

Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey

Campus Monterrey

Escuela de Ingeniería y Ciencias



Estudio del efecto de la transferencia de calor debida a la radiación en la dispersión de contaminantes atmosféricos por medio de CFD

Tesis presentada por

Edwin Gustavo González González

sometida a la

Escuela de Ingeniería y Ciencias

como un requisito parcial para obtener el grado académico de

Maestro en Ciencias

con especialidad en Ingeniería Energética

Monterrey Nuevo León, 11 de Mayo de 2018

## Declaración de autoría

Yo, Edwin Gustavo González González, declaro que esta tesis titulada, 'Estudio del efecto de la transferencia de calor debida a la radiación en la dispersión de contaminantes atmosféricos por medio de CFD', y el trabajo que se presenta en ella es de mi autoría. Adicionalmente, confirmo que:

- Realice este trabajo en su totalidad durante mi candidatura al grado de maestro en esta universidad.
- He dado crédito a cualquier parte de esta tesis que haya sido previamente sometida para obtener un grado académico o cualquier otro tipo de titulación en esta o cualquier otra universidad.
- He dado crédito a cualquier trabajo previamente publicado que se haya consultado en esta tesis.
- He citado el trabajo consultado de otros autores, y la fuente de donde los obtuve.
- He dado crédito a todas las fuentes de ayuda utilizadas.
- He dado crédito a las contribuciones de mis coautores, cuando los resultados corresponden a un trabajo colaborativo.
- Esta tesis es enteramente mía, con excepción de las citas indicadas.



---

Edwin Gustavo González González

Monterrey Nuevo León, 11 de mayo de 2018

©2018 por Edwin Gustavo González González  
Todos los derechos reservados

Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey

Campus Monterrey

Escuela de Ingeniería y Ciencias

Los miembros del comité aquí citados certificamos que hemos leído la tesis presentada por Edwin Gustavo González González y consideramos que es adecuada en alcance y calidad como un requisito parcial para obtener el grado de *Maestro en Ciencias con Especialidad en Ingeniería Energética*.

Dr. José Ignacio Huertas Cardozo  
Tecnológico de Monterrey  
Escuela de Ingeniería y Ciencias  
Asesor principal

Dr. Alejandro Montesinos Castellanos  
Tecnológico de Monterrey  
Escuela de Ingeniería y Ciencias  
Miembro del comité



Dr. Gerardo Manuel Mejía Velázquez  
Tecnológico de Monterrey  
Escuela de Ingeniería y Ciencias  
Miembro del comité

Dr. Rubén Morales Menéndez  
Director Nacional de Posgrado  
Escuela de Ingeniería y Ciencias

Monterrey Nuevo León, 11 de mayo de 2018

## Dedicatoria

El presente escrito está dedicado a todos mis seres queridos, quienes desde la lejanía me han apoyado en este gran paso que he dado para mi crecimiento profesional y personal; también a todos aquellos que me acompañaron en este trayecto ....

## Reconocimientos

Se reconoce especialmente al Tecnológico de Monterrey por permitir llevar a cabo los estudios de maestría en sus instalaciones y al grupo de investigación en energía y cambio climático puesto concedió las herramientas computacionales necesarias para llevarlo a cabo todo el trabajo.

# Estudio del efecto de la transferencia de calor debida a la radiación en la dispersión de contaminantes atmosféricos por medio de CFD

por

Edwin Gustavo González González

## **Presentación**

El presente documento, describe la realización de un proyecto de investigación para la obtención del título de Maestría en Ciencias con especialidad en Ingeniería Energética del Tecnológico de Monterrey. Desarrollado en las instalaciones del Grupo de Investigación en Energía y Cambio Climático del Tecnológico de Monterrey. Busca por objetivo, la comprensión acerca de la dispersión de contaminantes atmosféricos alrededor de vías y la eficacia con la que la dinámica de fluidos computacional permite emular, con un alto nivel de precisión, la física relacionada al fenómeno. Se exploran escenarios bajo los cuales intervienen diferentes efectos externos, tales como la radiación, humedad, velocidad, entre otros, con el fin de determinar el efecto sobre la dispersión de contaminantes cercanos a vías.

## Lista de Figuras

Figura 1. Dominio computacional utilizado para el estudio de la dispersión de partículas alrededor de vías por medio del uso de CFD. ....	6
Figura 2. a. Resultados del perfil horizontal de concentración a nivel suelo para diferentes modelos de turbulencia, b. Análisis de independencia de malla. ....	17
Figura 3. Resultados del perfil horizontal de concentración a nivel suelo (a) y a 2 m de altura (b) y verticales al borde de la vía (c) y a la salida del dominio computacional (d) para diferentes velocidades de viento y ausencia del módulo de transferencia de calor.....	18
Figura 4. Resultados del perfil vertical de velocidad al borde de la vía (a) y en la salida del dominio computacional (b) y del perfil vertical temperatura a la salida del dominio (c) Perfiles negativos (d) Perfiles positivos y neutral.....	19
Figura 5. Cambio de la temperatura de las partículas debido al efecto de la radiación incidente. (a) Temperatura vs. distancia en dirección del viento (b) Temperatura de las partículas vs. altura. ....	20
Figura 6. Resultados de la energía cinética turbulenta y la disipación viscosa turbulenta en la coordenada de dirección del viento a 0 m de altura (a) y en la vertical en el borde de la vía (b). ....	20
Figura 7. Resultados del perfil horizontal de concentración a nivel suelo (a) y a 2 m de altura (b) y en la vertical al borde de la vía (c) y a la salida del dominio computacional (d) para el caso base, un caso con el módulo de energía activo y el caso con módulo de radiación activo. ....	21
Figura 8. Resultados del perfil horizontal de concentración a nivel suelo (a) y a 2 m de altura (b) y perfiles verticales de concentración al borde de la vía (c) y a la salida del dominio computacional (d) para un caso con el módulo de radiación activo, uno sin el módulo de radiación activo y otro en el cual se fija un Flux de calor constante. ....	22
Figura 9. Resultados de los contornos de temperatura para un perfil negativo (a), temperatura para un perfil positivo (b), velocidad (c) y radiación incidente (d). ....	23
Figura 10. Resultados del perfil horizontal de concentración a nivel suelo (a) y a 2 m de altura (b) y perfiles verticales de concentración al borde de la vía (c) y a la salida del dominio computacional (d) para casos con estabilidad atmosférica adiabática a diferentes velocidades de viento. ....	24
Figura 11. Resultados del perfil horizontal de concentración a nivel suelo (a) y a 2 m de altura (b) y perfiles verticales de concentración al borde de la vía (c) y a la salida del dominio computacional (d) para casos con perfil de temperatura diferente. ....	25

Figura 12. Resultados del perfil horizontal de concentración a nivel suelo (a) y a 2 m de altura (b) y perfiles verticales de concentración al borde de la vía (c) y a la salida del dominio computacional (d) para diferentes estabilidades atmosféricas. .... 26

Figura 13. Resultados del perfil horizontal de concentración a nivel suelo (a) y a 2 m de altura (b) para diferentes ..... 27

Figura 14. Correlaciones entre los resultados del caso base y un caso con efecto de la radiación para una concentración adimensional según la ecuación (19) (a) y una concentración adimensional según la ecuación (25). .... 27



## Lista de Tablas

Tabla 1 Acrónimos y símbolos .....	2
Tabla 2 Condiciones meteorológicas que definen las clases de estabilidad de Pasquill. ....	14
Tabla 3 Resultados prueba F. ....	28

## Tabla de contenido

Presentación .....	V
Lista de Figuras .....	VI
Lista de Tablas .....	VIII
1. Introducción .....	4
2. Metodología .....	7
3. Descripción del modelo.....	8
4. Resultados .....	16
4.2 Casos de estudios .....	17
5. Conclusiones .....	28
6. Reconocimientos .....	29
7. Referencias .....	29

# Estudio del efecto de la transferencia de calor debida a la radiación en la dispersión de contaminantes atmosféricos por medio de CFD

J. I. Huertas; E.G. González; D. F. Prato

*Grupo de Energía y Cambio Climático  
Tecnológico de Monterrey, México*

## Resumen

*La actividad antropogénica del hombre ha permitido que las emisiones de partículas contaminantes se acrecienten día a día. Una fuente especial de emisión es debida al tránsito de vehículos en carreteras sin pavimentar, los cuales producen re-suspensión de material particulado, el cual viaja con ayuda de las corrientes de viento que circulan los alrededores.*

*Se desarrollará entonces un estudio el cual resuelve con ayuda de CFD las ecuaciones diferenciales que describen la dispersión de contaminantes atmosféricos alrededor de vías no pavimentadas y en especial para el caso en el que se tiene en cuenta la contribución de la radiación solar en el cálculo. Ésta última se modelará con ayuda de un modelo de radiación, adicional al sistema de ecuaciones que describen la física de las partículas que interactúan con el viento que las transporta.*

*Se encuentra que la radiación solar hace que la dispersión de contaminantes atmosféricos sea mayor en un 40% con respecto a un caso en el cual no se tiene en cuenta dicha contribución. Cerca de la zona de emisión se observan los cambios más importantes en la dispersión.*

*Finalmente, se propone un número adimensional que representa la concentración de partículas, el cual tiene en cuenta el efecto de la radiación. Este número, permite correlacionar las concentraciones obtenidas en estudios de dispersión de contaminantes sin radiación con concentraciones obtenidas para estudios realizados con el efecto de la radiación, con ello, es posible representar un caso con presencia de la radiación por medio de un caso simple, en ausencia de esta.*

**Palabras clave:** Dispersión de contaminantes atmosféricos, turbulencia, radiación solar, números adimensionales, estabildades atmosféricas.

**Tabla 1** Acrónimos y símbolos

	<i>Descripción</i>	<i>Unidades</i>
$a$	Coefficiente de absorción de superficies	—
$a_p$	Coefficiente de absorción de partículas	—
$C$	Concentración de las partículas	—
$C_{1\varepsilon}, C_{2\varepsilon}, C_\mu$	Constantes del modelo de turbulencia RNG k- $\varepsilon$	—
$C^*$	Concentración Normalizada	—
$D_{i,m}$	Difusividad de la especie i en m	$m^2s^{-1}$
$D_t$	Difusividad turbulenta de la especie i	$m^2s^{-1}$
$d, \bar{d}$	Diámetro y diámetro promedio de partícula	$\mu m$
$E$	Flux emitido	$kgm^{-2}s^{-1}$
$E_p$	Emisión de radiación equivalente	$Wm^{-2}$
$F_D$	Coefficiente de arrastre por unidad de masa en la partícula	—
$F_x$	Aceleración	—
$g_z$	Gravedad en la dirección z	$m^2s^{-2}$
$\vec{g}$	Vector de gravedad	$m^2s^{-2}$
$G_b$	Generación de energía cinética turbulenta debido a fuerzas buoyantes	$m^2s^{-2}$
$G_k$	Generación de energía cinética turbulenta debido a gradientes de velocidad	$m^2s^{-2}$
$I$	Intensidad de radiación (depende de la posición $\vec{r}$ y la dirección $\vec{s}$ )	$Wm^{-2}$
$I_i^n$	Vectores de irradiación i que responden a una posición $\vec{r}$ y una dirección $\vec{s}$ particular	$Wm^{-2}$
$K$	Energía cinética turbulenta	$m^2s^{-2}$
$l$	Longitud de lado de cada cuadro para el mallado en 2D	$m$
$\vec{j}_i$	Flux de difusión de la especie i	$kgm^{-2}s^{-1}$
$L$	Ancho de vía	$m$
$m_{vap}$	Masa de vapor contenida en el aire	$kg$
$m_{vap}^{sat}$	Masa de vapor requerida para saturar en el aire	$kg$
$n$	Parámetro de propagación de la función de distribución de tamaño de partícula, índice de refracción	—
$\vec{P}_i$	Matriz del balance de energía	—
$P_{vap}$	Presión de vapor de la mezcla i de agua y aire	$bar$
$P_{vap}^{sat}$	Presión de vapor de la mezcla saturada i de agua en aire	$bar$
$\dot{q}$	Flujo de calor	$Wm^{-2}$
$\vec{q}_i$	Vector de irradiación solar	—
$\vec{r}_i$	Acoplamiento del tensor de esfuerzos en la ecuación de radiación	—
$\vec{r}$	Vector de posición	—
$R^2$	Coefficiente de determinación	—
$Re$	Número de Reynolds	—
$\vec{s}$	Vector de dirección de dispersión	—
$\vec{s}'$	Dirección del vector de dispersión	—
$s$	Longitud de trayectoria	$m$
$S_\varepsilon$	Fuentes externas de disipación viscosa turbulenta	$m^2s^{-3}$
$S_k$	Fuentes externas de energía cinética turbulenta	$m^2s^{-2}$
$T$	Temperatura local	$K$
$T_g$	Temperatura del suelo	$K$
$T_i$	Temperatura de fluido o de partícula en una posición i	$K$
$T_s$	Temperatura del cielo (a una altura de 60 m)	$K$
$U$	Velocidad local de fluido en la dirección x	$m^2s^{-1}$
$u$	Velocidad local del viento en la dirección x	$m^2s^{-1}$
$u_p$	Velocidad local de partículas en la dirección x	$m^2s^{-1}$
$\hat{u}$	Energía interna por unidad de volumen	$Jm^{-3}$
$u^*$	Velocidad de Fricción	$m^2s^{-1}$
$U$	Velocidad media del viento en la dirección x	$m^2s^{-1}$
$U^*$	Velocidad de viento normalizada en la dirección x	—
$U_\infty$	Velocidad del viento fuera de la capa límite	$m^2s^{-1}$

$v$	Velocidad local del viento en la dirección $y$	$m^2 s^{-1}$
$\vec{v}$	Vector de velocidades	$m^2 s^{-1}$
$w$	Velocidad local del viento en la dirección $z$	$m^2 s^{-1}$
$x_b$	Posición en $x$ del borde de la vía	$m$
$x_i$	Distancia desde el borde de la vía (vientos abajo)	$m$
$x$	Tamaño de partícula $x$	$m$
$x_o$	Tamaño de partícula característico	$m$
$x^*$	Distancia normalizada desde el borde de la vía	–
$y^+$	Distancia de pared adimensional	–
$Y$	Fracción acumulativa de material en peso menor que el tamaño $x$	–
$Y_i$	Fracción másica de la especie $i$	–
$Y_M$	Contribución de la dilatación fluctuante en turbulencia compresible a la tasa de disipación global	$m^2 s^{-2}$
$z$	Altura	$m$
$z_0$	Rugosidad superficial	$m$
$\alpha_k$	Número de Prandtl inverso efectivo para la energía cinética turbulenta ( $k$ )	–
$\alpha_\varepsilon$	Número de Prandtl inverso efectivo para la disipación viscosa turbulenta ( $\varepsilon$ )	–
$\Delta V$	Volumen de control	$m^3$
$\partial$	Derivada parcial	–
$\delta_1$	Espesor de desplazamiento	$m$
$\delta_2$	Espesor de cantidad de movimiento	$m$
$\varepsilon$	Disipación viscosa turbulenta	$m^2 s^{-3}$
$\kappa$	Constante universal de Von Kármán (0.41)	–
$\mu$	Viscosidad molecular de fluido	$kgm^{-1}s^{-1}$
$\varphi$	Humedad relativa	–
$\Phi$	Función de fase	–
$\rho, \rho_p$	Densidad de fluido y de partículas	$kgm^{-3}$
$\rho_\infty$	Densidad del viento fuera de la capa límite	$kgm^{-3}$
$\sigma$	Constante de Stefan Boltzmann ( $5,669 \times 10^{-8}$ )	$Wm^{-2}K^{-4}$
$\sigma_\varepsilon$	Número de Prandtl turbulento para la disipación viscosa turbulenta	–
$\sigma_k$	Número de Prandtl turbulento para la energía cinética turbulenta	–
$\sigma_p$	Coefficiente de dispersión de partículas equivalente	–
$\sigma_s$	Índice de refracción de la superficie	–
$\bar{\tau}$	Tensor de esfuerzos viscosos	$kgm^{-1}s^{-2}$
$\tau_0$	Esfuerzo cortante en la superficie	$Pa$
$\theta_s$	Temperatura normalizada para condiciones atmosféricas estables	–
$\theta_u$	Temperatura normalizada para condiciones atmosféricas inestables	–
$\Psi_M$	Función de estabilidad	–
$\Omega'$	Ángulo sólido	–
$\nabla$	Operador nabla, divergencia de la variable a la cual se aplica	–
<b>Siglas</b>		
<b>ABL</b>	Atmospheric Boundary Layer	–
<b>CFD</b>	Computational fluid dynamics	–
<b>DNS</b>	Direct Numerical Simulation	–
<b>DO</b>	Discrete Ordinates	–
<b>FB</b>	Fractional Bias	–
<b>LES</b>	Large Eddy Siulation	–
<b>RANS</b>	Reynolds Averaged Navier Stokes	–
<b>RNG</b>	Renormalization Group	–

## 1. Introducción

La dispersión de contaminantes alrededor de vías es un fenómeno que permite que las partículas se transporten desde la fuente de emisión a lugares donde ni siquiera se tiene registro de éstas. Diferentes investigadores han intentado representar situaciones en las cuales existe cierto tipo de contaminante, ya sea gaseoso o particulado, y el cual se dispersa alrededor de vías, a través de edificios, alrededor de calles, entre otros. Muchos casos han sido representados con ayuda de diferentes tipos de aproximaciones, por ejemplo, el uso de modelos de tipo Gaussiano o por medio de resolución de ecuaciones empíricas que son producto de la simplificación de los modelos físicos que describen el fenómeno. Algunos autores han enfocado sus esfuerzos en la toma de mediciones experimentales y otros han resuelto casos sencillos por medio del uso de la dinámica de fluidos computacional (CFD por sus siglas en inglés). Este último medio es el que interesa en particular, puesto que, en el presente trabajo, toda la problemática de dispersión será resuelta con ayuda de dicha herramienta, y para ello, se hace uso de la herramienta Ansys Fluent V.17.1®.

Diversos son los autores que han explorado el tema de la dispersión de contaminantes, pero han enfocado sus esfuerzos en diferentes geometrías y casos modelados con ayuda de diferentes softwares de modelación en CFD. El caso de estudio que precede al trabajo actual fue desarrollado por (Huertas & Prato, 2018) y en adelante servirá como caso comparativo, llamándolo como “Caso Base”. En dicho trabajo, se hace uso de un modelo resuelto con ayuda de CFD y que se basa en la geometría propuesta en la

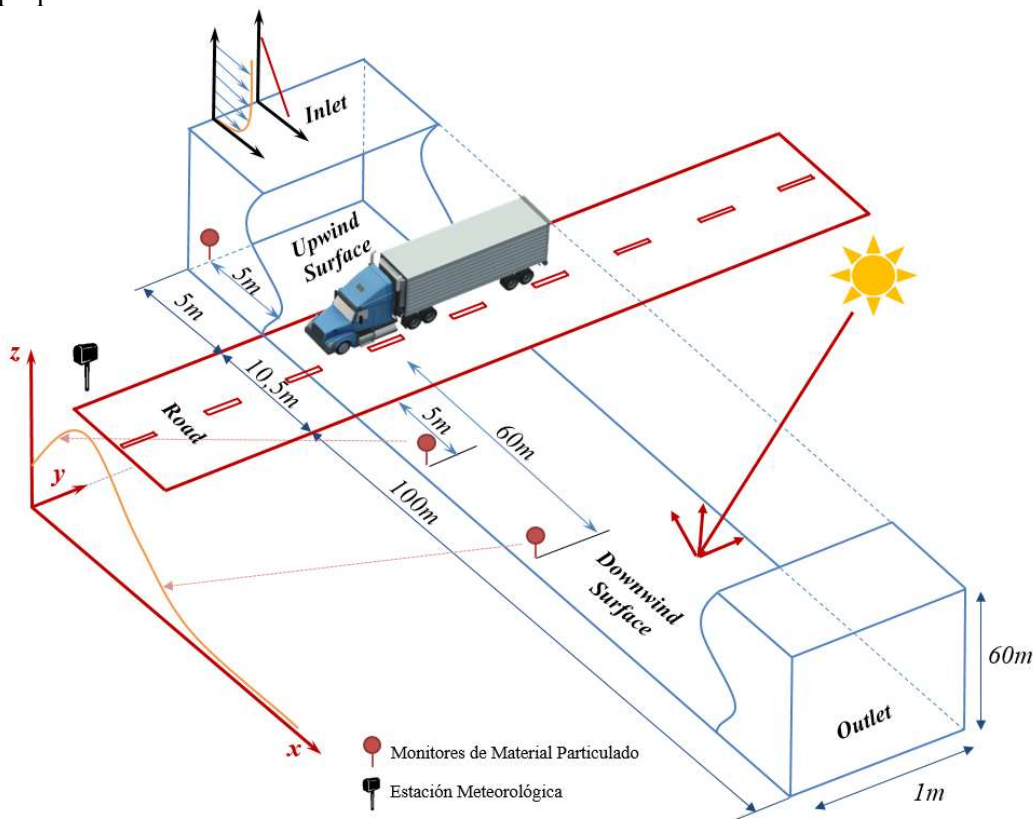


Figura 1. Consta de una carretera sin pavimentar, por la cual transitan vehículos la mayor parte del día en ambas direcciones. Los vehículos que transitan por dicha vía son principalmente de carga pesada. En dirección perpendicular a la vía se encuentra la dirección preferencial del viento, el cual presenta un perfil que cumple la condición de no deslizamiento en la superficie y en la parte más alta existe una velocidad constante ( $U_{\infty}$ ). El plano xy está dividido en tres secciones, todas con una

profundidad en y de 1 m. La primera sección, con una dimensión de 5 m en la dirección x, denominada “upwind” es la superficie vientos arriba, donde transita solamente el viento. En seguida se encuentra la superficie delimitada por la vía, con un ancho de vía de 10,5 m en la dirección x. Allí se produce una inyección de partículas en la dirección normal a la superficie bajo un flujo constante de 0.0105 kg/s de modo que se tenga un Flux de 1 g/m<sup>2</sup> s. Anexa a la carretera se orienta la tercera superficie, con una cobertura de 100 m en la dirección x y cuya denominación es “downwind”. Allí se llevará a cabo la deposición progresiva de partículas re-suspendidas de la carretera y arrastradas por la corriente de viento.

Las superficies que encierran el dominio computacional son en breve: la superficie denominada “inlet”, que es aquella donde ingresa la corriente de viento en dirección normal a la misma y bajo un perfil que será descrito más adelante con más detalle. La superficie de salida “outlet” donde escapará todo el viento y las partículas no depositadas en la superficie “downwind”. Existen dos superficies laterales que no tendrán interacción de masa ni calor con el dominio computacional, serán solo la frontera lateral y una superficie superior, de la cual procederá la radiación de acuerdo con los parámetros descritos en la sección “Condiciones de frontera”, descrita más adelante con mayor detalle.

Diversas han sido las contribuciones en torno al tema de estudio, pero pocas se han acercado a describir el fenómeno de la dispersión con participación de la transferencia de calor, y aún menos, estudios en los cuales se conjugue la transferencia de calor vía radiación. Esto enfoca directamente la necesidad de utilizar un modelo por medio de CFD que permita determinar y cuantificar el efecto de la radiación en la dispersión de contaminantes alrededor de vías.

Existen estudios en los cuales han desarrollado modelaciones que han validado con buen grado de correlación contra datos experimentales (Yuan, Ng, & Norford, 2014) algunos de ellos han medido los datos directamente con instrumentos especializados como por ejemplo (Huertas et al, 2012), cuyos estudios han demostrado que existe una fuerte dependencia de la dispersión de partículas con relación a los fenómenos turbulentos en especial en cercanías a la vía (Huertas & Prato, 2018). En el mismo estudio se demuestra que los modelos actuales han suprimido algunas variables relevantes para representar dichos comportamientos y con ello se sobreestima las concentraciones de contaminantes cercanas a la fuente de emisión. Otros estudios concluyen que bajo las condiciones urbanas actuales, los contaminantes atmosféricos del tráfico se concentran seriamente la parte inferior del flujo, asimismo consideran que si las actividades actuales de planificación y diseño no cambian, estas condiciones empeorarán con el futuro desarrollo urbano (Yuan et al., 2014). Teniendo en cuenta los efectos negativos de la contaminación del aire en la salud pública, las estrategias de mitigación son necesarias para aliviar este impacto. Es aquí donde el estudio que se avanza presenta su aporte a la ciencia y el desarrollo de herramientas que servirán para implementar acciones para un desarrollo como sociedad que vaya de la mano con el equilibrio del mundo y el desarrollo sustentable.

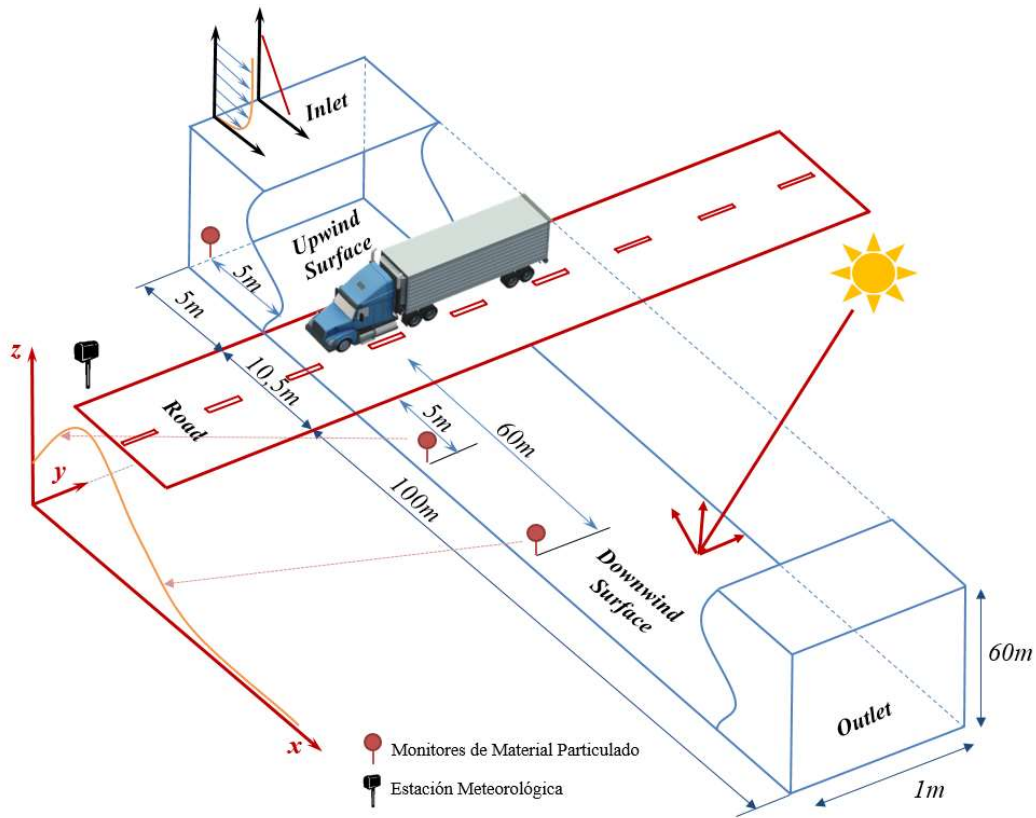


Figura 1. Dominio computacional utilizado para el estudio de la dispersión de partículas alrededor de vías por medio del uso de CFD.

Otros estudios demuestran que es necesario abarcar estudios enfocados en regiones sub-tropicales, donde a menudo no se consideran los estudios de escala microclima por medio de CFD. Adicional a ello indica que, entre todos los estudios de clima urbano, los estudios en regiones subtropicales (tropicales) constituyen menos del 20% y según su revisión, esta proporción es del 8% (15 de 183 estudios) (Toparlar et al., 2015). Es aquí donde nace la necesidad de profundizar un poco más en este espacio del conocimiento, donde la principal ventaja de los estudios de simulación en comparación con los estudios observacionales es la posibilidad de realizar análisis comparativos basados en diferentes escenarios.

Estudios en micro y meso clima son fundamentales según diversos autores consultados, por ejemplo, el autor (Toparlar, et al. 2016) presenta una revisión sistemática de diferentes estudios de microclima urbano por medio del uso de CFD, los cuales fueron publicados en revistas internacionales desde 1998 hasta finales de 2015. Se identificaron un total de 183 estudios que incluyen simulaciones en 3D y acoplan los campos de velocidad y temperatura. Dichos estudios se categorizaron en función de los tipos de áreas urbanas investigadas, reales o genéricas, y de la metodología seguida, además, estudios con y sin validación. De la mano, (Pieterse & Harms, 2013) indica que existe un efecto importante de la radiación, observando un fuerte calentamiento radiativo del suelo por el sol da como resultado la transferencia de calor al aire y la formación de la capa límite atmosférica (ABL por sus siglas en inglés) convectiva o inestable, con fuerzas de flotación que tienden a desestabilizar las parcelas de aire desplazado. Aquí se da una aproximación para lo que será el resultado de este estudio, puesto que como atributo adicional se tendrán en cuenta diversos fenómenos conjugados, tales como la dispersión de contaminantes y sus diferentes comportamientos en relación con la radiación y la humedad principalmente (sin dejar de lado los demás efectos estudiados en el pasado y también en el



presente estudio). Todas estas contribuciones permiten desarrollar un modelo que tenga en cuenta algunas características obviadas anteriormente, como la radiación, la estabilidad atmosférica, la humedad, entre otros.

Lo anterior es un punto de entrada para la presente investigación puesto que allí se hace notoria la necesidad que se tiene por profundizar temas como la humedad y la radiación, evocando entonces el área de oportunidad bajo la cual se enfoca el estudio actual. Lo anterior demuestra que existen consideraciones importantes que pueden ser explotadas y exploradas a profundidad, de modo que se produzca un aporte sustancial a la ciencia y en esencia, poder describir correctamente la dispersión de contaminantes atmosféricos alrededor de vías, bajo el efecto de diversos actores que pueden producir un cambio significativo en su comportamiento.

En cuanto a CFD, muchos autores han demostrado su potencial para resolver problemas de ingeniería de diversas ramas, sin dejar de lado el área de competencia actual, bajo la cual se busca representar los fenómenos que se involucran en la dispersión de contaminantes atmosféricos alrededor de vías y en especial la contribución de la radiación solar.

A lo largo de los últimos años, se han enfocado esfuerzos orientados a la resolución de problemas de flujo de partículas (sólidas y gaseosas), por medio de CFD, ganando experticia en diversas áreas de ingeniería, por ejemplo, algunos autores han desarrollado modelos que utilizan CFD acoplado con WRF y CMAQ para la resolución de sistemas físicos con y sin reacción química en los cuales se involucran sustancias principalmente en fase gaseosa (Kwak, Baik, Ryu, & Lee, 2015), esto brinda un sustento fuerte al trabajo, puesto que éste como otros investigadores han implementado modelos para solucionar problemas de embergadura similar. Por lo anterior, es posible asegurar que existe una confianza creada sobre éstos sistemas de solución de ecuaciones y de problemas físicos en general

Dentro de los estudios adelantados por los diferentes investigadores que tiene como foco la resolución de problemáticas similares a la que se quiere resolver en el presente documento (dispersión de partículas, contaminantes sólidos y gaseosos, transferencia de calor, confort térmico, estabilidades atmosféricas, entre otros), todos estos autores han aportado significativamente al tema de dispersión, en especial en zonas urbanas y esto sirve como punto de partida para atacar el problema de la dispersión alrededor de vías no pavimentadas. Por ejemplo, varios estudios concluyen que se puede mantener los perfiles de velocidad (Wang & Li, 2016) y temperatura (Pieterse & Harms, 2013) a lo largo del dominio computacional, y esto es consistente con la física del sistema, y debe cumplirse en el modelo actual.

El presente estudio busca principalmente presentar una metodología para comprender profundamente el fenómeno de dispersión de contaminantes atmosféricos en zonas aledañas a vías de tránsito vehicular, especialmente cuando existe una fuerte participación de la radiación solar. Con lo anterior se busca encontrar una relación entre la dispersión de partículas bajo un esquema sencillo (en ausencia de radiación) y la dispersión de partículas en una situación en la cual la radiación cumpla un papel fundamental; gracias a dicha relación se podría comprender el fenómeno de dispersión de contaminantes para diferentes épocas del año (primavera, verano, otoño e invierno) o para dispersión diurna vs dispersión nocturna, entre otras situaciones de interés particular. Estudios anteriores a este han demostrado un grado de correlación alto con datos experimentales, pero no se ha explorado la importancia que tiene sobre la dispersión el fenómeno ocasionado por la radiación, es decir, no se espera que la dispersión de contaminantes sea la misma para zonas de alta radiación, que para zonas de radiación baja o nula, asimismo, no se espera que la dispersión sea la misma para temporadas de invierno que para temporadas de verano, es allí donde se hace importante el estudio de la radiación en el modelo de dispersión de contaminantes atmosféricos.

## **2. Metodología**

En esta sección se explicará el modo de operación bajo el cual será desarrollado el presente estudio, asimismo la manera como se presentarán los resultados para una comprensión más profunda de los mismos al momento de ser analizados.

De la Figura 1, es posible observar las dimensiones del dominio computacional seleccionado. Ésta figura sirve para comprender la forma como se resuelve el caso base y los casos de estudio posteriores. El caso base resolverá el problema de la dispersión de contaminantes atmosféricos, teniendo en cuenta las contribuciones debidas a la turbulencia y al cambio del perfil de viento a la entrada del dominio computacional. Para cada caso de estudio con radiación, se implementarán cambios graduales sobre el caso base, permitiendo de esta manera, comparar directamente las distribuciones. Los cambios en su orden serán: 1. Inclusión de la radiación solar en el modelo. 2. Cambio de la velocidad de viento. 3. Cambio del perfil de temperatura en la vertical. 4. Cambio de la estabilidad atmosférica y 5. Cambio en la humedad relativa a la entrada de la fase continua. Con cada uno de los casos de estudio se evalúa el efecto que tiene cada una de las variables de estudio sobre la dispersión de la variable concentración.

Los dos casos (el caso base y el caso con radiación) serán post-procesados y comparados entre sí, con base en los mismos números adimensionales (hallados con la ayuda del teorema de Pi-Buckingham). de forma que las comparaciones entre las dispersiones obtenidas. Cada uno de los cambios (mencionados en el párrafo anterior) representa entonces un efecto a ser evaluado. Si existe un cambio en la dispersión de la concentración con respecto al caso base, esto indica que hay un efecto debido a la variación producida.

### 3. Descripción del modelo

En esta sección se describe la implementación del arreglo desarrollado el cual será resultado mediante el uso de CFD. En la Figura 1 se presenta el dominio computacional para el caso base y los casos de estudio con radiación. La emisión es un flux de partículas sobre la superficie “road” que ingresa normal a la superficie, dicha inyección de partículas ha sido configurada de manera tal que se distribuye como una función de Rosin Rammler (P.Aarne, 1980), dicha distribución representa la fracción másica de partículas de tamaño  $i$  que se distribuyen en un rango de diámetros en micras de  $0 < d < 30$ , ver ecuación 1, donde  $Y$  es la fracción acumulativa de material en peso menor que el tamaño de partícula  $x$ ,  $x_0$  es el tamaño de partícula característico y  $n$  es el parámetro de propagación de la función de distribución de tamaño de partícula.

$$Y = 1 - e^{\left(-\frac{x}{x_0}\right)^n} \quad (1)$$

Las partículas se dispersan en la dirección  $x$  desde su punto de emisión hasta que logran la sedimentación en la superficie vientos abajo (downwind). Las dimensiones totales del dominio computacional son 115,5 m en la dirección  $x$ , 1 m en la dirección  $y$ , y 60 m en la dirección  $z$ . está dividido en las superficies anteriormente mencionadas (upwind, road, downwind, inlet, outlet, lateral y top). El viento ingresa por la superficie inlet, con un perfil de velocidad definido, con un barrido comprendido entre 2,0 – 4,5 m/s con un intervalo de 0,5 m/s entre cada perfil de viento. Todo el material sale por la superficie “outlet”, exceptuando aquel que se deposita en la superficie “downwind”, en cuyo caso sólo será material particulado.

La radiación solar es emulada por medio del uso del modelo de radiación Direct Ordinates (D.O.), bajo tres esquemas de insolación: Extrema (Radiación solar directa de 1000 W/m<sup>2</sup> y difusa de 200 W/m<sup>2</sup>), Leve (Radiación solar directa de 1000 W/m<sup>2</sup> y difusa de 200 W/m<sup>2</sup>) y nula (Condición nocturna, insolación igual a cero).

Finalmente, la humedad será emulada por medio del modelo de especies, para el cual no se tiene en cuenta reacciones químicas.

### 3.1 Ecuaciones Fundamentales

Para resolver el problema directamente desde los fenómenos físicos que lo describen, se hacen uso de ecuaciones y modelos que gobiernan los principios fundamentales de la física. En general, las ecuaciones gobernantes se pueden expresar en forma integral o diferencial. Éstas ecuaciones se obtienen a partir de principios fundamentales como son la conservación de masa y energía y el balance de cantidad de movimiento. Cada ecuación diferencial proporciona información detallada de cada punto del dominio mientras que la ecuación integral indica lo que sucede en el volumen de control. Para el presente documento se presentarán las ecuaciones diferenciales de conservación las cuales serán resueltas para el caso particular, mediante la ayuda de CFD. Con base en el conocimiento de ingeniería presentados en la literatura por (Benjan, 2013), (Cengel, 2013), (Kays et al., 2008), es posible representar mediante ecuaciones, los parámetros y variables que conducen a situaciones físicas en las cuales el movimiento de fluidos y su interacción con demás entidades da como resultado la resolución del problema de interés, para el caso actual, la dispersión de contaminantes como una fase discreta inmersa en una fase continua

**Ecuación de Continuidad:** Esta ecuación representa el principio de conservación de la materia dentro del dominio computacional, y se representa mediante la ecuación (2) donde la divergencia del producto entre la densidad y el vector de velocidades debe ser igual a cero porque no existe acumulación de materia dentro del dominio computacional.

$$\nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \quad (2)$$

**Ecuaciones de Navier-Stokes:** Este conjunto de ecuaciones sustituye el tensor de esfuerzos viscosos para un fluido newtoniano en la ecuación de cantidad de movimiento y son válidas tanto para fluidos compresibles como incompresibles. En estado estacionario se escriben de la siguiente forma:

$$\rho(\vec{V} \cdot \nabla \vec{V}) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{V} + \rho \vec{g} \quad (3)$$

**Ecuación de Energía:** La ecuación diferencial de energía general, en estado estacionario y teniendo en cuenta solamente las contribuciones de la energía transportada por el fluido, el flujo neto de calor, y la razón de energía debida a fuentes externas, la ecuación queda expresada como:

$$\vec{V} \cdot \nabla \rho \left( \hat{u} + \frac{1}{2} V^2 \right) = -\nabla \cdot \vec{q}'' - \nabla \cdot (\rho \vec{V}) + \nabla \cdot \bar{\tau} \vec{V} + \rho \vec{g} \cdot \vec{V} \quad (4)$$

Donde específicamente el término de la izquierda, representa la energía transportada por el fluido a través de la superficie (energía interna y cinética por unidad de volumen), el primer término de la derecha representa el flujo neto de calor (por convección y radiación principalmente), el segundo y tercer términos de la derecha son la razón de trabajo debido a las fuerzas superficiales y el último término representa la razón de trabajo debido a las fuerzas de cuerpo.

**Modelo de turbulencia:** Para la resolución del presente caso puede hacerse uso de los diferentes modelos especializados para ello, desde modelos tipo RANS (Pieterse & Harms, 2013), (Wang & Li, 2016), (Kwak et al., 2015), hasta modelos tipo LES (Toparlar et al., 2016), inclusive, al tener una capacidad de cómputo superior, es posible llevar a cabo la resolución del problema por medio de

modelos tipo DNS. Para el caso bajo estudio, la geometría es sencilla, las condiciones de frontera seleccionadas son fáciles de resolver y el modelo es relativamente ligero y con una cantidad de nodos considerable, por lo anterior, se hace uso del modelo k-ε RNG ya que es ampliamente usado para la resolución de problemas de ingeniería y ha demostrado su versatilidad para la resolución de situaciones físicas como la que se plantea en el presente estudio; adicionalmente la comparación contra otros modelos de turbulencia habituales no arroja un resultado muy diferente (ver Figura 2). Por su sencillez, simplicidad y alta demanda en las investigaciones realizadas por diferentes actores de ésta rama de la ciencia, se selecciona éste modelo.

**Modelo de radiación:** Al incluir la contribución de los fenómenos de radiación solar en el presente estudio, se hace uso de la ecuación de radiación, la cual hace parte de la ecuación de energía (4) en el término de fuentes externas, la ecuación de radiación es entonces (ANSYS, 2016):

$$dI(\vec{r}, \vec{s}) + (a + \sigma_s)I(\vec{r}, \vec{s}) = an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s}, \vec{s}') d\Omega' \quad (5)$$

Donde ésta ecuación permite emular la transferencia de calor debida a la radiación que ingresa a un cuerpo proveniente de una posición ( $\vec{r}$ ) con una dirección ( $\vec{s}$ ). Participa en ella la intensidad de la radiación ( $I$ ) que se ve influenciada por los parámetros de absorción ( $a$ ) e índice de refracción ( $\sigma_s$ ) de las superficies, con referencia a una temperatura local ( $T$ ), una función de fase ( $\Phi$ ) y un ángulo sólido ( $\Omega'$ ) (ANSYS, 2016). Al utilizar el modelo de radiación DO (Discrete Ordinates), se resuelve la ecuación anterior en la cual existe un acoplamiento entre la ecuación de radiación, la ecuación de energía y la fase discreta.

$$\nabla \cdot I(\vec{s}) + (a + a_p + \sigma_p)I(\vec{r}, \vec{s}) = an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + E_p + \frac{\sigma_p}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s}, \vec{s}') d\Omega' \quad (6)$$

El acople del módulo de fase discreta y el módulo de radiación, permite combinar las contribuciones de emisión radiativa de superficie con el de partículas, dando lugar al coeficiente de emisión equivalente ( $E_p$ ). Por su parte existe también un acoplamiento en los coeficientes de dispersión, dando lugar al coeficiente de dispersión de partículas equivalente ( $\sigma_p$ ). El efecto de la radiación en la ecuación del balance de energía se obtiene mediante la integración sobre el volumen de control  $i$  obteniendo la siguiente expresión:

$$\vec{P}_i \vec{q}_i + \vec{r}_i = 0 \quad (7)$$

Haciendo el acoplamiento de la ecuación de radiación (5) con la ecuación del balance de energía (3), se obtiene la ecuación acoplada simplificada (6), donde  $\vec{P}_i$  representa un arreglo en forma matricial del balance de energía del sistema,  $\vec{q}_i$  hace referencia al vector de radiación solar con los diferentes vectores de irradiación ( $I_i^n$ ) y  $\vec{r}_i$  es al acoplamiento con el tensor de esfuerzos viscosos.

Con la ecuación de radiación acoplada a la ecuación de energía y a la fase discreta, es posible modelar un comportamiento más cercano de las partículas ante la interacción con los cambios externos debido a la presencia de la radiación y con ello determinar el efecto que tiene en su dispersión a lo largo del dominio computacional.

**Ecuación de transporte de especies:** Al incluir la humedad como parámetro fundamental de estudio, se requiere el uso de la ecuación de transporte de especies habilitada para el dominio computacional. Por medio de la cual se cumple conservación de especies y predice la fracción másica local para cada una de las especies involucradas en el dominio computacional (ANSYS, 2016).

$$\varphi = \left( \frac{m_{vap}}{m_{vap}^{sat}} \right)_T = \frac{P_{vap}}{P_{vap}^{sat}|_T} \quad (8)$$

**Balace de fuerzas de las partículas:** El software predice la trayectoria de la fase discreta integrando el balance de fuerzas en la partícula, que está escrito en un marco de referencia lagrangiano (ANSYS, 2016). Este balance de fuerza iguala la inercia de la partícula con las fuerzas que actúan sobre la partícula, y puede escribirse (para la dirección x en coordenadas cartesianas, en estado estacionario) de acuerdo con la ecuación (8), donde  $F_D(u - u_p)$  es la fuerza de arrastre de la partícula por unidad de masa,  $\rho$  es la densidad de la fase continua y  $\rho_p$  es la densidad de las partículas.

$$F_D(u - u_p) + \frac{g_z(\rho - \rho_p)}{\rho_p} \quad (9)$$

Fijadas las condiciones globales de resolución de modelos y ecuaciones gobernantes, se hace importante ahora la correcta especificación de las condiciones de frontera para resolver la ecuación de continuidad, combinada con las ecuaciones de Navier-Stokes y de energía acopada al módulo de radiación y fase discreta, asimismo con la contribución de los modelos de turbulencia, y de humedad, con el fin de representar la dispersión de las partículas como a lo largo del dominio computacional. Se seleccionan entonces las condiciones de frontera que permiten representar los fenómenos físicos gobernantes.

### 3.2 Post-Procesamiento de la información

Con el objetivo principal de representar no solo el fenómeno bajo estudio sino extrapolar a situaciones similares, problemáticas similares, configuraciones similares, entre otras características importantes para el avance científico, se tratan los datos obtenidos de forma tal que sean representados por cantidades adimensionales de acuerdo con el teorema de Pi-Buckingham.

En esencia, los números adimensionales que han sido obtenidos por análisis dimensional y que servirán para representar los fenómenos de transporte aquí descritos (concentración, velocidad, temperatura) son la distancia normalizada en x  $x^*$ , la velocidad normalizada  $u^*$ , la concentración normalizada  $C^*$ , la temperatura normalizada  $\theta$ . Los parámetros de normalización responden a condiciones de espaciales, de temperatura, y de flujo en esencia, cada una descrita a continuación:  $x_i$  es la distancia específica en la dirección x,  $x_b$  es la distancia desde la superficie de entrada de viento (inlet) hasta el borde de la vía,  $L$  es el ancho de la vía,  $u_i$  es la velocidad local en dirección x en la posición i,  $u_\infty$  es la velocidad fuera de la capa límite hidrodinámica,  $C_i$  es la concentración de las partículas en la posición i,  $E$  es la emisión superficial de partículas,  $T_s$  es la temperatura del suelo,  $T_i$  la temperatura en una posición i y  $T_\infty$  definida para este caso como la temperatura de la parte superior del dominio computacional.

$$x^* = \frac{x_i - x_b}{L} \quad (10) \quad u^* = \frac{u_i}{u_\infty} \quad (11) \quad C^* = \frac{C_i u_\infty}{E} \quad (12) \quad \theta = \frac{T_s - T_i}{T_s - T_\infty} \quad (13)$$

### 3.3 Condiciones de Frontera

**Partículas:** La modelación de las partículas se realiza bajo los mismos criterios del estudio previo desarrollado por (Huertas & Prato, 2018), en dicho estudio se tomó como partida, los datos experimentales provenientes del estudio de campo desarrollado por (J. I. Huertas, et al., 2012), posteriormente por (M. E. Huertas, Huertas, & Valencia, 2017) y luego por (Huertas & Prato, 2018). Dichos datos fueron procesados con el fin de encontrar los parámetros que se ajustan a la distribución de tamaño de partícula de Rosin-Rammler, ecuación (1).

El uso del modelo de fase discreta para determinar el movimiento y posición puntual de partículas, hace uso de un algoritmo de tipo estocástico, que permite predecir la posición instantánea de partículas y con ello se estima la concentración. El ingreso del material particulado al modelo se hace por la superficie “road” en forma de un flux de masa normal a la superficie.

**Carretera:** La emisión de contaminantes, compuesta principalmente por partículas inertes (Huertas et al, 2012), presentan una densidad constante de  $1730 \text{ kg/m}^3$ , es inyectada desde una superficie denominada “road” en la Figura 1, y consta de una emisión de tipo superficial, sujeta a una velocidad de salida normal a la superficie. Se fija entonces un flux de partículas en la inyección y la condición de frontera delimita la velocidad de salida de material. La base tomada es una emisión de  $1 \text{ g/m}^2\text{-s}$  de forma que sea una emisión unitaria por unidad de tiempo por unidad de área, así puede extenderse a diferentes emisiones futuras, medidas experimentalmente.

La condición de frontera es entonces una condición de velocidad a la entrada, bajo la cual se plantea que la carretera es una superficie que emite las partículas como una entrada de material al dominio computacional. Dicha entrada se configura con una velocidad media de las partículas de  $0.05 \text{ ms}^{-1}$ .

En referencia a la condición térmica de entrada de partículas, todas éstas ingresan al dominio a una temperatura de 300 K, con una emisividad interna de 0.93 (Mikron Instrument Company, 2014) (Fluke, 2007), la cual corresponde a partículas de cuarzo rugoso. Por su parte en la condición de frontera de la fase discreta se fija como reflexión para aquellas partículas que toquen la superficie.

**Superficies vientos arriba y vientos abajo de la carretera:** Existen dos superficies con la misma orientación que la carretera denominadas “upwind” y “downwind”, ambas en el plano xy a una altura de z igual a 0, que no presentan emisión alguna de partículas. Dichas superficies se encuentran compuestas por un material que emula las propiedades del pasto (rugosidad y coeficiente de transferencia de calor principalmente). Se simula como una superficie con condición de no deslizamiento, para la ecuación de momentum, una condición de radiación para la ecuación de energía y una superficie opaca con un indicador de fracción difusa del 50%. En cuanto a las partículas, estas superficies tendrán la capacidad de atrapar aquellas que entren en contacto con sus límites. La condición de frontera térmica y radiativa supone un valor para el cual existe una radiación como cuerpo gris, con una emisividad de 0.95 correspondiente a un suelo característico conformado por cuarzo, calcita, feldespato y algunos silicatos (Sobrino et al., 2009). En el suelo la radiación que toca la superficie se refleja de manera difusa en un 50% y la condición de frontera de la fase discreta permite que las partículas que lleguen a la superficie vientos arriba y vientos debajo de la vía se depositen.

**Paredes laterales:** Debido a la configuración del dominio, la condición de frontera más apropiada para representar las dos paredes laterales al flujo, consiste en una condición periódica, dicha condición

fue implementada también en el estudio que precede al actual, desarrollado por (Huertas & Prato, 2018). Ésta condición permite que no existe intercambio de materia ni energía sobre las superficies a las cuales se les adjudique dicha condición. Las condiciones de contorno periódicas se usan cuando la geometría física de interés y el patrón esperado de la solución térmica y de flujo tienen una naturaleza periódica que se repite (ANSYS, 2016).

**Superficie Superior:** Debido a que se quiere emular una condición en la cual se tenga una condición de radiación por la parte superior, se selecciona una pared para ello. Esta superficie tendrá las propiedades del aire y se modelará como una superficie semicristalina, de modo que la radiación incidente proveniente del modelo DO, la atraviese completamente sin pérdida alguna de energía. La altura máxima se fija para la condición en la cual no exista escape alguno de partículas por dicha cara y a lo largo del dominio. Debido a que es una pared ficticia no debe haber ningún tipo de esfuerzo cortante sobre la misma, por lo que se debe definir un valor de esfuerzo cortante de cero, de modo que no existe la condición de no deslizamiento en esta superficie y así el viento sigue su camino sin ninguna interacción que afecte su perfil. Finalmente, si por cualquier causa, las partículas de material particulado re-suspendido llegan a alcanzar las alturas determinadas por el dominio computacional, éstas serán reflejadas en esta cara del dominio, sin embargo, como se mencionó anteriormente, el dominio cuenta con una altura tal, que las partículas no alcanzan tal altura.

**Entrada:** Para emular las condiciones de entrada de viento, se han desarrollado dos perfiles desarrollados a la entrada del mismo, uno para la temperatura, de acuerdo con las diferentes estabilidades atmosféricas y el otro para la velocidad del viento. El perfil de temperatura responde a una función lineal con un cambio en grados Celsius por km. Por su parte, la ecuación de momentum definida desde la teoría de la capa límite para flujo externo en una superficie libre, donde no existe transpiración, el flujo es completamente incompresible y al ser superficie plana, la curvatura es cero (Kays et al., 2008), se expresa como:

$$\frac{\tau_0}{\rho_\infty} = \frac{d}{dx}(U_\infty^2 \delta_2) + \delta_1 U_\infty \frac{dU_\infty}{dx} \quad (14)$$

Siendo  $\tau_0$  el esfuerzo cortante sobre la superficie,  $\delta_1$  el espesor de desplazamiento y  $\delta_2$  el espesor de cantidad de movimiento, que responden a la teoría de la capa límite.

El perfil de velocidades, de acuerdo con la misma ley de la capa límite se expresa como (Probst & Cárdenas, 2010):

$$v(z) = \frac{u^*}{\kappa} \left\{ \ln\left(\frac{z}{z_0}\right) - \Psi_M\left(\frac{z}{L}\right) \right\} \quad (15)$$

Donde  $u$  es la velocidad local del viento a la altura  $z$ ,  $\kappa$  es la constante universal de Von Kármán, con un valor usualmente tomado como 0.4 (Probst & Cárdenas, 2010),  $z_0$  se toma con un valor de 0.3 de acuerdo con las recomendaciones tomadas para el estudio de (Huertas & Prato, 2018) y  $\Psi_M(z/L)$  contribución determinada por Monin-Obukhov. Para efectos prácticos, se supone como cero la contribución de Monin-Obukhov y, por el contrario, se permite que el software desarrolle el cálculo preciso para cada una de las estabilidades atmosféricas, de modo que la ecuación queda expresada de manera sencilla para la estabilidad neutral como:

$$v(z) = \frac{u^*}{\kappa} \ln\left(\frac{z}{z_0}\right) \quad (16)$$

Por su parte, el perfil de temperatura adopta una configuración de tipo lineal, la cual se fija de acuerdo con una estabilidad atmosférica determinada. En la siguiente tabla se presentan los casos bajo estudio:

Tabla 2 Condiciones meteorológicas que definen las clases de estabilidad de Pasquill.

Velocidad de viento (m/s)	Insolación durante el día			Condiciones Nocturnas	
	Fuerte	Moderada	Suave	Nublado tenue	Nublado
< 2	A	A – B	B	E	F
[2-3)	A – B	B	C	E	F
[3-4)	B	B – C	C	D	E
[4-5)	C	C – D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

A extremadamente inestable, B moderadamente inestable, C levemente inestable, D neutral, E levemente estable, F moderadamente estable. Fuente: (NOAA, 2018)

En cuanto a la condición de frontera para la radiación, se exhibe una emisividad igual a cero, puesto que esta superficie está conformada por una región de aire donde la radiación atraviesa y debe llegar hasta la superficie de la tierra, aquí es importante aclarar que el efecto del albedo de la tierra es considerado por el modelo de radiación, para el cual se ingresa una irradiación directa de 1000 W/m<sup>2</sup> y difusa de 200 W/m<sup>2</sup>.

Por su parte, la condición determinada para la fase discreta es una condición de escape de partículas. Naturalmente ninguna partícula debería escapar por la condición de frontera de la entrada, ni la superficie superior ni las superficies laterales.

**Outlet:** Para la superficie de salida se utiliza la condición de frontera de presión a la salida, para la cual se encuentra a una presión manométrica de 0 atm. Térmicamente se fija una condición de temperatura de contraflujo de 300 K, es decir, cualquier partícula que retorne al dominio computacional después de haber salido por dicha cara, tomará un valor de 300 K (ANSYS, 2016), esto no indica que la temperatura de la superficie sea de 300 K, sino que aquellas partículas que pudieren presentar una condición de reingreso al dominio computacional después de haber salido de éste ingresan con ese valor de temperatura. La emisividad de esta cara es igual a cero puesto que se encuentra en la misma condición física que la cara de entrada; por último, en referencia a la fase discreta, cualquier partícula que llegue a dicha superficie saldrá del dominio computacional.

### 3.4 Configuración del modelo

Se hicieron corridas para 6 velocidades de viento diferentes 2,0 – 4,5 m/s en intervalos de 0,5 m/s, con 6 humedades relativas diferentes 0, 20, 40, 60, 80 y 100% y 6 condiciones de estabilidad atmosférica.

Se especifica un solver basado en presión debido a que se trata de un problema de flujo incompresible, en estado estacionario y acción de gravedad en z.



### 3.4.1 Modelo de turbulencia

Para el presente estudio, se seleccionó el modelo de turbulencia  $k-\varepsilon$ , el cual emula la energía cinética turbulenta  $k$ , y la disipación viscosa turbulenta  $\varepsilon$ , para un sistema en tres dimensiones, de flujo incompresible. Se selecciona la versión RNG de dicho modelo debido a que, en general produce mejores resultados en predicción de flujos alrededor de edificaciones, además que predice con gran precisión el campo de flujos para calles rodeadas completamente de edificios, como lo reporta (Ai & Mak, 2017) en su investigación, otros autores reportan que dicho modelo, combinado con la función de pared estándar es capaz reproducir una tasa de flujo de aire cercana a los datos medidos experimentalmente (Luo & Li, 2011); por otro lado, (Cui, Li, & Tao, 2016) reporta en su investigación, que el modelo  $k-\varepsilon$  RNG obtiene resultados más acertados en cuanto a la estimación de la temperatura. Adicionalmente es importante mencionar que el modelo  $k-\varepsilon$  RNG permite calcular la generación de energía cinética turbulenta debida a la buoyancia y ofrece predicciones mejoradas para el calor de la pared y la transferencia de masa (ANSYS, 2016). Estas características son deseadas para el estudio que se quiere realizar en el presente trabajo, así pues, se optará por utilizar el modelo recomendado por los autores mencionados.

Por otro lado, al realizar una serie de corridas para diferentes modelos de turbulencia, en las cuales se tiene en cuenta la participación de los modelos de radiación. Allí se observan diferencias significativas, por ejemplo, los modelos  $k-\omega$  exponen valores de concentración en esencia menores que los modelos  $k-\varepsilon$  y el Reynolds Stress. Por su parte el Reynolds Stress requiere mucho tiempo de computación y para el caso descrito se obtiene aún algunas diferencias importantes de acuerdo con la tendencia natural de los otros modelos de turbulencia. Y como punto principal, los modelos  $k-\varepsilon$  presentan valores muy similares entre sí.

### 3.4.2 Modelo de radiación

Para el presente estudio, se seleccionó el modelo DO (Discrete Ordinates) para la implementación de la radiación solar en el estudio realizado. En principio, éste modelo es seleccionado debido a las bondades que ofrece para el presente estudio, algunas de ellas, explícitamente explicadas por el proveedor del software (ANSYS, 2016) indican que el modelo DO permite la simulación de la reflexión difusa y especular, calcula el intercambio de calor entre gas y partículas, permite modelar superficies semicristalinas, permite la simulación de la radiación no gris usando un modelo de banda gris y toma en cuenta la dispersión de la radiación debida a la presencia de las partículas de la fase discreta.

Para la configuración de modelo se mantienen los parámetros relacionados con la discretización angular y el modelo de cuerpo gris, de acuerdo con sus valores por defecto, mientras que para la carga solar se hace uso del modelo “DO Irradiation”, en el cual se cargaron los datos geográficos de la zona de interés de acuerdo con los resultados experimentales utilizados para corroborar el modelo en el estudio adelantado por (Huertas & Prato, 2018). El terreno consiste en una carretera sin pavimentar de tránsito de vehículos de carga pesada principalmente, con unas coordenadas de  $3^{\circ}50'15.3''$  N,  $71^{\circ}52'04.9''$  W, para la cual se llevaron a cabo la toma de datos de una campaña de medición llevada a cabo por (J. I. Huertas et al., 2012) durante los meses de marzo y abril del año 2009. Se fijan los parámetros de radiación como  $1000 \text{ Wm}^{-2}$ , para la radiación sola directa y  $200 \text{ Wm}^{-2}$  para la radiación solar difusa, siendo éstos representativos para una insolación fuerte, basados en la irradiación solar terrestre reportada como  $1373 \text{ Wm}^{-2}$  (Cengel, 2013) llamada también constante solar.

### 3.4.3 Módulo de especies

Con el fin de incluir la humedad en el estudio que se lleva a cabo, se hace necesario habilitar el módulo de especies, para el cual solamente se tendrá en cuenta el transporte, en el presente estudio no se tendrán en cuenta reacciones ni interacciones químicas. El material de mezcla estará compuesto por aire y agua, de modo que cuando se realicen simulaciones con humedad, el material utilizado en las condiciones de celda deberá ser cambiado de aire (fluido) a mixture-template (mezcla), de modo que participen las moléculas de aire en la fase continua.

#### **3.4.4 Módulo de fase discreta**

El módulo de fase discreta se configura de tal forma que se permita la interacción entre la fase continua y la fase discreta. Configurando por defecto un número máximo de pasos de 50.000, y permitiendo la interacción de radiación y partículas. En se configura la inyección de material particulado, compuesto por cuarzo y el cual se ajusta a una distribución de tamaño de partícula de Rosin-Rammler. Esta inyección de material particulado ingresa al dominio computacional con una velocidad definida en una dirección normal a la carretera y entra en contacto con la corriente de aire que ingresa por la cara denominada “entrada”.

#### **3.4.5 Esquema del método de solución**

Se configura un esquema de solución simple de segundo orden para todas las variables y disponiendo de unos factores de relajación de acuerdo a las recomendaciones por defecto excepto para la fase discreta en la cual se dispone un factor de relajación igual a cero, debido a que la convergencia de los casos se comporta de manera considerablemente inestable cuando el factor de relajación de la fase discreta se acerca a uno. Finalmente se determina la convergencia del caso cuando los residuales de cada una de las variables alcancen un valor igual o menor a  $1e-5$ .

### **4. Resultados**

#### **4.1 Análisis de independencia de malla**

Con el dominio computacional seleccionado y en virtud de ser obtener un buen mallado, se lleva a cabo un ejercicio de independencia de malla, bajo el cual se selecciona la malla más precisa para calcular la dispersión de contaminantes y sus efectos ante estímulos externos como la radiación y la humedad. Se realiza entonces un ejercicio de fabricación de mallas en donde se varía el número de elementos manteniendo fijas las propiedades del mallado tanto en 2D como en 3D y con ello determinar cuál malla sería la más apta para el desarrollo de las simulaciones. El mallado en 2D consiste en el mallado de las superficies que componen el suelo, superficie vientos arriba, la carretera y superficie vientos abajo, dicho mallado utiliza elementos cuadrados con un tamaño de lado ( $l$ ) variable para cada malla. Durante el desarrollo de las mallas y con el fin de obtener una calidad superior, el FB (Fractional Bias) fue ajustado en 1,0 con una configuración de tipo lineal, de modo que todos los elementos tengan la misma altura.

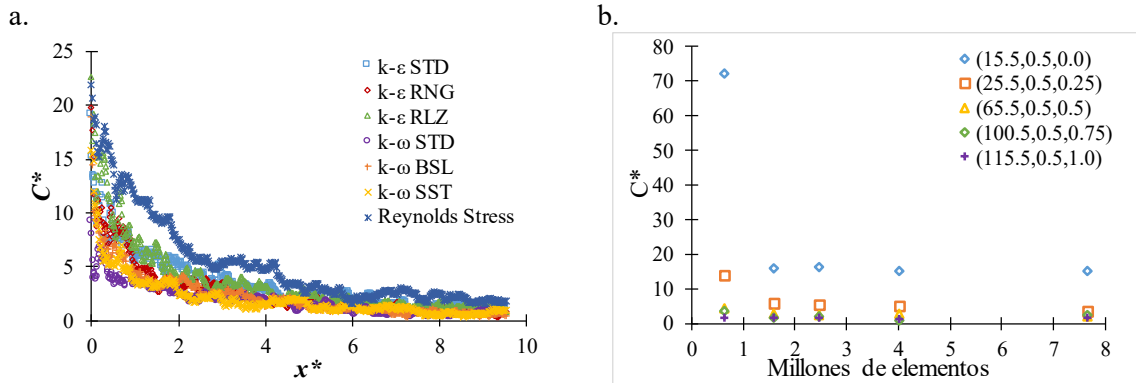


Figura 2. a. Resultados del perfil horizontal de concentración a nivel suelo para diferentes modelos de turbulencia, b. Análisis de independencia de malla.

Las mallas propuestas anteriormente fueron configuradas individualmente y ejecutadas para un cálculo sencillo donde se involucran los fenómenos de transferencia de calor, todas ellas corrieron exitosamente, allí se observa que en esencia la malla M\_01 se aleja totalmente del comportamiento obtenido para el otro grupo de mallas, así pues, ésta no será la seleccionada para el análisis que se pretende realizar. Para la selección de la malla que servirá para hacer el estudio de transferencia de calor por radiación, se debe cumplir que el valor de concentración, velocidad y temperatura de una malla sea menor al 5% del valor obtenido para una malla con mayor número de elementos. De acuerdo con lo anterior, y al observar la Figura 2

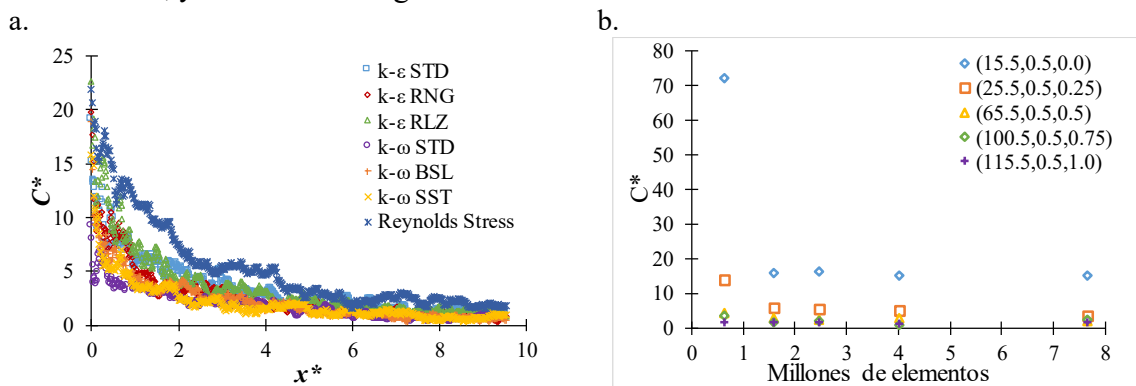


Figura 2b, es posible determinar que la malla seleccionada es la malla M\_02, con 1.591.688 elementos, puesto que esta reproduce precisamente los resultados con diferencias porcentuales relativas menores al 5% en todas las variables de estudio.

## 4.2 Casos de estudios

Se diseñaron rigurosamente distintos casos de estudio para los cuales quería verse un efecto ante una variable determinada, ya sea velocidad, temperatura, humedad, radiación, entre otras. En primera instancia se realizó la simulación del caso base, el cual reproduce la dispersión de partículas que son re-suspendidas de la carretera debido al paso de vehículos principalmente de carga pesada. Estos contaminantes son arrastrados por las corrientes de viento y poco a poco se sedimentan por gravedad en un punto determinado de la superficie vientos abajo.

Para realizar las comparaciones entre el caso base y los casos de estudio se toma como referencia 2 líneas con dirección en x, el primero de ellos a nivel superficie ( $z = 0$  m) y el segundo de ellos a una altura de 2 metros sobre la superficie; y dos líneas en dirección z, la primera al borde de la vía ( $x^* = 0$ , que es lo mismo que  $x = 15,5$  m) y una segunda línea en la vertical a la salida del dominio

computacional ( $x^* = 9,5$  o  $x = 115,5$  m). En la Figura 3 se presenta la dispersión de partículas en la horizontal (a y b) y en la vertical (c y d).

La Figura 3a presenta un tendencia logarítmica decreciente para las dos alturas, teniendo un  $C^*$  máximo de 13, el cual se presenta en el borde de la vía como es esperado, pues es el punto de mayor concentración de contaminantes suspendidos. A medida que las partículas se alejan de la fuente de emisión progresivamente disminuyen su concentración, esto es porque poco a poco se van depositando e la superficie y son menos las partículas que prevalecen suspendidas a grandes distancias. La forma del perfil prevalece, a medida que se aumenta la altura del plano de medición, con la salvedad que a mayores alturas las concentraciones van decreciendo como se observa entre la parte a y b de la Figura 3. Esto es debido a que la mayor cantidad de las partículas permanecen cercanas a la superficie. Los perfiles de concentración colapsan sobre un solo perfil, gracias al manejo de datos con ayuda de cantidades adimensionales, como se propone en el presente estudio. El uso de cantidades adimensionales garantiza que diversos casos de estudio puedan ser representados por medio de una sola curva en una gráfica, siempre y cuando los números adicionales utilizados configuren los diferentes efectos que quieren ser estudiados, como por ejemplo el cambio de velocidad de viento, el cambio de la temperatura del ambiente, entre otros.

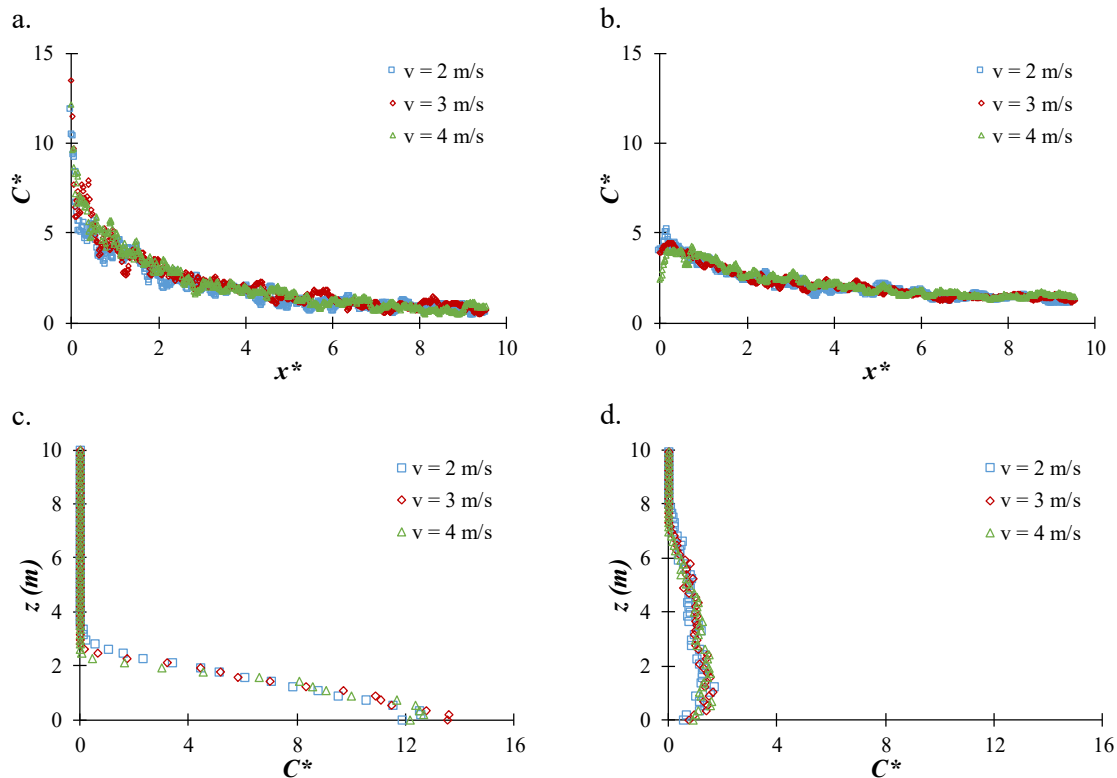


Figura 3. Resultados del perfil horizontal de concentración a nivel suelo (a) y a 2 m de altura (b) y verticales al borde de la vía (c) y a la salida del dominio computacional (d) para diferentes velocidades de viento y ausencia del módulo de transferencia de calor.

Las figuras c y d corresponden a los perfiles verticales de concentración (las dos líneas verticales explicadas anteriormente), y en estos se observa que cerca de la vía (figura c), la concentración de las partículas alcanza cierta altura (una media de 2-3 metros donde se comienza a notar los menores niveles de concentración) y que la concentración es mayor cerca de la superficie, la forma del perfil tiende a ser una línea recta, es decir que, en la vertical, la concentración de contaminantes es directamente proporcional a la altura que alcanzan las partículas. Por su parte, la figura d presenta el

perfil vertical de concentración a la salida del dominio computacional y para este caso la forma del perfil se asemeja a una S. esto implica que hay un punto máximo de concentración de partículas que no es la el suelo sino una altura cercana a 1,8 m de altura sobre la superficie. Esto se hace importante debido a que prácticamente está cerca a la altura del rostro de una persona promedio.

La velocidad del viento a la entrada del dominio ha sido establecida por medio de un perfil desarrollado hidrodinámicamente, de modo que se garantice que no existen cambios de gradientes de velocidad excepto cuando existe una perturbación. En la Figura 4 se observa los perfiles de velocidad de viento en la vertical en un punto al borde de la vía (a) y a la salida del dominio computacional (b). En general los perfiles muestran una forma logarítmica creciente en zonas cercanas a la superficie y cuando se alcanza el valor de velocidad libre, éste se mantiene constante.

Se observa en la Figura 4a, que en el momento en el que la corriente de viento (en dirección x) entra en contacto con la inyección de partículas (que entra en dirección z), se produce una leve aceleración y, en zonas cercanas al suelo, las partículas se aceleran un poco. Se observa en la Figura 9c cómo los vectores de velocidad cambian levemente su dirección (normalmente en x) a una dirección con componentes en z, y en la Figura 4a se aprecia que, ante una menor velocidad de viento, mayor es la aceleración observada en el borde de la vía y que a medida que se aleja de la misma los perfiles se normalizan poco a poco en una misma curva (ver Figura 4b).

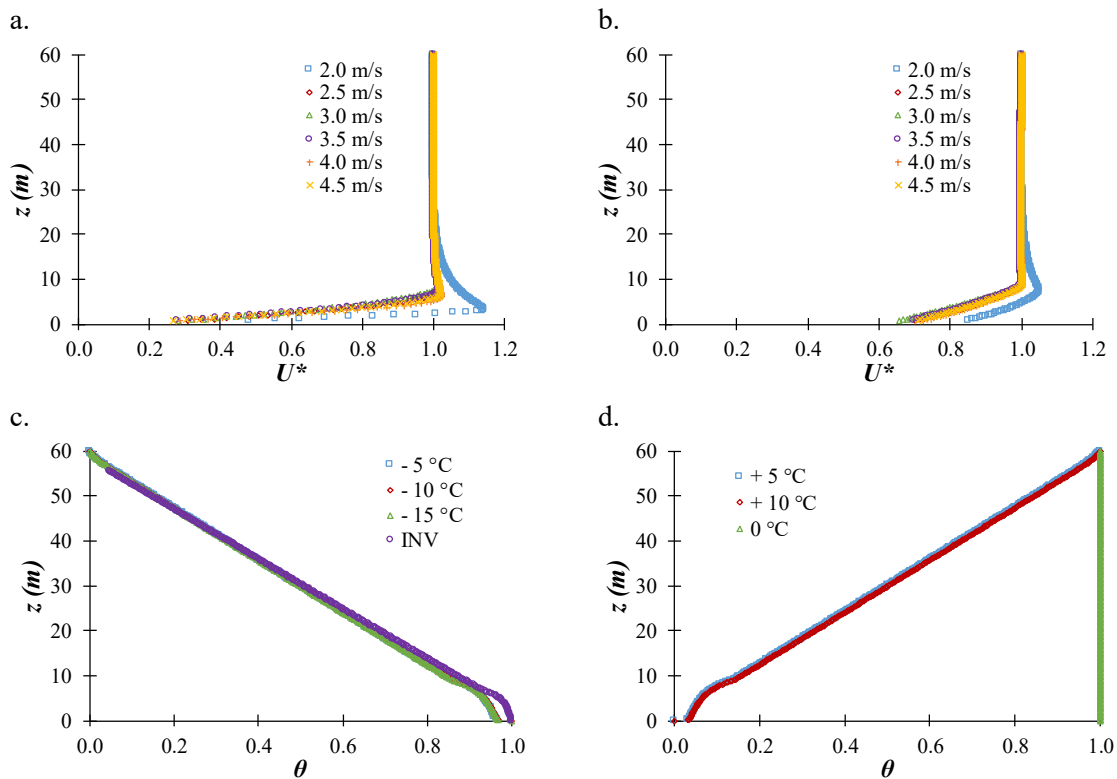


Figura 4. Resultados del perfil vertical de velocidad al borde de la vía (a) y en la salida del dominio computacional (b) y del perfil vertical temperatura a la salida del dominio (c) Perfiles negativos (d) Perfiles positivos y neutral.

El perfil de temperatura que gobierna en el dominio computacional se presenta en la Figura 4c para el caso de perfiles negativos y la Figura 4d para el caso de perfiles positivos. Cabe aclarar que los perfiles de temperatura a la entrada presentan una forma linealizada donde la temperatura de la superficie siempre es 300 K, de acuerdo con la condición de frontera de la superficie anteriormente descrita y se diferencian entre sí por pendientes positivas y negativas dentro del espectro: -30, -20, -

10, 0, 10, 20, 30 es INV medidas en K/km de altura, éste último presenta una pendiente positiva con valor de 10 hasta alcanzar una altura de dos metros y en adelante presenta un perfil de -10 hasta alcanzar la altura máxima delimitada por el dominio computacional.

Las partículas, al estar expuestas a la radiación, absorben una parte de dicha radiación de manera que se genera un cambio en la temperatura de las mismas a lo largo del dominio computacional (ver Figura 5), éste efecto se mencionó anteriormente desde la descripción de las ecuaciones, pero en esta parte se hace importante ya que un cambio en la temperatura de las partículas debería tener un efecto en la dispersión. Se observa que la temperatura de las partículas para una distancia determinada en  $x$  (a) y en  $z$  (b) no tienen una temperatura uniforme, esto indica que existen leves cambios de temperatura en la dirección  $y$ . Esto implica que es importante visualizarlo tener simulaciones en 3 dimensiones como en el caso actual.

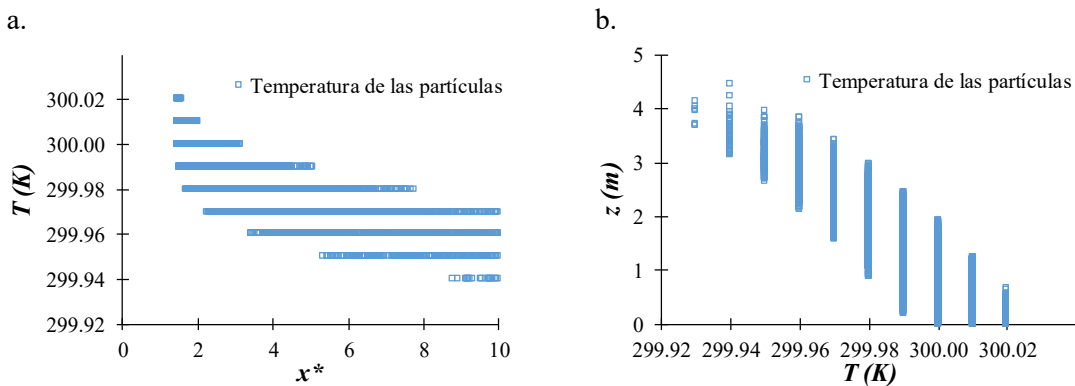


Figura 5. Cambio de la temperatura de las partículas debido al efecto de la radiación incidente. (a) Temperatura vs. distancia en dirección del viento (b) Temperatura de las partículas vs. altura.

Los efectos debidos a la turbulencia se representan mediante las curvas de la energía cinética turbulenta ( $k$ ) y la disipación viscosa turbulenta ( $\varepsilon$ ). En la Figura 6, se presentan los perfiles obtenidos por dichas variables. Se observa cómo la energía cinética turbulenta presenta un pico cuando la fase discreta entra en contacto con la fase continua, y se va disipando poco a poco hasta la salida del dominio computacional, donde vuelve a acercarse a cero, no se hace completamente cero puesto que aún existen un gran rango de partículas que aún no se han depositado totalmente sobre la superficie, sin embargo, la tendencia indica que así será. Por su parte la disipación viscosa presenta un comportamiento similar, pero ésta decae mucho más rápido, lo que implica que los fenómenos viscosos tienen menor fuerza que los fenómenos inerciales.

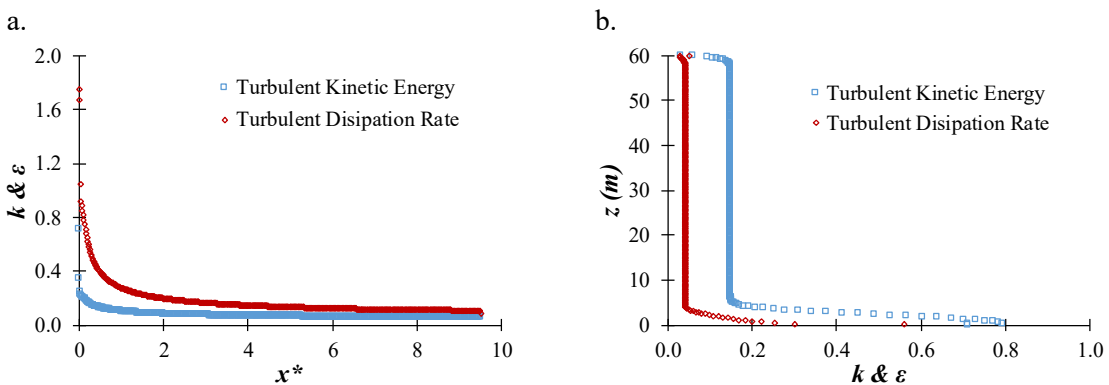


Figura 6. Resultados de la energía cinética turbulenta y la disipación viscosa turbulenta en la coordenada de dirección del viento a 0 m de altura (a) y en la vertical en el borde de la vía (b).

En las Figura 7 y Figura 8, se presentan los resultados obtenidos para tres casos en los cuales se busca determinar un efecto importante sobre la dispersión debido a la transferencia de calor. En la Figura 7 se evalúan tres casos en los cuales se comparan directamente la inclusión de un fenómeno de transporte, el primer caso es el caso base para una velocidad de viento de 4 m/s. El segundo caso representa las mismas condiciones, con la excepción que aquí se habilita la ecuación de energía, de modo que se permite la participación de la transferencia de calor por convección. Para este caso se fija una temperatura constante para todo el dominio computacional igual a 300 K. El tercer caso se configura igual que el caso número 2 y adicionalmente se habilita el módulo de radiación implementando el modelo DO con el fin de tener en cuenta los efectos de la radiación en el cálculo.

Entre el caso 1 y el caso 2 descritos anteriormente las diferencias son mínimas, de modos que puede concluirse que el caso base trabaja un caso de condición atmosférica neutral bajo una temperatura aproximada de 300 K. Por su parte, el caso 3 presenta una diferencia importante en los perfiles de concentración, tanto para los perfiles horizontales como para los verticales, especialmente en zonas cercanas a la vía., se observa por ejemplo que el  $C^*$  máximo asciende hasta un valor cercano a 20 (en el caso base el máximo era de 13), esto en el borde de la vía a nivel superficie, por ende, se entiende que las partículas se encuentran mayormente concentradas cuando la radiación incide en el dominio computacional. Este efecto va de la mano con los cambios de temperatura que sufren las partículas que están presentes en todo el dominio, y evidencia un fenómeno de calentamiento y re-dispersión de las partículas en el dominio computacional. En general las partículas se concentran más cerca a la vía y tienen una menor concentración a medida que la distancia aumenta, de modo que, las áreas bajo las curvas permanezcan constantes de acuerdo con el balance de masa.

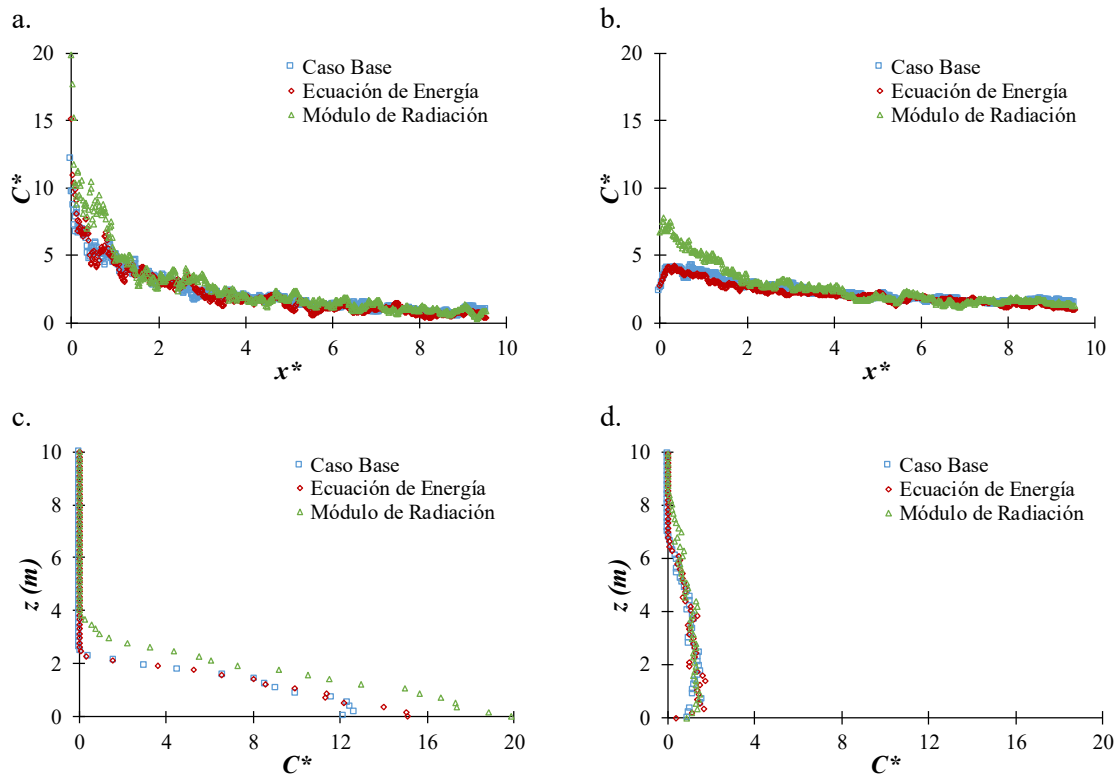


Figura 7. Resultados del perfil horizontal de concentración a nivel suelo (a) y a 2 m de altura (b) y en la vertical al borde de la vía (c) y a la salida del dominio computacional (d) para el caso base, un caso con el módulo de energía activo y el caso con módulo de radiación activo.

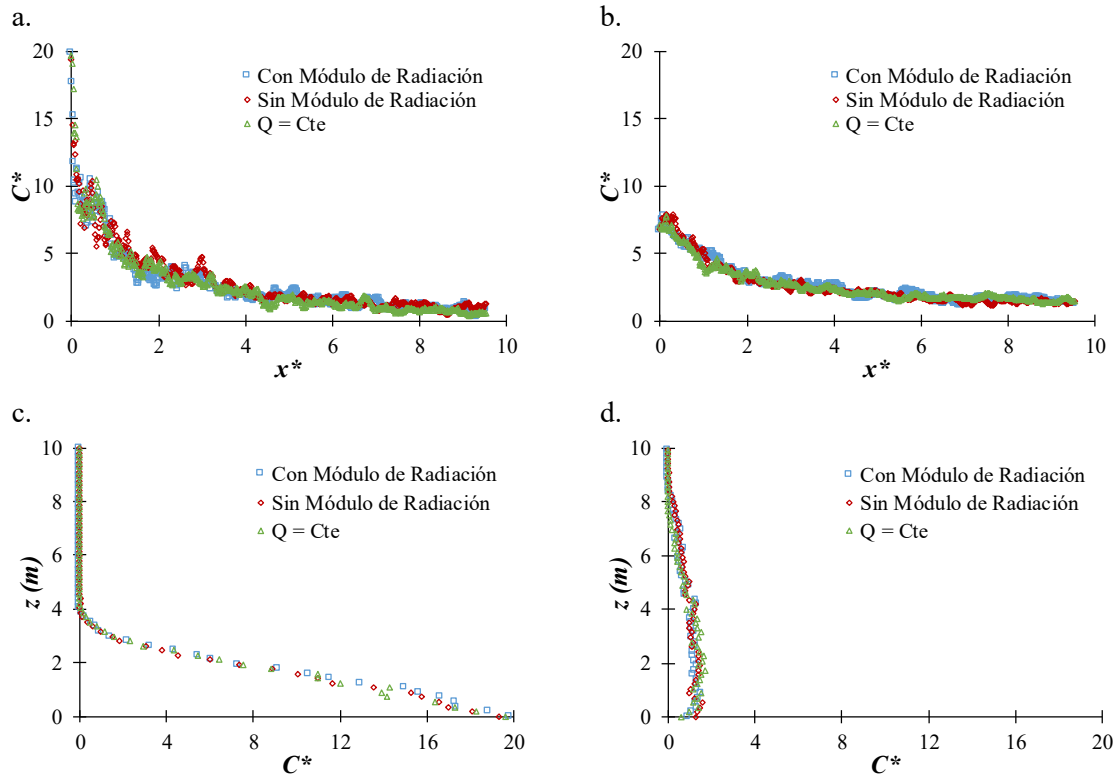


Figura 8. Resultados del perfil horizontal de concentración a nivel suelo (a) y a 2 m de altura (b) y perfiles verticales de concentración al borde de la vía (c) y a la salida del dominio computacional (d) para un caso con el módulo de radiación activo, uno sin el módulo de radiación activo y otro en el cual se fija un Flux de calor constante.

La concentración de partículas es mayor en la vertical en las cercanías a la fuente de emisión cuando existe una condición de radiación (para este caso una radiación extrema), sin embargo, a medida que se gana distancia en  $x$  los perfiles son similares entre el caso base y el caso con radiación. La forma del perfil en  $S$  se mantiene, sin embargo, existen pequeñas diferencias en la dispersión.

En esencia las partículas presentan un mayor valor de concentración adimensional para el caso en el cual existe radiación, sin embargo, al evaluar los diferentes medios para simular la radiación (ver Figura 8), no se notan cambios cuantiosos en la dispersión, no obstante, de acuerdo con las premisas presentadas anteriormente para el modelo D.O. se justifica el uso de dicho modelo debido a la versatilidad que presenta para el presente modelo y futuros modelos que quieran extender su cálculo basándose en un esquema similar al presentado en el presente artículo.

En la Figura 9, se observan algunos contornos de importancia para el entendimiento de los resultados que se presentarán más adelante. Lo primero es llamar la atención en el perfil de temperatura (imágenes a y b), allí se observa que, para todo el dominio computacional, la temperatura es prácticamente invariable en la vertical y en la dirección del flujo normal del viento. El perfil de temperatura en su totalidad permanece constante. En la Figura 9c se observan los vectores de velocidad trazados en el borde de la vía, se aprecia en la parte inferior la suma vectorial que permite la aceleración de las partículas como se observa con mayor énfasis en la Figura 4a y b. Finalmente, el contorno de la radiación incidente en el dominio computacional se presenta en la Figura 9d. se observa un patrón que emula un gradiente simétrico en virtud de las condiciones de frontera establecidas.



Continuando, ahora se plantea un escenario para el cual se tiene una estabilidad atmosférica de tipo adiabático seco, allí se permite explorar las diferentes velocidades de viento que fueron objeto de estudio, ver Figura 10. En general el cambio de velocidad de viento hace que la dispersión sea mayor (a velocidades mayores) en las zonas aledañas a la vía, mientras que se observa un colapsamiento de todas las curvas a medida que se aleja de la fuente de emisión. En cuanto a los perfiles verticales, el número adimensional seleccionado no permite que exista un colapsamiento de todas las curvas como se quería desde el planteamiento inicial, sin embargo, es fácil apreciar que conservan una forma de perfil muy similar, con diferencias únicas en la concentración máxima observada a nivel superficie.

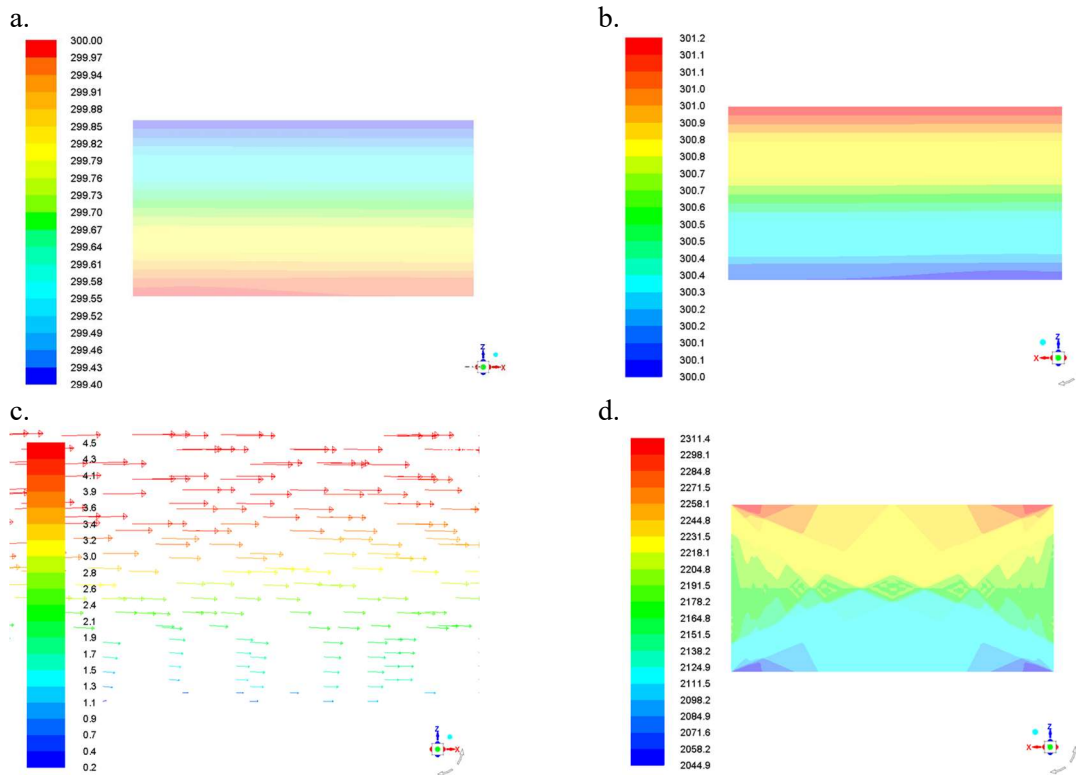


Figura 9. Resultados de los contornos de temperatura para un perfil negativo (a), temperatura para un perfil positivo (b), velocidad (c) y radiación incidente (d).

Las curvas no colapsan en su perfil vertical, cosa que si ocurría para el caso base ver Figura 3 c y d, por lo que la temperatura hace que se presenten diferencias en los perfiles de concentración vertical, por su parte, los perfiles horizontales muestran una pequeña brecha apenas apreciable para la concentración normalizada cercana a la vía, a mayor altura sobre la horizontal la diferencia es apenas apreciables, solo a velocidades bajas puede apreciarse tal efecto.

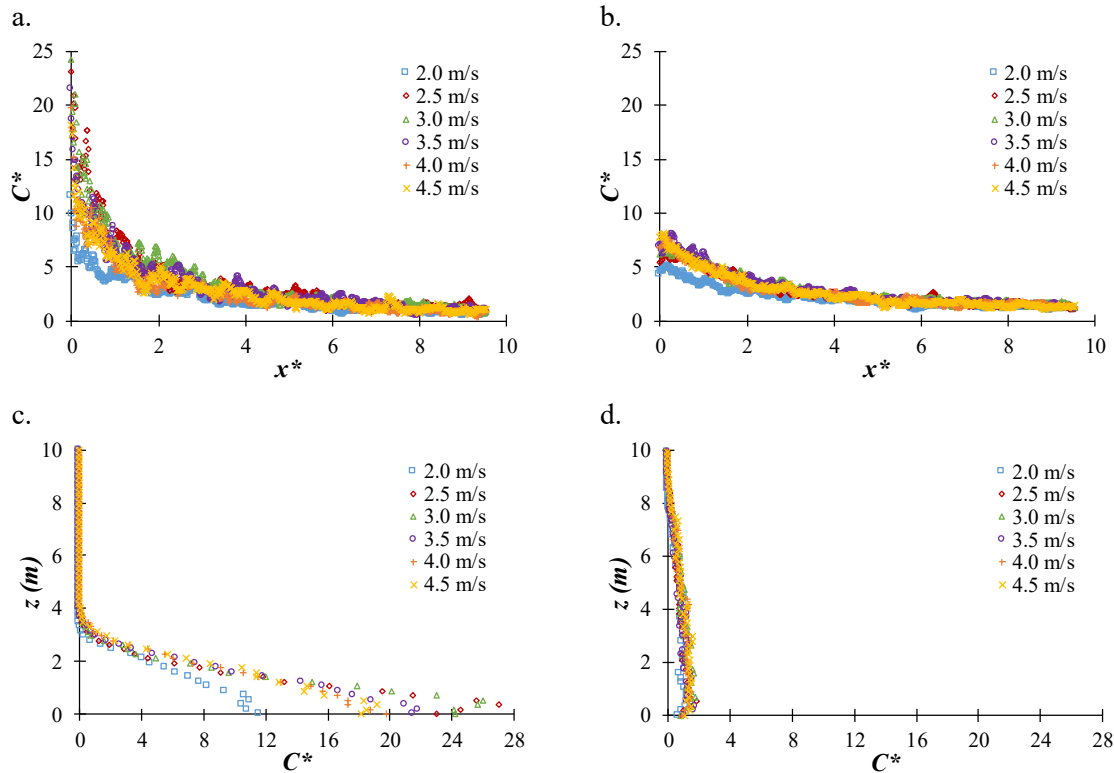


Figura 10. Resultados del perfil horizontal de concentración a nivel suelo (a) y a 2 m de altura (b) y perfiles verticales de concentración al borde de la vía (c) y a la salida del dominio computacional (d) para casos con estabilidad atmosférica adiabática a diferentes velocidades de viento.

En la Figura 8 se plantean diferentes escenarios para los cuales se varía el gradiente de temperatura a la entrada del dominio computacional. Los perfiles de temperatura propuestos abarcan rangos desde  $-15^{\circ}\text{C}/\text{km}$  hasta  $+10^{\circ}\text{C}/\text{km}$ . En general las variaciones de temperatura son minúsculas, teniendo gradientes máximos entre  $-0,5$  y  $0,5$  grados. En términos prácticos la temperatura es casi invariable debido a que la altura del dominio es sólo de 60 metros, por consiguiente, la respuesta de las partículas ante estímulos tan pequeños no se aprecia en un cambio importante en los perfiles de concentración normalizados.

Para todas las líneas de exploración de datos, los perfiles de concentración son prácticamente el mismo, pese a unas minúsculas diferencias en sus comportamientos, por consiguiente, para un nivel de radiación determinado (extremos para este caso) y un perfil térmico tan pequeño como los que se presentan en la Figura 8, no existe un efecto en la concentración de contaminantes atmosféricos en ninguno de los puntos analizados.

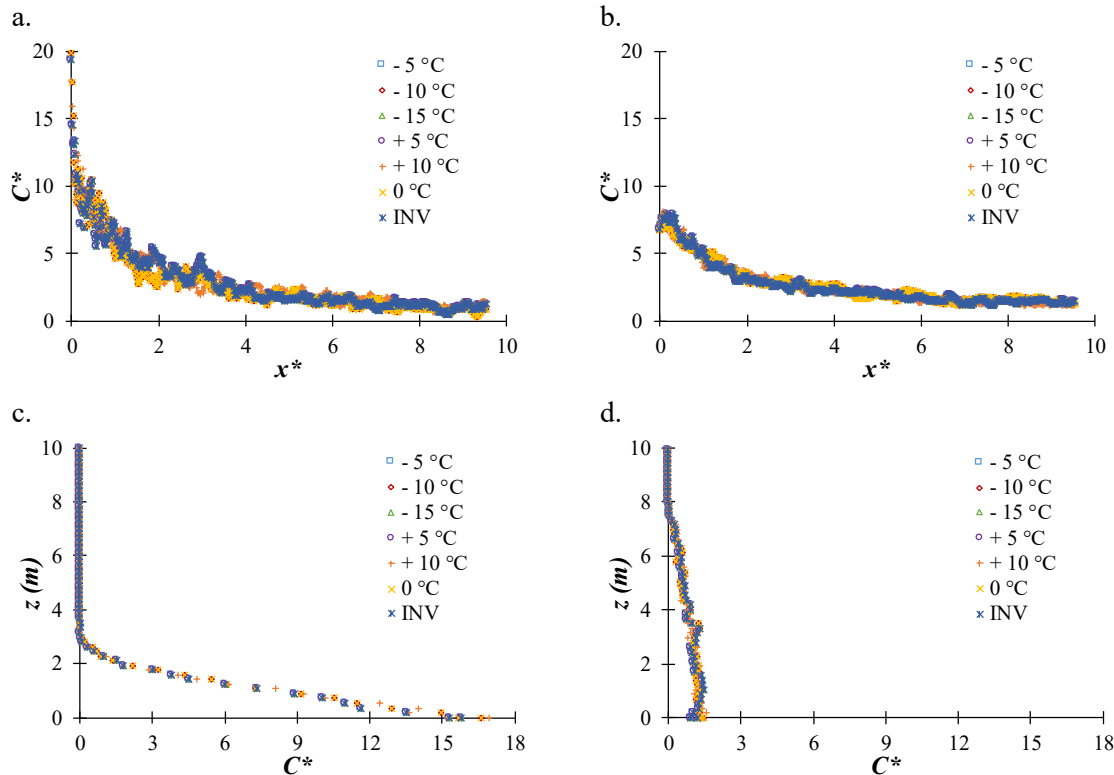


Figura 11. Resultados del perfil horizontal de concentración a nivel suelo (a) y a 2 m de altura (b) y perfiles verticales de concentración al borde de la vía (c) y a la salida del dominio computacional (d) para casos con perfil de temperatura diferente.

Con el fin de aseverar el análisis sobre los perfiles de temperatura anteriormente presentado, es necesario asociar a ellos un nivel de radiación, puesto que ciertos gradientes de temperatura sólo son posibles a ciertos niveles de radiación y a ciertos niveles de temperatura como se indica en la Tabla 2. El planteamiento es ahora, comparar las diferentes estabilidades atmosféricas de acuerdo con las condiciones propicias para reproducir cada una de ellas.

Las estabilidades atmosféricas para las cuales existe una condición de radiación de insolación fuerte son modeladas con un valor extremo de radiación como en los otros casos de estudio (Radiación directa de  $1000 \text{ W/m}^2$  y difusa de  $200 \text{ W/m}^2$ ), los casos de insolación moderada (Directa de  $500 \text{ W/m}^2$  y Difusa de  $100 \text{ W/m}^2$ ) e insolación suave (Directa de  $200 \text{ W/m}^2$  y Difusa de  $50 \text{ W/m}^2$ ). Cada caso de estabilidad atmosférica es configurado de acuerdo a un perfil de velocidad válido para la misma, de acuerdo con los valores recomendados en la Tabla 2. Con base en lo anterior y al visualizar la Figura 12, es posible observar que los perfiles de concentración presentan valores muy cercanos, con diferencias notables en cercanías a la vía. Se observa que los perfiles horizontales de concentración (Figura 12 a y b) presentan pequeñas diferencias en su dispersión en zonas aledañas al punto de emisión, siendo el nivel de radiación el factor fundamental en la diferencia que existe en las dispersiones de concentración. Las condiciones de radiación más bajas, producen valores de concentración normalizada más bajas, ésta es una de las causas que justifican el comportamiento de los perfiles, ya que las partículas no cambian su temperatura a la misma escala.

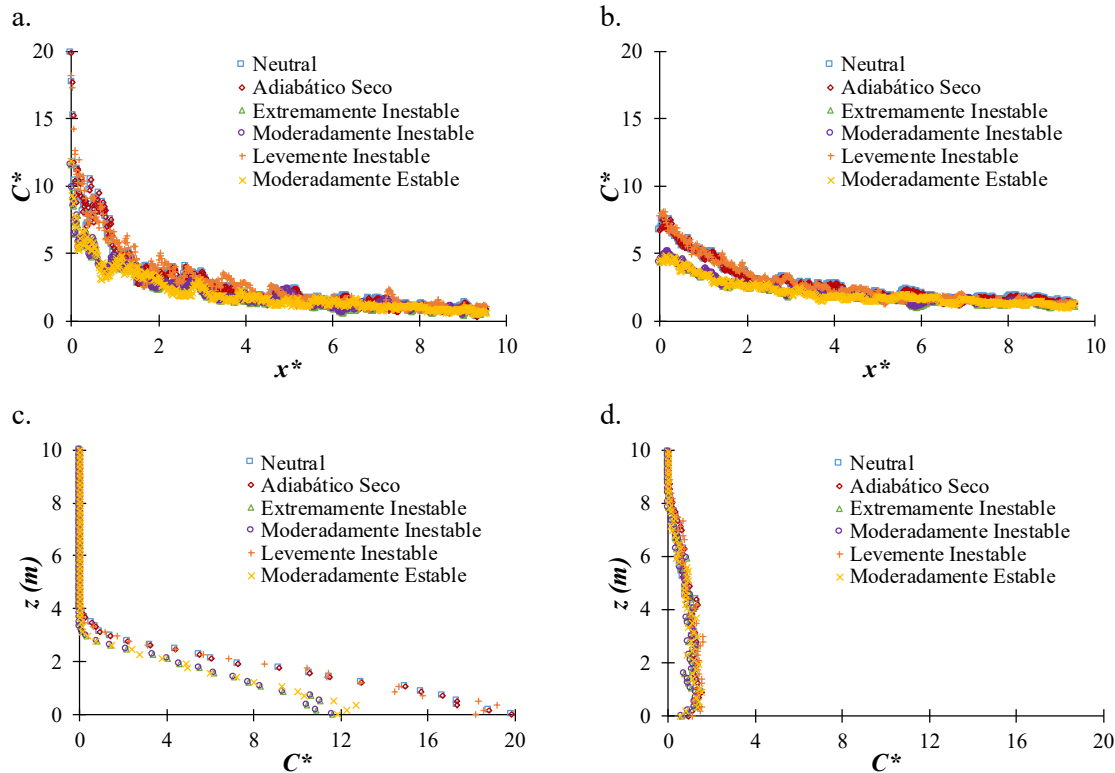


Figura 12. Resultados del perfil horizontal de concentración a nivel suelo (a) y a 2 m de altura (b) y perfiles verticales de concentración al borde de la vía (c) y a la salida del dominio computacional (d) para diferentes estabildades atmosféricas.

Por su parte, los perfiles verticales de concentración para diferentes estabildades atmosféricas (ver Figura 12 c y d) no colapsan como se espera, al igual que sucedió cuando se exploró la velocidad. De modo que puede aseverarse que el efecto de la radiación sobre las partículas ante diferentes velocidades de viento hace que cambie la concentración normalizada cerca del borde de la vía, pero para distancias alejadas de la misma todos los perfiles colapsan satisfactoriamente y producen el comportamiento normal del perfil en S.

En la Figura 13, se formulan casos con estabildad atmosférica adiabática, para los cuales se permite la presencia de humedad en el aire, y con ello se configuran distintos casos de humedad relativa. En esencia, los perfiles de concentración tanto en la horizontal como en la vertical no se ven fuertemente modificados por la presencia de la humedad en el modelo. Se esperan cambios en los perfiles de concentración debido a que la humedad presenta un papel fundamental en la densidad del aire, sin embargo, debido a que el módulo se está explorando preliminarmente, los resultados no responden aún con los valores esperados por la inclusión de la humedad, donde se supone mayores concentraciones en la superficie a mayores valores de humedad. Al observar la Figura 13a, se aprecia un poco dicho fenómeno, a una escala muy pequeña.

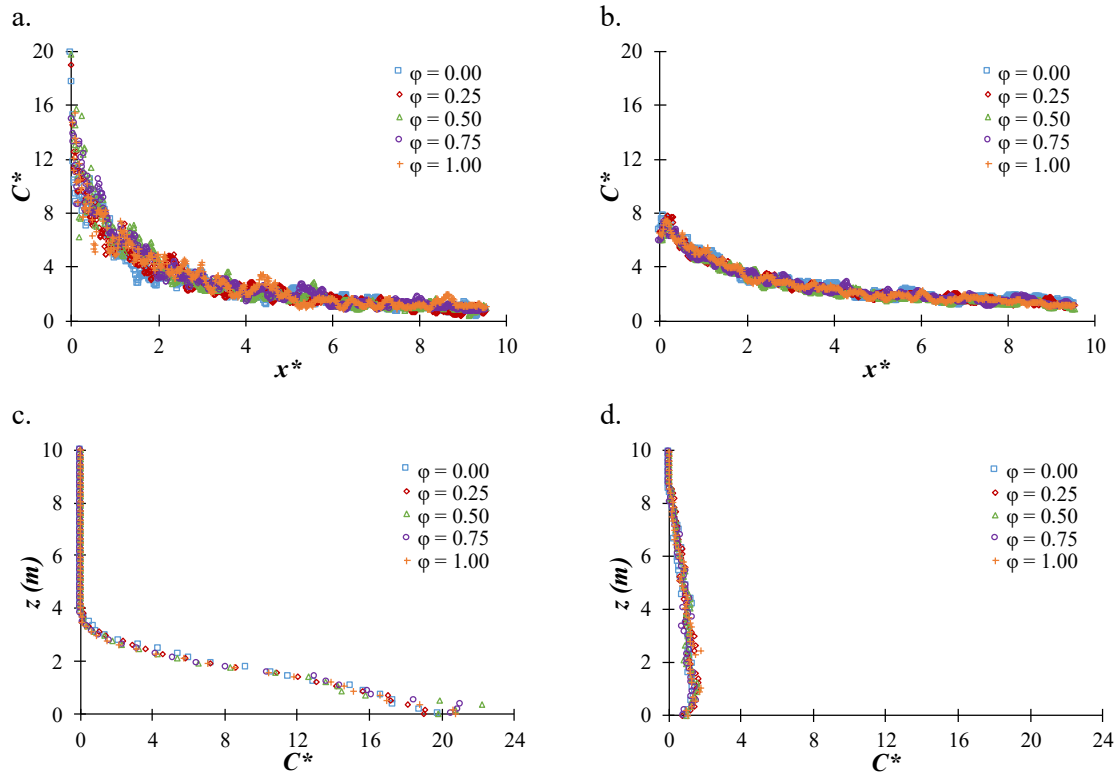


Figura 13. Resultados del perfil horizontal de concentración a nivel suelo (a) y a 2 m de altura (b) para diferentes

Finalmente, se configura un caso con perfil de temperatura del tipo inversión, con base en una serie de datos experimentales tomados en una campaña de mediciones desarrollada por colaboradores del Grupo de Investigación en Energía y Cambio Climático durante el primer semestre del año 2018. Éste caso se configura se compara contra el caso base, obteniendo una curva de correlación de concentraciones como se presenta en la Figura 14. En ésta figura se compara los resultados obtenidos para la concentración de partículas a nivel superficie desde el borde de la vía hasta la salida del dominio computacional en dirección  $x$  para el caso base vs el caso configurado con los datos experimentales medidos. En el eje de las abscisas se ubica el caso base y en el eje de las ordenadas el caso de estudio.

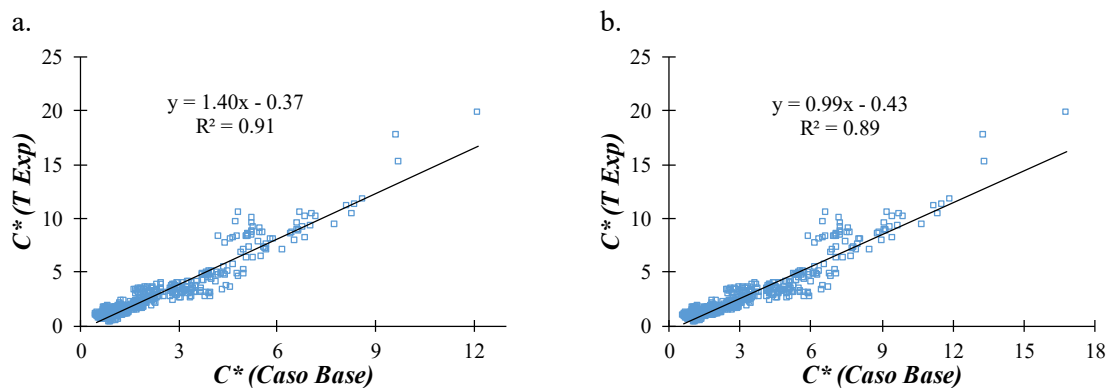


Figura 14. Correlaciones entre los resultados del caso base y un caso con efecto de la radiación para una concentración adimensional según la ecuación (19) (a) y una concentración adimensional según la ecuación (25).

La Figura 14a tiene graficada la concentración adimensional bajo la ecuación (12), tal y como se ha trabajado hasta el momento, sin embargo se observa que existen diferencias en la dispersión al existir datos un 40% mayores que los obtenidos para el caso base. Por su parte, la Figura 14b presenta los valores de concentración adimensional calculados con ayuda de la ecuación (17), en la cual se propone una modificación al cálculo de la concentración adimensional, basándose en las variables de radiación que fueron fijadas en éste caso de estudio, sí las concentraciones adimensionales presentan valores más cercanos a los del caso base.

$$C^* = \frac{C_i u_\infty h T_R}{E I_R} \quad (17)$$

Para determinar si los datos entre las dos dispersiones se encuentran correlacionados se hace uso de una prueba con el estadístico F, cuya hipótesis nula establece que las varianzas de las dos distribuciones son iguales, mientras que la hipótesis alternativa propone que las dos distribuciones son diferentes. Para un nivel de significancia del 5%, se realiza la prueba F para el caso base vs el caso de estudio planteado.

Tabla 3 Resultados prueba F.

	$C_{CB}^* - C_1^*$	$C_{CB}^* - C_2^*$
<b>F</b>	2.1614	1.105
<b>p-valor</b>	2.2 E – 16	0.2318

$C_{CB}^*$ : Concentración normalizada del Caso Base bajo la ecuación 12,  $C_1^*$ : Concentración normalizada del Caso de Estudio bajo la ecuación 12,  $C_2^*$ : Concentración normalizada del Caso de Estudio bajo la ecuación 17.

En la Tabla 3 se presenta el valor de F y el p-valor obtenido para la comparación entre las dos dispersiones (Caso base vs caso de estudio), en las dos modalidades de cálculo de la concentración normalizada (ecuación 12 y ecuación 17), es menor al nivel de significancia en el caso comparativo 1. En el caso comparativo 1 ( $C_{CB}^* - C_1^*$ ), es posible concluir que, estadísticamente las dispersiones no son iguales cuando se trabaja el mismo cálculo de concentración normalizada, sin embargo, con la propuesta de la concentración normalizada teniendo en cuenta los parámetros de radiación (ecuación 17), el p-valor presenta un valor mayor al nivel de significancia, por consiguiente las dispersiones son iguales en su varianza.

## 5. Conclusiones

El modelo utilizado y resuelto con ayuda de CFD, permite resolver un problema de dispersión de contaminantes en cercanías a vías no pavimentadas de tránsito variable, en el cual se tiene en cuenta la contribución de la radiación y la humedad como parámetros principales de estudio, además de la fase discreta, la turbulencia, la distribución de tamaño de partículas, entre otras características importantes para determinar la dispersión.

La dispersión de contaminantes atmosféricos se ve notablemente influenciada por la intensidad de la radiación que existe dentro del dominio computacional. La presencia de la radiación, a su vez, incide sobre los perfiles de concentración en la vertical permitiendo de éste modo que para diferentes velocidades de viento y en general, diferentes estabildades atmosféricas, no se encuentre un grado de colapsamiento satisfactorio como se presenta para el caso base.

Se encuentra un número adimensional que correlaciona los resultados de concentración obtenidos para el caso base con respecto al caso con radiación y para el cual se calcula un p-valor de la prueba F equivalente a 0.2318, de modo que estadísticamente se comprueba que las dispersiones obtenidas entre el caso base y el caso con radiación son las mismas. Gracias a esto es posible representar un

caso de estudio con radiación por medio de la misma curva obtenida para los casos sin radiación y únicamente se hace necesario conocer los parámetros de radiación incidente, temperatura de radiación y coeficiente de convección y de esta manera los perfiles siguen colapsando en la misma curva producida por el caso base.

La dispersión de contaminantes atmosféricos tanto en la horizontal como en la vertical no se ve fuertemente influenciada por la presencia de diferentes perfiles térmicos debido al gradiente tan pequeño que se trabaja (máximo 0.5 K), lo mismo ocurre al variar los valores de humedad relativa en la corriente de entrada de la fase continua.

## 6. Reconocimientos

Se reconoce especialmente al Tecnológico de Monterrey por permitir llevar a cabo los estudios de maestría en sus instalaciones y al grupo de investigación en energía y cambio climático puesto concedió las herramientas computacionales necesarias para llevarlo a cabo todo el trabajo.

## 7. Referencias

- Ai, Z. T., & Mak, C. M. (2017). CFD simulation of flow in a long street canyon under a perpendicular wind direction: Evaluation of three computational settings. *Building and Environment*, *114*, 293–306. <https://doi.org/10.1016/j.buildenv.2016.12.032>
- Cui, P. Y., Li, Z., & Tao, W. Q. (2016). Buoyancy flows and pollutant dispersion through different scale urban areas: CFD simulations and wind-tunnel measurements. *Building and Environment*, *104*, 76–91. <https://doi.org/10.1016/j.buildenv.2016.04.028>
- Fluke. (2007). Emissivity values of common materials, *I*(905), 6. Retrieved from [www.fluke.com](http://www.fluke.com)
- Huertas, J. I., Huertas, M. E., Izquierdo, S., & González, E. D. (2012). Air quality impact assessment of multiple open pit coal mines in northern Colombia. *Journal of Environmental Management*, *93*(1), 121–129. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2011.08.007>
- Huertas, M. E., Huertas, J. I., & Valencia, A. (2017). Vehicular road influence areas. *Atmospheric Environment*, *151*, 108–116. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.12.006>
- Kwak, K. H., Baik, J. J., Ryu, Y. H., & Lee, S. H. (2015). Urban air quality simulation in a high-rise building area using a CFD model coupled with mesoscale meteorological and chemistry-transport models. *Atmospheric Environment*, *100*, 167–177. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2014.10.059>
- Luo, Z., & Li, Y. (2011). Passive urban ventilation by combined buoyancy-driven slope flow and wall flow: Parametric CFD studies on idealized city models. *Atmospheric Environment*, *45*(32), 5946–5956. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2011.04.010>
- Mikron Instrument Company. (2014). Table of Emissivity of Various Surfaces, 1–13. [https://doi.org/http://www-eng.lbl.gov/~dw/projects/DW4229\\_LHC\\_detector\\_analysis/calculations/emissivity2.pdf](https://doi.org/http://www-eng.lbl.gov/~dw/projects/DW4229_LHC_detector_analysis/calculations/emissivity2.pdf)
- NOAA. (2018). Pasquill Stability Classes. Retrieved from <https://ready.arl.noaa.gov/READYpgclass.php>
- Pieterse, J. E., & Harms, T. M. (2013). CFD investigation of the atmospheric boundary layer under different thermal stability conditions. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, *121*(March), 82–97. <https://doi.org/10.1016/j.jweia.2013.07.014>
- Probst, O., & Cárdenas, D. (2010). State of the art and trends in wind resource assessment. *Energies*, *3*(6), 1087–1141. <https://doi.org/10.3390/en3061087>
- Short communication THE ROSIN-RAMMLER PARTICLE SIZE DISTRIBUTION. (1980), *5*, 3967.
- Sobrino, J. A., Mattar, C., Pardo, P., Jiménez-Muñoz, J. C., Hook, S. J., Baldrige, A., & Ibañez, R. (2009). Soil emissivity and reflectance spectra measurements. *Applied Optics*, *48*(19), 3664–3670. <https://doi.org/10.1364/AO.48.003664>
- Toparlar, Y., Blocken, B., Maiheu, B., & van Heijst, G. J. F. (2016). A review on the CFD analysis of urban microclimate. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, *80*(May), 1613–1640. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.05.248>
- Toparlar, Y., Blocken, B., Vos, P., Van Heijst, G. J. F., Janssen, W. D., van Hooff, T., ... Timmermans, H. J. P. (2015). CFD simulation and validation of urban microclimate: A case study for Bergpolder Zuid,

- Rotterdam. *Building and Environment*, 83, 79–90. <https://doi.org/10.1016/j.buildenv.2014.08.004>
- Wang, X., & Li, Y. (2016). Predicting urban heat island circulation using CFD. *Building and Environment*, 99, 82–97. <https://doi.org/10.1016/j.buildenv.2016.01.020>
- Yuan, C., Ng, E., & Norford, L. K. (2014). Improving air quality in high-density cities by understanding the relationship between air pollutant dispersion and urban morphologies. *Building and Environment*, 71(2), 245–258. <https://doi.org/10.1016/j.buildenv.2013.10.008>



## Hoja de Vida

### Perfil Profesional

Ingeniero Químico de la Universidad Nacional de Colombia con maestría en Ingeniería Energética del Instituto Tecnológico de Estudios Superiores de Monterrey (Fecha de grado 25 de mayo de 2018). Especialista en CFD, con gran énfasis en optimización de procesos energéticos. Con experiencia como asistente de investigación en el grupo de energía y cambio climático del ITESM adelantando investigaciones en torno al campo de CFD y resolución de proyectos de la industria. Experiencia en el sector de Oil & Gas como ingeniero de procesos desarrollando proyectos de la mano con el cliente, cumpliendo con etapas de negociación y estimación de proyectos, órdenes de cambio y trabajos complementarios sin afectar el cronograma de trabajo; estimación de costos, horas/hombre, entregables, entre otros; planeación de actividades para ejecución de tareas de ingeniería con grupos de trabajo, desarrollando proyectos que incluyen ingeniería básica, FEED y de detalle. Adicionalmente desempeñando labores de coordinación de personal y de actividades para la ejecución de trabajos de ingeniería con las oficinas en el extranjero. Incluyendo el desempeño de tareas de pre-comisionamiento y comisionamiento de plantas del sector Oil & Gas.

### Experiencia Laboral

#### GRUPO DE INVESTIGACIÓN EN ENERGÍA Y CAMBIO CLIMÁTICO – ITESM

Eugenio Garza Sada 2501, 64849  
Monterrey, N.L., México  
Tel: +52 (81) 8158 2000  
Cargo: *Asistente de Investigación*  
Periodo: 8 de agosto de 2016 – Actualidad

#### INTERCOL S.A.

Cr 29 B # 11 A-50 Arroyohondo  
Cali, Valle del Cauca., Colombia  
Tel: +57 (2) 6957022 / +57 3104926117  
Cargo: *Ingeniero de Procesos*  
Periodo: 23 de mayo de 2016 – 30 de Julio de 2016

#### AUDUBON ENGINEERING LLC SUCURSAL COLOMBIA

Carrera 10 No 97A-13 - Edificio Bogotá Trade Center – Oficina 401-409  
Bogotá D.C., Colombia  
Tel: +57 (1) 7422326 / +57 (1) 7422593  
Cargo: *Ingeniero de Procesos Junior*  
Periodo: 1 de marzo de 2013 – 07 de enero de 2016

### Formación Educativa

Instituto Tecnológico de Estudios Superiores d Monterrey (ITESM)  
Maestría con Especialidad en Ingeniería Energética, agosto 2016 – 25 de mayo de 2018

Universidad Nacional de Colombia  
Ingeniero Químico, 2013

Colegio Salesiano Juan del Rizzo  
Bachiller Académico, 2007

## **Habilidades comunicativas en el idioma extranjero**

Inglés, Avanzado (90%)  
Alemán, Intermedio (50%)

## **Otros estudios**

Curso de Entrenamiento - Multi-Stage Compressors - Conducting Operational and Safety Studies Using Dynamic Analysis  
Aspen Tech  
16 de junio de 2015

Curso de Aspen Hysys Dynamics  
Aspentech  
9 de junio de 2014 – 11 de junio de 2014

Operaciones Avanzadas de Separación  
Universidad Nacional de Colombia  
3 de Julio De 2012 – 19 de Julio de 2012

Viaje de Estudios (Beca)  
DAAD – Servicio Académico de Intercambio Alemán  
3 de junio de 2011 – 21 de junio de 2011

Alemán – Curso Intensivo “Mejores Promedios”  
Facultad De Ingeniería – Universidad Nacional de Colombia  
Dominio – Medio (Actualmente estudiando)  
8 de agosto de 2011 – 5 de mayo de 2012

## **Méritos y Galardones**

Beca de Maestría  
ITESM  
8 de agosto de 2016 – 25 de mayo de 2018

Excelencia Académica  
Colegio Salesiano Juan del Rizzo  
7 de diciembre de 2007

## **Formación Adicional**

Asistencia al curso de Control de Trabajo – Ecopetrol

Asistencia al curso de fomento de trabajo seguro, limpio y saludable – FASE II – Ecopetrol

Asistencia al curso de fomento de trabajo seguro, limpio y saludable – Preparación FASE I – Ecopetrol

Asistencia al Seminario de Automatización “Desafíos en Automatización para la Industria de Procesos”

Participación durante el proceso de certificación en el Sistema Integrado de Gestión ISO – 9001-2008, ISO – 14001-2004 y OHSAS 18001-2007.

Monitor de la sala de simulación del laboratorio de Ingeniería Química - Segundo semestre de 2012

Esta tesis **fue** editada en su totalidad por **Edwin Gustavo González González**