

UN MODELO NUMERICO DE DIFUSION DE CONTAMINANTES

Juan Carlos Labraga y Vicente Ricardo Barros

Centro Nacional Patagónico

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas

Puerto Madryn - República Argentina

RESUMEN

Se propone la simulación numérica de un proceso de difusión turbulenta desde un emisor lineal de contaminantes.-

Las ecuaciones hidrodinámicas acopladas con la ecuación de conservación del contaminante y simplificadas con la aproximación de Boussinesq son integradas por diferencias finitas. Se retiene el efecto de la perturbación de la presión sobre el movimiento.-

Los resultados muestran, para el caso de estabilidad neutral campos estadísticamente estacionarios de la concentración y de las variables hidrodinámicas, los cuales satisfacen las descripciones generales de modelos más simples.-

ABSTRACT

A numerical simulation of a turbulent diffusion process from a linear source of pollutant is proposed.-

The hydrodynamical equations coupled with the pollutant conservation one, are integrated by a finite difference method. Boussinesq approximation is made and the pressure perturbation effect on momentum equation is preserved.-

Results, show for the neutral stability case, statistically stationary fields, both for hydrodynamics variables and pollutant. Agreement with less sophisticated models is observed.-

1. INTRODUCCION

Los campos de movimiento y la estratificación térmica que condicionan la estabilidad vertical atmosférica, tienen una significativa influencia sobre los procesos de difusión turbulenta de los contaminantes que, generalmente, se emiten en las capas bajas de la atmósfera.-

Existe una vasta literatura referida a la modelación de plumas emitidas por fuentes puntuales. Siendo la más difundida la que utiliza la hipótesis gaussiana en la distribución tridimensional de la concentración. Esta modelación se apoya en numerosos estudios y verificaciones experimentales. La velocidad de emisión de los gases y el empuje resultante de la diferencia de temperatura con el entorno, dan lugar a una elevación de la pluma que también ha sido convenientemente parametrizada y verificada experimentalmente (Briggs, 1969). El caso de emisiones lineales no ha sido tan ampliamente estudiado, presentando no obstante interés para

la simulación de fuentes industriales tales como la del aluminio (acreedores tipo Robertson), en algunas plantas de generación termoeléctrica, y en la difusión de contaminantes a partir de una carretera.-

El presente trabajo propone la simulación numérica de una fuente lineal infinita integrada a un modelo de circulación de la capa límite atmosférica. Esto permite retener los efectos no lineales del campo de movimiento, perturbado por la emisión de una fuente con una velocidad y temperatura propias, lo que presupone un cierto empuje. Esta simulación se hace a través de la integración numérica de las ecuaciones hidrodinámicas de la capa límite y la de conservación del contaminante, reteniendo la incidencia de las perturbaciones del campo de presión sobre el de movimiento.-

2. FORMULACION DEL MODELO

2.1. Ecuaciones de gobierno

Al modelar bidimensionalmente el problema se considera un sistema de ecuaciones que representan la conservación del momento, en sus componentes vertical y horizontal, la energía, la masa de aire y el contaminante. Ello configura un sistema completo de ecuaciones diferenciales no lineales, que se modifican luego mediante un conjunto de simplificaciones derivadas de la aproximación de Boussinesq (Spiegel y Veronis, 1959; Ogura y Phillips, 1962).-

Cuando se considera el valor medio de las magnitudes que caracterizan un flujo turbulento resulta el siguiente sistema de ecuaciones.-

$$\partial u/\partial t + u\partial u/\partial x + w\partial u/\partial z = -c_p \frac{\partial \pi}{\partial x} + \partial(K_m \partial u/\partial z) / \partial z \quad (1)$$

$$\partial w/\partial t + u\partial w/\partial x + w\partial w/\partial z = -c_p \frac{\partial \pi}{\partial z} + g\theta/\theta + \partial(K_m \partial w/\partial z) / \partial z \quad (2)$$

$$\partial u/\partial x + \partial w/\partial z = 0 \quad (3)$$

$$\partial \theta/\partial t + u\partial \theta/\partial x + w\partial \theta/\partial z = Q + \partial(K_c \partial \theta/\partial z) / \partial z \quad (4)$$

$$\partial c/\partial t + u\partial c/\partial x + w\partial c/\partial z = C + \partial(K_c \partial c/\partial z) / \partial z \quad (5)$$

donde $\pi = (P/P_0)^{R/C_p}$ es la función de Exner; x es la coordenada horizontal en la dirección del movimiento medio, z la coordenada vertical, t el tiempo, u y w las componentes horizontal y vertical de la velocidad respectivamente, π y θ las perturbaciones de la presión y de la temperatura potencial con respecto a un estado inicial estacionario, que es sólo función de Z ; θ_0 la magnitud característica de la temperatura potencial, C_p el calor específico del aire a presión constante, g la aceleración de la gravedad, K_m , K_c , y K_c los coeficientes de difusión turbulenta de momento, calor y contaminante, θ la temperatura potencial, c la concentración de contaminante, Q y C los flujos de calor y contaminante debidos a la presencia de fuentes ó sumideros.-

2.2. Coeficientes de difusión turbulenta.

Los procesos de difusión turbulenta de momento, calor y contaminante están parametrizados por los coeficientes K_m , K_t y K_c respectivamente. Por simplicidad, se ha supuesto la igualdad de estos dos últimos: $K_t = K_c$.

A fin de considerar el efecto de la estabilidad atmosférica sobre la difusión turbulenta, se distinguen tres intervalos característicos del número de Richard - son: $R_i = (g/\theta) \partial\theta/\partial z (\partial u/\partial z)^{-2}$; asociándose en cada caso una expresión semi-empírica apropiada para los coeficientes K_m y K_t , que se detalla a continuación (Pandolfo y otros, 1971).

Caso estable: $R_i \geq 0$

$$K_m = \{k(z + z_0)\}^2 |\partial u/\partial z| \{(1 + \alpha R_i)\}^2 ; K_t = K_m \quad (6)$$

Convección forzada: $-0.048 \leq R_i < 0$

$$K_m = \{k(z + z_0)\}^2 |\partial u/\partial z| \{(1 - \alpha R_i)\}^{-2} ; K_t = K_m (1 - \alpha R_i)^{-2} \quad (7)$$

Convección libre: $R_i < -0.048$

$$K_t = h (z+z_0)^2 |(g/\theta)\partial\theta/\partial z|^{1/2} ; K_m = K_t \{3/C_0\}^{-1/2} |R_i|^{-1/6} \quad (8)$$

donde: Z_0 es el parámetro de rugosidad; $k = .42$ la constante de von Karman; $\alpha = -3$. la constante de Monin-Ubokjov; $C_0 = 3 k^{4/3} h^{-2/3}$; $h = k^2 (3/Ca)^{3/2}$; $Ca = 3 R_c^{1/3} (1 + R_c)^2$; $R_c = -1/7 \alpha$

Las expresiones (6), (7) y (8) son válidas para la capa de superficie. Aún cuando la altura de la misma es variable, hemos supuesto por simplicidad que se extiende hasta 40 metros de altura.-

Entre la capa de superficie y el tope del modelo, se efectúa una interpolación polinómica de los valores de K_m y K_t , (O'Brien, 1970).-

$$K(z) = K_T + \{(Z-Z_T)/(Z_T-Z_B)\}^2 \{K_B - K_T + (Z-Z_B)\{K_B' + 2(K_B - K_T)/(Z_T - Z_B)\}\}$$

donde: K_T , es el valor de K en el tope de la capa límite; Z_T , es la altura de la capa límite; Z_B , la altura de la capa superficial; K_B , el valor de K en el tope de la capa superficial; K_B' , la derivada de K respecto de Z en el tope de la capa superficial.-

2.3. Ecuación de diagnóstico de la presión.

Dado que el sistema (1) a (5) no contiene una ecuación de pronóstico para la presión π , se hace necesario para la integración numérica, deducir su ecuación de diagnóstico o eliminar esta variable mediante ecuaciones derivadas de mayor orden (ecuaciones de vorticidad). Esto último que es el camino más usual en modelos de capa límite y de convección no ha sido considerado conveniente aquí, por cuanto conduciría a un mayor error de truncado en la discretización de la difusión vertical turbulenta. Ello se debería a que este proceso quedaría expresado

en la ecuación correspondiente por un término en derivadas terceras,-

Derivando la (1) respecto de x y sumándole la derivada de la (2) respecto de z, se obtiene, aplicando la (3), la siguiente ecuación de diagnóstico para π :

$$\cdot \sqrt{2} \pi = (C_p \theta)^{-1} \{ (\theta/\theta) \partial \theta' / \partial z - 2 (\partial w / \partial z)^2 - 2 \partial w / \partial x \partial u / \partial z + \partial (\partial \kappa m / \partial z \partial w / \partial z) \partial z \} \quad (9)$$

Las Ec. (1), (2), (4), (5) y (9) conforman un sistema completo, el cual es integrado por el método de diferencias finitas.-

2.4. Región tratada.

El dominio de resolución es un rectángulo que se extiende en la dirección vertical Z hasta 1290 metros. El eje horizontal x orientado en la dirección del viento medio U, tiene su origen en la base de una chimenea de 20 metros de altura, extendiéndose corriente arriba de la fuente hasta -2000 metros y corriente abajo hasta 6600 metros.-

La región fue subdividida en 24 intervalos horizontales y 10 verticales, ambos de longitud variable, de modo de obtener una mayor densidad de nodos en la proximidad de la chimenea y una disminución de la misma hacia los contornos. De tal forma es posible lograr una mejor resolución de los campos en la zona donde se registran las gradientes mayores.-

3. FORMULACION DE LAS ECUACIONES EN DIFERENCIAS FINITAS

Sea "y" indistintamente la coordenada x ó z. El subíndice i identifica el nodo del reticulado, variando según la coordenada "y". La expresión utilizada para la derivada primera de una variable cualquiera G es:

$$\partial G / \partial y)_i = (G_{i+1} - \alpha_i^2 G_{i-1} - (1 - \alpha_i^2) G_i) / (y_{i+1} - y_i + \alpha_i^2 (y_i - y_{i-1}))$$

donde: $\alpha_i = (y_{i+1} - y_i) / (y_i - y_{i-1})$

En tanto que la derivada segunda se expresa como:

$$\partial^2 G / \partial y^2)_i = \{ G_{i+1} + G_{i-1} \alpha_i - G_i (1 + \alpha_i) + G_{i+2} \delta_i + G_{i-2} \delta_i \beta_i - G_i (1 + \beta_i) \delta_i \} / \eta_i$$

donde: $\beta_i = (y_{i+2} - y_i) / (y_i - y_{i-2})$

$$\delta_i = -\{ (y_{i+1} - y_i)^3 - \alpha_i (y_i - y_{i-1})^3 \} / \{ (y_{i+2} - y_i)^3 - \beta_i (y_i - y_{i-2})^3 \}$$

$$\eta_i = 1/2 \{ (y_{i+1} - y_i)^2 + \alpha_i (y_i - y_{i-1})^2 + \delta_i \{ (y_{i+2} - y_i)^2 + \beta_i (y_i - y_{i-2})^2 \} \}$$

Las expresiones en diferencias finitas (13) y (14) para las derivadas primera y segunda son de segundo orden, lo que permite el uso de un reticulado no uniforme sin incrementar el error de truncado.-

La derivada primera respecto de x de los términos advectivos horizontales se formula corriente arriba, es decir:

si $u \geq 0$ $\partial G / \partial x)_i = (G_{i+1} - G_i) / (x_{i+1} - x_i)$

si $u < 0$ $\partial G / \partial x)_i = (G_i - G_{i-1}) / (x_i - x_{i-1})$

Análogamente para las derivadas primeras de los términos de advección vertical.- De este modo se evita la inestabilización de una onda retrógrada espúrea, consecuencia de errores de truncado que se hacen significativos en regiones de discontinuidad (Fisher, 1961).-

Para la discretización de los términos de difusión turbulenta se aplicó el esquema implícito de Crank-Nicholson:

$$\partial(k \partial C / \partial z) / \partial z)_k = \gamma_k \{ 1/2 D^{t+1} (G_k) + 1/2 D^t (G_k) \}$$

donde el operador D aplicado en los instantes t y t + Δt tiene la expresión:

$$D (G_k) = \Gamma_k K_{k-1/2} G_{k-1} - (\Gamma_k K_{k-1/2} + K_{k+1/2}) G_k + K_{k+1/2} G_{k+1}$$

siendo: $\gamma_k = \{ \Delta z_k (\Delta z_k + \Delta z_{k-1}) \}^{-1}$; $\Delta z_k = z_{k+1} - z_k$; $\Delta z_{k-1} = z_k - z_{k-1}$;

$$\Gamma_k = \Delta z_k / \Delta z_{k-1}$$

4. CONDICIONES INICIALES Y DE CONTORNO

Como condiciones iniciales se utilizan campos de temperatura y de movimiento correspondientes a un caso de estabilidad neutral. Para ello suponemos que la temperatura potencial es constante con la altura y que el campo de movimiento vertical es nulo en todo punto. Partiendo de una solución aproximada para el campo de movimiento horizontal se integra el sistema descrito, hasta alcanzar un estado estacionario, omitiendo las condiciones de forzado que simulan la emisión de una fuente.-

El siguiente paso consiste en la integración del sistema, asignando a los nodos del reticulado, correspondientes a la ubicación de la chimenea, valores apropiados de temperatura y velocidad vertical (encendido de la chimenea), que simulan las condiciones de emisión de la fuente.-

Esta etapa de la integración, como la anterior, se extiende hasta alcanzar nuevamente un estado estacionario de las variables tratadas.-

Las condiciones de contorno empleadas son las siguientes:

Borde superior: (i = N)

$w_N = 0$, (filtrado de las ondas gravitatorias externas); $u = \theta' = \text{cte.}$;

$$\partial w / \partial z)_N = g \theta' / (\theta'^2 C_p) + 2 K_m w_{N-1} / ((z_N - z_{N-1})^2 C_p \theta)$$

Para el contaminante, se supone un valor virtual C_{N+1} , tal que $C_{N+1} = a C_{N+1}$, donde $0 < a < 1$ (17)

Borde inferior rígido: (i = 1)

$$\theta' = u = w = 0 ; \partial w / \partial z)_1 = g \theta' / (\theta'^2 C_p) + 2 w_2 K_m / ((z_2 - z_1)^2 C_p \theta)$$

Como en el borde superior, se supone un valor virtual C_{i-1} , tal que $C_{i-1} = b C_1$, donde $0 < b < 1$.- Los coeficientes a y b permiten simular situaciones comprendidas entre la reflexión total (a = b = 1) y la difusión (deposición) en el contorno

superior (inferior).-

Borde lateral corriente abajo: ($j = 1$)

$u = f(z)$, $\theta' = g(z)$, perfiles iniciales. Sea $G = G_1$, c , w ó u

$$\partial G / \partial x \Big|_1 = 0 \quad , \quad \partial^2 \pi / \partial x^2 \Big|_1 = 0$$

Borde lateral corriente arriba: ($j = M$)

$$\partial G / \partial x \Big|_M = (G_M - G_{M-1}) / (Cx_M - x_{M-1}) \quad ; \quad \partial^2 \pi / \partial x^2 \Big|_M = 0$$

5. METODO DE RESOLUCION

Partiendo de los campos de las variables, en un instante t , se calculan primeramente los perfiles de los coeficientes de difusión vertical turbulenta de momento y calor, según las expresiones anteriormente indicadas. Mediante la (9) se diagnostica el campo de perturbaciones de la presión. Se trata de una ecuación de Poisson que es resuelta por el método de relajación secuencial ó de Liebmann. Utilizando luego las Ec. (1), (2), (4), y (5) sin los términos de difusión turbulenta se pronostica un valor preliminar para las variables u , w , θ' y c empleando para ello diferencias adelantadas en el tiempo.-

El intervalo de tiempo empleado fue de 5 seg. Estos valores preliminares son corregidos por difusión turbulenta sobre igual período de tiempo, empleando el esquema de Crank-Nicholson. El mismo conduce a sistemas de ecuaciones algebraicas simultáneas con matrices tridiagonales, que son resueltos por el método de sustitución de Gauss, (Forsythe y Moller, 1967).-

De esta forma se obtienen los campos de las variables en el instante $t+1$. Esta secuencia de pasos se repite interactivamente hasta alcanzar nuevamente un estado estacionario posterior al encendido de la chimenea.-

A tales efectos se exige que el valor absoluto de la máxima diferencia entre los valores de las variables u , w y θ' , entre pasos consecutivos, se mantenga inferior a cotas convenientemente elegidas. Asimismo, se computa el valor medio y la variabilidad de la concentración de contaminante, exigiendo que sus fluctuaciones en el tiempo sean inferiores a una cota prefijada.-

6. DISCUSION DE LOS RESULTADOS (CASO DE ESTABILIDAD NEUTRAL)

Se ha realizado una experiencia de simulación con los siguientes parámetros de emisión: $We = .12 \text{ m s}^{-1}$, $C = 1$ (caudal unitario), $Te = .18K$ (exceso de temperatura de emisión).-

Los siguientes son valores para las condiciones de contorno y de los parámetros básicos del proceso: $\theta = 293 \text{ K}$; $\partial\theta/\partial z = 0$; $u(x,z) = u_0(z)$ (perfil neutral estacionario); $u_T = 10.22 \text{ m s}^{-1}$ (velocidad horizontal en el tope).-

6.1. Concentración de contaminantes.

El análisis de los campos de concentración de contaminantes obtenidos con una frecuencia de 5 minutos durante un período de aproximadamente una hora, después

del encendido de la chimenea, muestra la convergencia del proceso de advección y difusión turbulenta. El comportamiento de la media y la variabilidad de la concentración sobre períodos de 5 minutos y con una frecuencia de 5 segundos indican una tendencia hacia un estado estacionario. Un comportamiento análogo se observa en las variables hidrodinámicas, Fig. 1 y 2.-

La Fig. 3 muestra la distribución del contaminante 3'20" después del encendido de la chimenea. Las Figs. 4 y 5 lo hacen a los 28'20" y a los 58'20". En este último caso se ha alcanzado la estacionariedad. Los valores no nulos de concentración en superficie se deben a la simulación de un proceso de deposición del orden del 50%. La Fig. 6 muestra la variación de la concentración en superficie. En la misma puede apreciarse el máximo ubicado aproximadamente a 200 metros, corriente abajo de la fuente. Debe hacerse notar que el caso analizado corresponde a una baja velocidad de emisión y un empuje relativamente pequeño, lo que explica la proximidad del máximo en superficie.-

Si se trazara una curva que uniese los puntos de máxima concentración de la pluma, mostraría un descenso cerca de la fuente hasta una distancia de aproximadamente 500 metros seguida de un ascenso continuo hasta una altura aproximada de 50 metros a 6000 metros de la fuente.-

6.2. Perturbación en la temperatura.

El campo de perturbaciones de la temperatura, que en el caso neutral considerado es inicialmente cero en todo punto, se altera corriente abajo de la fuente.- Una vez alcanzado el estado estacionario se distingue una capa superior inestable y otra inferior estable ($\partial\theta/\partial z > 0$), cuyo tope se eleva progresivamente por encima del nivel de la boca chimenea (20 metros), hasta una altura de 100 metros a 6000 metros de la fuente (Fig. 7). Esta capa estable coincide con una zona de menor difusión del contaminante y por ende, más altas concentraciones. Este comportamiento podría observarse claramente en la marcada asimetría de un perfil vertical de concentraciones.

6.3. Componente vertical de la velocidad.

En este campo se distingue una zona de ascenso, con un máximo relativo de $.09 \text{ m seg}^{-1}$ (la máxima velocidad vertical es la de emisión de la fuente) ubicado aproximadamente a 150 metros de altura y a unos 100 metros corriente abajo de la fuente. La amplia zona de descenso que se inicia aproximadamente a los 1000 metros corriente abajo de la fuente, tiene un máximo de -0.01 m seg^{-1} ubicado a 90 metros de altura y a 2200 metros de la chimenea (Fig. 8).-

6.4. Campo de velocidades longitudinales.

En el estado estacionario el perfil de velocidades longitudinales sobre la vertical de la fuente, muestra una desaceleración general del flujo respecto del perfil corriente arriba. Esta desaceleración compensa los movimientos verticales de emisión de la chimenea y presenta un mínimo relativo a nivel del tope de la mis-

ma. Corriente abajo, el perfil recupera asintóticamente su forma inicial (Fig.9)

6.5. Perturbación de la presión.

Este campo escalar muestra una amplia zona de perturbaciones negativas a partir de unos 500 metros corriente abajo de la fuente. El resto de la región es ocupado por perturbaciones positivas con un eje vertical de máximas perturbaciones ubicado a unos 100 metros corriente arriba de la chimenea. Un perfil trazado sobre la vertical de la fuente muestra un crecimiento con la altura hasta unos 300 metros aproximadamente y luego un decrecimiento monótono hasta el tope del modelo (Fig. 10).-

7. CONCLUSIONES

El modelo de simulación utilizado ha mostrado su capacidad para describir adecuadamente los campos hidrodinámicos asociados a la perturbación producida por una emisión de gases a una dada velocidad y temperatura. Las concentraciones simuladas por el modelo concuerdan en líneas generales con las predicciones de modelos más simples. La elevación del centro de la pluma resulta ser mayor que la predicha para fuentes puntuales, (Briggs, 1969), lo cual parece coherente, por cuanto la caracterización de la fuente lineal infinita a través de un modelo bidimensional no considera la difusión turbulenta transversal.-

Aunque no se ha hecho aún una verificación exhaustiva del modelo con observaciones sobre contaminantes, algunos datos de mediciones de fluor total soluble emitido desde la fábrica Aluar de Puerto Madryn muestran una concordancia con los ordenes de magnitud previstos por el modelo. Dentro de la fase de verificación del modelo se prevé la simulación de una amplia gama de situaciones que incluyen además del caso neutral descrito aquí, situaciones de estabilidad e inestabilidad vertical.-

AGRADECIMIENTOS

En el desarrollo de este trabajo se contó con la valiosa colaboración del computador científico Oscar Geffner en la etapa de programación. Así mismo son de destacar las esclarecedoras discusiones e importantes sugerencias aportadas por los Licenciados J.A.Rodríguez Seró y J.L.Aiello.-

BIBLIOGRAFIA

- 1.- Briggs, G.A., 1969: Plume Rise, AEC Critical Review Series; U.S. Atomic Energy Commission. Oak Ridge, Tennessee.
- 2.- Fisher, E.L., 1961: A theoretical Study of the Sea Breeze; Journal of Meteorology, 18: 216-233.
- 3.- Forsythe G. y Moler C.B., 1967; Computer Solution of Linear Algebraic Systems; Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs, New Jersey.

- 4.- O'Brien, J.J., 1970: A note on the vertical structure of the eddy exchange coefficient in the P.B.L.- J. Atmos. Sci., 27: 1213-1215.-
- 5.- Ogura, Y. y Phillips N.W., 1962: Scale Analysis of Deep and Shallow Convection in the Atmosphere. J. Atmos.Sci., 19: 173-179.-
- 6.- Pandolfo, J.P., Atwater M.A. y Anderson G.E., 1971: Prediction by Numerical Models of Transport and Diffusion in an Urban Boundary Layer. Final Report. CEMC 4082 Vol. I. The Center for the Environment and Man.Inc. Hartford, Connecticut.
- 7.- Spiegel, E.A. y Veronis,G., 1960: On the Boussinesq approximation for a compressible fluid. Astrophys. J. 131: 442-447.

EPIGRAFES DE LAS FIGURAS

- Fig. 1: Concentración de contaminantes a 1740 m corriente abajo de la fuente, como función de la altura y del tiempo, para un flujo unitario de contaminantes.
- Fig. 2: Idem que 1, para la variabilidad de la concentración.
- Fig. 3: Campo de concentración de contaminante, a los 3'20" del encendido de la chimenea.
- Fig. 4: Idem que 3, a los 28'20".
- Fig. 5: Idem que 3, a los 58'20".
- Fig. 6: Concentración de contaminante en superficie.
- Fig. 7: Campo de perturbación de la temperatura potencial θ' a los 58'20" del encendido de la chimenea.
- Fig. 8: Campo de velocidad vertical w .
- Fig. 9: Perfiles de velocidad longitudinal u .
- Fig.10: Perfil de perturbación de la presión π , sobre la vertical de la fuente.













