista superior de la pluma de concentración media (partículas) calculada a 2 metros de altura desde el instante inicial hasta t = 30 minutos sobre una fotografía aérea de Paraná.

$$\begin{vmatrix} x - x_1 & y - y_1 & z - z_1 \\ x_2 - x_1 & y_2 - y_1 & z_2 - z_1 \\ x_3 - x_1 & y_3 - y_1 & z_3 - z_1 \end{vmatrix} = 0 \quad (14)$$

$$\frac{x - x_5}{x_6 - x_5} = \frac{y - y_5}{y_6 - y_5} = \frac{z - z_5}{z_6 - z_5} \quad (15)$$

Durante el transcurso de la simulación se registran las posiciones de todas las partículas fluidas existentes en el dominio de cálculo para analizar, en una instancia de post-procesamiento, la concentración de las mismas a nivel de 2 metros de altura (nivel de respiración). El tiempo total de la simulación fue de 30 minutos reales. Los 10 primeros segundos se utilizaron para lograr el régimen permanente y estabilizar el cálculo. Posteriormente, comenzaron a lanzarse 50 partículas por segundo desde la zona de emisión. Por lo tanto, se lanzaron 89500 partículas que fueron luego utilizadas para el cálculo de la concentración. Este valor se calculó contando la cantidad de partículas existentes en una celda de 300x300 metros en dirección horizontal y 4 metros en la vertical desde la superficie del terreno, por lo que la altura media de cada celda de concentración es de 2 metros. A esa altura la velocidad del viento es de  $u_{(z=2m)}^{\oplus} = 2,25$  m/s. Si llamamos  $C_0$  gr/m<sup>3</sup> a la concentración media (espacio-temporal) de un gas pasivo emitido desde la fuente contaminante medida en el sitio de emisión entonces, la concentración de gas que posee cada partícula fluida  $C$  gr/part. puede ser obtenida según:

$$C = \frac{VC_0}{Nt_0}, \quad (16)$$

donde  $N$  es el número de partículas emitida desde la fuente de contaminación en la unidad de tiempo, en este caso  $N = 50$  part./s,  $V$  es el volumen empleado para el conteo de partículas que darán lugar al cálculo de la concentración del gas corriente abajo de la fuente de emisión, en este caso  $V = 360000$  m<sup>3</sup> y  $t_0$  es el tiempo promedio que tarda una partícula fluida en recorrer el largo de la celda, es decir  $t_0 = \Delta x / u_{(z=2m)}^{\oplus} = 133,33$  segundos. De este modo, con los datos de esta simulación la ecuación (16) se reduce a:

concentración. This value was calculated by counting the quantity of particles existing in a cell of 300x300 metres horizontally and 4 metres vertically from the ground surface, and so the mean height of each cell of concentration is 2 metres. At that height the wind velocity is  $u_{(z=2m)}^{\oplus} = 2.25$  m/s. If we name  $C_0$  gr/m<sup>3</sup> the mean concentration (spatial-temporal) of a passive gas emitted from the contaminant source measured at the emission site then, the gas concentration contained of each fluid particle  $C$  gr/part. can be obtained according to:

$$C = \frac{VC_0}{Nt_0}, \quad (16)$$

where  $N$  is the number of particles emitted from the contamination source in the time unit, in this case  $N = 50$  part./s,  $V$  is the volume employed for the counting of particles that will give place to the calculation of the gas concentration downwind from the emission source; in this case,  $V = 360000$  m<sup>3</sup>  $t_0$  is the average time that a fluid particle takes to travel the length of the cell, that is  $t_0 = \Delta x / u_{(z=2m)}^{\oplus} = 133.33$  seconds. In this way, with the data of this simulation the equation (16) is reduced to:

$$C = 54C_0 \text{ gr/part} \quad (17)$$

The concentration of gas  $C_g$  downwind from the emission source is calculated in each instant counting the quantity of particles present in the counted cells, in this way if  $n$  is the value found in each cell:

$$C_g = \frac{nC}{V} \text{ gr/m}^3 \quad (18)$$

The downwind concentration expressed in relation to the value of the emission source will then be:

$$\frac{C_g}{C_0} = \frac{54n}{V} \text{ gr/m}^3 \quad (19)$$

## RESULTS

Figure 15 presents a view from the south of the plume of fluid particles at time  $t = 1800$  seconds. Figure 16 is a view from above where the mean concentration plume is seen (as values of  $n$  particles in each counted cell calculated between the initial times and  $t = 1800$  seconds) at a level of 2 metres above the ground and the digital model of elevation. Figure 17 is an amplified view of the mean concentration plume and the

$$C = 54C_0 \text{ gr/part} \quad (17)$$

La concentración de gas  $C_g$  corriente abajo de la fuente de emisión se calcula en cada instante contando la cantidad de partículas presentes en las celdas de conteo, de esta forma si  $n$  es el valor hallado en cada celda:

$$C_g = \frac{nC}{V} \text{ gr/m}^3 \quad (18)$$

La concentración corriente abajo expresada en relación al valor a la fuente de emisión será entonces:

$$\frac{C_g}{C_0} = \frac{54n}{V} \text{ gr/m}^3 \quad (19)$$

## RESULTADOS

La Figura 15 presenta una vista desde el sur de la pluma de partículas fluidas al instante  $t = 1800$  segundos. La Figura 16 es una vista superior donde se aprecia la pluma de concentración media (como valores de  $n$  partículas en cada celda de conteo calculada entre el instante inicial y  $t = 1800$  segundos) a nivel de 2 metros sobre el suelo y el modelo digital de elevación. La Figura 17 es una vista ampliada de la pluma de concentración media y los vectores de velocidad de viento simulados a una altura de 2 metros sobre el suelo.

En la situación más desfavorable de dirección de viento, se observa que la pluma de gases afectaría el límite oriental de la ciudad con niveles de concentración cercanos a  $n = 200$  partículas a una altura de 2 metros sobre el terreno que corresponde al 3% con relación a la fuente de origen según la ecuación (19):

$$\frac{C}{C_0} = \frac{5,4 (200)}{3600} = 0,03$$

En el límite occidental, corriente abajo de la pluma de dispersión, la concentración de partículas se reduce a  $n = 5$  partículas, que corresponde a una concentración de 0,075% con relación a la fuente:

$$\frac{C}{C_0} = \frac{5,4 (5)}{3600} = 0,00075$$

simulated wind velocity vectors at a level of 2 metres above the ground.

In the most unfavourable situation of wind direction, it is seen that the gas plume would affect the eastern limit of the city with concentration levels close to  $n = 200$  particles at a height of 2 metres above the ground that corresponds to the 3% in relation to the source of origin according to the equation (19):

$$\frac{C}{C_0} = \frac{5,4 (200)}{3600} = 0,03$$

In the western limit, downwind from the dispersion plume, the concentration of particles is reduced to  $n = 5$  particles, which correspond to a concentration of 0.075% in relation to the source:

$$\frac{C}{C_0} = \frac{5,4 (5)}{3600} = 0,00075$$

## CONCLUSIONS

Large scales simulation (LES) is not sufficient to correctly describe the phenomena of dispersion and diffusion of gases in a wind channel considering their relief. It is necessary to add to this tool a stochastic lagrangian model (SLM) that represents the phenomena of sub-grid turbulence to achieve a better description of these phenomena.

The coupled model (LES-SLM) is evaluated using carbon dioxide concentration measurements of emanated from a point source upwind a hill with a slight slope carried out in a wind channel by Gong (1991) with better results than those obtained with the LES.

The LES-SLM model is used to evaluate the geographic distribution and concentration, at a level of 2 metres above the ground, of emanations coming from a possible place of relocation of the open air waste dump in the city of Paraná, Argentina.

In the most unfavourable situation of wind direction it is observed that the gas plume would affect the eastern limit of the city with concentration levels close to 3% in relation to the source at a height of 2 metres above the ground. On the other hand, in the western limit of the city, downwind of the dispersion plume, the concentration of particles is reduced to 0.075% at the same height.

The transversal extension of the plume (North-South direction) is around 1500 metres in the eastern limit of the city and extends to 2500 metres in the western limit.

## CONCLUSIONES

La simulación de grandes escalas (SGT) no es suficiente para describir correctamente los fenómenos de dispersión y difusión de gases en túnel de viento considerando el relieve. A esta herramienta es necesario adicionarle un modelo estocástico lagrangiano (MEL) que represente los fenómenos de turbulencia de submalla con el fin lograr una mejor descripción de estos fenómenos.

El modelo acoplado (SGT-MEL) es evaluado utilizando mediciones de concentración de anhídrido carbónico emanado de una fuente puntual a barlovento de una colina de suave pendiente realizadas en túnel de viento por Gong (1991) con mejores resultados que los obtenidos con la SGT.

El modelo SGT-MEL es utilizado para evaluar la distribución geográfica y concentración, a nivel de 2 metros sobre el suelo, de emanaciones provenientes de una posible relocalización del basurero a cielo abierto de la ciudad de Paraná, Argentina.

En la situación más desfavorable de dirección de viento, se observa que la pluma de gases afectaría en el límite oriental de la ciudad con niveles de concentración cercanos al 3% en relación a la concentración a la fuente para una altura de 2 metros sobre el terreno. Por otra parte, en el límite occidental de la ciudad, corriente abajo de la pluma de dispersión, la concentración de partículas se reduce al 0,075% para la misma altura.

La extensión transversal de la pluma (dirección norte-sur) es de unos 1500 metros en el límite oriental de la ciudad y se extiende a 2500 metros en el límite occidental de la misma.

## RECONOCIMIENTOS

Este trabajo se ha realizado con el apoyo del proyecto PIDP "Desarrollo de métodos numéricos y software para la simulación de transporte turbulento de especies químicas reactivas en la capa límite atmosférica" financiado por la Universidad Autónoma de Entre Ríos. Además, se contó con el apoyo de los proyectos PICT2008-1417 y PICT2010-2492 de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT).

Los datos ASTER L1B fueron obtenidos a partir de la base de datos: Data Pool de la NASA Land Processes Distributed Active Archive Center (LP DAAC), USGS/Earth Resources Observation and

## ACKNOWLEDGEMENTS

This work was carried out with the support of the PIDP project "Development of numeric methods and software for the simulation of turbulent transport of reactive chemical species in the atmospheric boundary layer" financed by the Universidad Autónoma de Entre Ríos. Support also came from the projects PICT2008-1417 and PICT2010-2492 of the Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT).

The data ASTER L1B were obtained from the data base: Data Pool of the NASA Land Processes Distributed Active Archive Center (LP DAAC), USGS/Earth Resources Observation and Science (EROS) Center, Sioux Falls, South Dakota (2001), [http://lpdaac.usgs.gov/get\\_data](http://lpdaac.usgs.gov/get_data).

Science (EROS) Center, Sioux Falls, South Dakota (2001), [http://lpdaac.usgs.gov/get\\_data](http://lpdaac.usgs.gov/get_data).

## REFERENCIAS

- Aguirre, C.A.; Simoëns, S. & Ayrault, M. 2002. Dispersion of solid heavy particles in a homogeneous turbulence. *Tenth International Conference on Modelling, Monitoring and management of Air Pollution. Collection: Air Pollution X. Section: Aerosol and particles. Editorial: Wessex Institute of Technology WIT Press. Southampton, Boston, UK. ISBN: 1-85312-916-X. pp: 591 – 600.*
- Aguirre, C.; Simoëns, S. & Ayrault, M. 2003. Chemically reactive dispersion into atmospheric boundary layer. International Workshop on Physical Modeling of Flow and Dispersion Phenomena. *Proceeding of PHYMOD2003. Prato, Italy. pp: 154 – 158.*
- Aguirre, C.A.; Guo Y. & Ayrault M. 2004. Dispersion de particules solides en mouvement de saltation dans un écoulement turbulent. *Journal Comptes Rendus Mécanique* 332: 627 – 632.
- Aguirre, C.A. 2005. Dispersion et Mélange Atmosphérique Euléro-Lagrangien de Particules Fluides Réactives. Application à des cas simples et complexes. Tesis de doctorado. *Université Claude Bernard Lyon 1. 115-2005, pp: 1 – 323.*
- Aguirre, C.A.; Brizuela, A.B.; Vinkovic, I. & Simoëns, S. 2006a. A Subgrid Lagrangian Stochastic Model for Turbulent Passive and Reactive Scalar Dispersion. *International Journal for Heat and Fluid Flow* 27 (4): 627 – 635.
- Aguirre, C.A.; Brizuela, A.B.; Vinkovic, I. & Simoëns, S. 2006b. Modelo Acoplado Eulero-Lagrangiano de Simulación de la dispersión Atmosférica de Especies Químicamente Reactivas en la Capa Límite. *Serie Mecánica Computacional* 25: 185 – 205.
- Aguirre, C.A.; Martínez Fayó, J.M.; Brizuela, A.B. & Moyano, M.F. 2007. Simulación de las Grandes Escalas de Flujo Turbulento sobre una Colina de Suave Pendiente. *Serie Mecánica Computacional* 26: 1215 – 1235.
- Aguirre, C.A. & Brizuela, A.B. 2008. Simulación Numérica de la Dispersión Atmosférica de Gas Pasivo sobre una Colina utilizando un Modelo Acoplado. *Serie Mecánica Computacional* 27: 217 – 237.
- Akselvoll, K. & Moin, P. 1995. Large Eddy Simulation of Turbulent Confined Coannular Jets and Turbulent Flow Over a Backward Facing Step. *Department of Mechanical Engineering Stanford TF-63, Stanford University.*
- Arya, S.P.; Capuno, M.E. & Fagen, L.C. 1987. Some Fluid Modeling Studies of Flow and Dispersion Over Two-dimensional Low Hills. *Atmospheric Environment* 21: 753 – 764.
- Bachelier, L. 1900. Théorie de la spéculation. *Thèse publiée dans les Annales Scientifiques de l'École Normale Supérieure.* 17,21. Rééditée. Éditions Jacques Gabay, Paris, 1995.
- Baggett, J.S. 1997. Some Modeling Requirements for Wall Models in Large Eddy Simulation. *Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs. NASA Ames/Stanford Univ. pp: 123 – 134.*
- Baggett, J.S.; Jiménez, J. & Kravchenko, A.G. 1997. Resolution Requirements in Large-eddy Simulation of Shear Flows. *Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs. NASA Ames/Stanford Univ. pp: 51 – 66.*
- Bagwell, T.G.; Adrian, R.J.; Moser, R.D. & Kim, J. 1993. Improved Approximation of Wall Shear Stress Boundary Conditions for Large Eddy Simulation. En: (eds.) R.M.C. So, C.B. Speziale & B.E. Launder. *Near-Wall Turbulent Flow.* Elsevier Science Publisher, pp: 31 – 40.
- Balaras, E.; Benocci, C. & Piomelli, U. 1996. Two-layer Approximative Boundary Conditions for Large-eddy Simulations. *AIAA J.* 34. pp: 1111 – 1119.
- Bardina, J.; Ferziger, J.H. & Reynolds, W.C. 1983. Improved Turbulence Models Based on Large-eddy Simulation of Homogeneous Incompressible Turbulent Flow. *Department of Mechanical Engineering. Report NTF-19. Stanford Univ.*
- Brown, R. & Bilger, R. 1996. An experimental study of a reactive plume in grid turbulence. *Journal of Fluid Mechanics* 312: 373 – 407.
- Builtjes, P. 1983. A Comparison Between Chemically Reacting Plume Models and Wind-tunnel Experiments. In: Wispelaere, C. (ed.), *Air Pollution Modeling and its Application*, Vol. II. Plenum Press, New York, pp. 59 – 84.
- Cabot, W.H. 1995. Large-eddy Simulation with Wall Models. *Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs. NASA Ames/Stanford Univ. pp: 41 – 50.*
- Cabot, W.H. 1996. Near-wall Models in Large-eddy Simulation of Flow Behind a Backward-facing Step. *Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs. NASA Ames/Stanford Univ. pp: 199 – 210.*
- Cabot, W.H. 1997. Wall Models in Large-eddy Simulation of Separate Flow. *Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs. NASA Ames/Stanford Univ. pp: 97 – 106.*
- Cabot, W.H. & Moin, P. 2000. Approximative Wall Boundary Conditions in the Large-eddy Simulation of High Reynolds Number Flow. *Flow Turbulent Combustion* 63: 269 – 291.
- Clark, J.A. 1968. A study of incompressible turbulent boundary layer in channel flow. *Transactions of the ASME, Series D, Journal of Basic Engineering* 90: 445.
- Clark, T.L. 1977. A small-scale dynamic model using a terrain-following coordinate transformation. *Journal of Computational Physics* 24: 186 – 215.
- Colucci, P.; Jaber, F.; Givi, P. & Pope, S. 1998. Filtered Density Function for Large-Eddy Simulation of Turbulent Reacting Flow. *Physic of Fluids* 10: 499.
- Counihan, J. 1969. An improved method of simulating

- an atmospheric boundary layers in a wind tunnel. *Atmospheric Environment* 3: 197 – 214.
- Deardorff, J.W. 1970. A Numerical Study of three-dimensional Turbulent Channel Flow. *Journal of Fluid Mechanics* 41: 453 – 480.
- Deardorff, J.W. 1973. The Use of Subgrid Transport Equations in a Three-Dimensional Model of Atmospheric Turbulence. *Journal of Fluids Engineering* 429 – 438.
- Deardorff, J.W. 1980. Stratocumulus-capped mixed layer derived from a three dimensional model. *Boundary-Layer Meteorology* 18: 495 – 527.
- Dudhia, J. 1993. A nonhydrostatic version of the Penn State NCAR mesoscale model: Validation test and simulation of an Atlantic cyclone and cold front. *Monthly Weather Review* 121: 1493 – 1513.
- Durbin, P.A. 1980. A Random Flight Model in Inhomogeneous Turbulent Dispersion. *Phys. Fluids*. 23 (11): 2151 – 2153.
- Durbin, P.A. 1983. Stochastic Differential Equations and Turbulent Dispersion. *Lewis Research Center. NASA* 1103: 1 – 69.
- Esmaili, H. & Piomelli, H. 1993. Large Eddy Simulation of Relaminarizing Sink Flow Boundary Layers. *Review Near Wall Turbulent Flow*. 287 – 346.
- Fackrell, J.E. & Robins, A.G. 1982. Concentration Fluctuation and Fluxes in Plumes from Point Sources in a Turbulent Boundary Layers. *Journal of Fluid Mechanics* 117: 1 – 26.
- Gao, F. & O'Briend, E. 1993. A Large-Eddy Simulation schema for Trubulent reacting flow. *Physic of Fluids* A5: 1282.
- Germano, M.; Piomelli, U.; Moin, P. & Cabot, W.H. 1991. A Dynamic Subgrid-Scale Eddy Viscosity Model. *Journal of Physics Fluids* A 3: 1760 – 1765.
- Gong, W. & Ibbetson, A. 1989. A wind tunnel study of turbulent flow over models hill. *Boundary Layers Meteorology* 49: 113 – 148.
- Gong, W. 1991. A wind tunnel study of turbulent dispersion over two - and three- dimensional gentle hills from upwind point sources in neutral flow. *Boundary Layer Meteorology* 54: 211 – 230.
- Haworth, D.C. & Pope, S.B. 1986. A Generalized Langevin Model for Turbulent Flow. *Physic of Fluids* 29 (2): 378 – 405.
- Kolmogorov, A.N. 1941. Local Structure of Turbulence in an Incompressible Fluid at very high Reynolds numbers. *Doklady Akademii Nauk. SSSR* 30: 299 – 303.
- Kreplin, H. & Eckleman, M. 1979. Behavior of the Three Fluctuating Velocity Components in the Wall Region of a Turbulent Channel Flow. *Physic of Fluids* 22: 1233 – 1239.
- Langevin, P. 1908. On the Theory of Brownian Motion. *C. R. Académie des Sciences* 146: 530 – 533.
- Li, J. & Bilger, R. 1996. The Diffusion of Conserved and Reactive Scalars Behind Line Sources in Homogeneous Turbulence. *Journal of Fluid Mechanics* 318: 339 – 372.
- Li, J.; Brown, R. & Bilger, R. 1992. Experimental study of a scalar mixing layer using reactive and passive scalars. *XI Australasian Fluid Mechanics Conference* 159 – 162.
- Lilly, D.K. 1967. The Representation of Small-scale Turbulence in Numerical Simulation Experiments. *In Proc. IBM Scientific Computing Symposium on Environmental Sciences, IBM Form. N 320-1951*: 195 – 210.
- Lilly, D.K. 1992. A Proposed Modification of the Germano Subgrid-scale Closure Method. *Physic of Fluids* A 4: 633 – 635.
- Mason, P.J. 1989. Large-eddy simulation of the Convective Atmospheric Boundary Layer. *Journal of Atmospheric Science* 46: 1492 – 1516.
- Mason, P. & Callen, N.S. 1986. On the Magnitude of the Subgrid-scale Eddy Coefficient in Large-eddy Simulation of Turbulent Channel Flow. *Journal of Fluid Mechanics* 162: 439 – 462.
- Michelot, C. 1996. Développement d'un modèle stochastique lagrangien. Application à la dispersion et à la chimie de l'atmosphère. Tesis de doctorado. *Ecole Centrale de Lyon*, pp: 1 – 180.
- Moin, P. & Kim, J. 1982. Numerical Investigation of Turbulent Channel Flow. *Journal of Fluid Mechanics* 118: 341 – 377.
- NASA Land Processes Distributed Active Archive Center (LP DAAC). ASTER L1B. USGS/Earth Resources Observation and Science (EROS) Center, Sioux Falls, South Dakota. 2001.
- Olson, J.S.; Watts, J.A. & Allison, L.J. 1983. Carbon in live vegetation of major world ecosystems. *Oak Ridge National Laboratory, ORNL-5862*, Oak Ridge TN.
- Pérez, A.M.; Calle, A. & Casanova, J.L. 2003. Cálculo de la Temperatura Superficial a partir de Datos LANDSAT TM. *Teledetección y Desarrollo Regional. X Congreso de Teledetección*. Cáceres, España, pp: 95 – 98.
- Piomelli, U.; Ferziger, J.; Moin P. & Kim, J. 1989. New Approximate Boundary Conditions for Large-eddy Simulation of Wall-bounded Flows. *Physic of Fluids* A 1 (6): 1061 – 1068.
- Pope, S.B. 1983. Consistent Modeling of Scalars in Turbulent Flows. *Physic of Fluids* 26 (2). pp: 404 – 408.
- Pope, S.B. 1994. Lagrangian PDF Methods for Turbulent Flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 26. pp: 23 – 36.
- Pope, S.B. 2000. *Turbulent Flow*. Cambridge, UK. Cambridge University. Press, 720 pp.
- Porté-Agel, F.; Meneveau, C. & Parlange, M. 2000. A scale-dependent dynamic model for large-eddy simulation: application to a neutral atmospheric boundary layer. *Journal of Fluid Mechanics* 415: 261 – 284.
- Pozorski, J. & Minier, J-P. 1998. On the lagrangian turbulent dispersion models based on the langevin equation. *International Journal of Multiphase Flow* 24: 913 – 945.

- Raupach, M.R.; Thom, A.S. & Edwards, I. 1980. A Wind-tunnel Study of Turbulent Flow Close to Regularly Arrayed Rough Surfaces. *Boundary Layers Meteorology* 18: 373 – 397.
- Raupach, M.R.; Antonia, R.A. & Rajagopalan, S. 1991. Rough-wall turbulent boundary layers. *Applied Mechanics Review* 44 (1): 1 – 25.
- Schiestel, R. 1993. Modélisation et Simulation des écoulements turbulents. *Traité des Nouvelles Technologies - Serie Mécanique*. Editions Hermes. ISBN 2-86601-371-9. ISSN 0986-4873. Paris. France.
- Schmidt, H. & Schumann, U. 1989. Coherent Structure of the Convective Boundary Layers Derived From Large-eddy Simulation. *Journal of Fluid Mechanics* 200: 511 – 562.
- Schumann, U. 1975. Subgrid Scale Model For Finite Difference Simulations Of Turbulent Flow In Plane Channels And Annuli. *Journal of Computational Physics* 18: 376 – 404.
- Smagorinsky, J. 1963. General Circulation Experiments with the Primitive Equations. I. The Basic Experiments. *Monthly Weather Review* 91: 99 – 164.
- Speziale, C.G. 1985. Galilean Invariance of Subgrid-Scale Stress Models in LES of Turbulence. *Journal of Fluid Mechanics* 156: 55 – 62.
- Tanière, A.; Oesterlé, B. & Monnier, J.C. 1997. On the behaviour of solid particles in a horizontal boundary layer with turbulence and saltation. *Experiments in Fluids* 23: 463 – 471.
- Thompson, D.J. 1987. Criteria for the Selection of Stochastic Models of Particle Trajectories in Turbulent Flows. *Journal of Fluid Mechanics* 180: 529 – 556.
- Van Dop, H.; Nieuwstadt, F.T.M. & Hunt, J.C.R. 1986. Random walk models for particle displacement in inhomogeneous unsteady turbulent Flows. *Physic of Fluids* 28:1639 – 1653.
- Van Driest, E. R. 1956. On Turbulent Flow Near Wall. *Journal of Aero Sciences* 23: 1007 – 1011.
- Vinkovic, I.; Aguirre, C.A.; Simoëns, S. & Gorokhovski, M. 2006a. Large-Eddy Simulation of Droplet Dispersion for Inhomogeneous turbulent Wall flow. *International Journal of Multiphase Flow* 32 (3): 344 – 364.
- Vinkovic, I.; Aguirre, C.A.; Ayrault, M. & Simoëns, S. 2006b. Large-Eddy Simulation of the Dispersion of Solid Particles in a Turbulent Boundary Layers. *Boundary-Layer Meteorology*: 1472 – 1573.
- Vreman, B.; Geurts B. & Kuerten H. 1994. On the Formulation of the Fynamic Mixed Subgrid-scale Model. *Physic of Fluids* 6: 4057- 4059.
- Wang, M. 2000. Dynamic Wall Modeling for LES of Complex Turbulent Flows. *Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs. NASA Ames/Stanford Univ.* pp: 241 – 250.
- Xue, M.; Droegemeier, K.K. & Wong, V. 1995. The Advanced Regional Prediction System and Real-time Storm Weather Prediction. *International Workshop on Limited-area and Variable Resolution Models*. Beijing, China. World Meteorological Organization.
- Xue, M.; Droegemeier, K. & Wong, V. 2000. The Advanced Regional Prediction System (ARPS). A Multi-Scale Nonhydrostatic Atmospheric Simulation and Prediction Model. Part I: Model Dynamics and Verification. *Meteorology Atmospheric Physics* 75: 161 – 193.
- Zang, Y.; Street R., L. & Koseff, J. R. 1993. A Dynamic Mixed Subgrid-scale Model and its Applications to Turbulent Recirculating Flows. *Physic of Fluids A* 5: 3186.
- Zegadi, R.; Ayrault, M. & Mejean, P. 1994. Effects of a two-dimensional Low Hill in a thermally neutral and Stably Stratified Turbulent Boundary Layers. *Atmospheric Environment* 28: 1871 – 1878.
- Zhuang, Y.; Wilson, J.D. & Lozowski, E.P. 1989. A trajectory-simulation model for heavy particle motion in turbulent flow. *Transactions of the ASME. Journal of Fluids Engineering* 111: 492 – 494.

Recibido: julio 2011.

Aceptado: septiembre 2011.