

# DISPERSIÓN DE GASES EMANADOS DESDE LA FÁBRICA BOTNIA UTILIZANDO UN MODELO DE SIMULACIÓN DE LAS GRANDES ESCALAS ACOPLADO A UN MODELO ESTOCÁSTICO LAGRANGIANO.

César A. Aguirre<sup>a,c</sup>, Armando B. Brizuela<sup>a,c</sup>, Guillermo A. Berri<sup>b</sup> y Emiliana E. Orcellet<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Laboratorio de Ciencias de la Atmósfera, Centro de Investigaciones Científicas y Transferencia de Tecnología a la Producción (CICyTTP), CONICET-UNER. Materi y España s/n, (E3105BWA) Diamante, Argentina, cesaraguirredalotto@gmail.com, <http://www.cicyttp.org.ar>

<sup>b</sup>Servicio Meteorológico Nacional (SMN). 25 de Mayo 658, (1002) Buenos Aires, Argentina.

<sup>c</sup>Facultad de Ciencias Agropecuarias - Universidad Nacional de Entre Ríos (FCA-UNER), Ruta 11, Km 10 (3101) Oro Verde, Argentina.

**Palabras Clave:** Dispersión atmosférica, Simulación de las Grandes Escaladas, Modelos Estocásticos Lagrangianos, Botnia.

**Resumen.** En este trabajo se presentan los resultados de la simulación de la dispersión de gases emanados de la fábrica Botnia el día 1 de enero de 2011. Para la resolución de las ecuaciones de continuidad, energía y cantidad de movimiento se ha utilizado el código ARPS (Advanced Regional Prediction System). Este código ha sido acoplado a un modelo estocástico lagrangiano para obtener la trayectoria de partículas fluidas portadores de la concentración de gases, simulando las pequeñas escalas de la turbulencia no resueltas por ARPS. En este modelo acoplado se tiene en cuenta la topografía, el tipo y temperatura del suelo y la vegetación a partir de datos obtenidos por imágenes satelitales mientras que el parámetro de rugosidad del suelo es estimado a partir de una clasificación de los elementos presentes en el terreno usando una imagen de satélite. Las velocidades de viento a 10 metros y 40 metros son comparadas con mediciones realizadas por tres estaciones meteorológicas automáticas ubicadas en los alrededores del sitio de emplazamiento de la fábrica. Se muestran los niveles de concentración y la distribución geográfica de la pluma de dispersión de gases a nivel de 2,5 metros.

**Abstract.** A simulation of a plume dispersion issue from Botnia Factory at January 1, 2011 is presented in this work. The ARPS (Advanced Regional Prediction System) model is used by resolving the continuity, energy and momentum equations. To resolve the small turbulent scales, this computational code is coupled a lagrangian stochastic model for obtained the trajectory of fluid particles containing the gas concentration issue from the chimney. In this coupled model are into account the topography, type and temperature of soil and vegetation by satellite images. The roughness parameters are estimated from satellite image classification of surface ground elements. The velocity of wind at 10 meters and 40 meters are compared with meteorological station measurements localized at three sites around of Factory. The concentration levels of plume dispersion at 2.5 meters over the ground and their geographic distribution are showed.

## 1. INTRODUCTION

Se emplea un modelo numérico para simular los campos de viento y temperatura en capas bajas sobre la región del río Uruguay en proximidades de la fábrica de pulpa de celulosa Botnia. Este modelo simula además plumas de dispersión de emanaciones gaseosas emitidas desde una fuente puntual como puede ser una chimenea o fuentes distribuidas especialmente, como emisiones de gases desde basurales, tráfico vehicular, pantanos, etc. Es un modelo acoplado entre la simulación de las grandes escalas de la turbulencia (SGE) y un modelo estocástico lagrangiano (MEL) de seguimiento de partículas fluidas para simular la trayectoria de las mismas. El modelo SGE resuelve las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento, de energía y utiliza la ecuación de estado del aire húmedo para la presión (Xue et al., 1995, 2000). Es de mesoescala, no-hidrostático y semi-compresible desarrollado por el Center of Analysis and Prediction of Storms (CAPS) y la Universidad de Oklahoma (USA) y se denomina Advanced Regional Prediction System (ARPS) en su versión 5.2.12, cuyos programas fuentes se encuentran disponibles en la página <http://www.caps.ou.edu/ARPS>. Este modelo ha sido diseñado específicamente para el seguimiento y descripción de tormentas, 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 del estado de la atmósfera. Es de tipo semi-compresible ya que tiene en cuenta que la densidad del aire varía sólo con la altura en las ecuaciones de balance de masa, cantidad de movimiento y transporte de escalares pero admite la compresibilidad en la resolución de la ecuación de la presión utilizando un paso de tiempo más reducido que para las ecuaciones anteriores. 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 ondulaciones de terreno. El esquema numérico utilizado para obtener la solución de las ecuaciones diferenciales integradas en el paso de tiempo grande 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*. Aguirre (2005) realizó algunas modificaciones al mismo introduciendo la opción de cálculo dinámico para el modelo de cierre de la correlación de velocidades de las escalas no resueltas. Las mismas consistieron en la implementación del coeficiente de Smagorinsky (Smagorinsky, 1963) siguiendo la técnica de Germano et al. (1991). Aguirre et al. (2007) compararon los resultados de la dinámica del flujo simulado con este código con los obtenidos por mediciones en túnel de viento para el caso de suelo rugoso en presencia de una colina de suave pendiente realizadas por Gong & Ibbetson (1989). Aguirre et al. (2009) simularon un episodio de tormenta severa ocurrida en Aranguren, provincia de Entre Ríos, el 26 de enero de

1998. Más detalles acerca del funcionamiento del código ARPS pueden encontrarse en [Xue et al. \(1995, 2000\)](#).

Si bien para ciertos casos es suficiente con la SGE, cuando es necesario predecir con cierto grado de precisión la dispersión de un gas es indispensable modelar la turbulencia de submalla ya que fenómenos tales como la difusión y/o las reacciones químicas son determinadas por el movimiento de las pequeñas escalas no resueltas por SGE. Los modelos de tipo lagrangiano de seguimiento de partículas fluidas (MEL) son acoplados a la SGE con el fin de simular las trayectorias de estas partículas portadoras de especies químicas a nivel de la submalla. 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, 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., 1985](#); [Haworth & Pope, 1986](#); [Thomson, 1987](#); [Pope, 1994](#); [Michelot, 1996](#); [Pozorski & Minier, 1998](#); [Pope, 2000](#)). Con esta hipótesis de isotropía estadística [Aguirre et al. \(2006a\)](#) compararon los niveles de concentración de gas propano emanados desde una chimenea con los obtenidos a partir de mediciones realizadas en túnel de viento por [Fackrell & Robins \(1982\)](#). [Vinkovic et al. \(2006\)](#) utilizaron este modelo acoplado para simular la dispersión de partículas sólidas y compararon los resultados de la concentración con las experiencias de medición en túnel de viento realizadas por [Nalphanis et al. \(1993\)](#) y [Tanière et al. \(1997\)](#). [Aguirre & Brizuela \(2008\)](#) realizaron una modificación en el término determinista del modelo estocástico lagrangiano para considerar la anisotropía en el movimiento de partículas fluidas que tienen trayectorias cercanas a la superficie del suelo y compara los resultados de las simulaciones de la concentración de anhídrido carbónico emanado desde una fuente puntual elevada del suelo a barlovento de una colina de suave pendiente con las mediciones obtenidas en túnel de viento por [Gong \(1991\)](#) utilizando las tres variantes del modelo estocástico (turbulencia homogénea e isotrópica de submalla, turbulencia inhomogénea e isotrópica de submalla y turbulencia inhomogénea y anisotrópica de submalla) y además sin turbulencia de submalla, es decir, sin el acople del modelo estocástico lagrangiano, en cuyo caso las partículas fluidas se mueven siguiendo sólo las grandes escalas de la turbulencia.

El objetivo de este trabajo es simular la evolución de una pluma de gas emanado de la chimenea de la fábrica de celulosa Botnia para obtener valores relativos de concentración y distribución geográfica a nivel de 2 metros referidos a las concentraciones a boca de chimenea para un día de viento desde el NE.

## 2. METODOLOGÍA

### 2.1. La simulación de las Grandes Escalas (SGE)

El código ARPS resuelve las ecuaciones de balance de masa y cantidad de movimiento aplicadas al campo de velocidades y a las magnitudes escalares (temperatura potencial y relación de mezcla de agua en los tres estados). Para la resolución de la ecuación de la presión se utiliza la ecuación de estado para el aire húmedo ([Klemp & Wilhelmson, 1978](#)).

#### 2.1.1. Las variables del modelo ARPS

Se plantea una descomposición *Reynolds* del flujo en la capa límite atmosférica y de las otras magnitudes escalares considerando un estado base y una fluctuación. El estado base depende

sólo de la altura, mientras que las fluctuaciones son variables tridimensionales que evolucionan en el tiempo:

$$\begin{cases} u(x, y, z, t) &= \bar{u}(z) + u'(x, y, z, t) \\ v(x, y, z, t) &= \bar{v}(z) + v'(x, y, z, t) \\ w(x, y, z, t) &= w'(x, y, z, t) \\ \theta(x, y, z, t) &= \bar{\theta}(z) + \theta'(x, y, z, t) \\ p(x, y, z, t) &= \bar{p}(z) + p'(x, y, z, t) \\ \rho(x, y, z, t) &= \bar{\rho}(z) + \rho'(x, y, z, t) \\ q_v(x, y, z, p) &= \bar{q}_v(z) + q'_v(x, y, z, t) \\ q_{li}(x, y, z, t) &= q'_{li}(x, y, z, t) \\ q_h(x, y, z, t) &= q'_h(x, y, z, t) \end{cases} \quad (1)$$

En (1)  $u, v, w$  son las tres componentes del campo de velocidad en los tres ejes cartesianos ortogonales respectivamente, donde  $x$  toma la dirección oeste-este,  $y$  toma la dirección sur-norte y  $z$  es la dirección vertical. Además,  $\theta$  es la temperatura potencial,  $p$  es la presión,  $\rho$  es la densidad del aire,  $q_v$  es la relación de mezcla del vapor de agua,  $q_{li}$  del agua en estado líquido y  $q_h$  del estado sólido. Puede observarse también que la componente vertical del estado base de la velocidad es nula  $\bar{w}(z) = 0$ .

### 2.1.2. Las ecuaciones de balance del modelo ARPS

La técnica SGE 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:

$$u_i^\oplus(\vec{x}, t) = \int_V u_i(\vec{x} - \vec{r}, t) G(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (2)$$

donde  $\vec{r}$  es el radio vector posición y  $G(\vec{r})$  es la función de convolución que cumple la condición:  $\int_V G(\vec{r}) d\vec{r} = 1$ . Esta operación de filtrado aplicada al campo de velocidades puede ser vista como una descomposición del mismo en grandes escalas  $\vec{u}^\oplus$  (resueltas por SGE) y pequeñas escalas residuales  $\vec{u}^\ominus$  (no resueltas) :

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \vec{u}^\oplus(\vec{x}, t) + \vec{u}^\ominus(\vec{x}, t). \quad (3)$$

La operación de filtro aplicada a las ecuaciones de transporte de masa, cantidad de movimiento y energía resulta:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}u_i^\oplus)}{\partial x_i} = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}u_i^\oplus)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}u_i^\oplus u_j^\oplus)}{\partial x_j} = \bar{\rho}g_i B^\oplus - \left( \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right)^\oplus + 2\epsilon_{ijk}\Omega_j \bar{\rho}u_k^\oplus - \frac{\partial(\bar{\rho}\tau_{ij})}{\partial x_j} + \frac{\partial(\bar{\rho}T_{ij})}{\partial x_j}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\theta^\oplus)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}u_j^\oplus \theta^\oplus)}{\partial x_j} = \mathcal{S}_\theta - \frac{\partial(\bar{\rho}h_{\theta_j})}{\partial x_j}. \quad (6)$$

donde  $\mathcal{S}_\theta$  representa las fuentes o sumideros del escalar  $\theta$ . En las ecuaciones (4), (5) y (6)  $\bar{\rho}$  representa el promedio del valor de la densidad del aire en planos horizontales, es decir, varía sólo con la altitud (de allí el carácter semi-compresible del código). Esto último es lo mismo que decir que se ha utilizado la aproximación siguiente:

$$\rho'(x, y, z, t) \ll \bar{\rho}(z) \quad (7)$$

Además, en la ecuación (5),  $B$  es el término que representa le empuje hidrostático,  $\Omega$  es la velocidad angular de la tierra en el término de la fuerza de *Coriolis* y  $T_{ij}$  es el tensor de tensiones de viscosidad molecular. En las ecuaciones (5) y (6) han sido utilizadas la identidad de *Leonard* (Leonard, 1974) de la siguiente forma. Para la ecuación de balance de cantidad de movimiento (5):

$$\begin{aligned} (u_i u_j)^\oplus &= (u_i^\oplus u_j^\oplus)^\oplus + (u_i^\oplus u_j^\ominus + u_i^\ominus u_j^\oplus)^\oplus + (u_i^\ominus u_j^\ominus)^\oplus, \\ &= (u_i^\oplus u_j^\oplus) + \mathcal{L}_{ij} + \mathcal{C}_{ij} + \mathcal{R}_{ij}, \\ &= (u_i^\oplus u_j^\oplus) + \tau_{ij}, \end{aligned} \quad (8)$$

mientras que para la ecuación de la energía (6):

$$(u_j \theta)^\oplus = u_j^\oplus \theta^\oplus + h_{\theta_j}. \quad (9)$$

Para la resolución del tensor de tensiones de submalla o viscosidad de submalla  $\tau_{ij}$  y del término  $h_{\theta_j}$ , ARPS dispone de dos alternativas: Una es utilizar un modelo a gradiente a partir de las escalas resueltas, denominado modelo de *Smagorinsky Estándar* (Smagorinsky, 1963). La segunda opción es a partir de una estimación de la energía cinética turbulenta de submalla (1.5 TKE) resuelta utilizando 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).

Aguirre (2005) adicionó una tercer alternativa consistente en la utilización del modelo *Smagorinsky dinámico* siguiendo la metodología de Germano et al. (1991).

Como se dijo anteriormente, la ecuación de la presión es resuelta a partir de la ecuación de estado de los gases para el aire húmedo siguiendo a Klemp & Wilhelmson (1978):

$$\frac{\partial p'^\oplus}{\partial t} = - \left( u_i \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right)^\oplus - g_i \bar{\rho} u_i^\oplus - V_s^2 \frac{\partial (\bar{\rho} u_i)^\oplus}{\partial x_i} + V_s^2 \bar{\rho} \left( \frac{1}{\theta} \frac{d\theta}{dt} - \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} \right)^\oplus \quad (10)$$

En la ecuación (10)  $V_s$  representa la velocidad del sonido y  $A$  es la relación entre la constante de los gases perfectos para el aire seco y el aire húmedo (Proctor, 1987). El término de correlación velocidad-gradiente de la fluctuación de la presión es resuelto utilizando un modelo a gradiente (Deardorff, 1980). En la formulación de esta última ecuación no se ha realizado la aproximación (7), de allí el carácter semi-compresible del modelo.

El modelo de pared que permite estimar las tensiones tangenciales  $\tau_{13}|_p$  y  $\tau_{23}|_p$  en las celdas de la malla de cálculo más próximas al suelo es de tipo *ley de pared logarítmica*:

$$\begin{cases} \tau_{13}|_p &= -\bar{\rho} C_{dm} \left| \frac{\vec{V}_p^\oplus}{V_p^\oplus} \right| u_p^\oplus \\ \tau_{23}|_p &= -\bar{\rho} C_{dm} \left| \frac{\vec{V}_p^\oplus}{V_p^\oplus} \right| v_p^\oplus \end{cases} \quad (11)$$

donde el subíndice  $p$  denota el valor calculado de la variable para la celda del dominio de cálculo adyacente al suelo,  $\left| \vec{V}_p^\oplus \right|$  es el módulo de la componente horizontal de la velocidad y  $C_{dm}$  es el coeficiente de fricción calculado teniendo en cuenta la ley logarítmica del perfil de viento:

$$C_{dm} = \frac{k_v^2}{\ln^2 \left( \frac{\Delta z_p}{z_0} \right)} \quad (12)$$

$k_v$  representa la constante de *Von-Kármán*,  $\Delta z_p$  es la altura de la celda de cálculo adyacente al suelo y  $z_0$  es el parámetro de la rugosidad del suelo.

## 2.2. Modelo estocástico lagrangiano (MEL)

Para obtener las trayectorias de partículas fluidas que transportan las especies químicas en régimen turbulento debe realizarse la simulación de las pequeñas escalas no resueltas por SGE. Es decir, se simula el movimiento de las mismas al interior de un elemento de la malla de cálculo SGE. Para esto puede ser utilizada la ecuación de Langevin haciendo una analogía con el movimiento Browniano:

$$\frac{dU_i}{dt} = h_i(U_i, t) + q_{ij}(U_i, t)\eta(t), \quad (13)$$

donde  $h_i$  es el término determinista de la velocidad de una partícula fluida y  $q_{ij}$  es el término aleatorio, ligados ambos a las propiedades estadísticas de la turbulencia. En particular, definimos a  $\eta$  como una variable aleatoria cuyo valor medio es nulo y covarianza  $\langle \eta(t')\eta(t'') \rangle = \delta_{ij}\delta(t' - t'')$ . Según [Aguirre & Brizuela \(2008\)](#) las expresiones que ligan las grandes y pequeñas escalas de la turbulencia y que permiten acoplar ambos modelos son:

$$\begin{cases} q_{ij}(U_i, t) = \sqrt{C_0\varepsilon(U_i, t)} \delta_{ij}, \\ h_i(U_i, t) = \bar{\rho}g_i B^\oplus - \frac{\partial p'^\oplus}{\partial x_i} + 2\varepsilon_{ijk}\Omega_j \bar{\rho}u_k^\oplus + \frac{\partial(\bar{\rho}\tau_{ik})}{\partial x_k} + \alpha_{ij}\bar{\rho}u_j^\oplus, \end{cases} \quad (14)$$

donde el término aleatorio  $q_{ij}(U_i, t)$  es modelado haciendo uso de la constante de *Kolmogorov*  $C_0$  y la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta  $\varepsilon(U_i, t)$  siguiendo a [Pope \(1994\)](#). El tensor  $\alpha_{ij}$  expresa las características de la turbulencia de submalla. Si consideramos un flujo no estacionario, con turbulencia inhomogénea y anisotrópica, entonces su expresión resulta:

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{2K^\ominus} \frac{dK^\ominus}{dt} \delta_{ij} - \left( \frac{3}{4}C_0 \right) \frac{\varepsilon}{K^\ominus} \delta_{ij} + \left( \frac{\tau_{ij}}{2K^\ominus} - \frac{\delta_{ij}}{3} \right) \frac{\varepsilon}{K^\ominus} \quad (15)$$

donde  $K^\ominus$  representa la energía cinética turbulenta de submalla  $K^\ominus = (u_i^\ominus u_i^\ominus)^\oplus$  que puede ser resuelta planteando una ecuación de transporte ([Deardorff, 1980](#)). Más detalles de esta resolución pueden encontrarse en [Aguirre et al. \(2006a\)](#); [Aguirre et al. \(2006b\)](#) y [Aguirre & Brizuela \(2008\)](#).

### 3. CASO DE ESTUDIO

#### 3.1. Descripción de la zona de estudio

La zona de estudio comprende la margen argentina y uruguaya del Río Uruguay en cercanías de las ciudades de Gualeguaychú - Argentina y Fray Bentos - Uruguay. En esta zona se ubican tres estaciones meteorológicas sobre la margen argentina del río. Las mismas están indicadas como Torre NORTE, Torre ESTE y Torre SUR en la Figura 1. Las estaciones pertenecen al Programa de Vigilancia Ambiental del Río Uruguay que desarrolla el Servicio Meteorológico Nacional mediante un convenio firmado con la Secretaría de Ambiente y Desarrollo Sustentable de la Nación. Las mismas poseen sensores de viento y temperatura a dos niveles: 2 metros y 40 metros para la temperatura; 10 metros y 40 metros para la velocidad y dirección del viento. En este trabajo se realizó la simulación de del campo de viento, temperatura, humedad y presión usando el modelo ARPS y paralelamente se simuló la evolución espacio-temporal de la pluma de dispersión de gases emanada de la chimenea de la fábrica de pasta de celulosa Botnia utilizando el acople ARPS-MEL. La simulación correspondió al día 01 de enero de 2011 entre las 09:00 hs y las 15:00 hs (12:00 UTC a 18:00 UTC).



Figura 1: Dominio geográfico de la simulación y ubicación de las torres meteorológicas.

### 4. DESCRIPCIÓN DE LA SIMULACIÓN

La simulación ha sido realizada utilizando una computadora personal que consta de un procesador doble núcleo Intel Pentium y 4 GByte de RAM. Se utilizó un paso de tiempo grande de 10 segundos para la resolución de las ecuaciones de balance de masa, cantidad de movimiento y energía mientras que para la ecuación de resolución de la presión, el paso de tiempo fue de 1 segundo. Estas variables fueron calculadas simulando 6 horas con el modelo ARPS (entre las 9:00 hs y las 15:00 hs) mientras que las concentraciones de gases emanados de la chimenea

de Botnia usando el acople ARPS-MEL se realizó entre las 10:00 hs y las 15:00hs, es decir, se lanzó la corrida del modelo acoplado una hora después del comienzo de la simulación de las variables meteorológicas. La grilla está compuesta de celdas prismáticas regulares de altura variable. Las mismas tienen una dimensión horizontal de 1 Km x 1 Km y su altura va desde 5 metros, para las celdas adyacentes al terreno, hasta 198 metros para las que se encuentran al tope del dominio de cálculo. La ley de variación de la altura de las celdas sigue una función tangente hiperbólica. De esta forma, el mismo se compone de 75 x 75 celdas en dirección horizontal y 33 celdas en la dirección vertical. La altura del dominio útil se ha fijado en 2150 metros por encima del cual se ha dispuesto una capa suplementaria de 990 metros (5 celdas) para eliminar las ondas de presión utilizando un amortiguador de tipo *Rayleigh*. Cabe destacar que la coordenada vertical de la grilla sigue las ondulaciones del terreno. La Figura 2 presenta un corte vertical en dirección este-oeste a la altura de la fábrica Botnia. Las condiciones de borde laterales fueron de tipo *Neumann*.

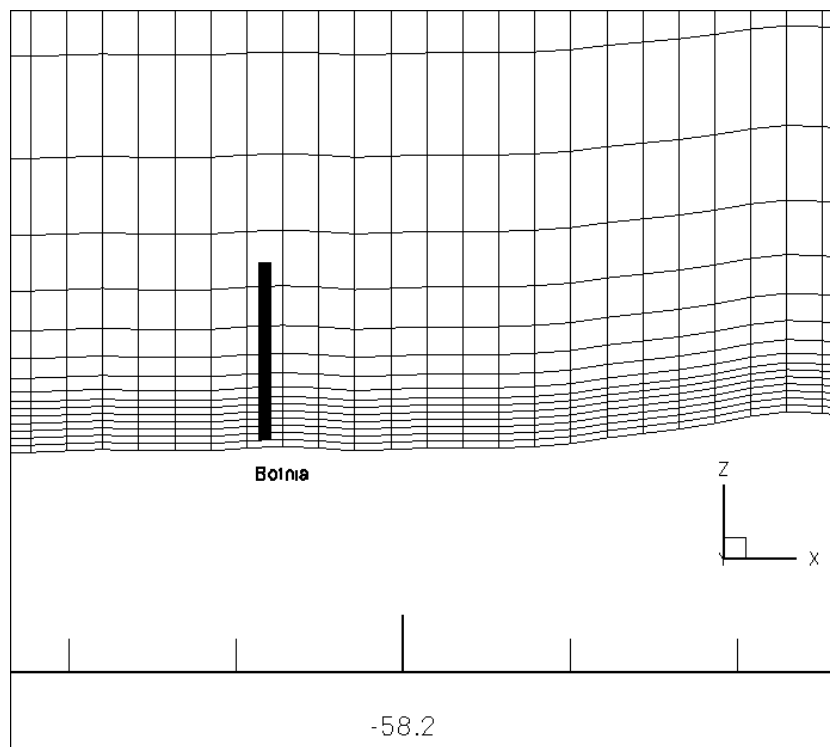


Figura 2: Configuración vertical de la malla de cálculo.

#### 4.1. Fuente de datos de las condiciones iniciales del modelo

En ARPS pueden utilizarse datos de las características de la superficie del suelo para ser incluidas como condiciones iniciales. Éstos fueron obtenidos a partir de un procesamiento de imágenes del satélite LANDSAT 5 y del satélite TERRA para el día 01 de enero de 2011. Las bandas del espectro visible e infrarrojo cercano del sensor *Thematic Mapper* montado sobre LANDSAT 5 poseen una resolución espacial de 30 metros y fueron utilizadas para realizar una clasificación no supervisada de los elementos existentes en el área de estudio en seis categorías. Posteriormente, cada categoría fue identificada realizando un muestreo a campo. La banda del infrarrojo térmico del mismo sensor tiene una resolución espacial de 120 metros y permitió obtener datos de la temperatura de la superficie del suelo siguiendo la metodología que propone



Perez et al. (2003). La Figura 3 muestra la imagen de la clasificación no supervisada de la cobertura del suelo con resolución espacial de 30 metros y la Figura 4 los datos de temperatura del suelo con una resolución espacial de 1 Km. El modelo de elevación de terreno (MDE) fue obtenido del banco de datos de *U.S. Geological Survey* (<http://srtm.usgs.gov>). La Figura 5 presenta el relieve de la zona con resolución espacial de 1 Km. A partir de la imagen clasificada (Fig. 3) se obtuvieron datos de la cobertura del terreno como el tipo de vegetación en zonas rurales, zonas urbanas y zonas cubiertas por agua. Estos tipos de vegetación fueron llevados a categorías según la tipología de *Olson World Ecosystem Classes* (Olson et al., 1985) y a partir de la correspondencia que proponen los autores, se obtuvo el mapa del parámetro de rugosidad del suelo. Para la obtención del Índice de Vegetación de la Diferencia Normalizada (NDVI) se utilizaron los datos del sensor *Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer* (MODIS) montado en el satélite TERRA. Éstos fueron adquiridos del banco de datos de *Land Processes Distributed Active Archive Center* (LP DAAC) de *USGS/Earth Resources Observation and Science* (EROS) Center, Sioux Falls, South Dakota ([http://lpdaac.usgs.gov/get\\_data](http://lpdaac.usgs.gov/get_data)). Todos los datos obtenidos de las imágenes de satélite fueron llevados a una resolución espacial de 1 Km. La metodología de análisis de las imágenes y obtención de los productos que fueron utilizados para establecer las condiciones iniciales puede encontrarse en Aguirre et al. (2012). Para inicializar los perfiles de las variables meteorológicas se utilizaron datos obtenidos de un radiosondeo de Ezeiza correspondiente a las 12 UTC (9:00 hora local argentina) del 01 de enero de 2011. Para el modelo de partículas se procedió a lanzar 100 partículas por paso de tiempo desde la boca de la chimenea, es decir 600 partículas por minuto. La chimenea tiene una altura de 120 metros sobre el terreno y está ubicada cerca de la ciudad de Fray Bentos. Cada partícula fluida transporta una concentración  $C$  de gas. Cuando las mismas llegan a la superficie del suelo quedan inmóviles en esa posición. De esta forma a diferentes momentos puede evaluarse la concentración de gas contabilizando la cantidad de partículas contenidas en volúmenes prismáticos imaginarios que se disponen en todo el dominio. Estos prismas no necesariamente deben coincidir con los utilizados por la SGE para el cálculo de la dinámica del flujo de aire ya que este cálculo se realiza en una instancia de pos-procesamiento. En este trabajo se ha optado por elegir prismas de 300 x 300 metros en dirección horizontal y 5 metros de altura sobre el terreno. Los resultados de la concentración de gas son expresados en forma relativa respecto de la concentración del prisma que contiene a la boca de chimenea  $C_0$ .

## 5. RESULTADOS

Según los datos del sondeo realizado en la estación meteorológica de Ezeiza el 01 de enero de 2011 el viento proviene del NE. Luego de la interpoación de las mediciones de viento, temperatura y humedad relativa realizadas a partir de estos datos se estimó que la velocidad del viento a 120 metros fue de  $|V| = 6,66$  m/s. Los valores de temperatura de las tres torres de medición ajustan satisfactoriamente con los simulados por el modelo. La comparación entre los valores de temperatura observados en las tres torres de medición para los dos niveles (10 metros y 40 metros) y simulados por el modelo es muy buena. La Figura 6 muestra un gráfico de dispersión entre los valores de temperatura observados y simulados. En esa figura puede verse además la recta de regresión lineal y la recta de pendiente unitaria. En este caso, el coeficiente de correlación es de  $R = 0,75$ . No ocurre lo mismo cuando se comparan los valores de velocidad de viento. Para esta variable se encontró un coeficiente de correlación bajo ( $R = 0,14$ ). Respecto de la dirección del viento, se obtuvo un porcentaje de acierto del 66 % para los datos registrados a 40 metros de altura y del 53 % para los registrados a 10 metros de altura considerando todos los registros. Más detalles de este análisis puede encontrarse en Aguirre et al. (2012).

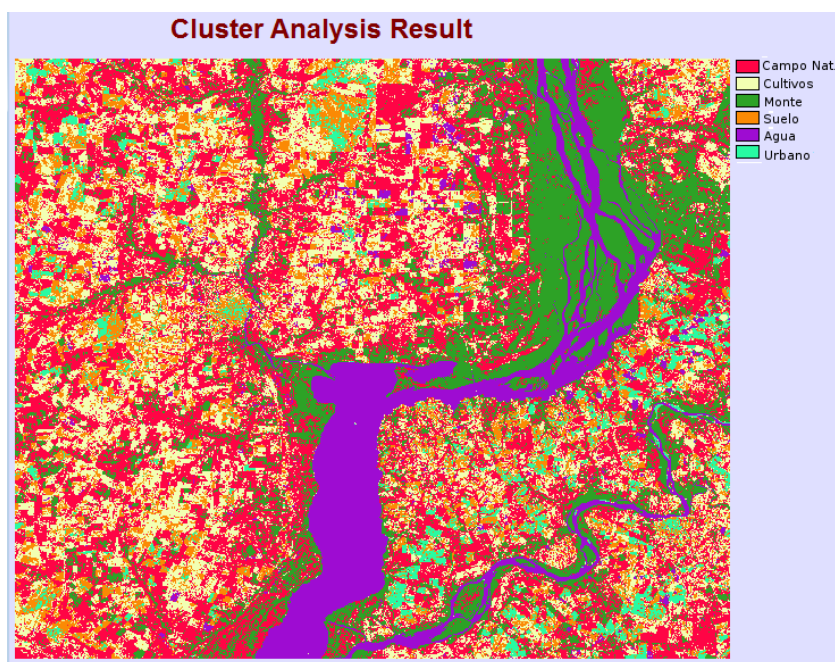


Figura 3: Clasificación no supervisada y posterior asignación de clases. Resolución espacial de 30 metros.

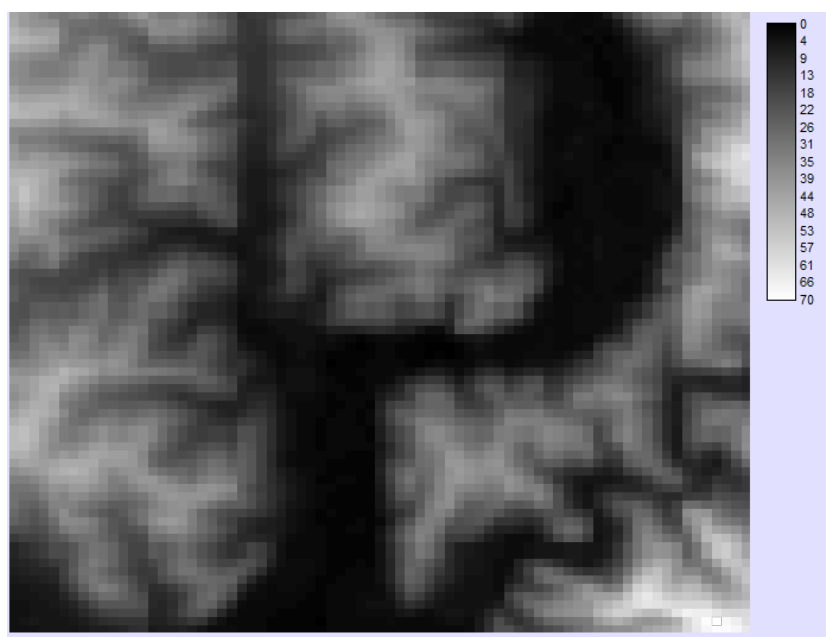


Figura 4: Modelo digital de elevación en metros. Resolución espacial de 1 Km.

La pluma de dispersión recorrió cerca de 20 Km en una hora, extendiéndose sobre el Río Uruguay y llegando a la costa de la margen entrerriana como se muestra en la Figura 7 (izquierda). Además, los gases emanados de la chimenea llegan al suelo corriente abajo luego de recorrer unos 250 metros como se observa en la Figura 7 (derecha).

La Figura 8 muestra la evolución temporal de la cantidad de partículas fluidas presentes en el dominio de cálculo. Esto permite conocer el momento en el cual el flujo de partículas alcanza el borde del dominio corriente abajo y comienzan a salir del mismo. A partir de ese momento es posible realizar los cálculos estadísticos de la concentración (valor medio y desvío estándar).

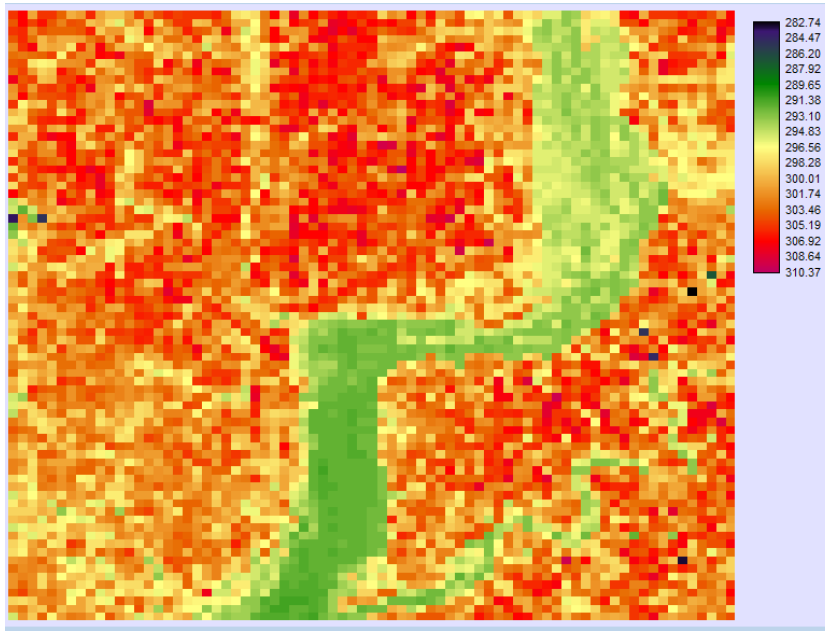


Figura 5: Temperatura de la superficie en  $^{\circ}K$ . Resolución espacial de 1 Km.

En la figura se observa que a  $t = 7980\text{seg}$  (2 hs, 13 minutos contados desde las 9:00 hs) la curva deja de crecer con una pendiente casi constante para llegar al primer máximo secundario, lo que indica que comienzan a salir partículas del dominio. a partir de ese momento se ha calculado el valor medio y el desvío estándar de concentraciones relativas ( $C/C_0$ ). La Figura 9 muestra el valor medio de la concentración relativa porcentual. La Figura 10 es una vista ampliada de la anterior. La Figura 11 muestra el Coeficiente de Variación de la concentración de gases. Todas estos últimos están calculados a 2,5 metros sobre el suelo.

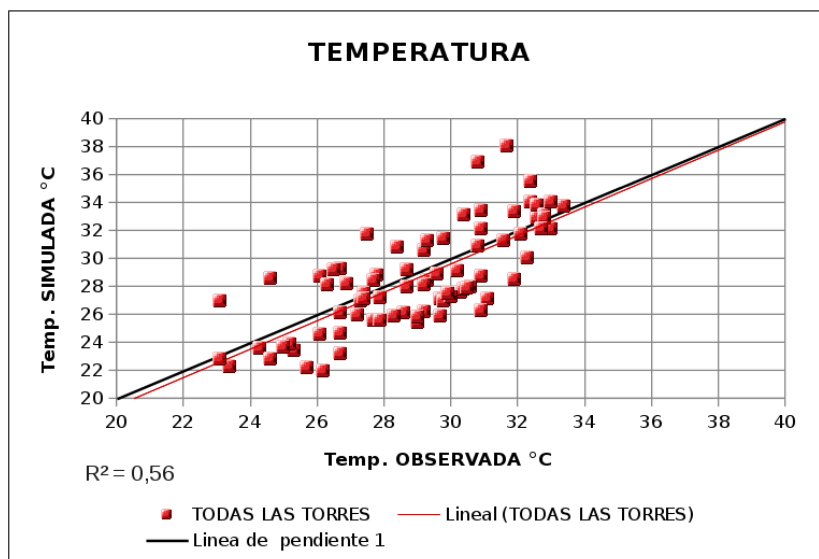


Figura 6: Dispersión entre los valores de temperatura observados por las estaciones de medición y simulados por el modelo (símbolos), línea de regresión y línea de pendiente unitaria.

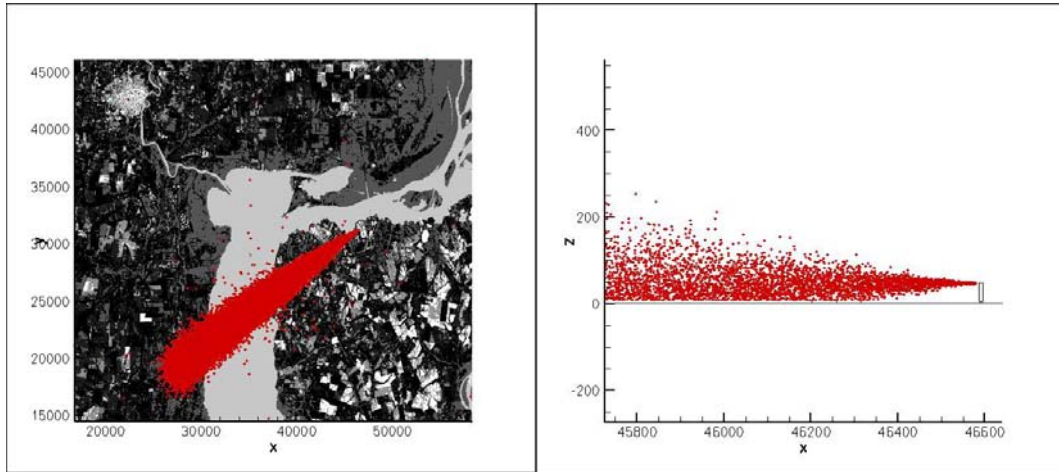


Figura 7: Vista superior (izquierda) y lateral desde el sur (derecha) de la pluma luego de una hora de simulación.

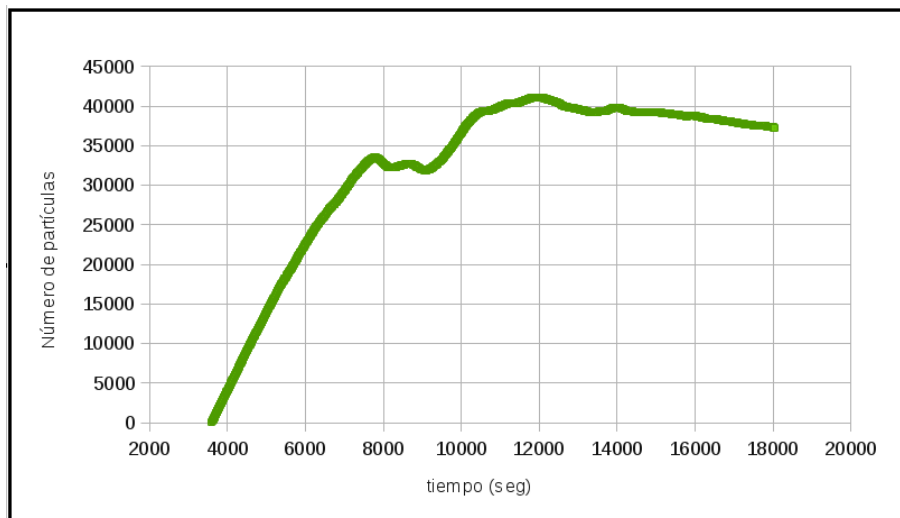


Figura 8: Evolución temporal del número de partículas en el dominio de cálculo.

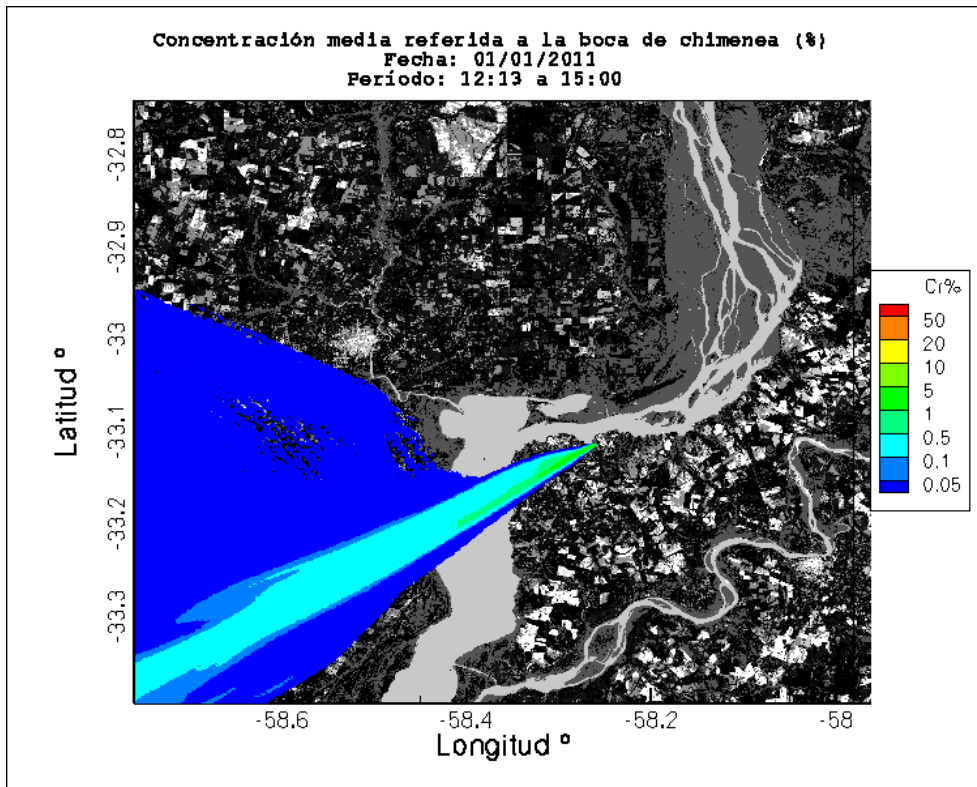


Figura 9: Concentración media relativa porcentual referida a boca de chimenea calculada a 2,5 metros sobre el terreno.

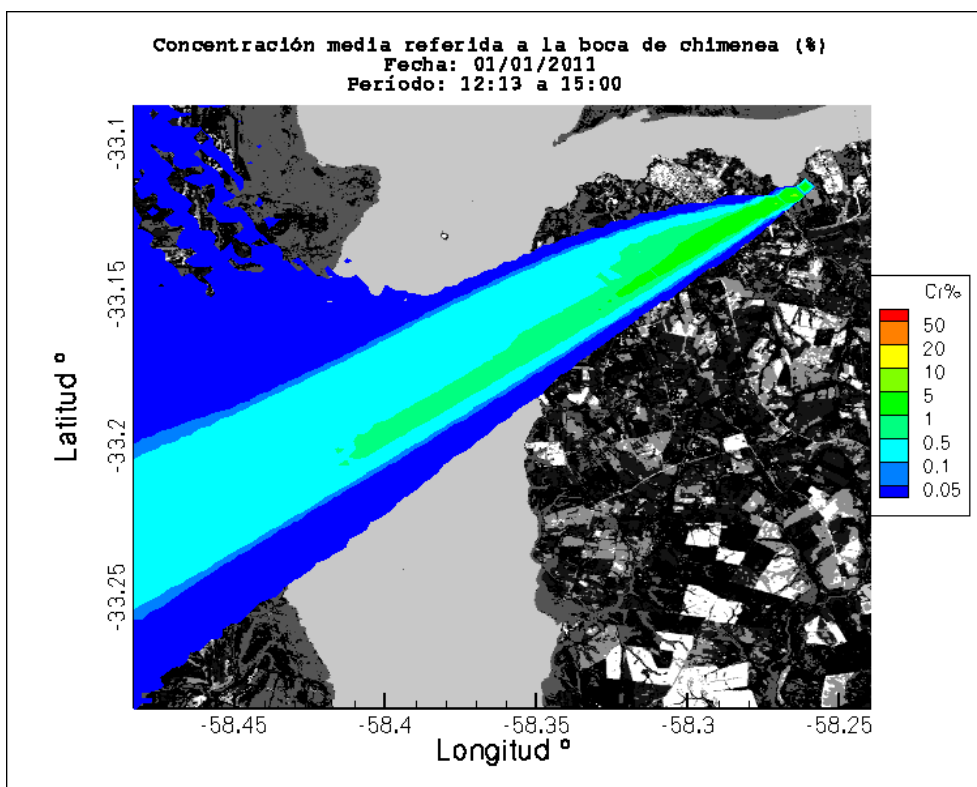


Figura 10: Vista ampliada de la concentración media relativa porcentual referida a boca de chimenea calculada a 2,5 metros sobre el terreno.

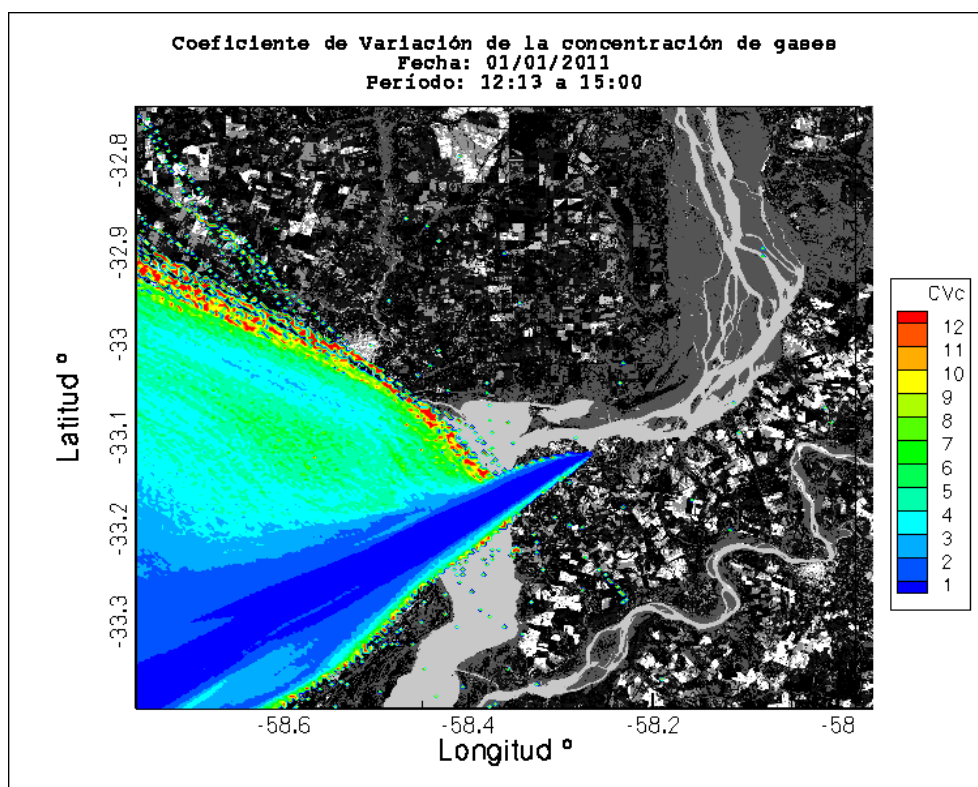


Figura 11: Coeficiente de Variación de la concentración de gases calculada a 2,5 metros sobre el terreno.

## 6. CONCLUSIONES

La velocidad de viento en capas bajas para este caso de estudio es pobremente representada por el modelo ARPS, sin embargo, la dirección de viento y la temperatura es bien simulada. Esta diferencia de comportamiento podría deberse a que las condiciones iniciales de viento fueron impuestas solamente utilizando datos de un radiosondeo, mientras que los datos de temperatura del suelo fueron suministrados al inicio de la simulación con una resolución espacial de 1 Km. Este inconveniente puede ser corregido forzando las condiciones de borde de las variables meteorológicas utilizando datos pronosticados de los modelos numéricos como el ETA, el MCLM o el WRF.

Para el día 01 de enero de 2011 la pluma de dispersión emanada de la chimenea de la fábrica Botnia recorrió cerca de 20 Km en una hora, extendiéndose sobre el Río Uruguay en dirección NE-SW y llegando a la costa de la margen entrerriana. Los gases emanados de la chimenea llegan al suelo corriente abajo luego de recorrer unos 250 metros. Las concentraciones medias calculadas entre las 12:13 y las 15:00 horas presentan una deformación transversal en el sitio donde la pluma retoma la costa entrerriana, ensanchándose rápidamente luego de atravesar el río. En este sitio, la pluma promedio tiene un ancho de 12 Km aproximadamente y una concentración media relativa porcentual de 0,45 % referido a los valores en boca de chimenea en el centro de la misma y para un nivel de 2,5 metros sobre el terreno. Se observa que parte de la pluma es desviada luego de atravesar el río hacia el noroeste pero sólo por un momento ya que los valores de concentración media son muy bajos y por ende, el coeficiente de variación es elevado indicando este efecto transitorio. Luego de que la pluma recorre unos 25 Km en territorio argentino, las concentraciones medias relativas porcentuales a 2,5 metros de altura disminuyen hasta un valor de 0,22 % al centro de la pluma. En este sitio, la extensión transversal, evaluada

considerando concentraciones medias superiores a 0,05 % a nivel de 2,5 metros de altura, ha alcanzado los 8 Km.

**Reconocimientos:** Este trabajo se ha realizado con el apoyo de los proyectos PICT2008-1417 y PICT2010-2492 ambos de la Agencia Nacional de Promoción Científica (ANPCyT). Los datos ASTER L1B fueron obtenidos a partir de la base de datos de la NASA *Land Processes Distributed Active Archive Center* (LP DAAC), USGS/Earth Resources Observation and Science (EROS) Center, Sioux Falls, South Dakota [http://lpdaac.usgs.gov/get\\_data](http://lpdaac.usgs.gov/get_data).

## REFERENCIAS

- Aguirre C. A. Dispersión et Mélange Atmosphérique Euléro-lagrangien de Particules Fluides Réactives. Application à des cas simples et complexe. *Thèse de doctorat. Université Claude Bernard Lyon 1, France*, **115-2005**, 1-323, 2005.
- Aguirre C. A., A. B. Brizuela, I. Vinkovic and S. Simoëns. A subgrid Lagrangian stochastic model for turbulent passive and reactive scalar dispersion. *International Journal of Heat and Fluid Flow. Editorial: Elsevier Science*. **27 (4)**. ISSN: 0142-727X: 627-635, 2006.
- Aguirre C. A., A. B. Brizuela, I. Vinkovic y S. Simoëns. Modelo acoplado Eulero-Lagrangiano de simulación de la dispersión atmosférica de especies químicamente reactivas en la capa límite. *Serie Mecánica Computacional, Argentina*, **Vol XXV**: 185-205, 2006.
- Aguirre C. A., J. M. Martínez Fayó, A. B. Brizuela y M. F. Moyano. Simulación de las Grandes Escalas de Flujo Turbulento sobre una Colina de Suave Pendiente. *Serie Mecánica Computacional, Argentina*, **Vol XXVI**: 1215-1235, 2007.
- Aguirre C. A. y A. B. Brizuela. Simulación Numérica de la Dispersión Atmosférica de Gas Pasivo sobre una Colina utilizando un Modelo Acoplado. *Serie Mecánica Computacional, Argentina*, **XXVII (4)**: 217-237, 2008.  
URL: [www.cimec.org.ar/ojs/index.php/mc/issue/view/229](http://www.cimec.org.ar/ojs/index.php/mc/issue/view/229)
- Aguirre C. A., R. R. Paz, J. M. Martínez Fayó, G. Rearte y A. Brizuela. Simulación computacional de la tormenta severa ocurrida en Aranguren, Entre Ríos, Argentina. *Serie Mecánica Computacional, Argentina*, **Vol XXVIII**: 1337-1354, 2009.
- Aguirre C. A., G. J. Berri, A. B. Brizuela y E. E. Orcellet. Simulación de la circulación de viento y temperatura en capas bajas en la región de la ciudad de Gualeguaychú, Argentina. *Aprobado para publicar en la Revista Serie Mecánica Computacional, Argentina*, 2012.
- Bachelier L. Théorie de la spéculation. *Thèse publiée dans les Annales Scientifiques de l'École Normale Supérieure*, **17,21**, 1900. Réédité aux Éditions Jacques Gabay, Paris, 1995.
- Deardorff J. W. Stratocumulus-capped mixed layer derived from a three dimensional model. *Boundary-Layer Meteorology*, **18**: 495-527, 1980.
- Durbin P. A. A random flight model in inhomogeneous turbulent dispersion. *Phys. Fluids*. **23 (11)**: 2151-2153, 1980.
- Durbin P. A. Stochastic Differential Equations and Turbulent Dispersion. *Lewis Research Center. NASA*, **1103**. Cleveland, Ohio: 1-69, 1983.
- Fackrell J. E. and A. G. Robins. Concentration fluctuations and fluxes in plumes from point sources in a turbulent boundary layers. *J. Fluid Mech*, **117**: 1-26, 1982.
- Germano M., U. Piomelli, P. Moin and W. H. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *J. of Physics Fluids*, **A 3**: 1760-1765, 1991.
- Gong W. and A. Ibbetson. A wind tunnel study of turbulent flow over models hill, *Boundary Layers Meteorology*, **49**: 113-148, 1989.

- Gong W. 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, 1991.
- Haworth D. C. and S. B. Pope. A Generalized Langevin Model for Turbulent Flow. *Phys. Fluid*, **29** (2): 378–405, 1986.
- Klemp J. B. and R. B. Wilhelmson. The Simulation of three-dimensional convective storm dynamics. *J. Atmos. Sci.*, **35**: 1070–1096, 1978.
- Langevin P. On the Theory of Brownian Motion. *C. R. Acad. Sci. Paris*, **146**: 530–533, 1908.
- Leonard A. Energy Cascade in Large Eddy Simulation of Turbulent Fluid Flow. *Adv. Geophysics*, **18 A**: 237–248, 1974.
- Michelot C. 1996. Développement d'un modèle stochastique lagrangien. Application à la dispersion et à la chimie de l'atmosphère. *Thèse de doctorat. Ecole Centrale de Lyon*: 180 pp, 1996.
- Nalpanis P., J. R. C. Hunt and C.F. Barrett. Saltating particles over flat beds. *J Fluid Mech*, **251**:661–685, 1993.
- Olson, J. S., J. A. Watts, and L. J. Allison. Major world ecosystem complexes ranked by carbon in live vegetation: a database. *Carbondioxide Information Center, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, NDP-017*: Tennessee, 1985.
- Pérez A. M., A. Calle y J. L. Casanova. Cálculo de la Temperatura Superficial a partir de Datos LANDSAT TM. *Teledetección y Desarrollo Regional. X Congreso de Teledetección*. Cáceres, España: 95–98, 2003.
- Pope S. B. Consistent Modeling of Scalars in Turbulent Flows. *Phys. Fluid.*, **26** (2): 404–408, 1983.
- Pope S. B. Lagrangian PDF Methods for Turbulent Flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **26**: 23–36, 1994.
- Pope S. B. *Turbulent Flow*. Cambridge Univ. Press., UK, 540 pp, 2000.
- Pozorski J. and J. P. Minier. On the lagrangian turbulent dispersion models based on the Langevin equation. *International Journal of Multiphase Flow*, **24**: 913–945, 1998.
- Proctor F. H. The Terminal Area Simulation System. *Volume I: Theoretical Formulation*. NASA Contractor Report. **CR-4046**: 176 pp, 1987.
- Smagorinsky J. General Circulation Experiments with the Primitive Equations. I. The Basic Experiments", *Mon. Weather Rev.*, **91**: 99–164, 1963.
- Tanière A., B. Oesterlé, J. C. Monnier. On the behaviour of solid particles in a horizontal boundary layer with turbulence and saltation. *Exp. in Fluids*, **23**:463–471, 1997.
- Thomson D. J Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows. *J. Fluid Mech*. **180**: 529–556, 1987.
- Van Dop H., F. Nieuwstadt and J. Hunt. Random walk models for particle displacement in inhomogeneous unsteady turbulent flow. *Phys. Fluids*. **28**: 1639–1653, 1985.
- Vinkovic I., C. A. Aguirre, M. Ayrault and S. Simoëns. Large-eddy simulation of the dispersion of solid particles in a turbulent boundary layer- *Boundary-Layer Meteorology*, **121**: 283–311, 2006.
- Xue M., K. K. Droegemeier, V. Wong, A. Shapiro and K. Brewster. ARPS version 4.0 user's guid. *CAPS*: 380 pp. <http://www.caps.ou.edu/ARPS>, 1995.
- Xue M., K. Droegemeier and V. Wong. The Advanced Regional Prediction System (ARPS). A Multi-Scale Nonhydrostatic Atmospheric Simulation and Prediction Model. Part I: Model Dynamics and Verificatio. *Meteorology Atmospheric Physics*, **75**: 161–193, 2000.
- Xue M., K. Droegemeier, V. Wong, A. Shapiro, K. Brewster, F. Carr, D. Weber, Y. Lin and D.



Wang. The Advanced Regional Prediction System (ARPS). A Multi-Scale Nonhydrostatic Atmospheric Simulation and Prediction Model. Part II: Model Physics and Applications, *Meteorology Atmospheric Physics*, **76**: 14-3-165, 2001.

Xue M., K. Droegemeier and D. Weber. Numerical Prediction of High-Impact Local Weather: A Driver for Petascale Computing, *CRC Press LLC, Chapter 6*: 103–125, 2008.