

Departamento de Energía



Universidad de Oviedo

Programa de Doctorado en Energía y Control de Procesos

TÍTULO DE LA TESIS

Metodología de evaluación de protocolos de actuación aplicados a la industria para la reducción de los niveles de contaminación atmosférica y su impacto sobre la dispersión de contaminantes

Methodology for the evaluation of action protocols applied to industry for the reduction of atmospheric pollution levels and their impact on the dispersion of pollutants

TESIS DOCTORAL

Elena Antuña Yudego

2023

RESUMEN DEL CONTENIDO DE TESIS DOCTORAL

1.- Título de la Tesis	
Español: Metodología de evaluación de protocolos de actuación aplicados a la industria para la reducción de los niveles de contaminación atmosférica y su impacto sobre la dispersión de contaminantes.	Inglés: Methodology for the evaluation of action protocols applied to industry for the reduction of atmospheric pollution levels and their impact on the dispersion of pollutants.
2.- Autor	
Nombre: Elena Antuña Yudego	DNI:
Programa de Doctorado: Energía y Control de Procesos	
Órgano responsable: Comisión académica del Programa de Doctorado	

RESUMEN (en español)

La proliferación global de zonas urbanas con una gran densidad de construcciones y edificios de gran altura supone una reducción en los niveles de ventilación y capacidad de dilución de contaminantes en entornos urbanos. En consecuencia, los problemas de calidad del aire se han convertido en una de las principales preocupaciones sociales y gubernamentales a nivel global, dado su potencial impacto en la salud y el confort de la población. En este contexto, el uso de las técnicas de mecánica de fluidos computacional (CFD por sus siglas en inglés) se ha vuelto muy popular para analizar la dispersión de contaminantes en entornos urbanos, fomentado también por un marco normativo medioambiental cada vez más restrictivo.

En el ámbito de las emisiones industriales, el uso de los denominados modelos de dispersión operacionales o de respuesta rápida está mucho más extendido, habida cuenta su capacidad para proporcionar resultados rápidos y fiables en la mayoría de las situaciones. Sin embargo, en escenarios singulares que implican topografías complejas o grandes obstáculos situados en las proximidades a las chimeneas, estas formulaciones empíricas no permiten la representación adecuada de los fenómenos complejos del flujo, los cuales pueden jugar un papel clave en el comportamiento de la pluma de contaminación.

En estos escenarios de mayor dificultad técnica es preciso utilizar una aproximación más robusta que permita verificar adecuadamente la efectividad de dilución de las chimeneas industriales, tal y como se exige para la solicitud y renovación de sus Autorizaciones Ambientales Integradas (AAI).

En esta tesis doctoral se ha desarrollado una metodología para la creación de modelos CFD que permite el estudio de la dispersión de contaminantes en escenarios industriales singulares que por su localización y características requieren el uso de modelos capaces de representar los procesos físicos. El caso de estudio consiste en una planta química ubicada en el fondo de un valle, con formaciones montañosas muy próximas a la instalación y que presentan una elevación que supera ampliamente la altura de la fuente emisora principal.

Las dificultades asociadas a la modelización de un sistema tan peculiar como es la capa límite atmosférica han recibido una atención especial en el diseño de la citada metodología. Para ello, se ha llevado a cabo una profunda revisión crítica del estado del arte, seleccionando e incorporando las mejores prácticas y recomendaciones detectadas en la literatura. La metodología resultante se ha validado contra una base de datos experimental de túnel de viento.

En la investigación, se concede especial atención a la ocurrencia de fenómenos del flujo complejo que pueden afectar a los mecanismos de dispersión. Así mismo, se ha propuesto una medida de mitigación de impacto contaminante para su simulación en el modelo CFD, con el objetivo de poder evaluar su efectividad. La medida propuesta ha sido la regulación de los sistemas de recuperación de calor de la instalación, cuyo uso puede llevar a un deterioro de los mecanismos de dispersión. Para ello, se han ejecutado nuevas simulaciones variando la temperatura de salida de los gases para observar el impacto de este parámetro en el compor-



tamiento de la pluma contaminante. De esta forma, mediante la simulación de distintos escenarios es posible alcanzar un compromiso entre impacto ambiental y el consumo de combustible en la planta industrial.

La revisión del estado del arte revela que no abundan en la literatura casos que estudien la aparición de fenómenos de recirculación del flujo causados por las características del relieve y la afección de estos últimos al comportamiento de la dispersión en el ámbito industrial. La principal contribución de esta tesis doctoral consiste, por tanto, en abordar un caso de estudio que reúna dichas características, así como la definición de una metodología específica para la misma.

RESUMEN (en Inglés)

The global proliferation of dense built-up areas and high-rise structures is known to cause a reduction in the flow circulation and pollutant removal capacity in urban landscapes. As a result, air quality is becoming a major concern among governments and citizens, provided the negative effects that breathing polluted air can have on humans' health. In this context, the use of Computational Fluid Dynamics (CFD) techniques is becoming very popular to analyse pollutant dispersion in urban studies, also fostered by an increasingly demanding environmental regulatory framework. For emission sources of industrial scenarios, models based on empirical formulations are more extended, providing faster but still satisfactory results despite their simpler formulations.

However, for singular cases involving complex terrains or large obstacles in the close vicinity of the source, empirical models cannot account for the effect of complex flow phenomena, which in turn might play a crucial role in the pollutant plume behaviour. For these challenging scenarios, a more robust approach is required to check the dilution effectiveness of the industrial chimneys, as often required for the request and renewal of the Integrated Environmental Authorizations (IEA).

In this research, a methodology for the development of a CFD model to analyse the pollutant dispersion in singular industrial scenarios that suggest the use of a robust approach capable to capture the physical processes of the flow has been designed. The case study consists of a chemical plant located at the bottom of a valley, with mountains very close to the main source and terrain elevations widely higher than the chimney.

The difficulties associated with modelling such a peculiar system as the atmospheric boundary layer have received special attention in the design of the methodology. For this purpose, a comprehensive and critical review of the state of the art has been conducted, identifying the best practices and recommendations identified in the literature. The methodology has been finally validated against an experimental wind tunnel database.

The research pays special attention to the occurrence of complex flow phenomena with potential of impacting the pollutant dispersion mechanisms. Additionally, the selection of a pollution mitigation measure has been proposed with the aim of evaluating its effectiveness through the execution of new CFD simulations. The selected measured has been the variation of the gas exit temperatures by waste heat recovery systems regulation, which is known to potentially deteriorate the dispersion mechanisms. By simulating different scenarios, it is possible to set the optimal temperature conditions ensuring the best compromise between the environmental pollution impact and the fuel consumption of the plant.

The review of the state of the art reveals that there are not cases in the literature that study the occurrence of flow recirculation phenomena caused by the characteristics of the terrain and the effect of the latter on the dispersion behaviour in the industrial field. The main contribution of this doctoral thesis consists, therefore, in tackling a case study that meets these characteristics, as well as the definition of a specific methodology for it.

Agradecimientos

Esta tesis doctoral es el resultado del trabajo y el esfuerzo desarrollados durante más de cinco años, una etapa que no ha resultado fácil, pero de la que me llevo grandes enseñanzas en lo académico, lo profesional y lo personal. Como suele ocurrir cuando nos enfrentamos a los retos de la vida, el haber llegado hasta aquí no habría sido posible sin el apoyo de algunas personas que me han acompañado durante esta “aventura”.

En primer lugar, en la Universidad de Oviedo quiero agradecer a mi directora, María José Suárez López, a Eduardo Álvarez Álvarez y a Eduardo Blanco Marigorta por haberme guiado y asesorado en este proceso. Por supuesto, no me olvido de Aitor Fernández Jiménez y Álvaro García Martínez, siempre con buenas palabras y dándome ánimos con el conocimiento de quien ha vivido recientemente o aún está viviendo esta misma experiencia del doctorado.

La mayor parte de esta tesis se desarrolló durante mi etapa profesional en la empresa TSK, acogiendo esta propuesta de tesis como un proyecto de investigación de la compañía y facilitándome los medios y las oportunidades para poder llevarla a cabo. A título personal, quiero dar las gracias a Juan Luis Carús Candás, quien ha seguido todo este proceso de cerca como director de tesis por parte de la empresa. También se merece una mención especial Alejandro Alfageme Carro, pues de no ser por él, posiblemente seguiría dándole vueltas a ciertas partes del modelo CFD sin éxito.

En mi círculo más cercano, quiero darle las gracias a mi familia por acompañarme y apoyarme siempre de forma incondicional en todos mis propósitos. A mi pareja, Dani, se lo tengo que agradecer doblemente, porque mucho de lo que me tocó “sufrir” durante este proceso le acabó alcanzando a él también por extensión, irremediablemente.

Por último, mis amigos jugaron también un papel muy importante en este proceso. He decidido no dar nombres ya que son muchas las amistades que han aportado su granito de arena en esta historia y no me gustaría dejar ningún nombre fuera. La única excepción a esta regla son mis queridas Andrea Morán Gajate y Elena Sánchez Fernández, a quienes de ninguna manera podría dejar sin mencionar en estas líneas. A los demás nombres que como he comentado voy a omitir, tengo que agradecerles su apoyo, el haberse interesado todo este tiempo con su “cómo va esa tesis”, algunos incluso inspirándome y dándome ideas que posteriormente puse en práctica en la tesis.

A todos vosotros, muchas gracias, en especial por haber creído en mí y confiado en que esta tesis iba a llegar a buen término, incluso cuando yo misma no lo creía. Al final, os voy a tener que dar la razón.

Hasta la próxima aventura.

Índice

AUTORIZACIÓN PARA LA PRESENTACIÓN DE TESIS DOCTORAL	3
RESOLUCIÓN DE PRESENTACIÓN DE TESIS DOCTORAL	5
RESUMEN DEL CONTENIDO DE TESIS DOCTORAL	7
Agradecimientos	9
Índice.....	10
Índice de Figuras.....	12
Índice de Tablas.....	17
Acrónimos	18
1 Introducción.....	22
2 Objetivos.....	29
3 Antecedentes	32
3.1 Atmósfera, composición y contaminación.....	32
3.2 Dispersión de contaminantes en la atmósfera.....	35
3.3 Consideraciones para la modelización atmosférica.....	37
3.4 Contaminación y contexto legislativo	42
4 Estado del arte	47
4.1 Estudio de dispersión de contaminantes con fines regulatorios: modelos de respuesta rápida vs CFD.....	47
4.2 Aplicación de modelos CFD al estudio de dispersión de contaminantes.....	51
5 Descripción del caso de estudio.....	69
5.1 Análisis y selección de escenarios meteorológicos.....	73
5.2 Selección y descripción del foco emisor.....	77
5.2.1 Definición de la temperatura y velocidad de salida de los gases.....	78
5.2.2 Cálculo de las tasas de emisión de los contaminantes de interés.....	81

Índice

5.3	Resumen de escenarios de simulación.....	84
6	Metodología.....	86
6.1	Geometría y dominio computacional.....	87
6.1.1	Generación de la superficie del terreno.....	88
6.1.2	Integración de la fuente y las edificaciones.....	104
6.1.3	Diseño de la zona de transición.....	110
6.1.4	Dominio exterior plano.....	111
6.2	Discretización del dominio o mallado.....	114
6.2.1	Criterios de diseño del mallado.....	114
6.2.2	Generación del mallado.....	123
6.2.3	Mallado resultante.....	130
6.3	Condiciones de contorno.....	135
6.3.1	Condición de entrada y salida del flujo y gases.....	136
6.3.2	Condición de superficies sólidas o de pared.....	138
6.3.3	Resumen de las condiciones de contorno.....	142
6.4	Modelo de turbulencia.....	143
6.5	Ecuaciones de gobierno del flujo y leyes aplicadas.....	145
6.6	Configuración del solver.....	146
7	Validación.....	148
7.1	Descripción y propiedades del caso seleccionado.....	149
7.2	Dominio geométrico y mallado.....	149
7.3	Condiciones de contorno.....	151
8	Resultados y discusión.....	156
9	Conclusiones.....	170
10	Líneas de investigación futuras.....	175
	Referencias.....	178
	Anexo I. Prueba de mallado en ANSYS ICEM.....	197
	Anexo II. Publicaciones en revistas y congresos.....	210

Índice de Figuras

Figura 1. Mecanismos de deposición de partículas contaminantes. Fuente: traducción de [8].....	36
Figura 2. División de la troposfera en dos regiones, la capa límite cercana a la superficie y la atmósfera libre. Fuente: traducción de [9].....	38
Figura 3. Representación del aspecto y distribución de los fenómenos de flujo que se producen en la capa de mezcla durante el día (arriba) y durante la noche (abajo) a consecuencia de la variación de los fenómenos térmicos. Fuente: adaptación de [13].....	39
Figura 4. Resumen de aspectos legislativos de interés para los objetivos de esta investigación.	45
Figura 5. Clasificación de modelos deterministas o numéricos.	48
Figura 6. Escalas espaciales y temporales de los fenómenos atmosféricos extraída de [55]. La definición de las escalas características está basada en los trabajos de [56] y [57]. Las columnas de la derecha indican cómo son tratados cada uno de estos fenómenos en los modelos RANS para distintas escalas, mientras que las zonas sombreadas indican las resoluciones de los modelos RANS actuales y los tamaños mínimos de fenómenos potencialmente susceptibles de ser resueltos por estos últimos.	52
Figura 7. Estructura vertical de la capa límite atmosférica a su paso por un escenario urbano. Figura extraída y traducida de [18].	53
Figura 8. Representación esquemática del flujo de capa límite y sus fenómenos alrededor de un edificio aislado. Ilustración original de [63] modificada por [29] y traducida al español.....	55
Figura 9. Evolución y variedad de la complejidad de escenarios urbanos estudiados en simulaciones CFD. Figuras extraídas de: a) [84], b) [85], c) [86], d) [70], e) [71], f) [87], g) [88], h) [89], i) [90], j) [22], k) [19], l) [83].	56
Figura 10. Representación gráfica del estudio de evolución de una pluma contaminante en diferentes contextos. Las figuras han sido extraídas de: a) [108] , b) [104], c) [83].	61
Figura 11. Concentraciones de dióxido de nitrógeno en Europa. Fuente: The European Space Agency (ESA). Contiene datos modificados de Copernicus Sentinel data (2019-2020), procesados por KNMI/BIRA-IASB.	65
Figura 12. Localización geográfica de la planta Industrial Química del Nalón en el Principado de Asturias.....	69
Figura 13. Vista aérea de la localización de la planta. Fuente: Google Maps.....	69
Figura 14. Imagen de la instalación y su entorno.	70
Figura 15. a) Vista en 3D de las dependencias de la industria y de la topografía circundante. La línea roja representa la proyección de la elevación de la sección de escape de la chimenea sobre la superficie	

Índice de Figuras

del terreno. b) Vista en planta de las instalaciones con algunas distancias horizontales representadas entre el centro de la sección de escape y varios puntos de la línea roja proyectada.	72
Figura 16. Rosas de los vientos para cada estación del año en la estación meteorológica de Meriñán.	74
Figura 17. Ubicación del foco emisor y de las estaciones meteorológica y de control de la calidad del aire consultadas.	75
Figura 18. Evolución de los contaminantes en la estación de inmisión más cercana a la instalación (PST=partículas sólidas, ben=benceno, tol=tolueno).....	76
Figura 19. Fases de creación de un modelo numérico CFD.	86
Figura 20. Diseño general preliminar del dominio geométrico.....	87
Figura 21. Componentes del contorno inferior del dominio computacional.	88
Figura 22. Visualización de los datos LiDAR en vista 3D y coloreados según categoría (izquierda) y en planta y coloración RGB (derecha) de la zona de estudio.....	90
Figura 23. Nube de puntos correspondiente al área de estudio escogida. El marcador rojo indica la ubicación de la fuente emisora.	91
Figura 24. Superficie TIN original.	92
Figura 25. Superficie TIN simplificada.	92
Figura 26. Regularización de la superficie TIN a resolución de 15 m.	93
Figura 27. Procedimientos posibles para el procesamiento del modelo gráfico.	94
Figura 28. Características de los archivos resultantes de cada procedimiento alternativo.....	95
Figura 29. Aspecto de la malla superficial preliminar para análisis de comportamiento.	95
Figura 30. Comparativa de mallado de modelos resultantes de cada procedimiento alternativo.....	96
Figura 31. Procedimiento final elegido para definición del modelo geométrico.....	96
Figura 32. Distorsiones en el mallado de superficie sobre el terreno.....	97
Figura 33. Distorsiones en el mallado de superficie sobre el terreno con detalle de intersecciones de celdas (volúmenes negativos).....	97
Figura 34. Ejemplos de algunas incidencias geométricas identificadas con herramientas del módulo SPACECLAIM en la superficie del terreno modelado.	98
Figura 35. Detalle de malla de superficie de la porción de terreno seleccionada para las simulaciones.	99
Figura 36. Detalle de distribución vertical de malla en altura (1).....	99
Figura 37. Detalle de distribución vertical de malla en altura (2).....	100
Figura 38. Superficie NURBS continua del terreno.....	101
Figura 39. Definición de circunferencias concéntricas.....	102
Figura 40. Proyección de circunferencias en el terreno.....	102
Figura 41. División de las proyecciones en puntos.....	103
Figura 42. Construcción de las bSplines.....	103

Índice de Figuras

Figura 43. Construcción de superficies mediante comando solevar.	103
Figura 44. Superficie resultante final.	104
Figura 45. Distribución en planta de los edificios a incluir en el modelo.....	106
Figura 46. Visualización de nube de puntos LiDAR correspondiente a la categoría edificios con escala de color aplicada según elevación.	107
Figura 47. Asignación de alturas a los bloques de edificios.....	108
Figura 48. Vista conjunto superficie del terreno y edificios.....	109
Figura 49. Vista conjunto superficie del terreno y detalle de la fuente emisora.	109
Figura 50. Aspecto final de la superficie del terreno modelada junto con los edificios (gris) y la fuente emisora (verde).....	110
Figura 51. Disposición y dimensiones del dominio computacional.	112
Figura 52. Diseño del dominio computacional y condiciones de contornos en función de la dirección del viento incidente.	113
Figura 53. Vista en perspectiva del dominio geométrico.	114
Figura 54. Representación de los distintos tipos o formas de celdas.	115
Figura 55. Proceso de generación y edición de bloques en ICEM CFD [147].....	116
Figura 56. Mallado compuesto de tetraedros y 3 capas de prismas sobre las superficies del terreno y edificios.	118
Figura 57. Aplicación de la técnica de extrusión una geometría urbana compleja.....	119
Figura 58. Problemas en la aplicación de la técnica de extrusión a un dominio que engloba terreno y edificios.	119
Figura 59. Ilustración de una interfaz de mallado no conforme.....	120
Figura 60. Comparación entre los distintos métodos de mallado y tipos de celdas ofrecidos por el módulo ANSYS Fluent Meshing. Adaptación y traducción de figura original proporcionada por ANSYS.	122
Figura 61. Distinción entre los dominios interior y exterior del modelo computacional.	126
Figura 62. Contornos del modelo y volúmenes definidos en SpaceClaim a los que son de aplicación distintos parámetros de configuración del mallado.	127
Figura 63. Cuerpos de influencia introducidos en el dominio a través de SpaceClaim.....	127
Figura 64. Listado de pasos seguidos para la generación del mallado en ANSYS Fluent Meshing. 129	
Figura 65. Vista del mallado resultante nº 1. Mallado de superficie del dominio exterior y refinamiento del área de entrada del viento.	131
Figura 66. Vista del mallado resultante nº2. Mallado de superficie la zona de transición y de la superficie completa del terreno.	132
Figura 67. Vista del mallado resultante nº3. Mallado de superficie del terreno en las proximidades a los edificios y a la instalación contaminante.....	133

Índice de Figuras

Figura 68. Vista del mallado resultante nº4. Mallado de superficie en las superficies de los edificios, dependencias de la instalación industrial, incluida la sección de salida de la misma y el espacio circundante afectado por el cuerpo de influencia de la chimenea.	134
Figura 69. Vista del mallado resultante nº4. Secciones transversales del mallado que muestra la forma de las celdas de volumen del interior del modelo desde distintas vistas.....	135
Figura 70. Valores de longitud de rugosidad aerodinámica definidos en ángulos de 30° de acuerdo a la clasificación Davenport-Wieringa.....	142
Figura 71. Condiciones de contorno aplicadas en el modelo para el grupo de escenarios de simulación con dirección de viento SO.....	143
Figura 72. Vista en planta de la geometría del caso B3, donde H representa la altura del edificio principal o de emisión.....	150
Figura 73. Dominio computacional y mallado obtenido para el caso de validación.	151
Figura 74. Datos de concentración normalizados obtenidos en túnel de viento y en las simulaciones CFD en diferentes planos transversales y alturas del dominio computacional.	153
Figura 75. Posiciones de los planos para los cuales se muestran y comparan los resultados de concentraciones de las simulaciones.....	153
Figura 76. Contorno de presión representado en un plano paralelo a la dirección del viento incidente que pasa por el centro de la chimenea.	156
Figura 77. Contornos de velocidad en un plano paralelo a la dirección del viento incidente que pasa por el punto centrar de la chimenea.	157
Figura 78. Contornos de velocidad en un plano paralelo a la dirección del viento incidente que pasa por el punto centrar de la chimenea ampliados en torno al área de interés.....	157
Figura 79. Líneas de flujo representadas en escala de colores según velocidad en plano paralelo a la dirección del viento incidente para el escenario E1.	158
Figura 80. Líneas de flujo representadas en escala de colores según velocidad en plano paralelo a la dirección del viento incidente para el escenario E2.	159
Figura 81. Contornos de concentración de SO ₂ en un plano paralelo a la dirección del viento incidente que pasa por el punto centrar de la chimenea en escenario E1.	160
Figura 82. Contornos de concentración de SO ₂ en un plano paralelo a la dirección del viento incidente que pasa por el punto centrar de la chimenea en escenario E2.	161
Figura 83. Superficies de iso-concentración del 5% del nivel de emisión original de dióxido de nitrógeno (NO ₂) para dos escenarios meteorológicos y tres temperaturas de salida del gas.	162
Figura 84. Superficies de iso-concentración del 5% del nivel de emisión original de dióxido de azufre (SO ₂) para dos escenarios meteorológicos y tres temperaturas de salida del gas.	163
Figura 85. Superficies de iso-concentración del 5% del nivel de emisión original de benceno (C ₆ H ₆) para dos escenarios meteorológicos y tres temperaturas de salida del gas.....	164

Índice de Figuras

Figura 86. Detalles de las posiciones desde las que se tomaron el conjunto de fotografías de los gases expulsados y tiempos.	166
Figura 87. Imágenes tomadas de los gases expulsados por el foco emisor en el instante y posición P1.	167
Figura 88. Imágenes tomadas de los gases expulsados por el foco emisor en el instante y posición P2.	168
Figura 89. Separación del modelo en partes para gestión del proceso de mallado en ICEM.	198
Figura 90. Bloque original (arriba) y divisiones practicadas para lograr la adaptación a la geometría de la chimenea (abajo).....	199
Figura 91. Subdivisión de bloque reservado al cuerpo de la chimenea.....	200
Figura 92. Estrategia de división de bloques para captar la geometría de la chimenea.	200
Figura 93. Mallado obtenido en la chimenea con estrategia de división descrita.....	201
Figura 94. Divisiones consecutivas de transición.....	201
Figura 95. Asignación de tamaños y tasas de progresión a los ejes de los bloques.....	202
Figura 96. Transición entre tamaños de celda en la zona de la chimenea (imagen superior) y en la columna de aire situada encima de la sección de salida de la misma (imagen inferior).....	203
Figura 97. Problema de intersección de ejes de división interna con el terreno.	204
Figura 98. Reorganización de vértices para evitar intersección de ejes con el terreno.....	204
Figura 99. Corte vertical del mallado a la altura de la fuente emisora en distintas perspectivas.....	205
Figura 100. Capturas del mallado de la superficie del terreno.....	206
Figura 101. Detalle de interfaz no conforme.	207
Figura 102. Mallado conjunto del modelo completo en planta, incluyendo dominios interior y exterior.	207
Figura 103. Distribución en altura de los tamaños de celda sobre el eje z.....	208
Figura 104. Indicadores de calidad de malla. Los valores óptimos de los indicadores quality y skewness son 1 en ambos casos. El valor máximo admisible de aspecto ratio para Fluent es 40.	209

Índice de Tablas

Tabla 1. Composición atmosférica.	33
Tabla 2. Clases de estabilidad atmosférica de Pasquill.....	40
Tabla 3. Organismos ambientales y modelos de dispersión recomendados o de preferencia. para fines regulatorios y permisos industriales.....	50
Tabla 4. Escenarios meteorológicos seleccionados para las simulaciones.	75
Tabla 5. Información relevante perteneciente a los distintos focos canalizados de la instalación.	78
Tabla 6. Velocidades de salida del gas para diferentes condiciones de temperatura en m/s.	80
Tabla 7. Recopilación de datos de ejemplos de chimeneas industriales procedentes de otros estudios.	80
Tabla 8. Tasas de emisión de los distintos contaminantes para la simulación.....	82
Tabla 9. Tasas de emisión (g/s) de los distintos contaminantes seleccionados en cada uno de los escenarios de estudio.....	83
Tabla 10. Emisiones a la atmósfera en kg/año registradas en el PRTR-España para la instalación IQN.	83
Tabla 11. Escenarios de simulación considerados.	84
Tabla 12. Determinación de las dimensiones del dominio computacional.....	112
Tabla 13. Vectores de velocidad que aplican a los contornos de entrada laterales en cada escenario de viento considerado para las simulaciones.	137
Tabla 14. Clasificación actualizada de rugosidad de Davenport-Wieringa, traducida de [172].....	139
Tabla 15. Parámetros de rugosidad para las simulaciones.	142
Tabla 16. Correspondencia de las propiedades del caso de validación entre la escala del modelo y la escala real.	149

Acrónimos

AAI	Autorización Ambiental Integrada
Ar	argón
AR	relación de aspecto en cañones de calles
BaP	benzoopireno
ben	benceno
C	concentración de un compuesto
CAD	software de diseño asistido por ordenador
C_d	coeficiente de descarga
CFD	computational fluid dynamics
CH₄	metano
C_{mol}	concentración molar
C_μ	constante del modelo $k - \epsilon$
CNIG	centro Nacional de Información Geográfica
CO	monóxido de carbono
CO₂	dióxido de carbono
COVs	compuestos orgánicos volátiles
C_p	calor específico
C_s	constante de rugosidad
D	difusividad de la masa
DNS	simulación numérica directa
D_o	diámetro de obstáculo
d_s	diámetro de la fuente
EEA	Agencia Europea de Medio Ambiente
E-PRTR	Registro Estatal de Emisiones y Fuentes Contaminantes
EUROFER	asociación Europea del Acero
g	aceleración de la gravedad
GEI	gases de efecto invernadero
H	altura máxima de obstáculo
H₂O	agua
He	helio
IPPC	prevención y control integrados de la contaminación
IQN	Industrial Química del Nalón, S.A.
IQPA	Clúster de Industrias Químicas y Procesos del Principado de Asturias
ISL	subcapa inercial
K	conductividad térmica
L	escala de longitud característica del flujo
k	energía cinética turbulenta
κ	constante de von Karman
Kr	criptón
k_s	altura de rugosidad de grano equivalente
L_B	distancia sotavento

Acrónimos

LES	simulación de grandes remolinos
L_F	distancia barlovento
LiDAR	<i>Light Detection and Ranging</i>
MTD	mejores técnicas disponibles
N₂	nitrógeno
NASA	Agencia Espacial de los Estados Unidos
Ne	neón
NH₃	amoníaco
NO_x	óxidos de nitrógeno
NURBS	<i>non-uniform rational bSplines</i>
NWP	modelos numéricos de predicción meteorológica
O₂	oxígeno
O₃	ozono
OMS	Organización Mundial de la Salud
PM	partículas sólidas o <i>particulate matter</i>
PM10	partículas inferiores a 2.5 micras
PM2.5	partículas inferiores a 10 micras
Pr	número adimensional de Prandtl
PST	partículas Sólidas Totales
Q_s	caudal de emisión
RANS	ecuaciones de Navier-Stokes promediadas por Reynolds
RCS	sistemas de reducción catalítica selectiva
Re	número adimensional de Reynolds
Ri	número adimensional de Richardson
RSL	subcapa rugosa superficial
Sc	número adimensional de Schmidt
SL	capa superficial
SO_x	óxidos de azufre
T_e	temperatura ambiente exterior
T_i	temperatura del gas de escape
TIN	red irregular de triángulos
U	perfil de velocidades del flujo
u*_{ABL}	velocidad de fricción de la capa límite atmosférica
UBL	capa límite urbana
UCL	capa de dosel urbano
URANS	ecuaciones de Navier-Stokes promediadas por Reynolds transitorias
US EPA	Agencia de Protección del Medio Ambiente de Estados Unidos
v	velocidad del fluido
V	volumen del gas de escape
v_{eg}	velocidad de los gases de escape
y_p	altura de centroide de celda adyacente a superficie
z	coordenada vertical
z₀	longitud de rugosidad aerodinámica
α	relación de densidad de emisión
ρ	densidad del fluido
ε	tasa de disipación turbulenta del modelo k - ε
μ	viscosidad dinámica

1. Introducción

1 Introducción

El rápido crecimiento industrial y desarrollo económico experimentado a nivel global durante las últimas décadas ha llevado a una importante expansión de las zonas urbanas en muchas regiones del mundo. Con el crecimiento de las zonas residenciales urbanas, otra tendencia que gana cada vez más fuerza es la construcción de edificios de grandes alturas, para dar cabida a una población en ascenso, especialmente en el caso de grandes ciudades.

De acuerdo a uno de los informes generados por las Naciones Unidas [1] en el año 2022, el porcentaje de la población mundial residente en ciudades o asentamientos urbanos fue del 55.3% durante el año 2018. Además, se espera que este porcentaje crezca hasta un 68% para el año 2050.

Sin embargo, la proliferación de áreas de alta densidad de construcciones supone un importante problema al provocar una reducción en los mecanismos de circulación del aire en entornos urbanos y la capacidad de evacuación de compuestos contaminantes. En consecuencia, los problemas de calidad del aire se han convertido en una de las principales preocupaciones sociales y gubernamentales, dado que gran parte de la población mundial se encuentra expuesta a una atmósfera que no cumple los estándares legales de calidad del aire o las directrices de la Organización Mundial de la Salud (OMS) [2]. Esta situación es bastante preocupante teniendo en cuenta que numerosos estudios asocian altos niveles de contaminación atmosférica exterior con un amplio abanico de efectos perjudiciales para la salud y el confort de la población [3].

En este escenario, gobiernos y agencias medioambientales de todo el mundo están definiendo políticas para tratar de reducir la exposición de la población a la contaminación ambiental, con claros ejemplos como las Directivas europeas sobre calidad del aire adoptadas en las últimas décadas. Este tipo de regulaciones pretenden promover el desarrollo de estrategias de reducción y control de emisiones contaminantes en zonas urbanas, lo que en última instancia ha motivado el uso de técnicas tradicionales y novedosas para modelizar la dispersión de contaminantes en la atmósfera.

La modelización de la dispersión de contaminantes se basa en el uso de ecuaciones matemáticas para simular el comportamiento de estos compuestos químicos a través de la atmósfera. Su uso permite predecir las concentraciones contaminantes que se van a obtener en zonas de interés como consecuencia de la existencia de una fuente emisora.

De entre los distintos tipos de técnicas más extendidas, los modelos de mecánica de fluidos computacional (CFD) se han vuelto muy populares para el estudio de la dispersión y la calidad del aire en escenarios urbanos. El motivo de su éxito se encuentra en su capacidad para proporcionar análisis físicos complejos del flujo y generar resultados continuos en la totalidad del espacio geométrico ocupado por el fluido.

El uso extendido de los modelos CFD ha permitido a planificadores urbanos y organismos reguladores optimizar los diseños urbanos para mejorar las condiciones de ventilación y calidad del aire. Además, el uso continuado de estos modelos ha revelado una frecuente aparición de fenómenos de recirculación del flujo en espacios urbanos, así como un gran impacto de estos últimos sobre los mecanismos de dispersión de contaminantes, especialmente en zonas de construcción densas y de gran altura. La aparición de este tipo de fenómenos provoca el estancamiento y concentración de los contaminantes en zonas de tránsito de peatones, así como en las proximidades de las fachadas de los edificios donde se sitúan las tomas de ventilación para el interior de las viviendas. La utilización de un modelo CFD resulta de gran utilidad para modificar los diseños urbanos y tomas de aire en edificios, así como para posicionar las chimeneas de los edificios, alejándolas de la zona de influencia de los fenómenos de flujo para minimizar los riesgos de la contaminación.

La utilización de modelos de dispersión también ha sido habitual en el ámbito industrial, donde se ha empleado bien con objetivos de diseño de las chimeneas de evacuación de gases o bien como herramienta para verificar el cumplimiento de las exigencias regulatorias. Sin embargo, en estudios industriales, la elección por excelencia ha sido los denominados modelos operacionales o de respuesta rápida. Este tipo de formulaciones permiten realizar simulaciones de dispersión con un coste computacional relativamente bajo y unos tiempos de cálculo reducidos, por lo que habitualmente han formado parte de sistemas de soporte a la decisión donde los tiempos de respuesta son un requisito fundamental.

Los modelos de dispersión operacionales son capaces de generar resultados válidos en una gran variedad de escenarios de estudios, así como en la mayor parte de localizaciones donde habitualmente se ubican gran parte de las instalaciones industriales contaminantes. Además, como prueba de su buen desempeño y amplia aceptación, varios organismos medioambientales recomiendan o incluso imponen el uso de un modelo específico para la realización de los estudios de dispersión que se exigen para solicitar o renovar los permisos de emisión a la atmósfera en instalaciones industriales.

Sin embargo, la evidencia científica de las últimas décadas ha puesto de manifiesto que el comportamiento de los modelos de respuesta rápida empeora de forma notable bajo determinadas condiciones. Los escenarios que presentan relieves complejos y abruptos son una de las situaciones más problemáticas para este tipo de modelos, que pueden suponer un deterioro importante en los resultados de dispersión obtenidos. En presencia de terrenos abruptos, la compleja interacción que

se produce entre la superficie de este último y el viento incidente puede dar lugar a la formación de zonas de recirculación del flujo, de forma similar a como sucede en escenarios urbanos con edificios de grandes alturas. Ante la aparición de fenómenos complejos de flujo, es necesario emplear modelos capaces de simular adecuadamente los procesos físicos subyacentes. Sin embargo, los modelos operacionales no cumplen este requisito, ya que están basados en formulaciones empíricas e hipótesis simplificadas, lo que explica su peor comportamiento en este tipo de escenarios.

En consecuencia, confiar únicamente en el uso de modelos de respuesta rápida puede no ser suficiente para comprender el impacto de la contaminación de las chimeneas industriales cuando éstas se sitúan en entornos singulares y complejos. En estos casos singulares, los gases emitidos pueden verse afectados por fenómenos complejos del flujo, alterando el comportamiento esperado de la pluma de forma similar a lo que sucede con las chimeneas situadas en entramados urbanos. Estos casos complejos deben ser abordados con técnicas de modelización más avanzadas como son los modelos CFD. De otro modo, la influencia de las zonas de recirculación y fenómenos complejos del flujo podrían no estar teniéndose en cuenta de forma adecuada en las simulaciones, comprometiendo así la efectividad del diseño de la chimenea o los resultados del estudio de impacto.

Esta tesis doctoral se ha centrado en el desarrollo de un modelo CFD para estudiar la dispersión de contaminantes desde una instalación industrial. La localización y características del caso de estudio elegido cumple los criterios de singularidad y complejidad previamente explicados que conllevan la necesidad de uso de modelos capaces de simular los procesos físicos como es el CFD. El caso de estudio consiste en una planta química ubicada en el fondo de un valle, con formaciones montañosas muy próximas a la instalación que presentan una elevación que supera ampliamente la altura de la fuente emisora principal.

En el estudio, se concede especial atención a la ocurrencia de fenómenos del flujo con potencial de afectar el comportamiento de la pluma de contaminación y la efectividad de dilución de la chimenea bajo dichas condiciones.

Por otro lado, aprovechando la versatilidad de los modelos CFD para llevar a cabo estudios paramétricos, se ha propuesto una medida de mitigación de impacto contaminante para su simulación en el modelo CFD, con el objetivo de poder evaluar su efectividad. La medida propuesta ha sido la regulación del uso de los sistemas de recuperación de calor de la instalación. Este tipo de sistemas se ha vuelto muy popular en industrias de todo tipo que incluyen procesos de combustión por su potencial para reducir el consumo de combustible y mejorar la eficiencia energética del proceso. Sin embargo, es un hecho que la reducción de la temperatura de salida de los gases por las fuentes industriales conlleva así mismo una reducción de la inercia de los mismos, lo que perjudica a los mecanismos de dispersión haciendo que los contaminantes lleguen a nivel de suelo en distancias más próximas a la fuente y en una concentración superior. Para evaluar la efectividad de dicha medida, se

propone la ejecución de nuevas simulaciones variando la temperatura de salida de los gases de forma que permita observar el impacto de este parámetro en el comportamiento de la pluma contaminante.

En este punto, es importante hacer énfasis en que el desarrollo de un modelo CFD no resulta una tarea trivial. Una revisión de algunos de los estudios más citados de la literatura revela rápidamente cuáles son las principales dificultades a las que se debe hacer frente cuando se desea aplicar este tipo de modelos al estudio de la atmósfera. La peculiaridad de la capa límite atmosférica hace que la creación de modelos numéricos CFD, presente sus propias dificultades y peculiaridades. En consecuencia, muchos de los supuestos y prácticas frecuentemente adoptadas en estudios de flujos industriales, ámbito de aplicación por excelencia del CFD, no resultan válidos en escenarios atmosféricos, con condiciones muy alejadas respecto a los anteriores.

Por ser esta una cuestión de gran importancia para la construcción de un modelo numérico robusto, se le ha concedido una especial dedicación en la presente investigación, especialmente en lo que respecta a la definición de la metodología y al enfoque seguido en la revisión del estado del arte. Así mismo, se debe destacar el hecho de que se ha intentado recurrir, en la medida de lo posible, al uso de datos procedentes de fuentes públicas y recursos libres. Aunque no ha sido posible extender esta práctica a la totalidad del proceso, se ha tratado de implementar lo máximo posible para poder acercar la metodología a otros investigadores del ámbito que deseen aplicarla en sus estudios, tratando así de limitar la dependencia de recursos menos accesibles o que sólo pueden ser facilitados por determinados entes privados.

La metodología diseñada para el desarrollo del modelo CFD se ha testado contra una base de datos experimental de túnel de viento, permitiendo así la validación del modelo de forma previa a la aplicación al caso de estudio real.

A continuación, se detallan las distintas secciones en las que se ha estructurado el presente documento de tesis doctoral, junto con una descripción de los contenidos más relevantes que se pueden encontrar en cada una de ellas.

A la presente sección “1. Introducción”, le sucede el apartado denominado “2. Objetivos”, en el que se exponen la motivación y los principales objetivos que persigue la presente tesis doctoral.

Seguidamente se tiene la sección “3. Antecedentes”, en la que se recopila información de relevancia relativa a la atmósfera terrestre y sus particularidades. Este apartado pretende proporcionar la base para comprender muchas de las implicaciones asociadas a la tarea de la modelización atmosférica, así como los pasos fundamentales del proceso de dispersión de contaminantes. Esta sección se complementa además con una breve consideración del contexto legislativo de aplicación, responsable en muchos casos de la decisión por parte de las industrias contaminantes de aplicar modelos de dispersión de contaminantes.

Posteriormente se encuentra la sección “4. Estado del arte”, la cual se encuentra dividida en dos partes diferenciadas. En la primera parte se realiza una comparación entre la aplicación de modelos CFD y los denominados modelos operacionales o de respuesta rápida para dispersión de contaminantes en escenario industrial, justificando la elección de los primeros en el presente trabajo. La segunda parte consiste en una revisión del estado del arte de aplicación de modelos CFD al estudio de flujo y dispersión atmosférica en escenarios urbanos e industriales durante las últimas cinco décadas, sentando así las bases para el desarrollo de los trabajos en sucesivas secciones.

En la sección “5. Descripción del caso de estudio” se presenta de forma detallada el caso de estudio elegido, justificando además el interés que dicha selección tiene para los objetivos de la investigación. También se facilitan los principales valores necesarios para la ejecución de las simulaciones y, en caso de ausencia de estos últimos, se exponen los métodos de cálculo seguidos para su estimación. Finalmente, se realiza la selección del conjunto de escenarios de cálculo considerados en la ejecución de las simulaciones.

La sección “6. Metodología” es la más extensa del todo el documento y recoge de forma detallada la descripción de la metodología para el desarrollo del modelo CFD, que es el principal objetivo de la presente investigación. Cada una de las fases necesarias para desarrollar este tipo de modelos ha sido abordada de forma individual en su correspondiente subsección, con un énfasis especial en las etapas de generación del dominio geométrico y el mallado. El diseño de la metodología se ha realizado y justificado en base a una extensa revisión del estado arte de la literatura y evidencia científica de las últimas décadas. De esta forma, el lector podrá identificar pequeñas revisiones del estado del arte individuales asociadas a cada una de las etapas de desarrollo del modelo en sus diferentes subsecciones. Esta tarea se ha realizado con un enfoque de revisión crítica, seleccionando las mejores prácticas en los casos en los que ha sido posible y justificando la no adopción de las mismas en otras cuestiones del modelo en las que, por la naturaleza del caso de estudio elegido, no resulta viable su aplicación.

En la sección “7. Validación” se puede encontrar la descripción del proceso de validación del modelo, siendo la única excepción en las etapas de desarrollo del modelo que no ha sido incluida dentro de la sección anterior. La validación es un paso fundamental en la aplicación de un modelo numérico, ya que permite determinar la coherencia y veracidad del modelo para reflejar la realidad que se intenta representar. Para ello, se ha utilizado un caso de simulación física de flujo y dispersión en túnel de viento procedente de una base de datos experimental pública.

A continuación, la sección “8. Resultados y discusión” muestra los resultados obtenidos en las simulaciones de los distintos escenarios de estudio considerados y su análisis. Los resultados se presentan en distintos formatos de utilidad, como son los gráficos de contornos o las denominadas iso-superficies de valores, ambos muy frecuentes en este tipo de estudios CFD. Con estas

representaciones se pretende prestar especial atención a la morfología e impacto de la pluma contaminante sobre el terreno circundante, así como a los fenómenos de recirculación del flujo.

Tras la exposición de los resultados, la sección final “9. Conclusiones” hace una recopilación de las principales conclusiones derivadas de la investigación, tanto en lo que respecta a los resultados de las simulaciones, como a la experiencia derivada de la aplicación y desarrollo de la metodología. En esta sección se observan, además de los resultados de dispersión normales, el impacto de la regulación de los recuperadores de calor, práctica elegida como medida de mitigación de la contaminación en determinados escenarios meteorológicos.

Por último, en este trabajo se ha incluido una sección denominada “10. Líneas de investigación futura” en el que, como su nombre indica, se exponen posibles líneas de investigación futura y de mejora y ampliación de los objetivos del trabajo.

Como comentario final, se desea resaltar el hecho de que no abundan en la literatura ejemplos de estudios que aborden el impacto de localizaciones y condiciones singulares sobre los mecanismos de dispersión de contaminantes. De forma más específica, no se han identificado casos previos de estudios centrados en la aparición de fenómenos de recirculación del flujo causados por las características del relieve y la afección de estos últimos al comportamiento de una pluma contaminante en el ámbito industrial. Por lo tanto, el abordaje de estas dos cuestiones de forma simultánea mediante el desarrollo de un modelo CFD constituye la principal contribución al estado del arte de esta tesis doctoral.

2 Objetivos

2 Objetivos

La motivación de esta tesis doctoral se encuentra en ayudar a las industrias contaminantes a comprender mejor el impacto de sus emisiones atmosféricas, así como facilitar la implantación de medidas para minimizar dichos impactos y acogerse a las exigencias normativas en materia medioambiental.

El objetivo fundamental de esta tesis es investigar el diseño y desarrollo de una metodología de apoyo a la toma de decisiones sobre protocolos de actuación para la mitigación de eventos no esperados relacionados con la dispersión de contaminantes en entornos industriales. Este objetivo general se puede descomponer en los siguientes objetivos específicos.

- Identificar escenarios singulares de dispersión de contaminantes en la atmósfera que determinen la necesidad de uso de modelos de dinámica de fluidos computacional (CFD) frente a los modelos operacionales o empíricos, generalmente mucho más extendidos. Dichos escenarios se caracterizarán por condiciones físicas que dan lugar a fenómenos de flujo cuya complejidad hace necesaria la simulación de los procesos físicos involucrados. Así mismo, se seleccionará un caso de estudio que reúna las características identificadas para su análisis mediante CFD.
- Desarrollar una metodología que permita el desarrollo de modelos CFD para el estudio de la dispersión de contaminantes desde fuentes industriales localizadas en entornos singulares. Dicha metodología cubrirá las distintas fases de creación de un modelo numérico, atendiendo a las particularidades que presenta la modelización de la capa límite atmosférica. Dichas particularidades están relacionadas con la escala y magnitud de las características del flujo, muy distintas de la mayoría de las simulaciones de fluidos en escenarios industriales. La metodología planteada deberá abordar cada uno de estos aspectos particulares de una forma adecuada.
- Simular y analizar el resultado de la emisión de contaminantes del caso de uso seleccionado en un conjunto de escenarios. Estos escenarios se determinarán a partir del estudio de las condiciones meteorológicas del entorno, prestando especial atención a aquellas condiciones

de viento que puedan producir fenómenos de recirculación del flujo, lo que puede dar lugar a comportamientos inesperados y complejos en el transporte de los contaminantes.

- Analizar la eficacia de protocolos de actuación propuestos para reducir el impacto de los contaminantes emitidos. Como se verá más adelante, la medida elegida consiste en la actuación sobre los recuperados de calor instalados en los circuitos de combustión. La regulación de estos sistemas permitirá aumentar las temperaturas de salida de los gases, lo que se traducirá en una mayor velocidad y dispersión de los mismos en la atmósfera. Mediante este análisis, las industrias emisoras pueden llegar a un balance entre el aumento del coste energético y la reducción del impacto contaminante, necesario cuando se den las condiciones meteorológicas desfavorables para la dispersión identificadas en el objetivo anterior.

3 Antecedentes

3 Antecedentes

La atmósfera es un sistema de vital importancia para la vida en la Tierra, actuando como escudo protector contra la radiación ultravioleta y ayudando a regular la temperatura del planeta. Para los seres vivos, la atmósfera también juega un papel fundamental en cuanto a la provisión de oxígeno y de dióxido de carbono para la fotosíntesis de las plantas.

3.1 Atmósfera, composición y contaminación.

A nivel estructural, la atmósfera consiste en una capa gaseosa o mezcla de gases que envuelve el planeta y se extiende hasta una altura de 600 km de altitud. Dentro de su estructura se pueden distinguir cinco regiones o subcapas, que se definen a partir de su perfil térmico vertical, incluyendo gradientes de temperatura tanto positivos como negativos. Las distintas capas que la componen, de acuerdo a los datos del Servicio Nacional de Meteorología americano [4], son las siguientes.

- **Troposfera.** Es la capa más cercana a la superficie y se extiende hasta los 6-20 km de altitud, aunque esta distancia es variable según se considere la región del Ecuador (18-20 km) o los polos (6 km). En esta capa, la temperatura disminuye con la altura hasta su límite superior, la denominada tropopausa, donde alcanza los -51 °C. Los fenómenos meteorológicos más importantes ocurren en esta capa.
- **Estratosfera.** Esta capa se encuentra por encima de la troposfera y se extiende hasta unos 50 km. En ella la temperatura aumenta con la altura hasta un valor cercano a -15 °C en su límite superior, denominado estratopausa. La mayor parte del ozono atmosférico se concentra en esta región, por lo que también se la conoce comúnmente como capa de ozono. El proceso de formación del ozono es el responsable de la liberación de calor que da lugar al aumento de temperatura. La troposfera y estratosfera concentran conjuntamente el 99% de la masa de los gases atmosféricos.
- **Mesosfera.** Se sitúa sobre la estratosfera y en ella la temperatura disminuye con la altura hasta su límite superior, la mesopausa, que se sitúa a unos 85 km de altitud con una temperatura del orden de -120 °C.

- **Termosfera.** Se extiende hasta los 600 km y en ella se localizan los satélites. La temperatura comienza a aumentar de nuevo con la altura.
- **Exosfera.** Es la última capa de la atmósfera y tiene un espesor muy fino.

En este punto cabe destacar que el interés de este trabajo se centra en la troposfera, por ser la capa en la que se produce la dispersión y reacción de la mayor parte de los contaminantes y la interacción directa con la biosfera. En la troposfera, los gases y aerosoles que la componen se mezclan y cambian constantemente.

Atendiendo de forma más detallada a la composición atmosférica, se puede distinguir entre componentes constantes, cuya proporción permanece inalterada, y componentes variables cuya concentración varía en el tiempo y el espacio. Así mismo, la composición atmosférica varía con la altura, siendo especialmente notable la variación en la concentración del vapor de agua, que se tiende a concentrar en las capas más próximas a la superficie. La Tabla 1 recoge la composición típica media atmosférica según datos de la Agencia Espacial de los Estados Unidos (NASA) [5].

Componentes principales	
Compuesto	Concentración
Nitrógeno (N ₂)	78.08%
Oxígeno (O ₂)	20.95%
Componentes menores	
Compuesto	partes por millón (ppm)
Argón (Ar)	934
Dióxido de carbono (CO ₂)	415
Neón (Ne)	18.18
Helio (He)	5.24
Metano (CH ₄)	1.7
Criptón (Kr)	1.14
Vapor de agua (H ₂ O)	0.55

Tabla 1. Composición atmosférica.

Teniendo en cuenta esta composición típica, se puede definir la contaminación atmosférica como la presencia en el aire de materias o formas de energía en concentraciones elevadas sobre su nivel ambiental normal, de forma que supongan un riesgo, daño o molestia para los seres vivos. El origen de estas sustancias contaminantes que se producen en forma de emisiones a la atmósfera puede ser natural o artificial.

- **Origen natural.** Sustancias originadas por la actividad biológica de la biosfera, la actividad geológica de la Tierra, procesos como incendios de causa natural o impactos de asteroides y el intercambio estratosférico-troposférico.
- **Origen antrópico o artificial.** La actividad antropogénica, como la quema de biomasa y los combustibles fósiles, también constituye una importante fuente de gases con un notable impacto en la química troposférica. De hecho, se cree que la actividad humana ha sido la causa del aumento de los gases de efecto invernadero (GEI) en la atmósfera durante los últimos 150 años. La emisión antropogénica de gas más significativa es la de dióxido de carbono (CO_2) procedente de la quema de combustibles fósiles, seguida del metano (CH_4).

Además de su procedencia, los contaminantes también pueden clasificarse de acuerdo a su tipología.

- **Contaminantes primarios.** Son aquellos que proceden directamente de las fuentes de emisión y son responsables de la mayor parte de la contaminación atmosférica.
- **Contaminantes secundarios.** Estos contaminantes se forman por interacción química entre los propios contaminantes primarios o entre estos últimos y otros agentes atmosféricos tales como la radiación solar y el vapor de agua, originándose compuestos nuevos.

La Agencia Europea del Medioambiente [6] identifica los siguientes contaminantes primarios principales:

- Partículas sólidas (PM). Se puede distinguir entre partículas finas con un diámetro inferior a 2.5 micras ($\text{PM}_{2.5}$) y diámetros inferiores a 10 micras (PM_{10}).
- Óxidos de azufre (SO_x).
- Óxidos de nitrógeno (NO_x).
- Amoníaco (NH_3).
- Monóxido de carbono (CO).
- Metano (CH_4).
- Compuestos orgánicos volátiles (COVs) como el benceno (ben).
- Hidrocarburos policíclicos como el benzopireno (BaP).

Entre los contaminantes secundarios se encuentran, además de algunos compuestos ya listados como contaminantes primarios, el ozono (O_3) que a nivel de la superficie se forma a consecuencia de las reacciones químicas de otros gases en presencia de la luz solar.

Por otro lado, cuando se habla de contaminación atmosférica es importante distinguir entre dos conceptos.

- **Inmisión.** Concentración de contaminantes en un instante o periodo determinado a nivel de suelo. Los valores de inmisión son objeto de la directiva de calidad del aire.

- Emisión. Cantidad de contaminante vertido a la atmósfera desde un foco. Los valores de emisión son objeto de la directiva de emisiones industriales.

3.2 Dispersión de contaminantes en la atmósfera

Los distintos contaminantes atmosféricos vertidos a la atmósfera sufren un proceso de dispersión a través del aire, dando lugar a cambios en las concentraciones de dichos compuestos que varían tanto en altura como a lo largo del espacio. En general, la mayor parte de los contaminantes se difunde hacia la parte baja de la atmósfera, región donde están sometidos a la acción química de otras especies presentes y a la acción física de los fenómenos meteorológicos que abundan en esta zona [7].

El proceso de dispersión de los contaminantes emitidos a la atmósfera consta de diversas etapas. En primer lugar, los contaminantes emitidos sufren un primer proceso de mezcla a causa de la turbulencia atmosférica, favorecida esta última por la interacción de la atmósfera con la superficie terrestre. Este proceso tiene lugar en la zona más baja de la troposfera, que se denomina capa de mezcla. Los contaminantes que no llegan a traspasar esta capa poseen tiempos de vida cortos y regresan a la superficie de la tierra en un lugar relativamente cercano a la emisión, aunque pueden sufrir alguna transformación química en su trayectoria [8].

La altitud a la que se encuentra la capa de mezcla es muy variable, pero en general se puede situar entre los 50 metros y los 3 kilómetros de altitud [9], [10]. No obstante, lo habitual es que se sitúe en torno a unos 2 km durante el día y unos centenares de metros durante la noche. Cuando el nivel de turbulencia es elevado, se favorece el contacto íntimo entre contaminantes provocando una distribución homogénea de los mismos en toda la capa de mezcla. En este proceso, los contaminantes son libres de desplazarse, tanto vertical como horizontalmente, gracias a las turbulencias que se generan en las capas bajas de la atmósfera [7]. Por definición, la dispersión turbulenta es un fenómeno que se caracteriza por la combinación de los términos de difusión y advección turbulentas, mecanismos muy dependientes de las características del flujo en cuestión [8].

- Advección. Movimiento de las partículas contaminantes que se produce a lo largo del grueso del flujo. Se produce por incorporación de los contaminantes a las masas circulantes de aire que generalmente dan lugar a una distribución homogénea de los contaminantes en una extensa región horizontal de la atmósfera. No obstante, los gradientes térmicos hacen que también se produzcan movimientos convectivos o ascensionales de las masas de aire, lo que también contribuye a su dispersión.
- Difusión. Movimiento neto de partículas desde zonas de concentración elevada a otras con menor concentración.

Estos términos se encuentran presentes en la ecuación que describe el transporte de contaminantes en un fluido (ecuación de transporte), que se deriva de la ley de conservación de la masa de un componente de concentración C . En flujos turbulentos, la forma de la ecuación de transporte más extendida en el ámbito de la dispersión atmosférica se muestra en la expresión (1), la cual indica la variación de la concentración de una especie determinada con el tiempo.

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = -\nabla(\bar{v}\bar{c}) + S_c + D_c \nabla^2 \bar{c} - \frac{\partial(u'c')}{\partial x} - \frac{\partial(v'c')}{\partial y} - \frac{\partial(w'c')}{\partial z} \quad (1)$$

La parte derecha de la expresión (1) describe el proceso de advección, los términos de fuente o entrada de concentraciones en el modelo, la difusión molecular y los flujos turbulentos horizontal y vertical, respectivamente. Dado que en la atmósfera la mezcla turbulenta es varios órdenes de magnitud más efectiva que la difusión molecular, el tercer componente de la expresión (1) se puede eliminar generalmente, excepto en el caso de flujos laminares.

Siguiendo con el ciclo de dispersión, la distancia a la que los contaminantes se alejan de los focos emisores dependerá en mayor o menor medida de su estabilidad química y del medio reactivo que vaya encontrando en su trayectoria. Además, la influencia de la dispersión turbulenta va ganando peso a medida que el flujo se aleja de la fuente emisora, siendo menos importante en las proximidades del foco. Posteriormente, los contaminantes pueden retornar a la superficie terrestre o bien sufrir transformaciones químicas, dando lugar a los ya mencionados contaminantes secundarios. La última etapa del ciclo de los contaminantes consiste en el retorno de los contaminantes a la superficie terrestre por una de las dos vías posibles [8]. Una de ellas consiste en la deposición húmeda, mediante la cual los contaminantes son transferidos a la superficie terrestre en forma acuosa, ya sea incorporados en el agua de lluvia, en la nieve o en la niebla. La otra vía de retorno consiste en la transferencia directa, por acción de la gravedad, del gas o de la partícula a la superficie terrestre (deposición seca). La Figura 1 muestra esquemáticamente la forma de estos dos mecanismos de eliminación de los contaminantes del aire.

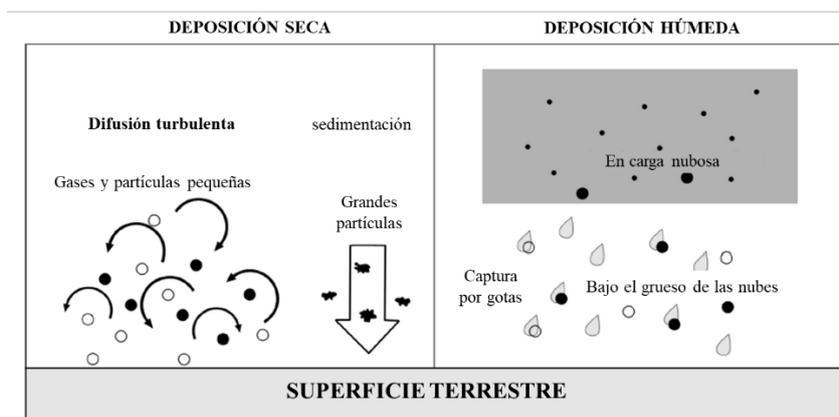


Figura 1. Mecanismos de deposición de partículas contaminantes. Fuente: traducción de [8].

Cabe señalar que los contaminantes emitidos por el hombre son, en general, muy solubles, debido a que son los que suelen estar en forma oxidada, con lo que la transferencia a la superficie terrestre ocurre principalmente, por deposición húmeda.

A diferencia de lo que ocurre por debajo de la capa de mezcla, en la zona superior de la troposfera y en la estratosfera los movimientos de las masas de aire son mucho más regulares. En la práctica, se pueden distinguir en esta zona unos modelos de circulación global que afectan a todo el planeta. Los contaminantes que se incorporan a estos movimientos convectivos de las masas de aire se desplazan grandes distancias antes de regresar a la superficie terrestre. En consecuencia, los efectos de dichos contaminantes se pueden sentir en lugares remotos al foco emisor, por lo que se habla entonces de contaminación transfronteriza. Un ejemplo representativo corresponde a la lluvia ácida ya que los óxidos de azufre y de nitrógeno generados pueden desplazarse grandes distancias, manifestándose las consecuencias de su vertido en lugares muy alejados del foco emisor, incluso en países distintos al de la emisión de origen [7]. No obstante, el comportamiento de los contaminantes en la estratosfera no será objeto de estudio en esta tesis, ni tampoco lo serán las zonas altas de la troposfera, ya que la región de interés para los objetivos de la investigación es la capa de mezcla, siendo esta subcapa concreta de la troposfera la que se pretende simular con un modelo numérico en el presente trabajo.

3.3 Consideraciones para la modelización atmosférica

Se denomina capa límite atmosférica a la parte más baja de la atmósfera que se forma debido a la interacción de esta última con la superficie planetaria a través de una escala temporal de un día o menos [9]. Se puede considerar que esta capa comprende una porción igual al 10% más bajo de la troposfera.

Una forma interesante de analizar la estructura del flujo atmosférico se basa en la teoría enunciada por el físico Prandtl en 1904 [11]. Según esta teoría, en fluidos poco viscosos como el aire, el flujo puede dividirse en dos regiones diferenciadas. Por un lado, se genera una capa viscosa y fina en las proximidades de las superficies sólidas. En esta capa, conocida como capa límite superficial, los efectos viscosos tienen gran importancia. Por otro lado, el flujo presenta una región exterior sobre la cual resulta de aplicación las ecuaciones de Euler y Bernoulli. La realización de ensayos con túneles de viento durante las últimas décadas sirvió para confirmar la teoría de que la atmósfera presenta dos regiones diferenciadas. En la región externa, también conocida como capa de Ekman o atmósfera libre, el flujo apenas se ve afectado por las características de la superficie terrestre y el efecto de Coriolis derivado de la rotación terrestre afecta de forma significativa. En cambio, en la región interna del flujo, también conocida como capa superficial, el flujo depende en gran medida de las características de la superficie sobre la que se desarrolla y no se ve afectado apenas por la rotación. La Figura 2 muestra de forma gráfica la distribución de las distintas regiones atmosféricas.

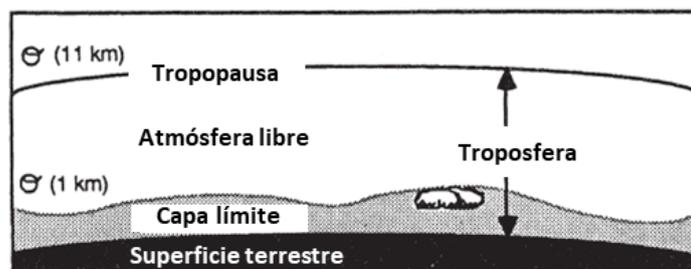


Figura 2. División de la troposfera en dos regiones, la capa límite cercana a la superficie y la atmósfera libre. Fuente: traducción de [9].

La adopción del término de capa límite en las ciencias atmosféricas surgió como resultado de la aplicación de las teorías desarrolladas para fluidos al escenario de la atmósfera real.

La teoría de Prandtl sobre la capa límite atmosférica también describe a esta última como una región en la que la velocidad del fluido aumenta desde cero a nivel de la superficie hasta un valor máximo, prácticamente constante, en la parte superior de la misma [11]. El espesor de esta capa se denomina altura de gradiente. Por encima de esta altura, se tiene la citada capa de Ekman, en la cual el viento característico de esta zona se conoce como viento geostrofico [12].

La capa límite atmosférica se caracteriza por la presencia de fenómenos turbulentos, los cuales se generan normalmente por efecto del rozamiento del viento con la superficie terrestre. Los gradientes térmicos también juegan un papel importante en la atmósfera, pudiendo contribuir a la generación o, por contra, la supresión de los niveles de turbulencia [13]. Además, la variedad de escalas de vórtices que se puede encontrar es muy amplia, contribuyendo cada una de ellas a su manera en el transporte y difusión de contaminantes.

Un aspecto interesante derivado de este fenómeno es la variabilidad del espesor de la capa de mezcla a lo largo del día, con alturas que pueden variar desde los 50 m hasta los 3 km [9], [10]. Durante el día, la luz solar calienta la superficie terrestre y transmite el calor a la atmósfera por convección. El aire caliente tiende a ascender mientras que el aire más fresco tiende a bajar a la superficie, produciéndose así un movimiento de masas de aire que resulta en estructuras de vórtices. En estas circunstancias, existe una gran turbulencia a lo largo de todo el espesor de la capa de mezcla durante el día, que aumenta de espesor y da lugar a lo que se conoce como estratificación atmosférica inestable. Por el contrario, durante la noche se produce el enfriamiento tanto de la superficie como de la atmósfera, lo que suprime la turbulencia [13]. En esta situación, las capas de aire más frío se encuentran en la parte más baja de la atmósfera mientras que las más calientes se situarán por encima sin existir mezcla o intercambio de masa entre las mismas. Esta condición atmosférica se conoce como estratificación estable y en ella el espesor de la capa límite atmosférica se reduce. La representación del aspecto y los fenómenos que se experimentan en la capa de mezcla durante el día y la noche se pueden observar en la Figura 3.

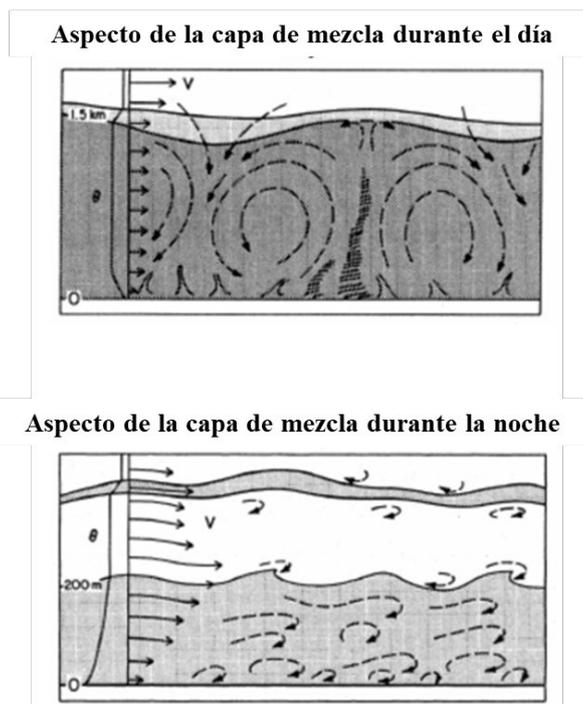


Figura 3. Representación del aspecto y distribución de los fenómenos de flujo que se producen en la capa de mezcla durante el día (arriba) y durante la noche (abajo) a consecuencia de la variación de los fenómenos térmicos. Fuente: adaptación de [13].

Además de estas dos condiciones atmosféricas, existe un tercer estado atmosférico posible que se denomina condición neutra o neutralmente estratificada. Cuando la intensidad de los vientos es suficientemente grande, los efectos térmicos se vuelven despreciables en comparación, por lo que la turbulencia se genera principalmente por medios mecánicos y no por gradientes térmicos. El flujo neutro, en el cual los efectos de flotación (*buoyancy effects*) por gradientes térmicos se consideran despreciables, es la condición que se reproduce de forma más habitual en los ensayos en túnel de viento. Aunque en la realidad no es habitual que se produzca esta condición, ya que se trata más bien de una idealización del estado de la atmósfera, es una de las condiciones más utilizadas en estudios de viento y en la práctica se puede aproximar a un estado de fuertes vientos en un día completamente cubierto de nubes [10].

Es importante tener en cuenta esta distinción para fijar el tipo de simulaciones que se van a llevar a cabo, definiéndose así lo que se conoce como atmósferas neutras (sin efectos térmicos), atmósferas estables (estratificación de las masas de aire en capas estables) o atmósferas inestables (estratificación inestable que da lugar a movimientos verticales entre capas por diferencias térmicas). Para definir el estado atmosférico en función de las condiciones meteorológicas predominantes resulta muy útil la clasificación de Pasquill [14]. Esta clasificación, recogida en la Tabla 1, define 6 tipos de clases de estabilidad de la atmósfera distintas en función de parámetros meteorológicos: muy inestable (A), inestable (B), ligeramente inestable (C), neutra (D), ligeramente estable (E) y estable (F).

Velocidad superficial del viento	Día (insolación diurna)			Noche (horas nocturnas)	
	Fuerte	Moderado	Ligero	Cielo cubierto de capa de nubes finas o neblina	Cielo cubierto más denso
< 1 m/s	A	A	B	E	F
1 – 3 m/s	A	B	C	E	F
3 – 5 m/s	B	C	C	D	E
5 – 8 m/s	C	D	D	D	D
> 8 m/s	D	D	D	D	D

Tabla 2. Clases de estabilidad atmosférica de Pasquill.

Atendiendo a la clasificación de Pasquill se puede observar que velocidades a partir de 5 m/s implican generalmente una condición de atmósfera neutra.

No obstante, las características de la atmósfera también se pueden analizar en función de los principales números adimensionales estudiados en mecánica de fluidos. Uno de los parámetros adimensionales más significativos en el ámbito de los estudios atmosféricos es el número de Richardson por su relevancia en la descripción de los procesos de mezcla turbulenta. El número de Richardson representa el cociente entre los términos inerciales o mecánicos y los términos de empuje o efectos térmicos según la expresión (2).

$$Ri = \frac{g}{\rho_0} \frac{\frac{\partial \rho}{\partial z}}{\left(\frac{\partial v}{\partial z}\right)^2} \quad (2)$$

donde g es la aceleración de la gravedad, ρ_0 la densidad del fluido, v la velocidad del fluido y z la coordenada vertical. El equilibrio desestabilizado por el gradiente de velocidad es contrarrestado por el empuje debido al gradiente de densidad. Números de Richardson elevados implican gradientes de densidades importantes en relación a los gradientes de velocidades, por tanto, se asocian con flujos laminares estables. En la atmósfera, la abundancia de fenómenos turbulentos denota números de Richardson pequeños, por debajo de 0, que son indicativos de un flujo inestable con fuertes movimientos térmicos. En cambio, para atmósferas neutras este valor se sitúa típicamente entre 0 y 0.25, lo que implica una situación de menor turbulencia.

Otros parámetros adimensionales de interés de cara a la caracterización del flujo atmosférico son los números de Mach, Prandtl y Schmidt. El primero se define como el cociente entre la velocidad del fluido y la velocidad del sonido a través del mismo, relación que arroja un valor bajo en el caso de estudios de capa límite atmosférica. El número de Mach tiene implicaciones de cara a la caracterización de la dispersión de gases en la atmósfera como se verá durante el presente trabajo. El número de Prandtl es un parámetro adimensional proporcional al cociente entre la velocidad de

difusión de la cantidad de momento (viscosidad cinemática) y la difusividad térmica (calculada en base a la conductividad térmica del fluido y el calor específico).

Por su parte, el número de Schmidt se considera a la transferencia de masa lo que el número de Prandtl a la transferencia de calor. De esta forma, el número Schmidt se expresa como el cociente entre la difusividad turbulenta del momento y la difusividad o transporte turbulento de la masa. La importancia de estos números en el estudio de la capa límite atmosférica reside en la necesidad de especificar estos valores en el modelo para poder realizar las simulaciones. Aunque generalmente se insertan en el modelo como valores constantes, la realidad es que son una función de las condiciones del flujo en cada instante. Las expresiones de los números de Prandtl y Schmidt se observan en las expresiones (3) y (4).

$$Pr = \frac{\mu \cdot c_p}{K} \quad (3)$$

$$Sc = \frac{\mu}{D \cdot \rho} \quad (4)$$

donde μ es la viscosidad dinámica, c_p el calor específico, D es la difusividad de la masa y K es la conductividad térmica.

Por último, otro de los números adimensionales más importantes a analizar para la caracterización de la capa límite atmosférica es el número de Reynolds. Es el parámetro más utilizado para establecer la diferencia entre flujos laminares y turbulentos y se define como el cociente entre las fuerzas de inercia y las fuerzas viscosas según la expresión (5).

$$Re = \frac{v \cdot L \cdot \rho}{\mu} \quad (5)$$

donde L es la escala de longitud característica del flujo.

De forma orientativa, se considera que números de Reynolds inferiores a 2300 denotan flujo laminar, mientras que números de Reynolds superiores a 4000 son indicativos del régimen turbulento. Los valores situados entre medias corresponderían al régimen de transición. No obstante, en la realidad el paso de un régimen a otro puede producirse a distintos valores del número de Reynolds dependiendo de otras condiciones del flujo.

En el caso del estudio de la capa límite atmosférica, la baja viscosidad cinemática del aire unido a valores de velocidad generalmente elevados dan como resultado números de Reynolds muy elevados, generalmente del orden de 10^5 , denotando indudablemente un régimen turbulento. Este dato concuerda con la afirmación realizada al inicio de esta sección de que la capa límite atmosférica se caracteriza por la presencia de un alto nivel de turbulencia.

Un valor muy elevado del número de Reynolds es precisamente uno de los factores que explican la dificultad asociada a la modelización de la capa límite atmosférica en estudios de aerodinámica. Esta

circunstancia hace necesario la utilización de mallados de alta resolución, especialmente en zonas cercanas a las paredes, así como el uso de funciones de pared robustas, tal y como se verá en el presente trabajo. Además, en estudios realizados en entornos urbanos es común la presencia de obstáculos como edificios u otras infraestructuras urbanas cuyas geometrías presentan aristas y bordes pronunciados. Cuando el flujo pasa sobre este tipo de obstáculos es común la aparición de vórtices, zonas de estancamiento y separación del flujo, desprendimiento de vórtices y otros fenómenos que hacen que su naturaleza sea muy compleja. La simulación de este tipo de escenarios presenta dificultades de tipo numérico y consecuencias para los esquemas de discretización.

Todas estas particularidades y dificultades presentadas han sido tenidas en cuenta en la realización del presente trabajo, que persigue la correcta modelización de la capa límite atmosférica en escenarios particulares. Uno de los objetivos de esta investigación ha sido el de desarrollar una metodología que permita obtener un modelo adecuado para simular este tipo de problemas, lo que necesariamente ha llevado a considerar y abordar las dificultades descritas en el diseño de dicha metodología.

3.4 Contaminación y contexto legislativo

Por su relevancia en relación con los objetivos del presente trabajo, se ha incluido un apartado de contexto legal de aplicación al ámbito en materia ambiental y de emisiones contaminantes en el ámbito industrial. Este contexto legal impone en muchas ocasiones a las empresas contaminantes la necesidad de llevar a cabo estudios de dispersión como el que se persigue en la presente investigación. Este contexto legal se puede analizar desde distintas escalas.

A nivel europeo, destaca la Directiva 2010/75/UE del Parlamento Europeo y del Consejo de 24 de noviembre de 2010 sobre las emisiones industriales (prevención y control integrados de la contaminación). Esta Directiva obliga a determinadas instalaciones industriales con mayor potencial de contaminación (recogidas en su Anexo I) a la adopción de medidas de prevención de la contaminación mediante la aplicación de las Mejores Técnicas Disponibles (MTD), entre otras exigencias, que buscan evitar o reducir en la medida de lo posible las emisiones a la atmósfera, agua y suelo.

A nivel nacional, esta Directiva se transpone al ordenamiento jurídico a través del Real Decreto Legislativo 1/2016, de 16 de diciembre, por el que se aprueba el texto refundido de la Ley de prevención y control integrados de la contaminación (Ley IPPC). Esta ley está desarrollada en parte por el Real Decreto 815/2013, de 18 de octubre, por el que se aprueba el Reglamento de emisiones industriales y de desarrollo de la Ley 16/2002, de 1 de julio, de prevención y control integrados de la contaminación.

También a nivel nacional es importante destacar el Real Decreto 508/2007, de 20 de abril, por el que se regula el suministro de información sobre emisiones del Reglamento E-PRTR y de las autorizaciones ambientales integradas. PRTR-España es el Registro Estatal de Emisiones y Fuentes Contaminantes, que dispone de datos de emisiones a la atmósfera, al agua y al suelo y de transferencias de residuos de las industrias, de acuerdo con la legislación internacional (Protocolo de Kiev o PRTR/RETC y Convenio de Aarhus), europea (Reglamento E-PRTR) y nacional (Real Decreto 508/2007 y sus modificaciones). Es también el inventario oficial estatal de las instalaciones industriales en el marco de la normativa IPPC (RDL 1/2016, mencionado anteriormente). De este modo, el objetivo principal de PRTR en España es la recopilación de la información anual procedente de los complejos industriales catalogados como contaminantes sobre emisiones a la atmósfera, al agua y al suelo, en cantidades totales emitidas por el complejo al año. La información de este registro se difunde públicamente a través de Internet.

En el mencionado Real Decreto Legislativo 1/2016 se establece y regula la figura de la Autorización Ambiental Integrada (AAI), la cual aglutina todas las autorizaciones ambientales existentes y es otorgada por las Comunidades Autónomas. La Autorización Ambiental Integrada es la resolución del órgano competente de la Comunidad Autónoma en la que se ubique la instalación, por la que se permite explotar una instalación a efectos de protección del medio ambiente, bajo determinadas condiciones destinadas a garantizar que la misma cumple el objeto y las disposiciones de la citada ley.

En la AAI se deberán especificar los sistemas y procedimientos para el tratamiento y control de todo tipo de emisiones y residuos, con especificación de la metodología de medición, su frecuencia y los procedimientos para evaluar las mediciones. Así mismo, la AAI obliga a comunicar al órgano competente regularmente los resultados del control de las emisiones y otros datos solicitados que permitan verificar el cumplimiento de las condiciones de la autorización. De esta forma, las instalaciones que sean susceptibles de obtener o actualizar una AAI deberán aportar un conjunto de información y estudios indicados por la citada normativa, así como por el Real Decreto 815/2013, de 18 de octubre, por el que se aprueba el Reglamento de emisiones industriales. Además, uno de los requisitos cada vez más demandados en las revisiones es la realización de un estudio que justifique la altura de chimeneas para asegurar la correcta dispersión de gases. Estos estudios se solicitan con el objetivo de verificar que la altura de las chimeneas es adecuada para producir una correcta dispersión de contaminantes que evite la aparición de valores de concentración elevados a nivel del suelo.

Respecto a lo anterior, el mencionado anteriormente Real Decreto 815/2013, de 18 de octubre, por el que se aprueba el Reglamento de emisiones industriales, indica que la altura de la chimenea se calculará de forma que se salvable la salud humana y el medio ambiente, aunque no especifica una formulación determinada o el uso de un modelo numérico. De igual modo, la citada Orden de 18 de octubre de 1976 indica que los titulares de la industria deberán incluir en el proyecto una memoria justificativa del cálculo de la altura de las chimeneas en función de las condiciones climatológicas del

lugar. Aunque dicha Orden indica una fórmula sencilla para realizar este cálculo, es un hecho que el otorgamiento de las AAI es competencia del órgano ambiental de la Comunidad Autónoma en la que se ubique la instalación. Esto implica que cada organismo competente tiene la capacidad para regular este cálculo de la forma que considere precisa. De esta forma, se observan distintos ejemplos como el caso del órgano correspondiente al País Vasco, que presenta su propia metodología matemática para instalaciones relativamente pequeñas. Sin embargo, cuando se trata de grandes instalaciones, muchas Comunidades Autónomas indican la necesidad de utilizar modelos físico-matemáticos para modelizar el penacho de contaminación y las condiciones de dispersión del mismo. Algunas de estas Comunidades imponen además una serie de requisitos particulares para la selección de dichos modelos, como el caso de Madrid, donde sólo se admiten modelos matemáticos validados reconocidos por la Agencia Europea de Medio Ambiente (EEA) o la Agencia de Protección del Medio Ambiente de Estados Unidos (EPA). Este requisito lleva con frecuencia a selección de modelos determinísticos, generalmente de tipo gaussiano o lagrangianos, integrados en programas informáticos como los conocidos CALPUFF, AERMOD, CTDM, etc. No obstante, a excepción de las especificaciones indicadas a nivel de Comunidad Autónoma como el ejemplo en Madrid, se puede concluir que no existe en España un modelo de dispersión de referencia o impuesto para la realización de los estudios de dispersión de contaminantes.

De lo anterior también se concluye que algunas Comunidades Autónomas tienen sus propias Instrucciones técnicas e instrumentos jurídicos, pero no todas siguen esta misma tendencia. En los casos en que no se desarrolle legislación autonómica adicional al respecto, sigue vigente lo establecido en el artículo 19 de la Orden de 18 de octubre de 1976 sobre prevención y corrección de la contaminación industrial de la atmósfera, a pesar de estar derogada, para el cálculo de la altura de las chimeneas. La Figura 4 resume de forma esquemática los elementos más destacados de este contexto legal en España.

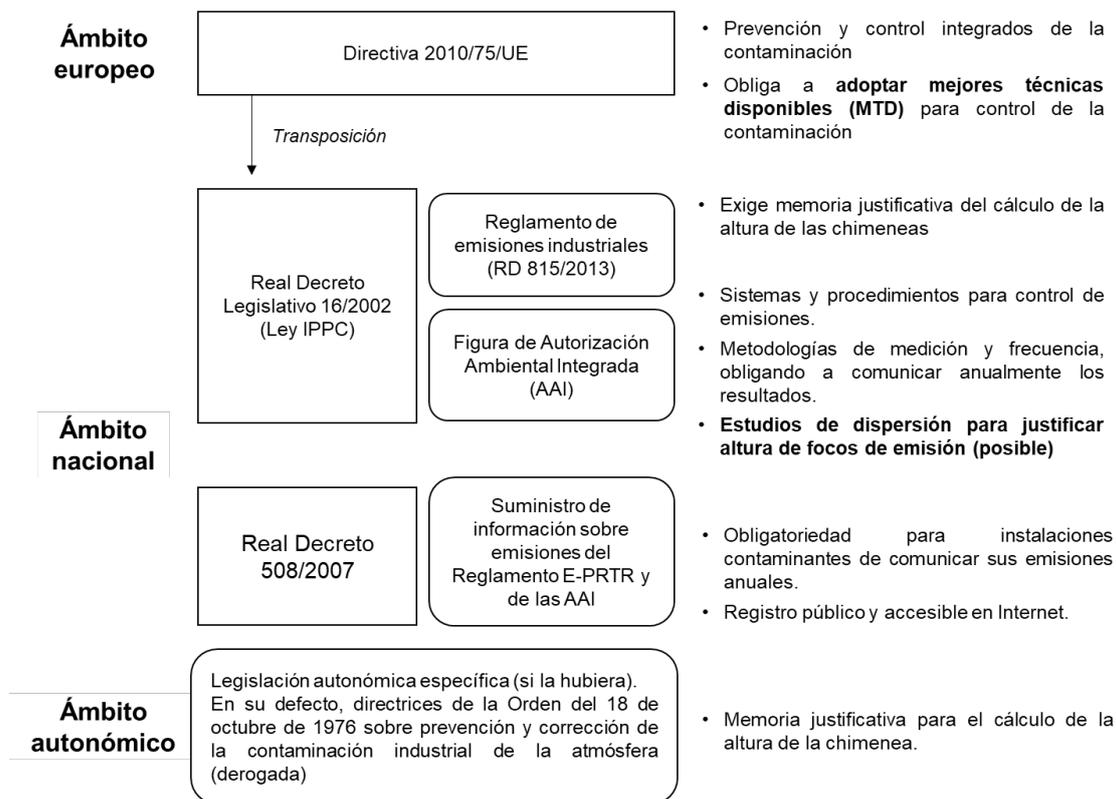


Figura 4. Resumen de aspectos legislativos de interés para los objetivos de esta investigación.

Fuera de España, es importante destacar que los órganos ambientales de determinados países también abordan estas cuestiones de distintas maneras. Algunos de estos organismos que exigen la utilización de modelos numéricos para la realización de estudios de dispersión de contaminantes de las industrias imponen el uso de un determinado modelo específico. Esta cuestión se verá con más detalle en la sección “4.1 Estudio de dispersión de contaminantes con fines regulatorios: modelos de respuesta rápida vs CFD”.

4 Estado del arte

4 Estado del arte

4.1 Estudio de dispersión de contaminantes con fines regulatorios: modelos de respuesta rápida vs CFD

La problemática medioambiental que afecta globalmente desde hace décadas ha empujado a gobiernos y organismos medioambientales de todo el mundo a promover políticas de restricción y control en los niveles de emisión del sector industrial. La Directiva 2010/75/EU sobre las emisiones industriales es uno de los mejores ejemplos que ilustran este propósito. Este contexto ha incentivado en gran medida el uso de técnicas de modelización de la dispersión de contaminantes en la atmósfera, especialmente en el ámbito de las industrias sujetas al cumplimiento de las exigencias legislativas.

Estos modelos de dispersión utilizan ecuaciones matemáticas para describir el comportamiento físico de la atmósfera, así como los mecanismos de dispersión de contaminantes, los cuales pueden incluir procesos físicos y químicos. Mediante su aplicación en diferentes casos prácticos es posible predecir las concentraciones de contaminantes en distintos escenarios de interés.

Los modelos que definen el comportamiento de la dispersión y el transporte de contaminantes en la atmósfera se pueden clasificar en base a múltiples factores, existiendo una gran familia de modelos disponibles. Una de las clasificaciones más elementales es la siguiente.

- Modelos físicos. Consisten en representaciones a pequeña escala de la realidad, como los experimentos en túneles de viento.
- Modelos numéricos o determinísticos. Son modelos basados en sistemas conceptuales y principios físico-químicos. Se construyen en base a ecuaciones matemáticas que describen el comportamiento de los procesos que se pretende simular. En el caso de la dispersión atmosférica, se considera principalmente la ecuación de advección-difusión.
- Modelos empíricos o estadísticos. Este tipo de modelos se basan en relaciones estadísticas y empíricas entre los datos relativos a la concentración de contaminantes (tanto los datos de emisión de la fuente como los de calidad del aire) y otras variables que puedan tener influencia sobre ellos.

Sin embargo, en la práctica es común aplicar otro tipo de clasificación más compleja que permite observar las distintas familias y subfamilias de modelos existentes. En este sentido, se presenta en la Figura 1 una clasificación más práctica para la selección del modelo más adecuado en un estudio de dispersión, resultado de combinar distintos criterios de clasificación seguidos en la literatura [8], [15].

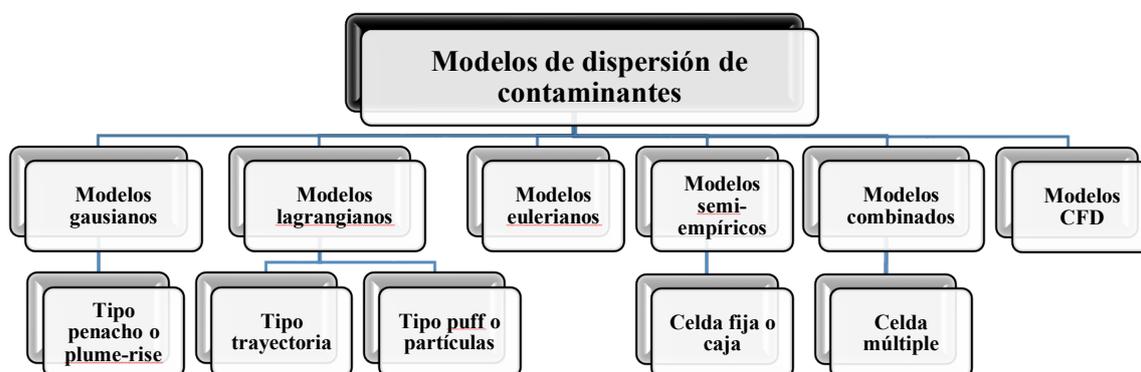


Figura 5. Clasificación de modelos deterministas o numéricos.

Entre las distintas técnicas disponibles, los modelos de dinámica de fluidos computacional (CFD) se han vuelto muy populares durante las últimas décadas para el análisis de la dispersión de contaminantes en la microescala y para la evaluación de la calidad de aire a nivel local [16]–[23]. Este tipo de formulaciones permite realizar un análisis complejo del flujo basado en los principios de conservación de la masa y del momento, resolviendo la ecuación de Navier-Stokes. La modelización con CFD es una elección adecuada para realizar análisis de dispersión puesto que tiene en cuenta parámetros como la meteorología y la geometría de las estructuras cercanas, los cuales tienen una gran influencia en los valores de concentración resultantes. Otra ventaja importante se encuentra en su capacidad para proporcionar todo el campo de datos del flujo y dispersión sin verse afectado por requisitos de similitud [24].

El uso extendido del CFD en entornos urbanos permite a organismos reguladores y planificadores mejorar los diseños urbanísticos para optimizar la circulación del aire y mejorar los indicadores de calidad del aire en las ciudades. Las investigaciones realizadas en las últimas décadas [25]–[29] muestran que fenómenos tales como el desprendimiento de vórtices y las regiones de recirculación son habituales en los entornos urbanos y afectan de forma notable a la dispersión de contaminantes, especialmente en presencia de edificaciones de gran altura. Estas zonas de recirculación y estancamiento surgen entre los edificios sobre los que sopla el viento y se caracterizan generalmente por valores de velocidad bajos, lo que termina provocando que los contaminantes se queden atrapados dentro de estas zonas con escasa capacidad de ventilación [30]–[32].

Un caso crítico en términos de impacto potencial sobre la calidad del aire en el que el uso de técnicas CFD puede ser particularmente interesante es el diseño y posicionamiento de las chimeneas de los

edificios. La normativa actual sobre sistemas de ventilación en edificación establece que dichas chimeneas deben diseñarse de modo que sus emisiones no afecten al aire fresco que entra en los edificios situados en el entorno [16], [33]. Sin embargo, las tendencias urbanísticas actuales están contribuyendo a que las chimeneas se vean cada vez más afectadas por zonas de recirculación de flujo, provocando la acumulación y concentración local de contaminantes en las inmediaciones de los edificios que las rodean. Una adecuada simulación CFD de dispersión puede ayudar en el diseño y posicionamiento de las chimeneas y las tomas de aire para minimizar el riesgo de contaminación.

Además de los planificadores urbanísticos, las industrias también pueden beneficiarse de los modelos de dispersión en el diseño y la evaluación de sus emisiones. Sin embargo, al contrario que en los casos urbanos, el estudio de fenómenos complejos de flujo no es tan común en el ámbito de la industria. Para verificar la correcta dilución de los gases de combustión, los diseñadores industriales suelen recurrir a los denominados modelos operacionales para simular la dispersión de contaminantes y comprobar si sus diseños cumplen con la normativa vigente.

Los modelos operacionales consisten en ecuaciones semiempíricas basadas en técnicas de parametrización deducidas a partir de datos experimentales [8], [15]. Este tipo de formulaciones solo necesita unos pocos datos de entrada y son capaces de analizar escenarios de dispersión con un coste computacional relativamente bajo [34], [35]. Además, es frecuente su uso como herramientas para la toma de decisiones en las que la robustez y rapidez del modelo son requisitos fundamentales. Entre las posibilidades existentes, las formulaciones Gaussianas son uno de sus principales exponentes [36], [37], las cuales asumen una distribución gaussiana de la pluma en condiciones estacionarias, tanto en dirección vertical como horizontal [8], [38].

En la mayoría de los casos, las instalaciones industriales se construyen sobre terrenos con una orografía llana, los cuales se encuentran habitualmente lejos de los núcleos urbanos. Bajo estas hipótesis, los modelos operacionales pueden proporcionar buenos resultados con un coste computacional muy bajo. Se comportan bien incluso en presencia de obstáculos, como es el caso de AERMOD, en el que se han implementado algoritmos de fenómenos de estela a sotavento de los edificios (*downwash algorithms*). De hecho, existe una comunidad activa de modelización comprometida con la mejora de AERMOD y otros modelos de calidad del aire de la Agencia de Protección del Medio Ambiente de Estados Unidos (US EPA) que trabaja en la introducción de nuevo conceptos del estado del arte en dichas herramientas (ver AERMIC en [39]). De esta manera, durante la última década se han ido produciendo de forma progresiva distintas versiones de AERMOD, ofreciendo mejoras y novedades hasta la última versión conocida, publicada en abril de 2022.

Como prueba de su rendimiento y amplia aceptación, muchos organismos ambientales recomiendan o incluso obligan al uso de determinados modelos operacionales para realizar los estudios de dispersión requeridos para solicitar o renovar las autorizaciones de las fuentes de emisión. Este es el

caso de la US EPA, que cita en su lista de modelos preferentes a AERMOD o a CTDMPPLUS [40]. La Tabla 3 recoge distintos casos de organismos ambientales identificados que cuentan con un modelo de dispersión recomendado.

Organismo	Modelo(s) preferente(s)	Tipo
Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (US EPA) – Estados Unidos	AERMOD, CTDMPPLUS [40].	Gausiano
Reino Unido – Agencia del Medio Ambiente (EA)	ADMS [41]	Gausiano
Alemania – Agencia ambiental alemana	AUSTAL [42]	Lagrangiano
Bulgaria	PLUME [43]	Lagrangiano
Finlandia (Instituto de meteorología finlandés)	UDM-FMI [44]	Gausiano

Tabla 3. Organismos ambientales y modelos de dispersión recomendados o de preferencia. para fines regulatorios y permisos industriales.

No obstante, la precisión de los modelos empíricos se reduce de forma importante bajo ciertas condiciones específicas. Por ejemplo, los casos con terrenos de orografía muy accidentada son una de las situaciones más problemáticas que deterioran los resultados del modelo, tal y como indican varios estudios realizados durante las últimas décadas. Esta problemática ya se advirtió en el informe previo de evaluación del modelo AERMOD [45], en el que no se apreció una mejora significativa de la precisión del modelo a pesar de los cambios introducidos en los algoritmos del terreno. De hecho, esta cuestión se plantea para una futura investigación y mayor desarrollo en futuras versiones del Plan de Desarrollo de AERMOD [46].

Uno de los principales factores que explica esta pérdida de calidad o rendimiento del modelo estriba en que las formulaciones empíricas no tienen en cuenta los procesos físicos, dado que se basan en simplificaciones [47]. Asimismo, puesto que no resuelven explícitamente las características del flujo generadas por las interacciones entre la atmósfera y la superficie del terreno, estos modelos no son adecuados para predecir las concentraciones contaminantes en las inmediaciones de las chimeneas. Esto resulta especialmente crítico cuando la pluma se desvía de su comportamiento normal o esperado debido a la influencia de obstáculos situados cerca de la fuente de emisión.

Como resultado, es común que los estudios de dispersión basados en modelos operacionales evalúen las concentraciones de los contaminantes solo a partir de distancias de varios cientos de metros contadas desde la posición de la fuente [38], [45], [48], [49]. La bibliográfica apunta a que las formulaciones gaussianas no son apropiadas para modelizar la dispersión en zonas situadas a menos de 100 m de la fuente de emisión [38], [45], [50] y que la correlación entre las concentraciones modelizadas y las medidas mejora con el aumento de esta distancia [51].

A pesar de los esfuerzos realizados en la literatura para incorporar de algún modo el efecto de los procesos físicos, en la mayoría de los casos las limitaciones de los modelos operacionales aún no han sido superadas. Acciones como la revisión de los coeficientes de dispersión o la introducción de nuevas funcionalidades para simular las estelas de los edificios o la turbulencia de la capa convectiva, no han sido suficientes para sobreponerse a las dificultades encontradas en muchos escenarios de dispersión complejos [50], [52]–[54].

Por lo tanto, confiar únicamente en modelos empíricos puede no ser suficiente para entender el impacto de la contaminación de las chimeneas industriales cuando éstas se sitúan en entornos singulares y complejos. Para estos casos singulares, los gases emitidos pueden verse afectados por fenómenos complejos del flujo, alterando el comportamiento esperado de la pluma de forma similar a lo que sucede con las chimeneas situadas en entramados urbanos. Estos casos complejos deben ser abordados con técnicas de modelización más avanzadas como son los modelos de dinámica de fluidos computacional (CFD). De otro modo, la influencia de las zonas de recirculación y fenómenos complejos del flujo podrían no estar teniéndose en cuenta de forma adecuada en las simulaciones, comprometiendo así la efectividad del diseño de la chimenea o los resultados del estudio de impacto.

Tal y como se adelantó en la sección “1 Introducción”, en este trabajo se aborda un escenario de estudio complejo en lo que respecta a fenómenos del flujo, características orográficas y ubicación de la instalación emisora. Por este motivo, en esta tesis doctoral se han elegido los modelos CFD como método para abordar el problema de la dispersión de contaminantes desde una fuente emisora industrial.

Las especificaciones técnicas del escenario de estudio y las características que hacen de este un caso particularmente complejo se detallan en la sección “5 Descripción del caso de estudio”.

4.2 Aplicación de modelos CFD al estudio de dispersión de contaminantes

El uso del CFD se ha popularizado durante los últimos años como herramienta para conocer las condiciones de dispersión y concentración de contaminantes atmosféricos en el entorno urbano. A esta área de estudio se la conoce normalmente en la literatura como física urbana.

Durante las últimas décadas se ha hecho un gran esfuerzo por avanzar el estado de la técnica en el desarrollo de este tipo de modelos, lo que junto a la progresiva mejora tecnológica en capacidad de computación ha permitido la aplicación de estos modelos a escenarios y casos de estudio cada vez más complejos.

El estudio de dispersión de contaminantes en escenarios urbanos involucra a la capa más baja de la troposfera. En términos de escala espacial horizontal, la física urbana suele estar restringida a la denominada microescala meteorológica y más concretamente a la escala de las edificaciones. La Figura 6, modificada a partir del trabajo de [55], proporciona una visión general de las escalas espaciales y temporales que dominan los fenómenos atmosféricos.

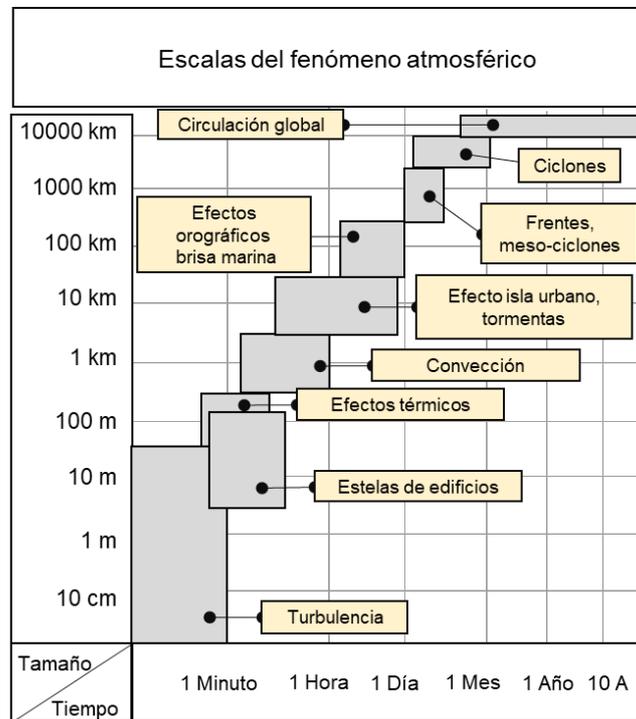


Figura 6. Escalas espaciales y temporales de los fenómenos atmosféricos extraída de [55]. La definición de las escalas características está basada en los trabajos de [56] y [57]. Las columnas de la derecha indican cómo son tratados cada uno de estos fenómenos en los modelos RANS para distintas escalas, mientras que las zonas sombreadas indican las resoluciones de los modelos RANS actuales y los tamaños mínimos de fenómenos potencialmente susceptibles de ser resueltos por estos últimos.

Se puede observar que los problemas de microescala, que son los que se pueden abordar con modelos CFD, se restringen a extensiones por debajo de los mil metros o, como máximo, de unos pocos kilómetros. En términos temporales, los fenómenos involucrados tienen unas duraciones características generalmente inferiores a una hora, descendiendo incluso por debajo del minuto en el caso de la turbulencia. La prevalencia de fenómenos de flujo de escalas temporales tan reducidas hace que la capa límite atmosférica presente un comportamiento intrínsecamente no estacionario.

Por encima de lo anterior se encuentran la mesoescala y la macroescala, para las cuales se suele emplear los denominados modelos numéricos de predicción meteorológica (NWP por sus siglas en inglés). A pesar de ello, los límites de escala entre las distintas categorías de modelos no son estrictos y se pueden encontrar estudios en los que se aplica CFD a escalas muy superiores a las habituales. Un ejemplo es un trabajo [58] en el que se utiliza un modelo CFD para calcular las condiciones de

viento en la entrada de un canal portuario de 25 km de longitud en Galicia. Otra tendencia que ha ganado fuerza en los últimos años consiste en la combinación de los modelos CFD con formulaciones NWP con el objetivo de aprovechar las fortalezas de ambos métodos [55]. Una de las aproximaciones de fusión más comunes consiste en la utilización de los resultados de modelos NWP como condiciones de contorno de entrada de los modelos CFD, tras realizar a los primeros las operaciones de reducción de escala y ajuste pertinentes [59], [60].

En los estudios de física urbana, la capa límite atmosférica se ve fuertemente alterada por la presencia de edificios y estructuras de diversos tamaños, frecuentemente agrupados y con poco espacio entre sí. Algunos autores se dedicaron a caracterizar la capa límite atmosférica a su paso por escenarios urbanos, generando nuevos conceptos y divisiones de la misma en subcapas, tal y como muestra la Figura 7.

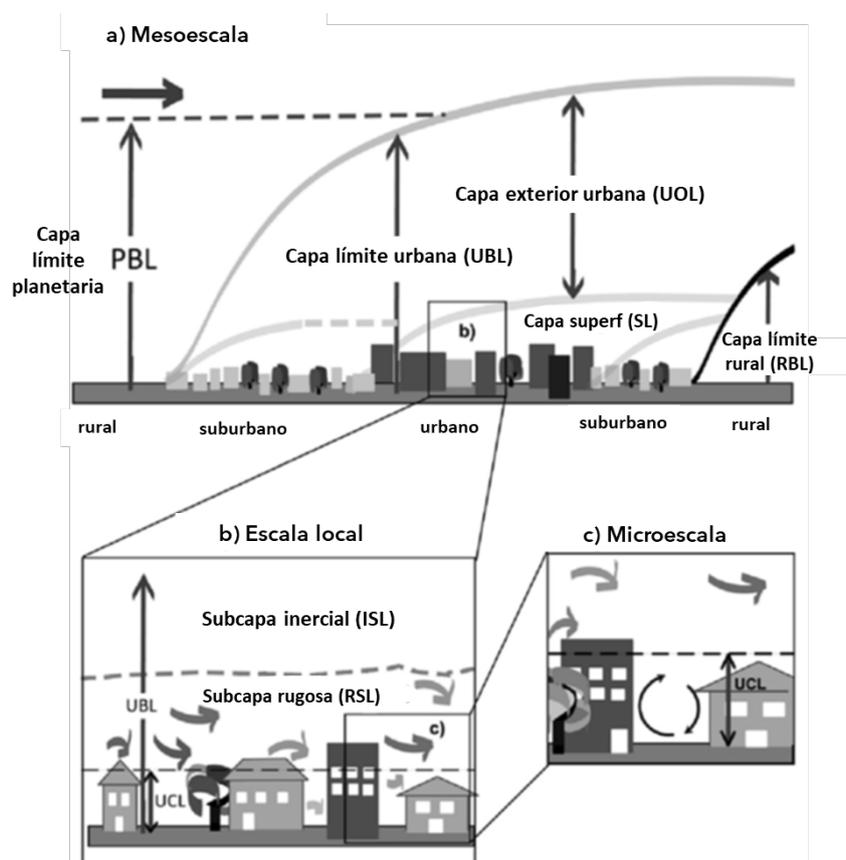


Figura 7. Estructura vertical de la capa límite atmosférica a su paso por un escenario urbano. Figura extraída y traducida de [18].

De acuerdo a la Figura 7 [18], la estructura vertical de la capa límite atmosférica o capa límite urbana (UBL) se puede descomponer en una subcapa rugosa cercana a la superficie (RSL) y una subcapa inercial (ISL) sobre esta última [61]. Ambas capas se encuentran dentro de la denominada capa superficial (SL), sobre la cual se encuentra la capa urbana exterior que se extiende hasta una altitud en la que el viento ya no se ve afectado por la superficie terrestre. Esta cuestión ya fue tratada en la

sección “3.3 Consideraciones para la modelización atmosférica” del presente trabajo, donde se analizó el comportamiento de la atmósfera desde el punto de vista de la teoría de Prandtl y se denominó capa de Ekman a la atmósfera libre no sujeta a la influencia de la superficie. Por último, cerca de la superficie del suelo, los edificios forman una capa de dosel urbano (UCL) y la dispersión viene determinada por una serie de factores, como la configuración y distribución de los edificios y la ubicación de la fuente emisora de contaminantes [62].

En las últimas décadas, los esfuerzos de los investigadores se han dirigido hacia los problemas de la interacción superficie-atmósfera sobre obstáculos y superficies complejas. Los primeros trabajos de aerodinámica en entorno urbano se limitaban al caso de estudio más sencillo que consiste en un cubo sobre una superficie plana en representación de un edificio [63], [64]. Cuando se trataba de analizar las condiciones de dispersión de contaminantes, los modelos incluían un foco emisor en la parte superior del bloque [65] simulando las chimeneas en las cubiertas de los edificios, aunque también se colocaba en otras posiciones como en la parte delantera o trasera de la base del bloque según el sentido del flujo [66]–[68]. La mayor parte de estos trabajos buscaba presentar las primeras conclusiones sobre el impacto de las distintas posiciones de las chimeneas sobre la calidad del aire en el entorno de los edificios.

A los estudios de bloque único pronto les siguieron experimentos de varios bloques, que pretendían estudiar la dispersión aún sobre formas simples, pero en un entorno más complejo en el que se hacían evidentes las interacciones entre estelas y otros fenómenos de flujo provocados por los edificios [69]–[71].

Otra de las morfologías urbanas que más estudios ha acumulado durante las últimas décadas han sido los denominados cañones de calles (*street canyon*). Este término hace referencia al efecto de encañonamiento o de canalización del flujo que sucede cuando las corrientes de aire circulan por el espacio interior que conforman las alineaciones o flancos de edificios enfrentados. Comenzaron así a surgir estudios de dinámica de flujo y dispersión en cañones, en los cuales uno de los parámetros más ampliamente analizados consistía en la denominada relación de aspecto del cañón (AR por sus siglas en inglés). Este parámetro geométrico refleja la relación existente entre la altura del cañón y su espaciado horizontal, es decir, la altura de los flancos de edificios que conforman su sección frente a la separación entre los mismos. Múltiples estudios revelaron que a medida que aumenta la relación de aspecto en cañones, también lo hacen los niveles de concentración medios en el interior a causa de una peor ventilación [72]–[75]. De esta forma, los cañones de calle profundos, cuya relación de aspecto es alta ($AR > 2$), resultan especialmente conflictivos desde el punto de vista de la acumulación de contaminantes.

En este tipo de estudios, además de prestar atención a la instantánea general del flujo y distribución de contaminantes, también se analizan los fenómenos que ocurren en la parte baja de los edificios.

El principal interés se encuentra en las regiones de tránsito de peatones, especialmente en los niveles de concentración generados a la altura a la que estos respiran. También fueron objeto de estudio las cercanías de las fachadas a lo largo de toda su extensión, por el riesgo de entrada de contaminantes a través de las tomas de ventilación de las viviendas.

Los primeros estudios de cañones de calles se desarrollaron en 2D [28], limitándose el estudio a los fenómenos del flujo que se podían detectar en secciones longitudinales y transversales a los mismos. Con el tiempo y la mejora tecnológica, empezaron a surgir estudios en tres dimensiones [76], [77] que permitieron caracterizar la dispersión en condiciones de viento no paralelas al eje de las calles y analizar el flujo en cualquier dirección del espacio, revelando nuevos comportamientos hasta el momento no identificados en los estudios en 2D.

Con el tiempo, los patrones de flujo típicos en cañones de calles y esquemas urbanos comunes fueron caracterizándose de forma cada vez más precisa, tal y como se refleja en algunos trabajos [18], [78] que hicieron una recopilación gráfica de dichos fenómenos en ilustraciones como la de la Figura 8.

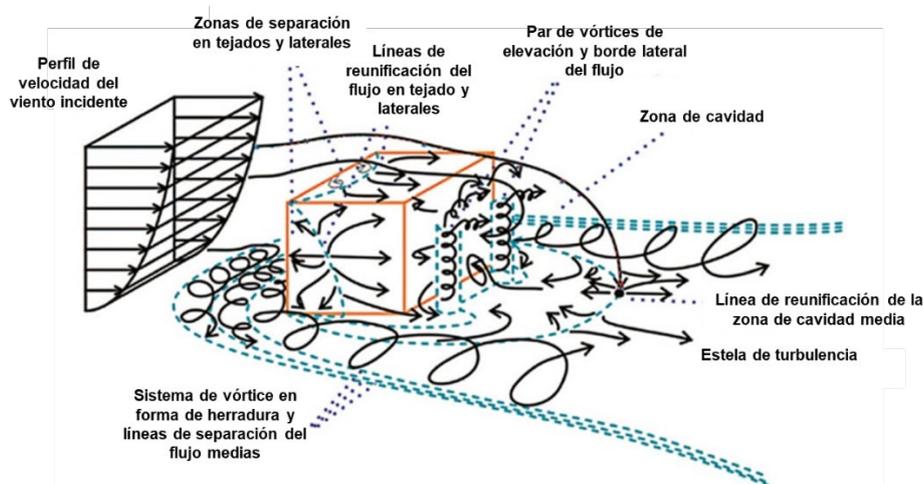


Figura 8. Representación esquemática del flujo de capa límite y sus fenómenos alrededor de un edificio aislado. Ilustración original de [63] modificada por [29] y traducida al español.

Con la mejora tecnológica continua y una mayor disponibilidad de recursos de computación, los escenarios de simulación fueron aumentando en complejidad de forma progresiva. A los casos de cubos aislados pronto le siguieron escenarios compuestos por grupos dispuestos en alineaciones regulares [79], disposiciones irregulares [80] y alturas variables entre los elementos que componen el conjunto [69]. También se empezó a reemplazar los cubos y formas simples por paralelepípedos de formas y ángulos más complejos y variados [81], tratando de acercarse más a las morfologías típicas de bloques y lineales de edificios en ciudades típicas europeas. Con el auge de este tipo de estudios, se empezó a comprender mejor la influencia que los obstáculos tenían sobre la dispersión de contaminantes en el entorno del edificio o zona de interés. Inicialmente, la representación de escenarios urbanos en esta remesa de estudios se caracterizaba por el uso de geometrías idealizadas y

siempre conservando una marcada regularidad. Sin embargo, no tardaron en aparecer nuevos casos con escenarios más realistas, en los que se reflejaba con mayor fidelidad las distancias y posiciones relativas entre edificios, afinándose también un poco mejor la geometría y dimensiones de estos últimos. Uno de los ejemplos más representativos de esta nueva tendencia se encuentra en [22], dado que fue uno de los primeros trabajos en estudiar un escenario urbano realista bajo condiciones meteorológicas variables y direcciones diagonales a los edificios. Al escenario anterior pronto le seguirían entramados mucho más grandes y complejos de diversas localizaciones y ciudades en todo el mundo [19], [82], [83]. La Figura 9 refleja la variedad y evolución de la complejidad de los escenarios urbanos estudiados mediante simulaciones CFD durante las últimas décadas.

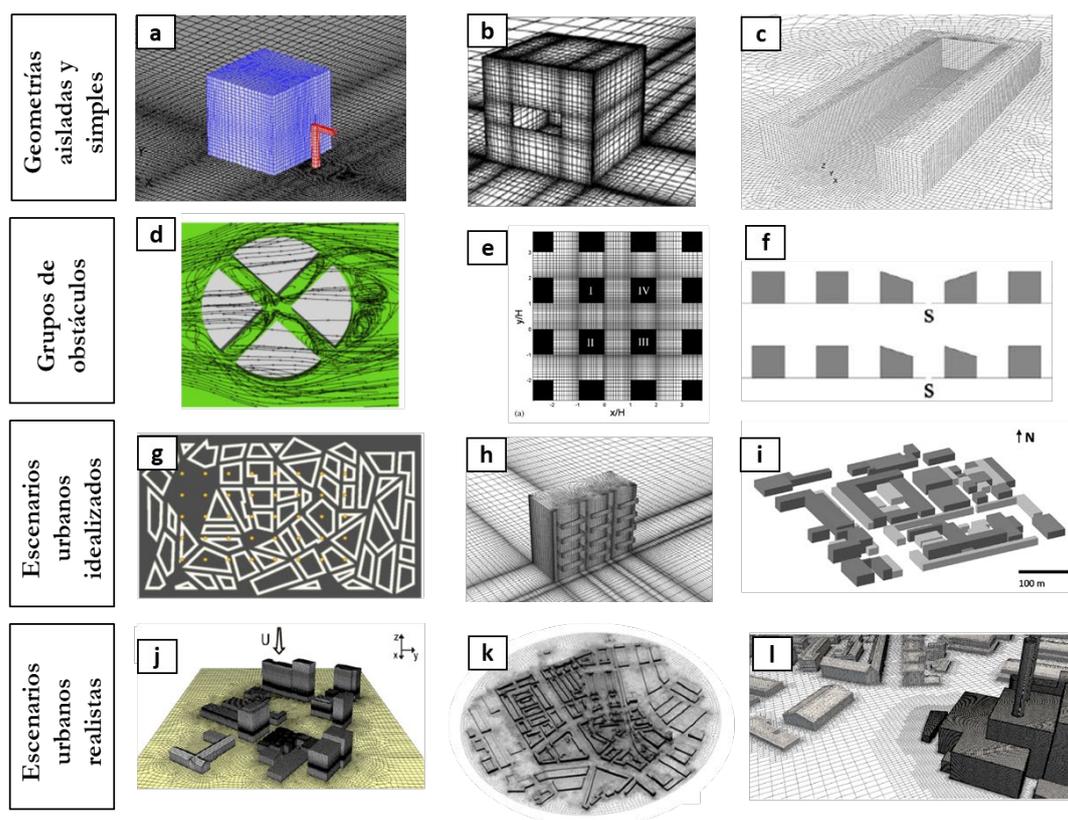


Figura 9. Evolución y variedad de la complejidad de escenarios urbanos estudiados en simulaciones CFD. Figuras extraídas de: a) [84], b) [85], c) [86], d) [70], e) [71], f) [87], g) [88], h) [89], i) [90], j) [22], k) [19], l) [83].

En cuanto a la representación geométrica de edificios y elementos urbanos, durante mucho tiempo las simulaciones se limitaron a simplificaciones en forma de polígonos o paralelepípedos, ya que con estas formas simples se podían explicar la mayor parte del comportamiento del fluido a la vez que se aligeraba la carga computacional. En una fase posterior, las investigaciones comenzaron a estudiar los fenómenos de desprendimiento de vórtices que se producían a nivel de cubierta de los edificios, llegando a la conclusión de que las geometrías de los distintos tejados podían tener un impacto no despreciable en las características del flujo interior de las calles. Fue así como empezaron a surgir

trabajos que añadían la representación geométrica de los tejados a los cañones en distintas formas y variantes. A los tejados, pronto les siguió el estudio otras formas urbanas como son balcones, cornisas, podios o pasos abiertos entre edificios, siempre apremiado por las mayores capacidades de computación disponibles.

De esta forma, se ha generado un panorama científico bastante amplio en cuanto a caracterización del impacto de distintos diseños urbanísticos en la dispersión de contaminantes. Aunque cada vez se trata de reflejar la influencia de más elementos en los modelos, el coste de añadir geometrías mucho más complejas en las simulaciones no siempre está justificado, por lo que dependiendo del elemento y sobre todo de los objetivos o escala de las simulaciones merecerá la pena afinar con geometrías más próximas a la realidad o será suficiente la utilización de simplificaciones geométricas. Esta cuestión sobre el grado de detalle necesario en la modelización del entorno urbano fue abordada en [91], mientras que en [92] se investigó un nuevo método de generalización de geometrías de edificios basado en información geográfica urbana y datos de elevación de superficies.

Otro de los aspectos de los modelos CFD que fue aumentando progresivamente en complejidad fue la elección del modelo de turbulencia. Inicialmente, la práctica totalidad de los estudios se resolvían mediante las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas por Reynolds (RANS). Estos métodos fueron muy populares durante décadas para predecir la dispersión de contaminantes en entornos urbanos debido a sus tiempos de cálculo y demanda de recursos computacionales relativamente bajos [18]. A pesar de ello, los distintos estudios de la literatura dejaban constancia de las dificultades de los modelos RANS para predecir el flujo alrededor de los edificios, especialmente debido a una sobreestimación de la energía cinética turbulenta en zonas de recirculación y fenómenos complejos.

Ante esta situación, los modelos de simulación de grandes remolinos (LES) se fueron presentando poco a poco como una robusta alternativa a las ecuaciones RANS, demostrando una mayor fiabilidad en los resultados de concentración de contaminantes [22]. Inicialmente, la aplicación de los modelos LES era muy escasa y se limitaba a estudios de escenarios simples y poco extensos. El motivo principal que impedía la proliferación de este tipo de modelos era el gran coste computacional que implicaban en comparación con los modelos RANS [21]. Sin embargo, la mejora tecnológica experimentada durante los últimos años ha permitido que los modelos LES pasaran de ser vistos como una herramienta experimental reservada a unos pocos casos a ganar terreno extendiéndose a una gran variedad de estudios de dispersión de contaminantes.

A pesar de la proliferación y mejores expectativas de uso de los modelos LES en la actualidad, las soluciones RANS siguen estando muy presentes en la literatura, especialmente en estudios que incluyen grandes dominios y escenarios complejos que siguen resultando inabordables mediante modelos LES.

Por otro lado, para poder realizar simulaciones de calidad y obtener resultados fiables, la validación es un paso fundamental en el desarrollo del modelo, siendo imprescindible disponer de datos experimentales para cotejar los resultados. No en vano, el aumento en la tasa de publicación de estudios de flujo y dispersión con CFD vino acompañado por otro tipo de acciones que resultaron indispensables para el desarrollo del estado del arte de los modelos CFD. Estas acciones consistieron en el desarrollo de ensayos experimentales en túneles de viento y campañas de medición de variables meteorológicas y uso de gas trazador en entornos reales. Estos datos constituyen una base indispensable para la etapa de validación, definida como el proceso de determinar la medida en que un modelo es capaz de representar de forma correcta el comportamiento del mundo real, siempre de acuerdo a los objetivos del modelo [93].

De esta forma, durante los últimos años se ha creado una importante base de datos experimental disponible para toda la comunidad investigadora, ya que la mayoría de esta información se encuentra disponible en internet de forma libre. En el ámbito de los ensayos en túnel de viento, destaca el proyecto CEDVAL [94], desarrollado en el Instituto Meteorológico de la Universidad de Hamburgo. Esta iniciativa consiste en una compilación de conjuntos de datos de túnel de viento que pueden ser usadas para validación de modelos de dispersión numérica. Otro caso reseñable es la iniciativa COST Action 732 [95], en la que se midió el flujo y concentraciones en un modelo a escala de la ciudad de Oklahoma y el experimento MUST [96]. Los experimentos CODASC [97] y EMU [98] constituyen otros recursos interesantes, el primero centrado en la dispersión en el interior de calles con presencia de árboles y el segundo con un amplio abanico de casos, desde los escenarios urbanos más simples hasta escenarios industriales complejos que incluyen efectos topográficos.

En cuanto a ejemplos de ensayos in-situ destaca el proyecto DAPPLE [99], una campaña de mediciones realizada en el centro de Londres con el objetivo de comprender la influencia del tráfico urbano y la topografía de los cruces en la dispersión de contaminantes [100]. Prairie Grass es otro ejemplo de medición en entorno real, caracterizado por la liberación de plumas de contaminantes continuas sobre un terreno plano agrícola donde la hierba había sido cortada [101]. También se encuentran datos experimentales sobre el relieve natural y accidentes topográficos como los de la colina Bolund y Steptoe Butte [102], [103].

La existencia de estas bases de datos experimentales accesibles para la comunidad científica es clave para los casos en los que no se disponen mediciones para el escenario de estudio específico que se pretende abordar. En este caso, se aconseja aplicar la validación por subconfiguración [85]. Este método consiste en subdividir la configuración real del modelo en una serie de subconfiguraciones genéricas, cada una de las cuales contiene una o varias de las características del flujo más destacadas de la configuración real. El objetivo es tener para cada subconfiguración un conjunto de datos experimentales que sirva para la validación de cada una ellas, de forma que, si se cumple este requisito en todas ellas, se pueda considerar extrapolable al modelo completo.

Un aspecto a considerar cuando se pretende estudiar el impacto de la morfología urbana sobre el flujo y dispersión de contaminantes es el nivel de detalle requerido en los resultados. Esta cuestión está directamente relacionada con la finura o tamaño de las celdas del mallado, entre otros condicionantes, y su definición depende no sólo de la naturaleza de los fenómenos analizados sino también del propósito final de la investigación. De esta forma, no es lo mismo analizar el impacto de la dispersión de contaminantes en el interior de una calle que observar la dispersión de una pluma o penacho contaminante a lo largo de un área que incluye varias edificaciones. En el primero de los casos, el estudio debe prestar atención a las particularidades del flujo (vórtices, zonas de estancamiento...) que se producen en el nivel de tránsito de los peatones o en el entorno de las fachadas y tomas de ventilación de los edificios. En este primer caso, el foco de análisis estaría puesto en una escala pequeña que implica la generación de un mallado más fino y de detalle. En cambio, lo que se pretende en el segundo caso es observar cómo la pluma se distribuye a lo largo del entramado urbano, identificar qué áreas resultan afectadas y en general conocer cómo está impactando la pluma en el grueso del escenario urbano. Visto desde otra perspectiva, se podría decir que en este segundo enfoque lo que se estudia es cómo impacta la morfología urbana en la dinámica de dispersión y evolución de la pluma, más que fijarse en los resultados de concentración al detalle en una zona en particular, como ocurría en el caso de los cañones de calle. En este tipo de estudios la extensión del dominio computacional suele ser muy grande e incorpora geometrías de múltiples edificios e infraestructuras urbanas. Con un dominio de grandes dimensiones, la realización de un mallado de detalle no resultaría viable dada la enorme demanda computacional que supone, además de ser innecesario para los objetivos y alcance del problema a resolver.

Coincidentes con este último enfoque, se pueden encontrar múltiples estudios en la literatura desarrollados durante los últimos años. Este es el caso de un trabajo [83] en el que los autores declaran como objetivo estudiar el efecto de un entramado urbano sobre la dispersión de gases, tal y como si se estuviera observando desde fuera del conjunto de edificios. Para hacer las simulaciones viables, los autores destacan la utilidad de aplicar un patrón geométrico general para reemplazar las geometrías de detalle (a excepción de los edificios centrales o de interés para el estudio). En general, esta aproximación al problema suele ser la elección en trabajos que analizan el impacto de las emisiones sobre núcleos de población. Así sucede en otro estudio [104] en el que se evalúa el impacto sobre la calidad del aire cercano de las emisiones de CO₂ procedentes de una central térmica. El dominio computacional lo integran un conjunto de edificaciones entre las que se encuentra un hospital, siendo uno de los objetivos del estudio la estimación de la distancia máxima que alcanza la pluma bajo distintas condiciones de simulación. También se aplica este enfoque en otro trabajo [105], aunque en este caso no se incluye un escenario urbano en el dominio computacional, sino que lo que se trata de analizar es el efecto de distintas condiciones atmosféricas (neutra, estable e inestable) sobre la dispersión de la pluma en un dominio plano.

A pesar del surgimiento de artículos con este enfoque aparentemente novedoso durante los últimos años, la realidad es que se pueden encontrar estudios dedicados al análisis de la dinámica y evolución de las plumas contaminantes desde la década de los 80. La diferencia principal entre estas dos generaciones de estudios está en que los actuales incorporan en mayor medida la influencia de los obstáculos del entorno sobre la pluma, mientras que los estudios más antiguos solían considerar dominios planos y con un claro enfoque en el análisis más detallado del perfil de la pluma desde el mismo momento en que es emitida. De esta forma, el estudio [106] fue uno de los primeros ejemplos en analizar las variaciones de concentración que se producen en las plumas contaminantes dispersadas en capas límites turbulentas. Se determinó que la mayor parte de las fluctuaciones ocurren muy cerca del punto de emisión, mientras que, a mayores distancias, el equilibrio entre los mecanismos de advección y disipación estabiliza este fenómeno. En la misma línea, el trabajo [107] extrajo una serie de fórmulas analíticas para predecir las fluctuaciones de concentración en plumas, destacando la importancia de las escalas de tiempo Lagrangianas en el éxito de las predicciones. En la actualidad también se siguen produciendo estudios de este tipo, como es el caso de [108], en el que se delimitan dos zonas bien diferenciadas dentro de la morfología de una pluma y se analiza la idoneidad de distintos modelos de turbulencia para la simulación del transporte de cada una de ellas. La Figura 10 muestra ilustraciones de diferentes publicaciones dedicadas a analizar la evolución de la pluma en contextos distintos.

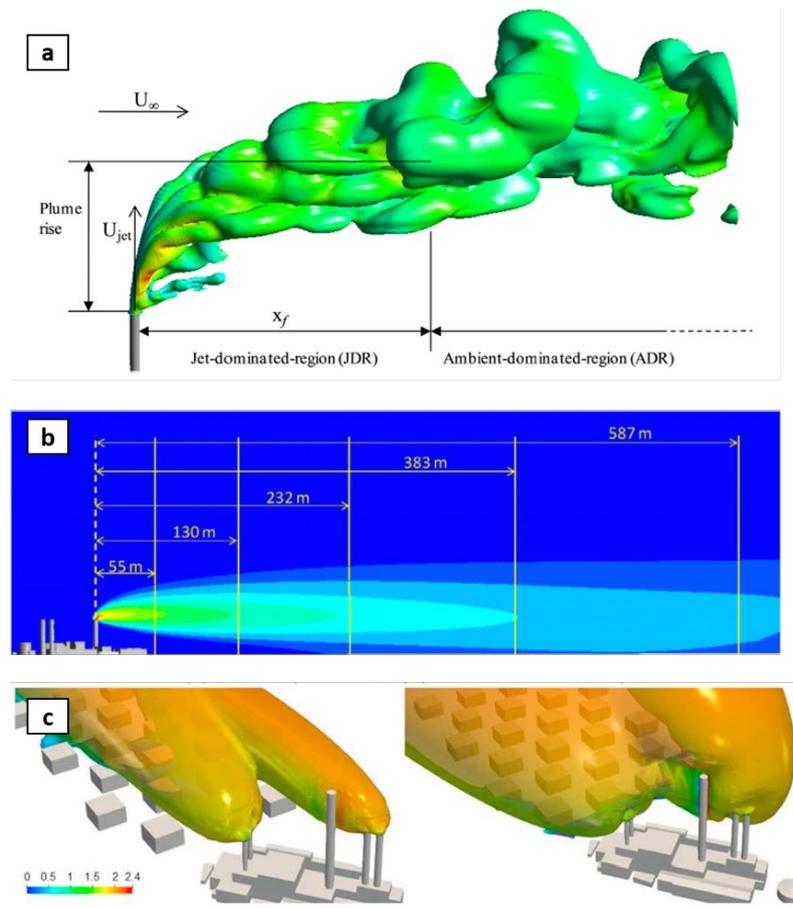


Figura 10. Representación gráfica del estudio de evolución de una pluma contaminante en diferentes contextos. Las figuras han sido extraídas de: a) [108] , b) [104], c) [83].

Por otro lado, aunque la mayor parte de los estudios de dispersión se centran en escenarios urbanos, por su potencial impacto en la salud de las grandes poblaciones, el estudio de este fenómeno en áreas rurales o que engloban relieves montañosos también ha recibido atención durante las últimas décadas. En esta línea, se pueden encontrar estudios que analizan los fenómenos de flujo que surgen alrededor de colinas [109], accidentes del terreno localizados [110], estuarios y desembocaduras de canales navegables [58], así como otros trabajos que incluyen grandes extensiones montañosas [111]–[113]. La estrategia seguida para realizar el mallado es un aspecto que se suele exponer de forma más detallada en este tipo de estudios que en los que tratan escenarios urbanos, debido a las particularidades que presenta la topografía a la hora de dividir el dominio en celdas. Aunque la mayoría de estos trabajos se centran sólo en el análisis del flujo, también existen casos que combinan este propósito con el estudio de la dispersión de contaminantes sobre dichos terrenos. El estudio [102] constituye uno de los casos más antiguos de estudios de dispersión sobre el terreno, en el que las simulaciones fueron acompañadas de una campaña experimental de mediciones con liberación de un gas trazador en el entorno de la colina Steptoe Butte, en Washington. Otro ejemplo es el de [114], en el que se desarrolló un modelo CFD para predecir la dispersión de aerosoles y gases olorosos de una explotación ganadera. En el estudio se modelan las características del terreno en el que se

encuentra la explotación, dedicando especial atención y esfuerzo a la generación de un mallado apropiado. En [115] se estudia el efecto de distintos perfiles topográficos sobre la dispersión de gas CO_2 procedente de una fuga en una tubería de alta presión. Para ello se estudian siete formas características del terreno y se evalúa la distancia máxima alcanzada por el gas fugado en cada una de ellas.

El siguiente grado de complejidad y alcance de las investigaciones de física urbana comienza con la aparición de estudios que combinan la topografía del terreno con morfologías urbanas o estructuras civiles [116]. En estos estudios se suele abordar grandes dominios geométricos que pueden incluir múltiples edificaciones (a veces hasta barrios enteros) en conjunto con formas características del terreno circundante. Así sucede en [117], donde se estudia la dispersión de una emisión continua a lo largo de un entorno industrial caracterizado por estar ubicado en un relieve complejo. Para ello se emplea el modelo RANS y se validan los resultados contra un experimento en túnel de viento derivado del proyecto EMU [98]. Aunque se encuentra limitado al estudio del flujo sin dispersión de contaminantes, también destaca otro trabajo [118] en el que se presta especial atención a la correcta integración entre geometrías urbanas y topografía en el modelo geométrico. El elevado número de celdas que caracteriza a este tipo de estudios los hace especialmente complejos y costosos de simular en términos de necesidades de cómputo. Por ello, no es de extrañar que los modelos de turbulencia RANS sigan dominando este tipo de estudios, ya que la aplicación de otros modelos más avanzados como LES no es viable en la mayoría de estos casos. Así mismo, para poder abordar estos escenarios de forma más eficiente, en ocasiones se recurre al uso de estrategias multiescala. Un buen ejemplo se encuentra en [119], en el que se simula el viento sobre una ciudad situada sobre un relieve abrupto. La particularidad de este estudio se encuentra en que las condiciones de entrada del viento para dicha simulación se extraen de una simulación previa de viento a una escala mayor, que engloba un área más extensa del terreno con el objetivo de captar la influencia de las cadenas montañosas situadas a barlovento de la ciudad. Posteriormente, los resultados de velocidad, energía y disipación turbulenta se extraen e interpolan a una escala menor, introduciéndose como condiciones de contorno del modelo urbano más reducido.

A medida que el historial de estudios de flujo en escenarios urbanos se hacía más grande, los autores comenzaban a replicar determinados procedimientos en el desarrollo de los modelos numéricos, motivada esta elección por los resultados demostrados en estudios similares. En consecuencia, muchas de estas técnicas se fueron contrastando progresivamente en multitud de casos de estudio, aumentando así la confianza de los autores sobre las mismas y generando patrones que se repetían cada vez con mayor frecuencia. Ante esta situación, surgieron los primeros trabajos destinados a definir mejores prácticas en la creación y configuración de modelos CFD aplicados a la física urbana. Esta iniciativa de estandarización está respaldada por múltiples documentos de recomendaciones y

mejores prácticas surgidos durante los últimos años, aunque en la actualidad sigue sin existir una convención para la adopción de una de estas guías de forma prioritaria.

Uno de los documentos de mejores prácticas más ampliamente adoptado en la literatura es la guía de [120]. Este trabajo surgió en el marco de la iniciativa europea COST Action 732 [95], que buscaba mejorar la calidad de los modelos meteorológicos de microescala aplicados en los procesos de predicción de flujo y transporte en entornos urbanos o industriales. Las recomendaciones de este documento incluyen aspectos críticos para la construcción de un modelo numérico fiable, como son las dimensiones y composición del dominio geométrico o el establecimiento de las tasas de crecimiento entre celdas adyacentes del mallado. Con el tiempo, han ido surgiendo otros ejemplos de guías y procedimientos destinados a aplicaciones más específicas, las “Guías para la Modelización de Microescala” [121] definidas por el organismo VDI alemán, muy enfocado a la evaluación de impacto ambiental. Destacan también otros trabajos que recogen pequeños procedimientos y recomendaciones más acotados como [122] o [123], siendo este último una de las referencias más actuales a pesar de haber sido publicado hace ya más de 10 años.

En este punto cabe destacar que la mayor parte de las guías mencionadas están formuladas en base a la aplicación de modelos RANS para simular los efectos turbulentos, mientras que la disponibilidad de guías de recomendación dedicadas a modelos LES sigue siendo escasa hoy en día en la literatura.

En la literatura de las dos últimas décadas también se aprecia otra tendencia que trata de combinar las técnicas CFD con modelos operacionales. El interés por combinar ambos métodos no debe resultar extraño, ya que como se explicó anteriormente, las normativas medioambientales están resultando favorables a los modelos de respuesta rápida. La integración de estos dos métodos permite aprovechar las ventajas de cada uno de ellos, aligerando la carga computacional y simplificando los esfuerzos de desarrollo del modelo. Esto es especialmente relevante en el ámbito industrial, donde las propias empresas contaminantes son muchas veces el usuario final de este tipo de metodologías.

La integración de estas dos metodologías se puede realizar en general mediante dos enfoques distintos. En el primero de ellos, se utilizan los modelos operacionales como estudio preliminar en el que se determinan los escenarios de simulación más desfavorables o complejos, que son los que posteriormente se seleccionan para su simulación avanzada mediante técnicas CFD. Las condiciones de contorno de estos escenarios de interés suelen extraerse también de estas simulaciones preliminares con modelos operacionales. Este es el enfoque seguido en [104], en el que se utilizó el modelo AERMOD para determinar las concentraciones horarias a nivel de suelo más elevadas durante un periodo de 5 años. Con esta información se determinaron las condiciones atmosféricas que llevaban a los peores escenarios de contaminación en el caso de una central térmica cercana a un núcleo de población y se generó posteriormente un modelo CFD para el estudio de la dispersión en dichos escenarios. Una estrategia similar se siguió en [124], en el que tras llegar a la conclusión con

AERMOD de que la condición de atmósfera estable con vientos elevados estaba dando lugar a las concentraciones más elevadas, se realizó una simulación URANS para estudiar el efecto de estela de los edificios y la densidad del entramado urbano.

El segundo enfoque de integración consiste en utilizar un conjunto de simulaciones CFD para ajustar el funcionamiento de un modelo operacional en un caso de uso concreto. Así sucede en [125], cuyo objetivo es emplear un modelo CFD para mejorar la capacidad de AERMOD para representar los patrones de dispersión alrededor de edificios, especialmente en escenarios de viento oblicuos. Para ello, se utilizó el modelo LES para simular múltiples dimensiones de los edificios, ubicaciones de los focos de emisión y altura de estos últimos, dando lugar a un estudio de sensibilidad de parámetros. Los resultados de esta acción permitieron finalmente modificar los algoritmos de dispersión de AERMOD responsables de la estimación de concentraciones a nivel de suelo en el entorno de obstáculos. En [126] y [54] también se planteó un objetivo similar, tras detectar que AERMOD sobreestimaba las concentraciones a nivel de suelo bajo determinadas condiciones meteorológicas. Esta deficiencia, localizada en el denominado algoritmo de flujo descendente tras obstáculos (*building downwash algorithm*), se detectó mediante la comparación con los resultados de simulaciones CFD y túneles de viento. También en [127] se siguió un procedimiento similar, orientando en esta ocasión la nueva parametrización al caso de chimeneas o focos de baja altura, situación especialmente compleja para los algoritmos de tipo gaussiano.

Otra posibilidad de integración se encuentra en [53], en el que se generó un perfil de turbulencia a partir de una simulación LES que posteriormente se incluyó como información meteorológica de entrada en AERMOD. Con esta acción se logró mejorar la estimación de la dispersión lateral de la pluma y la concentración en el eje central de la misma. También se ha intentado proponer una nueva formulación para calcular los parámetros de dispersión vertical en entornos urbanos como una función de la altura media de los edificios existentes [83].

Otro aspecto que llama la atención en la literatura más reciente es la aparición de un número creciente de datos procedentes de flotas de satélites y sus posibilidades de uso junto con el CFD. Los satélites destinados a registrar datos de contaminantes son una respuesta a la necesidad de monitorear la calidad del aire y otros aspectos ambientales a escala global. Estos satélites se utilizan para medir la concentración de contaminantes, como dióxido de nitrógeno, dióxido de azufre, ozono o partículas finas, entre otros, en la atmósfera. El sistema del instrumento de monitoreo de la troposfera TROPOMI, a bordo del Sentinel-5 Precursor es el mejor ejemplo disponible en la actualidad que permite obtener información precisa y en tiempo real sobre la calidad del aire en diferentes regiones del mundo, tal y como muestra el ejemplo de la Figura 11.

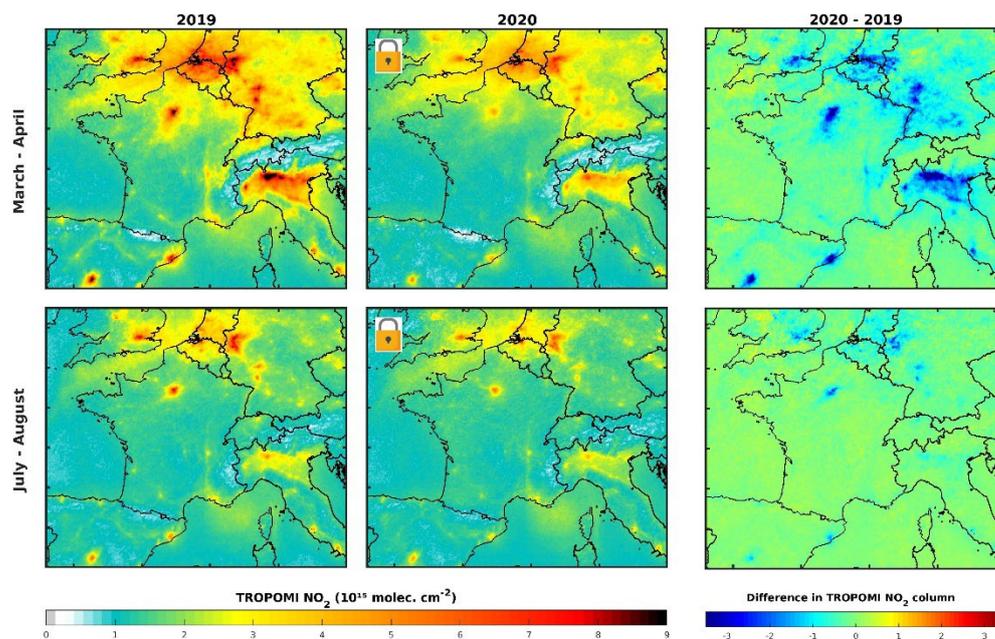


Figura 11. Concentraciones de dióxido de nitrógeno en Europa. Fuente: The European Space Agency (ESA). Contiene datos modificados de Copernicus Sentinel data (2019-2020), procesados por KNMI/BIRA-IASB.

Pero, además, el uso de estos datos de satélite como datos de validación de modelos CFD se ha convertido en un campo de investigación activo en los últimos años. Estos datos proporcionan una visión global de la distribución de contaminantes que podría resultar especialmente útil para cotejar y validar los resultados de dispersión y concentración obtenidos en las simulaciones. Sin embargo, la correlación entre los resultados de las simulaciones de microescala y los datos de contaminación de satélite no es directa ni sencilla, motivo por el cual aún no abundan este tipo de trabajos en el ámbito de la dispersión de contaminantes. Sin embargo, sí es posible encontrar ejemplos en los que se utilizan datos satelitales sobre temperaturas de la superficie para validar simulaciones de confort térmico urbano [19], [128]. En el ámbito de dispersión de contaminantes, el ejemplo más cercano se encuentra en [129], donde se utilizaron mediciones in-situ de la fracción molar de aire seco promediada en columna de CO_2 para validar los resultados de los modelos CFD. Esta aproximación podría ser una referencia para el uso de los datos de Sentinel-5 Precursor para validación, ya que estos últimos proporcionan mediciones totales y troposféricas de columna de distintos contaminantes como el ozono, dióxido de carbono y metano entre otros.

Otra de las tendencias más disruptivas en el ámbito de las simulaciones atmosféricas viene de la mano de los grandes avances surgidos en el ámbito de la Inteligencia Artificial en años recientes. La posibilidad de relacionar entre estas dos tipologías de modelos comienza con la simulación de un conjunto de casos en CFD, con el objetivo de generar los datos necesarios para entrenar las redes neuronales y algoritmos de *Deep Learning* [130]. Partiendo de esta situación, una de las posibilidades de integración entre estas dos metodologías consiste en reemplazar los modelos CFD con los

algoritmos de *Deep Learning*, o lo que es lo mismo, emulando con estos últimos la simulación numérica de dinámica de fluidos. Esta técnica, conocida como modelización subrogada (*surrogate modelling*) ha demostrado ser muy útil, especialmente en lo que respecta a la rápida obtención de resultados y un menor coste computacional. En la literatura se encuentran varios trabajos que siguen este procedimiento, permitiendo una predicción del flujo de varios órdenes de magnitud más rápido [131]. Pero a pesar de que el objetivo del modelo subrogado es reducir el coste computacional manteniendo el mismo orden de magnitud de fiabilidad [132], la exactitud de los resultados se ve deteriorada con frecuencia en la práctica. En primer lugar, la modelización subrogada se desarrolla en base y se compara con los resultados de simulaciones CFD, los cuales siguen presentando múltiples incertidumbres y deficiencias.

Además, las predicciones basadas en redes neuronales presentan una menor fiabilidad, especialmente en casos particulares para los cuales la red no fue entrenada, como para direcciones de viento no contempladas inicialmente en las simulaciones CFD [133]. En definitiva, la fiabilidad de los resultados de este procedimiento depende en gran medida del caso de uso considerado, por lo que no ofrece una buena capacidad de generalización y requiere una gran cantidad de datos de entrenamiento.

Existe, no obstante, otras formas de integración de los modelos CFD y algoritmos de *Machine Learning* cuyo objetivo no es reducir los tiempos de cálculo sino mejorar la fiabilidad de resultados de los primeros. Este es un planteamiento distinto al anterior en el que se hace uso de modelos de *Deep Learning* para actuar o directamente reemplazar las partes del modelo que genera un mayor número de incertidumbre y errores, como los modelos de turbulencia, logrando así una mejora sustancial sobre los resultados [134].

Para finalizar esta sección, con el estado del arte de aplicación de modelos CFD a la dispersión de contaminantes caracterizado, es interesante hacer dos observaciones. En primer lugar, se ha comentado la abundancia de escenarios de estudio urbanos complejos, con configuraciones que en algunos casos abarcan un buen número de edificios y estructuras incorporados en el modelo geométrico. La mayoría de estos escenarios urbanos presenta un fondo de dominio plano, dado que en general los estudios se centran en grandes urbes que requieren de extensas planicies para su expansión. Por otro lado, existen bastantes ejemplos de estudios dedicados exclusivamente al terreno, normalmente más centrados en cuestiones de caracterización de flujo que en la dispersión de contaminantes. Lo que no es habitual encontrar en la bibliografía son casos que combinen geometrías de edificios junto con el relieve del terreno, especialmente si este último es complejo. Además, los pocos casos hallados que cumplen ambas condiciones presentan topografías poco pronunciadas y generalmente distanciadas de la zona urbana donde se encuentran las edificaciones.

La segunda circunstancia a mencionar derivada de la revisión bibliográfica está relacionada con el estudio de los fenómenos de recirculación del flujo y su afeción a los patrones de dispersión. Esta

cuestión ha sido abordada habitualmente en escenarios urbanos, en los que la presencia de edificios de distintas alturas puede dar lugar a la ocurrencia de este tipo de fenómenos, atrapando los contaminantes emitidos por las chimeneas de algunas edificaciones y llevándolos a las proximidades de viviendas colindantes. Por el contrario, no es fácil encontrar estudios que analicen esta misma cuestión cuando la causa se encuentra en la orografía, donde también existe la posibilidad de formación de este tipo de estructuras de flujo a una mayor dimensión.

El motivo para destacar los aspectos anteriores es la voluntad de poner en valor la innovación y singularidad del escenario de estudio escogido en la presente investigación. Como se verá en la siguiente sección “5 Descripción del caso de estudio”, el escenario elegido presenta unas características que abordan estas dos carencias detectadas en el estado del arte.

5 Descripción del caso de estudio

5 Descripción del caso de estudio

El caso de estudio elegido para esta investigación consiste en una instalación industrial potencialmente contaminadora de la atmósfera denominada “Industrial Química del Nalón, S.A.” (en adelante IQN. La planta se localiza en la localidad de Sama, en el término municipal de Langreo y provincia del Principado de Asturias del territorio español. La Figura 12 muestra la localización espacial de la instalación en el mapa, mientras que en la Figura 13 se puede observar dos vistas aéreas de la misma y el aspecto de su entorno.

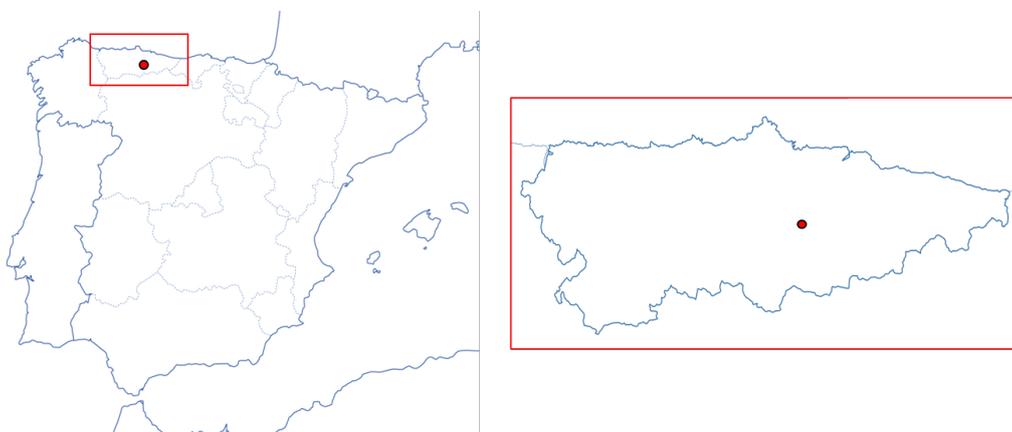


Figura 12. Localización geográfica de la planta Industrial Química del Nalón en el Principado de Asturias.



Figura 13. Vista aérea de la localización de la planta. Fuente: Google Maps.

El entorno en el que se ubica la planta es el denominado Valle del Nalón, de forma que la instalación se encuentra rodeada en sus proximidades por un relieve montañoso, tal y como se puede apreciar en la Figura 14. Además, otra característica destacable de la instalación es que se encuentra a menos de 500 metros de los núcleos urbanos de Sama y Ciaño, ambos en el municipio de Langreo.



Figura 14. Imagen de la instalación y su entorno.

De acuerdo a su documento de Autorización Ambiental Integrada (AAI-061/06), la actividad principal de la instalación consiste en la producción de coque de fundición, obtenido mediante la destilación seca de las hullas coquizables a alta temperatura y en ausencia de oxígeno. De esta forma, se trata de una instalación de combustión denominada coquería. La planta funciona de forma ininterrumpida los 365 días del año y tiene una capacidad de producción de 132.000 t de coque anuales, mientras que la potencia instalada es de 2,375 MW.

El producto fundamental obtenido en la destilación seca de la hulla es el coque de diferentes características y granulometrías, pero también se produce gas de batería (120.000 MW anuales), alquitrán y aguas amoniacales. El gas de batería procedente de los hornos se somete a un tratamiento específico de forma que posteriormente puede ser aprovechado en la propia planta como combustible para las cámaras de calentamiento del coque. Otras instalaciones, como el molino de finos y la caldera de vapor, también se alimentan de este gas de batería. Una vez distribuido el gas a todos los puntos de consumo, el excedente de gas bruto se destina a la generación de energía eléctrica en la planta de valorización energética existente en las propias instalaciones. La instalación de cogeneración está dimensionada para gestionar la totalidad del excedente de gas. En caso de funcionamiento anómalo de la instalación (averías y mantenimientos) el gas excedente es quemado en antorchas atmosféricas instaladas a tal efecto. La mayor parte del gas de batería generado en la instalación se destina a autoconsumo o cogeneración.

Las mejores técnicas disponibles (MTD) para las coquerías incluidas en el capítulo 6 del documento BREF [135] correspondiente a la industria del acero y del hierro son de aplicación a la instalación, tal y como se recoge en su Autorización Ambiental Integrada (AAI-061/06). Se debe destacar también que prácticamente la totalidad de las MTD propuestas en los documentos BREF de referencia (para instalaciones existentes) han sido implementadas. En cuanto a las mejoras ambientales implementadas destaca especialmente la reducción del consumo de gas de batería en el calentamiento de los hornos, con el objetivo de reducir las emisiones contaminantes. Esto se ha logrado gracias a la instalación de recuperadores de calor, que aprovechan la temperatura de los gases quemados calentando el aire a utilizar en la combustión de la siguiente inversión. También destaca el uso de materias primas con bajo contenido en azufre con el fin de reducir la emisión de SO_2/SH_2 a la atmósfera.

La elección de este caso de estudio se ha realizado en base a las condiciones definidas en la sección 4.1, que hacen de este un escenario particularmente complejo para la dispersión de contaminantes. Estas condiciones son las que motivan el uso de un modelo CFD para su resolución.

De acuerdo a lo anterior, la orografía del entorno de la instalación es la principal característica que ha llevado a la selección de este caso de estudio. Tal y como se mencionó, la coquería se ubica en el fondo de un valle que presenta una sección relativamente estrecha en determinadas ubicaciones, incluida la de las instalaciones. En consecuencia, una gran formación montañosa rodea de forma muy cercana a la chimenea principal de la instalación, con una elevación del terreno que supera ampliamente la sección de salida de los gases. La Figura 15a muestra en su parte una representación tridimensional de la planta y el relieve circundante vista desde el noroeste, en la que se puede apreciar la presencia de una gran colina situada al sur de la chimenea principal, representada por un cuerpo cilíndrico. Las elevaciones máximas del relieve se encuentran muy por encima de la sección de salida de los gases, cuya altura se ha proyectado en la superficie del terreno mediante una línea roja. Además, esta formación montañosa se sitúa muy próxima a la chimenea, tal y como indican las distancias horizontales representadas en la Figura 11b.

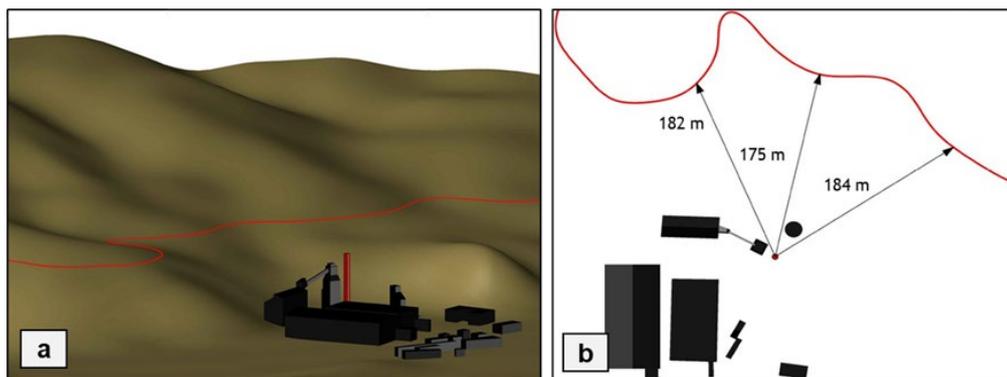


Figura 15. a) Vista en 3D de las dependencias de la industria y de la topografía circundante. La línea roja representa la proyección de la elevación de la sección de escape de la chimenea sobre la superficie del terreno. b) Vista en planta de las instalaciones con algunas distancias horizontales representadas entre el centro de la sección de escape y varios puntos de la línea roja proyectada.

En estas circunstancias, es de esperar una notable interacción entre la pluma de contaminación y el terreno, presentándose los modelos CFD como una de las herramientas con mayor potencial para analizar este problema. La gran cercanía de la instalación a dos núcleos urbanos es otro de los motivos que refuerza la necesidad de estudiar los mecanismos de dispersión detallado para descartar posibles impactos severos en la calidad del aire urbano.

Otra de las características de interés de este caso se encuentra en las condiciones de viento de la ubicación. Tal y como se verá más adelante, el análisis de las series históricas de viento revela que las direcciones predominantes en combinación con la orografía de la zona presentan un gran potencial para dar lugar a fenómenos de recirculación del flujo. Estos fenómenos de recirculación presentan un interés especial para este tipo de estudios ya que tienen un gran potencial para alterar los patrones de dispersión esperados.

Por último, además de las razones anteriormente citadas, cabe destacar que para este caso de estudio se detectó una nueva oportunidad relacionada con la modelización de la dispersión en base a un requerimiento procedente de una de las revisiones del documento de su Autorización Ambiental Integrada (AAI) (abril 2019, expte. AAI-068/15) [136]. En concreto, el documento exige un estudio de dispersión de contaminantes a la atmósfera que justifique la altura de uno de sus de focos para asegurar la correcta difusión de los gases.

Además de estudiar el fenómeno de dispersión en las condiciones normales de operación, se ha propuesto como objetivo de esta investigación evaluar el impacto de una medida de mitigación de la contaminación. La medida escogida está relacionada con el uso de recuperadores de calor y su impacto sobre la altura efectiva de dispersión de los gases. Como ya se indicó, la instalación cuenta con este tipo de dispositivos en base a la aplicación de las mejores técnicas disponibles (MTD) y su declaración en la última revisión de la Autorización Ambiental Integrada (abril 2019, expte. AAI-068/15) [136].

El uso de recuperadores de calor residual en procesos de combustión es una práctica muy habitual en la industria que tiene como objetivo elevar la temperatura de los fluidos que entran a alimentar el proceso. Este aumento de temperatura inicial contribuye a disminuir la demanda de calor en la caldera, lo que finalmente repercute en un menor consumo de combustible y una mejora de la eficiencia energética del proceso. Este calor que se reaprovecha en el proceso proviene de la temperatura de los gases de escape producidos en el ciclo de combustión anterior.

Sin embargo, la reducción de la temperatura a la que se expulsan los gases de la chimenea se produce a costa de una disminución en su velocidad de salida. Esta pérdida de inercia de los gases se traduce finalmente en una altura efectiva de emisión menor, lo que perjudica la dilución de los contaminantes facilitando que estos alcancen el nivel del suelo más rápidamente. El impacto de los sistemas de recuperación de calor en la altura efectiva de emisión y sus consecuencias en los niveles de contaminación ya se contemplaron en un estudio previo [104]. En él, los autores fijaron diferentes temperaturas de salida de la chimenea para analizar el efecto sobre la calidad del aire cercano a la fuente y definieron un indicador para cuantificar el impacto de los sistemas de recuperación de calor. Siguiendo esta misma lógica, en este trabajo se analizará el efecto de regular los recuperadores de calor de la planta representado en la obtención de tres temperaturas de salida de los gases diferentes. Se analizarán las diferencias obtenidas en las simulaciones con las distintas temperaturas de escape y se relacionarán con las condiciones meteorológicas existentes en cada escenario para determinar el nivel de regulación del recuperador necesario en cada caso. De esta forma, se pretende alcanzar un compromiso entre impacto de la dispersión de contaminantes y consumo energético de la planta en función de las condiciones meteorológicas que se produzcan en cada caso.

5.1 Análisis y selección de escenarios meteorológicos

Uno de los elementos fundamentales en la realización de estudios de modelización atmosférica es el acceso a series de datos meteorológicos del área de estudio que permitan determinar las condiciones más interesantes para las simulaciones. En este trabajo se han obtenido los datos de la estación meteorológica de Meriñán, situada a unos 3 km al noroeste de la instalación. Con esta información se han elaborado las rosas de frecuencia de los vientos para cada estación del año, tal y como refleja la Figura 16.

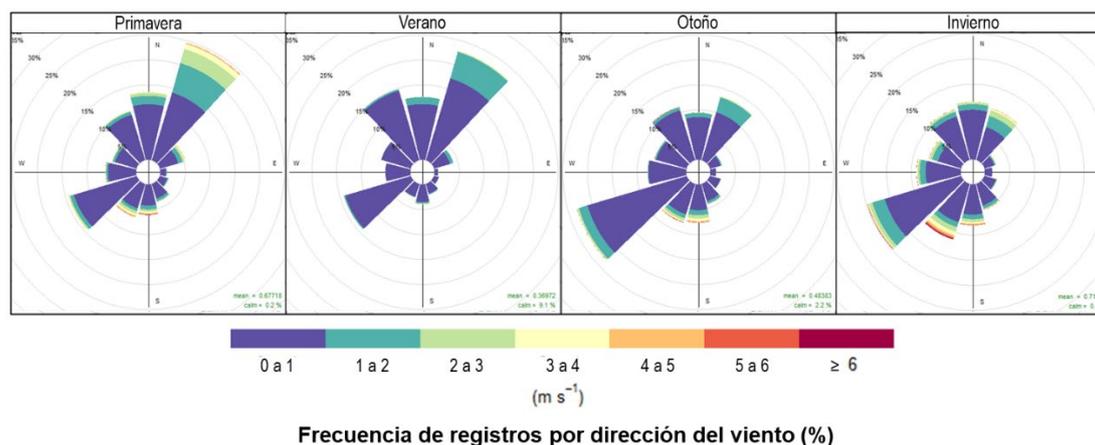


Figura 16. Rosas de los vientos para cada estación del año en la estación meteorológica de Merián.

De estos gráficos se puede concluir que el suroeste es la dirección predominante del viento la mayor parte del año, pero especialmente durante las estaciones frías (otoño e invierno), seguida de la dirección noreste, que prevalece durante las estaciones cálidas (primavera y verano). Las condiciones del viento son mayoritariamente tranquilas durante todo el año, aunque las velocidades moderadas a altas proceden principalmente de las direcciones sur y suroeste en invierno y, en menor medida, en primavera y otoño. En primavera, también se producen velocidades moderadas para la dirección del viento predominante que es la nordeste.

Los vientos procedentes del suroeste y del nordeste son especialmente interesantes para el propósito de este trabajo. El motivo es que la dirección de viento suroeste da lugar a una situación en la que la instalación se encuentra a sotavento de la colina cercana, quedando potencialmente expuesta a una zona de recirculación de flujo que podría desarrollarse detrás de la formación montañosa. En esta situación se puede producir el arrastre de los contaminantes de los gases de escape, lo que afectaría negativamente a los mecanismos de dispersión y a la capacidad de evacuación de los contaminantes. Por otro lado, cuando el viento sopla desde el nordeste, se produce la situación contraria, quedando la chimenea a barlovento de la colina. En este caso, existe un riesgo de que los gases de la chimenea se vean afectados por el movimiento descendente de un remolino o vórtice que podría surgir como consecuencia de la interacción del flujo al encontrarse con la cara norte de la colina. El nivel de elevación que alcanza la pluma contaminante en su salida antes de que comience a ser desviada significativamente de su trayectoria vertical es muy relevante para la dispersión de los contaminantes.

En cuanto a las velocidades del viento, dado que esta investigación se centra en la formación de zonas de recirculación y remolinos, sólo se tendrán en cuenta para el análisis condiciones de velocidad moderadas a altas, bajo las que dichos fenómenos de flujo podrían verse intensificados. Por lo tanto, sólo se simularán valores de velocidad del viento de al menos 6 m/s. Debe tenerse en cuenta que,

5 Descripción del caso de estudio

para tales velocidades del viento, la capa límite atmosférica presenta una estratificación neutra, por lo que los efectos térmicos son despreciables.

De acuerdo a estos criterios, para las simulaciones se han seleccionado los escenarios meteorológicos señalados en la Tabla 4, en la que V_{ref} determina la velocidad de referencia del viento a 10 m sobre el nivel del suelo. Se debe tener en cuenta que un valor de 6 m/s representa una velocidad moderada, mientras que 10 m/s se pueden considerar un viento intenso.

<i>Escenario</i>	V_{ref} (m/s)	<i>Dirección viento incidente</i>	<i>Temperatura media estacional</i>
E1	6	240°(SSO)	7.5 °C (invierno)
E2	10	210° (SSO)	7.5 °C (invierno)

Tabla 4. Escenarios meteorológicos seleccionados para las simulaciones.

Por otro lado, es posible conocer las condiciones generales en cuanto a concentración de contaminantes de la zona consultando los datos de inmisión registrados por la estación más cercana de la red de control de la calidad del aire del Principado de Asturias. La Figura 17 muestra las posiciones del foco emisor, estación meteorológica de Meriñán y la estación de inmisión de contaminantes consultada.

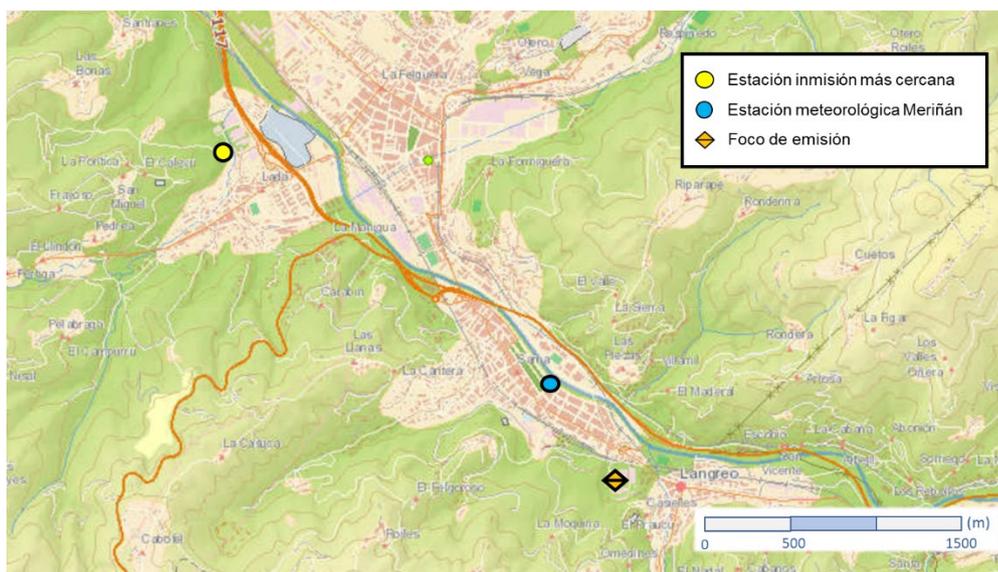


Figura 17. Ubicación del foco emisor y de las estaciones meteorológica y de control de la calidad del aire consultadas.

Con el registro de datos de la estación de inmisión se ha elaborado la Figura 18, que muestra la evolución de las concentraciones de contaminantes primarios. Para realizar los cálculos estadísticos de evolución de los diferentes contaminantes se ha utilizado la librería Openair del lenguaje de programación R, habiéndose aplicado un intervalo de confianza sobre los datos del 95%.

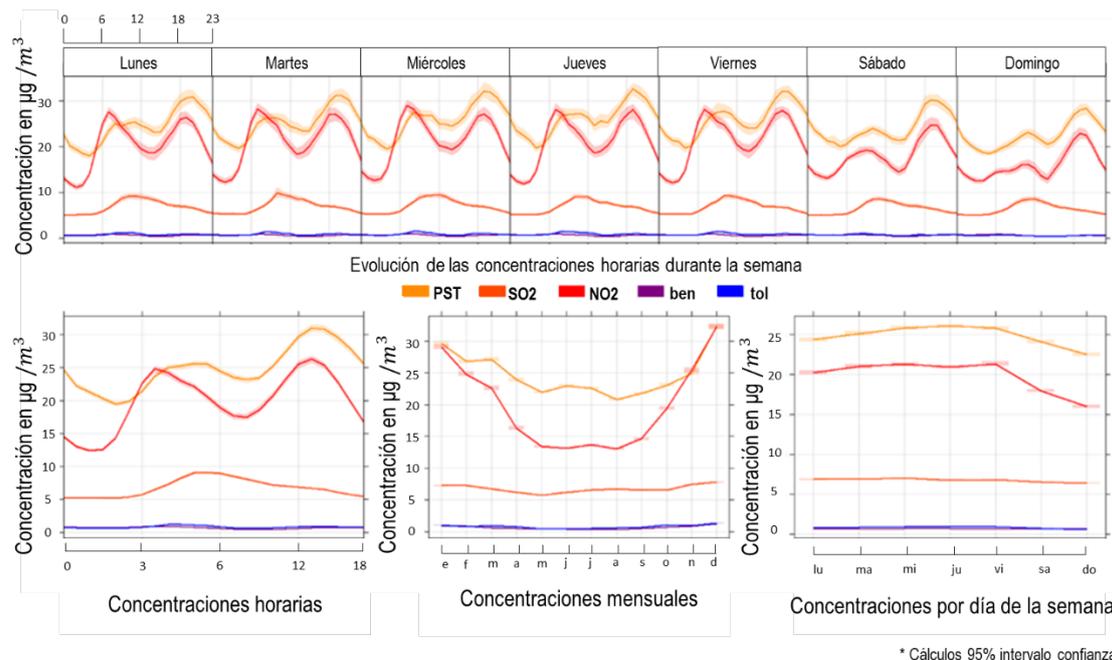


Figura 18. Evolución de los contaminantes en la estación de inmisión más cercana a la instalación (PST=partículas sólidas, ben=benceno, tol=tolueno).

A la vista de estos gráficos se pueden extraer una serie de conclusiones. La mayoría de los contaminantes analizados exhiben diariamente dos picos de concentración muy marcados de forma diaria que coinciden con los tramos horarios típicos considerados como horas punta en las carreteras. Durante el fin de semana, no obstante, el primer pico (correspondiente a las horas de mañana) se ve muy suavizado, conservándose sólo el correspondiente a las horas de la tarde o noche, lo que a priori hace pensar que la mayor fuente de contaminante procede de las emisiones de tráfico. La evolución de la concentración por días de la semana muestra así mismo un descenso general de los niveles durante el fin de semana. Las concentraciones mensuales son claramente superiores durante los meses más fríos, aunque la diferencia entre el invierno y el verano es mucho más acusada en el caso del NO_2 , donde el uso de calefacciones podría explicar este aspecto. En el caso de las partículas (PST), la diferencia de concentraciones entre estaciones es menos acusada, así como los picos diarios son menos marcados.

En contraposición, la tendencia del SO_2 es mucho más estable en comparación con el caso anterior. No se aprecian variaciones significativas a lo largo de los distintos días de la semana ni de los meses del año. De forma diaria, se observa un pico suave en torno a las 10 horas. Este perfil más uniforme hace pensar que en la zona existe otra fuente de emisión de SO_2 con un peso más significativo que el que tienen las emisiones de tráfico, presumiblemente con un patrón de emisión más continuo. Debido a esto, se ha escogido el gas SO_2 como el contaminante principal objeto de estudio en esta investigación.

5.2 Selección y descripción del foco emisor

La actividad desarrollada en las instalaciones da lugar a distintos tipos de emisiones contaminantes a la atmósfera, pudiendo distinguirse entre emisiones puntuales y difusas. También se consideran como una categoría aparte las emisiones de gases de efecto invernadero.

Los focos de emisión de la planta se encuentran identificados en el AAI, describiéndose a continuación los focos canalizados más significativos que consumen gas de batería.

- **Foco F1. Emisiones de gases de combustión en el proceso de secado y molienda de inertes.** Los contaminantes esperados en esta emisión son gases procedentes de la combustión de gas de batería, los cuales pasan por un proceso de filtración para reducir el contenido de sólidos arrastrados. Estas emisiones suponen un pequeño impacto dada la gran dilución de aire que acompaña a los gases.
- **Foco F2. Emisiones de gases de combustión de gas de batería para el calentamiento de la batería de coque.** La batería de hornos de coque existente en las instalaciones dispone de 552 quemadores para el calentamiento de los 22 hornos intercalados entre 23 cámaras de calentamiento. Estas cámaras de calentamiento están unidas dos a dos. Cuando en una de las cámaras entra gas y aire, en la otra se realiza la extracción de los gases quemados. Los recuperadores de calor aprovechan la temperatura de los gases quemados calentando el aire a utilizar en la combustión. Los contaminantes de esta emisión son los propios de la combustión de gas de batería y se produce de forma continua durante las 24 horas del día a través de una chimenea.
- **Foco F3. Emisiones de gases de combustión de gas de batería en la caldera de vapor nº2.** Estas emisiones proceden de una instalación auxiliar que en la actualidad se utiliza únicamente unas 18 horas al mes dado que el vapor utilizado procede de la planta de valorización energética, ya que sólo se pone en funcionamiento en los momentos en los que es necesario realizar controles de emisión de contaminante a la atmósfera. Consiste fundamentalmente en una caldera donde se produce vaporización de agua y una chimenea para evacuación de los gases de combustión resultantes.
- **FA8-F8E. Emisiones de gases de combustión de las antorchas de combustión del excedente de gas y de emergencia del barrilete.** La red de gas de la instalación dispone de antorchas que permiten, en caso de necesidad, la incineración del gas de batería antes de ser evacuado a la atmósfera.

Para el estudio de dispersión que se plantea en el presente trabajo, se ha decidido considerar únicamente el foco asociado a la cámara de calentamiento de los hornos (F2). El motivo de esta

elección es que F2 constituye el foco de emisiones canalizadas más significativo de la instalación (en dimensiones y número y magnitud de contaminantes regulados) y con un funcionamiento continuado, mientras que el resto de las fuentes solo operan unas pocas horas al año o en condiciones que no se corresponden con el funcionamiento normal. De acuerdo a la descripción anterior, la emisión de gas de este foco se produce de forma continuada durante las 24 horas del día.

Pero, además, cabe destacar que en la última revisión del AAI (abril 2019, expte. AAI-068/15) [136] se solicitó un estudio de dispersión de contaminantes para el foco F2 para demostrar la efectividad de dispersión del mismo, lo que justifica el especial interés existente sobre el foco seleccionado. Tampoco se estudiarán las aportaciones de los focos de emisiones difusas, que también se encuentran identificados en el correspondiente anejo.

En el primer Anexo de la última revisión del AAI (abril 2019, expte. AAI-068/15) [136] se ofrece información detallada sobre cada uno de los focos canalizados de la instalación, su ubicación y los límites de emisión legales para cada uno de ellos. Esta información ha sido detallada en la Tabla 5 para el foco seleccionado F2.

Foco		Proceso	Combustible	Altura (m)	Diámetro (m)	Coordenadas UTM Huso 30 T
F2	Cámaras de calentamiento de los hornos	Coquización	Gas de batería	56	2.960	X: 283122E Y: 4796298N

Tabla 5. Información relevante perteneciente a los distintos focos canalizados de la instalación.

Como se puede observar en la Tabla 5, se conoce la altura y diámetro del foco F2, pero no se dispone de información directa acerca de la temperatura o velocidad de salida de los gases de combustión. Estos parámetros son necesarios para llevar a cabo la simulación, por lo que será necesario definirlos.

5.2.1 Definición de la temperatura y velocidad de salida de los gases

Atendiendo al contenido del Documento BREF [135] que resulta de aplicación a la instalación, se observa que en la industria de procesos de metales férreos con calentamiento y recuperación de calor posterior la temperatura de salida de los gases se suele situar en torno a los 200 ° C. Según aportaciones de la Asociación Europea del Acero (EUROFER) a dicho documento, muchas plantas recuperan el calor residual de los gases de escape por motivos de eficiencia energética, obteniéndose temperaturas resultantes de los gases residuales en el entorno de 150 – 200 ° C. En el informe se menciona también un ejemplo concreto de un horno de calentamiento de planchones, con una temperatura de salida de gases que se sitúa en 200 ° C [137]. Si se utilizaran sistemas de reducción catalítica selectiva para reducción de NOx se necesitaría elevar la temperatura para adaptarse a los

requerimientos de dicha tecnología. Sin embargo, no consta en la Autorización Ambiental Integrada de la instalación el uso de esta clase de sistemas, por lo que el rango de 150 – 200 ° C se puede considerar de aplicación.

Incluso cuando la combustión se produce para fines distintos a los del proceso industrial principal, como ocurre en el presente caso con la quema del gas remanente para producción eléctrica, las temperaturas de escape que se manejan son similares. En el informe [138] elaborado por el clúster IQPA (Industrias Químicas y Procesos del Principado de Asturias), cuyo contenido cuenta con referencias de información facilitadas por IQN, se señala a esta posibilidad como una forma de aprovechar los subproductos del proceso y aumentar la eficiencia energética. Para su implementación se proporciona una serie de recomendaciones, como es el uso de motores alternativos de combustión interna para instalaciones de cogeneración de potencia media-baja. Estos motores suelen incorporar recuperadores de calor de los gases de escape de la combustión y en el informe se puede consultar el rendimiento térmico obtenido para distintos valores de temperatura de enfriamiento típicas de los gases (200, 145 y 110 ° C).

En el documento de la Autorización Ambiental Integrada de la instalación se confirma el uso de recuperadores de calor residual con el propósito de reducir el consumo de combustible de la planta. Sin embargo, la reducción de la temperatura a la que se expulsan los gases de la chimenea se produce a costa de la disminución de la velocidad de salida, lo que finalmente se traduce en una menor altura efectiva de emisión. El impacto de los sistemas de recuperación de calor en la altura efectiva de emisión y sus consecuencias en los niveles de contaminación ya se contemplaron en un estudio previo [104]. En él, los autores fijaron diferentes temperaturas de salida de la chimenea para analizar el efecto sobre la calidad del aire cercano a la fuente y definieron un indicador para cuantificar el impacto de los sistemas de recuperación de calor.

En el presente trabajo se ha considerado una temperatura de salida del gas inicial o de referencia de 150 ° C, que supone la plena utilización de los sistemas de recuperación de calor. Es importante destacar que generalmente se evitan las temperaturas inferiores a este valor, ya que pueden dar lugar a condensados ácidos en el interior de la estructura de la chimenea. A continuación, se plantea la realización de simulaciones adicionales aumentando la temperatura de los gases a 200 ° C y 250 ° C, lo que supone un uso regulado o parcial de los recuperadores. Las nuevas simulaciones deben servir para evaluar el impacto de la recuperación del calor residual de los gases en los mecanismos de dispersión, lo que permitirá establecer diferentes tasas de conversión del calor para garantizar unos niveles mínimos de calidad del aire ambiente en función de las condiciones meteorológicas.

Por otra parte, la velocidad de los gases de escape suele situarse en el intervalo recomendado de 5 a 20 m/s. Esta variable puede calcularse para las distintas condiciones de temperatura según la expresión (6).

$$v_{eg} = C_d \sqrt{2gH_c \frac{T_i - T_e}{T_i}} \quad (6)$$

donde C_d es el coeficiente de descarga (0.65), g es la aceleración de la gravedad, H_c es la altura de la chimenea, T_i es la temperatura del gas de escape y T_e la temperatura ambiente exterior. Las velocidades resultantes para las distintas temperaturas de salida se muestran en la Tabla 6.

T_e	T_i		
	150 ° C (423.15 K)	200 ° C (473.15 K)	250 ° C (523.15 K)
7.5 ° C (280.65 K)	12.5	13.7	14.7
15 ° C (288.15 K)	12.2	13.5	14.4

Tabla 6. Velocidades de salida del gas para diferentes condiciones de temperatura en m/s.

Para corroborar el cálculo de las velocidades estimadas, se ha decidido comparar con valores procedentes de otros estudios de dispersión industriales. Para ello, se han recopilado distintos trabajos e informes con sus valores correspondientes en la Tabla 7.

Ref.	Capacidad	Altura chimenea (m)	Diámetro (m)	T salida gases (° C)	Velocidad salida gases (m/s)
[129]	1500 MW	130 (f1, f2), 90 (f3, f4)	-	-	0.5 (f1), 2 (f2)
[105]	4000 MW	330 (f1), 300 (f2)	12 (f1), 10 (f2)	-	0,5 – 4 (f1), 1 – 5 (f2)
[104]	47 MW	33	3,66	382 /200*	23,5/17*
[139]	1.1·10 ⁶ ton coque	133	3,6	190	3 - 4
IQN	1.32·10 ⁵ ton coque	56	2,96	250, 200, 150	12 – 15 (estimado)

**Estimación bajo hipótesis de propiedades de gases ideales*

Tabla 7. Recopilación de datos de ejemplos de chimeneas industriales procedentes de otros estudios.

En [129] se presenta el caso de estudio de una planta termoeléctrica de 1.5 GW en el que se estudia la dispersión desde cuatro chimeneas industriales, dos de las cuales poseen 90 m de altura y las otras dos 130 m. Las velocidades de salida que se estudian en estas simulaciones son de 0.5 y 2 m/s. En [105] se estudia la dispersión desde otra central termoeléctrica de 4 GW, con dos chimeneas de 300 y 330 metros de altura y 12 y 10 metros de diámetro respectivamente. En este caso, se estudia el efecto de distintos regímenes de velocidad de salida de los gases que varían entre 0.5 y 5 m/s. En

[104], se estudia otra central térmica de 47 MW y una chimenea de 3.66 m de diámetro y aproximadamente 33 m de altura. La velocidad de salida de los gases para este último caso es de 23.5 m/s a una temperatura de 382 °C (655 K), lo que supondría una velocidad de en torno a 17 m/s para 200 °C (473.15 K).

Otro ejemplo que permite establecer una comparación es el de la coquería de ArcelorMittal [139]. En este caso, la instalación dispone de 2 chimeneas de emisión de los gases de combustión procedentes del calentamiento de los hornos de coquización. Ambos focos emisores poseen una altura de 133 m y un diámetro de boca de chimenea de 3.6 m. Con estas características constructivas, los gases de combustión salen a una temperatura de 190 °C y un caudal de 125000 Nm³/h, lo que produce una velocidad de salida de 3.4 m/s. Mencionar también que la capacidad de producción de coque en esta instalación es de 1 millón cien mil toneladas anuales.

Parece claro que, a grandes alturas de chimeneas, las velocidades de salida de los gases de combustión se reducen a valores por debajo de los 5 m/s. El caso de mayor velocidad se produce para el estudio [104], que por sus características es el que presenta mayor similitud con la instalación de IQN, a excepción de la temperatura de salida que con gran probabilidad es muy superior debido al sistema de recuperación del calor en esta última. Al tener la chimenea de IQN una altura superior con un diámetro similar, sería esperable una velocidad de gases ligeramente inferior. El caso de la coquería de Arcelor [139] puede ser también una buena referencia para la temperatura de salida de gases del proceso, contando además con un diámetro parecido. Al tener la chimenea de IQN una altura bastante inferior cabe esperar una velocidad de salida de gases superior a este último ejemplo, a pesar de que el caudal de gases de combustión sea inferior debido a la menor producción de coque. De acuerdo a las referencias anteriores, cabría esperar que las velocidades de salida del foco F2 se encontraran en un rango de 3 a 17 m/s. Los valores de las velocidades obtenidas en el cálculo se encuentran efectivamente dentro de dicho rango, por lo que se puede considerar una estimación razonable.

5.2.2 Cálculo de las tasas de emisión de los contaminantes de interés

Por otro lado, una vez conocidas las velocidades y temperaturas de salida de los gases, el siguiente paso consiste en determinar las tasas de emisión de los distintos contaminantes que los componen. Para ello, se va a tomar como referencia los límites de emisión legales definidos en el primer Anexo de la última revisión del AAI (abril 2019, expte. AAI-068/15) [136] y recogidos en la Tabla 8.

Contaminante	Límite emisión [Anexo III AAI] (mg/Nm ³)
NO ₂	700
SO ₂	500

Ben	1
-----	---

Tabla 8. Tasas de emisión de los distintos contaminantes para la simulación.

Del listado de contaminantes regulados, se ha seleccionado para la simulación el dióxido de azufre, el dióxido de nitrógeno y el benceno por su relevancia e impacto en el escenario industrial particular. Los límites de emisión de cada contaminante se definen como un valor de masa máxima por unidad de volumen de la mezcla de gases. Dado que la unidad de volumen se indica para condiciones atmosféricas normales (0° C, 101.3 kPa), en cada uno de los tres escenarios de temperatura considerados es necesario tener en cuenta la variación de la densidad de los gases de combustión. Se considerará que la composición de dicha mezcla de gases es similar a la del aire por simplicidad, así como las siguientes hipótesis de cálculo.

- Todo el volumen de gas de combustión de la planta se considera asociado a la cámara de calentamiento del coque (F2).
- Los valores límite de emisión de gases están indicados en condiciones normales (273.15 K y 101.3 kPa), por lo que será necesario calcular los nuevos valores correspondientes a las temperaturas de salida de gases determinados anteriormente.
- Se considera que el consumo es continuo y uniforme a lo largo del año.
- Se considerará que los gases de salida se ajustan a las propiedades de gas ideal, con la relación (7).

$$\frac{V_1}{V_2} = \frac{T_{i1}}{T_{i2}} \quad (7)$$

donde V es el volumen.

- La presión es la atmosférica (101.3 kPa) y se conoce la sección de salida de la chimenea a través del dato del diámetro.

Con los datos de velocidades estimadas y el diámetro de la sección de salida de la chimenea es posible calcular los caudales asociados a cada escenario y, finalmente, la tasa de emisión de cada contaminante. Finalmente, los cálculos de las tasas de emisión se han recogido en la Tabla 9.

Contaminante	T_i		
	250 °C (523.15 K)	200 °C (473.15 K)	150 °C (423.15 K)
NO ₂	5.373	5.537	5.652
SO ₂	3.838	3.955	4.037

ben	0.008	0.008	0.008
-----	-------	-------	-------

Tabla 9. Tasas de emisión (g/s) de los distintos contaminantes seleccionados en cada uno de los escenarios de estudio.

Como ya se mencionó, la emisión del foco F2 se produce de forma continua, por lo que si se tomara las tasas de emisión correspondientes a la temperatura de 200 °C se obtendrían alrededor de 175000 kg de dióxido de nitrógeno (NO₂) y 125000 kg de dióxido de azufre (SO₂) emitidos en total durante un año. A continuación, se ha accedido al Registro Estatal de Emisiones y Fuentes Contaminantes de España (PRTR-España) [140] para consultar las cantidades emitidas reportadas para ambos contaminantes durante los últimos años, tal y como se refleja en la Tabla 10.

Año	NO ₂ (kg)	SO ₂ (kg)
2019	193116	107384
2020	144300	72600
2021	170000	73800

Tabla 10. Emisiones a la atmósfera en kg/año registradas en el PRTR-España para la instalación IQN.

Con la información proporcionada en la Tabla 10 se observa que las estimaciones de emisiones de dióxido de nitrógeno (NO₂) concuerdan en gran medida con las cantidades registradas anualmente por la instalación. En realidad, la tasa de emisión podría ser algo inferior al valor estimado, dado que las cantidades declaradas en el registro PRTR corresponden a la suma de todos los focos de la instalación y no sólo a los derivados de la cámara de calentamiento (F2). Así mismo, el valor real de la tasa de emisión puede estar por debajo de lo que marca el límite legal. En el caso del dióxido de azufre (SO₂), la estimación total se encuentra por encima de los valores registrados. Esto puede deberse a que las tasas de emisión reales de este compuesto estén sensiblemente por debajo de los límites marcados por la ley, posiblemente debido a la desulfuración del gas de batería que se exige como medida para la operación de la instalación en la última revisión del AAI (abril 2019, expte. AAI-068/15) [136].

De igual manera, llama la atención que para los compuestos SO₂ y NO₂ también se exige su control en otros focos de la instalación, pero la exigencia de medición continua sólo se produce en F2, frente a las periodicidades más espaciadas (semestral, anual y trienal) de los demás focos. Este dato hace pensar también en un mayor peso del foco F2 para estos contaminantes respecto a los demás focos. Por otro lado, las antorchas de la instalación (F8) también queman el gas excedente en situaciones excepcionales (averías y paradas de mantenimiento) pudiendo generar los mismos compuestos que el foco F2, pero dado su carácter eventual se va a considerar que su aportación al total es pequeña.

5.3 Resumen de escenarios de simulación

Como resultado de la combinación de las condiciones meteorológicas de interés, así como las diferentes temperaturas de salida de los gases que se pretende evaluar en el modelo, surge un conjunto de escenarios de simulación que son los que se ejecutarán en el modelo. La Tabla 11 recoge cada uno de los 6 escenarios resultantes con su denominación y los parámetros que los caracterizan, recordando que T_i corresponde a la temperatura del gas de escape y T_e a la temperatura ambiente exterior.

Escenario	Condiciones
E1.1	$v= 6 \text{ m/s}$, $\text{dir}= 240 \text{ (SSO)}$, $T_e=7.5 \text{ }^\circ\text{C}$, $T_i=150 \text{ }^\circ\text{C}$
E1.2	$v= 6 \text{ m/s}$, $\text{dir}= 240 \text{ (SSO)}$, $T_e=7.5 \text{ }^\circ\text{C}$, $T_i=200 \text{ }^\circ\text{C}$
E1.3	$v= 6 \text{ m/s}$, $\text{dir}= 240 \text{ (SSO)}$, $T_e=7.5 \text{ }^\circ\text{C}$, $T_i=250 \text{ }^\circ\text{C}$
E2.1	$v= 10 \text{ m/s}$, $\text{dir}= 210 \text{ (SSO)}$, $T_e=7.5 \text{ }^\circ\text{C}$, $T_i=150 \text{ }^\circ\text{C}$
E2.2	$v= 10 \text{ m/s}$, $\text{dir}= 210 \text{ (SSO)}$, $T_e=7.5 \text{ }^\circ\text{C}$, $T_i=200 \text{ }^\circ\text{C}$
E2.3	$v= 10 \text{ m/s}$, $\text{dir}= 210 \text{ (SSO)}$, $T_e=7.5 \text{ }^\circ\text{C}$, $T_i=250 \text{ }^\circ\text{C}$

Tabla 11. Escenarios de simulación considerados.

6 Metodología

6 Metodología

En esta tesis doctoral se ha investigado y diseñado una metodología para el desarrollo de modelos numéricos CFD destinados al estudio de la dispersión de contaminantes en la capa límite atmosférica. Esta metodología ha sido desarrollada en base a una revisión crítica de la literatura, seleccionando las mejoras prácticas detectadas y justificando la no incorporación de aquellas técnicas que, aun siendo recomendadas en la bibliografía, no resultan viables o válidas para el presente caso de uso. Para estos casos se plantean alternativas siempre que sea posible.

La herramienta elegida para la simulación y materialización del modelo CFD ha sido el software de simulación numérica ANSYS Fluent, así como otros módulos y aplicaciones asociados a la familia ANSYS. La selección de un software concreto suele tener implicaciones en distintos aspectos del diseño y la concepción arquitectónica del modelo en sus distintas fases, ya que es necesario adaptarse a los requisitos de formatos de datos del código implementado en el mismo.

El proceso de creación de un modelo CFD comprende una serie de etapas que han sido representadas en la Figura 19. En los apartados sucesivos se aborda cada una de estas etapas, a excepción de la fase de validación, que ha sido recogida de forma independiente en la sección “7. Validación”.

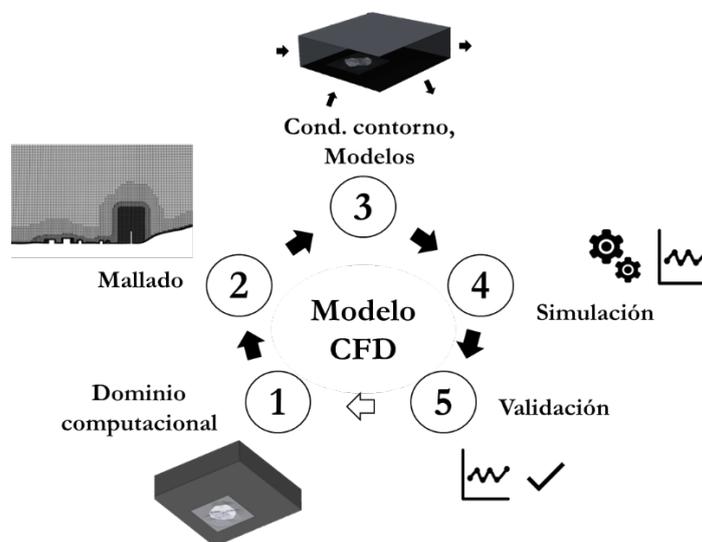


Figura 19. Fases de creación de un modelo numérico CFD.

6.1 Geometría y dominio computacional

El primer paso en la creación de un modelo numérico de CFD consiste en la generación del dominio geométrico. Para ello, se debe definir en primer lugar el diseño conceptual o arquitectónico del mismo, es decir, las distintas partes que lo integran y sus dimensiones. En el problema en cuestión se desea simular un volumen de fluido, que corresponde a una porción determinada de aire de la atmósfera. Dicho volumen estará delimitado inferiormente por la superficie del terreno sobre el que fluye, así como por las superficies de distintos obstáculos (edificios, infraestructuras, vegetación) con las que interactúa. La porción de aire a modelar estará así mismo delimitada superior y lateralmente por superficies virtuales, es decir, superficies que no existen físicamente en la realidad pero que introducimos para definir los límites del dominio a simular. De esta forma, el diseño del dominio geométrico se puede asimilar a una especie de caja de aire, tal como muestra la Figura 20, en la que destaca el relieve del terreno delimitando la parte inferior.

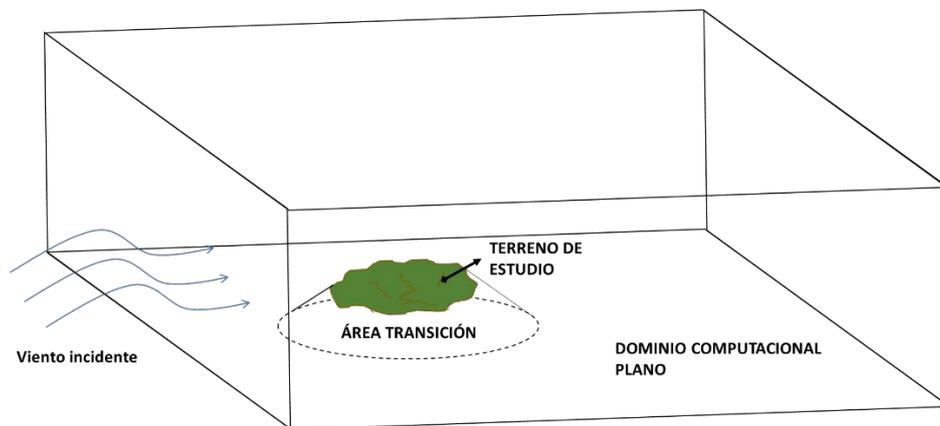


Figura 20. Diseño general preliminar del dominio geométrico.

Sin embargo, este contorno inferior no está integrado únicamente por el terreno objeto de estudio, sino que se pueden distinguir además otras dos regiones adicionales. Los tres componentes que forman este contorno inferior se han representado en la Figura 21 y se enumeran y describen a continuación.

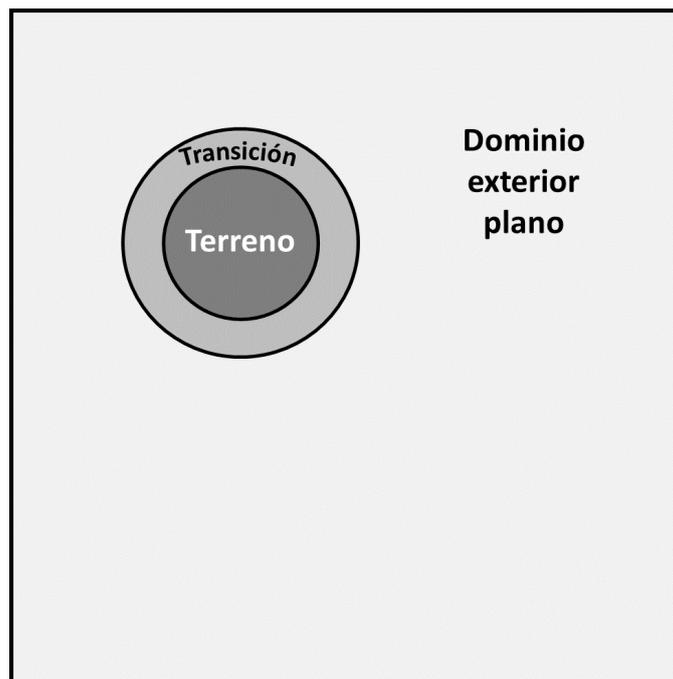


Figura 21. Componentes del contorno inferior del dominio computacional.

- **Área de estudio o terreno.** Corresponde a la porción del terreno elegida para el estudio. Se trata de una superficie circular de 1 km de radio cuyo centro se corresponde con la localización de la chimenea o fuente contaminante objeto de estudio.
- **Dominio exterior vacío.** Se trata de una superficie plana que rodea al terreno y extiende notablemente el tamaño del contorno inferior del dominio hasta el límite de intersección con los contornos laterales. La función de esta superficie es asegurar unas condiciones de entrada y salida del flujo en el dominio homogéneas [112]. El dominio exterior debe tener unas dimensiones suficientes para asegurar unas condiciones de entrada y salida del flujo homogéneas y evitar aceleraciones artificiales producidas por efectos de confinamiento [20]. Su función y características se detallan con mayor detalle más adelante.
- **Zona de transición.** Se trata de una región que permite conectar la superficie del terreno, de contorno variable e irregular, con el dominio exterior plano mediante una pendiente gradual o suavizada que evite perturbaciones artificiales del flujo. Para obtener una zona de transición adecuada se deben cumplir algunos criterios de diseño.

A continuación, se describe el proceso de diseño y creación de cada una de las partes del dominio geométrico.

6.1.1 Generación de la superficie del terreno

Para poder generar una superficie tridimensional que represente el relieve de una región geográfica es necesario disponer de datos de elevación del terreno. Para ello, el Centro Nacional de Información

Geográfica (CNIG)¹, ofrece numerosos recursos de información geográfica de utilidad, entre los que destacan los siguientes.

- **Modelo Digital del Terreno.** Consiste en una estructura numérica de datos que representa la distribución espacial de una variable continua, la altura ortométrica del terreno. Se encuentra disponible en distintos pasos de malla (2, 5, 25 y 200 m) y formato ASCII (*.asc).
- **Datos LiDAR.** Se trata de ficheros digitales con información altimétrica de cobertura nacional en el formato de una nube de puntos capturada mediante vuelos con sensor LiDAR. Estos datos se distribuyen en ficheros de 2x2 km de extensión con algunas excepciones de 1x1 km y una densidad de puntos de 0.5 puntos/m² o superior, disponibles en color verdadero RGB o en infrarrojo. El formato de entrega de los datos es un fichero *.laz. (formato de compresión de ficheros las).

Aunque ambas opciones son válidas, en este trabajo se ha optado por los datos LiDAR debido a las ventajas que presentan. En primer lugar, estos datos permiten la generación de un modelo digital del terreno a cualquier resolución por encima de su densidad de muestreo, que como se indicó es muy elevada. Por el contrario, los citados modelos digitales del terreno disponibles en la página web, presentan resoluciones espaciales excesivas para los objetivos del proyecto (resoluciones de 2 y 5 m) que complicarían mucho el procesamiento geométrico. En cambio, otras de las resoluciones disponibles son insuficientes (resoluciones de 25 m y superior). De esta forma, los datos LiDAR permitirían obtener una resolución espacial ajustada a demanda. Por otro lado, los ficheros LiDAR cubren extensiones más reducidas que en el caso de los modelos de elevación, demostrando una mayor facilidad de manejo en su modificación y procesamiento por el programa de edición gráfica elegido. Por último, otra notable ventaja de esta tecnología es que permite clasificar cada punto de la nube en distintas categorías (terreno, edificios, vegetación baja, vegetación media, vegetación alta...) lo que aporta una información muy valiosa para la definición de las características del modelo y diseño. Todos estos motivos llevaron a la elección de los datos LiDAR para la construcción del modelo geométrico.

Para obtener la nube de puntos, se debe buscar la ubicación de la instalación industrial de estudio en el visor del centro de descargas, lo que llevará a la descarga del fichero que contiene la ubicación deseada. Como se pretende cubrir también parte del entorno de la instalación industrial, se descargan también otros ficheros adyacentes al que contiene la instalación, asegurándose que los datos descargados cubren una superficie suficiente para su implementación en el modelo geométrico. Esto

¹ Centro de descargas del CNIG. <https://centrodedescargas.cnig.es/CentroDescargas/index.jsp> Fecha último acceso: 09/12/2021

se puede realizar trazando un polígono de dimensiones apropiadas en el visor de descargas, lo que permitirá obtener el listado de ficheros que intercepta.

Los datos descargados se presentan en formato *laz* y se deben descomprimir a otro formato apto para el programa de edición gráfica elegido. En este caso, se utilizó el software gráfico Autocad Civil 3D y se empleó una herramienta open-source o de acceso abierto para transformar los datos a formato *las* de forma previa a su introducción en el software de diseño asistido por ordenador (CAD), la herramienta LAsTools². En la Figura 22 se puede observar el aspecto de los ficheros de nubes de puntos una vez introducida en el software de edición CAD.

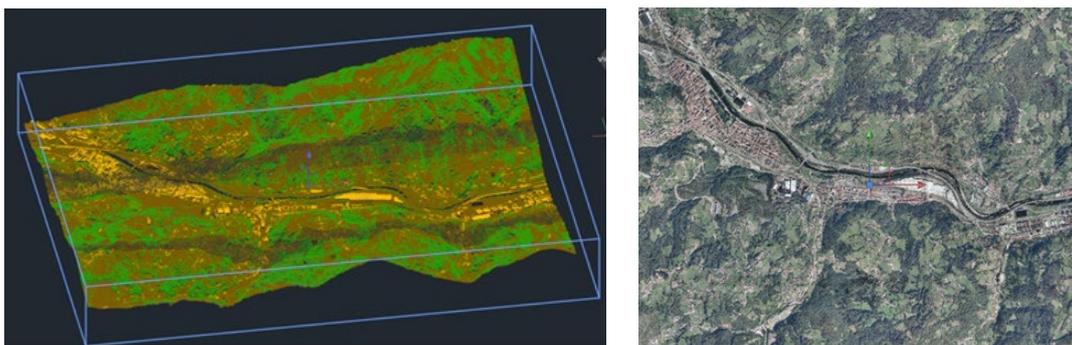


Figura 22. Visualización de los datos LiDAR en vista 3D y coloreados según categoría (izquierda) y en planta y coloración RGB (derecha) de la zona de estudio.

A continuación, se localizó la posición de la fuente industrial y se delimitó el área de estudio para extraer el conjunto de puntos correspondientes a dicha región, descartando los puntos que no forman parte de la misma. Tal y como se explicó, el área de estudio corresponde a una región circular de 600 m de diámetro cuyo centro coincide con la fuente emisora. Esta configuración se puede observar en la Figura 23.

² Rapidlasso GmbH. <http://lastools.org/> Fecha último acceso: 09/12/2021

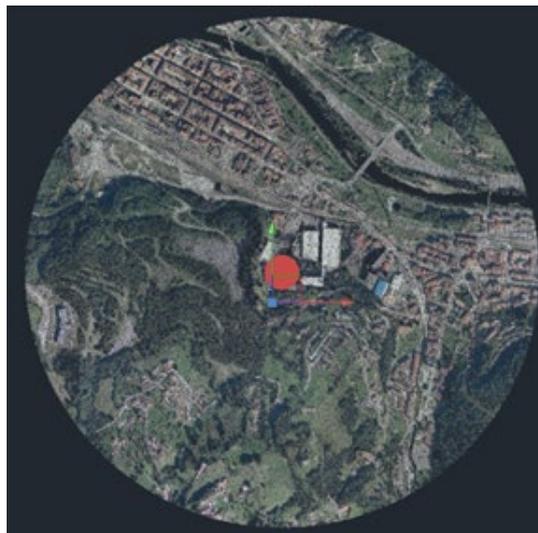


Figura 23. Nube de puntos correspondiente al área de estudio escogida. El marcador rojo indica la ubicación de la fuente emisora.

Una vez aislados los puntos de interés, el siguiente paso consiste en generar una superficie geométrica representativa del relieve topográfica que pasará a formar parte del dominio computacional del modelo. Para lograr el paso desde la nube de puntos a una superficie geométrica se han explorado dos vías diferentes. La primera se basa en la construcción de una red o malla TIN y fue descartada debido a los problemas que esta implicaba durante la fase del mallado del modelo. El segundo método se analizó como alternativa a los problemas generados por el primero y consiste en la creación de una superficie tipo NURBS.

6.1.1.1 Método de la red TIN

Este método de construcción de superficies se basa en la generación de una red irregular de triángulos (TIN) a partir de líneas que se forman conectando los puntos de la nube que se encuentran más próximos entre sí. Las aristas de los TIN forman facetas triangulares contiguas y no superpuestas que representan la morfología de una superficie, capturando la posición de entidades lineales que juegan un papel importante en la misma.

El resultado de este procedimiento es una malla virtual formada por triángulos irregulares, de tamaño y ángulos muy variables dependiendo de la complejidad y las características topográficas de cada zona. La Figura 24 muestra el aspecto de la superficie TIN obtenida a partir de la nube de puntos LiDAR con el detalle de algunas localizaciones.

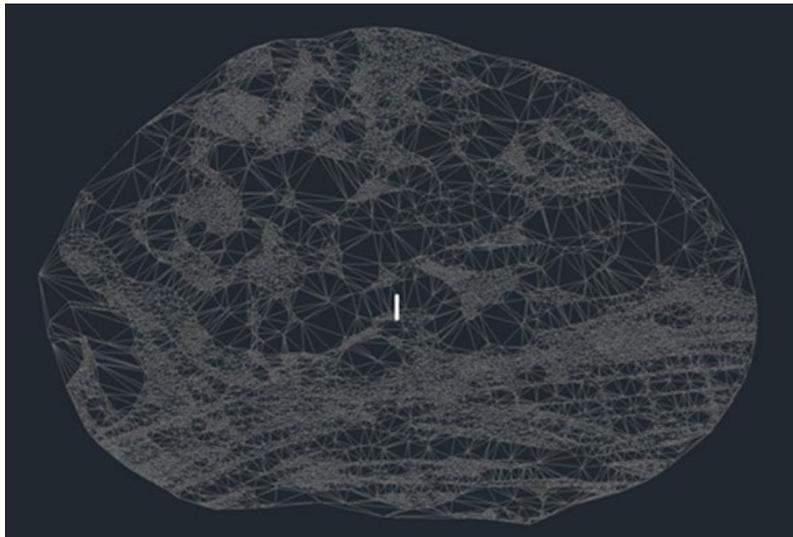


Figura 24. Superficie TIN original.

La red obtenida está compuesta por un número muy elevado de triángulos, dando lugar a una resolución y detalle excesivo en el modelo que puede dificultar en gran medida su procesamiento. Para ello, el software Autocad Civil3D permite una funcionalidad de simplificación de la malla TIN, con el que se permite la supresión de un porcentaje de puntos de la nube a la vez que se limita la variación de altura del mismo. Esta funcionalidad permite reducir en gran medida el número de puntos, manteniendo altas densidades en zonas singulares que requieren una gran definición y retirándolos de otras regiones más sencillas en las que no se precisan altas densidades de puntos. En la Figura 25 se puede observar que la superficie TIN, a pesar de haber eliminado un 40%, no ha tenido una pérdida de definición notable o a grandes rasgos para la escala de interés del presente estudio.

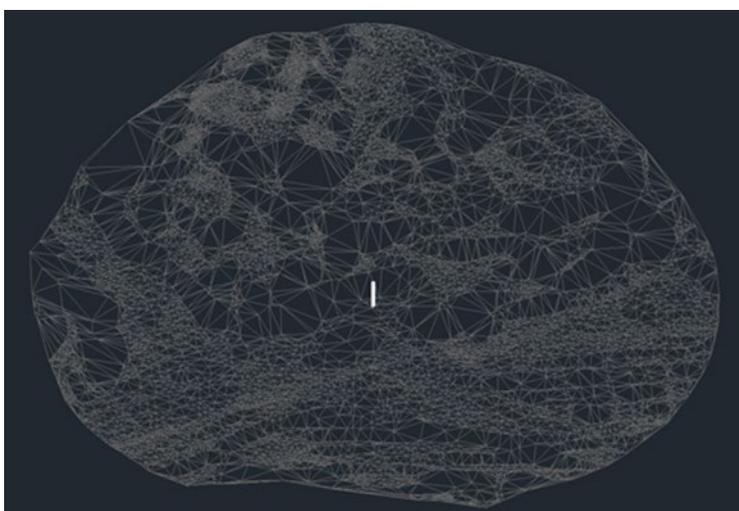


Figura 25. Superficie TIN simplificada.

Otra de las posibilidades que ofrece la red TIN como forma de simplificar y suavizar la geometría obtenida es generar una red de elevaciones regular a partir de la última en una resolución deseada. Este paso genera una red de triángulos de tamaño y disposición homogénea. El valor de este tamaño o espaciado constituye la resolución espacial de dicha red, que pasa a ser constante en toda su superficie. De esta forma, con este procedimiento estaríamos obteniendo un producto similar a los modelos digitales de elevación ofrecidos por el CNIG, pero a una resolución totalmente personalizable. La ventaja de aplicar este paso intermedio de regularización es la obtención de una geometría más limpia y de menor complejidad que puede facilitar en gran medida el procesamiento de la misma durante la generación del mallado posterior. No obstante, la posibilidad de colocar nodos de forma irregular en una red TIN frente a su homóloga regular permite obtener una resolución más alta en las áreas donde la superficie es muy variable o cuando se desea obtener un nivel de detalle superior y una resolución más baja en zonas menos variables. La elección entre una y otra alternativa dependerá entonces de la complejidad y tamaño del modelo, la precisión necesaria, así como los recursos computacionales y el tiempo disponible para la realización del modelo. En el presente trabajo, dado que se trata de una superficie muy extensa y compleja fue necesario realizar la regularización de la red triangular a una resolución espacial de 15 m, cuyo resultado se puede observar en la Figura 26.

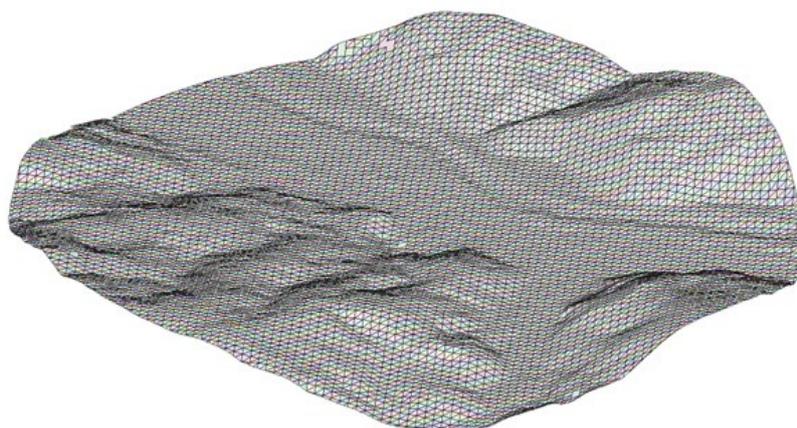


Figura 26. Regularización de la superficie TIN a resolución de 15 m.

El siguiente paso en el proceso de modelado gráfico consiste en la extracción de las facetas triangulares, es decir, la conversión de cada uno de estos triángulos a superficies físicas, ya que la red triangular obtenida constituye un elemento no físico o virtual. Con las facetas triangulares transformadas en regiones 3D, el modelo geométrico ya se encuentra en condiciones de ser transferido al módulo de mallado. No obstante, previamente a la exportación del modelo es posible realizar algunas operaciones de transformación adicionales que generan distintos efectos sobre el

número de celdas, tamaño de archivo y calidad de la malla obtenida. Las operaciones de procesamiento opcionales previas a la exportación son las siguientes.

1. Ninguna. Exportación directa de la región 3D.
2. Transformación de la región 3D a superficies 3D.
3. Suavizado de superficies 3D.
4. Unión de superficies 3D.

Para poder determinar el procedimiento más adecuado se realizó un análisis de impacto tanto de cada operación individual como de aquellas posibles combinaciones para determinar el efecto de cada una de ellas, tanto de forma individual como conjunta con el objetivo de poder determinar el procedimiento más adecuado. Los caminos analizados en dicho análisis se muestran en la Figura 27.

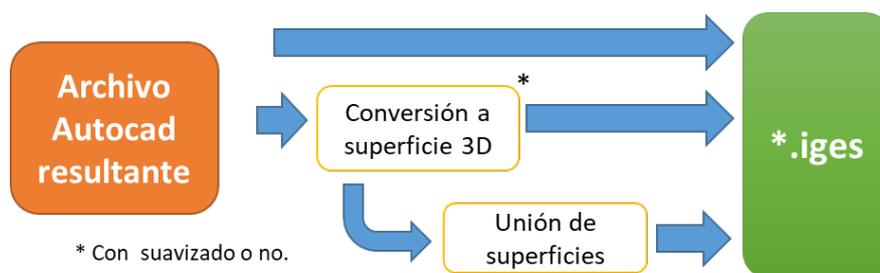


Figura 27. Procedimientos posibles para el procesamiento del modelo gráfico.

En la Figura 27 se observa que cualquier camino elegido parte del archivo CAD generado y acaba en un formato de archivo denominado iges. Es importante destacar que, dependiendo del módulo de mallado elegido, se puede tener accesos a interfaces que permiten la lectura directa de archivos procedentes de Autodesk, entre otros programas de diseño gráfico. Sin embargo, no todos los programas de mallado cuentan con dichas interfaces o incluso aquellas pensadas para Autocad pueden encontrar problemas a la hora de importar geometrías complejas procedentes de Autocad Civil3D. La exportación de la geometría al formato iges es una interesante alternativa para la importación de geometrías en módulos de mallado cuando falla la lectura directa del fichero nativo del programa CAD. Siguiendo los caminos establecidos en la Figura 27, se han definido 5 escenarios de análisis mediante combinación de las distintas operaciones.

Archivo	Exportación a 3D	Conversión a superficie	Suavizado de superficie	Unión de superficies
1	X			
2	X	X		
3	X	X	X	
4	X	X		X
5	X	X	X	X

Figura 28. Características de los archivos resultantes de cada procedimiento alternativo.

Cada uno de los archivos derivados de los distintos escenarios ha sido introducido en el módulo de mallado, en el que se ha generado una división de la superficie en celdas triangulares mediante procedimiento y ajuste de parámetros automático. El objetivo de este procedimiento es conocer el impacto inmediato de la superficie generada en la calidad de una malla simple y generada sin mayor esfuerzo. En la Figura 29 se puede observar el aspecto de una de estas mallas preliminares generadas para el análisis.

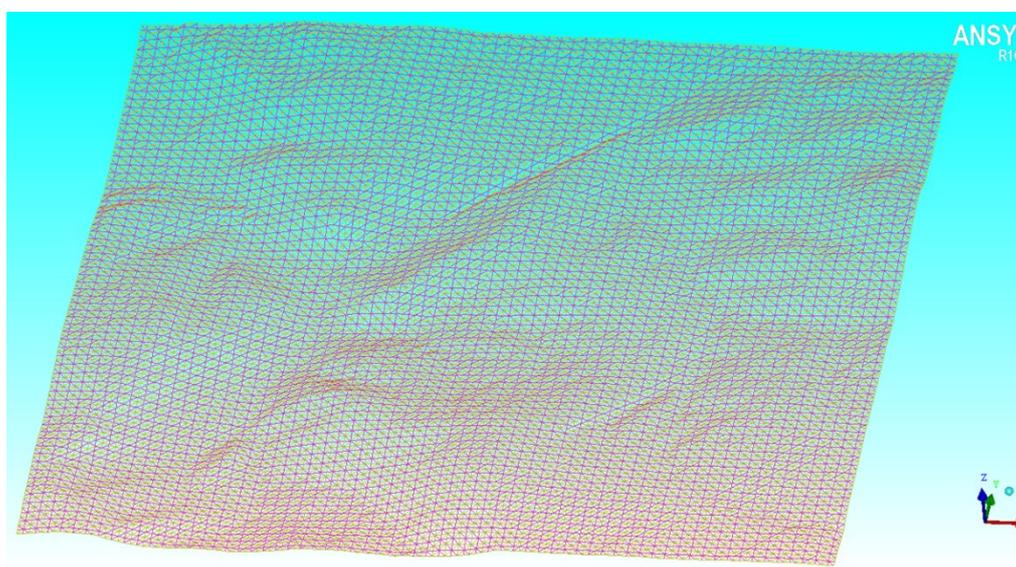


Figura 29. Aspecto de la malla superficial preliminar para análisis de comportamiento.

A continuación, se ha analizado el número de celdas obtenido en cada caso, el tamaño de archivo y el parámetro de calidad de malla. En la Figura 30 se puede ver el resultado de la comparativa en los términos anteriormente expuestos, donde se observa que la opción 1 ofrece los mejores resultados en todos los indicadores.

	1	2	3	4	5
Tamaño iges	23,0 Mb	49,7 Mb	49,7 Mb	12,4 Mb	37,3 Mb
Tamaño tin	32,1 Mb	63,5 Mb	64,2 Mb	24,8 Mb	57,1 Mb
Nº celdas (malla cuadriláteros)	80406	156544	156544	66977	141750
Quality					
Nº celdas (malla triangular)	88856	173444	173444	74886	34132
Quality					

Figura 30. Comparativa de mallado de modelos resultantes de cada procedimiento alternativo.

Los resultados de este análisis sirvieron, por tanto, para definir el procedimiento final del tratamiento de los datos LiDAR hasta la generación de la superficie final que integra el modelo geométrico. Este procedimiento se resume de forma esquemática en la Figura 31.

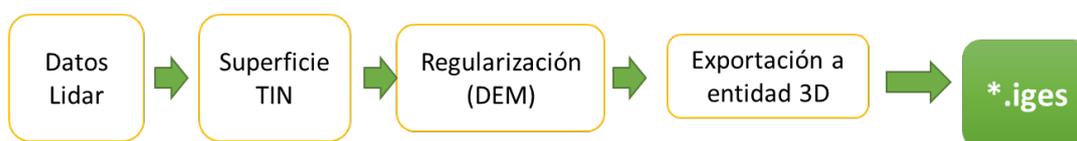


Figura 31. Procedimiento final elegido para definición del modelo geométrico.

Finalmente, a la superficie generada se le añade el volumen geométrico que representa a la fuente emisora o chimenea, asegurándose de que la base de la misma queda totalmente adosada o en contacto con la superficie del terreno.

Este método de creación de la superficie del terreno destaca por ser relativamente rápido y sencillo, aunque requiere el uso del software Autocad Civil 3D. Las opciones de edición de la red TIN son amplias y la posibilidad de generar una red triangular regular es otro punto a favor que permite generar geometrías más versátiles para múltiples aplicaciones.

Sin embargo, durante el procedimiento posterior de división del dominio en celdas, se descubrió que la superficie generada mediante esta metodología daba lugar a distorsiones severas en la malla. Aunque la explicación de los detalles del proceso de mallado se ha reservado para la sección “6.2. Discretización del dominio o mallado”, se han incluido aquí la Figura 32 y la Figura 33 que muestran el aspecto de algunas de las principales distorsiones ocurridas en la malla. Como se puede observar, las distorsiones más comunes consistían en desviaciones anómalas y cruces entre las aristas de las celdas, dando lugar en muchos casos a volúmenes de celdas negativos.

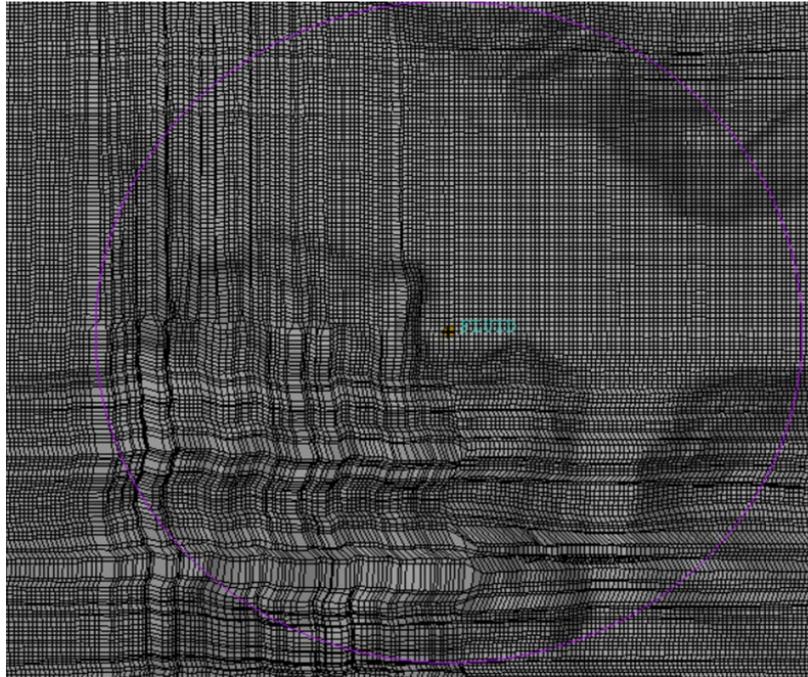


Figura 32. Distorsiones en el mallado de superficie sobre el terreno.

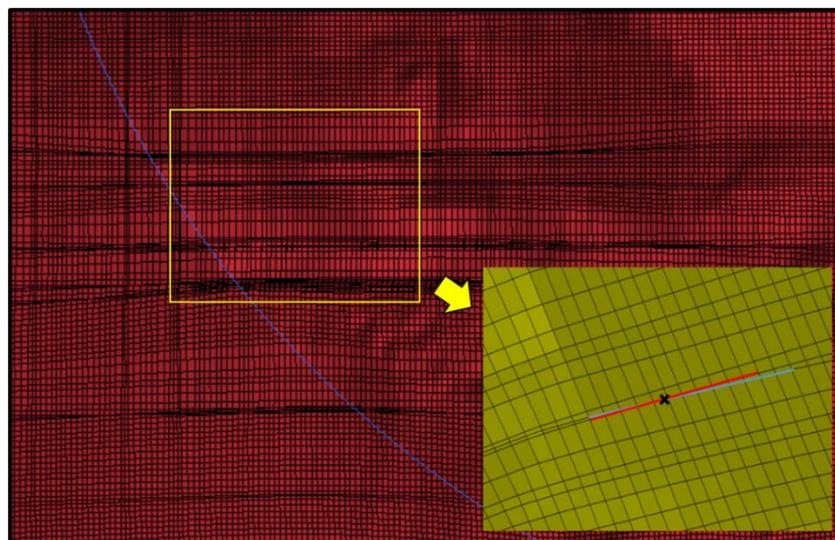


Figura 33. Distorsiones en el mallado de superficie sobre el terreno con detalle de intersecciones de celdas (volúmenes negativos).

Para intentar paliar estas anomalías, se recurrió al uso de herramientas de diagnóstico y reparación de superficies incluidas en algunos módulos de geometría y mallado, como las presentes en SpaceClaim. Estas herramientas resultaron muy efectivas en la detección de los errores geométricos que pueden ocasionar problemas en la malla y que se enumeran a continuación.

- Problemas de tangencia entre regiones triangulares adyacentes.
- Problemas de inexactitud de bordes y contornos asociados a las superficies.

- Problemas de generación de ángulos muy agudos entre triángulos secantes.
- Dificultad para tratar el total de la superficie como un elemento único.

La Figura 34 muestra la presencia y distribución de algunos de los errores más significativos, hallados sobre la superficie del terreno. Para intentar corregir estos defectos se hizo uso de las funcionalidades de reparación de geometrías también incluidas en el programa utilizado. Sin embargo, estas funciones no resultaron igual de efectivas con todos los defectos detectados, dando lugar incluso a un empeoramiento de la geometría al tratar algunos errores específicos al tratar algunos defectos.

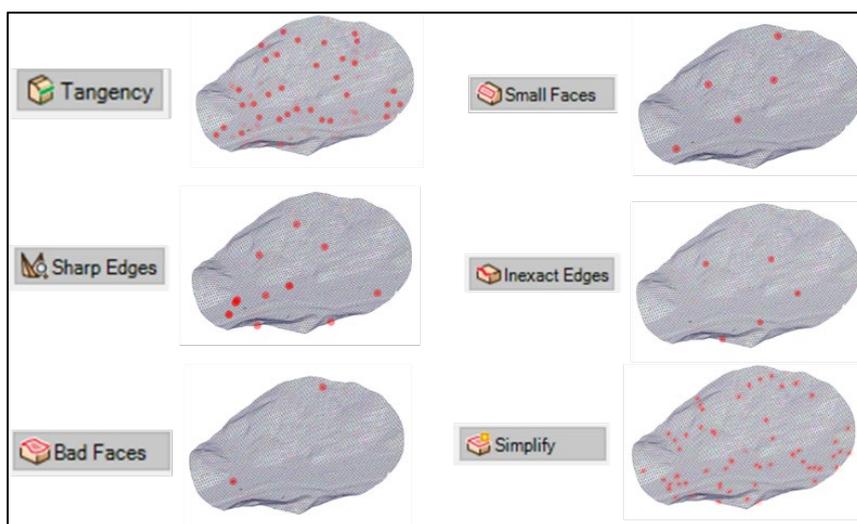


Figura 34. Ejemplos de algunas incidencias geométricas identificadas con herramientas del módulo SPACECLAIM en la superficie del terreno modelado.

Así mismo, se constató que las anomalías de la malla se producían también con la aplicación de otras tipologías de celdas y procesos de mallado más automatizados, como la generación de tetraedros o prismas de base triangular o cuadrangular. Si bien no se producían exactamente las mismas anomalías, se generaban otro tipo de errores que impedían, de igual forma, conseguir una calidad de malla suficiente.

Tal y como indicaban las herramientas de diagnóstico, la descomposición y representación del terreno a través de un gran número de superficies triangulares constituyen la principal causa de los problemas producidos en la malla, al estar tratándose un modelo de gran complejidad. Ante esta situación, la única solución razonable consistió en la búsqueda de una nueva metodología de creación de la superficie, tratando de sustituir la triangulación del terreno por una superficie suficientemente continua y flexible que facilitara el procesamiento por parte del módulo de mallado. Este fue el origen de la nueva metodología de superficies NURBS que se describe en la siguiente subsección “6.1.1.2 Método de la superficie NURBS”.

Existe, no obstante, un caso en el que esta metodología TIN es válida para representar la superficie del terreno sin provocar los errores de la malla descritos. Cuando el objetivo es capturar principalmente la superficie del terreno con un tamaño de celda más o menos uniforme, sin tener que ajustar y refinar la malla sobre obstáculos como chimeneas o edificios, la división del dominio en celdas se realiza de forma satisfactoria y sin distorsiones. La Figura 35, Figura 36 y Figura 37 muestra el aspecto de la malla obtenida al tener en cuenta sólo la superficie del terreno, prescindiendo de la chimenea y cualquier otro tipo de obstáculos. La de calidad de las celdas obtenida es muy elevada en este caso.

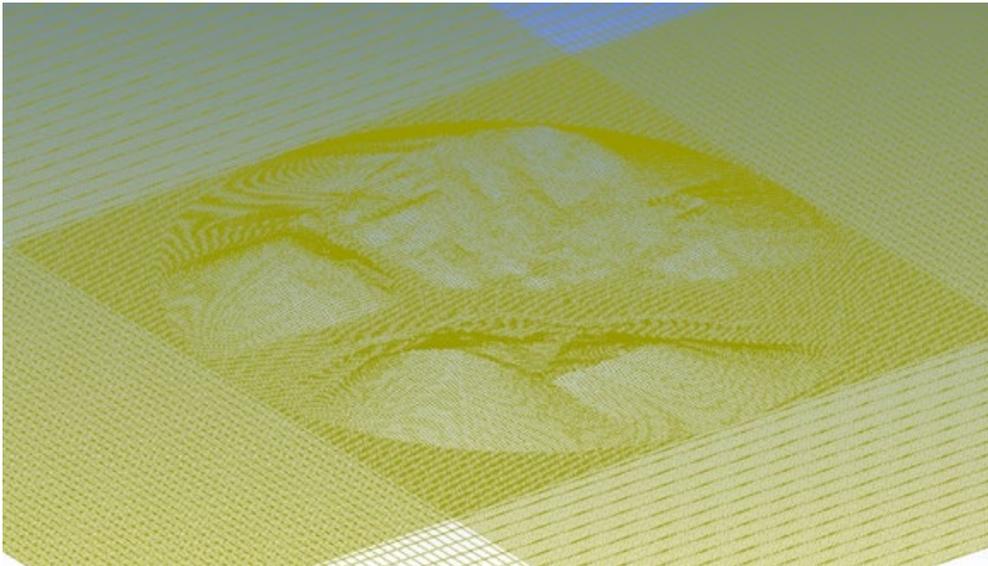


Figura 35. Detalle de malla de superficie de la porción de terreno seleccionada para las simulaciones.

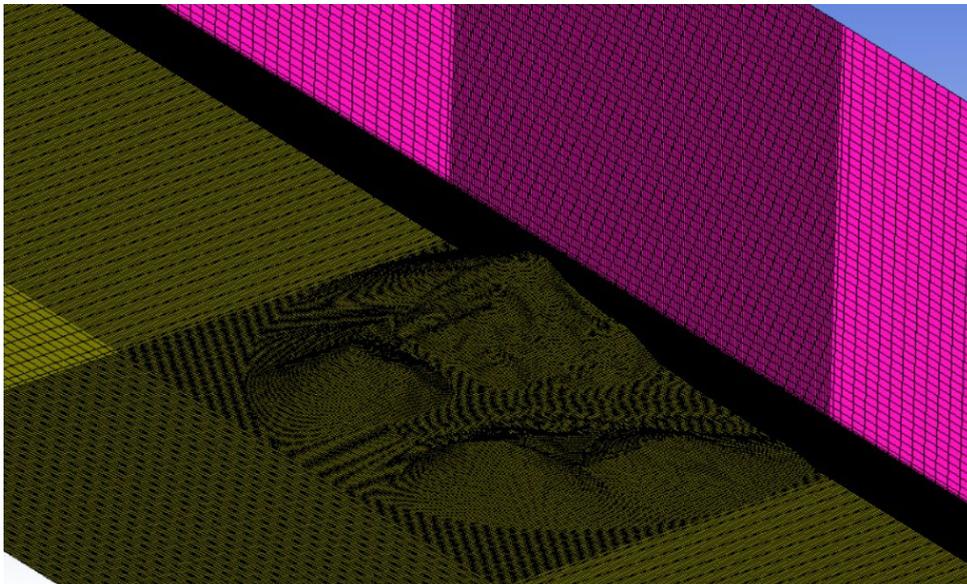


Figura 36. Detalle de distribución vertical de malla en altura (1).

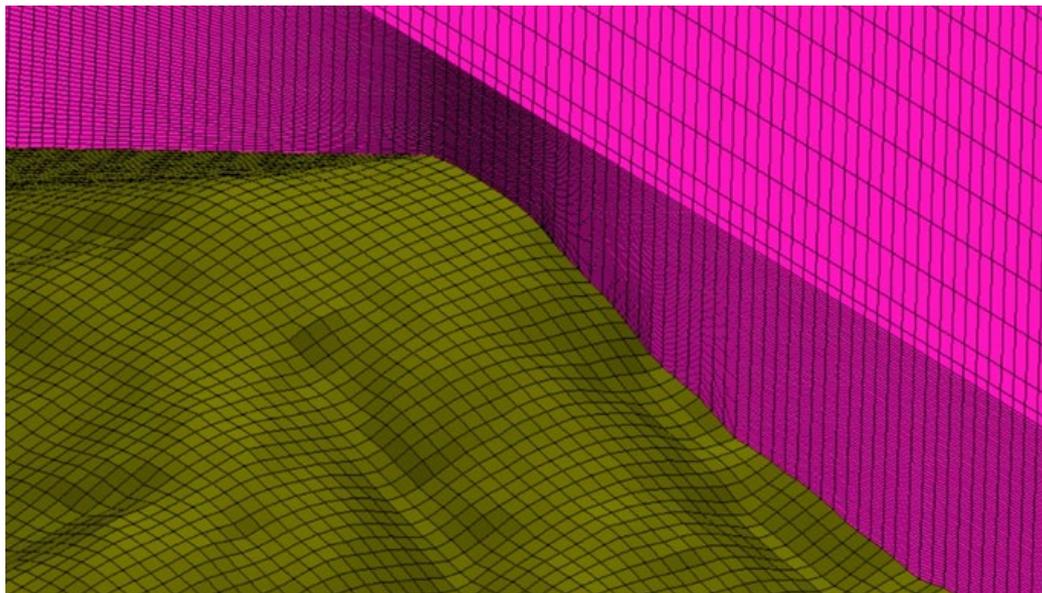


Figura 37. Detalle de distribución vertical de malla en altura (2).

Las anomalías en la malla empiezan a aparecer al realizar divisiones en el espacio destinadas a ajustar la disposición de las celdas a formas de aristas marcadas y paredes verticales que contrastan en gran medida con la horizontalidad del terreno. Por este motivo, cuando se trata de estudios destinados a estudiar la interacción del viento con la orografía a una escala superior o en casos en los que no es necesario recoger la geometría de los obstáculos de forma explícita, la generación de redes TIN permite obtener una geometría del terreno adecuada y con alto nivel de detalle de forma rápida.

6.1.1.2 Método de la superficie NURBS

Este método consiste en la representación del terreno mediante la construcción de una superficie tipo NURBS. Esta clase de superficies consisten en representaciones matemáticas de geometría 3D con las que se puede describir cualquier forma con precisión. Se construyen a partir de curvas Bézier o *splines* que se caracterizan por parámetros como el grado, los puntos de ajuste y vértices de control.

La creación de estas superficies presenta una gran ventaja frente al método de representación por triangulación anterior dado que permite obtener superficies continuas y bien definidas que mejoran en gran medida su posterior procesamiento a la hora de generar el mallado. El inconveniente que presentan es una mayor dificultad técnica y esfuerzo de creación, aunque en la actualidad existen algunos programas de diseño gráfico que ofrecen opciones avanzadas de creación de este tipo de superficies con muy poco esfuerzo por parte del usuario.

Para generar estas superficies, es necesario disponer de un conjunto de puntos del terreno o curvas de nivel, por lo que la nube de puntos LiDAR será también el punto de partida para este método. Al igual que sucedía con las superficies TIN, es recomendable reducir el número de puntos del terreno para evitar construir una superficie demasiado compleja y con un nivel de detalle innecesario. En el

caso de disponer de un programa que ofrezca opciones de creación automatizada de superficies NURBS se introducirá la nube de puntos o curvas de nivel como datos de entrada y se ajustarán los parámetros de configuración de superficie correspondientes cuyas características dependerán del programa elegido. Un buen ejemplo de software que permite la creación automatizada de este tipo de superficies a partir de los datos mencionados es Rhinoceros. Autocad también ofrece funcionalidades de creación de superficies tipo NURBS a partir de puntos del terreno o curvas de nivel, pero estas no son tan automatizadas como en el caso anterior. En este último caso, Autocad requiere la preparación de las curvas *spline* que formarán la superficie NURBS a partir de los puntos o curvas de nivel de origen y cumpliendo unas condiciones determinadas, por lo que el procesamiento geométrico conlleva cierta complejidad. En la Figura 38 se puede observar el resultado de la superficie del terreno obtenida a partir de la nube de puntos procesada por el software Rhinoceros, dando lugar a una superficie continua y limpia con un nivel de captura de detalles de la orografía bastante notable para los objetivos del estudio.

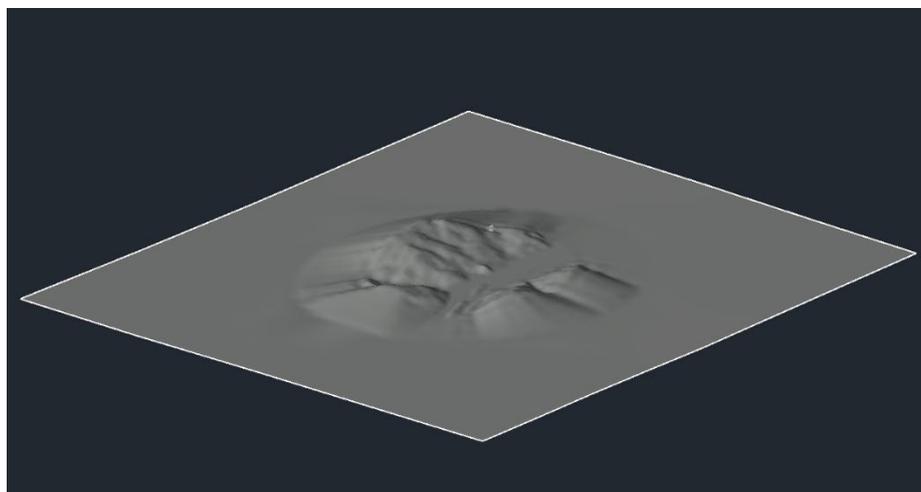


Figura 38. Superficie NURBS continua del terreno.

Sin embargo, en este trabajo se ha diseñado una metodología de trabajo para poder generar este tipo de superficies en caso de no disponer de un software que ofrezca esta funcionalidad automatizada. Esta metodología se puede realizar con un programa de edición gráfica como Autocad, SpaceClaim u otros programas similares. El punto de partida de este procedimiento es la superficie compuesta por las facetas triangulares extraídas de la red TIN generada con el método descrito en el párrafo anterior. Esto implica que los primeros pasos de la nueva metodología son comunes a la anterior, desde el procesamiento inicial de la nube de puntos LiDAR hasta la obtención de la red TIN y posterior obtención de las facetas o regiones 3D triangulares.

El siguiente paso consiste en definir una serie de circunferencias concéntricas, haciendo coincidir el centro de las mismas con el centro del área circular del terreno (Figura 39). A continuación, estas

circunferencias se proyectan verticalmente sobre el conjunto de facetas triangulares previamente obtenidas de la red TIN (Figura 40).

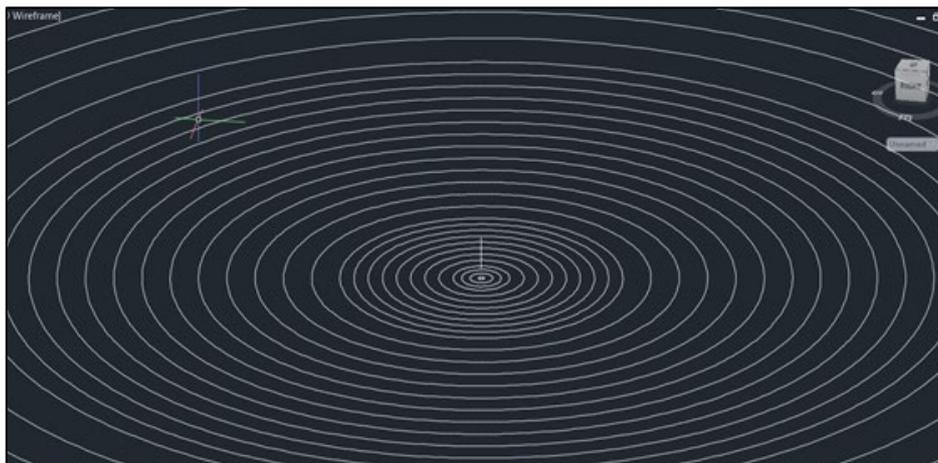


Figura 39. Definición de circunferencias concéntricas.

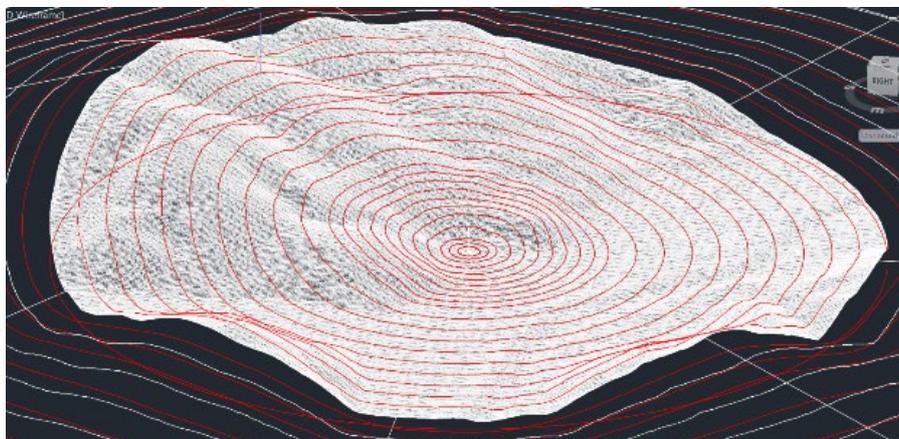


Figura 40. Proyección de circunferencias en el terreno.

Posteriormente, las proyecciones resultantes se dividen en una serie de puntos espaciados entre sí a una distancia determinada y uniforme (Figura 41). A continuación, los puntos resultantes pertenecientes a una misma circunferencia de origen se unen entre sí mediante una polilínea tridimensional cerrada o *bSpline* (ver Figura 42). A mayor número de puntos de división de la circunferencia, más precisa será la adaptación de la polilínea tridimensional a la forma real del terreno, por lo que la superficie tendrá mayor resolución.

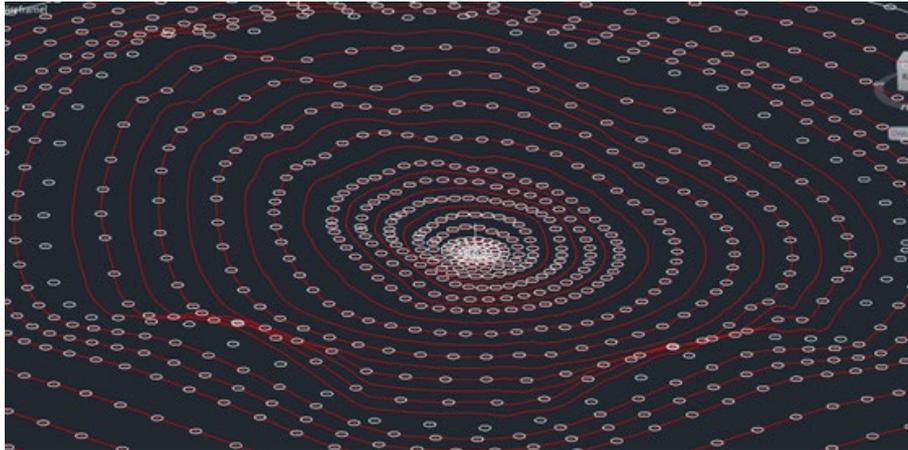


Figura 41. División de las proyecciones en puntos.

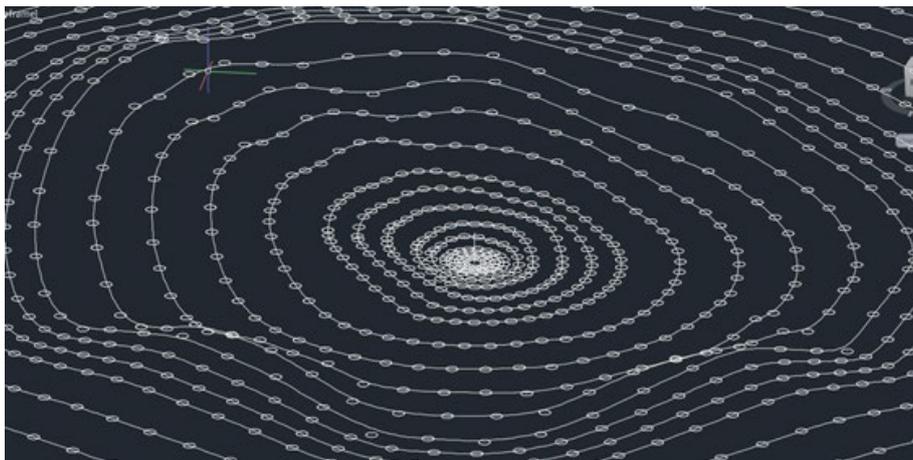


Figura 42. Construcción de las bSplines.

Finalmente, se genera la superficie del terreno mediante barrido con un comando del tipo “solevar” o “loft” (ver Figura 43) que sirve para conectar las polilíneas mediante una única superficie NURBS (ver Figura 44).

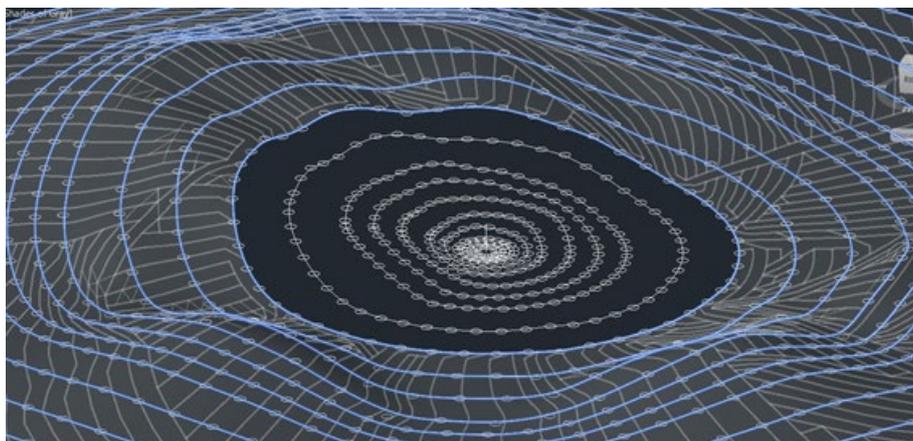


Figura 43. Construcción de superficies mediante comando solevar.

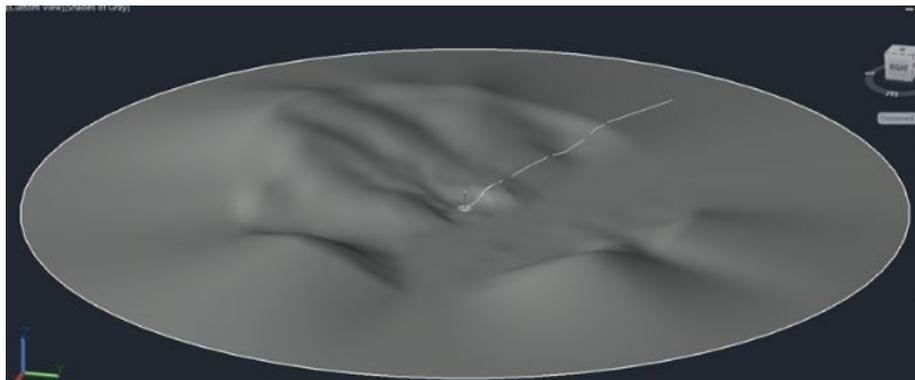


Figura 44. Superficie resultante final.

Sobre la superficie resultante se acopla el cuerpo de la chimenea de igual forma que se hacía en el método anterior, aunque en esta ocasión la base de la chimenea interseca una única superficie, simplificando la integración de ambos objetos.

La superficie que resulta de esta metodología tiene una forma mucho más suavizada que la anterior al prescindir de la descomposición de la superficie en triángulos, lo que evita errores de tangencias y ángulos agudos asociados a esta última. Así mismo, los programas de mallado suelen procesar este tipo de superficies de forma mucho más eficiente que en el caso anterior. Otro aspecto reseñable de esta metodología es la posibilidad de producir una resolución espacial variable. Tal y como se explicó, la resolución del modelo se controla mediante el espaciamiento entre circunferencias concéntricas y entre los puntos que resultan de la división. Si se asignan distancias superiores en los bordes del dominio y se van disminuyendo progresivamente hacia la parte central del modelo, se obtendrá una variabilidad en la resolución espacial que será más alta en las zonas de mayor interés y más reducida en los extremos, reduciendo así la complejidad de la superficie donde no es necesaria.

Por otro lado, también es importante destacar que este tipo de superficie es mucho más fácil de editar que en el caso anterior. Esto supone una ventaja a la hora de adosar al modelo no sólo el cuerpo de la chimenea sino también los bloques de edificios que se deseen simular explícitamente en dicho modelo. Esta tarea sería mucho más complicada de acometer en un modelo compuesto por facetas triangulares en la que el terreno no está constituido por una superficie única.

6.1.2 Integración de la fuente y las edificaciones

Finalizada la superficie del terreno, el siguiente paso consistió en incluir la fuente emisora o chimenea desde la que se va a realizar la liberación de gases y partículas. El objetivo es resolver la geometría de la chimenea en el modelo con especial énfasis en la sección de salida de la misma. Para ello, se ha construido un cilindro con unas dimensiones iguales a las de la fuente, es decir, 56 m de altura y 2.96 m de diámetro de base.

Por otro lado, es lógico pensar que los bloques de edificios presentes en las zonas bajas y más urbanizadas del valle tengan un impacto significativo sobre el flujo incidente. La incorporación del efecto que dichos obstáculos ejercen sobre el comportamiento del flujo en las simulaciones se puede realizar mediante dos técnicas distintas. La primera consiste en modelar estos obstáculos de forma implícita a través de un parámetro de rugosidad que caracteriza a las funciones de pared aplicadas en el terreno o fondo del dominio [141]. Este método destaca por su simplicidad y un menor esfuerzo de generación del dominio y posterior mallado, siendo la opción que aplica por defecto en las partes del dominio más alejadas del área de interés.

Sin embargo, cuando se consideran las zonas más próximas a la fuente emisora y en general en los casos donde los obstáculos tienen un efecto significativo sobre el flujo en la zona de interés, la opción preferida es la modelización explícita. Este método consiste en incorporar la geometría de los obstáculos en el propio modelo que será resuelta por las ecuaciones del flujo de forma explícita.

Dadas las características del presente caso de estudio, se ha optado por esta última alternativa incorporando al modelo los bloques de edificios que se encuentran en la parte más baja del valle, próximos a la fuente emisora. En cuanto a la representación geométrica de los edificios, en [142] se indica que el nivel de detalle necesario depende de la distancia de estos al obstáculo central o de interés, que en el caso del presente estudio es la chimenea emisora. A medida que crece la distancia respecto a la fuente, la geometría de los mismos se puede simplificar, representándose como bloques simples. Esta cuestión también fue analizada en [91], obteniendo como una de sus principales conclusiones que el nivel de detalle geométrico puede afectar al patrón de flujo en el interior del distrito urbano, pero no así al espesor de la capa límite, que se mantiene similar en todos los casos. Incluir un nivel de detalle muy elevado en la geometría supondría, por otro lado, un coste computacional muy alto asociado al aumento en el número de celdas y complejidad del mallado, así como a la probable aparición de celdas muy asimétricas, tal y como se señala en [119].

Es importante destacar que este estudio no se centra en analizar los fenómenos de flujo en regiones muy localizadas como puede ser a nivel de calles ni en zonas muy próximas a fachadas, cornisas u otros detalles arquitectónicos. Por contra, el objetivo es analizar el efecto de toda una zona urbana sobre la dispersión de la pluma, de forma que el efecto es observado desde el exterior del conjunto de edificios, siguiendo el ejemplo de enfoque propuesto en [83]. Por este motivo, en este modelo se han omitido detalles geométricos como balcones o tejados, conservando únicamente la forma principal de los edificios.

De esta forma, los bloques de edificios se modelizarán mediante la generación de volúmenes sólidos en forma de paralelepípedos, simplificando en la medida de lo posible la morfología de las edificaciones por grupos o bloques y prescindiendo de detalles geométricos irrelevantes para los

objetivos del estudio. Para llevar a cabo esta tarea, se ha recurrido a dos fuentes de información principales, CADmapper y la nube de puntos LiDAR.

CADMAPPER³ es un servicio capaz de transformar datos procedentes de fuentes públicas como OpenStreetMap, NASA y USGS en ficheros CAD organizados. Con este servicio es posible obtener los trazados en planta de los elementos urbanísticos presentes en distintas localizaciones geográficas, en un formato CAD editable. Para extensiones de hasta 1 km² la descarga de datos es gratuita. Dado que el área de estudio tiene una extensión de 2 km resulta sencillo obtener y combinar los dos archivos CAD que contienen la disposición de los elementos urbanísticos de la zona. A continuación, se realiza un filtrado de los objetos del archivo de dibujo conservando sólo los elementos de interés. La Figura 45 muestra la distribución en planta de los edificios a incluir en el modelo como resultado tras el filtrado.

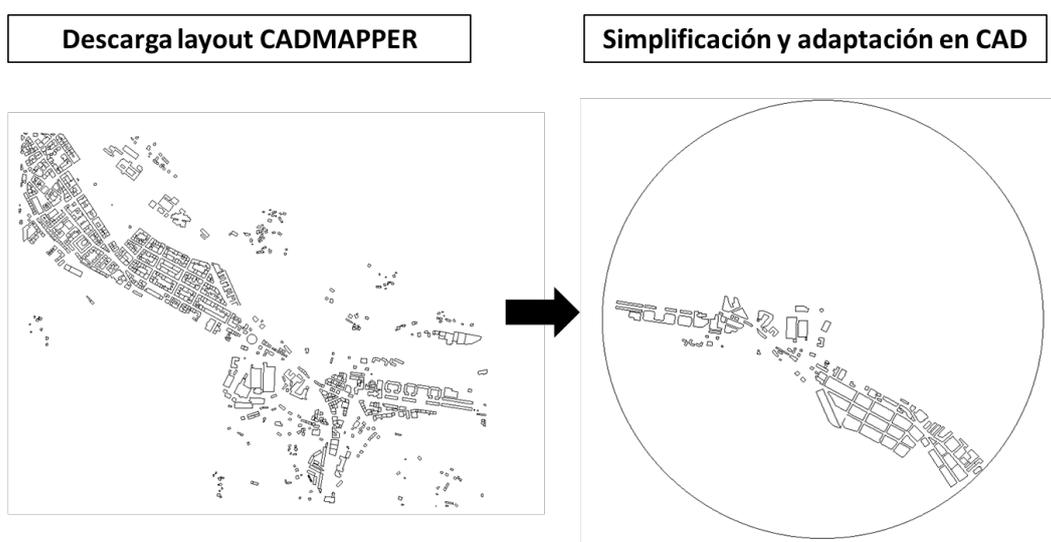


Figura 45. Distribución en planta de los edificios a incluir en el modelo.

Conocido el trazado en planta de los edificios, la forma más sencilla de modelizarlos es mediante una operación de extrusión, dando lugar a paralelepípedos más o menos simples. Sin embargo, para poder llevar a cabo esta operación es necesario conocer las alturas de los distintos bloques de edificios. En este punto se ha aprovechado la capacidad de clasificación por categorías que ofrece la nube de puntos LiDAR, aislando los puntos pertenecientes a la categoría de edificios para poder visualizarlos mejor y aplicando una escala de colores según la elevación. En la Figura 46 se puede ver el resultado de esta visualización. Valiéndose de esta información, se ha procedido a identificar la altura media de cada bloque de edificios a incluir en el modelo, tal y como se muestra en la Figura 47.

³ Servicio CADMAPPER. <https://cadmapper.com/> Fecha de último acceso: 31/03/2021

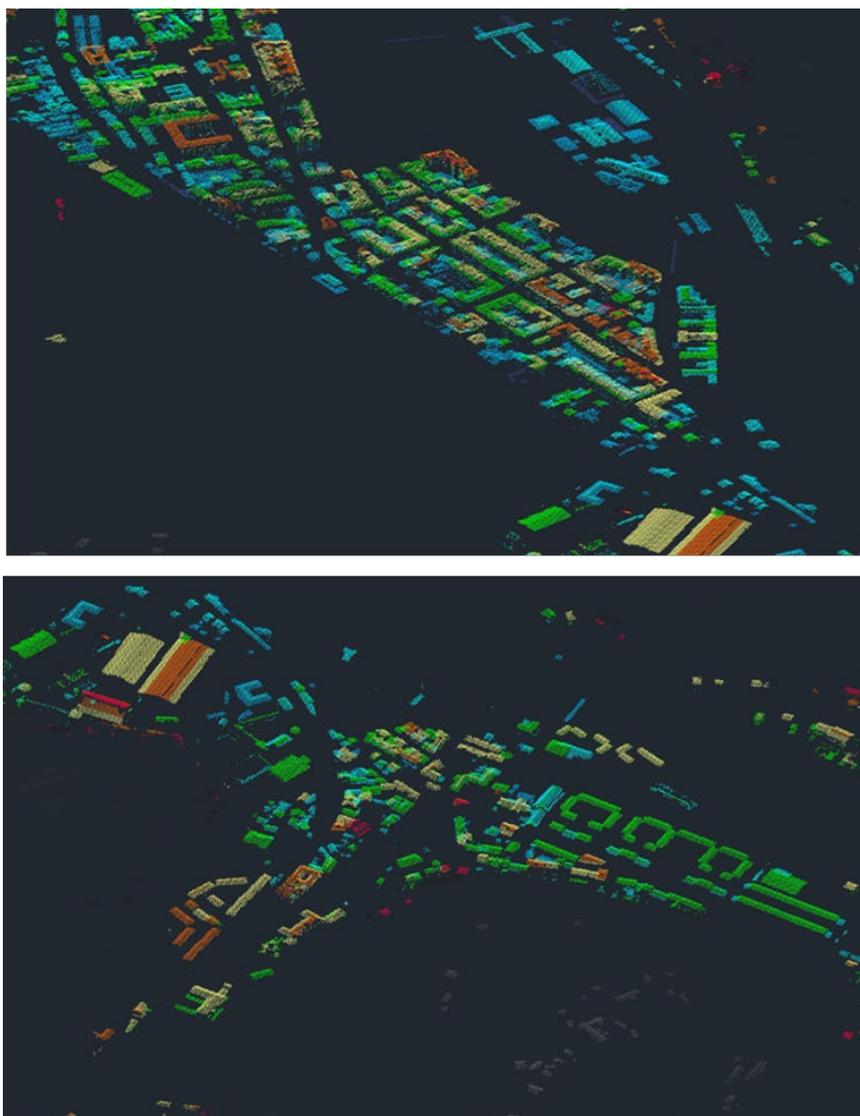


Figura 46. Visualización de nube de puntos LiDAR correspondiente a la categoría edificios con escala de color aplicada según elevación.

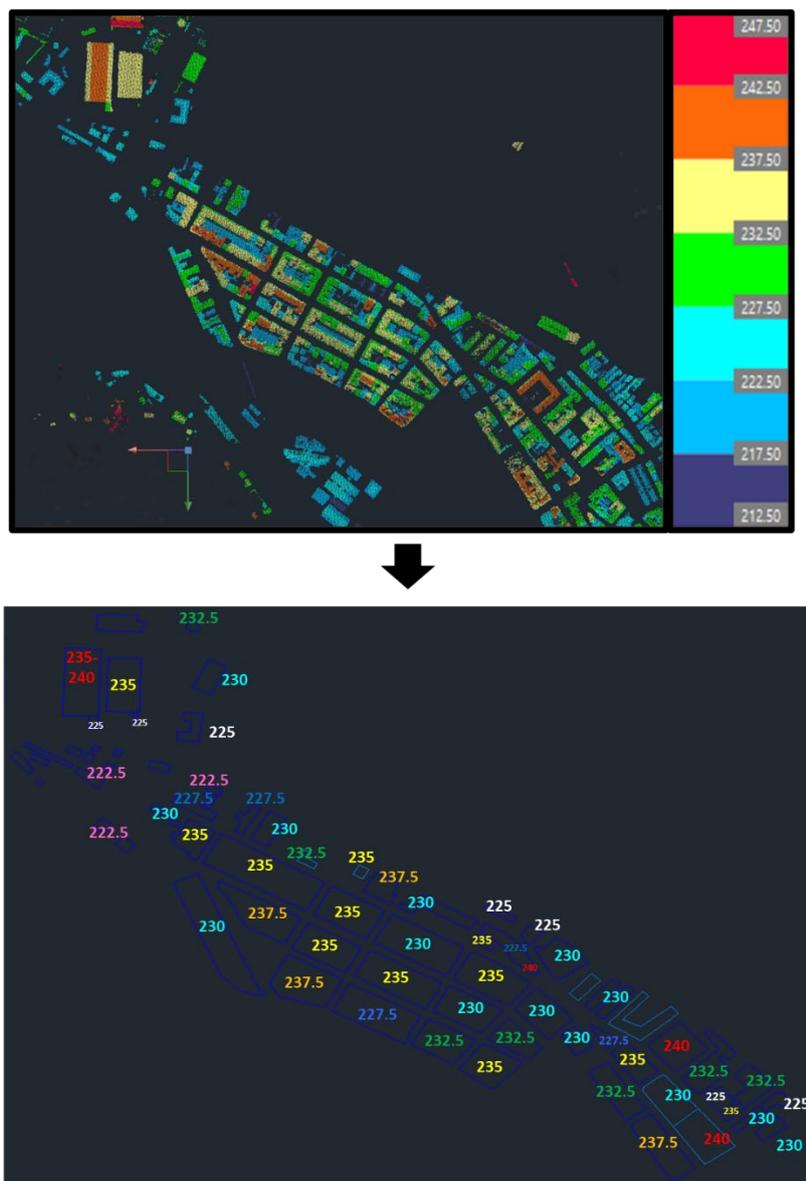


Figura 47. Asignación de alturas a los bloques de edificios.

Por último, se han extruido los polígonos a la altura determinada en el paso anterior, dando lugar a los cuerpos de los edificios que formarán parte del modelo. Una vez se tiene los cuerpos sólidos de los edificios, el siguiente paso consiste en su adhesión al terreno. Tal y como se explicó, las superficies NURBS presentan una buena capacidad de edición, admitiendo opciones de recorte e interferencia y fusión con cuerpos sólidos. Este rasgo resulta clave para lograr una adecuada integración entre la superficie del terreno y los obstáculos que se van a modelar de forma explícita. Para integrarlos de forma adecuada, los cuerpos sólidos correspondientes a los edificios que se generen deberán adaptar su base al relieve del terreno sobre el que se sitúen. Para ello se pueden crear sólidos de base plana, alargando esta última por debajo del nivel del terreno. Posteriormente, se recortan los cuerpos sólidos utilizando el terreno como superficie de corte mediante el comando “recortar”. De esta forma se asegura que los obstáculos se encuentren perfectamente asentados sobre el terreno sin generar zonas

de holgura y defectos que puedan entorpecer el proceso de mallado. El resultado final de la adhesión de los cuerpos sólidos de los edificios al terreno se puede observar en la Figura 48, Figura 49 y Figura 50.

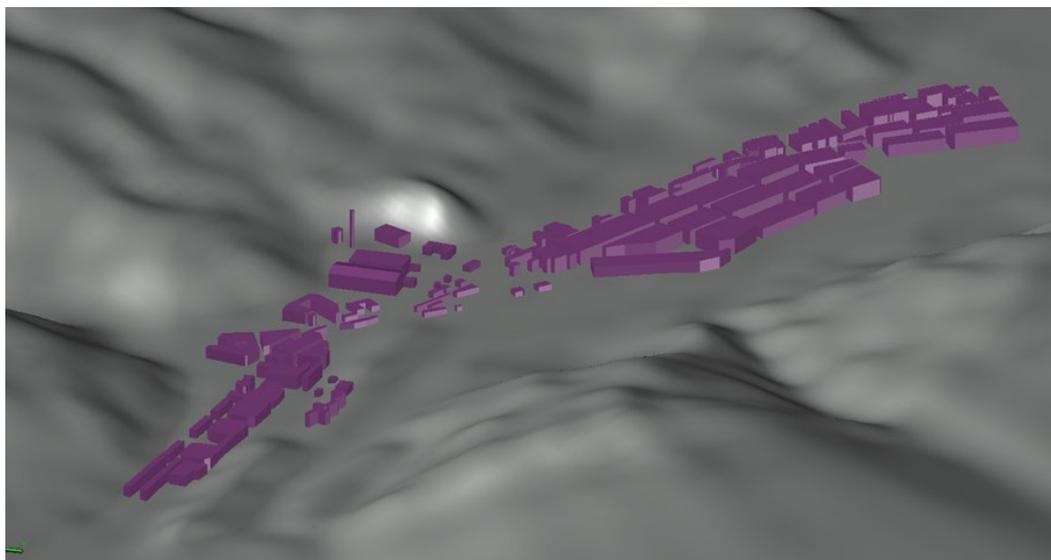


Figura 48. Vista conjunto superficie del terreno y edificios.

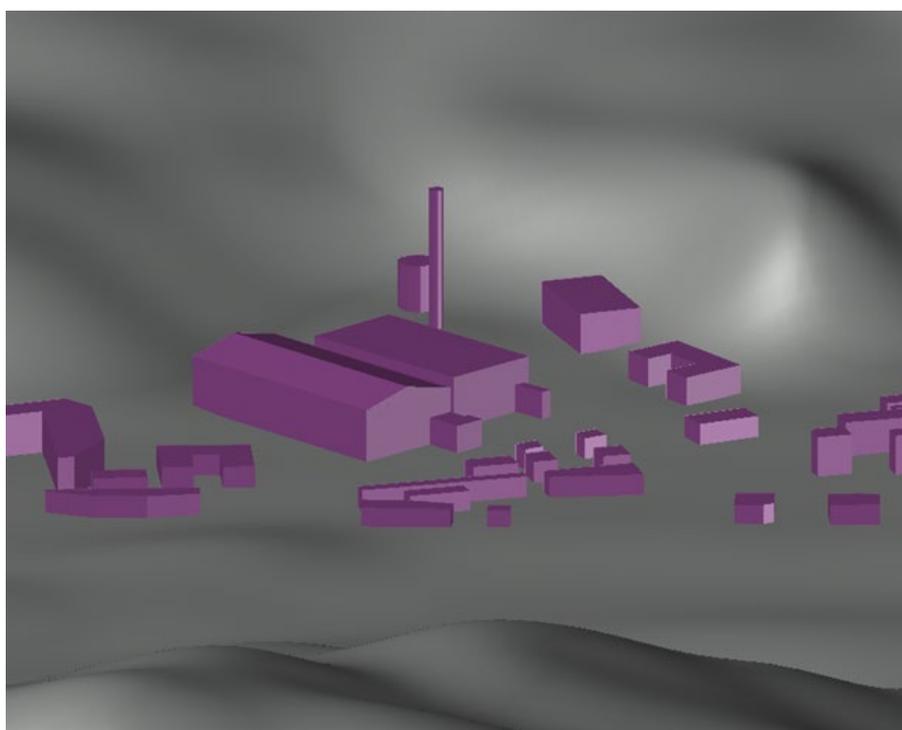


Figura 49. Vista conjunto superficie del terreno y detalle de la fuente emisora.

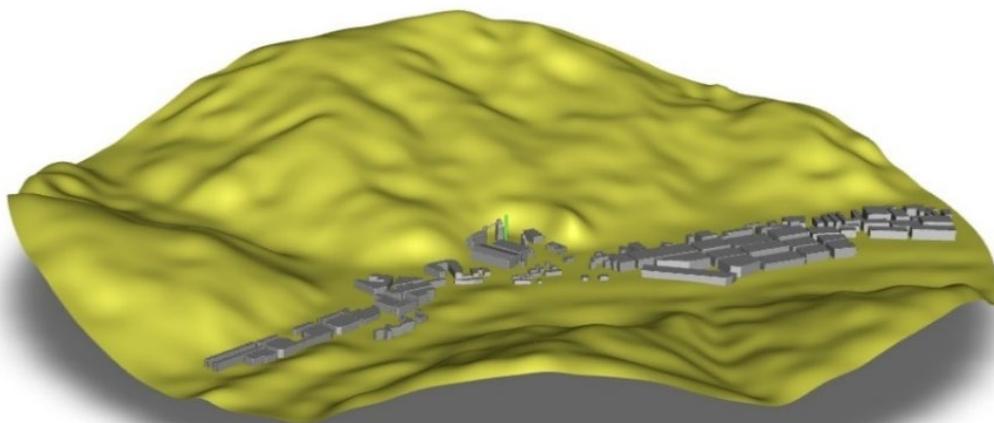


Figura 50. Aspecto final de la superficie del terreno modelada junto con los edificios (gris) y la fuente emisora (verde).

6.1.3 Diseño de la zona de transición

Con la parte del modelo geométrico correspondiente al terreno de estudio completada, el siguiente paso consiste en definir una superficie que conecte este último con la superficie plana de extensión del dominio. El perímetro exterior circular del terreno es irregular y altamente variable en altura debido a que discurre tanto por zonas bajas del valle como por zonas altas de montaña. Para poder unir este último a una superficie horizontal plana es necesaria una superficie que permita la transición entre contornos de forma gradual, evitando así gradientes y fenómenos abruptos en el flujo que discurra sobre esta zona. A pesar de tener un impacto importante sobre los resultados de la simulación de flujo, esta cuestión ha sido abordada de forma muy limitada en la literatura [118], [143].

El diseño de la superficie de transición mantendrá la misma forma que el perímetro del terreno, es decir, circular. Vista en planta, esta superficie se asemejará a una corona circular delimitada superiormente por el perímetro del terreno e inferiormente por una circunferencia situada a nivel del dominio plano exterior. La determinación del radio de dicha circunferencia inferior, así como la altura a la que esta se ubica, influirán en la geometría final de la superficie de transición, concretamente en las pendientes mínimas y máximas. Un estudio reciente [118] analizó el potencial de distorsión del perfil vertical de velocidad del flujo producido por distintas zonas de transición en un ensayo experimental en túnel de viento. El estudio concluyó que pendientes de transición por debajo de 30° de inclinación no producían alteraciones notables en el flujo respecto a un ángulo de 15° , considerado este último como un valor de referencia para generar una zona de transición relativamente plana capaz de conectar de forma uniforme el terreno con el fondo del dominio. Siguiendo esta

recomendación, se optó por limitar la pendiente máxima de la superficie de transición a una inclinación de 30°. Para ello, se reguló el radio de la circunferencia inferior, así como la diferencia de altitud desde el punto más alto del contorno hasta la superficie plana del dominio. El resultado fue un diámetro inferior de 900 m y una diferencia máxima de alturas entre la posición del dominio plano y el punto más alto del contorno de 160 m. Por último, para generar la superficie de transición se ha utilizado nuevamente el comando “solevar” de Autocad, aplicado entre el perímetro del terreno y la circunferencia inferior.

En este punto es importante destacar que la zona de transición se puede implementar tal y como se acaba de explicar o bien introducir un paso adicional destinado a mejorar las características de la superficie. Idealmente, se puede crear esta superficie durante el propio proceso de generación de la superficie correspondiente al terreno, de forma que se establezca una continuidad total entre ambas zonas al constituirse en una única superficie. Para lograr este objetivo, se parte de la superficie de transición generada según el procedimiento descrito. A continuación, se definen una serie de circunferencias concéntricas (cuyo centro coincide con el correspondiente al área circular del terreno) que serán proyectadas sobre la zona de transición. Las proyecciones obtenidas representan las curvas de nivel que definen el relieve de transición, utilizándose de forma conjunta con la nube de puntos del terreno para definir una superficie única y continua que abarque ambas regiones en una sola etapa. Esta superficie única se creará siguiendo el mismo procedimiento empleado para la creación de superficies NURBS. También es posible extender esta estrategia a la generación del dominio exterior o dominio vacío, de forma que se genere las tres partes del contorno superficial inferior del modelo de forma simultánea, en un único proceso.

6.1.4 Dominio exterior plano

La extensión del dominio mediante la inclusión de superficies planas en torno al área de estudio es una práctica común en el ámbito de la modelización de viento y dispersión de contaminantes [144]. El objetivo de esta extensión es permitir que el flujo incidente llegue a un estado de equilibrio antes de alcanzar el terreno de estudio, así como permitir su completo desarrollo una vez sobrepasa el área de perturbación que provoca sobre el flujo. De igual manera, la extensión del dominio en la dirección transversal pretende evitar un efecto de contracción del flujo que pueda dar lugar a aceleraciones artificiales, también conocido como efecto Venturi.

Por estos motivos, los contornos de entrada, salida y límite superior del modelo deben colocarse a una distancia considerable respecto al área de interés [112]. En estudios de viento y dispersión en geometrías urbanas una práctica común consiste en determinar el tamaño del dominio en función de altura del edificio más alto considerado, de acuerdo a las recomendaciones de la literatura [142], [144], [145]. La Tabla 12 muestra el valor numérico de estas dimensiones, donde el diámetro del obstáculo

(D_o) es 1800 m y la altura máxima de obstáculo (H) es 160 m. La Figura 51 muestra el resultado final del diseño de las dimensiones del dominio computacional.

Dimensión	Expresión cálculo	Resultado	Valor seleccionado
Distancia barlovento (L_F)	$5H$	802	850
Distancia sotavento (L_B)	$15H$	2405	2450
Lado total	$L_F+D_o+L_B$	5007	5100
Altura	$6H$	962	1500

Tabla 12. Determinación de las dimensiones del dominio computacional.

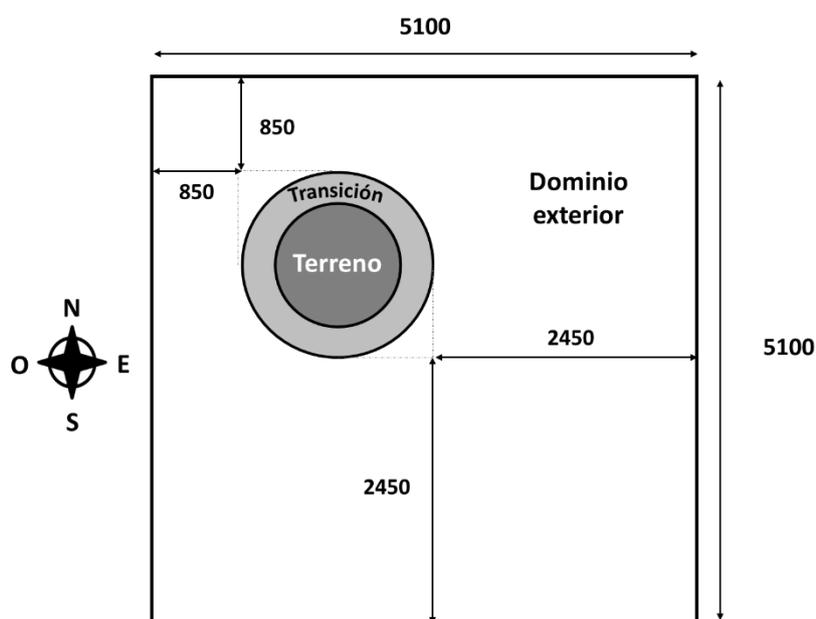


Figura 51. Disposición y dimensiones del dominio computacional.

Es importante destacar que el diseño del dominio geométrico varía en función de la dirección del viento incidente. Concretamente, es la condición de contorno de cada uno de los límites laterales del dominio la que cambia según la dirección del viento, modificando en consecuencia su distanciamiento respecto al terreno. Esta configuración se realiza bajo las siguientes premisas:

- El viento entra en cada caso por uno o dos laterales del dominio exterior, mientras que el resto de los laterales se configura como condición de simetría.
- La salida del flujo se realiza por una o dos franjas situadas en el fondo del dominio colindantes con los laterales configurados con la condición de simetría, es decir, los laterales opuestos a la condición de entrada. La condición de salida se fija en el fondo del dominio por dos motivos. El primero consiste en asegurar un perfil de presiones en función de la altitud correcto, ya que asignando la condición de salida directamente en los laterales opuestos a las entradas del flujo no permitía obtener un resultado satisfactorio. El segundo

motivo estriba en que todos los gases empleados en la simulación son más densos que el aire, de forma que tenderán a descender hasta que finalmente puedan abandonar el dominio por la parte inferior del mismo donde se sitúa la franja de salida.

La Figura 52 muestra el diseño del dominio computacional en función de la dirección del viento incidente.

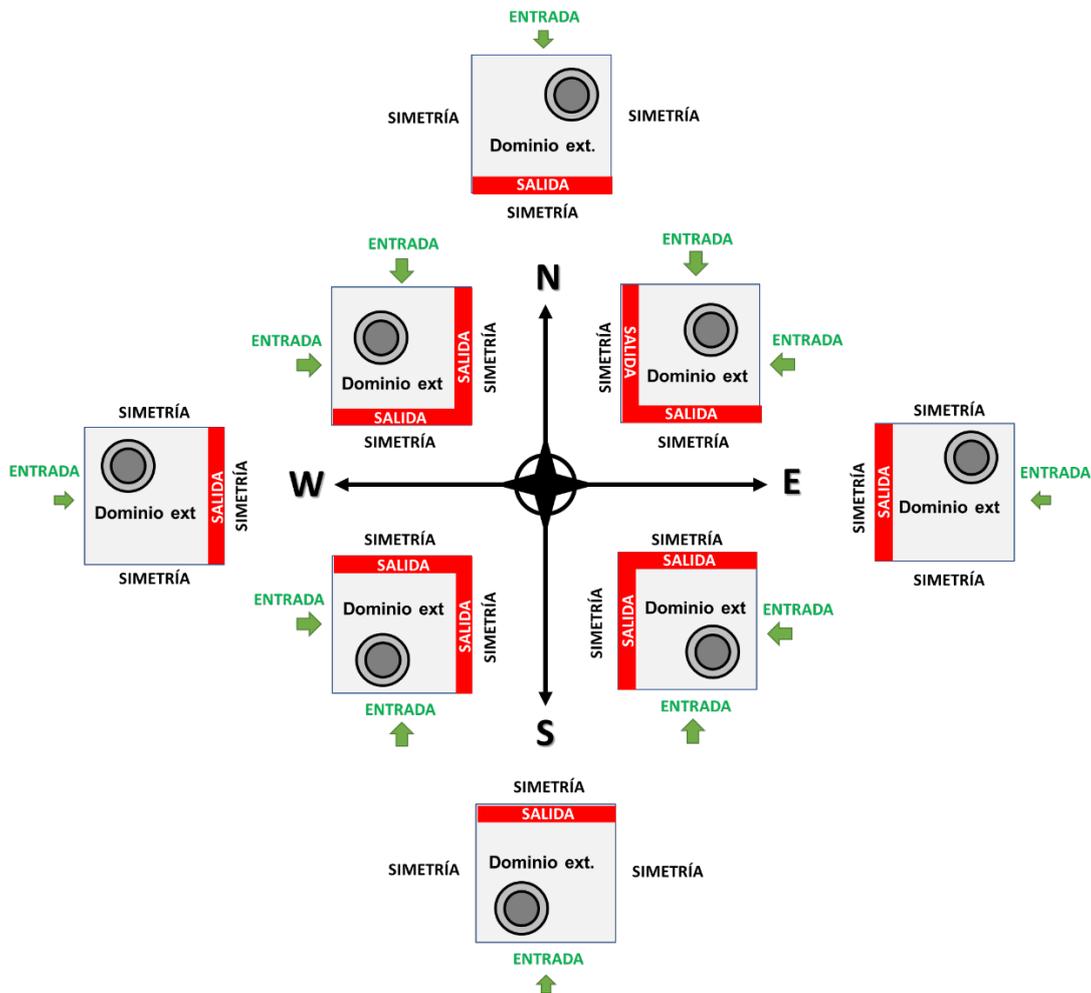


Figura 52. Diseño del dominio computacional y condiciones de contornos en función de la dirección del viento incidente.

Por último, la Figura 53 muestra una imagen en perspectiva del dominio geométrico, en el que se puede distinguir la dimensión vertical del mismo.

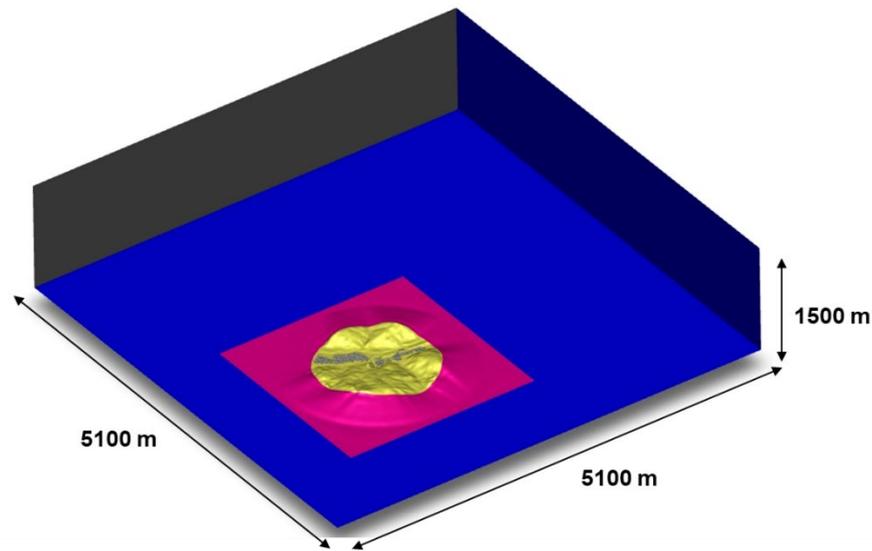


Figura 53. Vista en perspectiva del dominio geométrico.

6.2 Discretización del dominio o mallado

Una vez finalizado el dominio geométrico del modelo, el siguiente paso a realizar consiste en la discretización del mismo en celdas o proceso de mallado. Se conoce como mallado al proceso de dividir el dominio computacional en un número finito de celdas, las cuales proporcionan los puntos en los que posteriormente se calcularán los valores del flujo. Este proceso tiene un impacto muy grande en la simulación, dado que el estilo de malla escogido, así como la densidad o tamaño de la misma van a ser determinantes en la exactitud de los resultados, por lo que el diseño del mallado es un elemento clave de este proceso.

En la siguiente sección “6.2.1 Criterios de diseño del mallado” se presentará de forma detallado los criterios de diseño a tener en cuenta de cara a la realización del mallado, así como una revisión de las principales tendencias y métodos hallados en la literatura. El contenido de dicha sección sienta las bases para definir el procedimiento a seguir en la generación del mallado del modelo, que se ha descrito en la sección “6.2.2 Generación del mallado”.

6.2.1 Criterios de diseño del mallado

El mallado del modelo CFD presenta un impacto muy grande en las simulaciones, dado que el estilo de malla escogido, así como la densidad o tamaño de la misma, van a ser determinantes en la exactitud de los resultados. Para una mejor comprensión de los distintos tipos de celdas, la Figura 54 muestra una representación gráfica de cada uno de ellos.

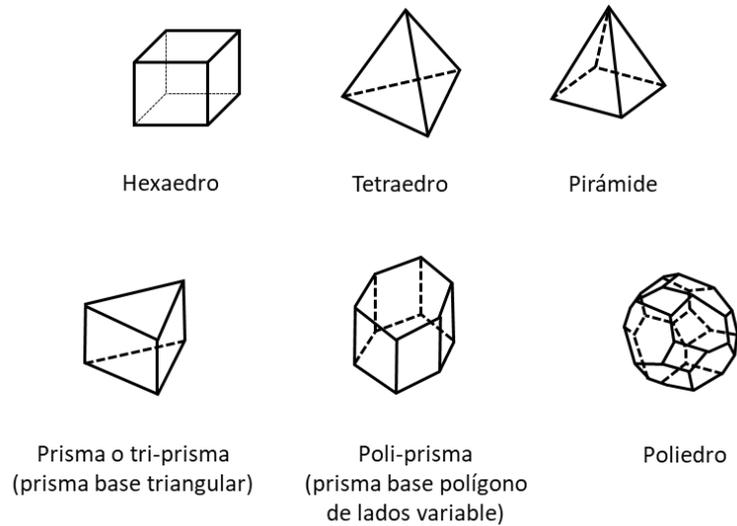


Figura 54. Representación de los distintos tipos o formas de celdas.

El estilo de la malla hace referencia normalmente a la geometría de los elementos en que se divide el dominio o celdas. En este sentido, los elementos poliédricos que se aplican con mayor frecuencia en el mallado de dominios tridimensionales son los tetraedros y los hexaedros. Cuando se trata de simular un sistema como es la capa límite atmosférica, una de las premisas comúnmente aceptadas es la superioridad de las formas hexaédricas frente a las tetraédricas, en términos de exactitud de los resultados. De esta forma, un estudio comparativo [66] determinó que los errores promedio en los resultados de simulación proporcionados por tetraedros podían ser de hasta un orden de magnitud superior a los resultados aportados por hexaedros. Otro importante hallazgo determinó que, para un mismo dominio computacional, un mallado basado en tetraedros exigía un número de celdas superior al requerido en caso de utilizar hexaedros para poder obtener resultados satisfactorios. Por tanto, el uso de tetraedros no sólo parece dar lugar a un mayor número de errores en los resultados, sino que además incrementa la demanda de recursos computacionales y tiempos de simulación.

Este aumento del error en los resultados asociado al uso de celdas tetraédricas se explica en parte por la obtención de mallas de baja calidad a las que suelen dar lugar, reflejado en parámetros de calidad de celda como la ortogonalidad, asimetría y relación de aspecto. No obstante, evitar los errores de discretización no es el único objetivo que se persigue al generar una malla de calidad, sino que tal y como defiende [85], también resulta clave para lograr la convergencia de las simulaciones minimizando la necesidad de uso de esquemas de discretización de segundo orden.

Otro importante factor que explica los errores de truncamiento o difusión numérica asociados al uso de tetraedros es la imposibilidad de alinear las paredes de la celda con el flujo incidente, disposición que sólo es posible con el uso de hexaedros y prismas. El uso de tetraedros está, por tanto, desaconsejado en las zonas del flujo más próximas al terreno y a las paredes de los edificios [20], [144], debiendo limitar su uso a las partes del dominio más alejadas de dichas superficies.

Una de las estrategias de mallado más recomendable consiste en utilizar capas de celdas paralelas a las superficies del terreno y edificios [145], por lo que las celdas hexaédricas constituyen una de las opciones más valoradas para la discretización de la capa límite atmosférica, capaz de producir mallas de alta calidad. Sin embargo, es importante destacar que el proceso de división del dominio en hexaedros no suele ser automático ni sencillo. Los módulos de mallado disponibles en la actualidad, tanto en paquetes comerciales como de código libre, presentan capacidades limitadas. Para poder obtener celdas hexaédricas suele ser requisito el descomponer la geometría en partes más sencillas y con geometrías que admitan su división en celdas por técnicas de barrido. Dicha técnica consiste en identificar una superficie base sobre la que se realiza una malla de superficie (celdas bidimensionales), que posteriormente se extruyen generando celdas tridimensionales de altura determinada. Por último, estas celdas 3D se van disponiendo en capas siguiendo una dirección determinada hasta alcanzar otra superficie de destino. La descomposición de la geometría en partes aptas para el barrido no suele ser sencilla y en muchos casos puede implicar un alto grado de edición manual. Otro procedimiento común para la obtención de mallados hexaédricos consiste en una estrategia de generación de bloques virtuales que posteriormente se adaptan a la geometría. Este procedimiento evita tener que realizar una descomposición real de la geometría, lo que facilita el proceso de creación del modelo. Mediante subdivisión y modificación de las dimensiones de los bloques, es posible adaptarlos a las formas geométricas. Posteriormente, el usuario define una serie de relaciones o asociaciones entre los vértices, ejes y caras de los bloques y los puntos, líneas y superficies, de la geometría a la que representan. Los programas ICEM CFD y SpaceClaim, pertenecientes ambos al paquete comercial de ANSYS, así como BlockMesh de OpenFOAM y terrainBlockMesher [146] son ejemplos destacados que permiten la estrategia de mallado hexaédrico por bloques. La Figura 55 muestra un ejemplo de creación de bloques en ICEM y posterior corte y descomposición hasta conseguir una forma adecuada para reflejar la geometría de un modelo [147].

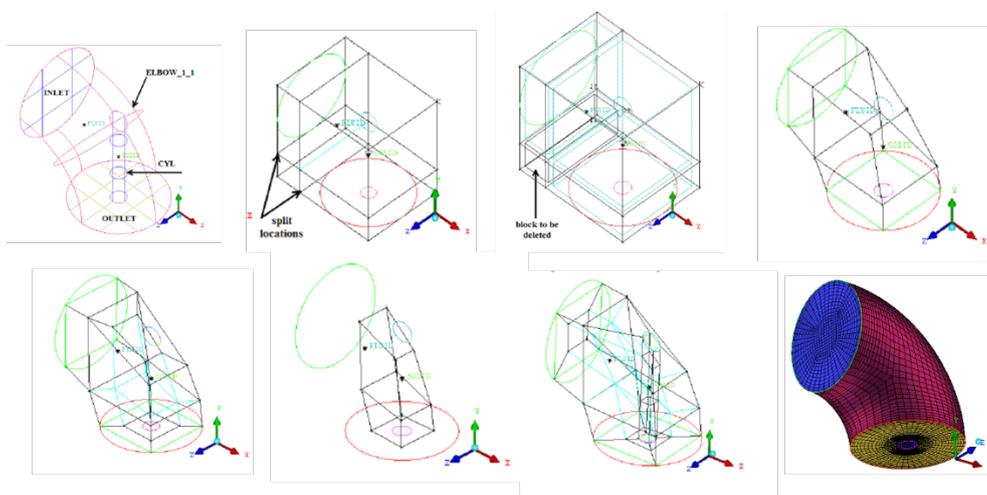


Figura 55. Proceso de generación y edición de bloques en ICEM CFD [147].

Aunque se trata de un método eficaz con el que se obtienen buenos resultados, es obvio que la estrategia de bloques no es apta para geometrías complejas en las que se tiene un elevado número de detalles a los que amoldar los bloques. Este es el caso de zonas urbanas extensas en las que existe una gran cantidad de edificios, elementos urbanísticos y fuentes emisoras de contaminantes. Realizar este proceso de división y asociación de bloques para cada elemento de interés resultaría impráctico, por lo que los casos encontrados en la literatura se limitan bien a obstáculos aislados o grupos poco numerosos de edificios [17], [66], [68], [69], [79], [84], [85], [148]–[151] o bien a relieves del terreno sin obstáculos [109], [112], [113], [115], [152]–[156].

Una de las opciones más valoradas como alternativa al mallado hexaédrico es el uso de celdas prismáticas o prismas. Esta geometría destaca por una mayor facilidad de generación, ya que las superficies pueden ser divididas no solo mediante cuadriláteros sino también mediante elementos triangulares. Los prismas se pueden disponer fácilmente en forma de capas paralelas a las superficies del terreno y obstáculos, alineadas por tanto con el flujo incidente. En la actualidad destacan principalmente dos técnicas capaces de obtener este tipo de mallado.

La primera de estas estrategias es ampliamente utilizada en la modelización de flujos en el ámbito industrial. Consiste en la generación de un número de capas de prismas mediante un procedimiento que se denomina generalmente inflación a partir de las celdas 2D triangulares generadas en las superficies de interés, rellenando el volumen restante con tetraedros [142], [144], [151]. Este procedimiento se encuentra altamente automatizado en prácticamente cualquier software de mallado, por lo que permite obtener un mallado de características razonables en poco tiempo. Cuando se consideran dominios que comprenden el relieve topográfico sin inclusión de obstáculos es posible generar un número de capas suficiente para cubrir toda la altura de la capa límite atmosférica, tal y como sucede en [111], [114]. En cambio, cuando se incorpora la geometría de edificios, el número de capas de prismas que se puede aplicar se ve limitado, ya que de lo contrario se pueden generar interferencias inadmisibles entre las capas dispuestas horizontalmente sobre el terreno y las verticales correspondientes a las fachadas de los edificios. Limitar por tanto las capas de prismas provoca que una gran parte del dominio quede desprovisto de celdas alineadas con el flujo, tal y como se muestra en la Figura 56.

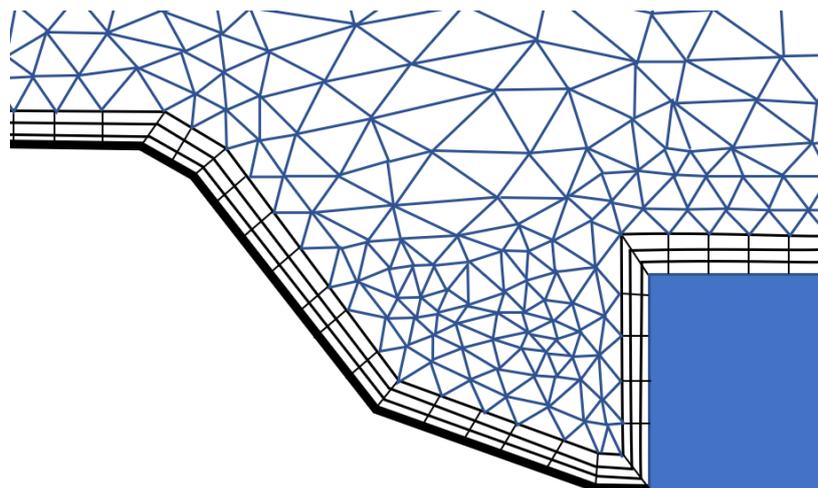


Figura 56. Mallado compuesto de tetraedros y 3 capas de prismas sobre las superficies del terreno y edificios.

La segunda estrategia consiste en una metodología manual específicamente creada para estudios de física urbana [23] y denominada por sus creadores como *surface-grid extrusion technique* (en adelante, técnica de extrusión). Esta técnica consiste en la definición de una malla superficial sobre el fondo del dominio, formada por elementos 2D triangulares y/o rectangulares, evitando las áreas ocupadas por edificios y otros obstáculos. Posteriormente, las celdas superficiales se extruyen y replican en altura, adaptando la disposición de las celdas a las alturas de los edificios y obstáculos que irán marcando así puntos de división del mallado en altura. Como resultado, se obtiene un mallado compuesto íntegramente por celdas prismáticas, alineadas por tanto con el flujo en todos los puntos del dominio. Por otro lado, con este procedimiento no es necesario incorporar la geometría tridimensional de los edificios en el modelo geométrico, ya que esta se va definiendo por medio de los espacios vacíos que resultan al generar el mallado.

Otra de las ventajas de esta metodología es la obtención de mallas de alta calidad, ya que en palabras de sus autores permite “un control total por parte del usuario sobre la calidad y resolución de la malla” [23]. De esta forma, la técnica de extrusión ha sido ampliamente utilizada en numerosos estudios del ámbito de la física urbana [19], [22], [58], [82], [86], [89], [91], [123], [157]–[159].

A pesar de sus ventajas, esta metodología puede resultar poco adecuada en determinados escenarios, debido a la complejidad que puede entrañar el proceso de adaptar las divisiones de la malla a alturas muy variables. Este es el caso de complejos urbanos que incluyan un número elevado de edificios y obstáculos, especialmente si las alturas de estos últimos son muy dispares. Para generar una malla por el método de extrusión habría que tener en cuenta un número de divisiones y variabilidad de tamaños de celdas en altura demasiado grande como para resultar práctico, tal y como se representa en la Figura 57.

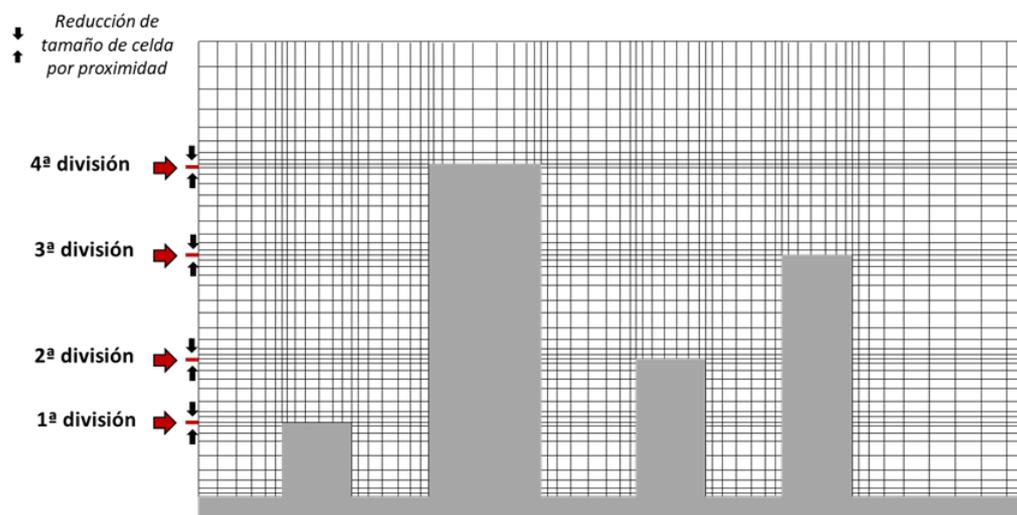


Figura 57. Aplicación de la técnica de extrusión una geometría urbana compleja.

Casos de estudio que incluyan relieves topográficos complejos a la vez que edificios también suponen un problema, ya que la disposición de capas de prismas paralelos en presencia de alturas variables se vuelve compleja. Tal y como representa la Figura 58, la dirección de extrusión de las celdas no puede seguir la dirección normal a la superficie de las mismas y la sucesión de capas hasta el límite superior del dominio representa una dificultad añadida. No es de extrañar por tanto que los estudios hallados en la literatura basados en esta técnica de mallado se limiten a escenarios urbanos con fondos planos.

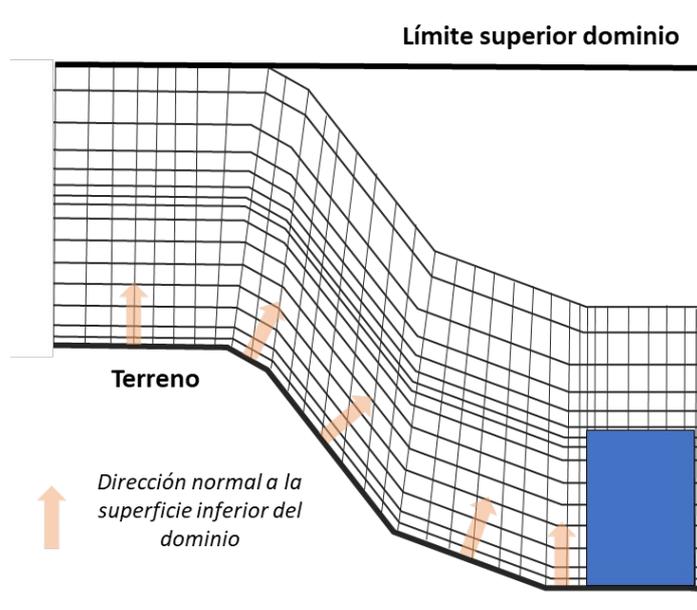


Figura 58. Problemas en la aplicación de la técnica de extrusión a un dominio que engloba terreno y edificios.

Para poder abordar los escenarios más complejos, es necesario recurrir a otras estrategias de mallado no tan extendidas en la literatura, especialmente en lo que respecta a aplicaciones en la industria o la energía. Una de las estrategias más destacables en este aspecto es el uso de mallados de tipo no

conforme. Este tipo de malla se caracteriza por la presencia de interfaces entre distintas regiones de celdas del modelo, en las que las posiciones de los nodos que conforman la malla a uno y otro lado de las mismas no coinciden [160]. La Figura 59 muestra un ejemplo de la tipología de mallado no conforme.

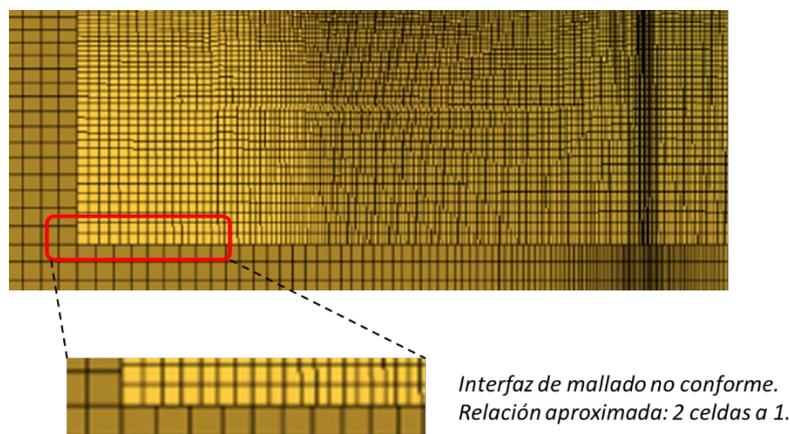


Figura 59. Ilustración de una interfaz de mallado no conforme.

Este tipo de interfaces permite conectar fácilmente las distintas regiones de celdas entre sí, con el requisito de que estas últimas se solapen al menos de forma parcial. Con este esquema de mallado es posible generar hexaedros en todo el dominio computacional y adaptarlos a la geometría de los edificios sin los esfuerzos de división y adaptación de bloques o descomposición geométrica. El principal inconveniente de este método es que la transferencia de valores numéricos entre celdas situadas a ambos lados de la interfaz no conforme se realiza mediante un proceso de interpolación, lo que introduce una pérdida de exactitud adicional resultados. Por este motivo, estas interfaces deben situarse alejadas de zonas en las que se esperen fenómenos singulares del flujo, así como fuertes gradientes en las variables características. Por otra parte, la obtención de este tipo de mallado depende de las capacidades del módulo o programa en cuestión que se utilice ya que se trata de una técnica que requiere de un alto componente de automatización por parte del mismo. En la práctica, son pocos los programas que ofrecen esta posibilidad, destacando los ejemplos de Salome y snappyHexMesh. El tradicional módulo de mallado del paquete ANSYS, Meshing, solía admitir este tipo de mallado mediante una funcionalidad denominada CutCell, descatalogada ahora desde la versión de 2020. Para poder utilizar esta técnica en programas que no permiten aplicarla de forma automatizada se requiere un gran esfuerzo por parte del usuario, debiendo realizar el mallado en múltiples partes independientes y posteriormente unirlos de forma adecuada en el *solver*. Esta tarea puede ser muy difícil de gestionar en el caso de geometrías complejas por lo que no abundan ejemplos de esta técnica en la literatura [83], [116].

Otra de las estrategias posibles para tratar geometrías complejas consiste en la utilización de mallados híbridos. En su versión más simple, estos esquemas aplican tetraedros en las zonas más complejas

como son los contornos y proximidades de edificios y obstáculo, mientras que cubren el resto del volumen del dominio con hexaedros. Además de los ya citados inconvenientes que implica la utilización de tetraedros en las zonas más críticas del flujo, la transición entre estas dos tipologías de mallado debe realizarse mediante celdas piramidales, que perjudican la calidad de la malla. Sin embargo, este esquema híbrido es relativamente fácil de conseguir incluso en geometrías complejas, por lo que se puede encontrar en varios estudios de la literatura [92], [111], [118], [156], [161]–[164].

La mejora de funcionalidades que los módulos de mallado han experimentado durante los últimos años ha propiciado la aparición y popularización de nuevos esquemas de mallado híbrido mucho más adecuados. Estos esquemas tratan de mejorar las deficiencias de la combinación típica de tetraedros y hexaedros, combinando y modificando dichas formas geométricas para mejorar los parámetros de calidad de la malla. Un ejemplo típico es partir de una malla compuesta por tetraedros para posteriormente agrupar un cierto número de estos elementos entre sí formando poliedros. Los poliedros reducen los errores de interpolación, capturando mucho mejor los gradientes del flujo, y han demostrado acelerar de forma notable las simulaciones, reduciendo el tiempo y coste computacional respecto a otros tipos de celdas [165]. Por este motivo, las celdas poliédricas han sido la elección de varios estudios de flujo y dispersión de contaminantes en años recientes [104], [166], [167]. En la superficie del modelo se conserva el uso de prismas, sin embargo, las bases triangulares se sustituyen por otras de formas también poliédricas resultado de la combinación de varias celdas adyacentes entre sí, de forma que el resultado se puede denominar poliprismas. Estos esquemas pueden admitir también la generación de un núcleo de hexaedros en las zonas del flujo más alejadas de las superficies y posiciones críticas, contribuyendo a mejorar aún más la calidad del mallado y reducir el número de celdas y el coste de la simulación [119], [168]. Con estos nuevos esquemas se evita el uso de celdas piramidales a la vez que se consiguen mallados de alta calidad con un alto nivel de automatización, reduciendo así el esfuerzo y necesidad de intervención manual por parte del usuario.

El programa Fluent Meshing, del paquete ANSYS, es uno de los ejemplos más destacados en la actualidad que implementa los distintos esquemas de mallado híbrido descritos. La Figura 60, traducida y adaptada a partir de la ilustración original producida por la empresa propietaria del software ANSYS, presenta una comparación entre los distintos métodos de mallado disponible. En ella se observan las ventajas de los mallados basados en poliedros y poliedros combinados con núcleos de hexaedros.

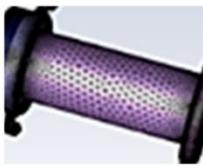
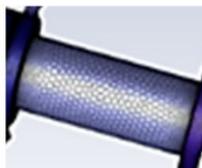
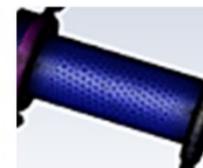
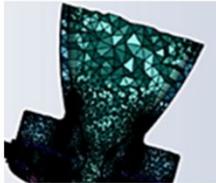
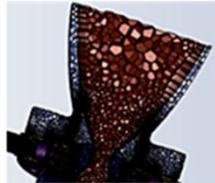
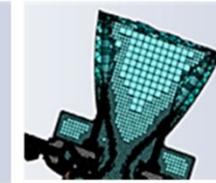
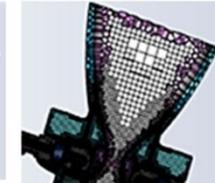
Método	Tetraedros	Poliedros	Núcleo-hexaedros	Poliedros + núcleo-hexaedros
Tipo de celda	Tetraedros + tri-prismas	Poliedros + poli-prismas	Hexaedros + tri-prismas + transición de tetraedros/pirámides	Poliedros + poli-prismas + transición de poliedros
Facilidad para tratar geometrías complejas?	Máxima	Alta	Media	Media
Cantidad de celdas	Máxima	Baja	Media	Mínima
Compatible con CFX/Polyflow ?	Sí	No	Sí (condiciones específicas)	No
Posibilidad de generación en paralelo	Tetraedros: no Prismas: sí	Sí	Sí	No
Mallado de superficie				
Mallado de volumen				

Figura 60. Comparación entre los distintos métodos de mallado y tipos de celdas ofrecidos por el módulo ANSYS Fluent Meshing. Adaptación y traducción de figura original proporcionada por ANSYS.

Para una geometría compleja como supone la combinación de relieve topográfico con elementos urbanísticos el uso de uno de estos esquemas permite obtener una malla de calidad, altamente adaptable y versátil que destaca por su facilidad de ejecución gracias a la automatización del proceso.

No obstante, cuando se considera el uso de paquetes comerciales se debe tener en cuenta que el procedimiento de mallado o lógica de funcionamiento de la herramienta no es totalmente transparente para el usuario. Con frecuencia, el usuario carece de control sobre los resultados derivados de ciertas acciones llevadas a cabo en el programa, a diferencia de otros programas de código libre o manuales que permiten un control mayor. Sin embargo, es importante destacar que estos programas han adquirido una gran relevancia dentro del ámbito industrial gracias a que ofrecen herramientas relativamente intuitivas y sencillas de utilizar, permitiendo obtener una malla de calidad en un tiempo menor. La reducción del tiempo de creación del modelo es un aspecto muy valorado en el ámbito de la industria, donde normalmente se cuenta con plazos ajustados. Por este motivo, las empresas desarrolladoras de este tipo de softwares comerciales invierten importantes esfuerzos en su

evolución, innovación y mejoras funcionales de forma continuada. Esto explica por tanto la relevancia que dichos programas alcanzan en el ámbito industrial, de forma que las industrias usuarias de los mismos invierten periódicamente en la renovación de licencias y actualización a las últimas versiones de dichas herramientas para poder beneficiarse de las mejoras funcionales en sus proyectos.

6.2.2 Generación del mallado

Tras analizar en la literatura las distintas posibilidades de mallado con sus ventajas e inconvenientes, inicialmente se optó por realizar un mallado hexaédrico por bloques mediante el programa ANSYS ICEM, por ser esta una de las estrategias más frecuentes en la literatura y por ser posible su aplicación para el presente caso de estudio. Para la primera aproximación se utilizó un modelo geométrico compuesto únicamente por el relieve topográfico y la fuente emisora, sin incluir los bloques de edificios. Durante la realización del mallado, cuyos detalles se explican posteriormente en la sección “6.2.2.1 Prueba de mallado en ANSYS ICEM”, se encontraron diversas dificultades que fue necesario abordar con distintas estrategias para evitar el deterioro de la calidad de la malla. Sin embargo, la complejidad detectada para replicar el proceso de mallado sobre el modelo geométrico completo con los edificios hizo que finalmente se descartara esta opción por resultar impráctica para los objetivos del proyecto.

Tras descartar la anterior estrategia, se optó finalmente por un esquema de mallado híbrido compuesto por poliedros, poliprismas y hexaedros. Este esquema se considera la opción más adecuada para el presente caso de estudio, no solo por la mayor facilidad en la obtención de la malla y calidad que se puede alcanzar, sino también por la naturaleza industrial del proyecto que se ve favorecida por las ventajas de reducción de tiempos y costes de computación, tal y como se explicó anteriormente. Para este objetivo se utilizó la herramienta Fluent Meshing, del paquete comercial ANSYS. Además de la tipología de celda, otro aspecto importante a considerar es el tamaño o número de las mismas, de forma que se deberá prestar especial atención a la densidad de malla en las zonas en que se esperen fenómenos del flujo y fuertes gradientes [142], [144].

A continuación, se presentan dos secciones en las que se describen el procedimiento de creación del mallado en cada uno de los dos módulos comerciales testeados. La primera sección, “6.2.2.1 Prueba de mallado en ANSYS ICEM”, describe los trabajos desarrollados en el primer intento de mallado, aunque finalmente fue descartado por las dificultades descritas. Sin embargo, se ha decidido incluirlo igualmente en este documento para mostrar las funcionalidades de este módulo ya que en algunos casos de estudio puede ofrecer resultados satisfactorios. Finalmente, en la sección “6.2.2.2 Mallado definitivo en ANSYS Fluent Meshing” se describe el procedimiento de mallado definitivo que resultó finalmente elegido para la construcción del modelo CFD de esta investigación.

6.2.2.1 Prueba de mallado en ANSYS ICEM

Una de las estrategias más típicas y efectivas para dividir el dominio geométrico en celdas hexaédricas es el denominado mallado por bloques. El módulo ICEM CFD permite realizar este tipo de mallado con un alto nivel de control y personalización por parte del usuario. Por este motivo, este software fue uno de los elegidos para llevar a cabo la división del dominio en celdas en lo que resultó ser el primer intento de obtención de un mallado adecuado para el modelo.

Sin embargo, este intento de mallado sólo fue posible completarlo para un escenario que incluía únicamente la geometría de la chimenea, presentando una enorme complejidad para su extensión a las geometrías derivadas de los múltiples edificios y obstáculos restantes del modelo. El motivo es que la abundancia de obstáculos en el modelo a los que adaptar las sucesivas divisiones de los bloques de mallado supone alcanzar un número de particiones difícilmente manejable para el usuario. Además, el esfuerzo manual y tiempo necesario para generar este tipo de mallado ha demostrado ser muy elevado y propenso a errores en el proceso de introducción de datos en el programa, lo que lo convierte en aún más inviable para situaciones de evoluciones y cambios en la geometría. A estos impedimentos, se une también algunos problemas de proyección de las líneas del mallado sobre las superficies verticales como las fachadas de los edificios.

Por todos estos motivos, esta geometría se debe reservar a los casos de estudio que incluyan únicamente el estudio del terreno (siempre y cuando no incluya pendientes o caras de elevada verticalidad) y, a lo sumo, la incorporación de la geometría de un foco emisor. Solo en estos casos, el método del mallado por bloques puede resultar una opción interesante para obtener un mallado hexaédrico de muy alta calidad de celdas.

La descripción de los trabajos conducentes a la obtención del mallado hexaédrico con ANSYS ICEM se puede encontrar en el Anexo I de esta tesis doctoral.

6.2.2.2 Mallado definitivo en ANSYS Fluent Meshing

El procedimiento para obtener la malla en Fluent Meshing no reviste mayor dificultad, dado que la herramienta resulta bastante intuitiva y sólo es necesario seguir los pasos en el orden que indica la propia herramienta. Inicialmente, esta herramienta ofrece dos estrategias de mallado a elegir en primer lugar:

- **Mallado con tolerancia de defectos (*Fault tolerant Meshing*).** Este flujo de trabajo es interesante para los casos en los que el dominio geométrico se construye en base a geometrías complejas que presentan problemas de inexactitudes y falta de tangencias entre las superficies y elementos que componen el modelo. Permite establecer unos niveles de tolerancia entre los distintos contornos que componen el dominio con el objetivo de que el programa llegue

a reconocer y extraer un volumen de fluido en el modelo que será sobre el que se realice posteriormente el mallado. Es una opción interesante para el caso de geometrías defectuosas, pero requiere un mayor esfuerzo de mallado y configuración manual y no garantiza unos resultados satisfactorios en todos los casos. En el caso de este trabajo, el dominio geométrico se realizó de una forma limpia y cuidada, por lo que no fue necesario utilizar este flujo de trabajo.

- **Mallado de geometrías estancas (*Watertight geometry*).** Esta estrategia de mallado es adecuada para geometrías más limpias y en las que las superficies adyacentes son perfectamente tangentes o secantes entre sí. Al igual que en el caso anterior, consiste en el reconocimiento y extracción automáticas de un volumen de fluido contenido entre las superficies o contornos del modelo que será sobre el que posteriormente se realice la discretización o mallado. Este fue el flujo de trabajo elegido para la generación del mallado.

En este punto es interesante destacar que el dominio geométrico previamente desarrollado ya consistía en un volumen o sólido 3D en sí mismo, de forma que no se dependió del algoritmo de reconocimiento volumétrico implementado en el programa. Esto es así debido a que el método seguido para la construcción geométrica incluye un esfuerzo adicional que permite obtener directamente el volumen de fluido de estudio desde el propio programa de edición gráfica. Para ello, una vez finalizadas todas las superficies geométricas de acuerdo a la metodología descrita en la sección “6.1 Geometría y dominio computacional”, se generó en el programa CAD un sólido hexaédrico destinado a abarcar la totalidad del espacio ocupado por el dominio. Sobre este sólido, se practicó posteriormente un comando de sustracción para descontar los volúmenes correspondientes a los edificios y chimenea del primero. Por último, mediante un comando de recorte, se utilizó como base la suma de todas las superficies sólidas del modelo (fondo exterior plano, zona de transición, superficie del terreno y todas las superficies asociadas a edificios y a la chimenea) para recortar inferiormente el sólido hexaédrico, obteniendo así finalmente el volumen exacto de aire considerado en el caso de estudio.

Si bien las funcionalidades ofrecidas por programas comerciales como ANSYS Fluent Meshing suprimen la necesidad de introducir modelos geométricos con volúmenes definidos en origen, siempre que sea posible es preferible obtener los volúmenes de estudio en la fase de construcción geométrica. De este modo, el usuario se puede asegurar un control mucho mayor sobre los resultados obtenidos en el proceso de mallado, así como la división del fluido en regiones que puedan ser tratadas de forma independiente durante el proceso de mallado. De esta forma, esta última característica ha sido aplicada en la generación del volumen del modelo, que como se explica a continuación, resultó dividido en dos partes diferenciadas.

- Submodelo o dominio interior. Se distingue una parte interna que incluye una porción del fluido situada fundamentalmente sobre la superficie del terreno y el área de transición, alcanzando una altura de aproximadamente dos tercios de la altura total del modelo. A esta región o parte se la denomina submodelo interior.
- Submodelo o dominio exterior. La otra región que resulta de descontar al volumen total del modelo la parte correspondiente al submodelo interior se denomina submodelo exterior.

Esta división del modelo, que se puede observar en la Figura 61, se realizó con el objetivo de poder controlar los tamaños de las celdas de forma independiente en cada uno de ellos.

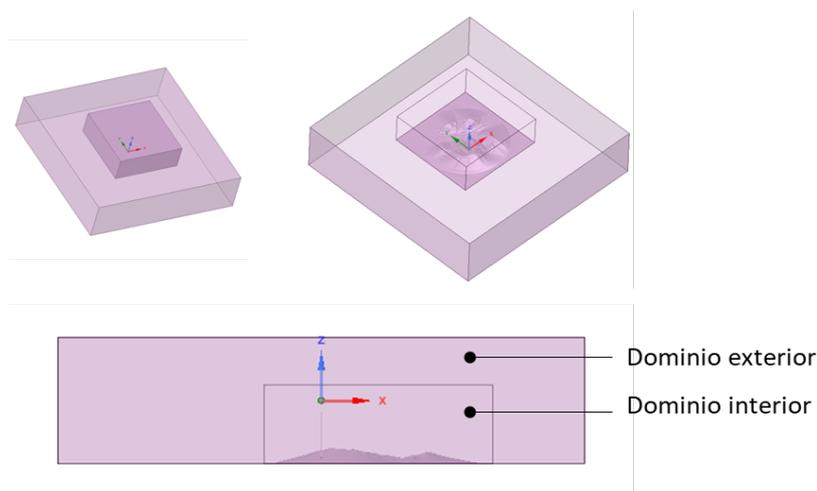


Figura 61. Distinción entre los dominios interior y exterior del modelo computacional.

Pero, además, otro aspecto a considerar previo al comienzo del ya citado flujo de trabajo denominado mallado de geometrías estancas (*Watertight geometry*) es la preparación del modelo en el módulo ANSYS SpaceClaim. Este software, incluido dentro del conjunto de herramientas de ANSYS, está destinado a la preparación y creación geométrica previa al proceso del mallado. Una de las operaciones más importantes que es recomendable llevar a cabo es la definición y nombramiento de los contornos del modelo sobre los que posteriormente se definirán las condiciones de contorno. Este paso permite además que el módulo Fluent Meshing sea capaz de reconocer dichos contornos, lo que resulta clave para la asignación de tamaños de celda diferentes en cada uno de ellos. Además de la mencionada definición de contornos, otro paso clave que es posible realizar en SpaceClaim consiste en la creación de los denominados cuerpos de influencia. Estos elementos consisten en volúmenes que se colocan estratégicamente en distintas zonas del modelo en las que se busca aplicar un refinamiento especial en el mallado de volumen. La Figura 62 muestra la identificación de los distintos contornos aplicada en el modelo computacional a través de SpaceClaim. Por otro lado, la Figura 63 muestra una representación gráfica de los principales cuerpos de influencia añadidos al modelo para ajuste del mallado. En ella se distinguen los siguientes cuerpos.

- Cuerpo de influencia de entrada del flujo (*BOI inlet*). Creado para ajustar el tamaño de celda de la región del flujo incidente que aún no ha alcanzado el terreno o área de estudio, en su parte inferior.
- Cuerpo de influencia de salida del flujo (*BOI outlet*). Creado para ajustar el tamaño de celda de la región del flujo que ya ha sobrepasado el área de estudio, en su parte inferior.
- Cuerpo de influencia de la chimenea (*BOI chim*). Creado para ajustar el tamaño de celda en las inmediaciones de la fuente emisora, donde se esperan las mayores fluctuaciones en la pluma de contaminación.
- Cuerpo de influencia del dominio interior (*BOI int*). Creado para limitar el tamaño de las celdas de volumen de todo el dominio interior del modelo a un valor máximo.

inlet_south	Contorno lateral sur
inlet_west	Contorno lateral oeste
outlet_north	Contorno lateral norte
outlet_east	Contorno lateral este
inlet_top	Contorno superior
wall_ext	Contorno inferior del dominio exterior
wall_chim	Contorno pared chimenea
inlet_chim	Contorno sección flujo gases chimenea
wall_buildings	Contorno pared edificios
wall_terrain	Contorno inferior superficie del terreno
wall_buffer	Contorno inferior zona de transición

Figura 62. Contornos del modelo y volúmenes definidos en SpaceClaim a los que son de aplicación distintos parámetros de configuración del mallado.

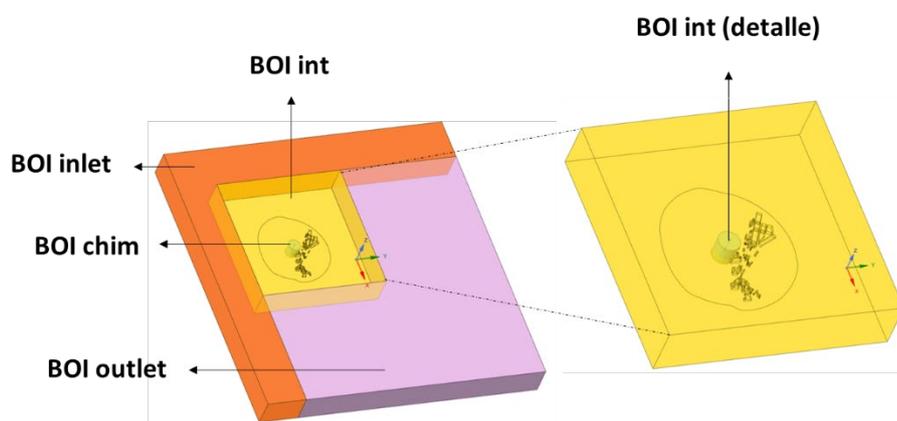


Figura 63. Cuerpos de influencia introducidos en el dominio a través de SpaceClaim.

Una vez resueltas estas cuestiones en SpaceClaim y de vuelta al flujo de trabajo seleccionado en el programa Fluent Meshing, el siguiente paso consiste en la selección de los tamaños de celda deseados en cada uno de los contornos previamente definidos y cuerpos de influencia, así como el establecimiento de ratios de crecimiento y funciones de curvatura y proximidad. A partir de este momento, el proceso de mallado se ha desarrollado en todo momento guiado por el menú de trabajo

del programa en forma de acciones consecutivas que se van activando a medida que se completan las anteriores. Finalmente, se llega al paso final en el que el usuario debe seleccionar el método de mallado de volumen deseado, cuyas opciones fueron ya presentadas en la Figura 60 durante la discusión sobre los mallados híbridos de la sección “6.2.1 Criterios de diseño del mallado”. El método elegido en este paso ha sido el que incluye mayoritariamente poliedros y un núcleo hexaedros (*poly-hexcore*). La Figura 64 muestra los pasos a través de los cuales el usuario es guiado para la generación del mallado.

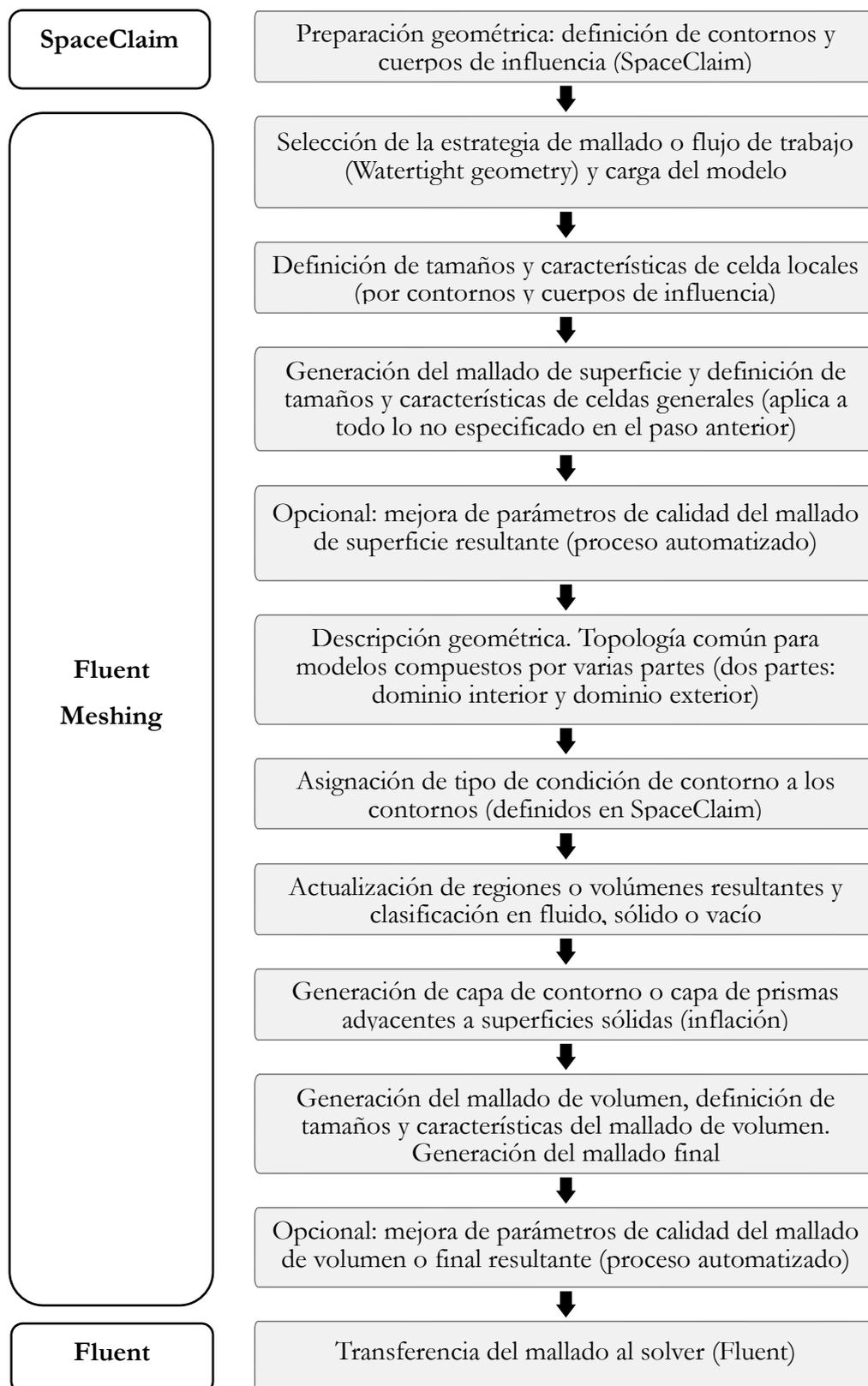


Figura 64. Listado de pasos seguidos para la generación del mallado en ANSYS Fluent Meshing.

6.2.3 Mallado resultante

El mallado obtenido en Fluent Meshing consiste en un esquema típicamente conocido como ajustado al volumen (*body-fitted*) generado en base a un método denominado *poly-hexcore*. Tal y como se adelantó en la sección “6.2.2.2 Mallado definitivo en ANSYS Fluent Meshing”, este esquema se compone en la práctica de una combinación de celdas poliédricas, hexaédricas (en la parte central o del núcleo) y poli-prismáticas en las capas más adyacentes a las superficies sólidas.

Para seleccionar un tamaño de malla adecuado, se ha realizado en primer lugar un estudio de independencia del mallado basado en tres versiones diferentes: una malla gruesa (10 millones de celdas), una malla media (20 millones de celdas) y una malla fina (30 millones). El objetivo de esta prueba es verificar que los resultados de la simulación no cambian con un mayor refinamiento de la malla de cálculo. Para ello se fijó un valor del 5 % como diferencia relativa máxima permitida entre los resultados de las simulaciones obtenidos con una resolución de malla y la siguiente. Tras realizar las simulaciones pertinentes y calcular este indicador para los distintos casos se observó que las diferencias relativas entre las mallas gruesa y media fueron de aproximadamente el 7%. En cambio, esta diferencia cayó ligeramente por debajo del 5% entre la malla media y la fina. En base a estos resultados se seleccionó finalmente la malla fina (20 millones de celdas) para las simulaciones.

La malla se ha refinado alrededor de la fuente de emisión, definiéndose para ello una forma cilíndrica de dos veces la altura de la chimenea y 6 m de diámetro (cuerpo de influencia de la chimenea, de acuerdo a lo descrito en la sección “6.2.2.2 Mallado definitivo en ANSYS Fluent Meshing” para limitar el tamaño de las celdas dentro de este espacio hasta un máximo de 1.5 m. Esta configuración asegura que la parte de la pluma sujeta aún a la mayor influencia de la inercia de salida de los gases (“*jet-dominated region*”, de acuerdo al estudio desarrollado en [108]) evolucionará en una región con alta resolución del mallado [60]. Además, la sección de salida de la chimenea se ha resuelto con 36 celdas de un tamaño máximo de 0.4 m, ya que estudios previos destacan la importancia de refinar la malla en la sección de escape [61].

Por otro lado, a las celdas que cubren las superficies del terreno y de los edificios se les ha asignado unos tamaños máximos de 4 y 2.5 m respectivamente, con refinamientos de hasta 2.5 m para capturar la proximidad a los bordes de los edificios en el caso del terreno. Al alejarse de los edificios, las celdas crecen gradualmente hasta tamaños máximos de 10 m dentro del dominio interior y hasta 40 m en el límite superior del dominio exterior. Sin embargo, las celdas de la parte inferior del dominio exterior se han limitado a 10 m, para la parte situada a barlovento del terreno, y a un máximo de 20 m para la región situada a sotavento. La relación de crecimiento entre dos celdas contiguas cualesquiera del dominio se han fijado en un máximo de 1.2, lo que resulta clave para limitar los errores de truncamiento. Además, esta relación disminuye localmente hasta 1.1 en regiones críticas, como las proximidades de la chimenea y las superficies de los edificios. Por último, se han añadido tres capas

de inflado de prismas (poli-prismas) adyacentes a las paredes sólidas del dominio, limitando la relación de crecimiento de estas últimas a un máximo de 1.5 en la dirección vertical.

La malla resultante presenta una resolución suficientemente alta para capturar la estructura de la dinámica de la capa límite atmosférica a su paso por la región de estudio. Por otro lado, los indicadores de calidad de malla obtenidos son satisfactorios, con un nivel de asimetría de celdas (*cell skewness*) mínimo de 0.49, lo que es importante para lograr la convergencia de los resultados y mantener unos errores de discretización bajos en las simulaciones. Así mismo, el parámetro de relación de aspecto (*aspect ratio*) se ha mantenido por debajo de 40, lo que resulta clave para asegurar un buen comportamiento del mallado en el módulo de cálculo (*solver*) de Fluent.

La Figura 65 a la Figura 69 muestran el aspecto del mallado obtenido a través de distintas vistas y detalles.

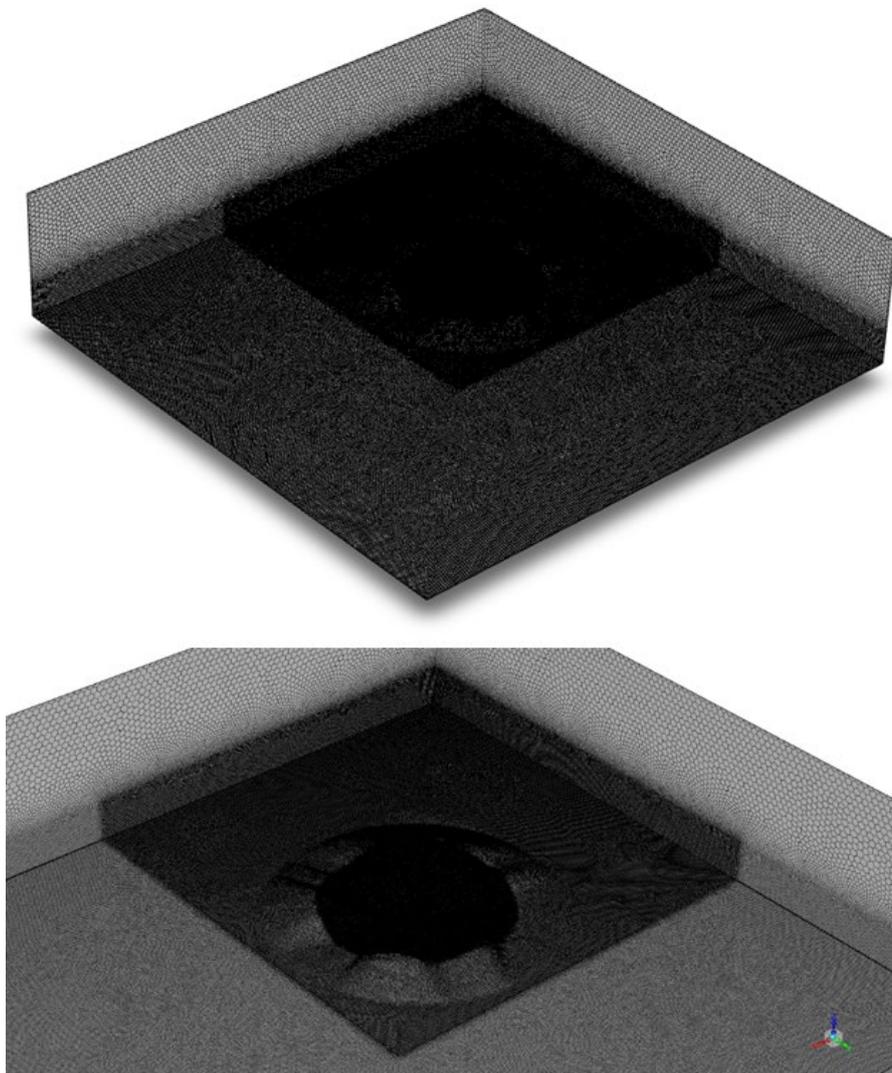


Figura 65. Vista del mallado resultante n° 1. Mallado de superficie del dominio exterior y refinamiento del área de entrada del viento.

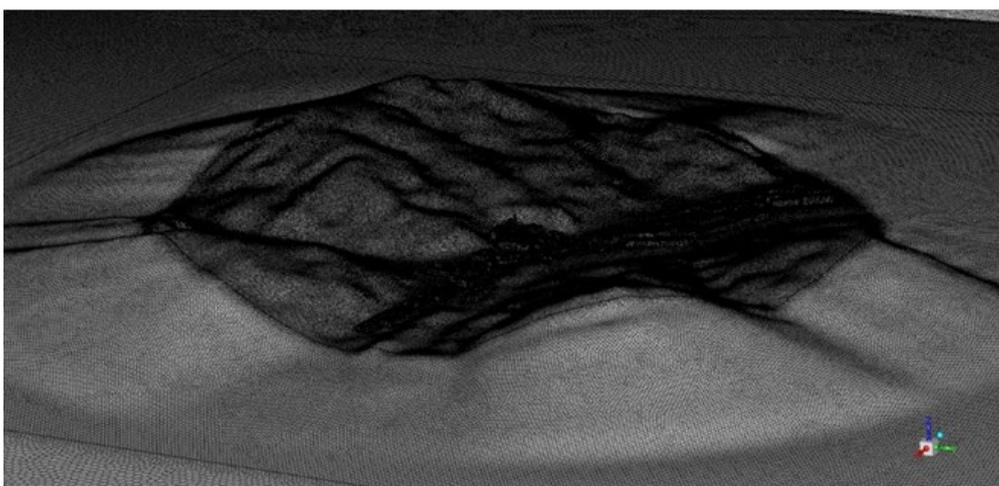
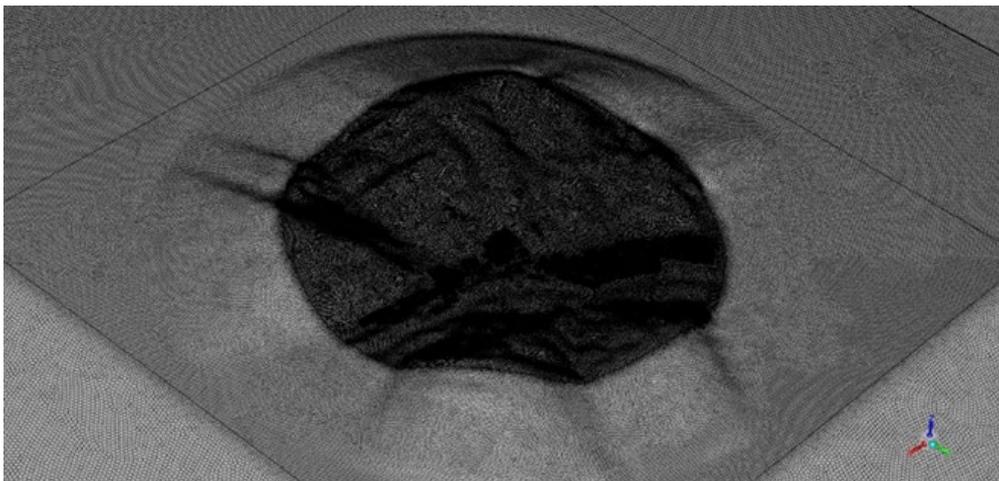


Figura 66. Vista del mallado resultante n°2. Mallado de superficie la zona de transición y de la superficie completa del terreno.

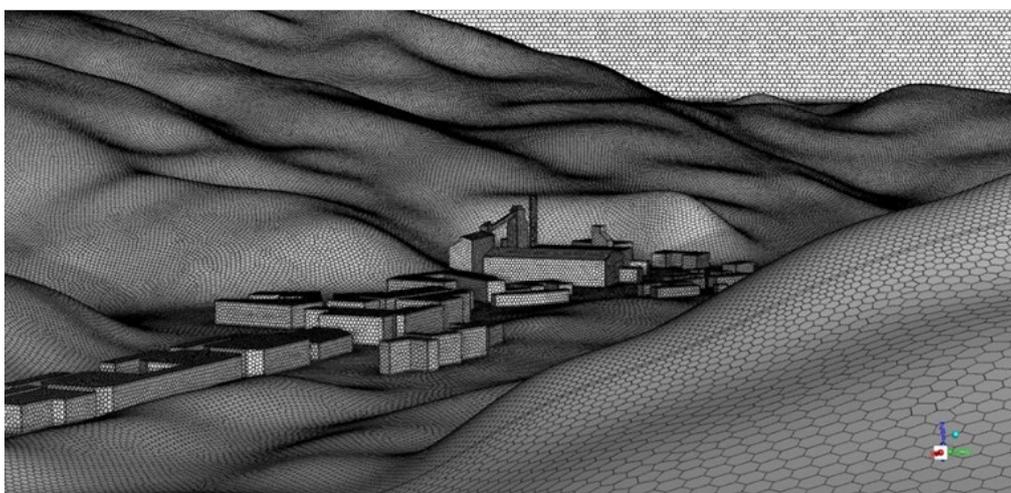
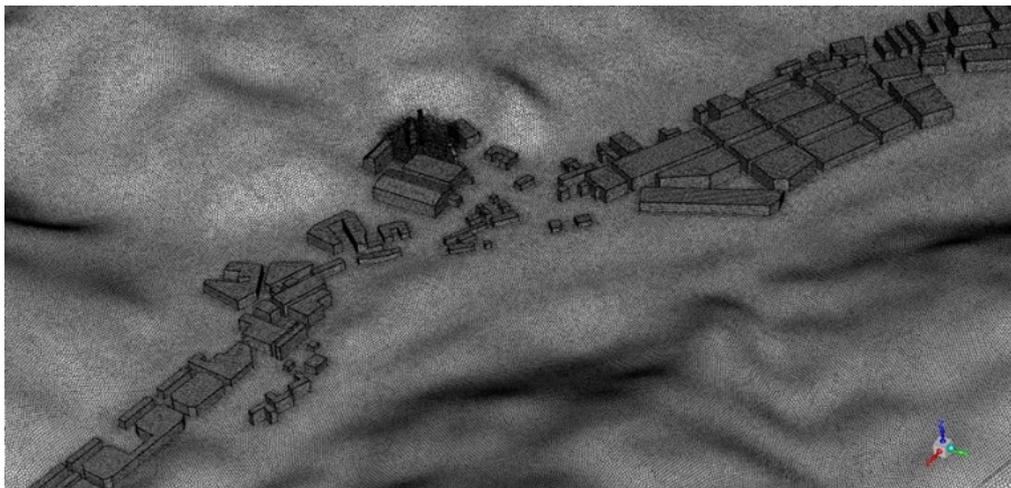


Figura 67. Vista del mallado resultante n°3. Mallado de superficie del terreno en las proximidades a los edificios y a la instalación contaminante.

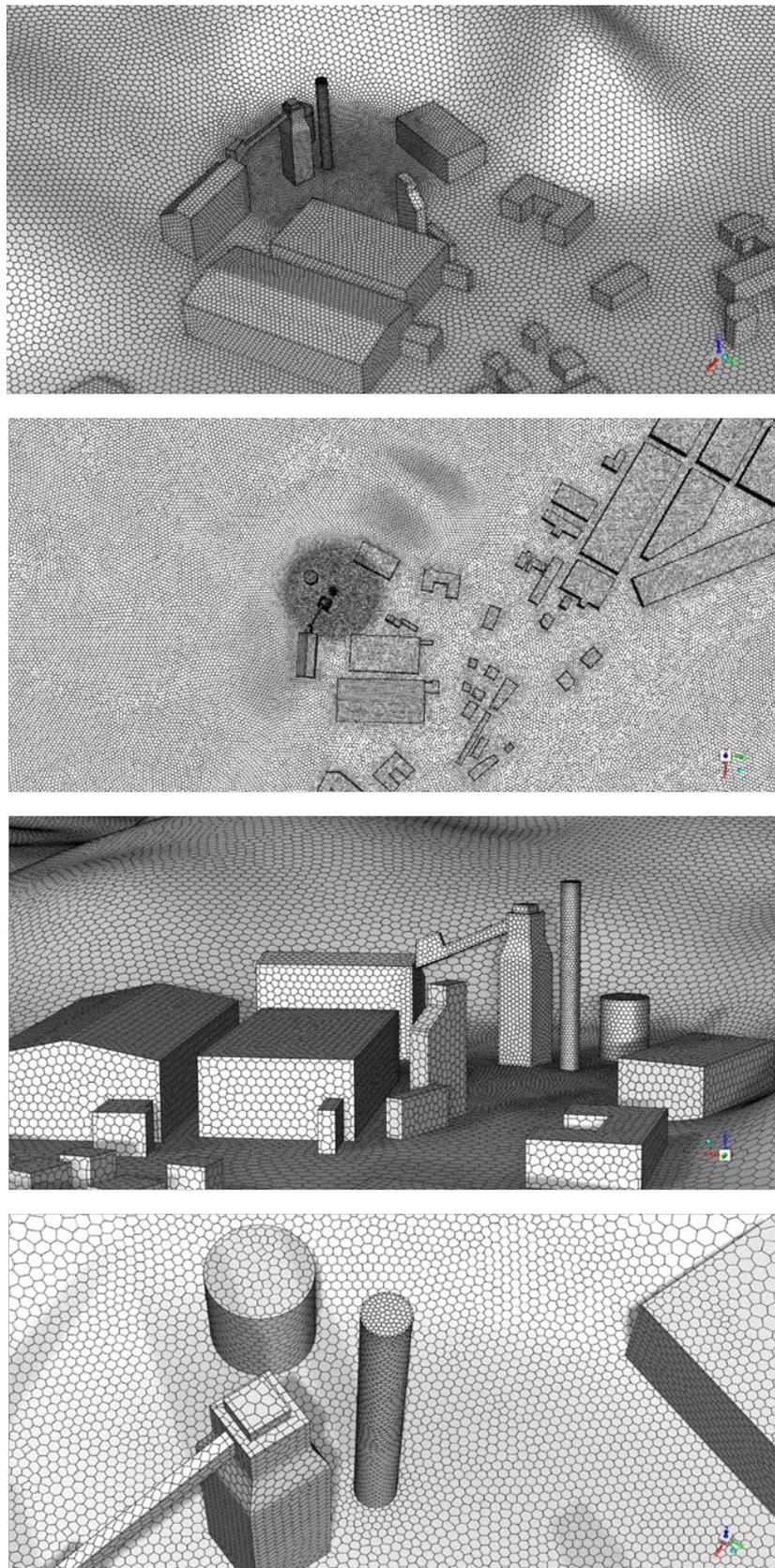


Figura 68. Vista del mallado resultante n°4. Mallado de superficie en las superficies de los edificios, dependencias de la instalación industrial, incluida la sección de salida de la misma y el espacio circundante afectado por el cuerpo de influencia de la chimenea.

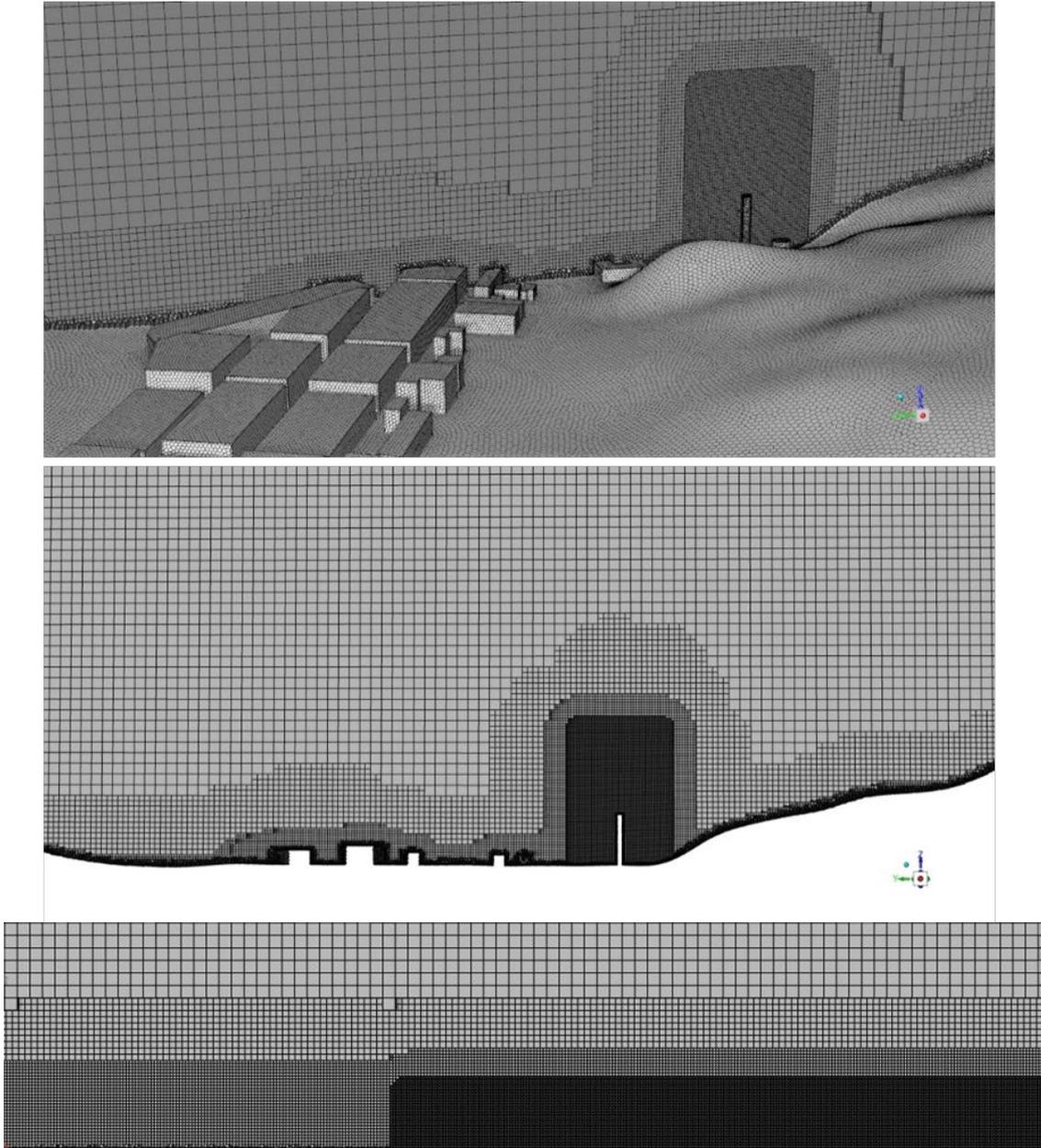


Figura 69. Vista del mallado resultante nº4. Secciones transversales del mallado que muestra la forma de las celdas de volumen del interior del modelo desde distintas vistas.

6.3 Condiciones de contorno

La selección de unas condiciones de contorno apropiadas es un paso crítico para poder reproducir correctamente la dinámica de la capa límite atmosférica.

Antes de detallar la configuración de las condiciones de contorno, es importante destacar que el diseño del dominio geométrico se ha realizado de forma que el papel que juegan los límites del mismo varía en función de la dirección del viento incidente. Concretamente, los límites laterales del dominio adoptan una condición de entrada o simetría del flujo en función de la dirección de viento simulada,

variando así mismo la distancia existente entre los mismos y el terreno de estudio. La variación del diseño del dominio computacional en función de la dirección del viento incidente se explicó de forma detallada en la sección “6.1.4 Dominio exterior plano”, donde se presentó la Figura 52 que muestra gráficamente todas las configuraciones posibles.

6.3.1 Condición de entrada y salida del flujo y gases.

En los laterales del dominio en los que se produce la entrada de viento al modelo se asigna la condición de contorno de entrada de velocidad (*velocity inlet*). Esta condición lleva asociada la definición de unos perfiles verticales de velocidad media y propiedades de turbulencia como son la energía cinética turbulenta y la tasa de disipación turbulenta. Las expresiones más extendidas en los casos de estudio que implican la simulación de atmósferas neutras son los denominados perfiles de Richards y Hoxey [169]. Estos perfiles están pensados para modelar una capa límite atmosférica bidimensional y homogénea y su expresión se basa en una serie de hipótesis.

- La velocidad vertical del flujo es nula.
- La presión es constante tanto en la vertical como en la dirección del flujo.
- La tensión de cizalladura o de corte (τ_0) es constante a lo largo de todo el espesor de la capa límite (en condiciones de atmósfera neutra). Su valor es igual a ρu^* , donde ρ es la densidad del aire y u^* la velocidad de fricción.
- La energía cinética turbulenta (k) y la tasa de disipación (ϵ) satisfacen sus respectivas ecuaciones de conservación. Como resultado de este supuesto existe una constante del modelo de turbulencia cuyo valor debe ser $\sigma_\epsilon=1.11$.

Los perfiles de Richards y Hoxey, ampliamente utilizados en las simulaciones RANS CFD que emplean el modelo $k - \epsilon$ para estudios de viento y física urbana, están definidos por las expresiones (8), (9) y (10).

$$U(z) = \frac{u_{ABL}^*}{\kappa} \ln \left(\frac{z + z_0}{z_0} \right) \quad (8)$$

$$k(z) = \frac{u_{ABL}^{*2}}{\sqrt{C_\mu}} \quad (9)$$

$$\epsilon(z) = \frac{u_{ABL}^{*3}}{\kappa(z + z_0)} \quad (10)$$

Donde u_{ABL}^* es la velocidad de fricción de la capa límite atmosférica, κ la constante de von Karman (0,42) y C_μ una constante a la que se suele asignar el valor 0,09. Cuando se utiliza el valor específico de 1.11 para la constante σ_ϵ del modelo de turbulencia, estas expresiones constituyen las soluciones analíticas de las ecuaciones RANS y de las dos ecuaciones del modelo $k - \epsilon$ estándar. El resto de las

constantes específicas y sus valores a considerar en el modelo son las siguientes: $\sigma_k=1.0$, $C_{\epsilon 1}=1.44$, $C_{\epsilon 2}=1.92$, $C_{\mu}=0.09$.

Sin embargo, es importante notar que los perfiles de Richards y Hoxey no son suficientes por sí mismos para mantener la capa límite atmosférica a lo largo de la longitud del dominio cuando se utilizan junto con el modelo de turbulencia $k-\epsilon$. Esto es debido a que la capa límite atmosférica está impulsada por los vientos geostroficos, por lo que la simple aplicación de un perfil de velocidad en la sección de entrada y confiar en que se mantenga a medida que la energía del flujo se disipa por el cizallamiento o fricción con el suelo no es adecuado [169]. Para evitar un decaimiento progresivo de los perfiles de viento a causa de la disipación de energía es necesario tomar medidas sobre el contorno o límite físico superior del modelo. Para ello, en este contorno superior se ha impuesto así mismo la condición de entrada de flujo (*velocity inlet*), aplicando los valores de velocidad de u y de turbulencia que resultan de evaluar las expresiones de Richards y Hoxey a la cota a la que se sitúa dicho contorno superior (1500 m).

La otra condición para que los perfiles se mantengan es la correcta especificación de las funciones de pared, cuestión que se abordará en la sección “6.3.2 Condición de superficies sólidas o de pared”.

Además de los perfiles de velocidad, la dirección y magnitud del viento se han especificado mediante vectores que aplican a cada sección de entrada. Dado que el modelo tiene generalmente dos entradas y dos salidas, la dirección del viento oblicuo considerada en cada caso se debe descomponer en dos vectores de velocidad, aplicándose cada uno de ellos a su contorno correspondiente. La Tabla 13 muestra los vectores de velocidad que aplican a cada contorno del modelo en cada escenario de viento. En el contorno superior del modelo se aplica simultáneamente los dos componentes del flujo procedentes de cada contorno lateral, resultando en una dirección paralela al plano superior del dominio.

Escenario	Componente X	Componente Y
6 m/s dir= 240 SSO	$-\text{sen } 240 = 0.866$	$-\text{cos } 240 = 0.5$
10 m/s dir= 210 SSO	$-\text{cos } 210 = 0.5$	$-\text{sen } 210 = 0.866$

Tabla 13. Vectores de velocidad que aplican a los contornos de entrada laterales en cada escenario de viento considerado para las simulaciones.

La temperatura del flujo o ambiente también se ha configurado en este paso (291.15 K en todos los casos).

La otra condición de contorno de entrada que aplica en el modelo es para el caso de la sección de salida de los gases de la chimenea. En este caso, el tipo de condición que aplica es la de entrada de flujo másico (*mass flow inlet*). En la configuración de esta condición se especifican los flujos de contaminantes especificados en la subsección “5.2.2 Cálculo de las tasas de emisión de los contaminantes de interés”, así como la componente direccional del flujo, que será perpendicular a la sección de salida de los gases. Por último, en la especificación de turbulencia de esta condición se ha especificado que las variables turbulentas se calculen en base al diámetro hidráulico (2.96 m) y considerando un 10% de intensidad turbulenta. Las distintas temperaturas de salida de los gases consideradas también han sido especificadas en este paso para cada escenario de simulación, de acuerdo a los valores especificados en la Tabla 11 de la sección “5.3 Resumen de escenarios de simulación”.

Por otro lado, la salida del viento del modelo (outlet) se realiza mediante la condición de salida de presión (*pressure outlet*). Esta condición se configura además con la opción de presión estática igual a cero.

6.3.2 Condición de superficies sólidas o de pared

En las superficies sólidas del modelo, tales como las superficies de los edificios, el terreno y el cuerpo de la chimenea, se aplicó una condición de contorno de tipo pared (*wall*) mediante el uso de funciones de rugosidad.

Para incluir los efectos de la rugosidad de las superficies en el flujo turbulento, el código de Fluent implementa la ley de la pared estándar (*standard law-of-the-wall*) definida por Cebeci y Bradshaw [170] y expresada en base a los experimentos de Nikuradse [171]. En estas expresiones, los efectos de la rugosidad se incorporan por medio de parámetros específicos definidos para cada tipo de pared y que se introducen como información de entrada en las funciones de rugosidad que modifican la ley de la pared estándar para la velocidad media.

En este punto, es importante notar que las mencionadas expresiones de Cebeci y Bradshaw fueron obtenidas a partir de experimentos realizados y tuberías en los que la magnitud de la rugosidad de sus paredes era muy pequeña, típicamente en el rango de 0 a 0.1 m. Esta rugosidad de pequeña escala se expresa normalmente en base a un parámetro denominado altura de rugosidad de tamaño de grano de arena (*sand grain roughness height*), expresado por k_s . Sin embargo, cuando se utilizan los perfiles de Richards and Hoxey como condición de contorno de entrada, la rugosidad se expresa en función de otro parámetro denominado longitud de rugosidad aerodinámica, expresado por z_0 . Este parámetro es mucho más adecuado para representar las rugosidades de gran escala típicas de los escenarios de capa límite atmosférica. La clasificación actualizada de valores de rugosidad de Davenport-Wieringa

[172] permite hacerse una idea de los valores que adopta el parámetro z_0 en distintos escenarios, tal y como recoge la Tabla 14.

z_0 (m)	Descripción del entorno
0.0002 (mar)	Mar abierto o lagos (independientemente del tamaño de las olas), llanura mareal, llanura cubierta de nieve, desierto sin accidentes, asfalto, hormigón, con un alcance libre de varios kilómetros.
0.005 (suave)	Superficie terrestre sin rasgos característicos, sin obstáculos apreciables y con vegetación insignificante; por ejemplo, playas, hielo compacto sin grandes crestas, marismas y campos abiertos cubiertos de nieve o en barbecho.
0.03 (abierto)	Terreno llano con poca vegetación (por ejemplo, hierba) y obstáculos aislados, obstáculos con separaciones de al menos 50 alturas de obstáculo; por ejemplo, pastizales sin cortavientos, brezales, páramos y tundras, zona de pistas de aeropuertos.
0.10 (abierto rugoso)	Superficie cultivada con una cubierta regular de cultivos bajos, o terreno moderadamente abierto con obstáculos ocasionales (por ejemplo, setos bajos, hileras de árboles, granjas aisladas) a distancias horizontales relativas de al menos 20 alturas de obstáculos.
0.25 (rugoso)	Paisaje "joven" de reciente desarrollo con cultivos altos o cultivos de altura variable, y obstáculos dispersos (por ejemplo, viñedos) a distancias relativas de unas 15 altura de los obstáculos.
0.5 (muy rugoso)	Paisaje cultivado "antiguo" con muchos obstáculos bastante grandes (grandes explotaciones, masas forestales) separados por espacios abiertos de unas 10 alturas de obstáculos. También vegetación baja y extensa con pequeños espacios intermedios como matorrales, huertos, bosques jóvenes densamente plantados.
1 (cerrado)	Paisaje cubierto totalmente y con bastante regularidad con obstáculos de tamaño similar con espacios abiertos comparables a la altura de los obstáculos; por ejemplo, bosques maduros regulares, ciudades homogéneas o pueblos.
≥ 2.0 (caótico)	Centros de grandes ciudades con mezcla de edificios bajos y altos. También grandes bosques irregulares con muchos claros.

Tabla 14. Clasificación actualizada de rugosidad de Davenport-Wieringa, traducida de [172].

En consecuencia, si se seleccionan las funciones de pared implementadas en Fluent por defecto, se estarían utilizando en el modelo dos parámetros de rugosidad diferentes. Por este motivo es necesario establecer una relación entre ambas rugosidades que permita calcular una altura de rugosidad equivalente para la rugosidad de gran escala de la capa límite. Esta expresión se ha derivado buscando la correspondencia de primer orden entre el perfil de velocidades de entrada y el perfil de velocidad

de la función de pared en el centroide de las celdas adyacentes a la pared o superficies sólidas [141]. El resultado de esta operación es la expresión (11), que define la relación entre el parámetro de rugosidad de grano equivalente (k_s), la constante de rugosidad (C_s) y la longitud aerodinámica de rugosidad (z_0).

$$k_s = 9.793 \frac{z_0}{C_s} \quad (11)$$

En la expresión (11) C_s es un parámetro de rugosidad que puede tomar valores entre 0.5 y 1, siendo el límite inferior de este rango el valor que toma habitualmente por defecto.

La expresión anterior implica que el parámetro k_s toma valores que son aproximadamente veinte veces superiores a z_0 . De esta forma, en presencia de terrenos muy rugosos ($z_0=0.5$ m de acuerdo a la clasificación de Davenport) se obtendría un parámetro k_s equivalente de 9.793 m. Tradicionalmente, el uso de valores de rugosidad de grano tan elevados suponía una limitación importante para el establecimiento de una resolución de malla adecuada en las proximidades al terreno o fondo del dominio computacional. El motivo es que, hasta hace relativamente poco, para Fluent no tenía sentido físico disponer celdas cuyos centroides se situaran por debajo de la altura física de la rugosidad [141]. A consecuencia de esto, debía fijarse la altura de la primera capa de celdas adyacente a las paredes de forma que la altura de sus centroides (y_p) quedaran por encima de la altura de la rugosidad (k_s) como requisito para mantener el efecto de la rugosidad sobre el flujo.

Para el ejemplo mencionado de un terreno muy rugoso, se obtendría un k_s igual 10 m, de forma que la primera capa de celdas sobre el terreno estaría obligada a adoptar una altura de al menos 20 m, lo que perjudicaría gravemente la resolución y calidad del mallado de acuerdo a las recomendaciones bibliográficas [120]. En caso de no satisfacer este requisito, el comportamiento del programa consistiría en redefinir automáticamente la altura de rugosidad introducida para adaptarla a la realidad del mallado generado de acuerdo a la expresión (12). De otra forma, la consecuencia de no cumplir con esta restricción sería la formación de una capa límite interna que provocaría la aparición de gradientes en el sentido del flujo.

$$k_s = \min(k_s, y_p) \quad (12)$$

El lanzamiento de la versión ANSYS Fluent 15 supuso el fin de esta restricción facilitando así la modelización de escenarios de gran rugosidad. A partir de dicha versión, el código de Fluent se modificó para incorporar la posibilidad de introducir un desplazamiento virtual de la pared (*virtual shift of the wall*) de hasta un 50% de la altura de los elementos rugosos. De esta forma, el valor $y+$ de los centros de celdas adyacentes a las paredes es corregido mediante un factor igual a $k_s/2$ que se suma al valor introducido por el usuario, lo que proporciona el desplazamiento correcto causado por la rugosidad de la superficie [160]. No obstante, se debe tener en cuenta que esta nueva aproximación

solo es válida para modelos de turbulencia basados en las ecuaciones k- ϵ , cuando estas se usan en conjunto con funciones de pared estándar y/o escalables.

Volviendo al escenario de un terreno de elevada rugosidad, este nuevo método permitiría aliviar la anterior restricción hasta $y_p \geq k_s/2$, de forma que la primera capa de celdas podría rebajarse hasta una altura de 10 m. Sin embargo, como este valor sigue siendo elevado, existe la posibilidad de ajustar la constante de rugosidad (C_s), que puede ser modificada para los distintos tipos de rugosidad considerados en cada superficie. Tal y como se mencionó, el valor por defecto de 0.5 es adecuado para casos de rugosidad uniforme. En cambio, para escenarios donde la rugosidad no es uniforme, el manual de usuario de Fluent sugiere la posibilidad de aumentar este valor basándose en algunas evidencias experimentales previas, aunque no exista aún un criterio técnico disponible para guiar esta elección. De acuerdo a esto, se ha decidido fijar esta constante en un valor igual a 1, valor máximo aceptado por este último de acuerdo al manual.

Finalmente, combinando el efecto de aumentar la constante de rugosidad con el nuevo método de desplazamiento virtual de la pared, se ha logrado que el modelo acepte una altura de celda adyacente al terreno de 2.5 m en el fondo del dominio exterior, siendo esta la región que más problemas generaba a este respecto. Esta resolución es mucho más apropiada para la discretización de los perfiles continuos de entrada de viento al modelo, tal y como se discute en [141], de forma que se evite una discretización muy burda de los mismos especialmente en la parte más baja del dominio.

En la superficie del terreno del área de estudio la restricción es menor por tener un parámetro de rugosidad inferior al representarse los obstáculos de forma explícita, por lo que no hay problema con el tamaño de celda en dicha región.

Por otro lado, siguiendo las recomendaciones para la realización de estudios de física urbana [172], se han extraído las características de rugosidad de los terrenos circundantes al área de estudio contenidos en un radio de 5 km desde la posición del foco emisor. De esta forma, se ha obtenido el parámetro de longitud de rugosidad aerodinámica de acuerdo a la clasificación Davenport – Wieringa [172] para cada ángulo de 30°, coincidiendo con las divisiones de la rosa de los vientos. La Figura 70 muestra el resultado de este ejercicio.

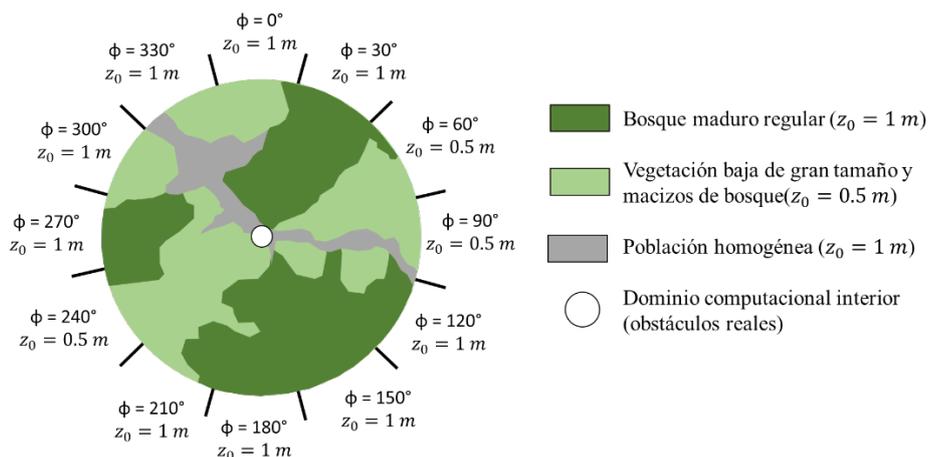


Figura 70. Valores de longitud de rugosidad aerodinámica definidos en ángulos de 30° de acuerdo a la clasificación Davenport-Wieringa.

Siguiendo las directrices descritas en esta sección, se ha definido el parámetro de rugosidad equivalente para las distintas superficies del dominio computacional, cuyos valores se han recogido en la Tabla 15.

Región	z_0	C_s	k_s
Dominio exterior plano	0.5	1	4.897
	1	1	9.793
Superficie del terreno	0.75	1	7.34
Superficie de edificios	-	0.5	0.1
Superficie chimenea	-	0.5	0.1

Tabla 15. Parámetros de rugosidad para las simulaciones.

6.3.3 Resumen de las condiciones de contorno

La Figura 71 recoge una recopilación de las condiciones de contorno definidas en el modelo y su posición en los escenarios de simulación marcados por las direcciones del viento consideradas.

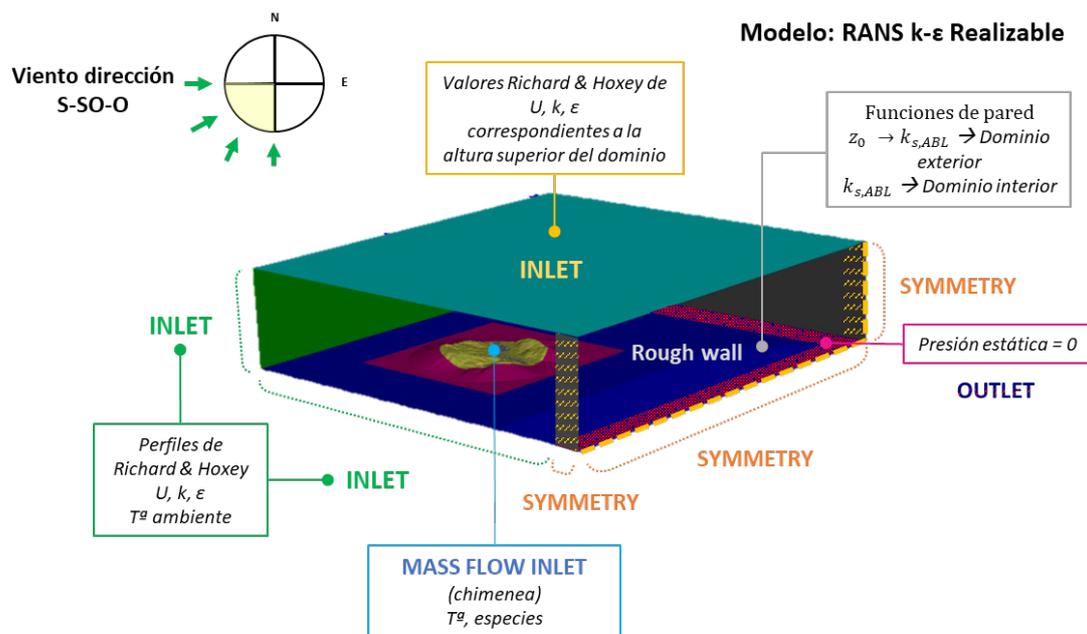


Figura 71. Condiciones de contorno aplicadas en el modelo para el grupo de escenarios de simulación con dirección de viento SO.

6.4 Modelo de turbulencia

Los modelos de turbulencia se pueden clasificar en base a la forma de las ecuaciones de gobierno que se resuelven para describir el flujo turbulento. De esta forma, se puede distinguir cuatro clases principales de modelos en este tipo de aplicaciones: simulación numérica directa o *Direct Numerical Simulation* (DNS), simulación de grandes remolinos o *Large Eddy Simulations* (LES), ecuaciones de Navier-Stokes promediadas por Reynolds o *Reynolds-Averaged Navier-Stokes* (RANS) e híbridos entre LES y RANS transitorios (LES-URANS) [173].

Los modelos DNS resuelven las ecuaciones exactas de Navier-Stokes hasta las escalas de turbulencia y tiempo más pequeñas existentes en cada caso. Dado que en la mayoría de las aplicaciones ambientales y de física urbana los números de Reynolds son muy elevados ($10^4 - 10^9$), el método DNS es excesivamente costoso en términos computacionales. En esta situación, es necesario buscar formas aproximadas de las ecuaciones de Navier-Stokes, en las cuales se aplica algún tipo de modelización física para reducir la complejidad del problema. Es por ello que los dos tipos de modelos más extendidos en la literatura de la física urbana y estudios ambientales son los modelos RANS y LES.

Los modelos RANS resuelven las ecuaciones de Navier Stokes promediadas por Reynolds mediante la modelización de todo el espectro de vórtices turbulentos. Cuando se asume que el flujo es

estadísticamente estacionario, esta operación de promediado de las ecuaciones es equivalente a hablar de un promedio temporal (RANS estacionario) [173].

Los modelos RANS han constituido tradicionalmente la elección más extendida en la literatura para simular la mayoría de los problemas en el ámbito industrial y atmosférico [174], ya que proporcionan resultados generalmente satisfactorios a un coste computacional relativamente bajo. No obstante, la mayor simplicidad de los modelos RANS conlleva así mismo una serie de limitaciones derivadas de su carácter estacionario (solo proporciona soluciones temporalmente invariables), calculadas principalmente en base a promedios temporales de las variables de flujo estimadas. Así mismo, el concepto de viscosidad turbulenta isotrópica propio de esta formulación es otro de sus puntos débiles [175]. Como resultado de estas limitaciones, los modelos RANS suelen llevar a una sobreestimación de la energía cinética turbulenta en algunos puntos del flujo [68].

Por su parte, los modelos LES se basan en el concepto de separar los fenómenos turbulentos en estructuras de pequeña y gran escala [21], [173]. De esta forma, las estructuras turbulentas transitorias de mayor tamaño son resueltas de forma explícita mediante las ecuaciones filtradas de Navier Stokes. En cambio, los vórtices o remolinos de escalas más pequeñas se modelizan, mediante la aplicación de los denominados modelos de subescala (SGS) [22].

En los distintos estudios que se pueden encontrar en la literatura, los modelos LES superan los resultados de RANS en la predicción de concentraciones contaminantes. Este mejor desempeño de los modelos LES se puede atribuir principalmente al hecho de que esta formulación es capaz de capturar la física de regiones separadas y producir soluciones no estacionarias (temporalmente variables o dependientes del tiempo), así como proporcionar ciertas características del flujo tales como las tensiones de Reynolds, las cuales no pueden ser obtenidas mediante RANS. Diversos estudios muestran que LES es capaz de reproducir de forma adecuada la difusión de las concentraciones anisotrópicas que fluctúan de forma natural [84]. De esta forma, tanto las difusividades de las concentraciones horizontales como las verticales se reproducen de una forma más precisa gracias al carácter transitorio del modelo. En consecuencia, las concentraciones estimadas por LES son generalmente inferiores que aquellas estimadas con modelos RANS debido al comportamiento mucho más difusivo del primero. No obstante, los resultados de los diversos estudios también apuntan a que la discrepancia entre los dos modelos para el caso de los campos de velocidad medios es relativamente pequeña [176].

A pesar de la superioridad demostrada de LES, su principal inconveniente es el elevado coste computacional que acarrea, el cual se estima en uno o dos órdenes de magnitud superior a RANS [144]. Este impedimento hace que esta aproximación no resulte práctica para dominios computacionales complejos o de grandes dimensiones, donde la aplicación de RANS ya conlleva de por sí unos tiempos de simulación elevados. Además, otro aspecto importante a tener en cuenta

cuando se trabaja con modelos LES es el refinamiento de la malla, requiriendo tamaños de celda mucho más reducidos que en el caso de RANS. Este requisito resultaría impráctico en un dominio computacional como el seleccionado en el presente trabajo, teniendo en cuenta además la necesidad de implementar funciones de pared del modelo RANS al no ser viable generar capas de celdas adyacentes a las superficies suficientemente finas como para resolver la capa límite cercana.

Dadas las dificultades que supondría la aplicación de un modelo LES y el hecho de que RANS sigue siendo en la actualidad el modelo más extendido para la resolución del flujo y dispersión en el ámbito industrial y ambiental, se ha elegido este último para resolver las ecuaciones del flujo.

Como se mencionó, el principio básico de RANS consiste en la aplicación del operador de Reynolds promediado (*Reynolds-averaging operator*) a las ecuaciones de Navier-Stokes, lo que resulta en la aparición de unas nuevas incógnitas: las tensiones de Reynolds [22]. Estas incógnitas se pueden relacionar con las variables de flujo de distintas maneras, lo que va a definir el tipo de modelo de turbulencia específico.

Lo anterior implica que, junto con RANS, es necesario seleccionar un modelo de turbulencia apropiado, pudiendo hacer una distinción entre dos tipos principales: modelos de cierre de primer y segundo orden. Los modelos de primer orden se basan en la hipótesis de la viscosidad turbulenta de Boussinesq (*Boussinesq eddy-viscosity hypothesis*), la cual relaciona los valores de las tensiones de Reynolds con los gradientes de velocidad en el flujo medio. Por otro lado, los modelos de cierre de segundo orden se basan en la resolución de ecuaciones de transporte adicionales para determinar las tensiones de Reynolds [85]. Los ejemplos más típicos dentro de este grupo son el modelo de una ecuación de Spalart-Almaras [177], los modelos $k - \epsilon$ [178] y los modelos $k - \omega$ [179]. En general, los modelos $k - \epsilon$ son los que se utilizan con mayor frecuencia [174] junto con las aproximaciones RANS, proporcionando expresiones para calcular la viscosidad turbulenta (ν_t) a partir de los parámetros de energía cinética turbulenta (k) y tasa de disipación turbulenta (ϵ) [15]. A su vez, es posible encontrar diferentes alternativas dentro de este subgrupo de modelos como son el $k - \epsilon$ estándar o SKE, el $k - \epsilon$ RNG y el $k - \epsilon$ realizable [151]. La literatura muestra que el modelo $k - \epsilon$ realizable es uno de los más utilizados para el estudio de características de flujo complejas [20], [23], [180], [181], en los que ha demostrado proporcionar mejores resultados en la predicción de zonas de recirculación alrededor de edificios en comparación a otros modelos como el $k - \epsilon$ estándar. Por este motivo, se ha escogido $k - \epsilon$ realizable para la modelización de la turbulencia en el presente trabajo.

6.5 Ecuaciones de gobierno del flujo y leyes aplicadas.

Las tres ecuaciones fundamentales que se resuelven en el problema fluidodinámico son las siguientes.

- Ecuación de continuidad.

- Ecuación del momento o cantidad de movimiento.
- Ecuación de la conservación de la energía.

Además, por la selección de modelos realizada, se deben resolver otras dos ecuaciones adicionales.

- Ecuación de transporte de energía cinética turbulenta (k).
- Ecuación de transporte de la disipación turbulenta (ϵ).

Por otro lado, en los cálculos se ha activado la aceleración de la gravedad, dado que algunos de los contaminantes modelados son más densos que el aire. En cuanto a la mezcla de gases contaminantes definida, la relación entre la temperatura y la densidad se ha configurado bajo el principio de gas ideal incompresible. Aunque la marcada diferenciada de temperaturas entre los gases de salida y la temperatura ambiente hacen pensar en la necesidad de una aproximación de gas ideal compresible, la configuración de la mezcla bajo esta premisa aumentaría en gran medida la carga computacional y podría dar lugar a problemas de inestabilidad numérica [182]. Sin embargo, dado que el número de Mach en problemas de flujo urbano se puede aproximar a cero, la energía de las ondas acústicas es notablemente inferior a la de la velocidad de convección del fluido y la energía interna termodinámica. Por este motivo, el principio de gas ideal incompresible se puede considerar válido para el estudio, siguiendo el razonamiento de [182].

6.6 Configuración del solver

Las simulaciones se realizaron con el código ANSYS Fluent. Se utilizó la metodología SIMPLE para el acoplamiento de presión y velocidad. Los esquemas de discretización empleados fueron de segundo orden, así como la interpolación de la presión. Se configuraron unas 2500 iteraciones para cada uno de los casos.

7 Validación

7 Validación

La validación es un paso fundamental en la aplicación de todo modelo numérico, tal y como se explicó en la sección “4.2 Aplicación de modelos CFD al estudio de dispersión de contaminantes”. En dicho apartado también se mencionó que, en los casos en los que no se disponga de mediciones para el escenario de estudio específico que se pretende estudiar, se aconseja aplicar el método de la validación por subconfiguración [85]. Este método consiste en subdividir la configuración real del modelo en una serie de subconfiguraciones genéricas, cada una de las cuales contiene una o varias de las características de flujo más destacadas de la configuración real. El objetivo es tener para cada subconfiguración un conjunto de datos experimentales que sirva para la validación de cada una de ellas, de forma que, si se cumple este requisito en todas ellas, se pueda considerar extrapolable al modelo completo.

Para validar el presente caso de estudio, se ha escogido un conjunto de datos de concentración de contaminantes pertenecientes al proyecto experimental “Evaluation of Modelling Uncertainty” (EMU) [98]. Estos experimentos se realizaron en el túnel de viento EnFlo perteneciente a la Universidad de Surrey. Se trata de un túnel de tipo abierto con una longitud de 20 m y una sección de 3.5 m por 1.5 m, por lo que presenta unas grandes dimensiones. Una de sus particularidades únicas es la capacidad de generar distintas condiciones de capa límite, tanto neutrales como estratificadas (atmósferas estables e inestables). El rango de velocidades operativas se sitúa entre los 0.5 y los 4.5 m/s.

En los ensayos llevados a cabo en el proyecto EMU se produjeron liberaciones continuas de gases en atmósferas tanto de tipo neutro como estable. Así mismo, se experimentó con gases que presentaban distintas densidades relativas respecto al aire a temperatura ambiente, es decir, mezclas de gases ligeras, mezclas densas y mezclas de densidad similar a la del aire.

De entre los distintos conjuntos de datos disponibles, se escogieron los correspondientes al caso B3, que consiste en una emisión continua de un gas más denso que el aire en una atmósfera de tipo neutro. La selección de este caso se justifica por su similitud con las condiciones del caso de estudio real que se pretende validar.

7.1 Descripción y propiedades del caso seleccionado.

El experimento B3 consiste en la liberación de un gas desde un orificio circular situado en un bloque simple con forma de L que pretende representar la geometría de un bloque de edificios. También destaca la presencia de otro edificio de planta rectangular situado a sotavento del principal.

El escenario simulado en túnel de viento está planteado a una escala 1/200. La Tabla 16 muestra la correspondencia de las propiedades del caso entre la escala del modelo y la escala real.

Propiedad	Escala del modelo	Escala real	Unidades
Altura de edificio emisor (H)	0.05	10	m
Velocidad del viento a 10 m de altura (U_{10})	0.72	5	ms^{-1}
Longitud de rugosidad aerodinámica (z_0)	0.6	120	mm
Profundidad de la capa límite	1	200	m
Diámetro de la fuente (d_s)	0.005	1.0	m
Relación de densidad de emisión (α)	2.82	1.30	
Velocidad de salida de gases (v_{eg})	2.44	25.0	ms^{-1}

Tabla 16. Correspondencia de las propiedades del caso de validación entre la escala del modelo y la escala real.

La distorsión de la densidad del gas emitido es un aspecto esencial para mantener una velocidad de funcionamiento razonable en el túnel de viento. Para ello, se utilizó una mezcla de un 3,51% de etileno (por unidad de volumen) en una base de gas criptón. La simulación se basó entonces en la similitud de los flujos no dimensionales de momento de emisión y flujos flotabilidad con una distorsión de la relación de densidades de 2.2 ($2.82/1.30$). A escala 1/200, la relación entre las velocidades del flujo a 10 m y la altura de referencia (U_{10}/U_{ref}) es de 0.55, por lo que el túnel se puso en funcionamiento a una velocidad de referencia de 1.3 m/s.

7.2 Dominio geométrico y mallado.

En la Figura 72 se puede observar la geometría y disposición de estos elementos traducidos a escala real, donde H representa la altura del edificio que equivale a 10 m y D_o el diámetro del orificio emisor que es de 1 m.

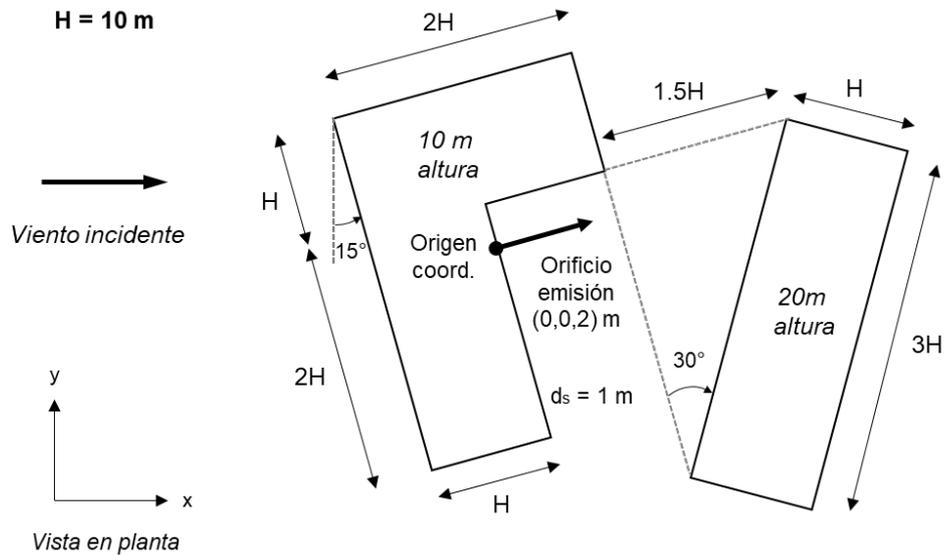


Figura 72. Vista en planta de la geometría del caso B3, donde H representa la altura del edificio principal o de emisión.

Tras construir el dominio geométrico, este se ha discretizado con un mallado adaptado al volumen (*body-fitted*) compuesto por un núcleo de celdas poli-hexaédricas (*poly-hexcore*) basado en el método de descomposición *octree*. Este esquema de mallado se compone en la práctica de una combinación de celdas poliédricas, hexaédricas y prismáticas.

Para seleccionar un tamaño de malla adecuado se ha realizado un estudio de independencia del mallado basado en tres versiones diferentes: una malla gruesa (2 millones de celdas), una malla media (3 millones de celdas) y una malla fina (5 millones). El objetivo de esta prueba es verificar que los resultados de la simulación no cambian con un mayor refinamiento de la malla de cálculo. Para ello se fijó un valor del 5 % como máxima diferencia relativa permitida para los resultados de las simulaciones entre una resolución de malla y la siguiente.

Tras realizar las simulaciones pertinentes y calcular este indicador para las concentraciones del gas trazador, se observó que las diferencias relativas entre las mallas gruesa y media fueron de aproximadamente el 6%. Por otro lado, esta diferencia fue ligeramente inferior al 5% entre la malla media y la fina. En base a estos resultados se seleccionó finalmente la malla fina (5 millones de celdas) para las simulaciones.

La malla se ha refinado alrededor de los edificios, con un tamaño de celdas de 0.4 m en las paredes y la parte superior de los bloques. Al orificio de emisión se le asignó el tamaño de celda más pequeño del dominio (0.2 m), mientras que el tamaño máximo (2 m) se produce en los límites del modelo, lejos de la influencia de los edificios. Por otra parte, se ha aplicado una estrategia de inflado para producir tres capas de prismas adyacentes a las paredes sólidas del dominio. Es importante mencionar que la finalidad de estas capas de prismas no es capturar la capa límite desarrollada en las superficies

sólidas, como suele hacerse cuando se aplica la modelización con números de Reynolds bajos. En su lugar, esta estrategia pretende limitar la altura de la primera fila de celdas adyacentes a la pared en el esquema de malla poliédrica, así como controlar la relación de crecimiento de las celdas circundantes en la dirección vertical hasta un máximo de 1.15. Además, las caras de estas celdas prismáticas resultan en todo momento paralelas o perpendiculares a las paredes del modelo, tal y como se aconseja para la aplicación de funciones de pared (*wall functions*). La Figura 73 muestra tres vistas de la malla obtenida.

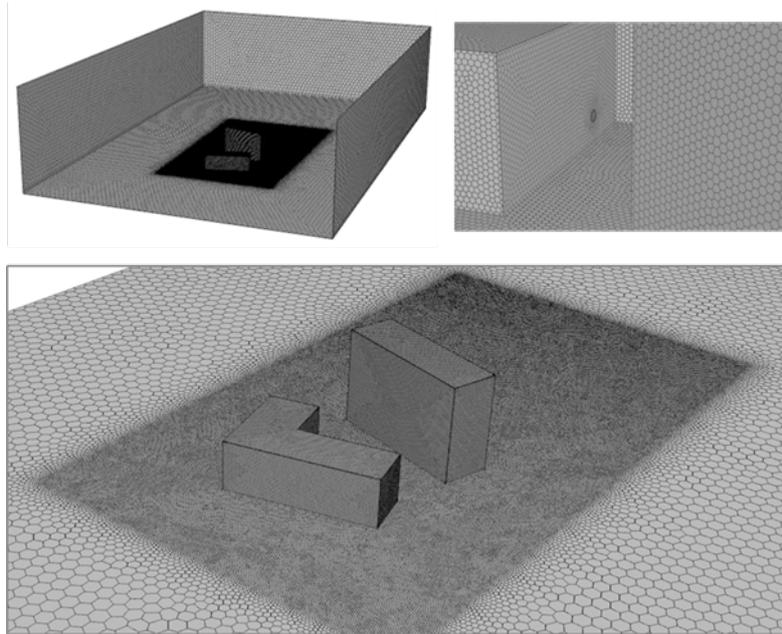


Figura 73. Dominio computacional y mallado obtenido para el caso de validación.

7.3 Condiciones de contorno.

En cuanto a las condiciones de contorno, en la sección de entrada del viento del dominio se ha impuesto la condición de *velocity inlet*. Los perfiles de velocidad del viento promedio, energía cinética turbulenta y disipación turbulenta aplicados obedecen a las expresiones (13), (14) y (15), tal y como se especifica en la documentación de los ensayos en túnel de viento del proyecto EMU.

$$U(z) = \frac{u^*}{\kappa} \ln\left(\frac{z+z_0}{z}\right) \quad (13)$$

$$k(z) = \frac{u^{*2}}{C_\mu^{0.5}} \quad (14)$$

$$\varepsilon(z) = \frac{u^{*3}}{\kappa(z+z_0)} \quad (15)$$

Así mismo, en la parte superior del dominio se ha aplicado la condición *velocity inlet*, junto con los valores de velocidad, energía cinética turbulenta y disipación turbulenta que resultan de aplicar las expresiones anteriores a la altura del plano superior del dominio (70 m).

Para la salida del flujo, siguiendo el patrón definido en el caso de estudio, se ha fijado una franja en el fondo del dominio y extremo opuesto al contorno de entrada del modelo que actuará como sección de salida. En ella se ha elegido la condición *pressure outlet* con una presión estática igual a cero mientras que los laterales del dominio han sido caracterizados con la condición de simetría (*symmetry*).

En las paredes o superficies sólidas del modelo se han aplicado las funciones de pared estándar (*wall functions*) con modificación de rugosidad, de forma similar a como se hizo en la sección “6.3.2 Condición de superficies sólidas o de pared”. El parámetro de longitud de rugosidad aerodinámica es igual a 0.12 m, tal y como se indica en la documentación de los ensayos. Tal y como sucedía cuando se explicó la configuración del modelo para el caso de estudio real, se calculó el parámetro de rugosidad k_s siguiendo la ya definida expresión (11) y manteniendo el valor por defecto de 0.5 para la constante C_s .

5.1. Modelo de turbulencia y configuración del modelo.

Como modelo de turbulencia se ha escogido RANS con el esquema k- ϵ realizable para el cierre del sistema de ecuaciones, de forma similar al caso de estudio real. De igual forma, todas las ecuaciones de transporte han sido discretizadas con un esquema de segundo orden y se ha utilizado el algoritmo SIMPLE para el acoplamiento de la presión y la velocidad. Los gradientes se han calculado en base al teorema Green-Gauss y las condiciones iniciales del modelo se han obtenido de la condición *velocity inlet*, mediante los perfiles de viento definidos.

Como criterio de convergencia se ha fijado un valor de 10^{-4} para todos los residuos a excepción de los correspondientes a la ecuación de energía, para la que se ha fijado un valor de 10^{-6} . Además, es necesario analizar los resultados para detectar posibles oscilaciones no deseadas que pudieran indicar otros problemas en las simulaciones.

5.2. Resultados.

Ejecutadas las simulaciones, la Figura 74 muestra una comparación entre las concentraciones del gas trazador medidas en el túnel de viento y las obtenidas como resultado en las simulaciones. Las distancias y concentraciones del experimento se han normalizado de acuerdo con la expresión (16) para facilitar las comparaciones entre el modelo del túnel de viento y los resultados CFD.

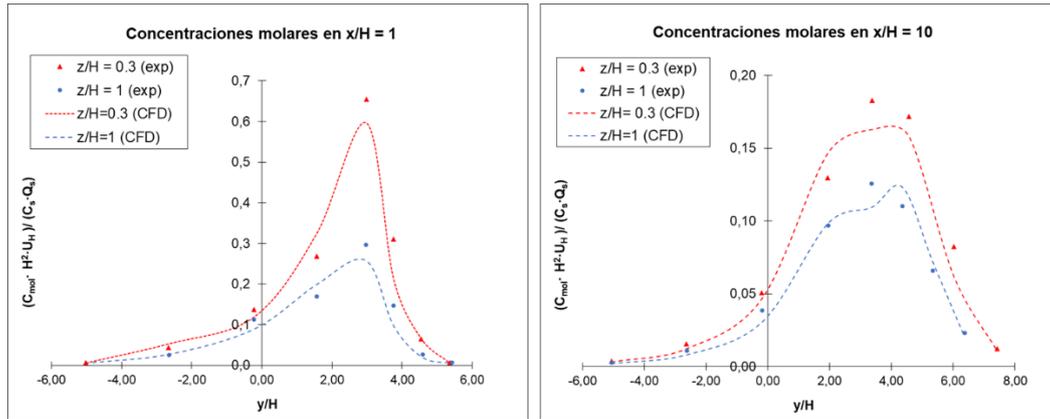


Figura 74. Datos de concentración normalizados obtenidos en túnel de viento y en las simulaciones CFD en diferentes planos transversales y alturas del dominio computacional.

$$c^* = \frac{C_{mol} \cdot Q_s}{U_H \cdot H^2} \tag{16}$$

donde C_{mol} es la concentración molar de la fuente, Q_s el caudal de emisión, U_H la velocidad del viento a la altura del edificio emisor y H la altura de este último.

Dichas concentraciones se muestran para las posiciones de dos planos transversales a la dirección del viento situados en $x/H=1$ y $x/H=10$ y a dos niveles de altura $z/H=1$ y $z/H=10$, siendo H la altura del edificio emisor. Para mayor claridad, la Figura 75 muestra la ubicación de las secciones en las que se han evaluado los resultados.

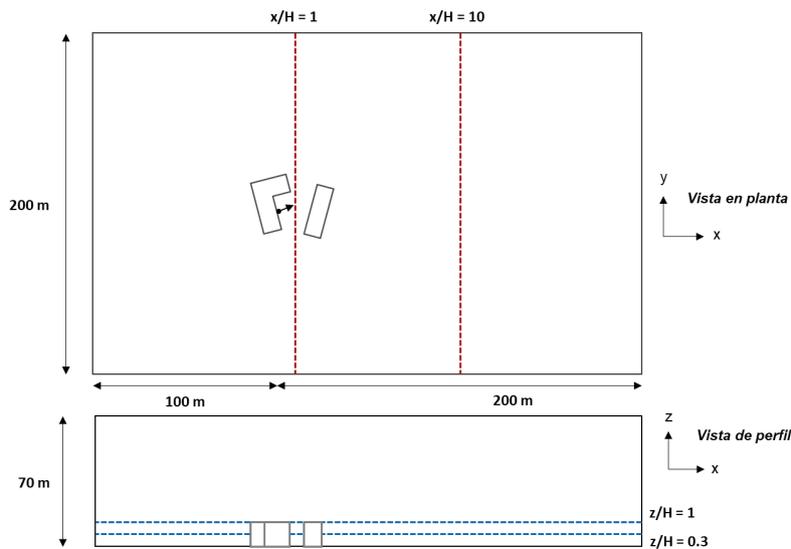


Figura 75. Posiciones de los planos para los cuales se muestran y comparan los resultados de concentraciones de las simulaciones.

A la vista de los resultados de la Figura 74 se puede concluir que el modelo $k-\epsilon$ realizable capta las tendencias generales de dispersión del contaminante, así como las concentraciones máximas, a pesar

de observarse algunas sobreestimaciones de concentración en determinados puntos del dominio. De esta forma, se puede concluir que el modelo ha sido validado para su uso en la simulación de la dispersión en entornos reales.

8 Resultados y discusión

8 Resultados y discusión

Una vez realizadas las simulaciones para cada uno de los escenarios de cálculo se han analizado algunas de las variables más importantes del flujo con el objetivo de verificar si el comportamiento es el esperado. En primer lugar, se ha consultado el gráfico de contornos de presión del dominio en un plano paralelo a la velocidad incidente del viento, reflejado en la Figura 76.

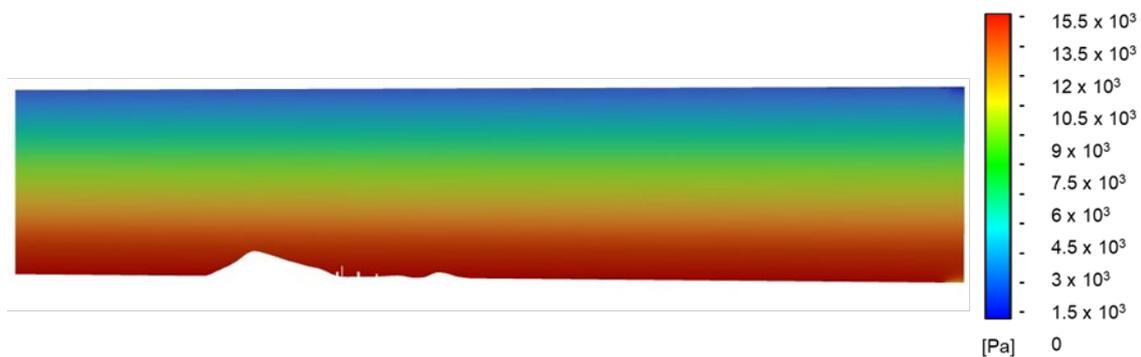


Figura 76. Contorno de presión representado en un plano paralelo a la dirección del viento incidente que pasa por el centro de la chimenea.

Se observa que los resultados de presión se ajustan al comportamiento esperado, disminuyendo la presión con la altitud de forma que la variación total de la misma es coherente con la altura de la columna de aire existente.

La siguiente variable considerada es la velocidad del flujo. Para ello, la Figura 77 muestran contornos de velocidad para dos escenarios distintos, E1 y E2, en los que se puede apreciar el perfil de velocidades de la capa límite atmosférica de acuerdo a la condición impuesta en los laterales de entrada del modelo.

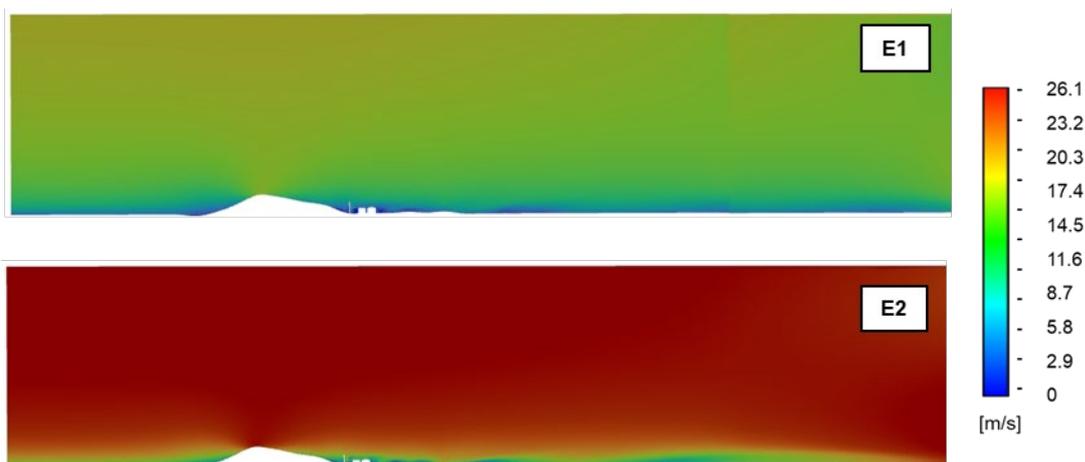


Figura 77. Contornos de velocidad en un plano paralelo a la dirección del viento incidente que pasa por el punto central de la chimenea.

Ampliando la vista sobre el área de interés se puede observar con mayor detalle los valores de velocidad que se producen en el entorno de la chimenea, tal y como muestra la Figura 78. En dicha figura se pueden observar zonas de velocidades muy reducidas en la base de la chimenea y alrededor de la misma, lo que puede indicar la presencia de fenómenos de recirculación.

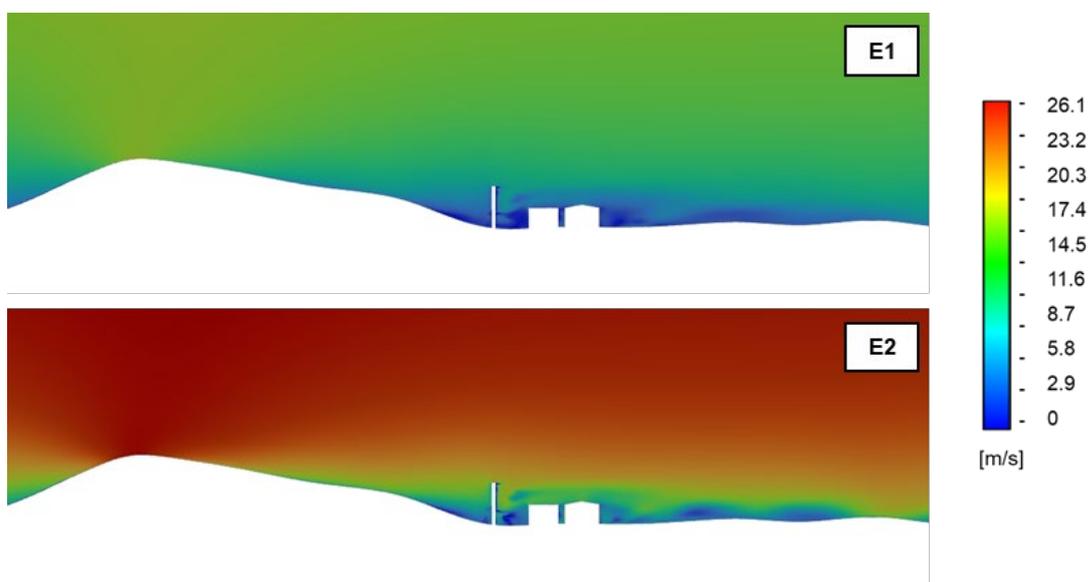


Figura 78. Contornos de velocidad en un plano paralelo a la dirección del viento incidente que pasa por el punto central de la chimenea ampliados en torno al área de interés.

Para confirmar esta hipótesis, se ha representado en la Figura 79 y Figura 80 la trayectoria de las líneas del flujo en el entorno de la chimenea, lo que permite observar con mayor claridad su trayectoria además de su velocidad.

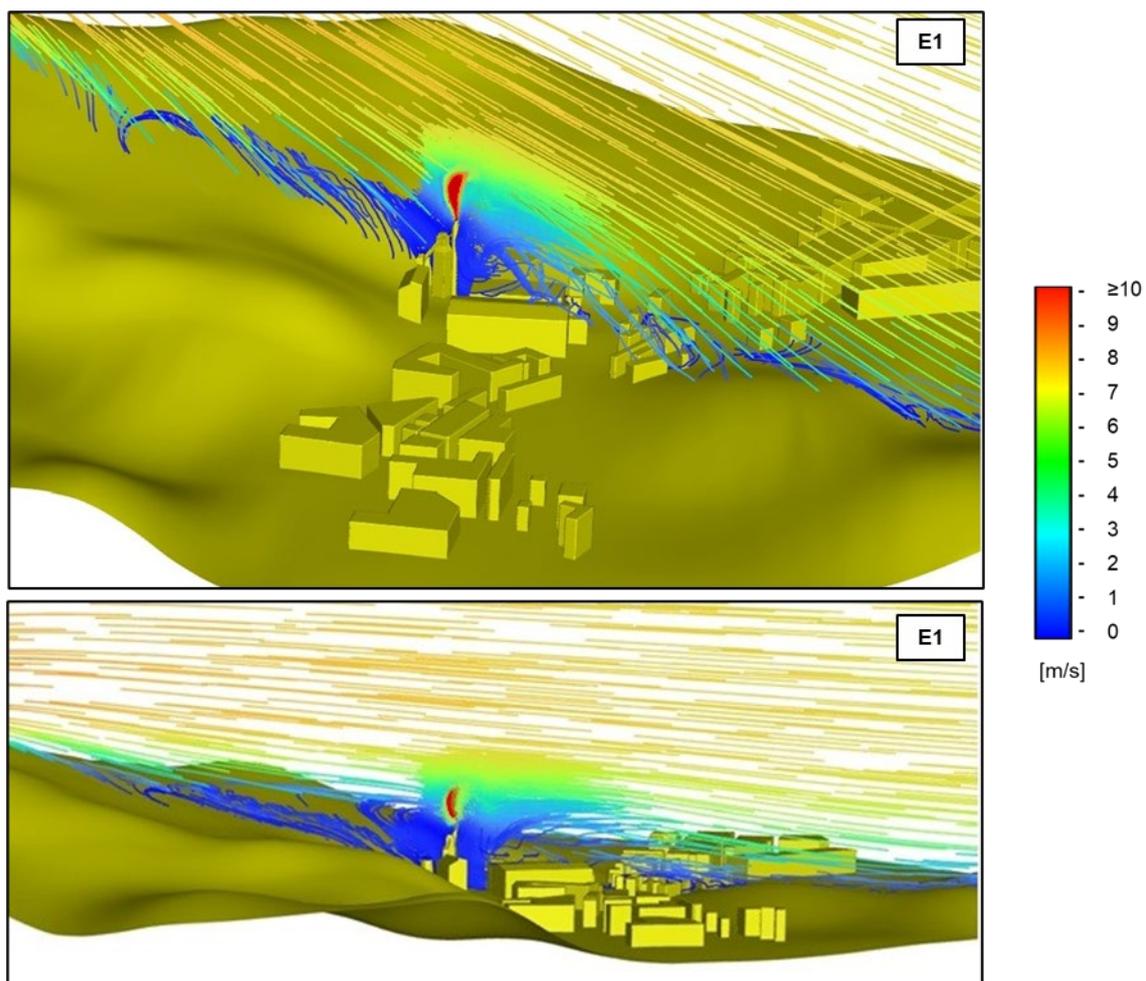


Figura 79. Líneas de flujo representadas en escala de colores según velocidad en plano paralelo a la dirección del viento incidente para el escenario E1.

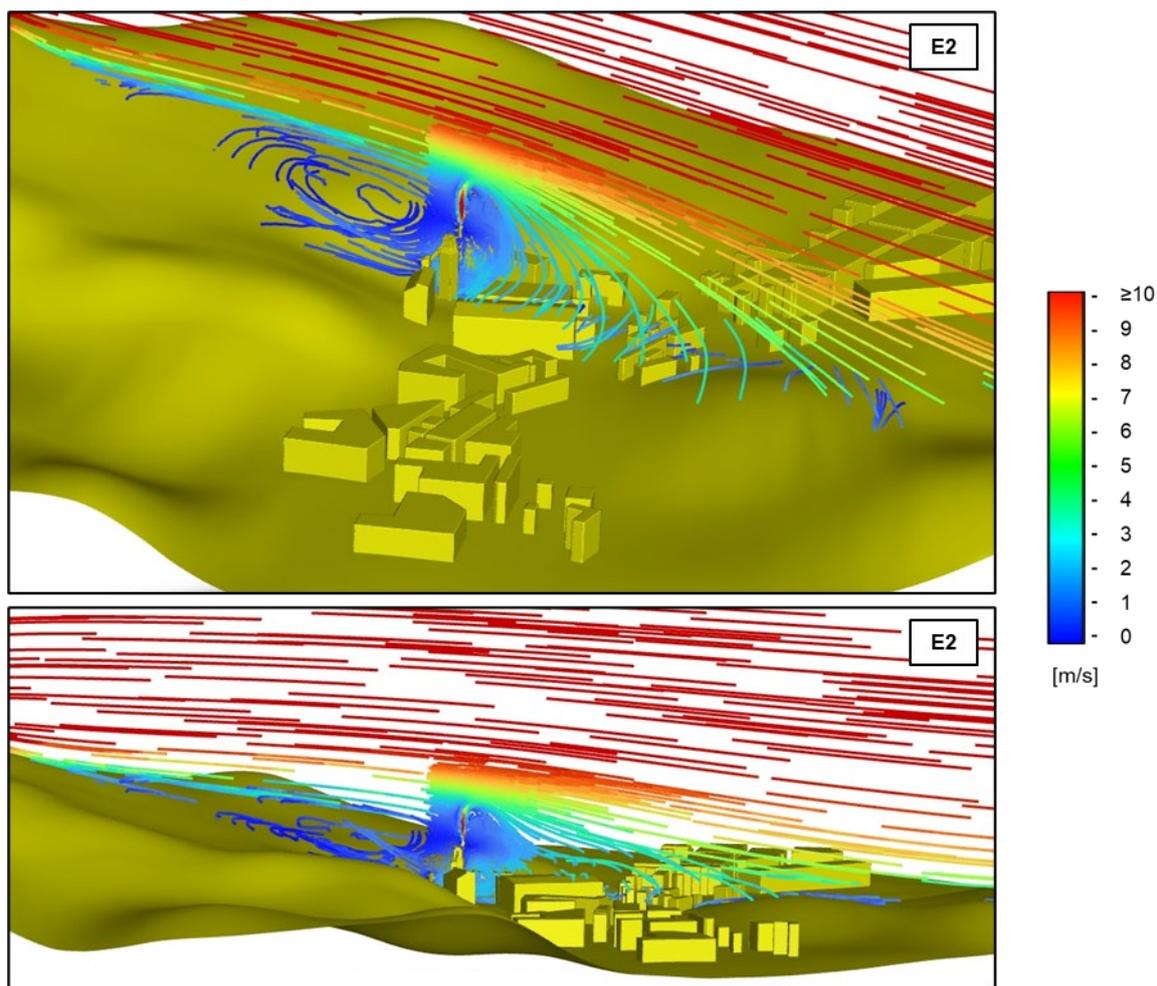


Figura 80. Líneas de flujo representadas en escala de colores según velocidad en plano paralelo a la dirección del viento incidente para el escenario E2.

En todos los casos, se ve claramente la formación de una zona de recirculación del flujo que empieza a mitad de la colina y evoluciona hacia la zona baja del valle. Cuando alcanza la posición de la chimenea, se puede identificar un movimiento de torbellino que genera un gran impacto sobre el comportamiento de la pluma. Para el escenario E1 (viento de 6 m/s) la velocidad de la pluma es superior a la velocidad del flujo en las inmediaciones de la sección de salida de la chimenea, lo que permite que los gases asciendan algunos metros antes de ser desviados por el remolino. A medida que los gases de escape pierden su velocidad, la pluma gira ligeramente hacia el sur debido al movimiento ascendente del vórtice, para posteriormente empezar a curvarse hacia el norte. El comportamiento observado es diferente en el escenario E2 (viento 10 m/s), dado que la velocidad del viento en torno a la sección de salida de la chimenea es ahora superior a la velocidad de salida de los gases. En este caso, la pluma asciende y es rápidamente arrastrada en dirección NE con un movimiento descendente. Dado que las velocidades del flujo alrededor de la salida de la chimenea exceden la de la pluma a partir de determinadas alturas, esta última se encuentra mucho más condicionada por la influencia del viento.

Para observar el efecto del flujo en la dispersión de contaminantes, se ha obtenido la Figura 81 y Figura 82, las cuales muestran los contornos de concentración de uno de los contaminantes simulados en un plano paralelo a la dirección del viento en cada escenario de viento. En estas representaciones se observa como los gases contaminantes, con una densidad superior a la del aire, tienden a descender por gravedad una vez liberados a la atmósfera hasta que finalmente escapan del dominio computacional a través del contorno de salida fijado en el extremo inferior del modelo.

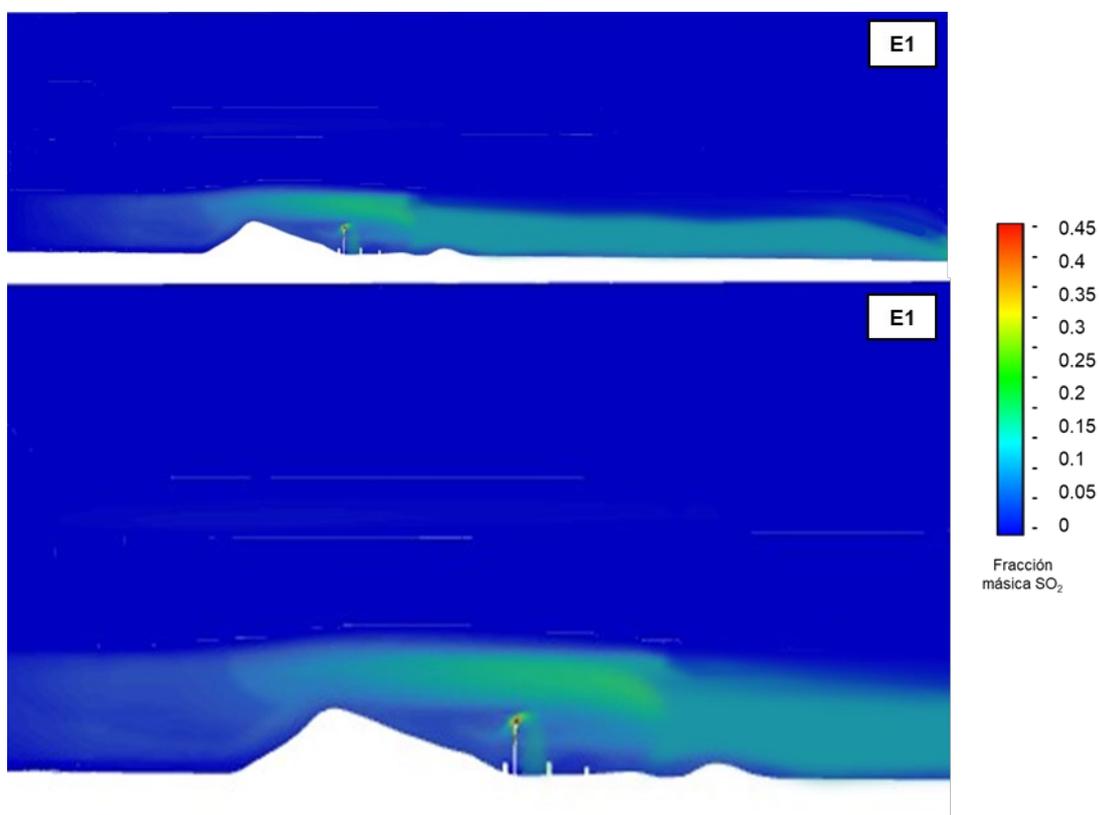


Figura 81. Contornos de concentración de SO₂ en un plano paralelo a la dirección del viento incidente que pasa por el punto central de la chimenea en escenario E1.

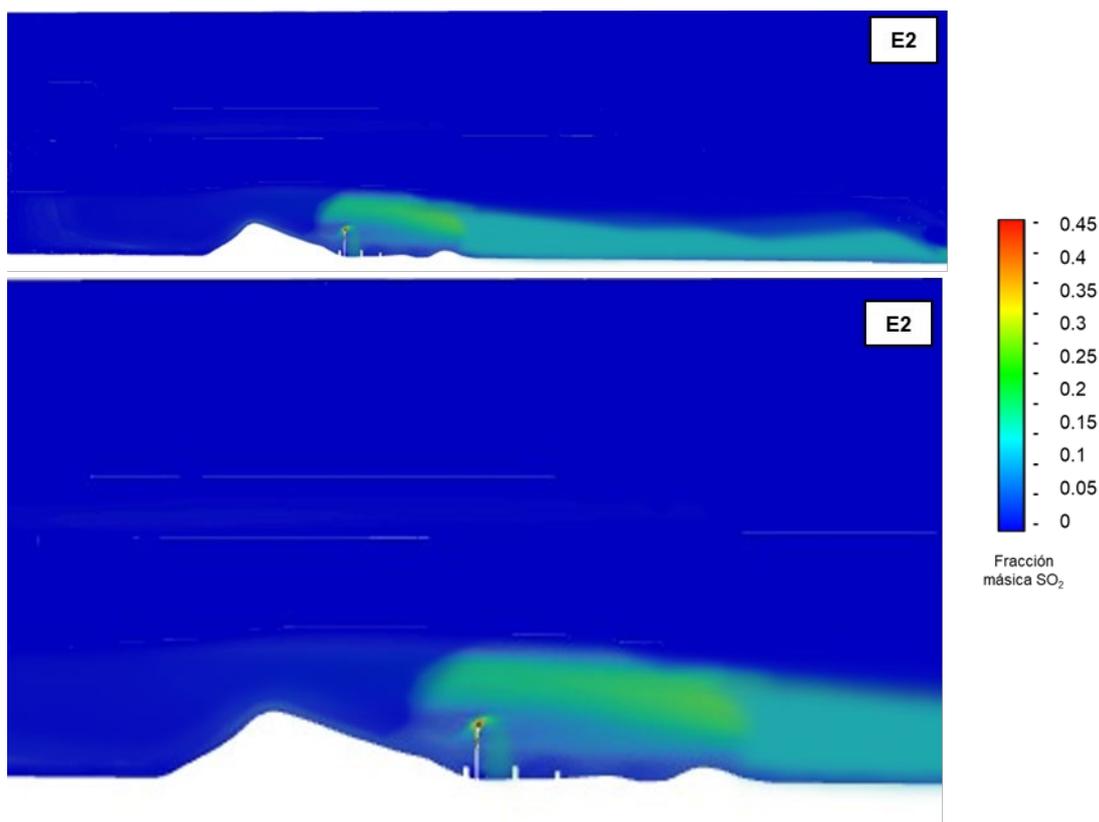


Figura 82. Contornos de concentración de SO₂ en un plano paralelo a la dirección del viento incidente que pasa por el punto central de la chimenea en escenario E2.

Para evaluar la influencia de la dinámica del flujo sobre la pluma contaminante, una de las formas de visualización más útiles que se puede obtener es la representación en forma de iso-superficies. Para ello, se ha elegido una concentración del 5% del nivel de emisión inicial para la visualización de las iso-superficies que se producen en la sección de salida de cada uno de los contaminantes simulados. La Figura 83, Figura 84 y Figura 85 muestran las superficies de iso-concentración del 5% de los valores de emisión inicial de dióxido de nitrógeno (NO₂), dióxido de azufre (SO₂) y benceno (C₆H₆), respectivamente, para los dos escenarios meteorológicos considerados.

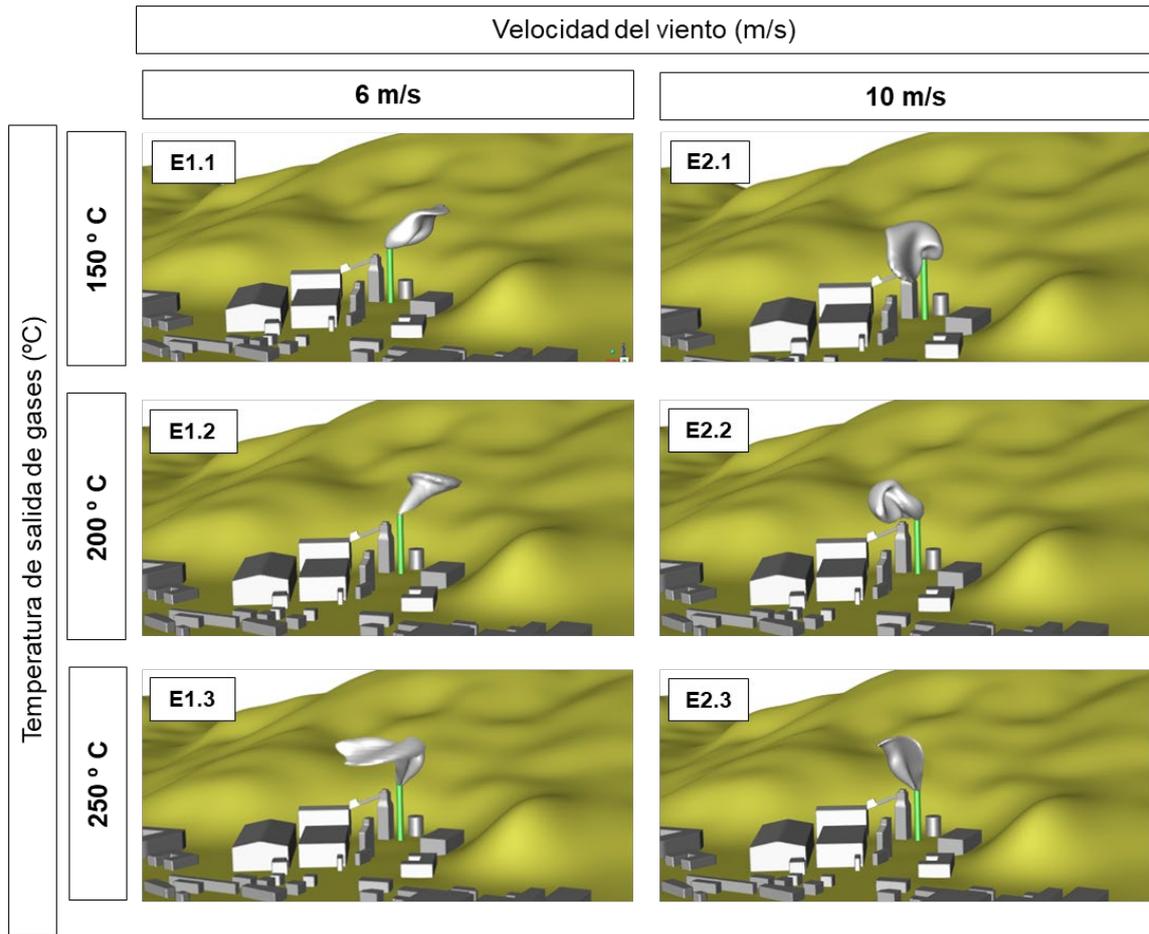


Figura 83. Superficies de iso-concentración del 5% del nivel de emisión original de dióxido de nitrógeno (NO₂) para dos escenarios meteorológicos y tres temperaturas de salida del gas.

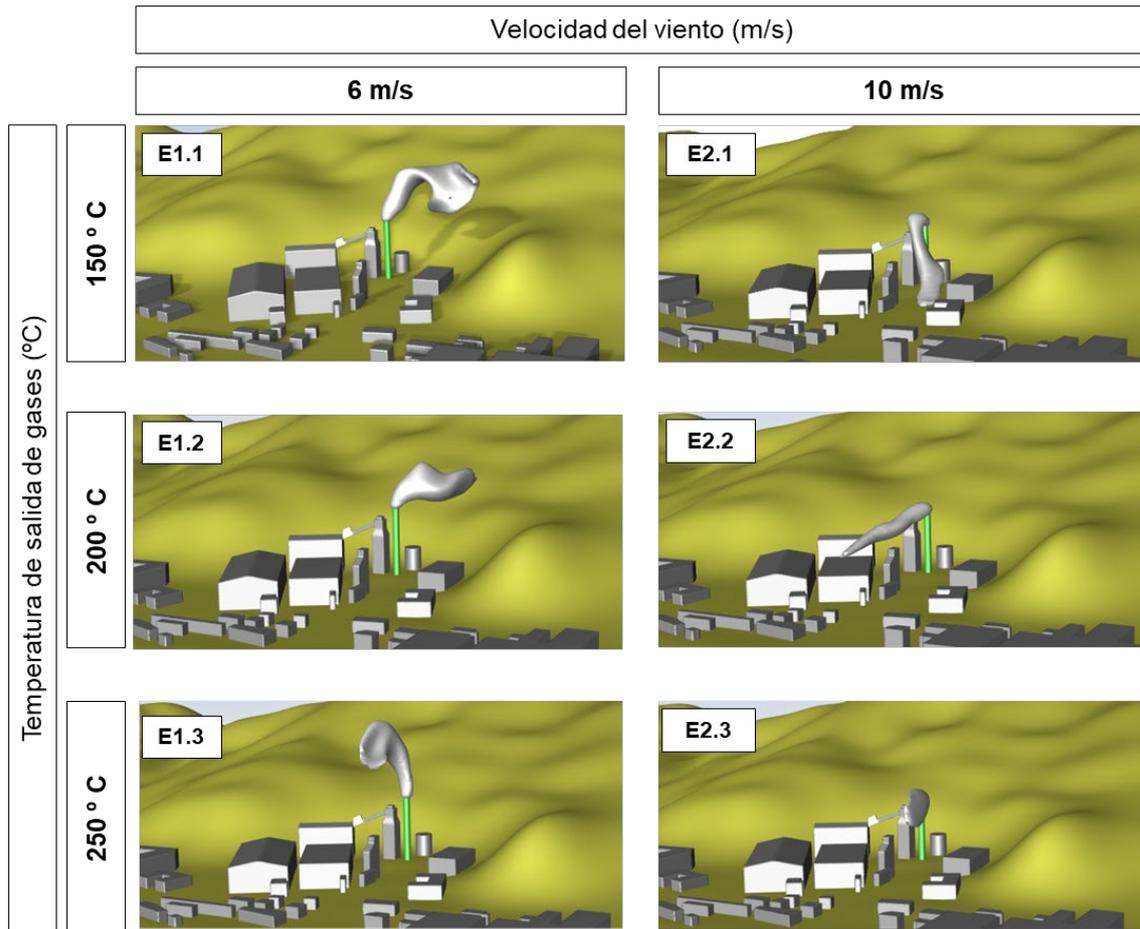


Figura 84. Superficies de iso-concentración del 5% del nivel de emisión original de dióxido de azufre (SO_2) para dos escenarios meteorológicos y tres temperaturas de salida del gas.

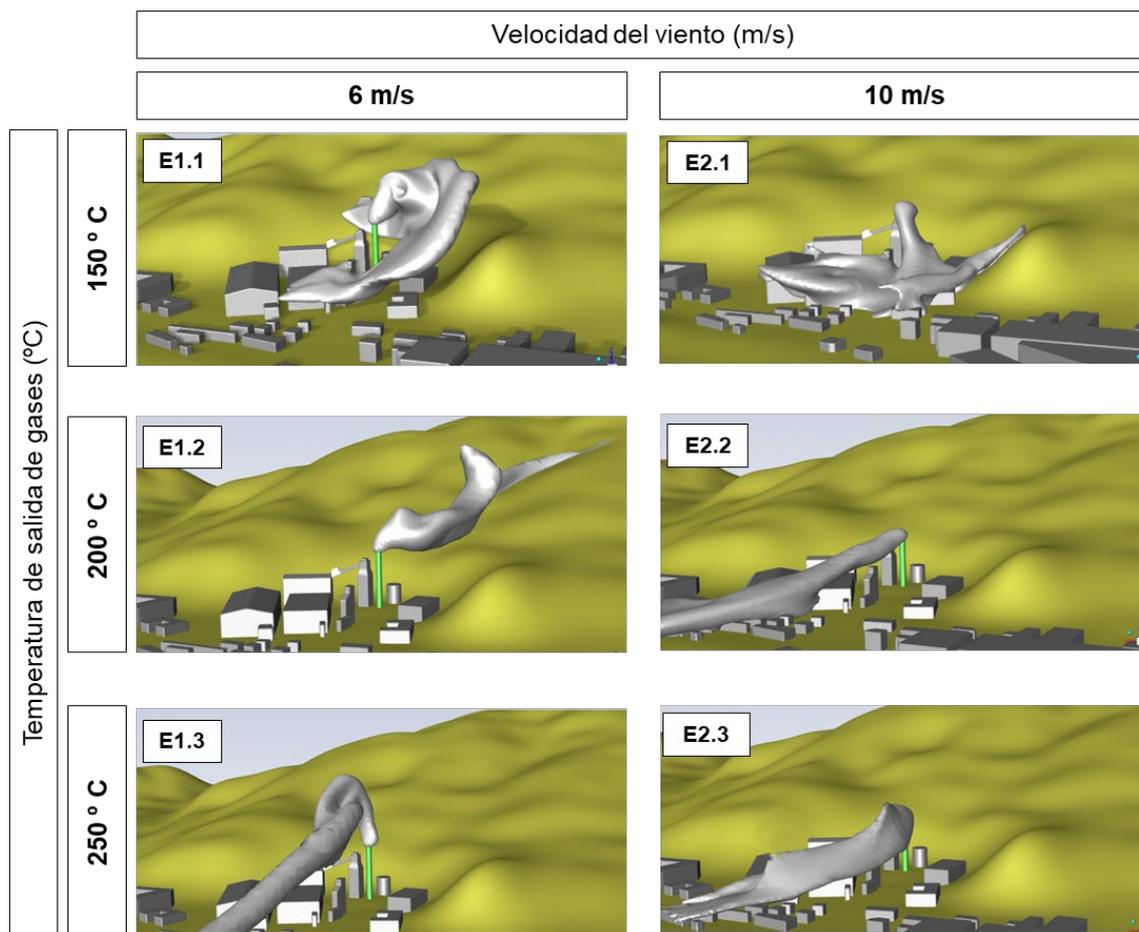


Figura 85. Superficies de iso-concentración del 5% del nivel de emisión original de benceno (C_6H_6) para dos escenarios meteorológicos y tres temperaturas de salida del gas.

El fenómeno de recirculación del flujo y su impacto sobre la dispersión de la pluma se puede observar de forma más clara en las figuras anteriores. La concentración contaminante desciende del 5% para el caso del dióxido de nitrógeno a partir de este punto, mientras que los otros dos contaminantes necesitan una distancia superior de dispersión para llegar al mismo nivel. De acuerdo a esto último, en el dióxido de azufre y el benceno se observa que al giro le sigue una trayectoria descendente por el lado oeste de la chimenea. En el caso del benceno y el dióxido de azufre, la pluma acaba invadiendo las propias instalaciones industriales aun cuando no llega a alcanzar el nivel del suelo por completo. Aunque los niveles de concentración pueden no resultar muy elevados, no se deben ignorar posibles consecuencias para los empleados de la instalación como resultado de una exposición prolongada.

En el escenario E2.1, la pluma exhibe un comportamiento diferente dado que los vientos más intensos limitan la ascensión de la pluma, de forma que los gases contaminantes ya no se aproximan a la ladera de la montaña que se veía anteriormente afectada. Por el contrario, la instalación industrial recibe ahora el mayor impacto dado que la pluma cae rápidamente hacia el suelo con una trayectoria

casi vertical, llegando a la base de la chimenea con una concentración más elevada que en el escenario anterior, especialmente en el caso del benceno.

Las figuras anteriores también contienen los resultados de la dispersión que se produce a las distintas temperaturas de salida de los gases simuladas, como medida para intentar mitigar el impacto del penacho de contaminación. Las superficies de iso-concentración que se producen para temperaturas de expulsión de gases superiores (E1.2 y E1.3 para el primer escenario meteorológico y E2.2 y E2.3 para el segundo) revelan que este parámetro tiene un gran impacto sobre el comportamiento de la pluma.

Para una velocidad de viento de 6 m/s (escenario meteorológico E1), aumentar la temperatura de salida de 150 ° C a 200 ° C limita de forma importante el arrastre hacia el suelo de la pluma por efecto del movimiento de recirculación, situación especialmente visible para el benceno y el dióxido de azufre. De esta forma, el escenario E1.2 muestra para los distintos contaminantes plumas que se mantienen más alejadas del nivel del suelo y se dispersan a través de distancias más largas. Sin embargo, en el caso particular del benceno la mayor ascensión de la pluma no es suficiente y provoca que los contaminantes se acerquen a la ladera de la montaña situada al suroeste de la chimenea donde se ubican algunas casas pequeñas y granjas que no han sido representadas en la geometría del modelo. Por tanto, esta situación puede tener un efecto negativo en la calidad del aire que respiran las personas que viven en esa zona de la montaña.

Finalmente, el aumento de la temperatura de salida hasta los 250 ° C evita que la pluma de benceno se dirija hacia la ladera de la colina en dirección suroeste, registrándose además una elevación de la pluma mucho mayor, tal y como muestran las imágenes correspondientes al escenario E1.3 para los distintos contaminantes. Estos cambios en la dinámica de la pluma contribuyen a una mayor dilución de los contaminantes cuando alcanzan niveles más próximos al suelo.

Por otro lado, para velocidades de viento de 10 m/s (escenario meteorológico E2), una temperatura de emisión de 200 ° C es suficiente para evitar el desplome de la pluma hacia el suelo de la instalación industrial en todos los casos, permitiendo a la pluma expandirse en dirección nordeste y a una altura suficientemente segura respecto a los tejados de las viviendas cercanas. Aumentar la temperatura hasta los 250 ° C supone una mejora superior en los mecanismos de dilución, pero en este caso no es necesario alcanzar un valor de temperatura tan alto para mantener los contaminantes alejados de las zonas críticas.

Las distintas situaciones ilustradas en las figuras extraídas de las simulaciones se pueden comparar con algunas imágenes tomadas de la fuente emisora en condiciones meteorológicas similares a las simuladas. De esta forma, se han tomado algunas fotografías de los gases expulsados por la fuente de estudio, visibles gracias a la presencia de partículas sólidas suspendidas en los mismos. Para comprender mejor la posición desde la que se tomó cada grupo de fotografías y el momento temporal

se proporciona la Figura 86 que detalla esta información sobre una imagen aérea de la zona. En esta figura también se incluye información sobre la dirección del viento predominante en el momento de la captura, de acuerdo a los registros de viento de la estación de Meriñán.

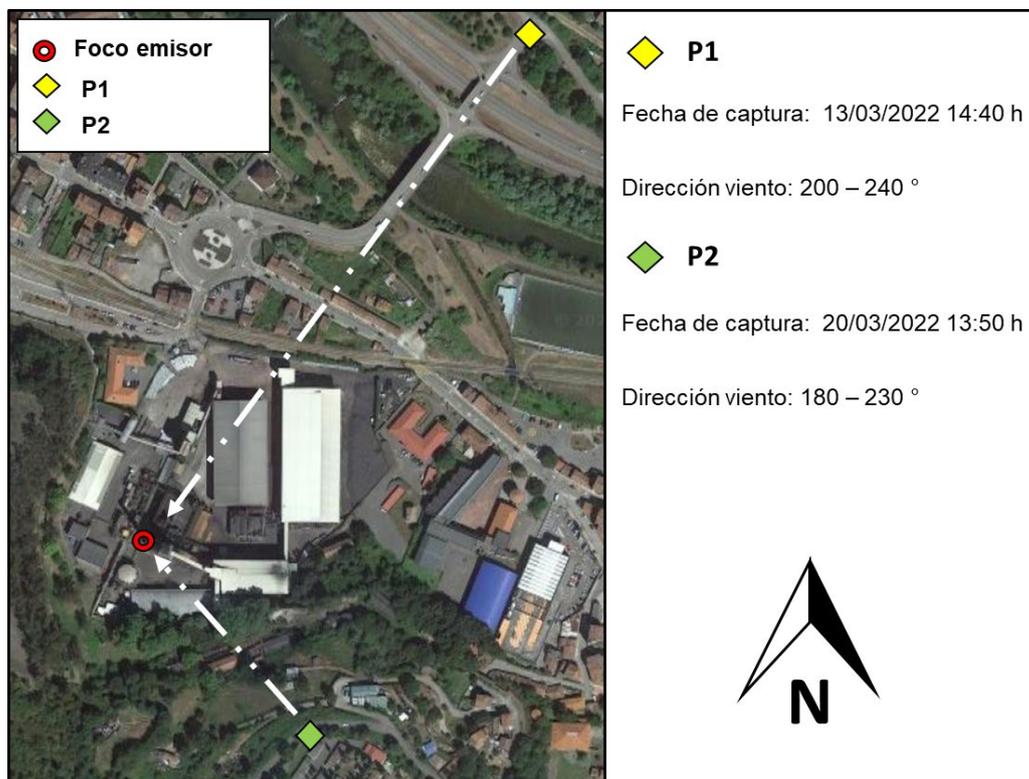


Figura 86. Detalles de las posiciones desde las que se tomaron el conjunto de fotografías de los gases expulsados y tiempos.

Las fotografías tomadas desde la posición P1 se pueden observar en la Figura 90. En la fotografía de la izquierda se puede observar cómo los humos expulsados no ascienden, sino que tan pronto como son liberados tienden a descender hacia el suelo, situación que coincide con las plumas observadas en el escenario E2.1 de la Figura 83 y Figura 85. Por su parte, la imagen derecha de la Figura 87 muestra cómo los humos ascienden levemente antes de experimentar un giro hacia la derecha (oeste de la chimenea), correspondiéndose esta situación con las plumas observadas en el escenario E1.1 de la Figura 83, Figura 84 y Figura 85. Respecto a la velocidad del viento que tuvo lugar en el momento de las capturas, es importante destacar que este se produce normalmente en ráfagas de distintas intensidades, siendo muy infrecuente el mantenimiento de una velocidad más o menos constante. Por ello, en un breve lapso de tiempo es habitual recibir ráfagas de velocidades elevadas y bajas de forma intercalada. En la práctica, no resulta fácil llegar a conocer la velocidad que se produce en un instante dado, presentándose los datos de viento en las estaciones como la de Meriñán en forma agregada por intervalos minutales u horarios. Por este motivo, no es posible conocer la velocidad del viento en el instante exacto en que fueron tomadas las fotos, aunque es posible afirmar que la imagen

derecha se produjo en un momento de ráfaga intensa mientras que la derecha tuvo lugar en un momento de menor intensidad.



Figura 87. Imágenes tomadas de los gases expulsados por el foco emisor en el instante y posición P1.

Por otro lado, se incluye también una fotografía tomada desde la posición P2, representada en la Figura 87. Los humos en esta instantánea no se aprecian con la misma claridad que en el caso anterior, por lo que se ha duplicado la imagen incluyendo una línea que marca el eje de la pluma en la imagen derecha. En este caso, la imagen se tomó en unas condiciones de viento más bien reducidas y un rango de direcciones que, aunque no difiere demasiado de las direcciones simuladas, se encuentra más cercano a la dirección sur (180°). No obstante, se ha decidido incluir esta imagen dado que muestra el comportamiento de giro de la pluma hacia el sur (donde se ubica la ladera de la colina cercana) desde una posición de perfil en la que se puede apreciar mejor dicho movimiento. Este viraje se pudo apreciar en los escenarios E1.1 y E1.2 para todos los contaminantes. Sin embargo, el menor efecto de recirculación producido por una baja velocidad del viento en el momento de la instantánea evita el movimiento de descenso hacia el suelo que se observaba en las plumas de la Figura 83 y Figura 85, apreciándose por el contrario un ascenso notable de la pluma en la Figura 88.



Figura 88. Imágenes tomadas de los gases expulsados por el foco emisor en el instante y posición P2.

De esta forma, la ejecución de simulaciones de dinámica de fluidos computacional en diferentes escenarios y condiciones de operación ha permitido la identificación de situaciones críticas en términos de condiciones concentración contaminante. Además, esta herramienta ha permitido la evaluación de estrategias de mitigación con el objetivo de seleccionar aquellas que mantengan un compromiso entre el impacto sobre la calidad del aire y el coste del consumo de combustible en la planta. En concreto, en este trabajo se ha analizado la temperatura mínima a la que se podrían expulsar los gases en base a las condiciones meteorológicas con el objetivo de reducir el impacto de las emisiones a la vez que se optimiza el uso de los recuperadores de calor. El análisis llevado a cabo se puede extender a otros escenarios meteorológicos adicionales para cubrir tantos escenarios como sea posible con el objetivo de poder ajustar los parámetros de emisión en la mayoría de las situaciones.

9 Conclusiones

9 Conclusiones

En esta tesis doctoral se ha abordado el problema de estudiar la dispersión de contaminantes en un escenario singular mediante el diseño de una metodología de desarrollo de modelos CFD adaptada a los principales retos asociados a la simulación de la capa límite atmosférica. A continuación, se recogen las principales conclusiones extraídas de esta investigación.

- La contaminación ambiental es uno de los principales problemas a los que se enfrenta la sociedad y los órganos gubernamentales en todo el mundo. La tendencia progresiva hacia un marco legal cada vez más restrictivo con las emisiones contaminantes supone un desafío para muchas industrias. Esta situación está acelerando la adopción de modelos de dispersión de contaminantes para caracterizar correctamente este fenómeno en instalaciones industriales con el objetivo de cumplir los requisitos de control ambiental impuestos por la normativa y los distintos órganos ambientales.
- En el ámbito de las emisiones industriales, el uso de los denominados modelos de dispersión operacionales o de respuesta rápida ha sido tradicionalmente la elección más extendida, dada su capacidad para generar resultados satisfactorios en la mayor parte de los escenarios, junto con unos tiempos de cálculo y demanda computacional reducidos. Muchas de estas formulaciones se encuentran ampliamente reconocidas por numerosos organismos ambientales y han sido objeto de mejora continua por parte de comunidades científicas implicadas en la mejorar sus capacidades mediante la incorporación de técnicas del estado del arte.
- A pesar de lo anterior, es un hecho que los modelos operacionales presentan importantes limitaciones para representar correctamente la física de los principales procesos asociados a flujos turbulentos. Esta situación provoca que, en escenarios de fenómenos complejos de flujo causados por localizaciones singulares, los modelos operacionales no sean capaces de generar unos resultados de dispersión satisfactorios. En esta tesis doctoral se ha identificado un claro ejemplo de escenario de estudio cuyas características suponen un impedimento para el uso de este tipo de modelos. Las características del escenario singular identificado han sido una orografía compleja y profunda en forma de valle, la gran proximidad de la fuente emisora a dichas formaciones montañosas y la posibilidad de formación de grandes zonas de

recirculación del flujo que resulta de la combinación de las condiciones meteorológicas junto con las características físicas de la ubicación. En este escenario singular, se aconseja el uso de modelos CFD, capaces de representar de forma mucho más fiel el impacto de los fenómenos del flujo.

- La revisión del estado del arte revela una importante proliferación en el uso de modelos CFD para el estudio de la dispersión de contaminantes en escenarios urbanos. Estos modelos resultan especialmente útiles para detectar condiciones adversas para la ventilación y evacuación de contaminantes en zonas de tránsito de peatones o en zonas próximas a las fachadas de los edificios, donde frecuentemente se ubican tomas de ventilación de las viviendas. También resultan útiles para estudiar distintas posibilidades de diseños urbanos y su efectividad en la mejora de la ventilación. Este creciente interés ha propiciado la aparición de una gran batería de estudios enfocados a perfeccionar la metodología de creación de los modelos CFD para la capa límite atmosférica, especialmente en lo que respecta al proceso de mallado, así como ajustes de configuración del modelo y la definición de las condiciones de contorno. En consecuencia, en la actualidad se pueden identificar un conjunto de directrices y mejores prácticas que facilitan a los usuarios de este tipo de técnicas la obtención de modelos cada vez más robustos y efectivos.
- La modelización del terreno para la generación del dominio computacional del modelo es un proceso que conlleva una importante dificultad técnica, especialmente en escenarios de relieves complejos. Organismos como el Centro Nacional de Información Geográfica pone a disposición del público una variedad de datos elevación del terreno de distinta resolución, destacando las nubes de puntos LiDAR por su versatilidad. Sin embargo, el proceso de transformación de estos datos en una superficie geométrica apta para la discretización del dominio no es directa y la calidad de su resultado puede condicionar en gran medida la obtención de un mallado satisfactorio, tal y como se demostró en la presente investigación. Entre las principales técnicas de modelización de superficies a partir de datos geográficos destaca el de la malla triangular TIN, muy extendido por su relativa sencillez, pero de peor calidad resultante para las exigencias del modelo. En cambio, la generación de superficies en base a la definición de curvas *bSplines* y superficies NURBS ha demostrado ofrecer un resultado mucho más adecuado para la generación del dominio computacional, a pesar de exigir un esfuerzo de generación superior. En esta investigación se ha ideado un procedimiento de generación de superficies basado en *bSplines* como alternativa cuando no se dispone de software especializado que realice esta tarea de forma automatizada y directa.
- En lo que respecta al proceso de mallado del dominio, la literatura de las últimas décadas recomienda priorizar el uso de celdas hexaédricas o prismáticas. Esta elección se justifica por la posibilidad de alinear las paredes de las celdas respecto a la dirección del flujo principal, lo que contribuye a reducir los errores de difusión numérica. Si bien esta ha sido la elección

habitual en escenarios urbanos de suelo plano, cuando el escenario de aplicación presenta edificaciones asentadas sobre un terreno altamente irregular, los esquemas de generación de este tipo de celdas presentan muchas dificultades que a menudo los hacen inviables. Incluso pesar de la aparición de metodologías en la literatura o paquetes de libre acceso como snappyHexMesh específicos para la generación de mallados prismáticos o hexaédricos, las dificultades en la práctica siguen siendo muy grandes y en muchos casos inabordables. Por el contrario, los módulos comerciales de mallado están más orientados a facilitar este proceso al usuario, reduciendo en la medida de lo posible las necesidades de intervención manual por su parte, aunque ello implique una menor posibilidad de lograr un mallado hexaédrico o prismático. Si bien esta opción puede resultar a priori menos deseable por ofrecer un menor control sobre la generación del mallado, hoy en día constituye una de las pocas alternativas viables cuando se abordan escenarios de grandes dimensiones y variabilidad geométrica. No obstante, a pesar de que su principal premisa se basa en facilitar y automatizar procesos el trabajo, este tipo de programas también han presentado avances en los últimos años en lo que respecta a calidad del mallado resultante. En este sentido, una novedad destacable ha sido la incorporación de nuevas tipologías de celdas poliédricas y poli-prismáticas y esquemas de mallados híbridos, las cuales parecen ofrecer características interesantes para los requisitos típicos de las simulaciones de dinámica de fluidos y unos indicadores de calidad de celdas razonables.

- La definición de las condiciones de contorno y modelos de turbulencia es otro de los pasos que resultan críticos para el éxito de las simulaciones. Para abordar de forma adecuada este punto es muy importante identificar las condiciones atmosféricas y particularidades existentes en cada escenario meteorológico considerado. A modo de ejemplo, durante el desarrollo del presente trabajo se vio que, en casos de atmósferas neutras, los perfiles de velocidad y turbulencia de viento más extendidos son los de Richards y Hoxey. En cambio, la simulación de una condición atmosférica estable o inestable requeriría el uso de unos perfiles de viento diferentes. Así mismo, es importante conocer en la medida de lo posible la formulación o código del programa utilizado para las simulaciones, ya que puede presentar condicionantes importantes para la configuración del modelo. Un ejemplo notable abordado en este trabajo fue el uso de las funciones de pared y la implicación del concepto de la altura de rugosidad en el establecimiento de la altura de la primera capa celdas, punto en el que fue fundamental conocer el comportamiento del programa empleado para poder establecer dicha altura de forma correcta. De lo contrario, si no se tienen en cuenta y respetan dichos condicionantes, las simulaciones que se ejecuten pueden dar lugar a resultados inconsistentes o poco realistas.
- En aquellos escenarios singulares anteriormente descritos y que se caracterizan por la existencia de relieves abruptos y la proximidad de grandes obstáculos pueden aparecer

fenómenos de recirculación del flujo de forma similar a lo que sucede en escenarios urbanos. Estos vórtices pueden tener un impacto significativo en las emisiones de gases procedentes de fuentes industriales, con potencial para alterar la trayectoria de la pluma contaminante y arrastrar los contaminantes hacia áreas vulnerables de exposición humana.

- El uso de recuperadores de calor en procesos de combustión industriales está muy extendido como medida de mejora de la eficiencia energética de la planta. Sin embargo, en lo que respecta a la dispersión de contaminantes, esta práctica puede tener un efecto negativo ya que los gases se expulsan con una velocidad menor y llegan a nivel en un tiempo menor y, por tanto, menos diluidos. Las simulaciones mediante CFD han demostrado que regular las tasas de conversión de los reguladores puede resultar útil en escenarios meteorológicos adversos y episodios de alta contaminación para incrementar el momento vertical de la pluma contaminante emitida. De esta forma, se logra que la pluma alcance una elevación superior, aumentando las posibilidades de escapar a la influencia de los movimientos giratorios producidos por los remolinos o zonas de recirculación de flujo y facilitando una dispersión más efectiva alejando los contaminantes de zonas críticas. De esta forma, mediante un estudio dedicado con modelos CFD, es posible ajustar los patrones de utilización de los recuperadores de calor, en base a un compromiso entre el impacto contaminante generado y el consumo energético de la planta.

10 Líneas de investigación futuras

10 Líneas de investigación futuras

Esta tesis doctoral ha sido el resultado de varios años de trabajo durante los cuales el plan de investigación y sus objetivos han experimentado diversos cambios y reajustes en el enfoque y estrategia a seguir. Estas desviaciones, han llevado irremediamente a una dilación en el tiempo de desarrollo de la tesis respecto a lo inicialmente planeado.

A consecuencia de lo anterior, varias ideas y propósitos iniciales o surgidos durante el desarrollo de la investigación han tenido que ser excluidos del alcance del trabajo, bien por falta de tiempo o por insuficiencia de recursos computacionales para poder llevarlos a cabo.

En esta sección se ha recogido lo que, a juicio de la autora, podrían ser las líneas de investigación más interesantes para complementar o ampliar el trabajo realizado en esta investigación.

- **Simulación de condiciones atmosféricas estables o inestables.** En esta investigación se ha optado por la simulación de escenarios de viento de velocidades moderadas a elevadas, lo que sitúa a la atmósfera en una condición de estratificación neutra. Estos escenarios fueron elegidos por su potencial para intensificar los fenómenos de recirculación del flujo, principal interés de la investigación por su posible impacto sobre el comportamiento de las plumas contaminantes. Sin embargo, es un hecho que los episodios de contaminación más desfavorables se producen en condiciones de atmósferas estables, especialmente cuando se produce el efecto de inversión térmica. Por tanto, una de las líneas de trabajo futuras más interesantes consistiría en la simulación de este tipo de escenarios atmosféricos, bien con velocidades más reducidas, pero aún capaces de provocar algún tipo de fenómeno de recirculación o bien en condiciones de práctica ausencia del viento y fenómenos asociados. Sin embargo, es importante destacar que la realización de este tipo de simulaciones implicaría algunas modificaciones importantes en el modelo desarrollado. De esta forma, la simulación de una atmósfera estable conllevaría no sólo la definición de un valor de velocidad de viento más reducido, sino también la búsqueda y definición de unos perfiles de velocidad y características turbulentas de viento completamente diferentes. También sería necesario incluir fenómenos de transferencia térmica por radiación en el modelo, así como un perfil de temperaturas atmosférica variable con la altura adecuado.

- **Comparación con resultados de modelos operacionales.** Otro ejercicio interesante consistiría en simular este mismo caso de estudio mediante un modelo de tipo operacional, como puede ser AERMOD. Posteriormente, se podría cuantificar de forma más precisa las diferencias entre uno y otro modelo, detectando las principales deficiencias y áreas de mejora.
- **Simulaciones de estado transitorio.** Aunque la aplicación de modelos tipo LES sigue resultando inviable para un caso de estudio de dimensiones y complejidad como el abordado en la presente investigación, se podría plantear la simulación no estacionaria mediante un modelo URANS. De esta forma, se podría conocer el impacto de las fluctuaciones en las características del flujo sobre la dispersión de contaminantes. Así mismo, se podría experimentar con otros esquemas de cierre del modelo de turbulencia como la formulación $k-\omega$, respecto a los cuales han comenzado a surgir en años más recientes evidencias bibliográficas que apuntan a unos resultados prometedores para las simulaciones de capa límite atmosférica.
- **Generación del dominio computacional a partir recursos de código abierto.** Otra posible actuación interesante consiste en replicar el proceso de generación de geometría descrito en la presente investigación exclusivamente con herramientas y recursos de código abierto o libre acceso, especialmente en la parte que respecta al relieve o superficie del terreno.

Referencias

- [1] United Nations; Department of Economic and Social Affairs; Population Division., “World Urbanization Prospects: The 2018 Revision (ST/ESA/SER.A/420),” New York, 2019.
- [2] European Environment Agency (EEA), “Europe’s air quality status 2022 (briefing), April 2022,” 2022.
- [3] D. E. Schraufnagel *et al.*, “Air Pollution and Noncommunicable Diseases: A Review by the Forum of International Respiratory Societies’ Environmental Committee, Part 2: Air Pollution and Organ Systems,” *Chest*, vol. 155, no. 2. Elsevier, pp. 417–426, Feb. 01, 2019. doi: 10.1016/j.chest.2018.10.041.
- [4] “Layers of the Atmosphere - National Weather Service, National Oceanic and Atmospheric Administration.”
<https://web.archive.org/web/20170902191353/http://www.srh.noaa.gov/srh/jetstream/atmos/layers.html> (accessed Apr. 17, 2023).
- [5] Dr. David R. Williams, “NASA Earth Fact Sheet,” 2021.
- [6] European Environment Agency (EEA), “Sources and emissions of air pollutants in Europe,” 2022. Accessed: Apr. 18, 2023. [Online]. Available: <https://www.eea.europa.eu/publications/air-quality-in-europe-2022/>
- [7] X. Domènech, *Química atmosférica: Origen y efectos de la contaminación*. Miraguano, 2008.
- [8] Á. Leelőssy, F. Molnár, F. Izsák, Á. Havasi, I. Lagzi, and R. Mészáros, “Dispersion modeling of air pollutants in the atmosphere: a review,” *Central European Journal of Geosciences*, vol. 6, no. 3, pp. 257–278, Sep. 2014, doi: 10.2478/S13533-012-0188-6/XML.
- [9] R. B. Stull, *An introduction to boundary layer meteorology*. Kluwer Academic Publishers, 1988.
- [10] J. R. Garratt, “Review: the atmospheric boundary layer,” *Earth Sci Rev*, vol. 37, no. 1–2, pp. 89–134, Oct. 1994, doi: 10.1016/0012-8252(94)90026-4.
- [11] J. D. Anderson, “Ludwig Prandtl’s boundary layer,” *Phys Today*, vol. 58, no. 12, pp. 42–48, 2005.
- [12] A. Portela, M. Castro, and R. González, “Parametrización de la capa límite atmosférica en los modelos numéricos de pronóstico meteorológico,” *Física de la Tierra*, no. 3, p. 103, 1991.
- [13] J. R. Garrat, *The atmospheric boundary layer*. Cambridge University Press, 1994.

Referencias

- [14] D. B. Turner, *Workbook of atmospheric dispersion estimates: an introduction to dispersion modeling*. CRC press, 2020.
- [15] N. S. Holmes and L. Morawska, “A review of dispersion modelling and its application to the dispersion of particles: An overview of different dispersion models available,” *Atmos Environ*, vol. 40, no. 30, pp. 5902–5928, Sep. 2006, doi: 10.1016/J.ATMOSENV.2006.06.003.
- [16] Z. Tong and K. M. Zhang, “The near-source impacts of diesel backup generators in urban environments,” *Atmos Environ*, vol. 109, pp. 262–271, May 2015, doi: 10.1016/j.atmosenv.2015.03.020.
- [17] M. Lateb, C. Masson, T. Stathopoulos, and C. Bédard, “Numerical simulation of pollutant dispersion around a building complex,” *Build Environ*, vol. 45, no. 8, pp. 1788–1798, Aug. 2010, doi: 10.1016/J.BUILDENV.2010.02.006.
- [18] M. Lateb, R. N. Meroney, M. Yataghene, H. Fellouah, F. Saleh, and M. C. Boufadel, “On the use of numerical modelling for near-field pollutant dispersion in urban environments – A review,” *Environmental Pollution*, vol. 208, pp. 271–283, Jan. 2016, doi: 10.1016/J.ENVPOL.2015.07.039.
- [19] Y. Toparlar *et al.*, “CFD simulation and validation of urban microclimate: A case study for Bergpolder Zuid, Rotterdam,” *Build Environ*, vol. 83, pp. 79–90, Jan. 2015, doi: 10.1016/J.BUILDENV.2014.08.004.
- [20] B. Blocken, W. D. Janssen, and T. van Hooff, “CFD simulation for pedestrian wind comfort and wind safety in urban areas: General decision framework and case study for the Eindhoven University campus,” *Environmental Modelling & Software*, vol. 30, pp. 15–34, Apr. 2012, doi: 10.1016/J.ENVSOFT.2011.11.009.
- [21] Y. Tominaga and T. Stathopoulos, “CFD simulation of near-field pollutant dispersion in the urban environment: A review of current modeling techniques,” *Atmos Environ*, vol. 79, pp. 716–730, Nov. 2013, doi: 10.1016/J.ATMOSENV.2013.07.028.
- [22] P. Gousseau, B. Blocken, T. Stathopoulos, and G. J. F. van Heijst, “CFD simulation of near-field pollutant dispersion on a high-resolution grid: A case study by LES and RANS for a building group in downtown Montreal,” *Atmos Environ*, vol. 45, no. 2, pp. 428–438, Jan. 2011, doi: 10.1016/J.ATMOSENV.2010.09.065.
- [23] T. van Hooff and B. Blocken, “Coupled urban wind flow and indoor natural ventilation modelling on a high-resolution grid: A case study for the Amsterdam ArenA stadium,” *Environmental Modelling & Software*, vol. 25, no. 1, pp. 51–65, Jan. 2010, doi: 10.1016/J.ENVSOFT.2009.07.008.

Referencias

- [24] H. Montazeri and B. Blocken, “CFD simulation of wind-induced pressure coefficients on buildings with and without balconies: Validation and sensitivity analysis,” *Build Environ*, vol. 60, pp. 137–149, Feb. 2013, doi: 10.1016/j.buildenv.2012.11.012.
- [25] P. J. Richards and R. P. Hoxey, “Flow reattachment on the roof of a 6 m cube,” *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 94, no. 2, pp. 77–99, Feb. 2006, doi: 10.1016/j.jweia.2005.12.002.
- [26] J. Gallagher, L. W. Gill, and A. McNabola, “Numerical modelling of the passive control of air pollution in asymmetrical urban street canyons using refined mesh discretization schemes,” *Build Environ*, vol. 56, pp. 232–240, Oct. 2012, doi: 10.1016/J.BUILDENV.2012.03.013.
- [27] H. Wen and L. Malki-Epshtein, “A parametric study of the effect of roof height and morphology on air pollution dispersion in street canyons,” *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 175, pp. 328–341, Apr. 2018, doi: 10.1016/J.JWEIA.2018.02.006.
- [28] X. Xie, Z. Huang, J. Wang, and Z. Xie, “The impact of solar radiation and street layout on pollutant dispersion in street canyon,” *Build Environ*, vol. 40, no. 2, 2005, doi: 10.1016/j.buildenv.2004.07.013.
- [29] B. Blocken, T. Stathopoulos, J. Carmeliet, and J. L. M. Hensen, “Application of computational fluid dynamics in building performance simulation for the outdoor environment: an overview,” <http://dx.doi.org/10.1080/19401493.2010.513740>, vol. 4, no. 2, pp. 157–184, Jun. 2010, doi: 10.1080/19401493.2010.513740.
- [30] S. J. Jeong and M. J. Andrews, “Application of the k- ϵ turbulence model to the high Reynolds number skimming flow field of an urban street canyon,” *Atmos Environ*, vol. 36, no. 7, pp. 1137–1145, Mar. 2002, doi: 10.1016/S1352-2310(01)00569-6.
- [31] A. Kubilay, M. K. A. Neophytou, S. Matsentides, M. Loizou, and J. Carmeliet, “The pollutant removal capacity of urban street canyons as quantified by the pollutant exchange velocity,” *Urban Clim*, vol. 21, pp. 136–153, Sep. 2017, doi: 10.1016/J.UCLIM.2017.06.003.
- [32] C. H. Liu and C. C. C. Wong, “On the pollutant removal, dispersion, and entrainment over two-dimensional idealized street canyons,” *Atmos Res*, vol. 135–136, pp. 128–142, Jan. 2014, doi: 10.1016/J.ATMOSRES.2013.08.006.
- [33] Refrigerating and A.-C. Engineers, *ASHRAE Handbook: Heating, ventilating, and air-conditioning applications*. American Society of Heating, Refrigerating and Air Conditioning Engineers, 2003.

Referencias

- [34] S. Vardoulakis, B. E. A. Fisher, K. Pericleous, and N. Gonzalez-Flesca, “Modelling air quality in street canyons: a review,” *Atmos Environ*, vol. 37, no. 2, pp. 155–182, Jan. 2003, doi: 10.1016/S1352-2310(02)00857-9.
- [35] L. Soulhac, P. Salizzoni, P. Mejean, and R. J. Perkins, “Parametric laws to model urban pollutant dispersion with a street network approach,” *Atmos Environ*, vol. 67, pp. 229–241, Mar. 2013, doi: 10.1016/J.ATMOSENV.2012.10.053.
- [36] A. J. Cimorelli *et al.*, “AERMOD: A dispersion model for industrial source applications. Part I: General model formulation and boundary layer characterization,” *Journal of applied meteorology*, vol. 44, no. 5, pp. 682–693, 2005.
- [37] B. Hajra, T. Stathopoulos, and A. Bahloul, “The effect of upstream buildings on near-field pollutant dispersion in the built environment,” *Atmos Environ*, vol. 45, no. 28, pp. 4930–4940, Sep. 2011, doi: 10.1016/J.ATMOSENV.2011.06.008.
- [38] N. S. Holmes and L. Morawska, “A review of dispersion modelling and its application to the dispersion of particles: An overview of different dispersion models available,” *Atmos Environ*, vol. 40, no. 30, pp. 5902–5928, Sep. 2006, doi: 10.1016/j.atmosenv.2006.06.003.
- [39] U.S. Environmental Protection Agency. Office of Air Quality Planning and Standards., “Air Quality Dispersion Modeling - Preferred and Recommended Models.” <https://www.epa.gov/scram/air-quality-dispersion-modeling-preferred-and-recommended-models> (accessed May 04, 2022).
- [40] A. ul Haq, Q. Nadeem, A. Farooq, N. Irfan, M. Ahmad, and M. R. Ali, “Assessment of AERMOD modeling system for application in complex terrain in Pakistan,” *Atmos Pollut Res*, vol. 10, no. 5, pp. 1492–1497, Sep. 2019, doi: 10.1016/j.apr.2019.04.006.
- [41] D. J. Carruthers, B. M. Davies, H. A. Edmunds, K. L. Ellis, C. A. McHugh, and D. J. Thomson, “ADMS the Atmospheric Dispersion Modelling System: Comparisons with data from Kincaid, Lillestrom and Copenhagen.” 1994.
- [42] R. Schenk, “Integral sentences and numerical comparative calculations for the validity of the dispersion model for air pollutants AUSTAL2000,” *Environmental Systems Research* 2020 9:1, vol. 9, no. 1, pp. 1–28, Oct. 2020, doi: 10.1186/S40068-020-00181-6.
- [43] G. A. Briggs, “Plume Rise USAEC Critical Review Series TID-25075, National Technical Information Service, Springfield.” Va, 1969.
- [44] J. Kukkonen, J. Harkonen, E. Valkonen, A. Karppinen, and E. Rantakrans, “Regulatory dispersion modelling in Finland,” *Int J Environ Pollut*, vol. 8, no. 3–6, pp. 782–788, 1997.

Referencias

- [45] U.S. Environmental Protection Agency. Office of Air Quality Planning and Standards., “Comparison of Regulatory Design Concentrations. AERMOD vs ISCST3, CTDMPLUS, ISC-PRIME,” 2003.
- [46] U.S. Environmental Protection Agency. Office of Air Quality Planning and Standards., “EPA White Papers on Planned Updates to AERMOD Modeling System Memorandum.,” 2017.
- [47] X. X. Li, C. H. Liu, D. Y. C. Leung, and K. M. Lam, “Recent progress in CFD modelling of wind field and pollutant transport in street canyons,” *Atmos Environ*, vol. 40, no. 29, pp. 5640–5658, Sep. 2006, doi: 10.1016/J.ATMOSENV.2006.04.055.
- [48] A. ul Haq, Q. Nadeem, A. Farooq, N. Irfan, M. Ahmad, and M. R. Ali, “Assessment of AERMOD modeling system for application in complex terrain in Pakistan,” *Atmos Pollut Res*, vol. 10, no. 5, pp. 1492–1497, Sep. 2019, doi: 10.1016/J.APR.2019.04.006.
- [49] A. Mazzoldi, T. Hill, and J. J. Colls, “CFD and Gaussian atmospheric dispersion models: A comparison for leak from carbon dioxide transportation and storage facilities,” *Atmos Environ*, vol. 42, no. 34, pp. 8046–8054, Nov. 2008, doi: 10.1016/J.ATMOSENV.2008.06.038.
- [50] X. Liu, A. Godbole, C. Lu, G. Michal, and P. Venton, “Optimisation of dispersion parameters of Gaussian plume model for CO2 dispersion,” *Environmental Science and Pollution Research 2015 22:22*, vol. 22, no. 22, pp. 18288–18299, Sep. 2015, doi: 10.1007/S11356-015-5404-8.
- [51] A. Venkatram, *Validation of Concentrations estimated from air dispersion modeling for source-receptor distances of less than 100 meters*. California Environmental Protection Agency, Air Resources Board, Research ..., 2003.
- [52] D. J. Thomas and A. J. Manning, “Along-Wind Dispersion In Light Wind Conditions,” *Boundary-Layer Meteorology 2001 98:2*, vol. 98, no. 2, pp. 341–358, 2001, doi: 10.1023/A:1026542924429.
- [53] M. Pirhalla, D. Heist, S. Perry, W. Tang, and L. Brouwer, “Simulations of dispersion through an irregular urban building array,” *Atmos Environ*, vol. 258, p. 118500, Aug. 2021, doi: 10.1016/J.ATMOSENV.2021.118500.
- [54] E. M. Monbureau, D. K. Heist, S. G. Perry, L. H. Brouwer, H. Foroutan, and W. Tang, “Enhancements to AERMOD’s building downwash algorithms based on wind-tunnel and Embedded-LES modeling,” *Atmos Environ*, vol. 179, pp. 321–330, Apr. 2018, doi: 10.1016/J.ATMOSENV.2018.02.022.
- [55] K. H. Schlünzen, D. Grawe, S. I. Bohnenstengel, I. Schlüter, and R. Koppmann, “Joint modelling of obstacle induced and mesoscale changes—Current limits and challenges,”

Referencias

- Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 99, no. 4, pp. 217–225, Apr. 2011, doi: 10.1016/J.JWEIA.2011.01.009.
- [56] I. Orlanski, “A rational subdivision of scales for atmospheric processes,” *Bull Am Meteorol Soc*, pp. 527–530, 1975.
- [57] D. Randerson, “Overview of regional-scale numerical models,” *Bull Am Meteorol Soc*, vol. 57, no. 7, pp. 797–804, 1976.
- [58] B. Blocken, A. van der Hout, J. Dekker, and O. Weiler, “CFD simulation of wind flow over natural complex terrain: Case study with validation by field measurements for Ria de Ferrol, Galicia, Spain,” *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 147, pp. 43–57, Dec. 2015, doi: 10.1016/j.jweia.2015.09.007.
- [59] R. Kunz, I. Khatib, and N. Moussiopoulos, “Coupling of mesoscale and microscale models—an approach to simulate scale interaction,” *Environmental Modelling & Software*, vol. 15, no. 6–7, pp. 597–602, Sep. 2000, doi: 10.1016/S1364-8152(00)00055-4.
- [60] M. Tewari *et al.*, “Impact of coupling a microscale computational fluid dynamics model with a mesoscale model on urban scale contaminant transport and dispersion,” *Atmos Res*, vol. 96, no. 4, pp. 656–664, Jun. 2010, doi: 10.1016/J.ATMOSRES.2010.01.006.
- [61] B. Fisher, J. Kukkonen, M. Piringer, M. W. Rotach, and M. Schatzmann, “Meteorology applied to urban air pollution problems: Concepts from COST 715,” *Atmos Chem Phys*, vol. 6, no. 2, pp. 555–564, 2006, doi: 10.5194/ACP-6-555-2006.
- [62] P. Huq and P. Franzese, “Measurements of Turbulence and Dispersion in Three Idealized Urban Canopies with Different Aspect Ratios and Comparisons with a Gaussian Plume Model,” *Boundary Layer Meteorol*, vol. 147, no. 1, pp. 103–121, Apr. 2013, doi: 10.1007/S10546-012-9780-Z/METRICS.
- [63] R. P. Hosker, “Flow around isolated structures and building clusters: a review,” *ASHRAE Trans.:(United States)*, vol. 91, no. CONF-850606-, 1985.
- [64] I. P. Castro and A. G. Robins, “The flow around a surface-mounted cube in uniform and turbulent streams,” *J Fluid Mech*, vol. 79, no. 2, pp. 307–335, 1977.
- [65] B. Blocken, T. Stathopoulos, P. Saathoff, and X. Wang, “Numerical evaluation of pollutant dispersion in the built environment: Comparisons between models and experiments,” *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 96, no. 10–11, 2008, doi: 10.1016/j.jweia.2008.02.049.

Referencias

- [66] M. M. Hefny and R. Ooka, "CFD analysis of pollutant dispersion around buildings: Effect of cell geometry," *Build Environ*, vol. 44, no. 8, pp. 1699–1706, Aug. 2009, doi: 10.1016/J.BUILDENV.2008.11.010.
- [67] Y. Tominaga and T. Stathopoulos, "Numerical simulation of dispersion around an isolated cubic building: Comparison of various types of k- ϵ models," *Atmos Environ*, vol. 43, no. 20, 2009, doi: 10.1016/j.atmosenv.2009.03.038.
- [68] R. Yoshie, G. Jiang, T. Shirasawa, and J. Chung, "CFD simulations of gas dispersion around high-rise building in non-isothermal boundary layer," *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 99, no. 4, pp. 279–288, Apr. 2011, doi: 10.1016/J.JWEIA.2011.01.006.
- [69] J. Hang, Y. Li, M. Sandberg, R. Buccolieri, and S. Di Sabatino, "The influence of building height variability on pollutant dispersion and pedestrian ventilation in idealized high-rise urban areas," *Build Environ*, vol. 56, pp. 346–360, Oct. 2012, doi: 10.1016/J.BUILDENV.2012.03.023.
- [70] J. Hang, M. Sandberg, and Y. Li, "Age of air and air exchange efficiency in idealized city models," *Build Environ*, vol. 44, no. 8, pp. 1714–1723, Aug. 2009, doi: 10.1016/J.BUILDENV.2008.11.013.
- [71] J. J. Kim and J. J. Baik, "A numerical study of the effects of ambient wind direction on flow and dispersion in urban street canyons using the RNG k- ϵ turbulence model," *Atmos Environ*, vol. 38, no. 19, 2004, doi: 10.1016/j.atmosenv.2004.02.047.
- [72] F. Murena and G. Favale, "Continuous monitoring of carbon monoxide in a deep street canyon," *Atmos Environ*, vol. 41, no. 12, pp. 2620–2629, Apr. 2007, doi: 10.1016/J.ATMOSENV.2006.11.017.
- [73] F. Murena, N. Garofalo, and G. Favale, "Monitoring CO concentration at leeward and windward sides in a deep street canyon," *Atmos Environ*, vol. 42, no. 35, pp. 8204–8210, Nov. 2008, doi: 10.1016/J.ATMOSENV.2008.07.048.
- [74] X. X. Li, C. H. Liu, and D. Y. C. Leung, "Large-Eddy Simulation of Flow and Pollutant Dispersion in High-Aspect-Ratio Urban Street Canyons with Wall Model," *Boundary-Layer Meteorology* 2008 129:2, vol. 129, no. 2, pp. 249–268, Sep. 2008, doi: 10.1007/S10546-008-9313-Y.
- [75] X. X. Li, C. H. Liu, and D. Y. C. Leung, "Numerical investigation of pollutant transport characteristics inside deep urban street canyons," *Atmos Environ*, vol. 43, no. 15, pp. 2410–2418, May 2009, doi: 10.1016/J.ATMOSENV.2009.02.022.

Referencias

- [76] J. Zhong, X. M. Cai, and W. J. Bloss, “Coupling dynamics and chemistry in the air pollution modelling of street canyons: A review,” *Environmental Pollution*, vol. 214, pp. 690–704, Jul. 2016, doi: 10.1016/J.ENVPOL.2016.04.052.
- [77] D. Cui, G. Hu, Z. Ai, Y. Du, C. M. Mak, and K. Kwok, “Particle image velocimetry measurement and CFD simulation of pedestrian level wind environment around U-type street canyon,” *Build Environ*, vol. 154, pp. 239–251, May 2019, doi: 10.1016/J.BUILDENV.2019.03.025.
- [78] A. W. M. Yazid, nor A. C. Sidik, S. M. Salim, and K. M. Saqr, “A review on the flow structure and pollutant dispersion in urban street canyons for urban planning strategies,” <http://dx.doi.org/10.1177/0037549714528046>, vol. 90, no. 8, pp. 892–916, Apr. 2014, doi: 10.1177/0037549714528046.
- [79] Y. Dai, C. M. Mak, Z. Ai, and J. Hang, “Evaluation of computational and physical parameters influencing CFD simulations of pollutant dispersion in building arrays,” *Build Environ*, vol. 137, pp. 90–107, Jun. 2018, doi: 10.1016/J.BUILDENV.2018.04.005.
- [80] O. Coceal, E. V. Goulart, S. Branford, T. Glyn Thomas, and S. E. Belcher, “Flow structure and near-field dispersion in arrays of building-like obstacles,” *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 125, pp. 52–68, Feb. 2014, doi: 10.1016/J.JWEIA.2013.11.013.
- [81] D. Hertwig, G. C. Efthimiou, J. G. Bartzis, and B. Leitl, “CFD-RANS model validation of turbulent flow in a semi-idealized urban canopy,” *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 111, pp. 61–72, Dec. 2012, doi: 10.1016/J.JWEIA.2012.09.003.
- [82] T. Van Hooff and B. Blocken, “CFD evaluation of natural ventilation of indoor environments by the concentration decay method: CO₂ gas dispersion from a semi-enclosed stadium,” *Build Environ*, vol. 61, pp. 1–17, Mar. 2013, doi: 10.1016/J.BUILDENV.2012.11.021.
- [83] F. Toja-Silva, C. Pregel-Hoderlein, and J. Chen, “On the urban geometry generalization for CFD simulation of gas dispersion from chimneys: Comparison with Gaussian plume model,” *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 177, pp. 1–18, Jun. 2018, doi: 10.1016/J.JWEIA.2018.04.003.
- [84] Y. Tominaga and T. Stathopoulos, “Steady and unsteady RANS simulations of pollutant dispersion around isolated cubical buildings: Effect of large-scale fluctuations on the concentration field,” *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 165, pp. 23–33, Jun. 2017, doi: 10.1016/J.JWEIA.2017.02.001.

Referencias

- [85] B. Blocken, “Computational Fluid Dynamics for urban physics: Importance, scales, possibilities, limitations and ten tips and tricks towards accurate and reliable simulations,” *Build Environ*, vol. 91, pp. 219–245, Sep. 2015, doi: 10.1016/J.BUILDENV.2015.02.015.
- [86] C. Gromke, B. Blocken, W. Janssen, B. Merema, T. van Hooff, and H. Timmermans, “CFD analysis of transpirational cooling by vegetation: Case study for specific meteorological conditions during a heat wave in Arnhem, Netherlands,” *Build Environ*, vol. 83, pp. 11–26, Jan. 2015, doi: 10.1016/J.BUILDENV.2014.04.022.
- [87] Y. Huang, X. Hu, and N. Zeng, “Impact of wedge-shaped roofs on airflow and pollutant dispersion inside urban street canyons,” *Build Environ*, vol. 44, no. 12, pp. 2335–2347, Dec. 2009, doi: 10.1016/J.BUILDENV.2009.03.024.
- [88] G. C. Efthimiou, S. Andronopoulos, and J. G. Bartzis, “Prediction of dosage-based parameters from the puff dispersion of airborne materials in urban environments using the CFD-RANS methodology,” *Meteorology and Atmospheric Physics*, vol. 130, no. 1, pp. 107–124, Feb. 2018, doi: 10.1007/S00703-017-0506-0/METRICS.
- [89] H. Montazeri, B. Blocken, W. D. Janssen, and T. van Hooff, “CFD evaluation of new second-skin facade concept for wind comfort on building balconies: Case study for the Park Tower in Antwerp,” *Build Environ*, vol. 68, pp. 179–192, Oct. 2013, doi: 10.1016/J.BUILDENV.2013.07.004.
- [90] J. H. Amorim, V. Rodrigues, R. Tavares, J. Valente, and C. Borrego, “CFD modelling of the aerodynamic effect of trees on urban air pollution dispersion,” *Science of The Total Environment*, vol. 461–462, pp. 541–551, Sep. 2013, doi: 10.1016/J.SCITOTENV.2013.05.031.
- [91] A. Ricci, I. Kalkman, B. Blocken, M. Burlando, A. Freda, and M. P. Repetto, “Local-scale forcing effects on wind flows in an urban environment: Impact of geometrical simplifications,” *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 170, pp. 238–255, Nov. 2017, doi: 10.1016/J.JWEIA.2017.08.001.
- [92] M. Li *et al.*, “CFD Simulation of the Wind Field in Jinjiang City Using a Building Data Generalization Method,” *Atmosphere 2019, Vol. 10, Page 326*, vol. 10, no. 6, p. 326, Jun. 2019, doi: 10.3390/ATMOS10060326.
- [93] American Institute of Aeronautics and Astronautics, *AIAA guide for the verification and validation of computational fluid dynamics simulations*. American Institute of aeronautics and astronautics., 1998.
- [94] CEDVAL, “CEDVAL experimental database.” <http://www.mi.uni-hamburg.de/cedval/> (accessed Feb. 10, 2023).

Referencias

- [95] COST Action 732, “Action 732,” *Quality Assurance and Improvement of Microscale Meteorological Models*. <https://www.cost.eu/actions/732/> (accessed Feb. 06, 2023).
- [96] S. Di Sabatino *et al.*, “COST 732 in practice: The MUST model evaluation exercise,” *Int J Environ Pollut*, vol. 44, no. 1–4, pp. 403–418, 2011, doi: 10.1504/IJEP.2011.038442.
- [97] CODASC, “CODASC Dataset”, Accessed: Feb. 10, 2023. [Online]. Available: <http://www.windforschung.de/CODASC.htm>
- [98] R. C. Hall, “Evaluating modelling uncertainty-project EMU final report,” in *WS Atkins Report WSA/AM5017/R7*, 1997.
- [99] Dapple, “Dapple Dataset”, Accessed: Feb. 10, 2023. [Online]. Available: <http://www.mi.zmaw.de/index.php?id=484>
- [100] C. R. Wood *et al.*, “Dispersion experiments in central London: the 2007 DAPPLE project,” *Bull Am Meteorol Soc*, vol. 90, no. 7, pp. 955–970, 2009.
- [101] M. L. Barad, “Project Prairie Grass, a Field Program in Diffusion: Volume 1,” vol. 58, no. 235, 1958.
- [102] W. Ryan, B. Lamb, and E. Robinson, “An atmospheric tracer investigation of transport and diffusion around a large, isolated hill,” *Atmospheric Environment (1967)*, vol. 18, no. 10, pp. 2003–2021, Jan. 1984, doi: 10.1016/0004-6981(84)90186-0.
- [103] J. Berg, J. Mann, A. Bechmann, M. S. Courtney, and H. E. Jørgensen, “The Bolund Experiment, Part I: Flow Over a Steep, Three-Dimensional Hill,” *Boundary Layer Meteorol*, vol. 141, no. 2, pp. 219–243, Nov. 2011, doi: 10.1007/S10546-011-9636-Y/METRICS.
- [104] B. Yang, J. Gu, and K. M. Zhang, “The effect of heat recovery on near-source plume dispersion of a simple cycle gas turbine,” *Atmos Environ*, vol. 184, pp. 47–55, Jul. 2018, doi: 10.1016/J.ATMOSENV.2018.04.008.
- [105] A. Issakhov and A. Mashenkova, “Numerical study for the assessment of pollutant dispersion from a thermal power plant under the different temperature regimes,” *International Journal of Environmental Science and Technology*, vol. 16, no. 10, pp. 6089–6112, Oct. 2019, doi: 10.1007/S13762-019-02211-Y/METRICS.
- [106] J. E. Fackrell and A. G. Robins, “Concentration fluctuations and fluxes in plumes from point sources in a turbulent boundary layer,” *J Fluid Mech*, vol. 117, pp. 1–26, 1982, doi: 10.1017/S0022112082001499.
- [107] S. R. Hanna, “Concentration fluctuations in a smoke plume,” *Atmospheric Environment (1967)*, vol. 18, no. 6, pp. 1091–1106, Jan. 1984, doi: 10.1016/0004-6981(84)90141-0.

Referencias

- [108] B. Yang and K. M. Zhang, “CFD-based turbulent reactive flow simulations of power plant plumes,” *Atmos Environ*, vol. 150, pp. 77–86, Feb. 2017, doi: 10.1016/J.ATMOSENV.2016.11.049.
- [109] J. M. Prospathopoulos, E. S. Politis, and P. K. Chaviaropoulos, “Application of a 3D RANS solver on the complex hill of Bolund and assessment of the wind flow predictions,” *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 107–108, pp. 149–159, Aug. 2012, doi: 10.1016/J.JWEIA.2012.04.011.
- [110] A. Peña, R. Floors, and S. E. Gryning, “The Høvsøre Tall Wind-Profile Experiment: A Description of Wind Profile Observations in the Atmospheric Boundary Layer,” *Boundary Layer Meteorol*, vol. 150, no. 1, pp. 69–89, Jan. 2014, doi: 10.1007/S10546-013-9856-4/METRICS.
- [111] T. Ha, I. bok Lee, K. seok Kwon, and S. J. Lee, “Development of a micro-scale CFD model to predict wind environment on mountainous terrain,” *Comput Electron Agric*, vol. 149, pp. 110–120, Jun. 2018, doi: 10.1016/J.COMPAG.2017.10.014.
- [112] M. O. Mughal, M. Lynch, F. Yu, and J. Sutton, “Forecasting and verification of winds in an East African complex terrain using coupled mesoscale - And micro-scale models,” *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 176, pp. 13–20, May 2018, doi: 10.1016/J.JWEIA.2018.03.006.
- [113] X. Y. Tang, S. Zhao, B. Fan, J. Peinke, and B. Stoevesandt, “Micro-scale wind resource assessment in complex terrain based on CFD coupled measurement from multiple masts,” *Appl Energy*, vol. 238, pp. 806–815, Mar. 2019, doi: 10.1016/J.APENERGY.2019.01.129.
- [114] S. Hong *et al.*, “CFD modelling of livestock odour dispersion over complex terrain, part I: Topographical modelling,” *Biosyst Eng*, vol. 108, no. 3, pp. 253–264, Mar. 2011, doi: 10.1016/J.BIOSYSTEMSENG.2010.12.009.
- [115] X. Liu, A. Godbole, C. Lu, and G. Michal, “Investigation of terrain effects on the consequence distance of CO₂ released from high-pressure pipelines,” *International Journal of Greenhouse Gas Control*, vol. 66, pp. 264–275, Nov. 2017, doi: 10.1016/J.IJGGC.2017.10.009.
- [116] Y. Zhao, P. Wang, L. Ma, and J. Zhang, “Prediction of pollutants dispersion patterns around two adjacent urban road tunnels,” <https://doi.org/10.1080/01932691.2018.1464469>, vol. 40, no. 1, pp. 82–93, Jan. 2018, doi: 10.1080/01932691.2018.1464469.
- [117] P. Kumar and A. A. Feiz, “Performance analysis of an air quality CFD model in complex environments: Numerical simulation and experimental validation with EMU observations,” *Build Environ*, vol. 108, pp. 30–46, Nov. 2016, doi: 10.1016/J.BUILDENV.2016.08.013.

Referencias

- [118] K. An, S. M. Wong, J. C. H. Fung, and E. Ng, “Revisit of prevailing practice guidelines and investigation of topographical treatment techniques in CFD-Based air ventilation assessments,” *Build Environ*, vol. 169, p. 106580, Feb. 2020, doi: 10.1016/J.BUILDENV.2019.106580.
- [119] C. Li, S. Zhou, Y. Xiao, Q. Huang, L. Li, and P. W. Chan, “Effects of inflow conditions on mountainous/urban wind environment simulation,” *Build Simul*, vol. 10, no. 4, pp. 573–588, Aug. 2017, doi: 10.1007/S12273-017-0348-1/METRICS.
- [120] J. Franke, A. Hellsten, K. H. Schlunzen, and B. Carissimo, “The COST 732 Best Practice Guideline for CFD simulation of flows in the urban environment: a summary,” *Int J Environ Pollut*, vol. 44, no. 1–4, pp. 419–427, 2011.
- [121] VDI, “Environmental meteorology—Prognostic micro-scale wind field models—Evaluation for flow around buildings and obstacles.” Beuth Verlag Berlin, Germany, 2005.
- [122] A. J. Jakeman, R. A. Letcher, and J. P. Norton, “Ten iterative steps in development and evaluation of environmental models,” *Environmental Modelling & Software*, vol. 21, no. 5, pp. 602–614, May 2006, doi: 10.1016/J.ENVSOFT.2006.01.004.
- [123] B. Blocken and C. Gualtieri, “Ten iterative steps for model development and evaluation applied to Computational Fluid Dynamics for Environmental Fluid Mechanics,” *Environmental Modelling & Software*, vol. 33, pp. 1–22, Jul. 2012, doi: 10.1016/J.ENVSOFT.2012.02.001.
- [124] B. Yang, J. Gu, T. Zhang, and K. M. Zhang, “Near-source air quality impact of a distributed natural gas combined heat and power facility,” *Environmental Pollution*, vol. 246, pp. 650–657, Mar. 2019, doi: 10.1016/J.ENVPOL.2018.12.067.
- [125] E. M. Monbureau, D. K. Heist, S. G. Perry, and W. Tang, “Modeling lateral plume deflection in the wake of an elongated building,” *Atmos Environ*, vol. 234, p. 117608, Aug. 2020, doi: 10.1016/J.ATMOSENV.2020.117608.
- [126] R. L. Petersen, S. A. Guerra, and A. S. Bova, “Critical review of the building downwash algorithms in AERMOD,” <http://dx.doi.org/10.1080/10962247.2017.1279088>, vol. 67, no. 8, pp. 826–835, Aug. 2017, doi: 10.1080/10962247.2017.1279088.
- [127] B. Yang, J. Gu, and K. M. Zhang, “Parameterization of the building downwash and sidewash effect using a mixture model,” *Build Environ*, vol. 172, p. 106694, Apr. 2020, doi: 10.1016/J.BUILDENV.2020.106694.

Referencias

- [128] H. Huo and F. Chen, “A Study of Simulation of the Urban Space 3D Temperature Field at a Community Scale Based on High-Resolution Remote Sensing and CFD,” *Remote Sensing* 2022, *Vol. 14, Page 3174*, vol. 14, no. 13, p. 3174, Jul. 2022, doi: 10.3390/RS14133174.
- [129] F. Toja-Silva, J. Chen, S. Hachinger, and F. Hase, “CFD simulation of CO₂ dispersion from urban thermal power plant: Analysis of turbulent Schmidt number and comparison with Gaussian plume model and measurements,” *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 169, pp. 177–193, Oct. 2017, doi: 10.1016/J.JWEIA.2017.07.015.
- [130] J. Pedro Souza de Oliveira, J. Victor Barbosa Alves, J. Neuenschwander Escosteguy Carneiro, R. de Andrade Medronho, and L. Fernando Lopes Rodrigues Silva, “Coupling a neural network technique with CFD simulations for predicting 2-D atmospheric dispersion analyzing wind and composition effects,” *J Loss Prev Process Ind*, vol. 80, p. 104930, Dec. 2022, doi: 10.1016/J.JLP.2022.104930.
- [131] Z. Wang, D. Xiao, F. Fang, R. Govindan, C. C. Pain, and Y. Guo, “Model identification of reduced order fluid dynamics systems using deep learning,” *Int J Numer Methods Fluids*, vol. 86, no. 4, pp. 255–268, Feb. 2018, doi: 10.1002/FLD.4416.
- [132] K. Fukami, K. Fukagata, and K. Taira, “Super-resolution reconstruction of turbulent flows with machine learning,” *J Fluid Mech*, vol. 870, pp. 106–120, Jul. 2019, doi: 10.1017/JFM.2019.238.
- [133] C. Ding and K. P. Lam, “Data-driven model for cross ventilation potential in high-density cities based on coupled CFD simulation and machine learning,” *Build Environ*, vol. 165, p. 106394, Nov. 2019, doi: 10.1016/J.BUILDENV.2019.106394.
- [134] S. Luo, M. Vellakal, S. Koric, V. Kindratenko, and J. Cui, “Parameter Identification of RANS Turbulence Model Using Physics-Embedded Neural Network,” *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, vol. 12321 LNCS, pp. 137–149, 2020, doi: 10.1007/978-3-030-59851-8_9/COVER.
- [135] Ministerio de Medio Ambiente, “Prevención y control integrados de la contaminación (IPPC) Documento de referencia de Mejores Técnicas Disponibles en la Industria de Procesos de Metales Férricos. Documento BREF. ,” 2006.
- [136] “Resolución de 29 de abril de 2019, de la Consejería de infraestructuras, ordenación del Territorio y Medio Ambiente, por la que se revisa la autorización ambiental integrada de la coquería de Industrial Química del Nalón, S.A., sita en Langreo, para su adaptación a las MTD. Expte. AAI-068/15.”

Referencias

- [137] AG. Arnold J., D. Gante, Hoffmann G.W., and Meyer O. Stahl u, “Strategie und Anlagentechnik der Energiewirtschaft der Preussag Stahl . Eisen 113 n° 10,” 1993.
- [138] IQPA y AIQPA, “Propuestas eficaces de ahorro energético en la Industria de Procesos. Una aproximación,” 2015.
- [139] “Estudio de impacto ambiental del proyecto de reinicio de la actividad en la coquería de la Factoría de Arelormittal en Gijón (Asturias). Anexo 6: ‘Estudio de dispersión atmosférica de la Factoría de ArcelorMittal en Gijón (Asturias)’. Documento sometido a consulta pública en diciembre de 2016.,” 2016.
- [140] “Registro Estatal de Emisiones y Fuentes Contaminantes, PRTR-España, Ministerio para la Transición Ecológica.” https://prtr-es.es/informes/fichacomplejo.aspx?Id_Complejo=1737 (accessed Mar. 26, 2023).
- [141] B. Blocken, T. Stathopoulos, and J. Carmeliet, “CFD simulation of the atmospheric boundary layer: wall function problems,” *Atmos Environ*, vol. 41, no. 2, pp. 238–252, Jan. 2007, doi: 10.1016/J.ATMOSENV.2006.08.019.
- [142] J. Franke *et al.*, “‘Impact of Wind and Storms on City Life and Built Environment’ Working group 2-CFD techniques RECOMMENDATIONS ON THE USE OF CFD IN PREDICTING PEDESTRIAN WIND ENVIRONMENT,” 2004.
- [143] X. HUANG, Wenfeng; ZHANG, “Wind field simulation over complex terrain under different inflow wind directions,” *Wind and Structures*, vol. 28, no. 4, pp. 239–253, 2019.
- [144] J. Franke, *Best practice guideline for the CFD simulation of flows in the urban environment*. Meteorological Inst., 2007.
- [145] Y. Tominaga *et al.*, “AIJ guidelines for practical applications of CFD to pedestrian wind environment around buildings,” *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 96, no. 10–11, pp. 1749–1761, Oct. 2008, doi: 10.1016/J.JWEIA.2008.02.058.
- [146] S. J, “TerrainBlockMesher.” <https://github.com/jonasIWES/terrainBlockMesher.git> (accessed Jan. 12, 2022).
- [147] ANSYS, “ANSYS ICEM CFD Tutorial Manual,” 2018.
- [148] S. M. Salim, S. C. Cheah, and A. Chan, “Numerical simulation of dispersion in urban street canyons with avenue-like tree plantings: Comparison between RANS and LES,” *Build Environ*, vol. 46, no. 9, pp. 1735–1746, Sep. 2011, doi: 10.1016/j.buildenv.2011.01.032.

Referencias

- [149] L. W. Chew and L. K. Norford, "Pedestrian-level wind speed enhancement with void decks in three-dimensional urban street canyons," *Build Environ*, vol. 155, pp. 399–407, May 2019, doi: 10.1016/J.BUILDENV.2019.03.058.
- [150] C. Feng, M. Gu, and D. Zheng, "Numerical simulation of wind effects on super high-rise buildings considering wind veering with height based on CFD," *J Fluids Struct*, vol. 91, p. 102715, Nov. 2019, doi: 10.1016/J.JFLUIDSTRUCTS.2019.102715.
- [151] Y. Tominaga and T. Stathopoulos, "CFD simulations of near-field pollutant dispersion with different plume buoyancies," *Build Environ*, vol. 131, pp. 128–139, Mar. 2018, doi: 10.1016/J.BUILDENV.2018.01.008.
- [152] B. W. Yan, Q. S. Li, Y. C. He, and P. W. Chan, "Numerical simulation of topographic effects on wind flow fields over complex terrain", doi: 10.3850/978-981-07-8012-8.
- [153] T. Uchida and G. Li, "Comparison of RANS and LES in the Prediction of Airflow Field over Steep Complex Terrain," *Open Journal of Fluid Dynamics*, vol. 08, no. 03, pp. 286–307, Sep. 2018, doi: 10.4236/OJFD.2018.83018.
- [154] A. Makridis and J. Chick, "Validation of a CFD model of wind turbine wakes with terrain effects," *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 123, pp. 12–29, Dec. 2013, doi: 10.1016/J.JWEIA.2013.08.009.
- [155] M. Balogh, A. Parente, and C. Benocci, "RANS simulation of ABL flow over complex terrains applying an Enhanced k- ϵ model and wall function formulation: Implementation and comparison for fluent and OpenFOAM," *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 104–106, pp. 360–368, May 2012, doi: 10.1016/J.JWEIA.2012.02.023.
- [156] W. C. Radünz, J. M. L. Mattuella, and A. P. Petry, "Wind resource mapping and energy estimation in complex terrain: A framework based on field observations and computational fluid dynamics," *Renew Energy*, vol. 152, pp. 494–515, Jun. 2020, doi: 10.1016/J.RENENE.2020.01.014.
- [157] P. Gousseau, B. Blocken, T. Stathopoulos, and G. J. F. van Heijst, "Near-field pollutant dispersion in an actual urban area: Analysis of the mass transport mechanism by high-resolution Large Eddy Simulations," *Comput Fluids*, vol. 114, pp. 151–162, Jul. 2015, doi: 10.1016/J.COMPFLUID.2015.02.018.
- [158] N. Antoniou, H. Montazeri, M. Neophytou, and B. Blocken, "CFD simulation of urban microclimate: Validation using high-resolution field measurements," *Science of The Total Environment*, vol. 695, p. 133743, Dec. 2019, doi: 10.1016/J.SCITOTENV.2019.133743.

Referencias

- [159] A. Ricci, M. Burlando, M. P. Repetto, and B. Blocken, “Simulation of urban boundary and canopy layer flows in port areas induced by different marine boundary layer inflow conditions,” *Science of The Total Environment*, vol. 670, pp. 876–892, Jun. 2019, doi: 10.1016/J.SCITOTENV.2019.03.230.
- [160] ANSYS, “Fluent 2022 R1 User’s Guide,” 2022. https://ansyshelp.ansys.com/account/secured?returnurl=/Views/Secured/corp/v221/en/flu_ug/x1-2670007.4.1.html (accessed Jan. 12, 2022).
- [161] G. Triscone *et al.*, “Computational Fluid Dynamics as a tool to predict the air pollution dispersion in a neighborhood – a research project to improve the quality of life in cities,” *International Journal of Sustainable Development and Planning*, vol. 11, no. 4, pp. 546–557, Aug. 2016, doi: 10.2495/SDP-V11-N4-546-557.
- [162] S. Hong *et al.*, “CFD modelling of livestock odour dispersion over complex terrain, part I: Topographical modelling,” *Biosyst Eng*, vol. 108, no. 3, pp. 253–264, Mar. 2011, doi: 10.1016/J.BIOSYSTEMSENG.2010.12.009.
- [163] H. Foroutan, W. Tang, D. K. Heist, S. G. Perry, L. H. Brouwer, and E. M. Monbureau, “Numerical analysis of pollutant dispersion around elongated buildings: An embedded large eddy simulation approach,” *Atmos Environ*, vol. 187, pp. 117–130, Aug. 2018, doi: 10.1016/J.ATMOSENV.2018.05.053.
- [164] Q. Wang, W. Fang, R. de Richter, C. Peng, and T. Ming, “Effect of moving vehicles on pollutant dispersion in street canyon by using dynamic mesh updating method,” *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 187, pp. 15–25, Apr. 2019, doi: 10.1016/J.JWEIA.2019.01.014.
- [165] A.-W. Paper, “ANSYS Fluent Mosaic Technology Automatically Combines Disparate Meshes with Polyhedral Elements for Fast, Accurate Flow Resolution.”
- [166] S. Brusca, F. Famoso, R. Lanzafame, S. Mauro, M. Messina, and S. Strano, “PM10 Dispersion Modeling by Means of CFD 3D and Eulerian–Lagrangian Models: Analysis and Comparison with Experiments,” *Energy Procedia*, vol. 101, pp. 329–336, Nov. 2016, doi: 10.1016/J.EGYPRO.2016.11.042.
- [167] J. L. Santiago *et al.*, “CFD modelling of vegetation barrier effects on the reduction of traffic-related pollutant concentration in an avenue of Pamplona, Spain,” *Sustain Cities Soc*, vol. 48, p. 101559, Jul. 2019, doi: 10.1016/j.scs.2019.101559.
- [168] N. Wu, N. Xue, and X. Liu, “Research on the Influence of Complex Terrain on Atmospheric Dispersion After Accident,” Oct. 2018, doi: 10.1115/ICONE26-81378.

Referencias

- [169] D. M. Hargreaves and N. G. Wright, “On the use of the k - ϵ model in commercial CFD software to model the neutral atmospheric boundary layer,” *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 95, no. 5, pp. 355–369, May 2007, doi: 10.1016/J.JWEIA.2006.08.002.
- [170] T. Cebeci and P. Bradshaw, “Momentum transfer in boundary layers, Hemisphere Publ,” *Corp., Washington*, p. 194, 1977.
- [171] C. F. Colebrook and C. M. White, “Experiments with fluid friction in roughened pipes,” *Proc R Soc Lond A Math Phys Sci*, vol. 161, no. 906, pp. 367–381, Aug. 1937, doi: 10.1098/RSPA.1937.0150.
- [172] J. Wieringa, “Updating the Davenport roughness classification,” *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 41, no. 1–3, pp. 357–368, Oct. 1992, doi: 10.1016/0167-6105(92)90434-C.
- [173] Y. Tominaga and T. Stathopoulos, “Ten questions concerning modeling of near-field pollutant dispersion in the built environment,” *Build Environ*, vol. 105, pp. 390–402, Aug. 2016, doi: 10.1016/j.buildenv.2016.06.027.
- [174] Z. Xie and I. P. Castro, “LES and RANS for turbulent flow over arrays of wall-mounted obstacles,” *Flow Turbul Combust*, vol. 76, no. 3, pp. 291–312, Apr. 2006, doi: 10.1007/S10494-006-9018-6/METRICS.
- [175] N. G. Wright and G. J. Easom, “Non-linear k - ϵ turbulence model results for flow over a building at full-scale,” *Appl Math Model*, vol. 27, no. 12, pp. 1013–1033, Dec. 2003, doi: 10.1016/S0307-904X(03)00123-9.
- [176] S. M. Salim, R. Buccolieri, A. Chan, and S. Di Sabatino, “Numerical simulation of atmospheric pollutant dispersion in an urban street canyon: Comparison between RANS and LES,” *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 99, no. 2–3, pp. 103–113, Feb. 2011, doi: 10.1016/J.JWEIA.2010.12.002.
- [177] P. R. Spalart and S. R. Allmaras, “One-equation turbulence model for aerodynamic flows,” *Recherche aerospaciale*, no. 1, pp. 5–21, 1994, doi: 10.2514/6.1992-439.
- [178] V. Yakhot and S. A. Orszag, “Renormalization group analysis of turbulence. I. Basic theory,” *J Sci Comput*, vol. 1, no. 1, pp. 3–51, Mar. 1986, doi: 10.1007/BF01061452/METRICS.
- [179] F. R. Menter, “Eddy Viscosity Transport Equations and Their Relation to the k - ϵ Model,” *J Fluids Eng*, vol. 119, no. 4, pp. 876–884, Dec. 1997, doi: 10.1115/1.2819511.

Referencias

- [180] M. Lateb, C. Masson, T. Stathopoulos, and C. Bédard, “Numerical simulation of pollutant dispersion around a building complex,” *Build Environ*, vol. 45, no. 8, pp. 1788–1798, Aug. 2010, doi: 10.1016/j.buildenv.2010.02.006.
- [181] Y. Du, C. M. Mak, and Z. Ai, “Modelling of pedestrian level wind environment on a high-quality mesh: A case study for the HKPolyU campus,” *Environmental Modelling and Software*, vol. 103, 2018, doi: 10.1016/j.envsoft.2018.02.016.
- [182] C. Lin, R. Ooka, H. Kikumoto, T. Sato, and M. Arai, “CFD simulations on high-buoyancy gas dispersion in the wake of an isolated cubic building using steady RANS model and LES,” *Build Environ*, vol. 188, 2021, doi: 10.1016/j.buildenv.2020.107478.

Anexos

Anexo I. Prueba de mallado en ANSYS ICEM

Una de las estrategias más típicas y efectivas para dividir el dominio geométrico en celdas hexaédricas es el denominado mallado por bloques. El módulo ICEM CFD permite realizar este tipo de mallado con un alto nivel de control y personalización por parte del usuario. Por este motivo, este software fue uno de los elegidos para llevar a cabo la división del dominio en celdas en lo que resultó ser el primer intento de obtención de un mallado adecuado para el modelo.

En el método de mallado por bloques, se define una estructura virtual cúbica o de bloque pensada para abarcar total o parcialmente el dominio geométrico que se desea mallar. Los bloques están formados por vértices, bordes y caras para los cuales se definen relaciones de asociación con los puntos, líneas y superficies, respectivamente, que componen el modelo geométrico. El objetivo es adaptar la forma del bloque virtual a la de la geometría para definir en el primero los parámetros de tamaño y configuración de malla. En este método, por tanto, el mallado no se realiza sobre la geometría, sino sobre el bloque virtual, lo que permite un grado de personalización y control de las celdas elevado. Para poder adaptar la forma de los bloques a las distintas entidades geométricas de interés que componen el modelo, se realizan divisiones en su estructura, así como la supresión de algunos de los bloques divididos resultantes. La división de los bloques no se realiza únicamente para la adaptación geométrica sino también para permitir refinamientos de la malla en zonas concretas.

El primer paso ha consistido en la incorporación del modelo geométrico en ICEM, que se ha realizado mediante la importación del fichero de geometría en formato *.iges. Una vez incorporada al programa, la geometría se muestra como un conjunto de puntos, líneas y superficies que se pueden agrupar libremente en partes definidas por el usuario. Es importante destacar que ICEM no considera la existencia de entidades de volumen en el modelo geométrico, sino que los buscará mediante la existencia de regiones delimitadas espacialmente por superficies (en modelos tridimensionales) o por líneas (en modelos bidimensionales).

Para facilitar el manejo del modelo durante el proceso de mallado es recomendable agrupar las entidades geométricas mediante una serie de partes que representen, como mínimo, las superficies sobre las que se definen las condiciones de contorno del modelo. Además de estas categorías fundamentales, se definen también otras partes que incluyen entidades geométricas de puntos y líneas con el objetivo de facilitar la acción de ocultar y visibilizar partes del modelo durante el proceso de asociación. En la Figura 89, se puede observar las distintas partes definidas para el modelo geométrico. Además de esta acción es necesario definir el material del proyecto, que se establecerá mediante un punto colocado en un volumen finito o delimitado espacialmente por superficies.

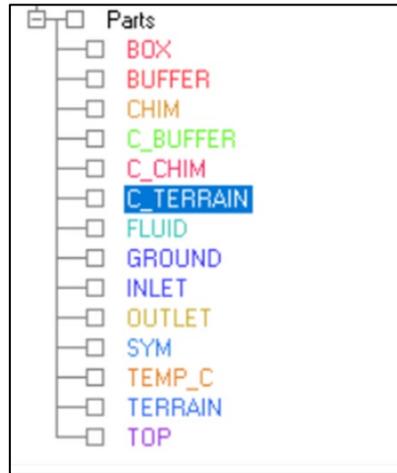


Figura 89. Separación del modelo en partes para gestión del proceso de mallado en ICEM.

Antes de comenzar con el proceso de bloques y mallado se ha separado el modelo geométrico según sus partes interior y exterior con el objetivo de mallar cada una de forma separada. El objetivo de esta acción es facilitar el manejo del modelo durante el mallado, especialmente en lo que respecta al proceso de división de bloques, así como generar entre ambos dominios un mallado de tipo no conforme, que se explicará más adelante. De esta forma, cada parte del dominio se trabajará de forma independiente, empezando por el dominio interior.

El siguiente paso consiste en la generación del bloque inicial que cubre todo el dominio geométrico interior. Posteriormente se van realizando las divisiones necesarias para definir zonas de refinamiento de malla y para adaptarse a la geometría de la chimenea existente en el centro de la superficie del terreno, de forma que el esquema de divisiones resultantes se asemeja a una cruz. En la Figura 90 se muestra el bloque original (identificable por poseer ejes verdes) y el resultante tras aplicar las divisiones necesarias para conseguir una subdivisión central de dimensiones adecuadas a la chimenea. Los ejes verdes del bloque original indican que han sido asociados con líneas del modelo geométrico.

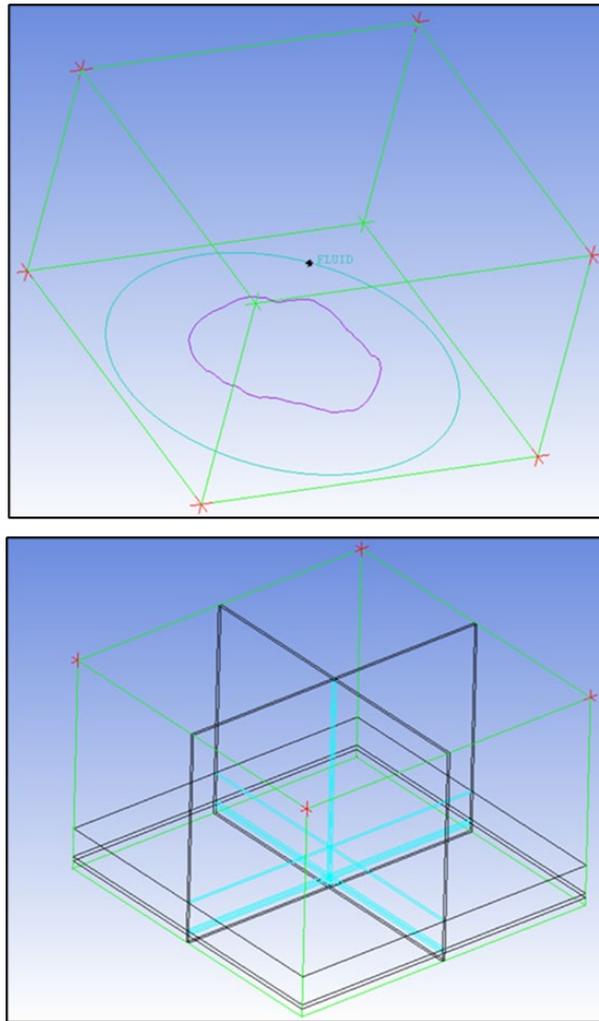


Figura 90. Bloque original (arriba) y divisiones practicadas para lograr la adaptación a la geometría de la chimenea (abajo).

En el mallado hexaédrico por bloques, es necesario prestar atención a la captura de la curvatura de determinados elementos del dominio, especialmente en el caso de la sección de la chimenea o salida de los gases. Para adaptar la malla y obtener unos parámetros de calidad satisfactorios se suele recurrir a una estrategia particular de división de bloques. Se parte de una subdivisión de bloque reservada para la geometría de la chimenea, tal y como se ve en la Figura 91. A continuación, se realiza una división de dicho bloque en 5 volúmenes, consistentes en una nueva sección rectangular de menor tamaño ubicada en el centro del rectángulo original, tal y como se puede observar en la Figura 92. Los vértices de ambos rectángulos se encuentran unidos entre sí uno a uno.

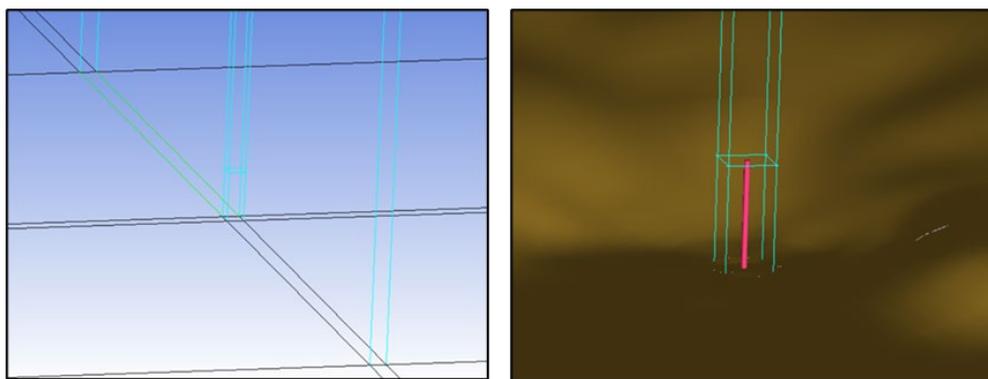


Figura 91. Subdivisión de bloque reservado al cuerpo de la chimenea.

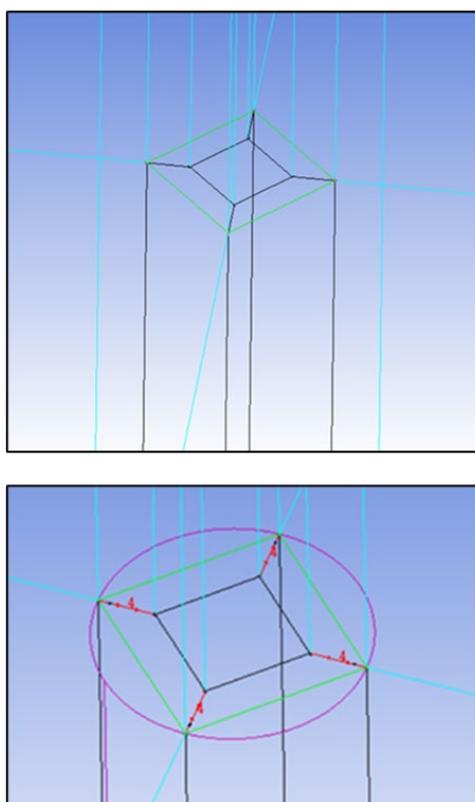


Figura 92. Estrategia de división de bloques para captar la geometría de la chimenea.

Tras esta división, las líneas que corresponden al contorno del cuadrado o rectángulo exterior se asocian al perímetro circular de la chimenea tal y se posicionan los vértices de forma que los ángulos resultantes se aproximen a 45° (para asegurar la mejor calidad). El resultado se puede ver en las imágenes de la Figura 93.

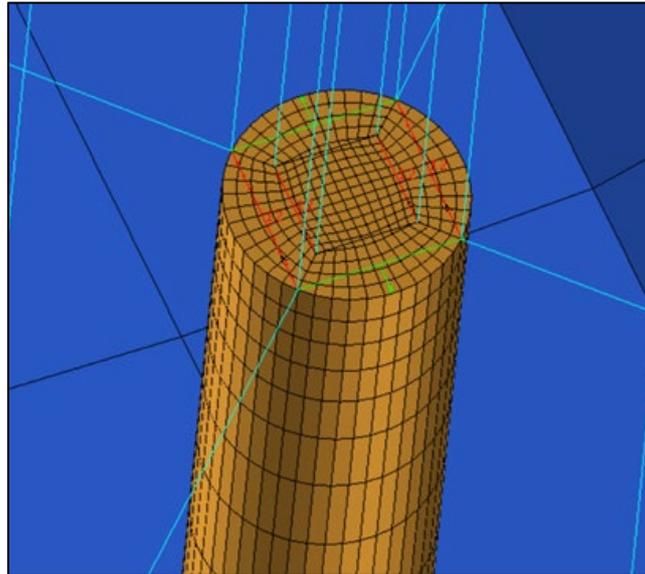


Figura 93. Mallado obtenido en la chimenea con estrategia de división descrita.

Este procedimiento de división de bloques utilizado para capturar la curvatura ha sido utilizado también para permitir una progresión de tamaño adecuada entre las celdas situadas sobre el terreno (más grandes) y las celdas del cuerpo y sección de la chimenea (más pequeñas). Como resultado, este procedimiento ha sido implementado doblemente con dos divisiones consecutivas, tal y como se observa en la Figura 94

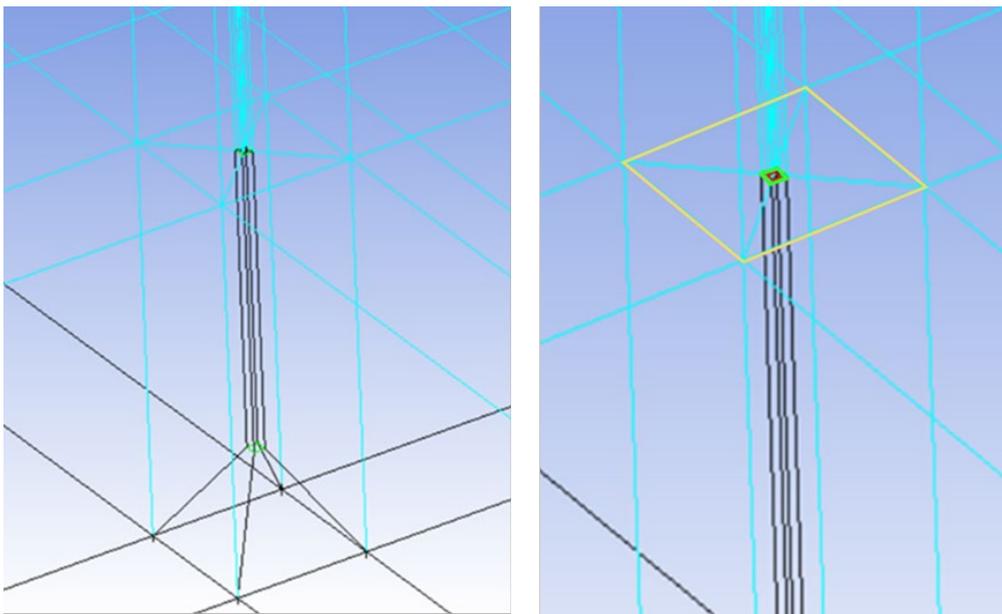


Figura 94. Divisiones consecutivas de transición.

. En esta última se puede observar un bloque o rectángulo de referencia (verde) del que nace una división hacia el interior (rojo) para capturar la curvatura y una división hacia afuera (amarillo) para

permitir la progresión de tamaños de las celdas. Por otro lado, en la Figura 95 se ha representado la asignación de tamaños a los ejes y progresiones.

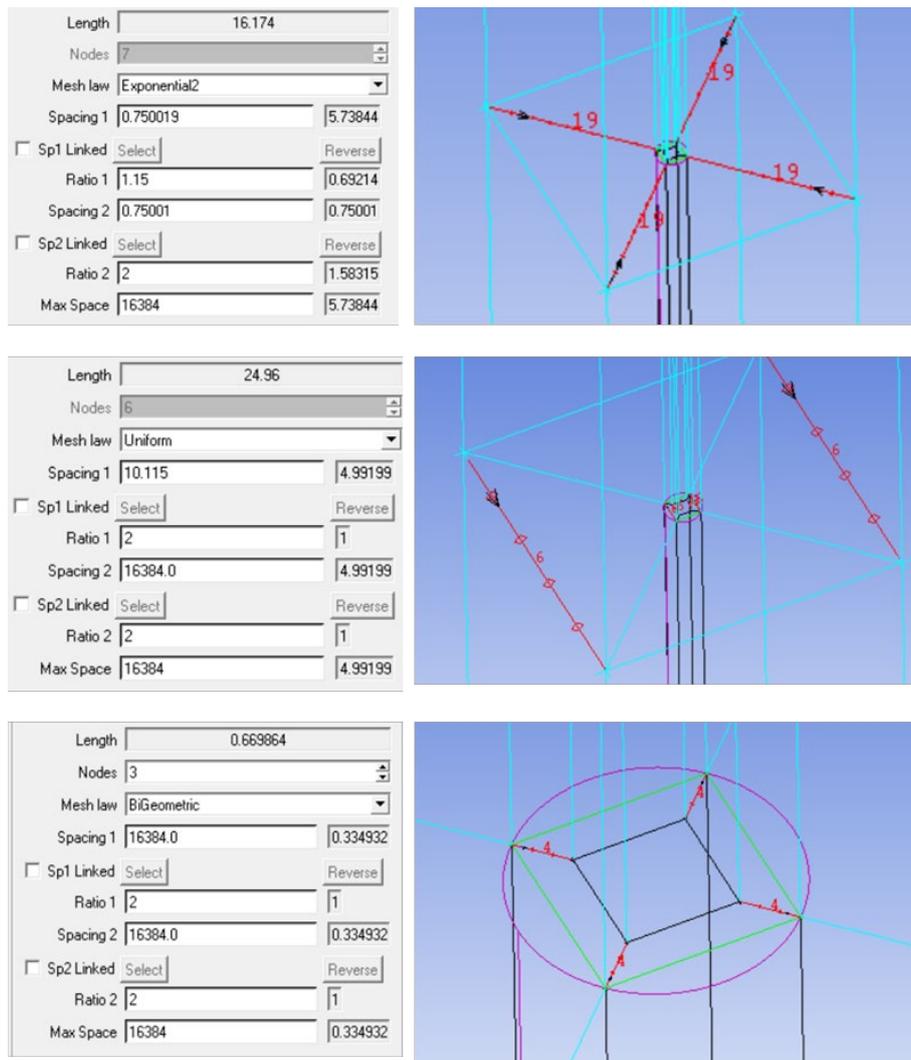


Figura 95. Asignación de tamaños y tasas de progresión a los ejes de los bloques.

El mallado obtenido sobre la sección de la chimenea se mantendrá en altura como si de una extrusión se tratase hasta el nivel que decida el usuario. Mantener esta división de celdas hasta la parte más del dominio no es recomendable por dos motivos. En primer lugar, se está conservando un refinamiento de la malla a lo largo de toda la altura, llegando a regiones donde no es necesario y aumenta considerablemente el número de celdas de forma injustificada. En segundo lugar, las celdas deben crecer en altura (a lo largo del eje z) a medida que se alejan de la chimenea alcanzando valores cercanos a los 50 metros en el límite superior del dominio. Si se mantiene el mallado de la sección de salida de gases a lo largo de toda la columna de aire presente sobre la chimenea al llegar a las capas más altas se tendrán hexaedros con tamaños muy pequeños en dos de sus dimensiones y una longitud muy superior en la tercera dimensión (eje z). Por tanto, se estarían generando celdas con una relación de aspecto muy elevada e inadmisibles para Fluent. Si se mantiene el mallado de superficie de salida de

los gases extruyéndolo a lo largo de toda la columna de aire existente sobre la chimenea se llegará a una situación en la que las celdas obtenidas tendrán una dimensión de altura (dimensión en el eje z) muy superior a las dimensiones de la base (dimensiones en los ejes x e y), lo que provoca una relación de aspecto de celda muy elevada e inadmisibles para Fluent. Para evitar esto, habría que impedir el crecimiento del tamaño de celda en altura manteniendo una misma longitud, sin embargo, esto daría lugar a un número de celdas excesivo e innecesario. Es necesario, por tanto, interrumpir la extrusión del mallado de la sección de la chimenea en algún punto generando una transición entre dicho mallado fino hacia uno de cuadriláteros de mayor tamaño y en el que ya no existan las anteriores divisiones de curvatura y proximidad. Se elige un punto a una altura de 100 m para asegurar un espacio suficiente de presencia de celdas de pequeño tamaño para capturar bien la evolución de la pluma y se divide el bloque central (rojo), imponiendo así un límite superior. A continuación, se realiza lo mismo con el bloque interno (color azul), separándolo una distancia que permita obtener un ángulo de aproximadamente 45° en las líneas que unen los vértices de los bloques. Esta operación se repite con ambos bloques, tanto los de curvatura como de proximidad. De esta forma, se consigue una transición del mallado refinado a uno más grueso, tal y como refleja la Figura 96.

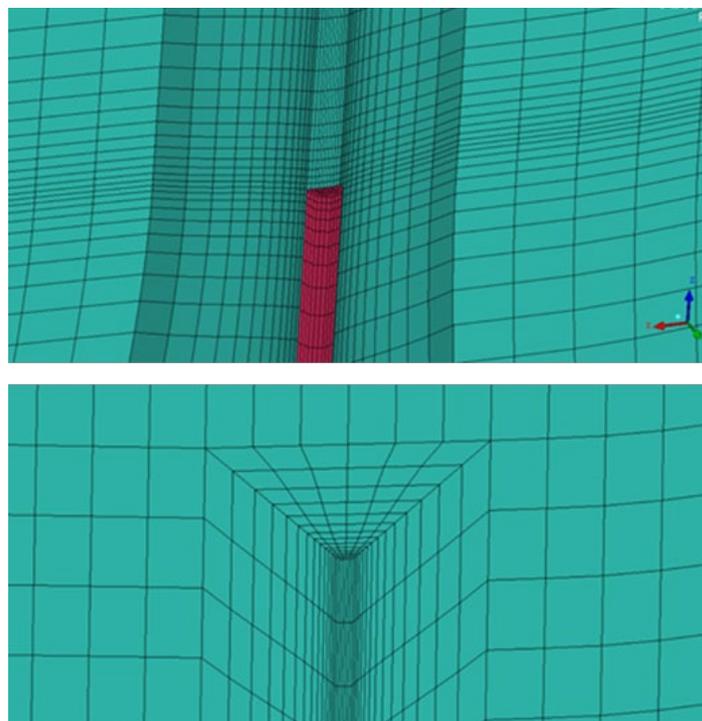


Figura 96. Transición entre tamaños de celda en la zona de la chimenea (imagen superior) y en la columna de aire situada encima de la sección de salida de la misma (imagen inferior).

El mallado del volumen restante del modelo es directo, sin necesidad de realizar más divisiones o asociaciones. La única precaución a tener en cuenta es la dirección de los ejes de división interna en caso de que estos últimos corran el riesgo de intersectar algún punto del terreno, ya que esta situación puede dar lugar a celdas con un alto nivel de asimetría y ángulos agudos (*skewness*). La Figura 97 refleja

esta situación. Para evitar esta intersección en los puntos del terreno de mayor altitud, se puede desplazar los vértices de los bloques para inclinar los ejes de forma que eviten cortarse con el terreno, tal y como se observa en la Figura 98. En la Figura 99 se puede ver el resultado del mallado tras esta última acción, en un corte vertical que pasa por la chimenea, mientras que la Figura 100 muestra el aspecto de las celdas sobre la superficie del terreno. Por su parte, Con esta acción se ha completado el mallado de la parte interior del dominio.

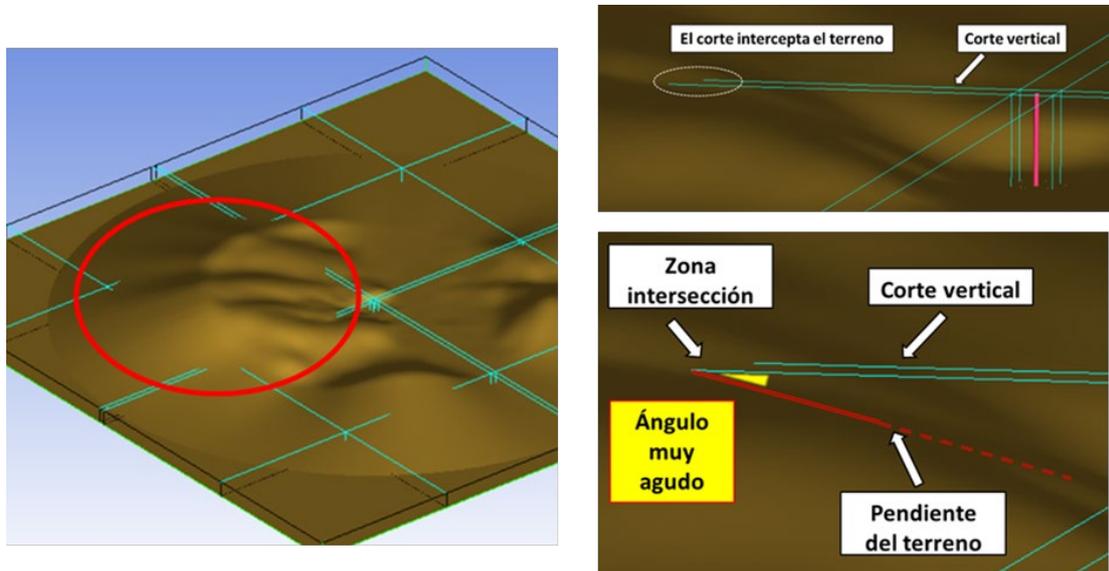


Figura 97. Problema de intersección de ejes de división interna con el terreno.

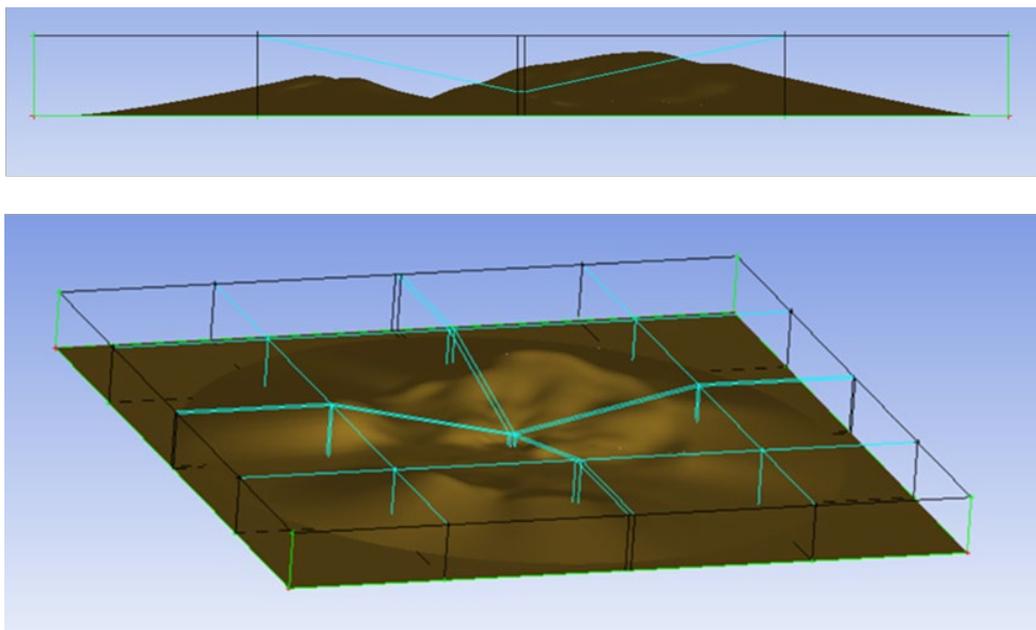


Figura 98. Reorganización de vértices para evitar intersección de ejes con el terreno.

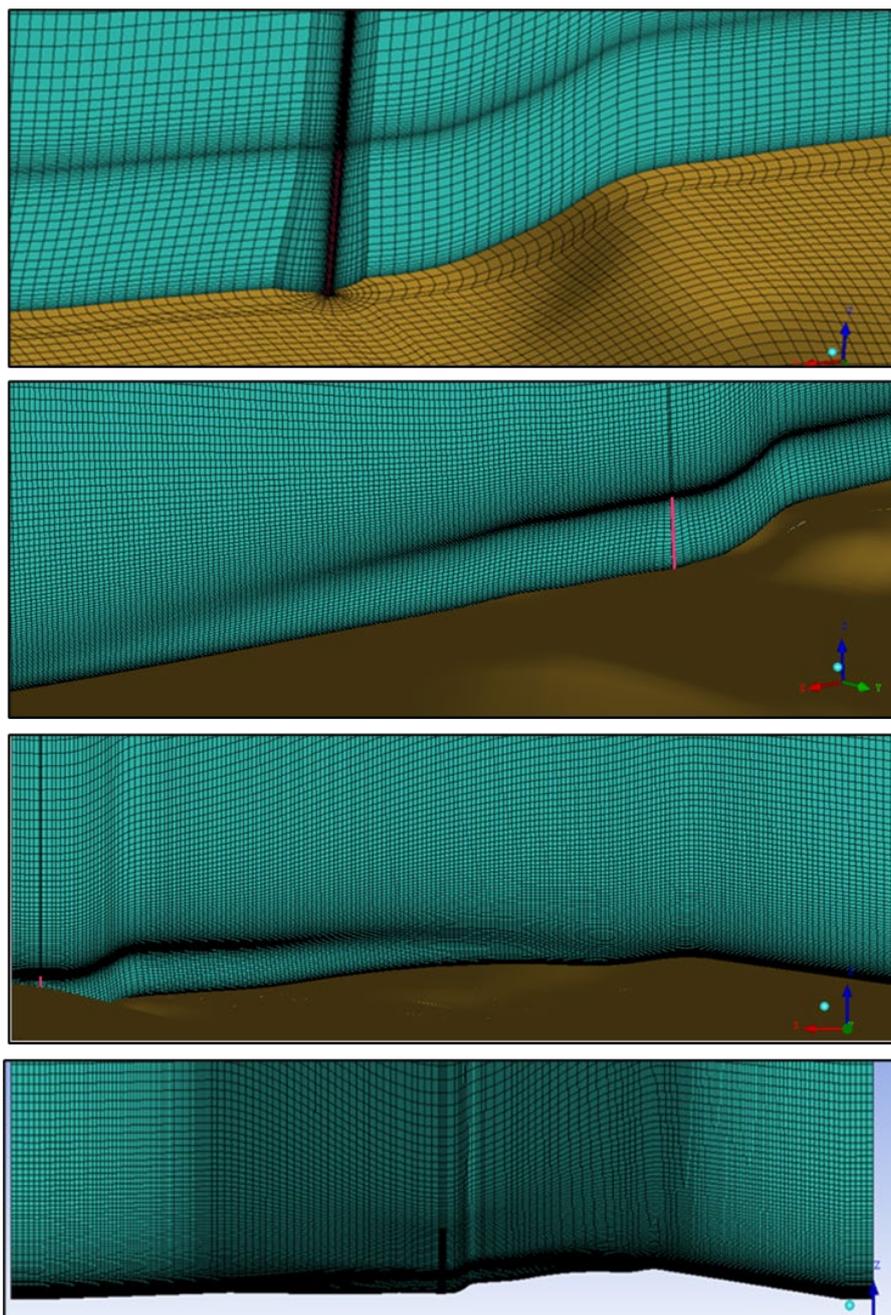


Figura 99. Corte vertical del mallado a la altura de la fuente emisora en distintas perspectivas.

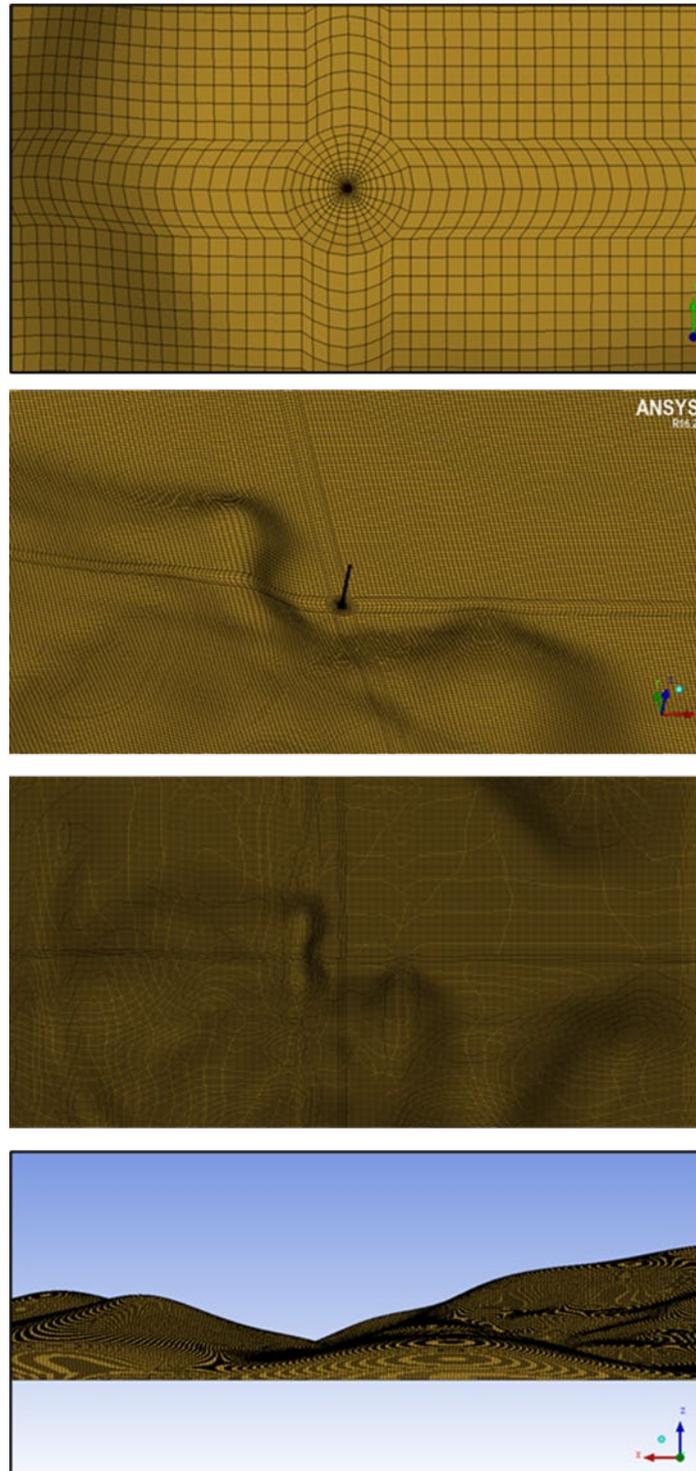


Figura 100. Capturas del mallado de la superficie del terreno.

A continuación, se realizó el mallado del dominio exterior, correspondiente al dominio computacional vacío. Con el objetivo de reducir el número de celdas del modelo se ha optado por generar una interfaz de mallado tipo no-conforme entre los dominios interior y exterior. En el mallado de tipo no conforme existe una frontera o interfaz que divide dos regiones de tal forma que

las celdas presentes a ambos lados de la misma no comparten la posición de sus nodos, tal y como se puede observar en la Figura 101.

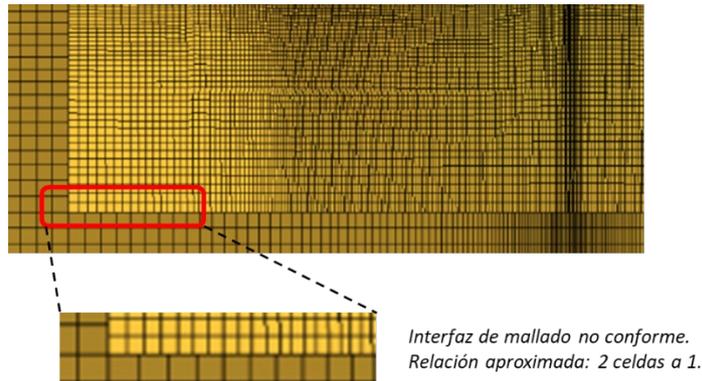


Figura 101. Detalle de interfaz no conforme.

En este punto del mallado, los valores numéricos se transmiten a las celdas contiguas por medio de interpolación, lo que tiene asociado error numérico. Sin embargo, al situarse esta interfaz en la parte del dominio computacional vacío donde no se esperan fuertes gradientes en las variables del flujo que a esas alturas ya debe estar totalmente desarrollado los errores introducidos no tienen por qué ser significativos. En la Figura 102 se observa el mallado conjunto del dominio exterior e interior visto en planta.

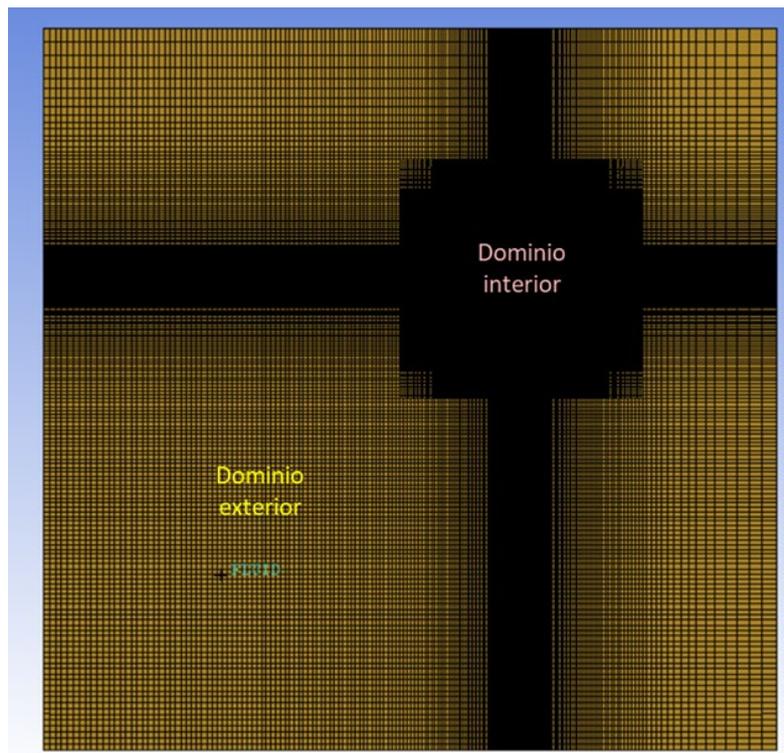


Figura 102. Mallado conjunto del modelo completo en planta, incluyendo dominios interior y exterior.

El número total de celdas obtenido es de 34 millones, de las cuales 30 millones corresponden al dominio interior y 4 millones al exterior. El tamaño máximo de celda en el dominio interior es de 7.5 m, mientras que en el área específica del terreno es de como máximo 5 m. El tamaño de las celdas en altura se ha representado en la Figura 103. En el dominio exterior la malla alcanza un tamaño máximo de 25 m.

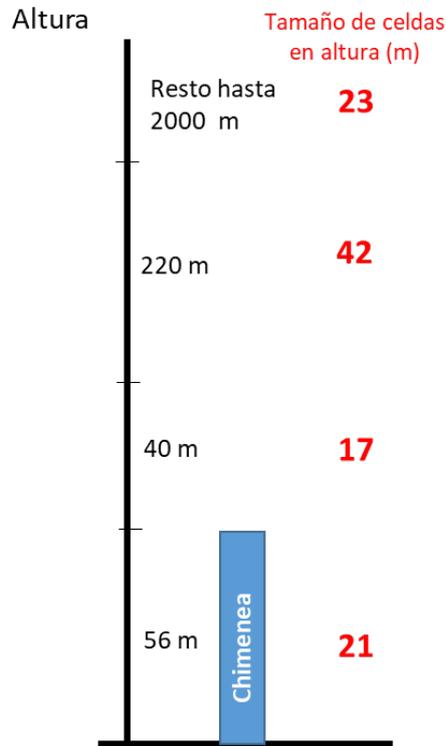


Figura 103. Distribución en altura de los tamaños de celda sobre el eje z.

Por último, los parámetros de calidad de malla son satisfactorios con un indicador de calidad mínimo de 0.55, un indicador de asimetría mínimo de 0.45 y una relación de aspecto máxima de 31.6, tal y como se muestra en la Figura 104.

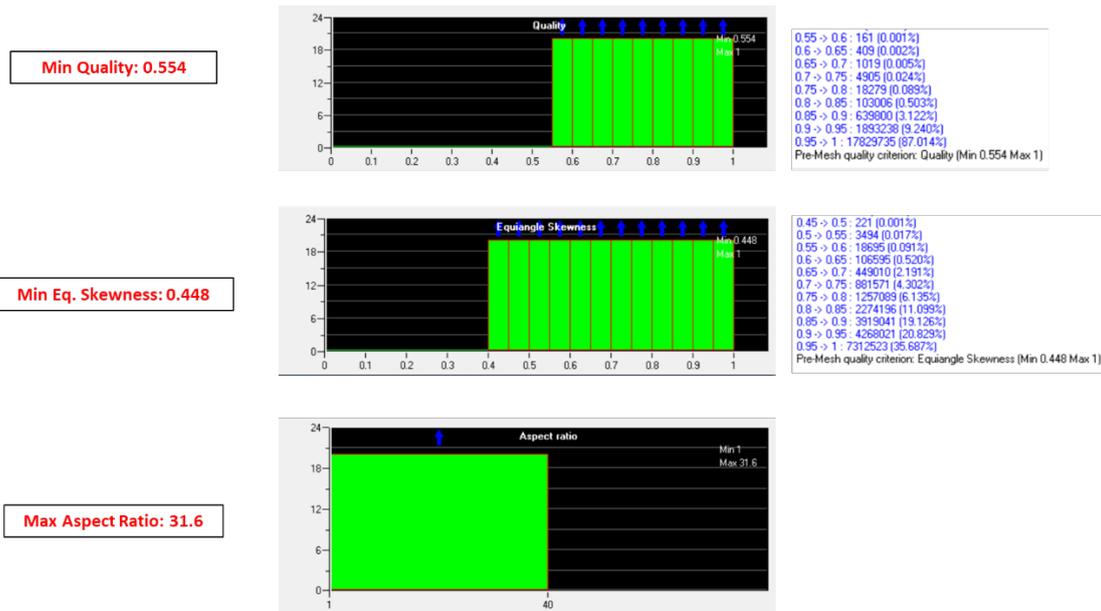


Figura 104. Indicadores de calidad de malla. Los valores óptimos de los indicadores quality y skewness son 1 en ambos casos. El valor máximo admisible de aspecto ratio para Fluent es 40.

Tal y como se explicó al inicio de la sección, este mallado se realizó para un escenario en el que solo está presente la geometría de la chimenea, por lo que sería necesario repetir este procedimiento para los múltiples edificios y obstáculos que pudieran existir en el modelo. Sin embargo, a la vista de la descripción del procedimiento es evidente que esta tarea se vuelve muy complicada, dado que el número de divisiones de los bloques puede alcanzar un número difícilmente manejable. Además, el esfuerzo manual y tiempo empleado en generar este mallado ha sido muy elevado y muy propenso a errores en el proceso de introducción de datos en el programa, por lo que no resulta fácil la generación de sucesivas mallas en caso de cambios de geometría.

Además, se ha observado que la presencia de un número superior de superficies verticales en el modelo (las que resultarían de añadir las geometrías de los edificios) tienden a desestabilizar las proyecciones de los ejes de los bloques, dando lugar a complicaciones en el mallado difíciles de resolver. Por todos estos motivos, esta metodología se reserva únicamente para los casos de estudio que incluyan sólo el estudio del terreno (siempre y cuando no incluya pendientes de elevada verticalidad) y, a lo sumo, la incorporación adicional de la geometría de un foco emisor.

Anexo II. Publicaciones en revistas y congresos.

Se adjuntan a continuación dos publicaciones realizadas en las revistas Sustainability y Processes, así como dos comunicaciones realizadas en un congreso. Todas ellas realizadas en el marco de la tesis doctoral.

Air pollution assessment for regulatory purposes: a CFD approach design

ANTUÑA-YUDEGO E.^{1*}, FERNÁNDEZ-PACHECO V.M.², SUÁREZ-LÓPEZ M.J.³, ÁLVAREZ-ÁLVAREZ E.⁴ and CARÚS-CANDÁS J.L.⁵

^{1, 5} TSK, Ada Byron, 220, 33203 (Gijón), Asturias, Spain.

^{2, 3, 4} Energy Department, University of Oviedo, Wifredo Ricart s/n, 33204 (Gijón), Asturias, Spain.

*corresponding author:

e-mail: elena.antuna@grupotsk.com

Abstract. In a context of atmospheric pollution levels on the rise, there is a growing interest in the use of pollutant dispersion tools, especially for regulatory purposes involving industrial activities. Environmental organizations from different countries legislate and encourage the use of different types of models capable to provide fast and robust results in many scenarios. However, these models are not suitable for certain complex conditions of pollutant dispersion, where CFD tools offer a powerful alternative to consider, despite their higher demands in terms of time and resources. In order to run accurate and reliable CFD simulations, some important steps must be carefully considered, such as the definition of an appropriate computational domain. As for the concerned scenario, the pollution impact assessment of industrial facilities, building such a geometrical domain poses specific challenges that are necessary to address. The present work identifies a case study of pollutant dispersion from an industrial source for which the use of CFD models is advised. A contribution is made towards the establishment of a systematic methodology for the development of CFD computational domains in the field of pollution impact assessment of industrial facilities.

Keywords: pollutant dispersion; CFD; topography; computational domain.

1. Introduction

Atmospheric pollution has become a source of major concern in society and in the political scene, a circumstance reflected in increasingly stricter environmental regulations. As a consequence, the industrial sector is being greatly affected by this situation, as the requirements to obtain or renew the prescriptive gas emissions licenses are becoming tighter. In this scenario, there is a growing interest in the use of pollutant dispersion models as tools to perform the pollution impact assessment required by the different national environmental organizations for the license applications. Nowadays, there is a great variety of models available to carry out these studies, many of them widely recognized and validated through decades. In some cases, the national regulatory bodies recommend or even impose the use of a specific

modelling tool to comply with this requirement. This is the case of the United States Environmental Protection Agency (US EPA), which accounts for resources like AERMOD or CTDMPLUS (Haq et al. 2019) in its list of preferred models, or some European countries like the United Kingdom with its ADMS model or Germany with AUSTAL 2020 (Schenk 2020; Stocker et al. 2012). The above examples, which fall within different categories (Gaussian, Eulerian, puff models, etc.), have the advantage of being relatively simple and fast in providing results and have evolved during the last years to include more powerful functionalities. Although these models yield satisfactory results in most cases, there are some conditions in which they are not expected to perform appropriately due to intrinsic constraints. Such is the case of scenarios where the dispersion is heavily influenced by turbulence, like a steep topography involving complex interactions among several terrain features (Mills et al. 1988), as well as cities and other structured built-up and industrial areas (Hajra, Stathopoulos, and Bahloul 2011; Lien et al. 2006). The dispersion in regions where sources are located in the close proximity of these obstacles constitutes also an important limitation (Holmes and Morawska 2006), especially if the heights of the chimneys and the surrounding obstacles are comparable, which greatly affects the plume behaviour (Tominaga and Stathopoulos 2016). A typical case where such conditions can be found is that of an industrial combustion facility located in a closed valley, in order to benefit from the proximity to rivers and water reservoirs for its cooling system.

For these more challenging cases, Computational Fluid Dynamics (CFD) models constitute a powerful alternative. They provide complete analysis of fluid flow based on conservation of mass and momentum by resolving the Navier-Stokes equation using finite volume methods. Numerical simulations with CFD are very flexible and provide results of flow features at every point in space (Moonen et al. 2012). On the contrary, the high demand of computational resources entailed by these tools, as well as the greater efforts required to set up the model and run the simulations, is well known. In this sense, one of the critical errors in CFD results arises from numerical simulation

aspects such as the computational domain design and size (Frank et al. 2007), being one of the key steps in the development of the model. However, despite these shortcomings, for complex conditions and scenarios like the ones exposed, the use of CFD models is justified and necessary in order to achieve satisfactory results in the assessment of pollutant dispersion. This way, several efforts have been made during the last decades to improve the accuracy and reliability of CFD models, addressing their weaknesses and uncertainties so as to provide potential solutions. As regards of wind flow simulations over natural terrains, the use of CFD tools has substantially increased in the last years, especially for the quantification of the energy potential in new wind farm projects (Uchida and Li 2018). Other outstanding applications were the positioning of wind towers (Ha et al. 2018) or the estimation of local wind conditions for operating purposes (Blocken et al. 2015). Urban physics and their link to pollutant dispersion have also been a recurrent topic in the literature lately. According to this, guidelines and best practices have been released for the definition of the computational domain and other key parameters of the CFD models in these applications. On the contrary, few studies account for both the effect of the urban canopy and the terrain topography on the flow characteristics and pollutant dispersion simultaneously. The few examples tackling this challenge either deal with very simple topography (Zhao et al. 2019) or apply a multi-scale approach (Mochida et al. 2011). In the latter research, terrain effects are firstly simulated at a large resolution by means of a mesoscale model, and the outputs are then imposed as the input boundary conditions for a separate microscale urban simulation. However, there are almost no studies jointly integrating terrain effects and urban physics into a single modelling framework.

A possible explanation for the lack of studies undertaking this approach is the complexity behind the successful integration of these two elements (terrain and urban features) in a unique model. In addition, there are no specific guidelines for the implementation of this combined setup, and it is not clear whether the existing ones dedicated to urban scenarios can be directly applied to this approach, as it poses its own specific challenges. Therefore, it is necessary to address the definition of a computational domain which jointly accounts for terrain and urban features in order to establish a systematic methodology for this purpose.

In the present work, a case study is identified whose characteristics advice against the use of operational models for the assessment of pollutant dispersion from a chimney, and a CFD approach was chosen instead. More specifically, this research is focused on the development of the geometrical or computational domain, contributing to the establishment and application of some procedural guidelines according to the state-of-the-art. This effort aims at overcoming one of the barriers to the application of CFD models to industrial case studies, a growing need for regulatory purposes.

2. Methodology

2.1. Site location.

The case study selected for this research is a chemical industrial plant located in a mining valley in the Principality of Asturias, a province in the North of Spain. Figure 1 shows an image of the facility where the highly mountainous character of the surrounding environment and its proximity to the plant is evident. The exhaust gases of the process are released from a prominent chimney located in the geographic coordinates 43.288439, -5.674461. Information on its dimensions and other parameters required for the modelling are publicly available through the document of its integrated environmental authorization.

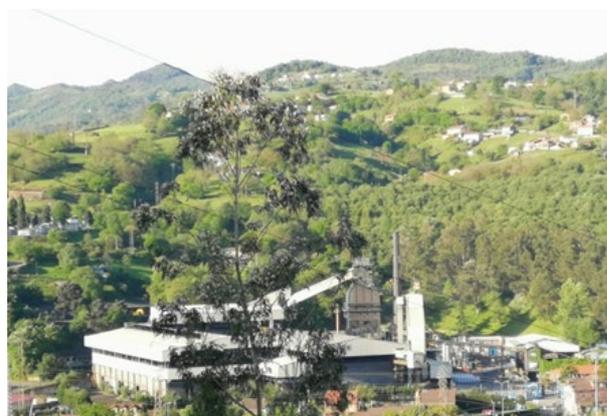


Figure 1. An image of the chemical plant of study.

2.2. Data gathering.

In order to generate the terrain surface for the modelling area in the chosen location, altimetric information has been retrieved from the National Centre for Geographic Information (CNIG) in Spain. Digital terrain models (DTM) for the national territory are available in different grid spacing. However, the use of LIDAR 3D point clouds has been preferred for this work instead, given its flexibility to produce elevation models of any desired spatial resolution and to model the contour shape. This way, the terrain surface has been produced at a chosen spatial resolution of 30 m. The terrain area selected for the analysis corresponds to a circular region with a 750 m radius, the chimney of the industrial facility being located at its geometric center.

2.3. Computational domain design.

The adoption of a circular shape for the terrain domain makes it especially suitable to deal with the simulation of variable wind incoming directions. The chimney has been incorporated as a cylindrical body placed at the center of the circular region. Likewise, the buildings of interest have also been integrated as rectangular parallelepipeds in the appropriate positions. The entire process of the terrain surface generation has been developed in the commercial computer-aided design software Autocad Civil 3D. However, it is worth noting that this whole process can be alternatively undertaken by means of open-source tools. Figure 2 shows the aspect of the terrain surface, with the surface and buildings.

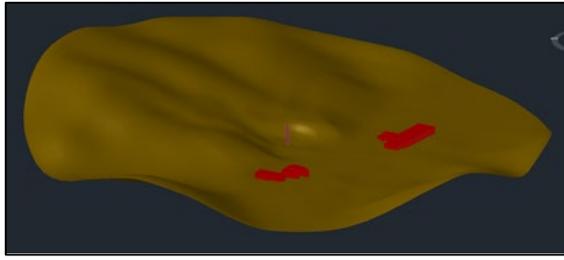


Figure 2. Terrain surface obtained.

Another key point in the design of the computational domain is the integration of empty areas surrounding the model to ensure that the inlet flow reaches a state of equilibrium before approaching the terrain and fully develops once it passes over it, out of its disturbance area. However, the coupling of these flat surfaces to the terrain portion is not straightforward given its irregular outer contour, which is highly variable in altitude. Therefore, an appropriate transition zone should be established to uniformly connect both domains. One of the studies that dealt with this issue previously was (Huang, Wenfeng; Zhang 2019), where a procedure was described to smoothly link a mountainous terrain area to a flat domain, while maintaining the circular shape throughout the new transitional surface. On the other hand, (An et al. 2020) analyzed the potential of the transitional zones to distort the vertical wind profile before it reaches the terrain if the former are improperly designed. From the analysis, it was concluded that transitional areas with inclinations beyond 30° could produce unsatisfactory results. According to this, the transitional zone has been created maintaining the circular shape and limiting the slope to a maximum value of 18° degrees at any point of the surface. This condition has been accomplished by adjusting the circular base radius of the transitional surface and the height difference between the maximum elevation point of the outer terrain contour and the elevation at which the flat domain bottom is positioned. The result is a 1400 m radius base for the transitional surface and the positioning of the flat bottom at a vertical distance of 205 m from the highest point of the terrain contour. Figure 3 shows the dimensions and composition of this transitional region. Then, the outer limits of the domain have been set and incorporated to the geometry, as shown by Figure 4.

Finally, it is important to locate the study region far enough from the model boundaries in order to avoid the flow contraction and subsequent artificial acceleration. The outer limits of the computational domain can be defined following the distance guidelines given by (Frank et al. 2007).

2.3. Domain implementation to CFD model.

After the computational domain, an appropriate mesh should be obtained prior to its integration to the solver module. Then, the boundary conditions are set and the turbulence and species transport models should be carefully selected. Once completed, the whole CFD model will be validated according to two different mechanisms. The first one relies on the use of available databases that provide airflow quantities and pollution concentrations measurements allowing for a quantitative validation. The

second mechanisms will involve the development of a wind tunnel with special measurement techniques for the characterization of flow pathlines and trends, which will eventually lead to a qualitative characterization.

3. Results.

A preliminary simulation has been carried out to show the robustness of the model design proposed. The objective was to verify that the geometric domain supports the generation of a mesh, simply and without excessive efforts, capable of meeting the convergence criteria in a simulation. Figure 5 shows the results for a benzene release under neutral atmospheric conditions and north wind direction at a speed of 6 m/s.

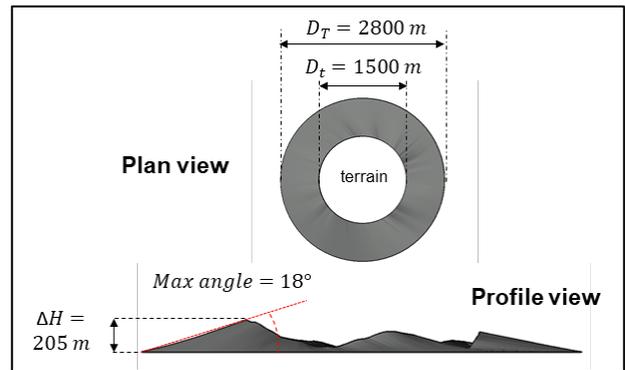


Figure 3. Transitional surface dimensions.

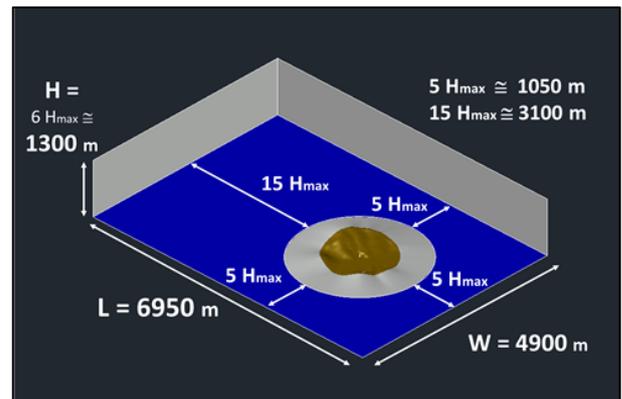


Figure 4. Computational domain dimensions.

4. Conclusions.

When it comes to the pollution evaluation impact of an industrial facility, CFD models represent a powerful alternative for those cases studies where more widespread and faster models cannot perform appropriately. However, the application of CFD tools for regulatory purposes still has to overcome some barriers related to the uncertainties and typical errors associated to this approach. One important step in the development of a CFD model which is subject to improvements is the definition of the computational model. A case study of pollutant dispersion from an industrial chimney has been tackled through a CFD approach in the present work. The research is focused on the development of a computational domain that jointly

accounts for terrain and urban features. For that purpose, the study targeted the establishment and application of different procedural guidelines according to the state-of-the-art. The ultimate purpose of this research is the contribution to the establishment of a systematic methodology for the development of CFD computational domains for pollution regulatory purposes in the industrial field.

Acknowledgements

This research includes actions funded by the *Agencia Estatal de Investigación* (AEI) of Spain, reference DI-17-09630/AEI

References

- An, Karl, Sze Ming Wong, Jimmy Chi Hung Fung, and Edward Ng. 2020. "Revisit of Prevailing Practice Guidelines and Investigation of Topographical Treatment Techniques in CFD-Based Air Ventilation Assessments." *Building and Environment* 169:106580.
- Blocken, Bert, Arne van der Hout, Johan Dekker, and Otto Weiler. 2015. "CFD Simulation of Wind Flow over Natural Complex Terrain: Case Study with Validation by Field Measurements for Ria de Ferrol, Galicia, Spain." *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics* 147:43–57.
- Frank, J., A. Hellsten, H. Schlünzen, and B. Carissimo. 2007. "Best Practice Guideline for the CFD Simulation of Flows in the Urban Environment. COST Action 732." *Quality Assurance and Improvement of Meteorological Models. University of Hamburg, Meteorological Institute, Center of Marine and Atmospheric Sciences.*
- Ha, Taehwan, In bok Lee, Kyeong seok Kwon, and Seung Jae Lee. 2018. "Development of a Micro-Scale CFD Model to Predict Wind Environment on Mountainous Terrain." *Computers and Electronics in Agriculture* 149:110–20.
- Hajra, B., T. Stathopoulos, and A. Bahloul. 2011. "The Effect of Upstream Buildings on Near-Field Pollutant Dispersion in the Built Environment." *Atmospheric Environment* 45(28):4930–40.
- Haq, Amin ul, Qaisar Nadeem, Amjad Farooq, Naseem Irfan, Masroor Ahmad, and Muhammad Rizwan Ali. 2019. "Assessment of AERMOD Modeling System for Application in Complex Terrain in Pakistan." *Atmospheric Pollution Research* 10(5):1492–97.
- Holmes, N. S. and L. Morawska. 2006. "A Review of Dispersion Modelling and Its Application to the Dispersion of Particles: An Overview of Different Dispersion Models Available." *Atmospheric Environment* 40(30):5902–28.
- Huang, Wenfeng; Zhang, Xibin. 2019. "Wind Field Simulation over Complex Terrain under Different Inflow Wind Directions." *Wind and Structures* 28(4):239–53.
- Lien, F. S., E. Yee, H. Ji, A. Keats, and K. J. Hsieh. 2006. "Progress and Challenges in the Development of

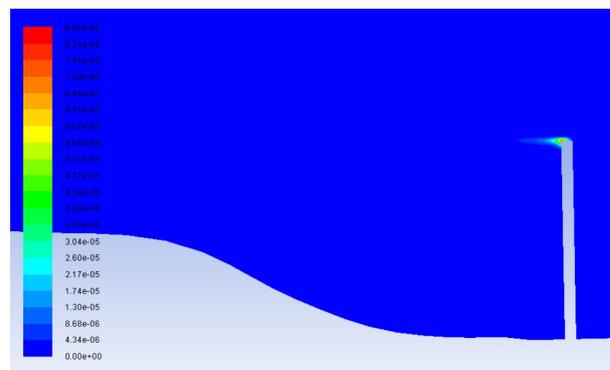


Figure 5. Contours of C_6H_6 concentration of the XZ-plane in a mid-cut of the model.

Physically-Based Numerical Models for Prediction of Flow and Contaminant Dispersion in the Urban Environment." *International Journal of Computational Fluid Dynamics* 20(5):323–37.

- Mills, M., R. Paine, E. Insley, and B. Egan. 1988. "Complex Terrain Dispersion Model(CTDM) Terrain Preprocessor System. User Guide and Program Description." *NTIS, SPRINGFIELD, VA(USA)* 177.
- Mochida, Akashi, Satoru Iizuka, Yoshihide Tominaga, and Isaac Yu Fat Lun. 2011. "Up-Scaling CWE Models to Include Mesoscale Meteorological Influences." *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics* 99(4):187–98.
- Moonen, Peter, Thijs Defraeye, Viktor Dorer, Bert Blocken, and Jan Carmeliet. 2012. "Urban Physics: Effect of the Micro-Climate on Comfort, Health and Energy Demand." *Frontiers of Architectural Research* 1(3):197–228.
- Schenk, Rainer. 2020. "Integral Sentences and Numerical Comparative Calculations for the Validity of the Dispersion Model for Air Pollutants AUSTAL2000." *Environmental Systems Research* 9(1):1–28.
- Stocker, Jenny, Christina Hood, David Carruthers, and Christine McHugh. 2012. "ADMS-Urban: Developments in Modelling Dispersion from the City Scale to the Local Scale." *International Journal of Environment and Pollution* 50(1–4):308–16.
- Tominaga, Yoshihide and Ted Stathopoulos. 2016. "Ten Questions Concerning Modeling of Near-Field Pollutant Dispersion in the Built Environment." *Building and Environment* 105:390–402.
- Uchida, Takanori and Graham Li. 2018. "Comparison of RANS and LES in the Prediction of Airflow Field over Steep Complex Terrain." *Open Journal of Fluid Dynamics* 08(03):286–307.
- Zhao, Yu, Peng Wang, Liangdong Ma, and Jili Zhang. 2019. "Prediction of Pollutants Dispersion Patterns around Two Adjacent Urban Road Tunnels." *Journal of Dispersion Science and Technology* 40(1):82–93.

Evaluation of atmosphere pollutants dispersion using CFD numerical models

FERNÁNDEZ-PACHECO V.M.¹, ANTUÑA-YUDEGO E.^{2*}, SUÁREZ-LÓPEZ M.J.³, CARÚS-CANDÁS J.L.⁴ and ÁLVAREZ-ÁLVAREZ E.⁵

^{1, 3, 5} Energy Department, University of Oviedo, Wifredo Ricart s/n, 33204 (Gijón), Asturias, Spain.

^{2, 4} TSK, Ada Byron, 220, 33203 (Gijón), Asturias, Spain.

*corresponding author:

e-mail: elena.antuna@grupotsk.com

Abstract This paper describes the approach of studying air pollution by using Computational Fluid Dynamics (CFD) models. It also includes a report of a series of investigations performed in order to illustrate the potential of such models with the aim to give a solution to the dispersion to resolve the question of the dispersion of solid and gases pollutants into the atmosphere by using different validation techniques.

Keywords: Air Quality, CFD, Pollution, Pollutant's dispersion, PM10

1. Introduction

One of the main consequences of industrial development is air pollution, which is increasing due to growing populations in cities, high consumption of fossil fuels and widespread of car use. Air pollution causes many environmental and health problems. Specifically, it has been estimated that there are about 500,000 premature deaths per year in Europe due to air pollution (European Environment Agency 2019).

Air quality is a major concern of regional, national and European governments. Authorities are developing strict regulations and controls to reduce emissions of atmospheric pollutants. According to the European Union, these measures should ensure a clean atmosphere, free of anthropogenic pollutants by 2030 (Council of the European Union 2017).

Most of the tools used to analyze air pollution (AERMOD, CALPUFF, etc.) has a closed architecture and is focused on the analysis of specific pollutants, such as SO₂, NO₂, PM₁₀, PM_{2.5}, Pb, VOC, NH₃ (US EPA 2020). Within this framework, Computational Fluid Dynamics (CFD) models allow these analyses with higher accuracy and without restrictions. It is possible to evaluate the dispersion of any kind of pollutant in different environments, and it is especially useful on a small or medium scale taking into account orography or buildings, including complex three-dimensional geometries.

The main phases of a CFD methodology are the development of the geometric model, definition of the models and boundary conditions, the simulation and the validation of the results. In this work the development of the numerical model is presented, analyzing Navier-Stokes equations, turbulence models, multispecies model, boundary conditions and resolution parameters. In addition, results obtained with this type of CFD model are shown. Finally, a methodology to test at real or laboratory scale will be presented.

2. Geometric model

The first thing to do in the CFD methodology is the development of the geometric model. For this, it will be necessary to know the study area, so that the limits of the computational domain can be defined. The domain dimensions will be set taking into account the requirements, the computational resources or the time needed to simulate.

One advantage of CFD models is the allowance for the use of very complex geometries. Thus, the orography of the terrain, which is not considered by the rest of the tools, can be incorporated into the model and, even, a detailed modeling of the city considering the streets and buildings (Fig.1).

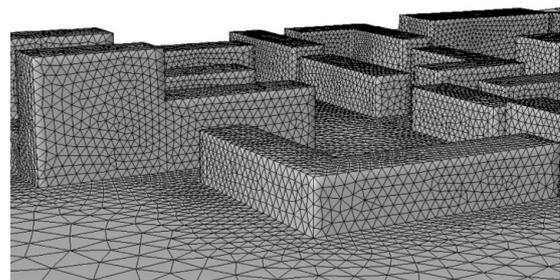


Figure 1. Detail of a mesh for pollutant dispersion study considering the geometry of buildings (Suárez-López et al. 2018).

After the geometry definition, it is necessary a discretization of the domain generating an appropriate meshing, since it is a key point in the accuracy of the results. There are different tools and techniques to optimize this process. Therefore, meshing is the basis of the finite element methods, since it is in each cell where the software applies the proposed models and equations, solving them through iterative calculation by means of numerical methods up to a limit value known as residual.

3. Numerical model

The CFD techniques are used to study fluid flows, solving the mathematical equations expressing the governing laws. Thus, using numerical techniques, the distribution of pollutants in the domain studied can be revealed. With these simulations, a lot of variables can be obtained results, such as air flow and pressure, temperature variations, forces exerted on adjacent solids, energy exchanges, etc.

3.1. Air flow characterization

Considering the air in which both solid and gases pollutants move as an incompressible fluid, the continuity equation is:

$$\text{div}(\vec{v}) = 0 \quad (1)$$

Where $\vec{v} = (u, v, w)$ is the velocity vector.

For the case of incompressible flow, density of the fluid remains constant with the pressure and the Navier Stokes equations in the three directions are (White 1981):

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho \text{div}(\vec{v}u) + \frac{\partial P}{\partial x} - \text{div}(\mu \text{grad}(u)) - S_{Mx} = 0 \quad (2)$$

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} + \rho \text{div}(\vec{v}v) + \frac{\partial P}{\partial y} - \text{div}(\mu \text{grad}(v)) - S_{My} = 0 \quad (3)$$

$$\rho \frac{\partial w}{\partial t} + \rho \text{div}(\vec{v}w) - \rho g + \frac{\partial P}{\partial z} - \text{div}(\mu \text{grad}(w)) - S_{Mz} = 0 \quad (4)$$

Where ρ is the density of the fluid, P its pressure, μ its viscosity, g is the gravity and S_{Mx}, S_{My}, S_{Mz} are the source terms, including the contributions due to mass forces (gravitational, centrifugal, Coriolis and electromagnetic).

Turbulence is defined as a phenomenon of intrinsic instability of the flow caused by apparent volatile behaviour. This turbulent agitation produces additional stresses in the flow (Reynolds stresses) giving rise to the RANS equations (Reynolds-average Navier-Stokes). The resulting system has more unknown variables than equations, which raises the problem of closure Reynolds stresses must be related to flow conditions and geometry.

3.2. Turbulence models

A turbulence model is a numerical procedure that allows closing the Reynolds system of equations so that it can be solved. As the velocity fluctuations can be small-scale and high-frequency, the direct simulations are almost impossible, since the numerical simulation would require a lot of computational effort. The Reynolds equations can

be averaged out over time, collectively by using other techniques to eliminate small-scale fluctuations. With this procedure, an easily-solve set of equations is obtained.

3.3. Multispecies model

A particularization of the conservation equations used the pollutant dispersion analysis is the multispecies model. This model gives us the opportunity to study the mix and transport of chemical species by solving the conservation equation describing the sources of convection, diffusion and reaction for each component. The CFD software predicts the local mass fraction of each species Y_i , by solving a convection-diffusion equation for each “ i ” specie. The general form of this conservation equation is:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i + S_i \quad (5)$$

Where R_i is the net rate of production of “ i ” specie by chemical reaction, S_i is the rate of creation by addition of the dispersed phase from any source defined by the user, and \vec{J}_i is its diffusion flux.

3.4. Boundary conditions and simulation parameters

In order to complete the numerical model and perform the simulation, it is necessary to specify the boundary conditions setting values for the static pressure, the total pressure, the velocity, or the gradient of these variables at the limits of the domain. These conditions must also be imposed for the variables of the turbulence model used.

For non-stationary problems, it is also needed to define the initial values of the variables for all points in the domain from the initial calculation of the solutions in the successive temporal steps. In the case of a stationary problem, only some initial values of the variables must be introduced in the program to start the iterative process.

In addition, some properties of the fluid, such as viscosity and density, must be specified, considering the possible variations with temperature, pressure, etc. In this case, these variations should be introduced to the program. Finally, the parameters affecting the numerical resolution of the problem (relaxation factors, setting criteria for completion of iterations, etc.) have to be controlled.

4. Validation

Validation is the final step in the development of a CFD model. In the case of the pollutants dispersion, two types of studies can be performed depending on its scale: real scale or laboratory scale. The real-scale data collection is usually used in many projects which incorporate CFD techniques. However, air quality study requires a large number of measurements. This is conducted by placing a large number of sensors for monitoring purposes. The laboratory scale makes it possible to solve these problems, thereby providing the opportunity to the conditions by means of reduced-scale physical models. In addition, this methodology allows us to incorporate corrective measures

such as plant barriers, for the study of their possible implementation on a real scale.

5. Examples of this methodology

Dispersion models can be grouped depending on the type of pollutants analyzed: solid or gases. In each group there are different studies in function of the scale and the purpose.

3.1. Gas dispersion.

Focusing on the gases, it is observed that the dispersion depends on the gas density strongly (Suárez-López et al. 2018), with highly dispersed concentration plumes appearing in light gases, while heavy gases contribute to the formation of pollution berets (Fig. 2). Another example of a gas simulation is the NO₂ simulation in the Aguirre Schools neighborhood of Madrid (Santiago and Martín 2015). In this work, the validation is carried out using air quality stations located in the field (Fig. 3).

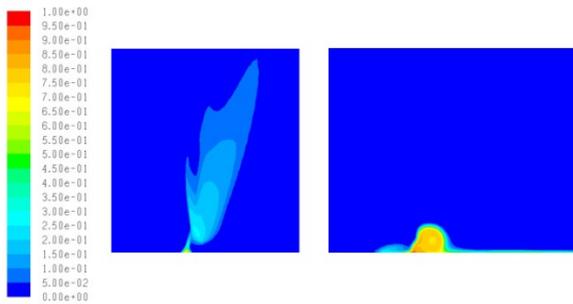


Figure 2. Differences in atmospheric dispersion between a light and heavy gas (Suárez-López et al. 2018).

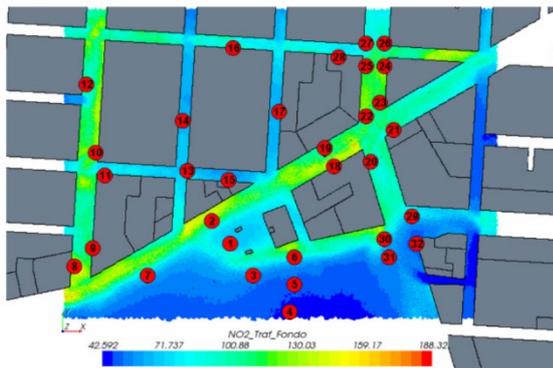


Figure 3. NO₂ obtained by CFD model and air quality measurement in the field (Santiago and Martín 2015).

3.2. Particulates dispersion.

Other studies analyze the PM₁₀ particles dispersion. A first laboratory-scale example installs a particle emitter in a wind tunnel and places obstacles in its path. These obstacles attempt to simulate the behavior of pollutants when they encounter a building or other barrier (Brusca et al. 2016). In this work, the CFD model is adjusted through these tests in order to use it later in other more complex situations.

On a larger scale, there is a study of the dispersion of coke particles in the Avilés Port (Asturias 2011) offering different results depending on the wind conditions, which can explain the pollution reaching some areas of the city (Fig. 5).

Finally, sensitivity studies can be done. In this way, incorporation of vegetable barriers in order to improve air quality in an avenue can be tested (Buccolieri et al. 2011). For that purpose, this work uses physical models on a reduced scale in a wind tunnel (Fig. 6). Another factor that will affect the simulation is the turbulence model. Therefore, there are studies (Salim et al. 2011) that compare the results of several models, including LES models with high computational cost. In this way, it is possible to observe the differences that exist with eddies in PM₁₀ in the vertical profile of a street (Fig. 7).

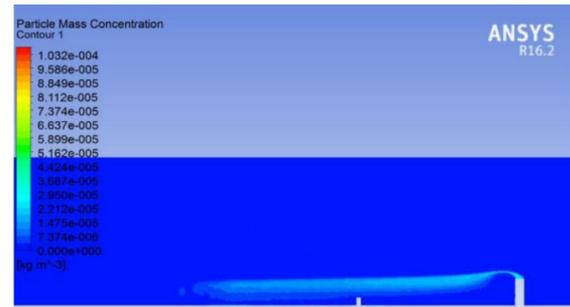


Figure 4. PM₁₀ concentration fraction in simulation of pollutant dispersion in wind tunnel (Brusca et al. 2016).

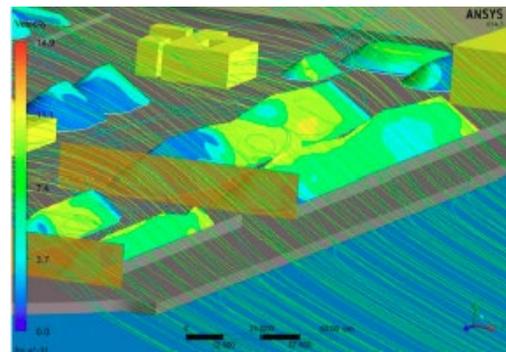


Figure 5. Path lines over coke piles in a CFD model of Avilés Port (Asturias 2011).

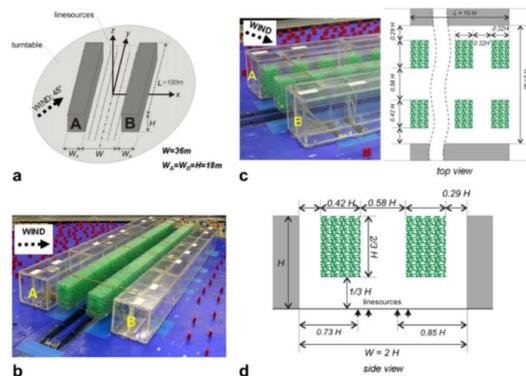


Figure 6. Physical model of a street scale (street canyon) in wind tunnel incorporating a vegetable barrier as a corrective measure (Buccolieri et al. 2011).

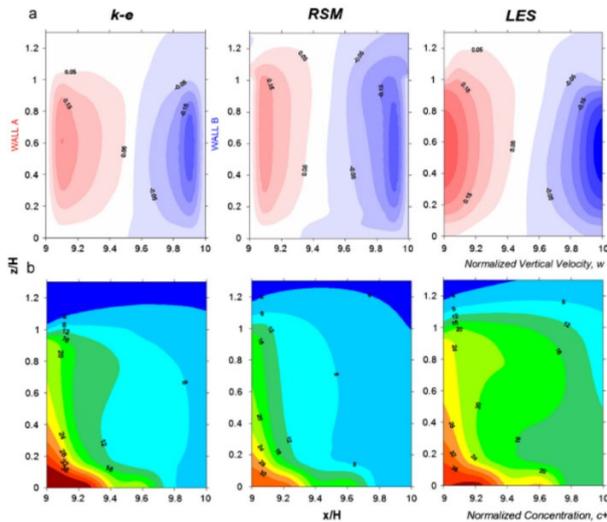


Figure 7. Velocity speed and pollutant concentration in a vertical profile of a street using different turbulence models (Salim et al. 2011).

6. Conclusions

CFD models allow for the evaluation of dispersion of all types of pollutants in complex geometries such as urban environments. These models are based on solving the Navier Stokes equations. The most common approach is to use RANS equations completed by a turbulence model

References

- Asturias GP (2011) Plan De Mejora De La Calidad Del Aire En La Zona ES0302
- Brusca S, Famoso F, Lanzafame R, Mauro S, Messina M, Strano S (2016) PM10 Dispersion Modeling by Means of CFD 3D and Eulerian–Lagrangian Models: Analysis and Comparison with Experiments. *Energy Procedia* 101:329–336. <https://doi.org/10.1016/J.EGYPRO.2016.11.042>
- Buccolieri R, Salim SM, Leo LS, Di Sabatino S, Chan A, Ielpo P, de Gennaro G, Gromke C (2011) Analysis of local scale tree–atmosphere interaction on pollutant concentration in idealized street canyons and application to a real urban junction. *Atmos Environ* 45(9):1702–1713. <https://doi.org/10.1016/J.ATMOENV.2010.12.058>
- Council of the European Union (2017) Communication from the Commission to the European Parliament, the Council, the European Economic and Social Committee and the Committee of the Regions: on the 2017 list of Critical Raw Materials for the EU. *Off J Eur Union COM(2017):8*
- European Environment Agency (2019) Air quality in Europe
- Salim SM, Buccolieri R, Chan A, Di Sabatino S (2011) Numerical simulation of atmospheric pollutant dispersion in an urban street canyon: Comparison between RANS and LES. *J Wind Eng Ind Aerodyn* 99(2–3):103–113. <https://doi.org/10.1016/J.JWEIA.2010.12.002>
- Santiago JL, Martín F (2015) Use of CFD modeling for estimating spatial representativeness of urban air pollution monitoring sites and suitability of their locations. *Física la Tierra* 27:191
- Suárez-López MJ, Expósito LG, Marigorta EB, Álvarez EÁ, Manso AN, Pacheco VMF, Yudego EA, Candás JLC (2018) Methodology for the Study of the Air Dispersion of the Industrial Contaminants Taking into Account the Orography. *Proceedings* 2(23):1414. <https://doi.org/10.3390/proceedings2231414>
- US EPA O (2020) Air Quality Dispersion Modeling - Preferred and Recommended Models. <https://www.epa.gov/scram/air-quality-dispersion-modeling-preferred-and-recommended-models>. Accessed 11 Dec 2020
- White FM (1981) Viscous fluid flow measurement. *MEAS Control* 14(1, Jan. 1981):17. <https://doi.org/10.1177/002029408101400103>

($k - \varepsilon$, $k - \omega$). Occasionally, higher computational cost models such as LES are also used to offer another interpretation of turbulence. In the case of pollution, it is common to particularize these models in a multispecies model solving the mixing and chemical transport of the species.

Validation is carried out through wind tunnel tests using physical models on a reduced scale or through measurements that require air quality stations in the field. A collection of studies employs different turbulent models and validation methodologies have been shown to illustrate the process of the development of a CFD numerical model.

Acknowledgements

This research includes actions of the EVAIR project, funded by the Government of the Principality of Asturias through the Economic Development Agency of the Principality of Asturias (IDEPA) and the Science, Technology and Innovation Plan (PCTI), as well as by the European Union through the ERDF fund.

Article

An Evapotranspiration Evolution Model as a Function of Meteorological Variables: A CFD Model Approach

Víctor Manuel Fernández-Pacheco ^{1,*}, Elena Antuña-Yudego ², Juan Luis Carús-Candás ²,
María José Suárez-López ¹ and Eduardo Álvarez-Álvarez ¹

¹ Energy Department, University of Oviedo, Wifredo Ricart s/n, 33204 Gijón, Spain; suarezmaria@uniovi.es (M.J.S.-L.); edualvarez@uniovi.es (E.Á.-Á.)

² TSK Electrónica y Electricidad S.A., Ada Byron, 220, 33203 Gijón, Spain; elena.antuna@grupotsk.com (E.A.-Y.); juanluis.carus@grupotsk.com (J.L.C.-C.)

* Correspondence: fernandezpvictor@uniovi.es

Abstract: The study of meteorological variables and evapotranspiration in open spaces using the three spatial dimensions represents a technical challenge since the high computational resources required only enable the problem to be addressed on a very small scale. This research sets forth a three-dimensional computational fluid dynamics numerical model, characterized by its simplicity, which allows problems to be addressed over large areas (scale of kilometres). Similarly, the corresponding design and software developments carried out allow for a more dynamic introduction of meteorological and evapotranspiration boundary conditions. In the numerical domain created, the Reynolds-Averaged Navier–Stokes equations are solved, supplemented by a multispecies model (to distinguish the movements of dry air, evapotranspiration and air humidity) and one of solar radiation. The numerical model was applied to a semi-arid area in southern Spain, obtaining the three-dimensional special evolution of evapotranspiration, temperature, air humidity and wind velocity, specifically concerning its variation in horizontal and vertical planes of the three-dimensional domain, as well as vertical profiles at discrete points.

Keywords: CFD model; evapotranspiration; multispecies model; meteorological variables



Citation: Fernández-Pacheco, V.M.; Antuña-Yudego, E.; Carús-Candás, J.L.; Suárez-López, M.J.; Álvarez-Álvarez, E. An Evapotranspiration Evolution Model as a Function of Meteorological Variables: A CFD Model Approach. *Sustainability* **2022**, *14*, 3800. <https://doi.org/10.3390/su14073800>

Academic Editors: Ozgur Kisi and Mohammad Valipour

Received: 13 February 2022

Accepted: 18 March 2022

Published: 23 March 2022

Publisher's Note: MDPI stays neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.



Copyright: © 2022 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

1. Introduction

Climate change not only impacts countries' economies, but it also affects human health. The Paris Agreement [1] focuses attention on the greatest challenge for the future and provides a catalyst for research lines directed towards climate and meteorology.

The global climate crisis has been closely linked to issues such as global changes in the water cycle, deterioration of urban air quality or desertification. Therefore, the study of the relationship between meteorological variables and climate change, especially their spatial distribution in large-scale open areas, is essential.

So far there have been several studies which have analysed the spatial evolution of meteorological variables in indoor or outdoor spaces.

In the case of indoor spaces (such as greenhouses) the existence of boundaries and their reduced dimensions simplify the study (simulation and validation) of the evolution of the meteorological variables. Such simplicity has allowed for the undertaking of different studies using Computational Fluid Dynamics (CFD) models with reduced computational resources. Investigations have also been held in greenhouses, using three-dimensional (3D) CFD models combined with those of radiation, to analyse the distribution of both temperature and humidity [2] or the CO₂ distribution [3] and other cases with 2D CFD models to analyse the vertical distribution of humidity and temperature [4] or even the humidity condensation in a greenhouse roof [5].

Another research line in indoor spaces is focused on evaluating human thermal comfort using CFD models, studying indoor temperature and air flow distributions. For example, using a 2D model in a house ventilated with a solar chimney [6]; with a 3D model of test rooms to evaluate the efficiency of radiant cooling systems [7]; or a 3D model of a house which enables simulation over long periods of time, demonstrating its accuracy compared with real data [8].

In the case of outdoor spaces, the investigations are focused on different scenarios using 3D CFD models to study distributions of airflow, temperature, humidity, radiation, and evapotranspiration (ET). For example, using a model of: A house with a tree located nearby [9]; street canyons [10]; multiple street canyons [11]; open spaces like a stadium [12] or a dam [13].

All these models are located on a micro scale due to the high computational cost of achieving great precision in large-scale models. While there are simulations with high spatial resolution on large scales, it is nevertheless necessary to use supercomputing centres [14]. Therefore, when studying large areas, it is common to use remote sensing, i.e., focusing on evaluating ET with data obtained from remote sensors [15–17], or hydrological balances using multiple sensors [18,19]. However, this approach (based on remote sensors) provides 2D information at surface level, and there are cases in which the 3D air movement is required in order to provide an in-depth study of the distribution of meteorological variables, i.e., urban forest interface regions [20] or semi-arid ones [21,22].

The aim of this research is to outline a methodology based on a 3D numerical CFD model, which in turn enables us to secure the values of the meteorological variables of air temperature, radiation, air humidity, wind characteristics as well as the humidity associated with the mass fraction of ET (named evapotranspiration rate, ETR) in large-scale outdoor 3D spaces (created from the zone topography), minimizing the computational resources needed. The model also allows for the introduction of the ET flow from the ground—the sum of evaporation from the land surface plus transpiration from plants—at the different points where it is discretized, known as the ET profile. The methodology and model proposed have been applied as a practical example in a zone corresponding to the semi-arid region of Cabo de Gata in Almería (Spain). The data obtained highlight the importance of topography when analyzing the characteristics of the meteorological variables and ETR distribution in the 3D domain.

2. Geometric Model

Firstly, a geometric model (with a variable extension depending on the computational resources available) from the selected study area referred to as a “study zone” is created. The structure of the study zone will be made up of the topography and kilometres of atmosphere. The model is separated into three different volumes by four different planes defined as Figure 1: Top of the atmosphere (a horizontal plane); land surface (created using data from a Digital Terrain Model and a GIS software tool); soil limit; and ET frontier, the latter two are acquired by copying the land surface.

Secondly, the complete model, which represents a virtual wind tunnel with three zones, is defined (Figure 2a): The study zone in the centre and an interface zone both united, as well as an exterior domain. The circular shape of the interface zone allows both zones to rotate with respect to the exterior domain and create the angle necessary to simulate different wind directions without geometric modifications.

The wind velocity is included as a uniform profile on one side of the domain and develops as it passes through the exterior domain and the interface zone until being fully developed by the time it reaches the study zone.

An additional function of the interface zone is to adapt the elevation of the base of the plane of the exterior domain to fit the land surface of the study zone with the use of a slope (Figure 2b).

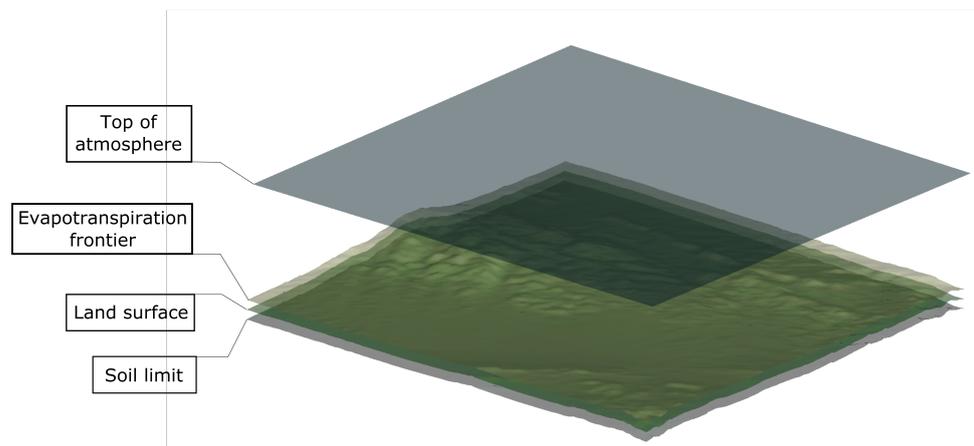


Figure 1. Study area and main surfaces.

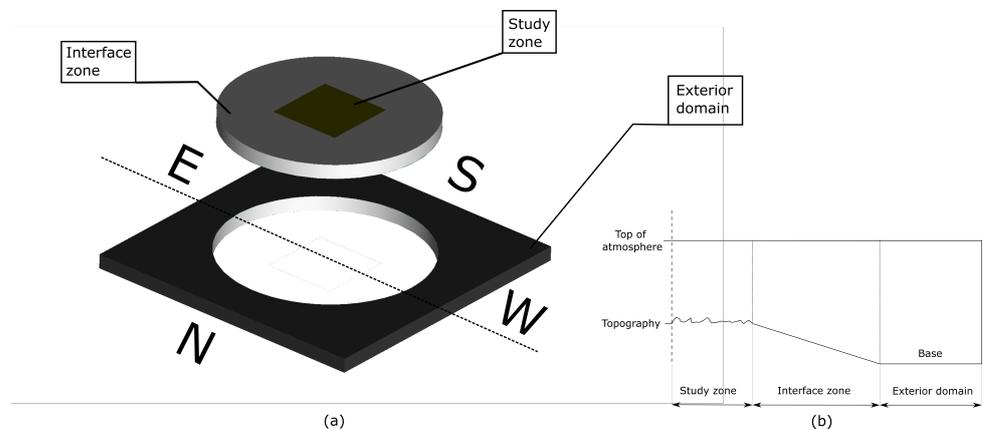


Figure 2. (a) Complete model geometry and meshed zones. (b) Mid-transversal section.

3. Numerical CFD Model

3.1. Theoretical Model

The numerical model used to study the fluid-dynamic behaviour of the domain employs CFD methodology based on Reynolds-Averaged Navier–Stokes equations (RANSs) for the three-dimensional flow complemented with the multispecies model to consider air, ET and air humidity—and a radiation model to include solar radiation.

Once the geometry is developed, the meshing of the volume of the completed model is carried out. Hexahedral cells with base dimensions between 100 to 200 m are used with a boundary layer mesh to adapt to the terrain.

Volume conditions must also be conveniently chosen. In the study zone, the air and water vapour mixture volume will have the condition of fluid, the ET volume will be considered as water vapour source (to simulate the existing vapour flow because of ET flow from the ground) and the soil volume will have the condition of solid. Additionally, the interface zone and the exterior domain will have the fluid condition (Figure 3).

In general, multispecies models are used to study the mixing and transport of chemical species by solving, for each component, the conservation equation that describes its convection, diffusion and reaction sources. In this specific application, only the species mixing is considered without any chemical reaction. To predict the local mass fraction of a species i , the general form of the conservation equation is:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i + S_i \quad (1)$$

$$\vec{J}_i = -\left(\rho D_i + \frac{\mu_t}{Sc_t}\right) \nabla Y_i \quad (2)$$

where Y_i is the local fraction, \vec{j}_i is the diffusion flux (for turbulent flows), ρ is the density, \vec{v} is velocity vector, R_i is the net rate of production by chemical reaction, S_i is the rate of production by addition from the dispersed phase plus any user-defined source, Sc_t is the turbulent Schmidt number, μ_t is the turbulent viscosity and D_i is the turbulent diffusivity (all units are in the International System).

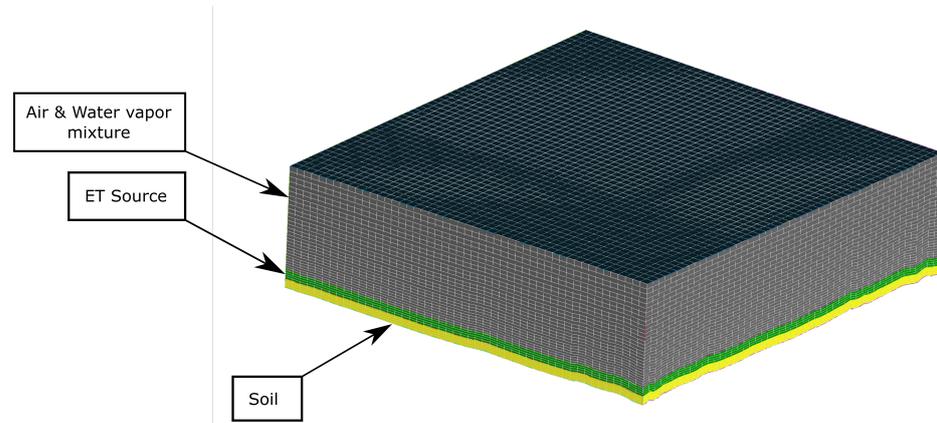


Figure 3. Study zone: Meshed main volumes.

The Discrete Ordinates (DO) radiation model [23] is used to consider the radiation that reaches the land surface. This model was selected due to its ability to calculate through transparent materials and the possibility of defining various radiation bands. Additionally, the intensity of solar radiation, as well as the position and inclination of the sun each day, can be used as input.

The DO model solves the radiation transfer for a finite number of discrete solid angles, each associated with a vector direction, fixed in the global Cartesian system. The accuracy of the angular discretization is set following two guidelines: The number of angles and the number of pixels. This model transforms the general equation of heat transmission into a transport equation for radiation intensity in spatial coordinates.

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{s})}{ds} + (\alpha + \sigma_s)I(\vec{r}, \vec{s}) = a \cdot n^2 \frac{\sigma \cdot T^4}{\pi} + \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \cdot \Phi(\vec{s} \cdot \vec{s}') d\Omega' \quad (3)$$

where \vec{r} is the position vector, \vec{s} is the direction vector, \vec{s}' is the dispersion direction vector, s is the length of the path, a is the absorption coefficient, n is the refractive index, σ_s is the dispersion coefficient, σ_s is the Stefan–Boltzmann constant ($5.672 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}^4$), I is the radiation intensity that depends on the position and the direction, T is the temperature, Φ is the phase function and Ω' is the solid angle (all units are in the International System).

3.2. Simulation Methodology

The numerical calculations were completed using the commercial code Ansys Fluent 18.2. This code was used to solve the unsteady Reynolds-Averaged Navier–Stokes equations (URANS) by the finite volume method, converting them from differential equations into their numerical analogues (Eulerian method). The Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations (SIMPLE) algorithm was used to resolve the coupling between pressure and velocity fields. The discretizations of the spatial and temporal derivatives for the velocities and concentration in the equations were carried out by means of second-order schemes. The pressure staggering option (PRESTO!) discretization scheme was used for the pressure. Turbulence effects in the fluid flow were incorporated by means of the K-epsilon-RNG model [24], including buoyancy effects. Zheng [25] discovered that this turbulence model produced the best results for cases with features similar to the current test case.

3.3. Boundary Conditions

Different boundary conditions have been considered to simulate in the same model different processes that affect the evolution of meteorological variables.

A set of boundary conditions are considered for the exterior domain to allow for a means to include meteorological variability (Figure 4). One surface is set as a velocity inlet, aimed to introduce a wind velocity uniform profile and its humidity and temperature. The opposite surface is set as a pressure outlet. The other two lateral surfaces are set as symmetries (or wall without roughness) and the same for the ceiling. The floor is defined as a rough wall. An interface condition will allow the cylinder, where the study area is included, to rotate with respect to the domain, offering the chance to select a precise angle for wind inlet.

Furthermore, a set of boundary conditions for the study zone (Figure 5) are applied to the four limiting surfaces. The upper one, called “top of the atmosphere”, is defined as a wall without roughness, constant temperature and a semi-transparent material (such as glass). Moreover, in this wall, the radiation is included with an orthogonal beam using Φ and Ω' values of 0.53 [26] to define the angle, so that direct and diffuse irradiation is included as input magnitude. The ET frontier is defined as an interior surface (virtual wall which is 100% permeable for flow). The land surface is a wall with friction, and a temperature dependant of the air temperature and solar radiation. The material of the land surface is opaque. The soil limit is considered also an opaque wall with frictionless and constant temperature conditions. The value of this temperature will be that of the ground at a depth of 10 m. The value used can be the measured or calculated by a thermal gradient law from the land surface temperature. Finally, lateral surfaces of the study area are all interiors (virtual wall which is 100% permeable for flow).

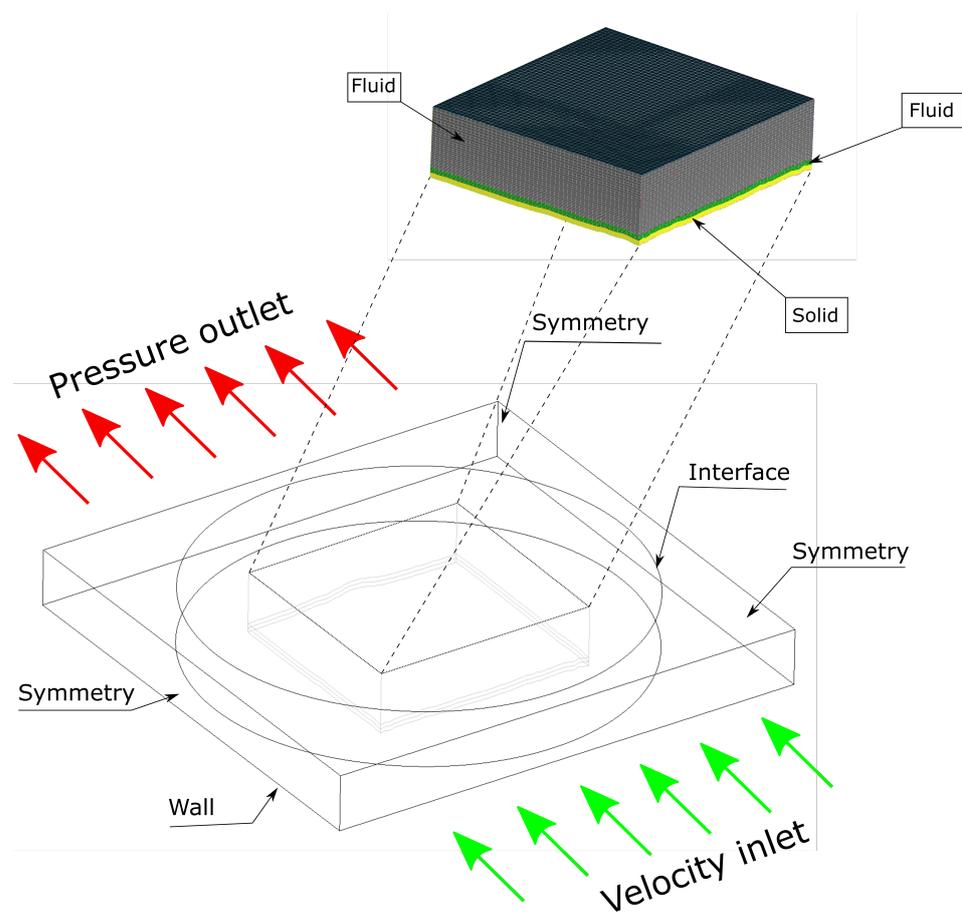


Figure 4. Boundary conditions.

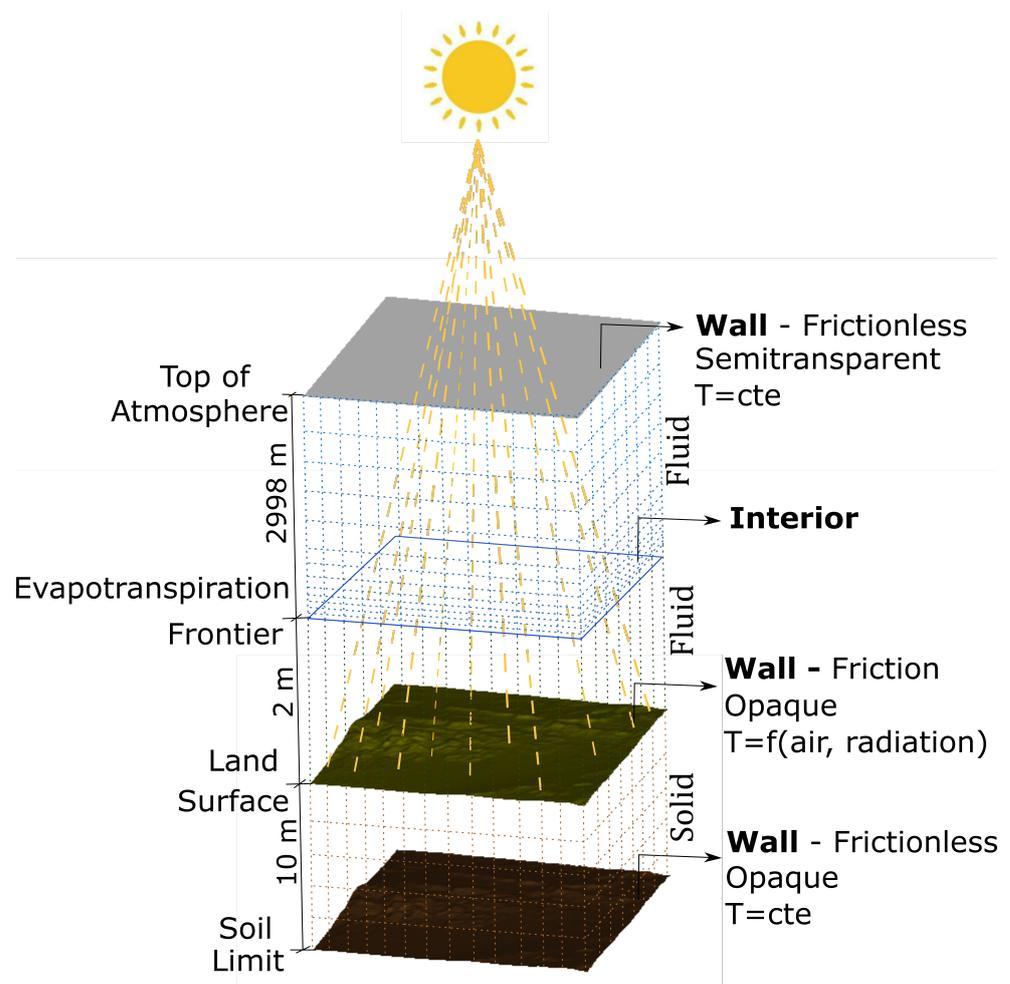


Figure 5. Boundary conditions at Study zone.

4. Example of Use: Cabo de Gata

4.1. Study Area

The aim of this section is to provide an example of the possibilities that this methodology offers in order to study meteorological variables' behaviour in large 3D areas.

The study was carried out in a land area of Cabo de Gata, Almería, Spain, (Figure 6), in an area where databases of meteorological variables can be accessed and used as model inputs. It is a semi-arid region near the coast that includes an elevated zone with a hill of around 1000 m of elevation and a valley with altitudes close to sea level (0 m) (Figure 7).

4.2. Geometric and Numerical Model

The land surface of the study zone measures $23,600 \times 24,800$ sq. m and has been obtained using data from IGN (National Geographic Center) with a spatial resolution of 5 m. Before meshing the complete study zone, a pre-processing is carried out which simplifies it before transforming it into a .stl file that will be imported by the meshing software. The mesh consists of 2,497,360 cells with hexahedral structure (Figure 8). Tests were made with a larger number of cells (3.5 million) without appreciable variations in the results. To reduce the number of cells, the boundary layer extends from 2 m in height to 200 m. The exterior domain is carried out with tetrahedral cells. The size of the tetrahedrons diminishes while descending from high-order to low-order generations.

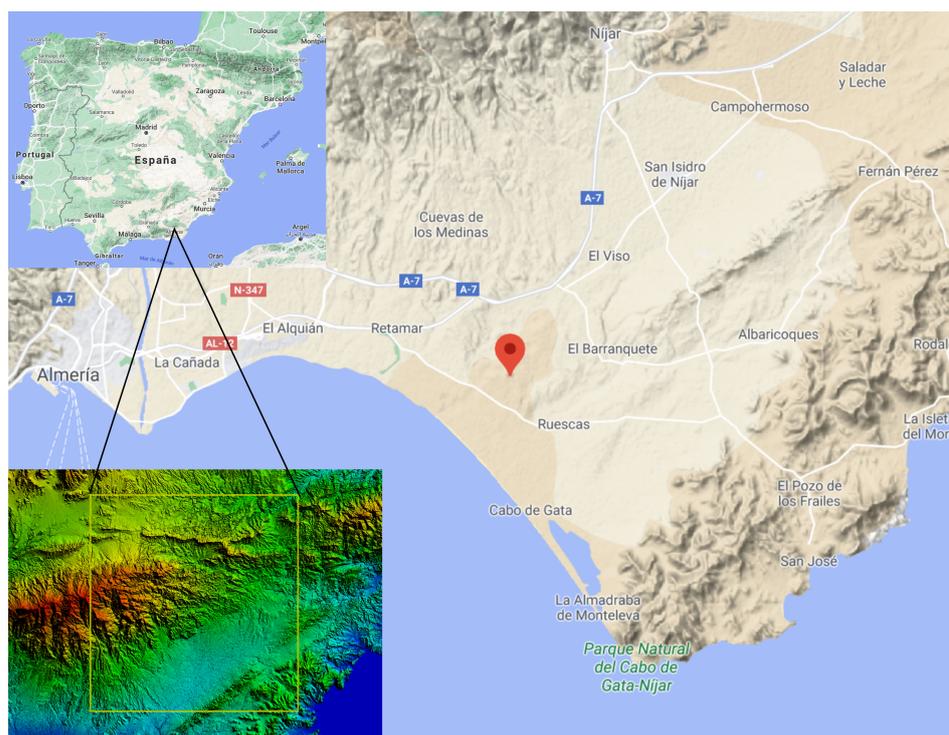


Figure 6. Study area located in Blasa Blanca (Cabo de Gata, Almería, España).

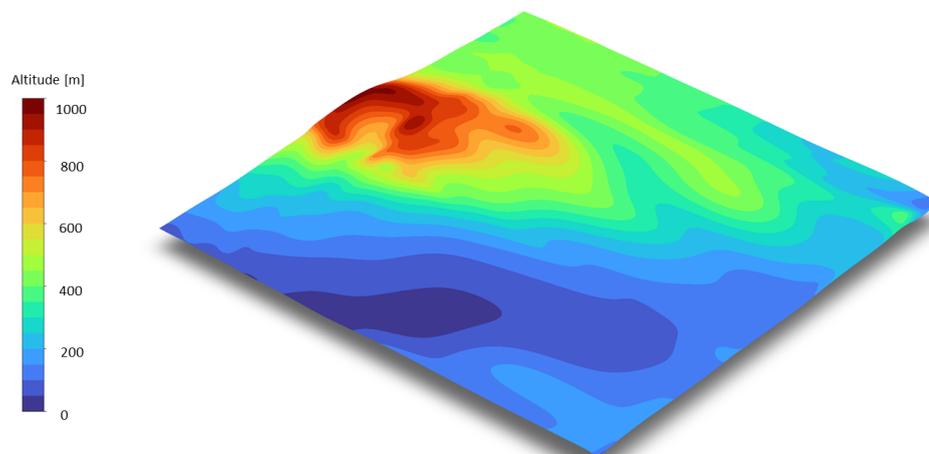


Figure 7. Elevation profile of Study zone.

Before meshing the volumes, a boundary layer mesh was built in the study zone using structured meshing to obtain a better description of the boundary layer in the numerical calculations. The minimum volume cell is $3.17 \times 10^4 \text{ m}^3$. In addition, a quality analysis of the mesh yielded very satisfactory results, indicating a magnitude of the equitize skew below 0.4 for 100% of the cells in the mesh. This parameter shows the shape of the cells formed; values near 0 indicate more regular cells, which are far more likely to achieve satisfactory results.

4.3. Input Data

The meteorological data, wind speed (m/s) and direction, air humidity (%) and temperature ($^{\circ}\text{C}$) were drawn from the 30 min logs of a weather station from June 2006 to December 2014. The seasonal values used as model inputs are calculated on the basis of the mean of air humidity and temperature while the wind velocity and direction are obtained using compass roses per each season (Figure 9).

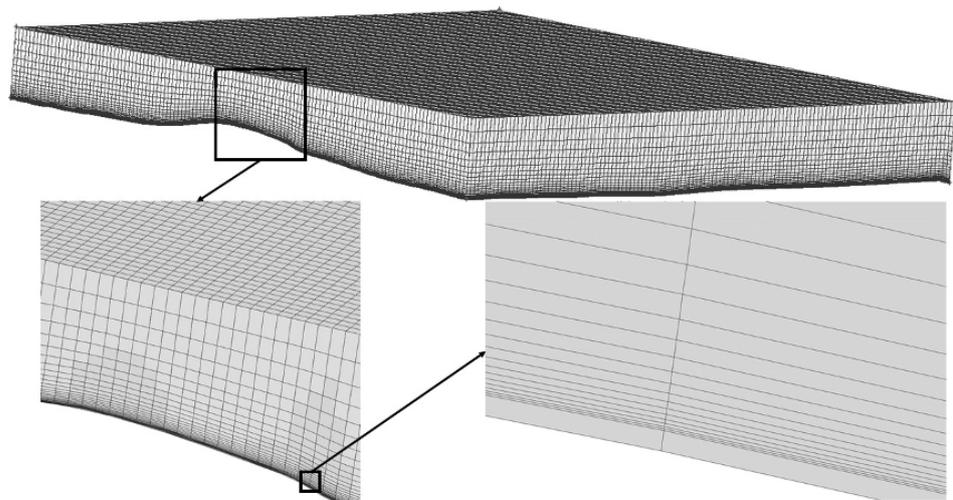


Figure 8. Detail of meshing of the study zone in Almería.

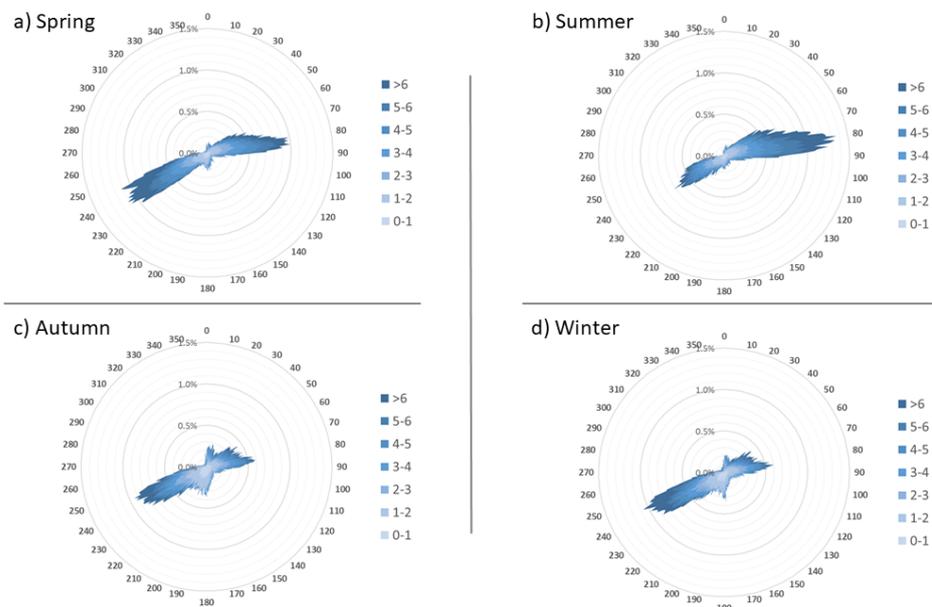


Figure 9. Compass rose created by historical data.

A representative value of radiation for each season was obtained from a study of a nearby zone (Tabernas desert) performed by [27]. The soil limit temperature, at 10 m depth, is estimated by using a typical value gradient at shallow levels of about 3 °C decreasing at every 100 m of depth [28] considering the ground surface at the same temperature as the air. Table 1 represents all meteorological data used as inputs.

Table 1. Meteorological data used as an input.

	Temperature	Soil Temperature	Humidity	Wind Speed	Wind Angle	Radiation
	°C	°C	%	m·s ⁻¹	Azimet	W·m ²
Spring	17.45	17.15	63.61	3.42	240°	537.77
Summer	24.26	23.96	64.66	3.32	80°	545.25
Autumn	15.91	15.61	72.16	2.65	240°	371.46
Winter	11.36	11.06	70.95	2.93	240°	372.65

The average values for each season of ET profile (kg/m³ s) used in the model as a vapour source input were obtained from the data of ET flow (mm/day) with a spatial

resolution of 1100 m of GeoTIFF images provided by [21]. For this purpose, a Raster package implemented in the R software [29] was applied Figure 10.

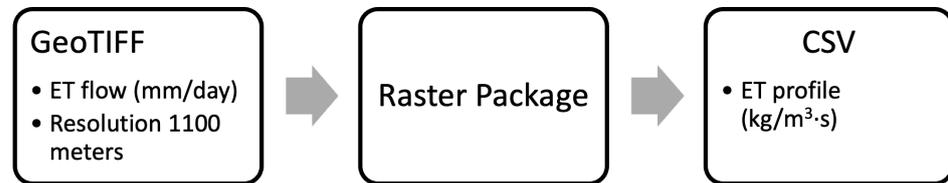


Figure 10. Software development to generate ETR profile.

4.4. Simulation Methodology

The numerical calculations were performed using Ansys Fluent 18.2 software. The SIMPLE algorithm is chosen to resolve coupling between pressure and velocity fields. A second-order scheme for spatial and temporal discretization was carried out, PRESTO! scheme for pressure and k-Epsilon-RNG for turbulence model.

To represent real conditions, it is necessary to perform two simulations. First, an initial simulation in a transitory state to place the study zone in the correct position to reproduce wind direction. Secondly, in a steady state, introducing all the inputs for each season. This part involves the greatest computational effort.

4.5. Results

Some results are shown as an example of those that can be obtained in the study zone giving the necessary information to evaluate ETR and the meteorological variables evolution in a 3D domain. As an example, four types of results are shown: (a) ET vertical flow; (b) maps of ETR, wind velocity (both closely to ground level) and ground temperature; (c) ETR evolution in zones of a vertical cross section; (d) vertical profiles of wind speed, ETR and temperature. Those profiles were obtained for points A, B, C and D. Point P represents the location of an ET flux tower (Figure 11).

The convergence criterion to conclude the iterative computational process was set at values lower than 10^{-5} for the normalised residuals of each governing equation. With these values the time required for the simulation of each season was about 36 working hours in parallel mode on a computer with an AMD-Ryzen9 processor of eight cores.

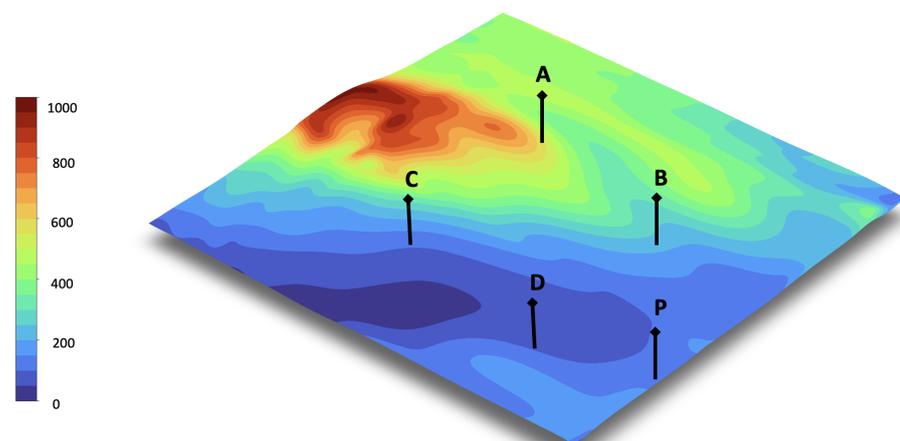


Figure 11. Points A, B, C, D and P locations.

The ET vertical flow (ET_{vf}) represents the ET transported by turbulent diffusion, which is several orders of magnitude lower than the ET transported in the horizontal layers by convection. It can be calculated using the results of the model at a certain height, such

as $ET_{vf} = ETR \cdot d \cdot V_z$, where ETR is the evapotranspiration rate (p.u.), d is the density of the species mixture (kg/m^3) and V_z is the vertical component of the wind velocity (m/s).

Comparing the values of ET_{vf} ($\text{kg}/\text{m}^2 \text{ s}$) registered in the ET flux tower at 3.5 m height with the mean values calculated using the model, it was found that they reliably represent ET movements, especially considering the accuracy with the low magnitude of ET_{vf} (less than $0.1 \text{ kg}/\text{m}^2 \text{ s}$). Figure 12 shows this comparison for the season of Spring as an example.

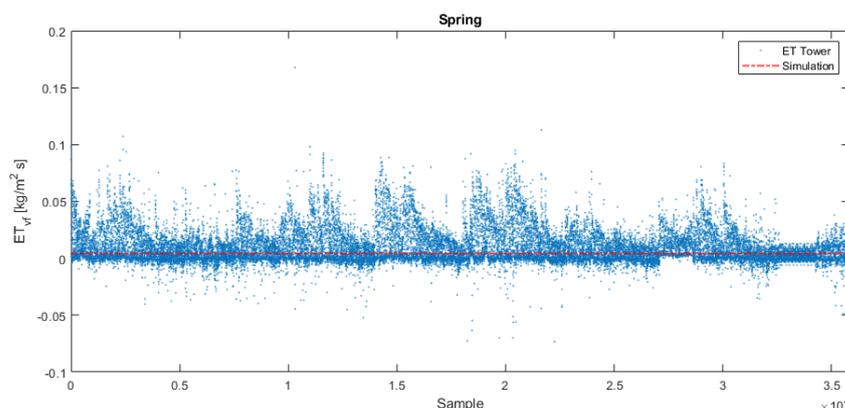


Figure 12. ETR vertical flux in Spring.

Per each season, Figures 13–15 represent the maps of results obtained for wind speed at 2 m height (from land surface), temperature at land surface and ETR in the height between 0 and 2 m (from the land surface).

Globally, land temperatures have a direct correlation with the different solar radiation values. Moreover, the maximum values of ETR increase in keeping with the values of land temperatures, from 1.26×10^{-3} p.u. of maximum ETR in Winter, with the lowest values of surface temperature, to 5.4×10^{-3} p.u. in Summer, with the highest surface land temperatures.

Additionally, in all cases, it is noticeable that wind direction justifies the ETR concentrations more specifically in zones exposed to the incoming wind where the ETR is transported by convection out of the study zone (Figures 13 and 15), while the ETR is more concentrated in places sheltered from the wind (because of the hill effect) which for the same reason have ground temperatures slightly higher than the surrounding zones.

The model allows us to observe the evolution of the variables studied not only on horizontal planes but also on vertical ones. As an example, Figure 16 represents the variation of the magnitude of the ETR during the Spring season in two zones of a vertical cross section.

Figures 17 and 18 represent profiles of wind velocities, air temperature and ETR during Summer and Winter of points A–D.

In the Summer (Figure 17) points A–D have similar parabolic profiles for the three variables, as they are facing the wind direction with no obstacles. The ETR and ground temperatures are slightly higher at point C (at the different heights), indicating that it is in a zone a little more protected from the incoming wind.

In the case of the Winter (Figure 18) all profiles (wind, ETR and temperature) of points A and B are distorted parabolic as they are in a zone highly protected from the incident wind, contrary to points C and D with parabolic profiles as there is no obstacle that affects the wind profile. Moreover, in this case, due to the previously mentioned protection effect, the wind velocity values of A and B are lower than those of C and D, which leads to higher ground temperatures and ETR at different heights.

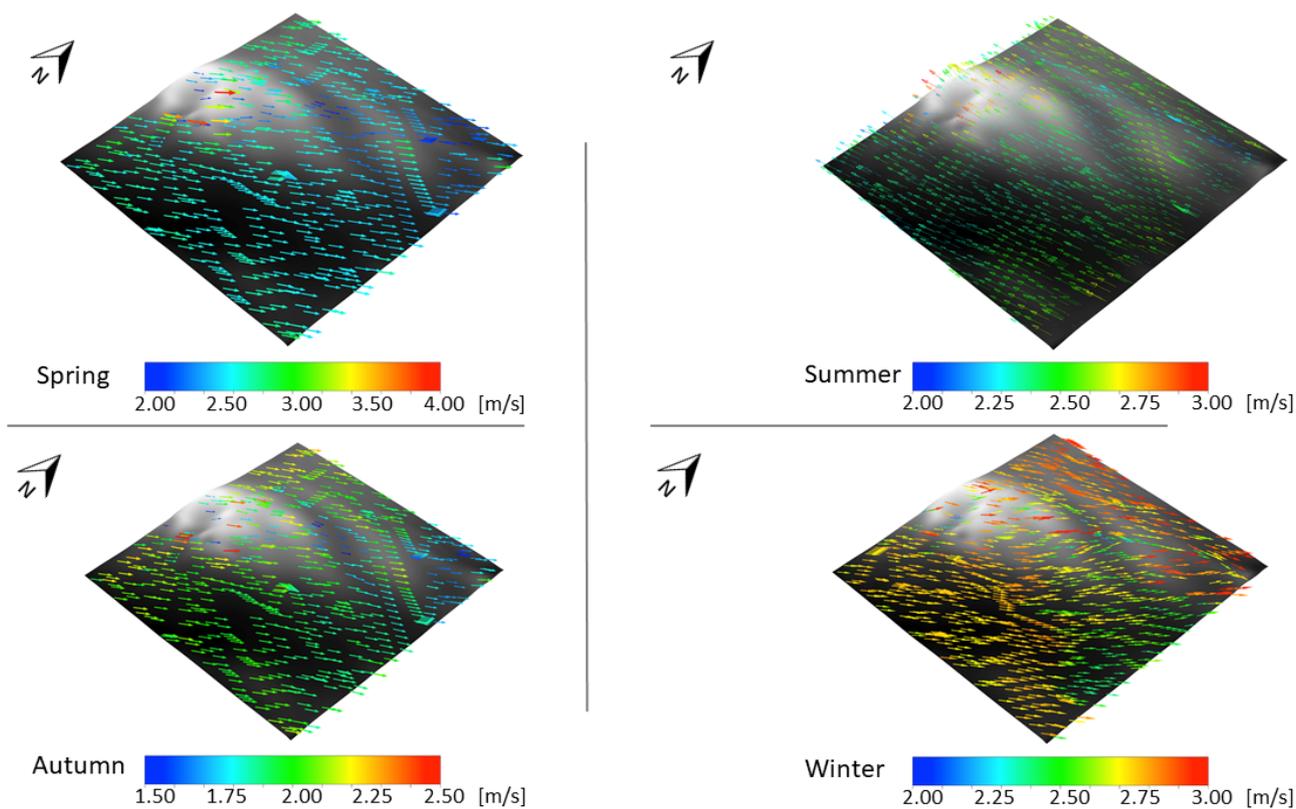


Figure 13. Wind velocity maps.

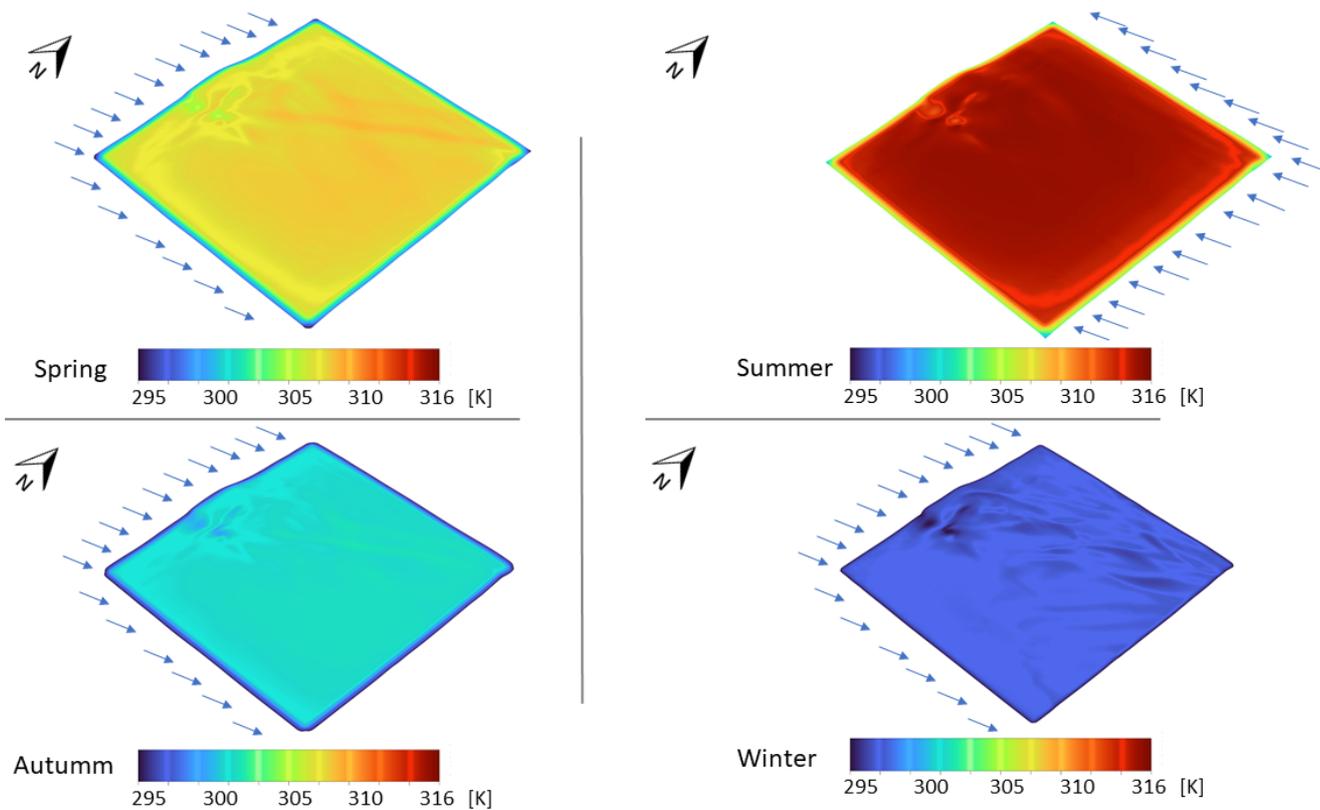


Figure 14. Land temperature maps.

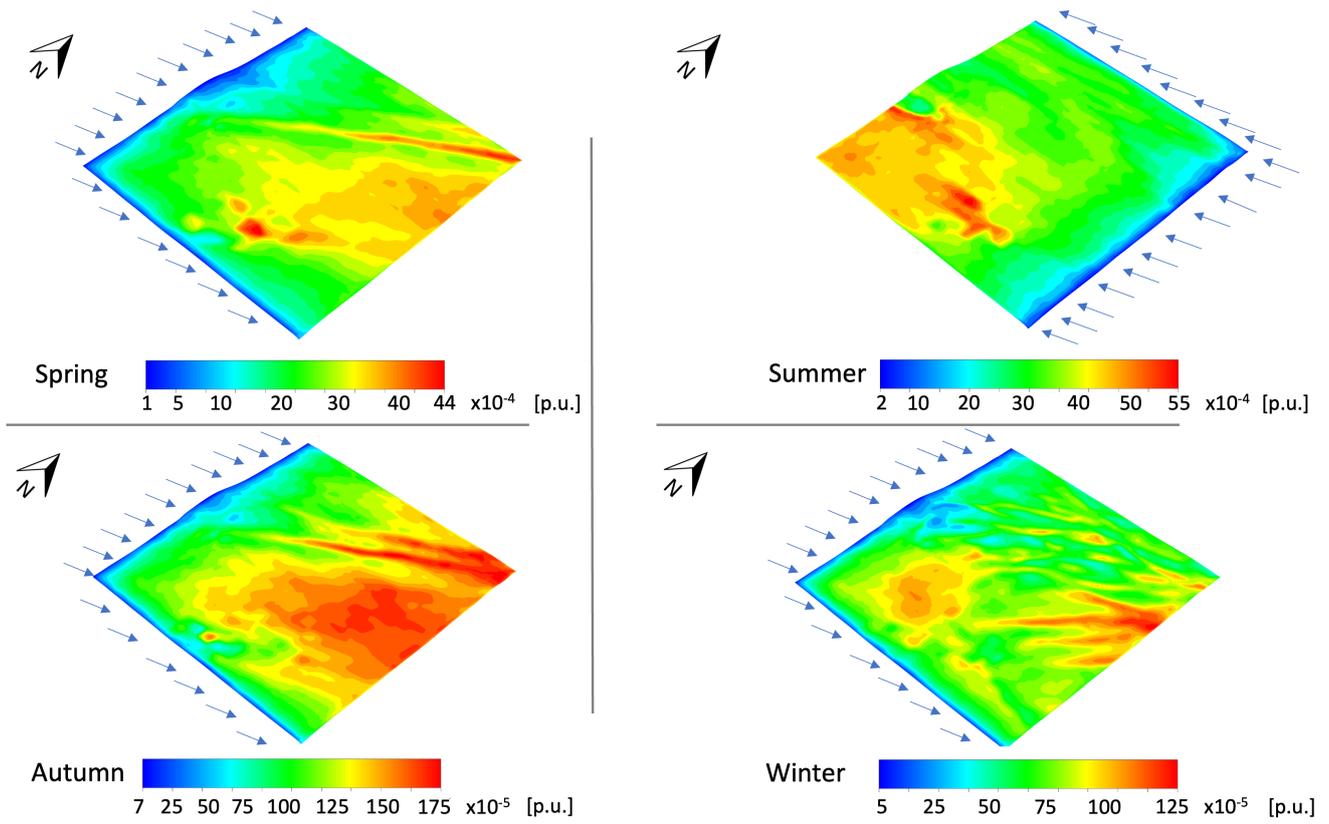


Figure 15. ETR maps.

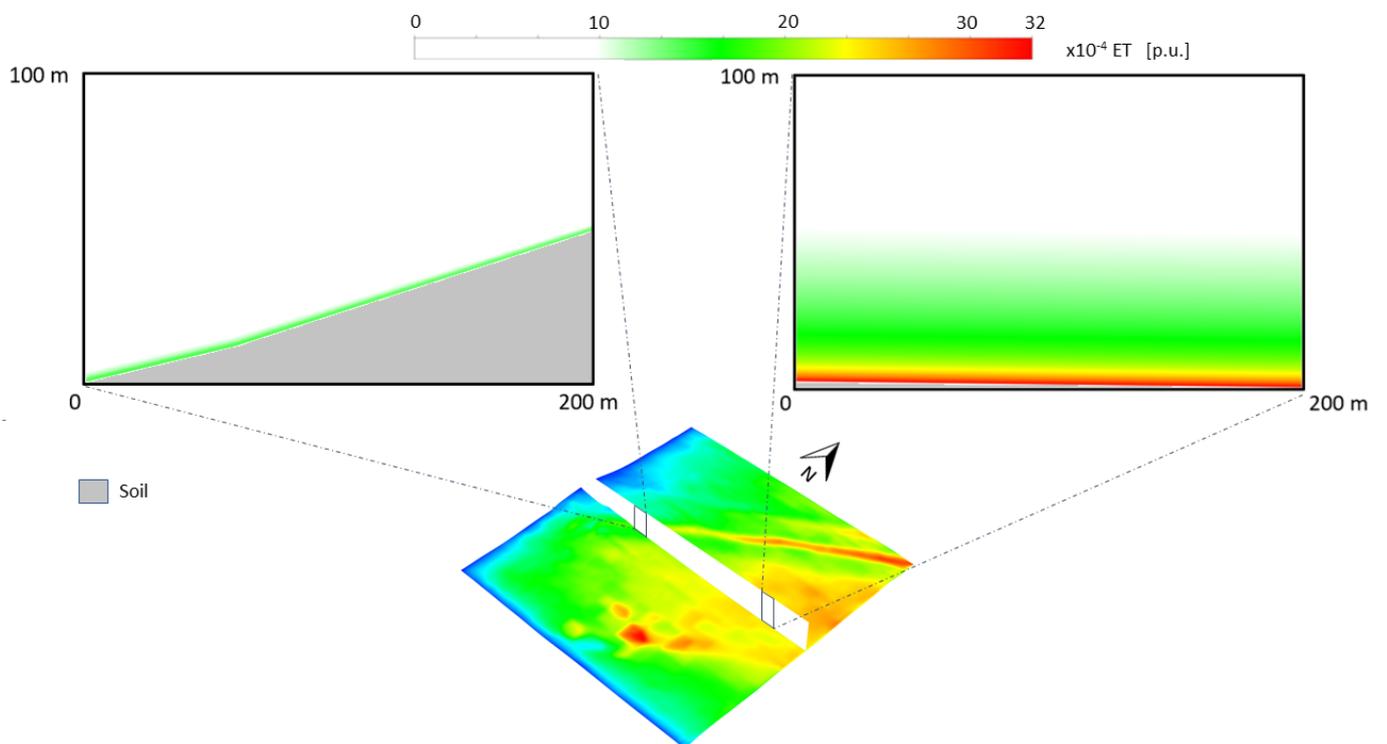


Figure 16. ETR in two zones of a vertical cross section.

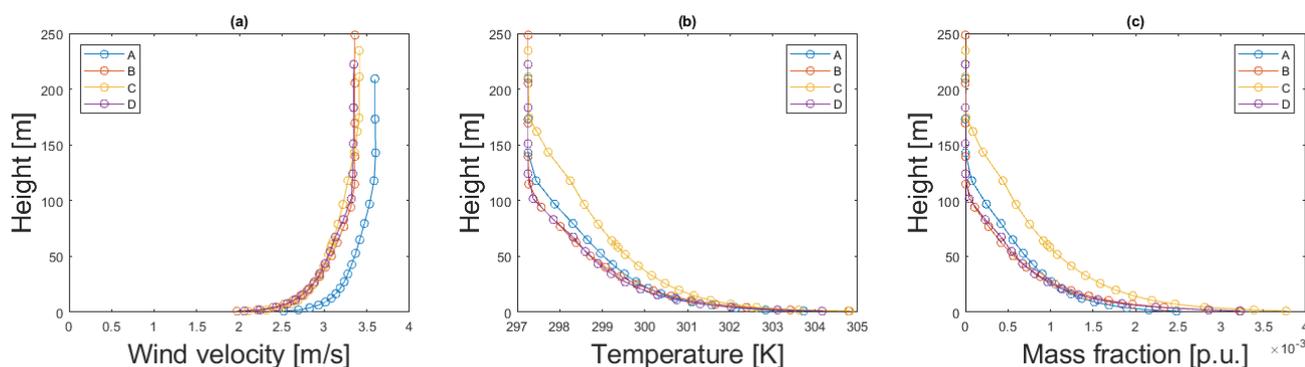


Figure 17. Profiles during Summer at points A–D: Wind velocity (a), temperature (b) and ETR (c).

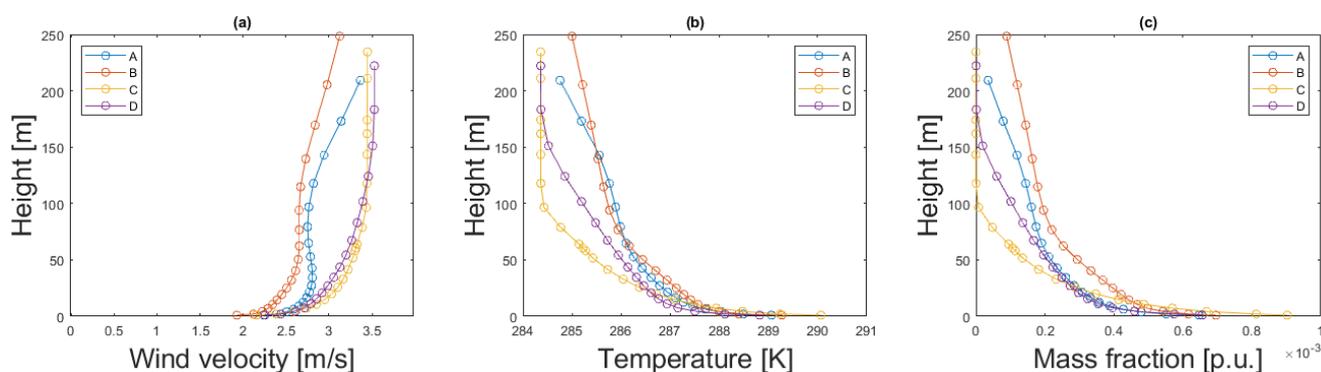


Figure 18. Profiles during Winter at points A–D: Wind velocity (a), temperature (b) and ETR (c).

5. Conclusions

The methodology and 3D CFD model put forward provide the means to simulate meteorological variable evolution as well as ETR variations in outdoor spaces. Its design facilitates a simple introduction of the meteorological variables air temperature and humidity, wind velocity and angle, solar radiation and ET profile, as model inputs. Furthermore, it ensures the adequate development of the wind profile and that the change in wind velocity direction can be easily reproduced. All the above together with the meshing employed create the conditions required to apply the model to large land extensions and thereby obtain satisfactory results with reduced computational resources.

The model was applied to a land area of Cabo de Gata (Almería, Spain) of $23,600 \times 24,800$ m, as this is an area with similar meteorological conditions on different days of each season of the year, and therefore, using average data per season, representative results can be obtained.

Some relevant results were obtained that demonstrate the usefulness of the model, such as the influence of wind direction and topography in the ET transported by convection and land temperature or the unerring accuracy of the model concerning calculating ET vertical fluxes.

Author Contributions: Methodology, V.M.F.-P. and E.A.-Y.; numerical model definition, V.M.F.-P. and M.J.S.-L.; results generation and validation, V.M.F.-P., E.A.-Y. and M.J.S.-L.; data curation, V.M.F.-P. and J.L.C.-C.; formal analysis, E.Á.-Á. and J.L.C.-C.; writing—original draft preparation, V.M.F.-P.; writing—review and editing, E.Á.-Á. and M.J.S.-L.; supervision, E.Á.-Á. and M.J.S.-L. All authors have read and agreed to the published version of the manuscript.

Funding: This research received no external funding.

Institutional Review Board Statement: Not applicable.

Informed Consent Statement: Not applicable.

Data Availability Statement: Not applicable.

Acknowledgments: The authors would like to thank the EU and (Centre for the development of Industrial Technology (CDTI), Innovation Fund Denmark (IFD) and Flanders Innovation & Entrepreneurship (VLAIO) for funding, in the frame of the collaborative international consortium FORWARD financed under the ERA-NET Cofund WaterWorks2015 Call. This ERA-NET is an integral part of the 2016 Joint Activities developed by the Water Challenges for a Changing World Joint Programme Initiative (Water JPI). The authors want to thank Mónica García and Francisco Domingo for the contribution of the data of meteorological variables of the domain and GeoTIFF images of ET values.

Conflicts of Interest: The authors declare no conflict of interest.

References

1. United Nations Framework Convention on Climate Change. Adoption of the Paris Agreement. In Proceedings of the Conference of the Parties on Its Twenty-First Session, Paris, France, 30 November–13 December 2015; p. 32.
2. Cheng, X.; Mao, H.; Ni, J. Numerical prediction and CFD modeling of relative humidity and temperature for greenhouse-crops system. *Nongye Jixie Xuebao Trans. Chin. Soc. Agric. Mach.* **2011**, *42*, 157, 173–179.
3. Roy, J.C.; Pouillard, J.B.; Boulard, T.; Fatnassi, H.; Grisey, A. Experimental and CFD results on the CO₂ distribution in a semi closed greenhouse. *Acta Hort.* **2014**, *1037*, 993–1000. [[CrossRef](#)]
4. Kichah, A.; Bournet, P.E.; Migeon, C.; Boulard, T. Measurement and CFD simulation of microclimate characteristics and transpiration of an Impatiens pot plant crop in a greenhouse. *Biosyst. Eng.* **2012**, *112*, 22–34. [[CrossRef](#)]
5. Bouhoun Ali, H.; Bournet, P.E.; Danjou, V.; Morille, B.; Migeon, C. CFD simulations of the night-time condensation inside a closed glasshouse: Sensitivity analysis to outside external conditions, heating and glass properties. *Biosyst. Eng.* **2014**, *127*, 159–175. [[CrossRef](#)]
6. Maher, D.; Hana, A. CFD investigation of temperature distribution, air flow pattern and thermal comfort in natural ventilation of building using solar chimney. *World J. Eng.* **2020**, *17*, 78–86. [[CrossRef](#)]
7. Catalina, T.; Virgone, J.; Kuznik, F. Evaluation of thermal comfort using combined CFD and experimentation study in a test room equipped with a cooling ceiling. *Build. Environ.* **2009**, *44*, 1740–1750. [[CrossRef](#)]
8. Albatayneh, A.; Alterman, D.; Page, A. *Adaptation the Use of CFD Modelling for Building Thermal Simulation*; ACM International Conference Proceeding Series; Association for Computing Machinery: New York, NY, USA, 2018; pp. 68–72. [[CrossRef](#)]
9. Gkatsopoulos, P. A Methodology for Calculating Cooling from Vegetation Evapotranspiration for Use in Urban Space Microclimate Simulations. *Procedia Environ. Sci.* **2017**, *38*, 477–484. [[CrossRef](#)]
10. Gromke, C.; Blocken, B.; Janssen, W.; Merema, B.; van Hooff, T.; Timmermans, H. CFD analysis of transpirational cooling by vegetation: Case study for specific meteorological conditions during a heat wave in Arnhem, Netherlands. *Build. Environ.* **2015**, *83*, 11–26. [[CrossRef](#)]
11. Dimoudi, A.; Nikolopoulou, M. Vegetation in the urban environment: Microclimatic analysis and benefits. *Energy Build.* **2003**, *35*, 69–76. [[CrossRef](#)]
12. Szucs, A.; Moreau, S.; Allard, F. Aspects of stadium design for warm climates. *Build. Environ.* **2009**, *44*, 1206–1214. [[CrossRef](#)]
13. Vidal-López, P.; Martínez-Alvarez, V.; Gallego-Elvira, B.; Martín-Górriz, B. Determination of synthetic wind functions for estimating open water evaporation with Computational Fluid Dynamics. *Hydrol. Process.* **2012**, *26*, 3945–3952. [[CrossRef](#)]
14. Ashie, Y.; Kono, T. Urban-scale CFD analysis in support of a climate-sensitive design for the Tokyo Bay area. *Int. J. Climatol.* **2011**, *31*, 174–188. [[CrossRef](#)]
15. Helman, D.; Givati, A.; Lensky, I.M. Annual evapotranspiration retrieved from satellite vegetation indices for the eastern Mediterranean at 250 m spatial resolution. *Atmos. Chem. Phys.* **2015**, *15*, 12567–12579. [[CrossRef](#)]
16. Helman, D.; Osem, Y.; Yakir, D.; Lensky, I.M. Relationships between climate, topography, water use and productivity in two key Mediterranean forest types with different water-use strategies. *Agric. For. Meteorol.* **2017**, *232*, 319–330. [[CrossRef](#)]
17. Helman, D.; Lensky, I.M.; Yakir, D.; Osem, Y. Forests growing under dry conditions have higher hydrological resilience to drought than do more humid forests. *Glob. Chang. Biol.* **2017**, *23*, 2801–2817. [[CrossRef](#)]
18. Helman, D.; Bonfil, D.J.; Lensky, I.M. Crop RS-Met: A biophysical evapotranspiration and root-zone soil water content model for crops based on proximal sensing and meteorological data. *Agric. Water Manag.* **2019**, *211*, 210–219. [[CrossRef](#)]
19. Helman, D.; Lensky, I.M.; Bonfil, D.J. Early prediction of wheat grain yield production from root-zone soil water content at heading using Crop RS-Met. *Field Crop. Res.* **2019**, *232*, 11–23. [[CrossRef](#)]
20. Dahm, C.N.; Cleverly, J.R.; Allred Conrod, J.E.; Thibault, J.R.; McDonnell, D.E.; Gilroy, D.J. Evapotranspiration at the land/water interface in a semi-arid drainage basin. *Freshw. Biol.* **2002**, *47*, 831–843. [[CrossRef](#)]
21. García, M.; Sandholt, I.; Ceccato, P.; Ridler, M.; Mougin, E.; Kergoat, L.; Morillas, L.; Timouk, F.; Fensholt, R.; Domingo, F. Actual evapotranspiration in drylands derived from in-situ and satellite data: Assessing biophysical constraints. *Remote Sens. Environ.* **2013**, *131*, 103–118. [[CrossRef](#)]
22. Morillas, L.; Villagarcía, L.; Domingo, F.; Nieto, H.; Uclés, O.; García, M. Environmental factors affecting the accuracy of surface fluxes from a two-source model in Mediterranean drylands: Upscaling instantaneous to daytime estimates. *Agric. For. Meteorol.* **2014**, *189–190*, 140–158. [[CrossRef](#)]

23. Raithby, G.D.; Chui, E.H. A Finite-Volume Method for Predicting a Radiant Heat Transfer in Enclosures with Participating Media. *J. Heat Transf.* **1990**, *112*, 415–423. [[CrossRef](#)]
24. Launder, B.E.; Spalding, D.B. The numerical computation of turbulent flows. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **1974**, *3*, 269–289. [[CrossRef](#)]
25. Zheng, S.; Zhao, L.; Li, Q. Numerical simulation of the impact of different vegetation species on the outdoor thermal environment. *Urban For. Urban Green.* **2016**, *18*, 138–150. [[CrossRef](#)]
26. Launder B. E.; Spalding D.B. MAN—ANSYS Fluent User' s Guide Release 15.0. *Knowl. Creat. Diffus. Util.* **2013**, *15317*, 724–746.
27. Soutullo, S.; Sánchez, M.N.; Enríquez, R.; Jimenez, M.J.; Heras, M.R. Empirical estimation of the climatic representativeness in two different areas: Desert and Mediterranean climates. *Energy Procedia* **2017**, *122*, 829–834. [[CrossRef](#)]
28. Flóvenz, O.; Hersir, G.P.; Sæmundsson, K.; Ármannsson, H.; Friethriksson, T. Geothermal energy exploration techniques. In *Comprehensive Renewable Energy*; Elsevier: Amsterdam, The Netherlands, 2012; Volume 7, pp. 51–95. [[CrossRef](#)]
29. Hijmans, R. Package 'Raster' Type Package Title Geographic Data Analysis and Modeling. 2021. Available online: <https://cran.r-project.org/web/packages/raster/raster.pdf> (accessed on 30 January 2022).

Article

A CFD-Based Methodology for Impact Assessment of Industrial Emissions and Evaluation of Mitigation Measures for Regulatory Purposes

Elena Antuña-Yudego ^{1,*}, Víctor Manuel Fernández-Pacheco ¹, Eduardo Álvarez-Álvarez ¹ ,
Juan Luis Carús-Candás ²  and María José Suárez-López ¹ 

¹ Energy Department, University of Oviedo, Wifredo Ricart s/n, 33204 Gijón, Spain; fernandezpvictor@uniovi.es (V.M.F.-P.); edualvarez@uniovi.es (E.Á.-Á.); suarezlmaria@uniovi.es (M.J.S.-L.)
² TSK Electrónica y Electricidad S.A., Ada Byron, 220, 33203 Gijón, Spain; juanluis.carus@grupotstk.com
* Correspondence: uo224065@uniovi.es

Abstract: In a context where air quality has become a global concern, modelling techniques are becoming very popular for analysing pollutant dispersion conditions. While models based on empirical formulations are most widely used for industrial scenarios, singular cases involving complex terrain or large obstacles in the vicinity of emission sources require a more robust approach to evaluate the dispersion conditions. In this research, a computational fluid dynamics (CFD) model is developed to analyse the dispersion of pollutants from an industrial facility whose location and characteristics suggest the occurrence of complex flow features that affect the dispersion patterns. In addition, the variation of the gas exit temperatures of waste heat recovery systems is proposed as a measure to mitigate the impact of the plume. The simulation results show unexpected deviations in the plume path affecting vulnerable areas in a nearby mountainside, but increasing the gas exit temperature is useful to prevent this event. Therefore, the proposed methodology can be considered a decision support tool to find a compromise between the environmental impact and the fuel consumption of the plant.

Keywords: complex terrain scenario; computational fluid dynamics (CFD); industrial emissions plume behaviour; pollutant dispersion



Citation: Antuña-Yudego, E.; Fernández-Pacheco, V.M.; Álvarez-Álvarez, E.; Carús-Candás, J.L.; Suárez-López, M.J. A CFD-Based Methodology for Impact Assessment of Industrial Emissions and Evaluation of Mitigation Measures for Regulatory Purposes. *Processes* **2023**, *11*, 2039. <https://doi.org/10.3390/pr11072039>

Academic Editors: Lingling Ma, Yang Shao and Min Luo

Received: 8 June 2023
Revised: 2 July 2023
Accepted: 5 July 2023
Published: 7 July 2023



Copyright: © 2023 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

1. Introduction

The rapid industrial and economic development achieved by many regions over the last decade has led to an important expansion of urban areas as well as the construction of many high-rise buildings to cater for the increasing population. According to one of the United Nations' latest reports [1], 55.3% of the world's population lived in urban settlements in 2018, and this proportion is expected to increase to 68% by 2050. However, the proliferation of dense built-up areas poses an important problem, as it is known to cause a reduction in the flow circulation and pollutant removal capacity in urban environments. Hence, air quality has become a major concern for governments and citizens, as a significant proportion of urban population is exposed to air that does not meet legislation air quality standards or World Health Organization (WHO) guidelines [2]. Increasing levels of outdoor pollution are associated with a wide range of detrimental effects on the population's health and comfort [3].

Governments and environmental agencies all around the world are creating policies to reduce the population's exposure to air pollution, such as the European Union's air quality directives adopted throughout the last decades. These regulations are intended to promote the development of strategies for the reduction and control of emissions in urban areas, a scenario that has motivated the use of traditional and new techniques to model the dispersion of pollutants in the atmosphere.

Dispersion modelling uses mathematical equations to describe the behaviour of the atmosphere, as well as dispersion mechanisms of pollutants, and they might also include some certain physical and chemical processes. By applying these to different case studies, it is possible to predict pollutant concentrations at various locations of interest. Of these techniques, computational fluid dynamics models (CFD) have become very popular for plume dispersion analysis in microenvironments and also for local air quality assessments [4–6]. They can provide the complex analysis of fluid flow based on the conservation of mass and momentum principles by resolving the Navier–Stokes equation. Indeed, the popularity of CFD techniques extends to other fields such as industrial design [7] or biomedicine [8–12]. One of the main advantages of these models is their ability to provide the entire flow and dispersion field data without suffering from similarity requirements [13]. In addition, CFD simulations can save time and money compared to traditional experiments and testing methods by eliminating the need for physical prototypes.

The widespread use of these models in urban physics enables regulators and urban planners to improve urban geometry designs for optimal ventilation and to enhance air quality indicators in cities. Investigations conducted over the last few decades [5,14,15] show that phenomena such as vortex shedding and recirculation regions are commonplace in urban environments and have a remarkable impact on pollutant dispersion, especially in the presence of high-rise structures. These recirculation and stagnation zones emerge in between the buildings where the wind regularly blows and are generally characterised by low flow speeds that cause pollutants to become trapped within these areas [16,17]. This situation is particularly damaging for the fresh-air intake of dwellings, which can be affected by the emissions from the rooftop stacks of nearby buildings because of the influence of such flow recirculation zones. An appropriate CFD dispersion simulation can be useful in the design and positioning of rooftop chimneys and ventilation systems of the buildings to comply with current standards and to minimise the risk of contamination [18,19]. At larger spatial scales, CFD models are also useful for estimating pollutant transport and dispersion over long distances [20].

Not only urban planners, but also industrial agents, benefit from dispersion models in the design and impact assessment of the emissions. In order to evaluate whether their designs comply with regulatory exigences (e.g., Industrial Emissions Directive requirements), industrial designers usually rely on the so-called operational models to simulate pollutant dispersion. Operational models use semi-empirical equations based on parametrization techniques deduced from experimental data [21]. They only require a small amount of input and can treat a variety of situations with relatively low computational cost [15], so they are frequently employed in decision support tools where fast response times are required. Among these tools, Gaussian formulations are some of the most outstanding examples [14,22].

In most cases, industrial facilities are built on flat and unobstructed terrains, normally far from urban centres. Under these assumptions, operational models can provide good performance results at a very low computational cost. They perform well even in the presence of buildings, such as the case of AERMOD [22] or OML [23], for which downwash algorithms were implemented. Indeed, there is an active modelling community committed to the improvement of AERMOD and other U.S. EPA's (United States Environmental Protection Agency) air quality models through the introduction of state-of-the-art modelling concepts into them. Moreover, as proof of its performance and wide acceptance, many environmental regulatory bodies recommend or even impose the use of a specific operational model to conduct the dispersion analysis required to request or renew the operating permits for the emission sources. This is the case of the U.S. EPA, which accounts for resources like AERMOD or CTDMPLUS [24] in its list of preferred models. Both of the above examples are Gaussian models designed to estimate hourly concentrations of plume material from elevated point sources. However, the detail and complexity of the meteorological and terrain input data requirements are higher in the case of CTDMPLUS, as it is intended for more complex terrain scenarios.

Nevertheless, the accuracy of empirical models is known to decrease under certain specific conditions. For instance, scenarios involving complex or steep terrains are some of the most problematic situations, leading to the deterioration of the model results, as reported by a comparison study [25]. One of the critical factors explaining this loss in the model performance is that empirical formulations do not account for physical process (i.e., the flow features generated by surface–atmosphere interactions), as opposed to CFD techniques, but are based on expressions that assume crude simplifications [26]. As a result, these models are not suited for predicting the flow and concentration fields in the close surrounding area of the stack, being typically used to evaluate concentrations only at distances of at least several hundred meters from the source onwards [24,27,28]. Despite the efforts accomplished to extend the models' functionalities to account for the unrepresented physical processes, the limitations found in challenging scenarios have not yet been overcome in most cases [29,30].

Therefore, trusting empirical models alone might not be enough to understand the pollution impact of industrial chimneys when these are placed at complex environments subject to the influence of complex flow phenomena. These singular cases should be tackled with a more advanced modelling technique, such as CFD, as otherwise the impacts of recirculation zones and other flow features could not be appropriately considered, potentially undermining the effectiveness of the chimney design.

In this work, a CFD model is developed to study the pollutant dispersion from an industrial facility whose location meets the singularity and complexity criteria previously explained. The target plant is a chemical facility located in a valley with close mountains exceeding the height of the main emission source. Special attention is paid to the occurrence of flow phenomena affecting the behaviour of the plume and the dilution effectiveness of the chimney under these conditions. In addition, the regulation of waste heat recovery systems is proposed as a measure to mitigate the impact of the pollution plume. To evaluate the effectiveness of this measure, new simulations are conducted, varying the temperature of the exit gases to account for the changes in the behaviour of the plume. The following CFD methodology was first developed and tested on an experimental database, allowing for model validation and the justification of its subsequent application to a real case study.

Few examples of studies on the impact of singular locations on pollutant dispersion mechanisms from industrial sources have been previously discussed in the literature. More specifically, to the authors' knowledge, no previous cases of studies focusing on (i) recirculation flow phenomena caused by natural terrain and (ii) their effects on the behaviour of industrial plumes have hitherto been conducted. Addressing these two specific features simultaneously through the development of a CFD model represents an innovative contribution of this research.

Therefore, the novelty of this research can be found in the study of the impact of large flow recirculation effects on pollutant dispersion when the cause of this phenomenon is the interaction of the wind with natural terrain features. While this phenomenon has been widely studied in the urban environment, there are hardly any studies on natural terrain scenarios, due to the difficulty of correctly modelling the terrain geometry around the pollutant source, which is the main objective of this research.

To overcome this challenge, another contribution of this research is the design of a methodology to develop robust computational domains for the appropriate representation of complex terrain scenarios based on non-uniform rational B-spline (NURBS) surfaces. To achieve this objective, a systematic review of the literature was carried out to identify the best practices for the development of CFD models, both in terms of traditional guidelines and new approaches emerging from more recent studies.

Finally, another relevant contribution of this study is the use of a CFD model to analyse the effect of modifying an operational parameter of an industrial plant on the behaviour of the exhaust gases. Through this analysis, it is possible to adjust the performance of the heat recovery systems of the plant to mitigate the pollution impact caused by unfavourable weather conditions.

2. Materials and Methods

The CFD model methodology to apply will be first evaluated against tracer observations from the Evaluation of Modelling Uncertainty (EMU) project [31]. This evaluation is intended to serve as a validation step for a real-life case study, as the same computational parameters and settings will be applied to the real-life situation. As stated in [32] for the sub-configuration validation strategy: “it can reasonably be assumed that the same or a similar combination will also provide accurate results for the actual configuration”. Indeed, validation is a crucial step to ensuring the accuracy of computational simulation results, as shown in the literature [33–35].

The EMU experiments were conducted in a large and stratified wind tunnel (20 m × 3.5 m × 1.5 m) at the University of Surrey, where continuous jet releases of dense, buoyant and neutrally buoyant gases were simulated in neutral or stable atmospheres. Among the available experiments, case B3, consisting of dense gas release in neutral atmospheric conditions was selected for validation, as these conditions are similar to those in the actual case study.

2.1. Computational Domain and Mesh Generation

The first step in the development of a CFD model is the definition of the geometric domain. In case B3, gas was released from a 1 m diameter hole located in a simple L-shaped building. Another slab-shaped building was located downwind of the former. The geometry and dimensions are schematically depicted in Figure 1.

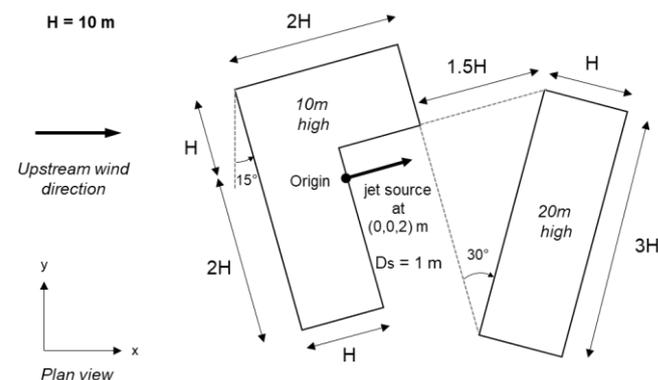


Figure 1. Schematic of the numerical setup for the validation stage, where H corresponds to the height of the buildings.

The upstream wind blows along the x -axis. The emission source is therefore located on the leeward side of the L-shaped building, so it is not directly exposed to the incoming wind but may be exposed to recirculation flow generated behind the building.

The computational domain is discretised with a body-fitted, poly-hexcore mesh based on octree decomposition. The poly-hexcore material is composed of a combination of polyhedra, hexahedra and prisms. To select an appropriate mesh size, a grid independency study was conducted based on three different meshes: a coarse grid (2 million cells), a medium grid (3 million cells) and a fine grid (5 million). The aim of this test was to verify whether the simulation results are sensitive to a further refinement of the computational grid. A threshold value of 5% was taken as the maximum relative difference allowed for the results between one mesh resolution and the following. By computing this indicator for the tracer concentrations, the relative differences between the coarse and the medium meshes were about 6%. Also, this difference is slightly below 5% between the medium and the fine grid. According to these results, the fine mesh (5 million cells) was selected for the simulations.

The grid was refined around the building, with a cell size of 0.4 m on the building's walls and roof. The stack section has the smallest cell size (0.2 m), and the maximum value (2 m) can be found far away from the building, at the model's boundaries. On the

other hand, an inflation strategy was applied to produce three layers of prisms, adjacent to the solid walls of the domain. The purpose of these inflation layers was not to capture the boundary layer developed on solid surfaces, as they are usually intended for when applying low-Reynolds number modelling. Instead, this strategy was intended to limit the height of the first row of wall-adjacent cells in the polyhedral mesh design, as well as to control the stretching ratio of the surrounding cells in the vertical direction to a maximum of 1.15. In addition, the faces of these prismatic cells are either parallel or perpendicular to the walls, which is advisable for the application of wall functions. Figure 2 shows three views of the mesh obtained.

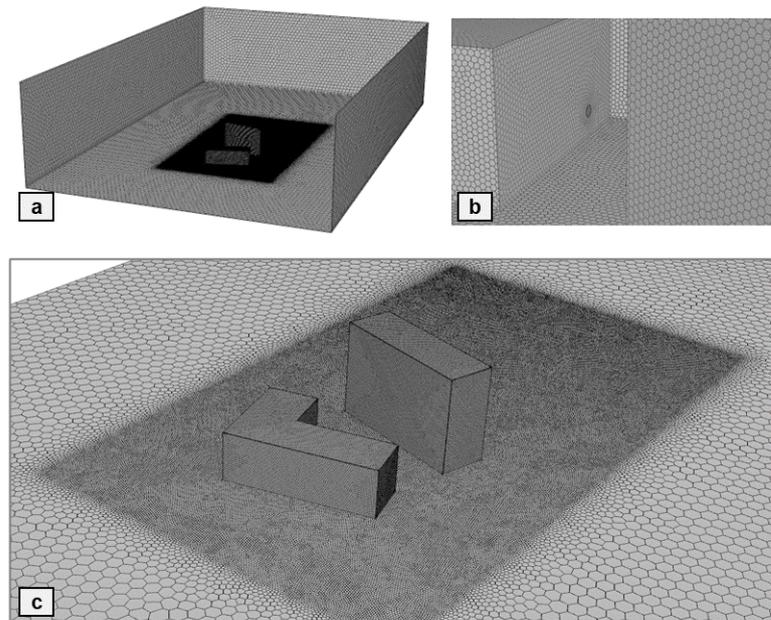


Figure 2. Computational domain and mesh obtained for the validation case, including a general overview of the domain (a), mesh detail of the source (b) and the buildings (c).

2.2. Boundary Conditions

The different conditions applying to each of the model boundaries are shown in Figure 3.

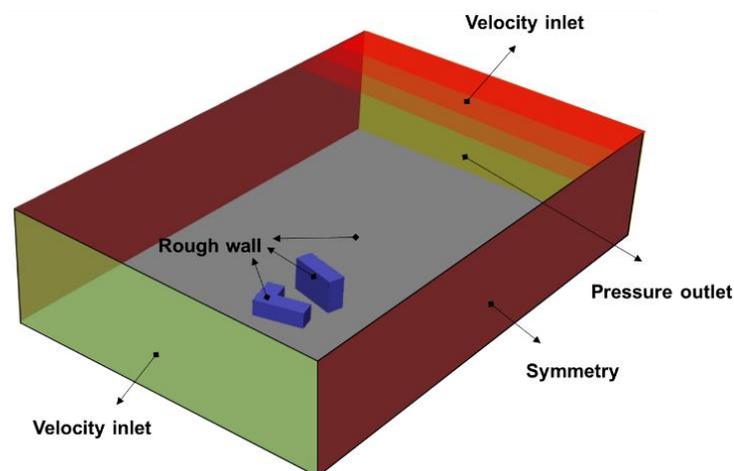


Figure 3. Boundary conditions of the validation case.

It should be noted that the various parameters used to set up the model are defined in the corresponding project report [31].

At the inflow boundaries of the domain, profiles of mean wind velocity, turbulence kinetic energy and turbulence dissipation were imposed following the Expressions (1)–(3).

$$U(z) = \frac{u^*}{\kappa} \ln\left(\frac{z + z_0}{z_0}\right) \quad (1)$$

$$k(z) = \frac{u^{*2}}{C_\mu^{0.5}} \quad (2)$$

$$\varepsilon(z) = \frac{u^{*3}}{\kappa(z + z_0)} \quad (3)$$

where u^* is the friction velocity, κ the von Karman constant (0.42), z is the height, z_0 is the aerodynamic roughness length and C_μ is a constant equal to 0.09. In addition, zero species background concentration was defined at the inlet planes.

The pressure outlet condition was selected for the outflow boundaries where a height dependent pressure profile was specified according to Expression (4).

$$P(z) = \rho g z \quad (4)$$

where ρ is the air density, g is the gravitational acceleration and z is the height.

The emission source is represented through an inlet condition with uniform velocity of 25 m/s. A mixture of 3.51% by volume of ethylene in a krypton balance is released from the 1 m diameter source in the building's wall, for which ideal gas properties were considered.

At the top of the domain, fixed values for U , k and ε were applied, corresponding to the values of the inlet profiles at this height. Lateral boundaries were assigned symmetry conditions. At the walls, the standard wall function with a roughness modification [36,37] was imposed, for which the aerodynamic roughness length (z_0) equals 0.12 m. It is important to note that this function is based on a different roughness parameter, k_s and a roughness constant C_s , which defaults to 0.5. However, the relationship between k_s and z_0 is shown in (5), which can be derived by the first-order matching of the atmospheric boundary layer (ABL) velocity profile with the wall-function velocity profile in the centre point P of the wall-adjacent cell [38].

$$k_{s,ABL} = \frac{9.793 z_0}{C_s} \quad (5)$$

2.3. Numeric Approach and Turbulence Model

Among the different existing turbulence models reported in the literature for CFD, the Reynolds-averaged Navier–Stokes equations (RANS) and large eddy simulation (LES) are the most outstanding ones. RANS models solve the ensemble averaged Navier–Stokes equations by turbulence modelling, which aims to model the entire spectrum of the turbulent eddies. When flow is assumed to be statistically steady, ensemble averaging is equivalent to time averaging (steady-RANS) [39]. These have traditionally been the first choice to simulate a wide range of atmospheric [6,13,40] and pollution applications [5,41,42], providing accurate solutions at moderate to low computational cost. The availability of best practices and well-developed technical guidelines for RANS models [43,44] is another sign that these models have reached a mature state.

Thus, the RANS approach was selected for the present study, together with realizable k - ε model for the closure of the system of equations. Realizable k - ε models are frequently applied in urban studies involving complex flow features [6,40,41,45], where they are shown to yield better results in the prediction of the recirculation zones around buildings than other models, such as the standard k - ε .

All the transport equations were discretised with a second-order scheme. The SIMPLE algorithm is used for pressure–velocity coupling. The gradients were computed based

on the Green–Gauss theorem, and initial conditions were computed from inflow profiles. A threshold of 10^{-4} was set for all residuals to monitor the progress of the solution, except for the energy equation, where a value of 10^{-6} was specified. In addition, it was necessary to analyse the results in order to detect possible undesired oscillations requiring specific actions.

2.4. Validation and Results

Figure 4 shows a comparison between predicted and measured tracer concentrations at two cross-stream planes ($x/H = 1$ and $x/H = 10$) and for two different heights ($z/H = 1$ and $z/H = 10$) where H is the height of the building. The distances and concentrations in the experiment were normalised to facilitate comparisons between the model in the wind tunnel and the full scale one. For greater clarity, Figure 5 shows the location of the sections where the results were evaluated.

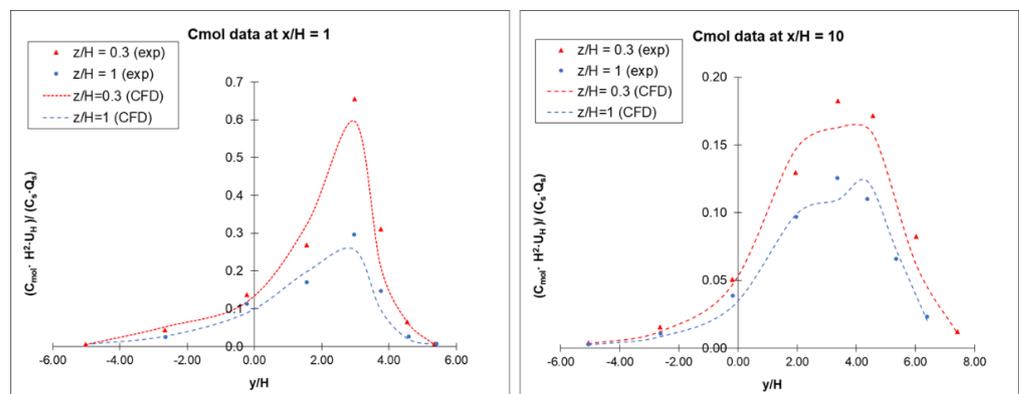


Figure 4. Concentration data normalised by $C^* = C_s \cdot Q_s / H^2 \cdot U_H$ from CFD and measurements at different cross-stream planes and heights.

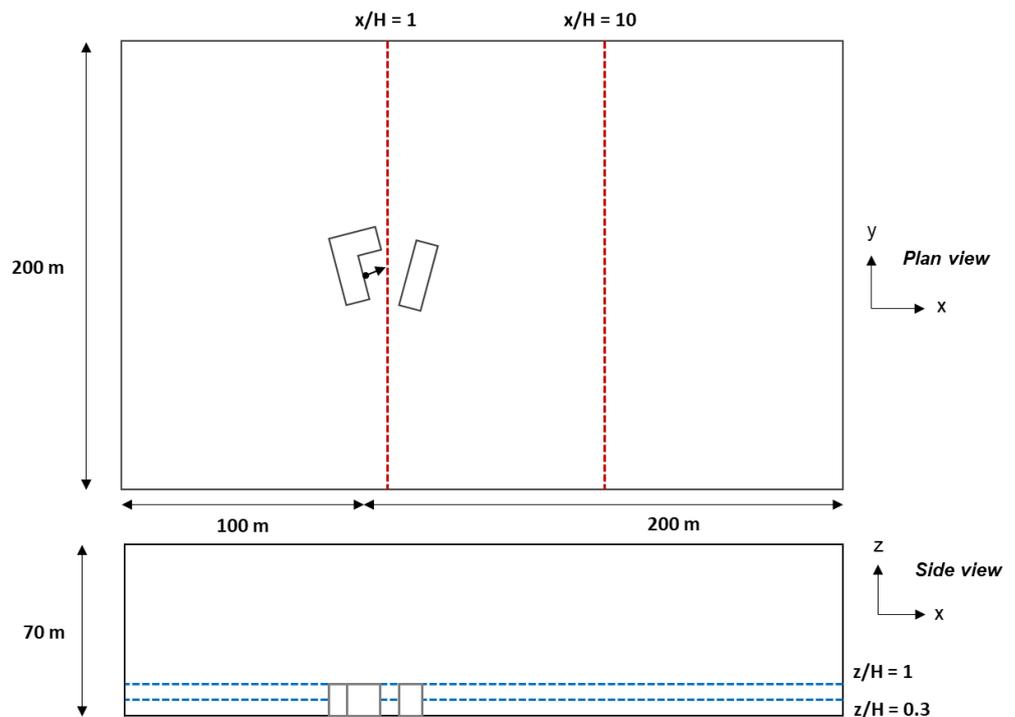


Figure 5. Location of the planes considered for the simulation results.

Overall, the realizable $k-\epsilon$ captures the general trends and peak concentrations, despite certain overpredictions at certain points of the domain. This evaluation serves as a strong basis for simulating the dispersion of the plume in realistic urban environments.

3. Case Study

The case study selected for this research is a chemical plant located in a mining valley in the Principality of Asturias, a province in the north of Spain. The main activity of the plant is the manufacturing of coke as well as the production of coke oven gas as a subproduct of the process. The facility is surrounded by a highly mountainous area, as shown by Figure 6, and it is located less than 500 m from an urban nucleus.



Figure 6. An image of the chemical plant of study and the surrounding environment.

The Integrated Environmental Authorization (IEA) (Integrated Environmental Authorization revision of May 2019 (BOPA, 2019). URL: <https://sede.asturias.es/bopa/2019/05/17/2019-04859.pdf> (accessed on 1 June 2023)) of the facility provides relevant information about its features, operating conditions and sources of atmospheric releases. Among the different emission sources identified in the IEA form, the one for the evacuation of the fumes of the gas combustion in the boiler was selected for analysis. The source is a prominent chimney (elevated point source), 56 m high and 2.96 m in diameter, located at the geographic coordinates 43.288439, -5.674461 . The proximity of the chimney to the nearby hills that widely exceed the height of the stack is a singular feature to highlight, as a chance exists that the exhaust gases are affected by the wind flow's interaction with the land surface. The proximity of the urban nucleus reinforces the need to examine the dispersion mechanisms to detect potentially risky pollution events. Indeed, this source recently underwent a dispersion modelling study to verify the dilution effectivity of the chimney's height, as stated in one of its IEA revisions.

Figure 7a shows a 3D representation of the plant outbuildings surrounded by the natural terrain, seen from the north-west direction. A large hill exists south of the main chimney (red body) whose vertical dimensions far exceed the height of the outlet section (represented by a red line projected onto the surrounding terrain surface). Moreover, these high landforms are significantly close to the source, as indicated by the horizontal distances represented in Figure 7b.

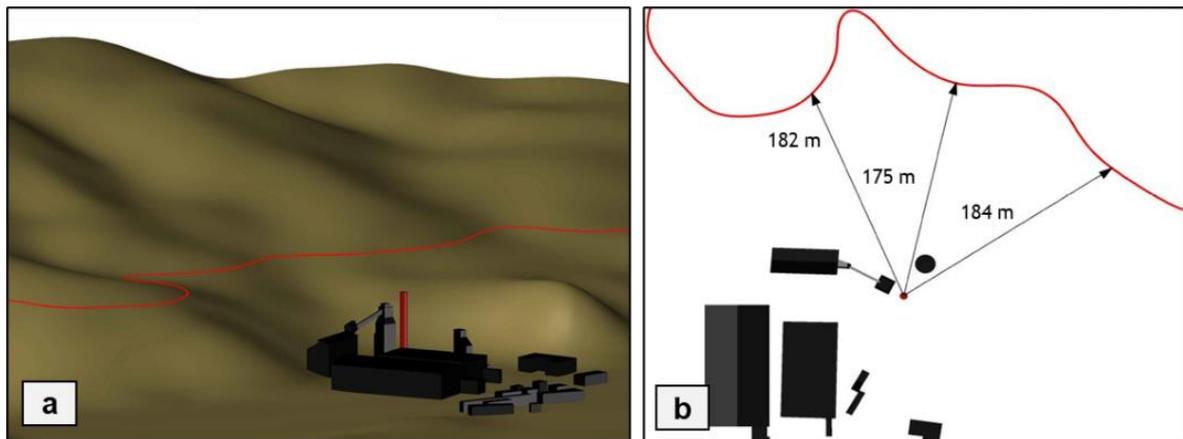


Figure 7. (a) A 3D view of the industry dependencies and the surrounding topography. The red line represents the projection of the chimney's exhaust section elevation onto the terrain surface. (b) Plant view of the facilities with some horizontal distances depicted between the centre of the exhaust section and various points of the projected red line.

3.1. Computational Domain and Mesh Generation

Terrain modelling in CFD studies has traditionally been an important challenge that has been addressed in different ways in the literature [46–50]. When dealing with terrain elevation data, a common approach is to generate a triangulated irregular network (TIN). Although this technique is advantageous in terms of simplicity and fast results, it often suffers from geometric inaccuracies, especially in the case of very large distances with high spatial resolution. These geometry errors have a significant impact on the quality of the subsequent mesh, thus compromising the reliability of the simulations.

To address this problem, this research proposes an alternative technique based on the definition of Bézier curves or splines from terrain elevation data. A sweeping process is then applied using the splines as cross sections to generate a non-uniform rational B-spline (NURBS) surface.

These surfaces are mathematical representations of 3D geometry that can accurately describe any shape. The geometry of the buildings and the wall of the chimney are also included in this step.

Although this method is more time-consuming than TIN surfaces, the good results obtained in terms of geometric quality justify its use. Moreover, this method allows the generation of a continuous surface throughout the whole case study. This is an advantage because it makes it possible to obtain the air section to be modelled (computational domain) as a single volume composed exclusively of the fluid space encompassing the study area. For this purpose, a rectangular parallelepiped is generated and sliced at the bottom by the NURBS surface. This computational domain format facilitates the subsequent grid generation process, with satisfactory results.

The terrain elevation data of the area of interest were retrieved from the Spanish National Centre for Geographic Information (CNIG) (National Center for Geographic Information (CNIG). Data consultation for “Digital Elevation Models: LIDAR 1st Coverage (2008–2015)” [File: PNOA-2012-LOTE-AST-282-4798-ORT-CLA-COL.LAZ] url: <http://centrodedescargas.cnig.es/CentroDescargas> (accessed on 3 September 2022)) in LiDAR point cloud format, which offers versatility for the creation of three-dimensional bodies. These data were used to create a continuous NURBS surface, representing the topographical features of the terrain. The region selected for the analysis is a circular area of 1 km radius, with the main emission source of the industrial facility located at its geometric centre. Next, the bodies of the chimney and the buildings located within the study area were added to the model in the form of simplified parallelepipeds and cylinders. The geometry of the buildings was defined based on the layout information from CADMAPPER service, together with the classification properties of LiDAR point clouds, which allow for the

exploration of the elevation of the points corresponding to the rooftops. The dimensions of the chimney was extracted from its IEA. Figure 8 shows the final appearance of the modelled terrain surface, together with the plant dependencies and buildings.

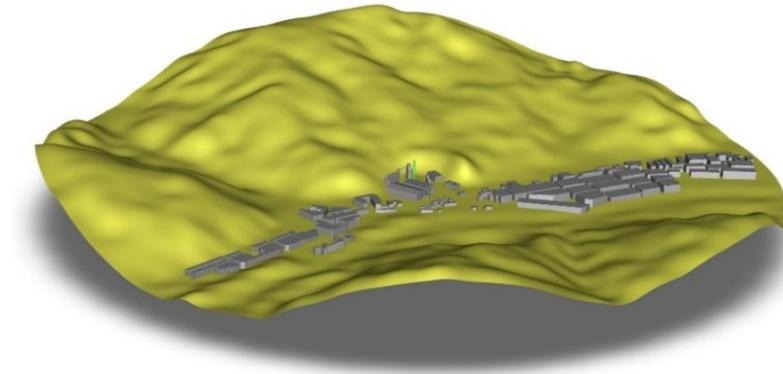


Figure 8. View of the terrain surface modelled with the plant dependencies and buildings.

When designing a computational domain for the simulation of the atmospheric boundary layer, there are some well-known guidelines to consider [43,44]. According to these, the computational domain must be large enough to ensure homogeneous inlet and outlet conditions, as well as to avoid unintended flow gradients due to the flow contraction effect. For that purpose, the model extents are enlarged through the addition of a horizontal plane constituting the bottom or lower limit of the computational domain. This plane bottom is shaped according to the size guidelines given in [44], ensuring that the blockage ratio of the domain is kept below 3% [43]. The recommended minimum dimensions are defined based on the vertical size of the highest obstacle of the model (H_{\max}). In this case study, the H_{\max} parameter corresponds to the elevation of the highest point of the terrain surface with respect to the flat domain bottom.

As well as following these general recommendations, the study has also incorporated other practices from the more recent literature. One of the key features of the case study that requires special attention is the transition between the flat bottom of the domain and the outer boundary of the terrain, the latter having an irregular contour with strong height gradients typical of a valley area. In order to ensure a suitable and progressive transition of the flow from the flat bottom to the terrain area, a smooth transition surface was generated between these two elements with a maximum slope of 30° , in accordance with the findings of [51].

According to the explained scheme, the domain can be virtually divided into an inner domain (including the terrain area and the transition surface) and an outer domain (corresponding to the expanded flat background). Figure 9 shows the different parts and dimensions of the resulting domain schematically, which was fully developed using the commercial computer-aided design software Autocad Civil 3D.

For the domain discretization, a poly-hexcore mesh of 20 million cells was implemented, following a strategy similar to the one explained for the validation case. In this case, three meshes of 10 million cells (coarse), 20 million cells (medium) and 30 million cells (fine) were selected for the grid independency study. Following the same criteria as in the validation case, the difference in the concentration results between a given mesh resolution and the following falls below 5% for the medium case, which was the one selected for the simulations.

The grid was refined around the emission source, where a cylindrical shape of twice the height of the stack and 6 m diameter was defined to limit the size of the cells inside this region up to a maximum of 1.5 m. This configuration ensured that the jet-dominated part of the plume would develop in a high-resolution mesh region [42]. In addition, the outlet face of the chimney was covered with 36 cells of a maximum size of 0.4 m, as previous studies highlight the importance of refining the mesh on the exhaust section [52].

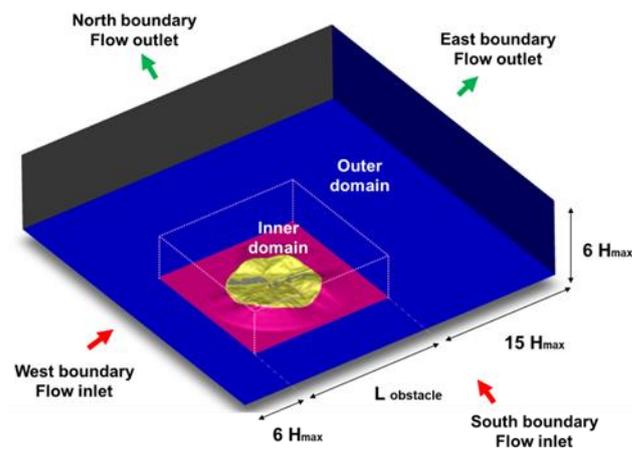


Figure 9. Full computational domain with the different parts and dimensions, where H_{\max} is 249 m and L_{obstacle} is 3600 m.

The cells covering the buildings and terrain surfaces were assigned maximum sizes of 4 and 2.5 m, respectively, with further refinements of up to 2.5 m for terrain to capture proximity to building edges. Away from the buildings, the grid grew gradually to maximum sizes of 10 m within the inner domain and up to 40 m in the top boundary of the outer domain. However, the cells in the bottom of the outer domain were limited to 10 m in the upstream part of the model and to 20 m in the downstream region. The expansion ratio between any two consecutive cells of the domain is at most 1.2, which is key for keeping the truncation error small. Moreover, this ratio decreases locally to 1.1 in critical regions such as the vicinity of the chimney and the buildings' surfaces. Finally, three inflation layers of prisms were added adjacent to the solid walls of the domain, limiting the stretching ratio to a maximum of 1.5 in the vertical direction. Figure 10 shows the final appearance of the computational grid.

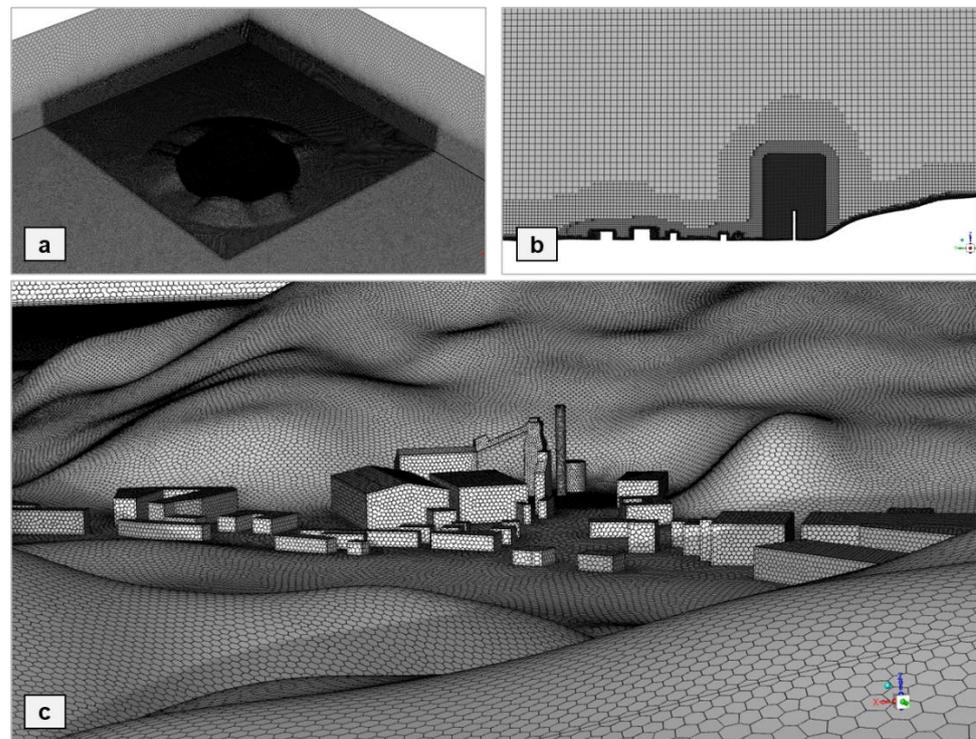


Figure 10. Details of the surface mesh (a,b) and the hexacore volume cells (c).

The resulting mesh presents a sufficiently high resolution to capture the structure of boundary layer dynamics and shows high-quality indicators, including a satisfactory level of cell skewness (0.49), which is important to achieve the convergency of results and low discretization errors during the simulations.

3.2. Simulation Scenarios and Boundary Conditions

When conducting modelling studies of the atmosphere, weather information is key to identifying and selecting the most interesting meteorological scenarios for the research objectives. For that purpose, data were retrieved from the Meriñán weather station (Air quality monitoring stations network of the Principality of Asturias. Hourly data consultation for Meriñán station. url: <https://asturaire.asturias.es/consultas> (accessed on 4 January 2023)), located around 3 km northwest of the facility. Based on this information, the wind frequency roses of each season were generated and are shown in Figure 11.

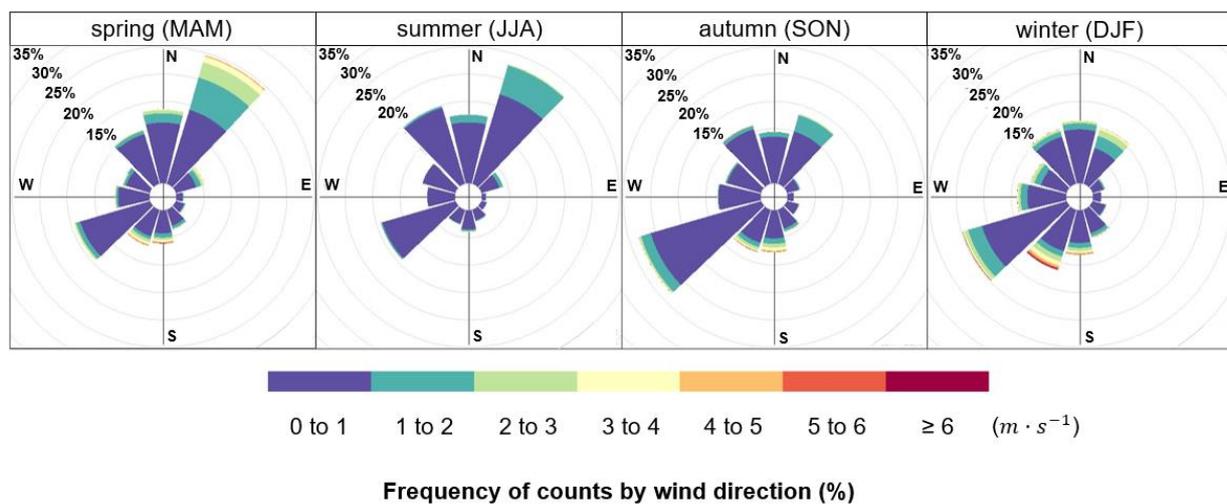


Figure 11. Seasonal wind roses from the Meriñán weather station location.

From the plots, it can be concluded that south-west is the prevailing wind direction most of the year but especially during the cold seasons (autumn and winter), followed by the north-east direction, which prevails during the warm seasons (spring and summer). The wind conditions are mostly calm throughout the year; however, moderate to high wind velocities come mainly from south and south-west directions in the winter and to a lesser extent in spring and autumn. In spring, moderate velocities also occur for the prevailing wind direction of that season (north-east).

This south-west direction is especially interesting for the purpose of this work, as it leads to a situation in which the chimney is located downstream of the nearby hill, potentially exposed to a flow recirculation zone that might develop behind the cliff. This situation might also give rise to the entrapment of the exhaust pollutants, thus negatively affecting the dispersion mechanisms and the evacuation capacity.

In terms of wind velocity, as the focus of this work is on the formation of recirculation zones and swirls, only moderate to high speed conditions, under which these flow features intensify, will be considered for the analysis. Therefore, only wind speed values of at least 6 m/s will be simulated. It should be noted that, for such wind velocities, the atmospheric boundary layer exhibits neutral stratification, and thus thermal effects are either absent or negligible.

According to these criteria, the meteorological scenarios shown in Table 1 were selected for the simulations. Note that a speed of 6 m/s represents a moderate velocity, whereas 10 m/s is considered a high or strong wind. It should also be noted that the combination of high wind speeds and low air kinematic viscosity results in a high Reynolds number in the region of 10^5 .

Table 1. Meteorological scenarios selected for the simulations.

Scenario	Uref at 10 m	Incident Wind Direction	Seasonal Mean Temperature
S1.0	6 m s ⁻¹	210° (SSW)	7.5 °C (winter)
S2.0	10 m s ⁻¹	210° (SSW)	7.5 °C (winter)

The lateral planes of the domain act as either inlets or outlets for the flow, depending on the direction of the incident wind considered in each scenario with respect to the domain boundaries. For a wind flow coming from SW direction, the south and west boundaries of the domain will be treated as inlets, while the north and east boundaries will be the outlets. The outer dimensions applied during the definition phase of the computational domain should be set in accordance with the relative position of each boundary type (inflow or outflow) resulting from each wind scenario.

At the inflow boundaries of the domain, profiles of mean wind velocity, turbulence kinetic energy and turbulence dissipation are imposed based on Richards and Hoxey's set of equations [53] for a neutral ABL, as shown by Expressions (6)–(8). These profiles ensure a homogeneous ABL and constitute a standard among CFD practitioners for wind engineering studies.

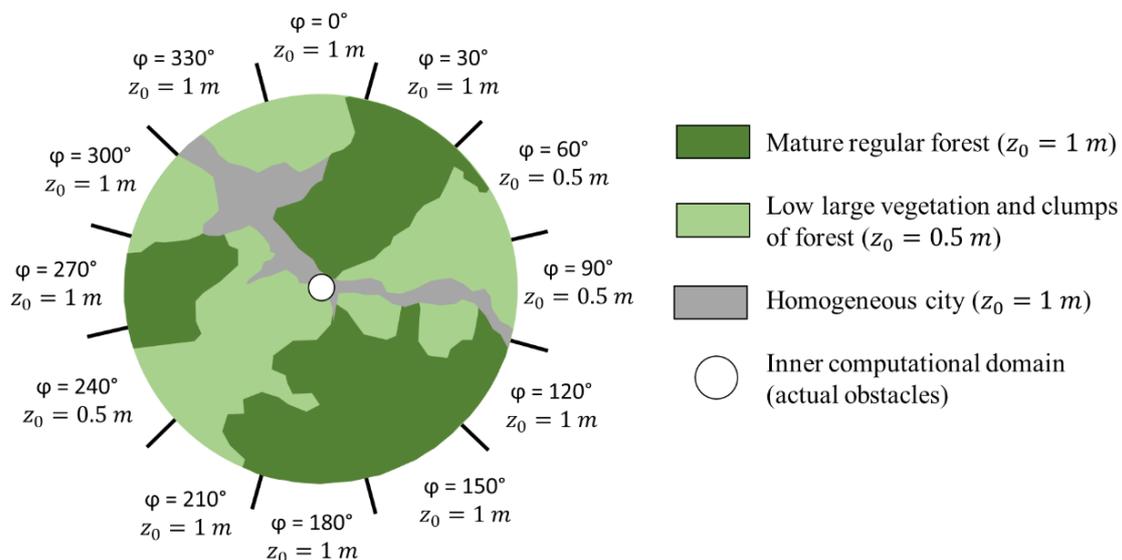
$$U(z) = \frac{u_{ABL}^*}{\kappa} \ln\left(\frac{z+z_0}{z_0}\right) \quad (6)$$

$$k(z) = \frac{u_{ABL}^{*2}}{C_\mu^{0.5}} \quad (7)$$

$$\varepsilon(z) = \frac{u_{ABL}^{*3}}{\kappa(z+z_0)} \quad (8)$$

where u_{ABL}^* is the ABL friction velocity. As in the validation case, zero species background concentration was defined at the inlet planes.

As recommended in aerodynamic studies, an upstream fetch of 5 km was considered for the definition of the atmospheric boundary layer properties [54]. The terrain included within a radial distance of 5 km around the facility was analysed to extract the aerodynamic roughness length z_0 , as shown by Figure 12. This roughness parameter was determined based on the updated Davenport roughness classification [54] at every 30° sector, in accordance with the divisions of the wind roses.

**Figure 12.** Determination of the aerodynamic roughness length parameter (z_0) for different wind intervals in the terrain surrounding the domain.

For the rest of the model boundaries, namely the top, wall and outlet boundaries, the boundary conditions selected are similar to the respective ones applied to the validation case. The source of study is the large chimney dedicated to the evacuation of the fumes resulting from the gas combustion in the boiler. As stated in the plant's IEA, the gas emission occurs on a continuous basis 24 h a day and the main pollutants released into the atmosphere are identified together with their correspondent emission limits in its atmospheric emissions annex. These limits were taken as the reference values to set the proportion of each pollutant in the fumes. The use of waste heat recovery systems is envisaged in the IEA of the facility, whose purpose is to reduce the fuel consumption of the plant, increasing the energy efficiency. However, reducing the temperature at which gases are expelled from the chimney comes at the cost of a consequent decrease in the exit velocity, which eventually means a lower effective emission height. The impact of heat recovery systems on the effective emission height and its consequences on pollution levels were already investigated in [55]. In the study, the authors set different stack exit temperatures to analyse the effect on near-source air quality and defined an indicator to quantify the impact of heat recovery systems.

As for the present study, an initial or reference gas exit temperature of 150 °C was taken, which assumes the full utilization of the heat recovery systems. Note that gas temperatures under this value are normally avoided as they can lead to acid condensates inside the chimney's structure. Then, additional simulations were conducted, increasing the temperature of the gases to 200 °C and 250 °C, assuming the regulation or partial use of the devices. The new simulations are useful for evaluating the impact of waste heat recovery of gases on the dispersion mechanisms, making it possible to set different heat conversion rates to ensure a minimum level of ambient air quality for each weather condition.

On the other hand, exhaust gas velocity is typically in the recommended range of 5–20 m/s. This variable can be calculated for the different temperature conditions according to Equation (9).

$$v_{eg} = C \sqrt{2gH \frac{T_i - T_e}{T_i}} \quad (9)$$

where C is the discharge coefficient (0.65), g is the gravity acceleration, H is the chimney's height, T_i is the gas exit temperature and T_e is the outdoor temperature. The resulting velocities for the different gas exit temperatures are shown in Table 2, considering an outdoor temperature of 7.5 °C, as stated before.

Table 2. Exit gas velocities in m/s for the different temperature conditions.

Ti = 250 °C	Ti = 200 °C	Ti = 150 °C
14.7	13.7	12.5

The exit cross-section of the chimney is defined as a velocity inlet with a uniform velocity profile. Turbulence quantities are computed based on the hydraulic diameter, assuming a 10% turbulence intensity.

3.3. Numeric Approach and Turbulence Model

As supported by the tests performed in the validation case, a steady RANS approach was selected, together with the k - ϵ realizable turbulence model. The values of the model constants are $C_{1\epsilon} = 1.44$, $C_{2\epsilon} = 1.92$, $C_\mu = 0.09$ and $\sigma_k = 1.0$, $\sigma_\epsilon = 1.11$, with the latter imposed in accordance with Richards and Hoxey's inflow profiles [53]. The remaining model settings, such as the discretization scheme, residual thresholds and other numeric parameters, are the same as in the validation case.

4. Results and Discussion

In order to analyse and draw better conclusions from the simulation results, a set of visualization graphs was obtained. Initially, the occurrence of flow recirculation phenomena was confirmed according to the following analysis. Figure 13 shows the velocity magnitude contours on a plane parallel to the incident wind direction passing through the chimney's centre point. In addition, Figures 14 and 15 show, respectively, the flow path lines coloured by velocity magnitude in Scenario S1.0 and Scenario S2.0.

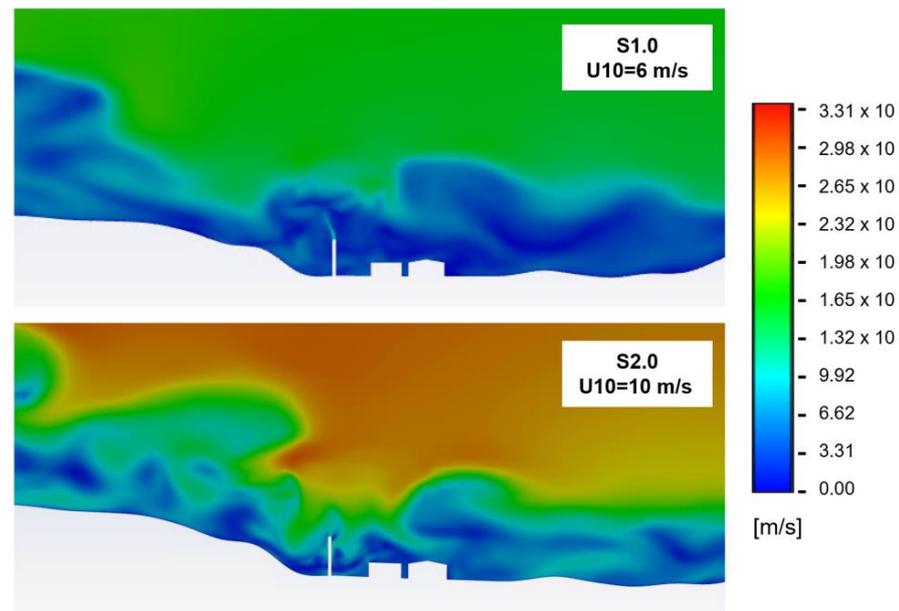


Figure 13. Velocity magnitude contours on a plane parallel to the approaching wind direction passing through the chimney's centre point.

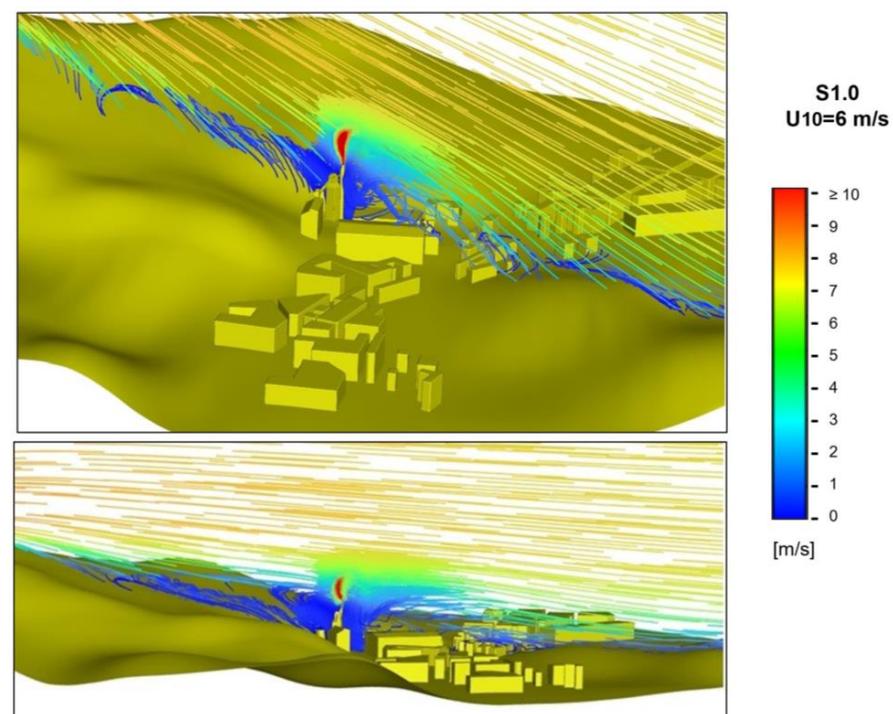


Figure 14. Flow path lines coloured by velocity magnitude on a plane parallel to the approaching wind direction passing through the chimney's centre point in Scenario 1.

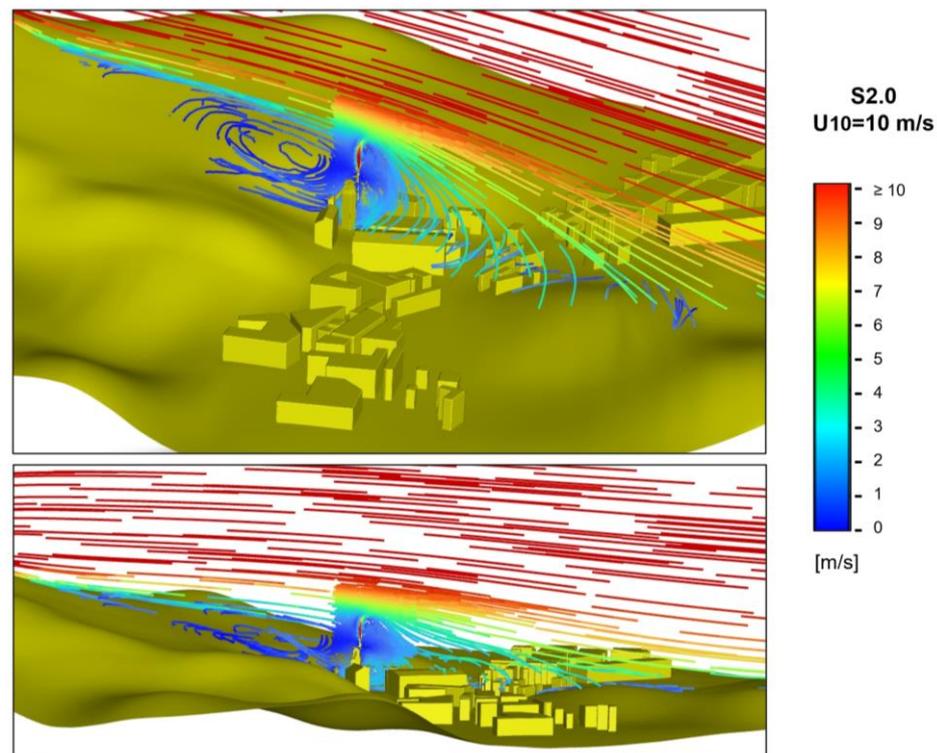


Figure 15. Flow path lines coloured by velocity magnitude on a plane parallel to the approaching wind direction passing through the chimney's centre point in Scenario 2.

In all cases, the formation of flow recirculation region starting at the highest point of the hill and evolving along the downhill slope is clearly visible. When it reaches the position of the chimney, a swirling motion can be identified, which clearly impacts the behaviour of the plume. For scenario S1.0 (210°, 6 m/s wind), the speed of the plume is higher than the velocity of the flow in the vicinity of the exhaust section, allowing the gases to rise a few meters before being diverted by the swirl motion. As the exhaust gases lose their velocity, the plume turns slightly southwards due to the upward motion of the vortex, and then starts to bend northwards with a much lower speed. The observed behaviour looks notably different in Scenario S2.0 (210°, 10 m/s wind) since the wind speed at the exhaust section is now comparable to the exit velocity of the gases. In this case, the plume barely rises, and it is soon dragged southwards with a downward movement. Since the background flow velocities around the chimney's outlet section are now similar or even exceed those of the exhaust plume from a certain height, the latter is much more influenced by the wind.

To assess the influence of the flow dynamics on the pollutant plume, one of the most useful visualization forms that can be obtained from CFD results is the representation of iso-surfaces. The pollutant SO₂ was chosen for the visualization of concentration iso-surfaces for different fractions of the emission levels at the exit cross-section. Figure 16 shows SO₂ iso-concentration surfaces of 1%, 5% and 25% of the source emission levels for the two meteorological scenarios.

The flow recirculation phenomenon and its impact on the plume dispersion can be seen in these representations. In Scenario S1.0, the upward movement of the plume and its subsequent 180° turn can be seen, followed by a downward trajectory on the west side of the chimney. The downward bending motion of the plume causes the pollutants to approach the mountainside to the southwest of the chimney, where a few small houses and farms not explicitly represented in the model geometry are located. This situation may, therefore, have a negative effect on the quality of the air that people living in that area of the mountain breathe. For the lowest concentration fraction, the plume also invades the industrial installations themselves, even if it does not reach ground level. Although the

concentration levels in the latter case might not be significant, possible consequences for the employees of the plant resulting from long-term exposure should not be overlooked.

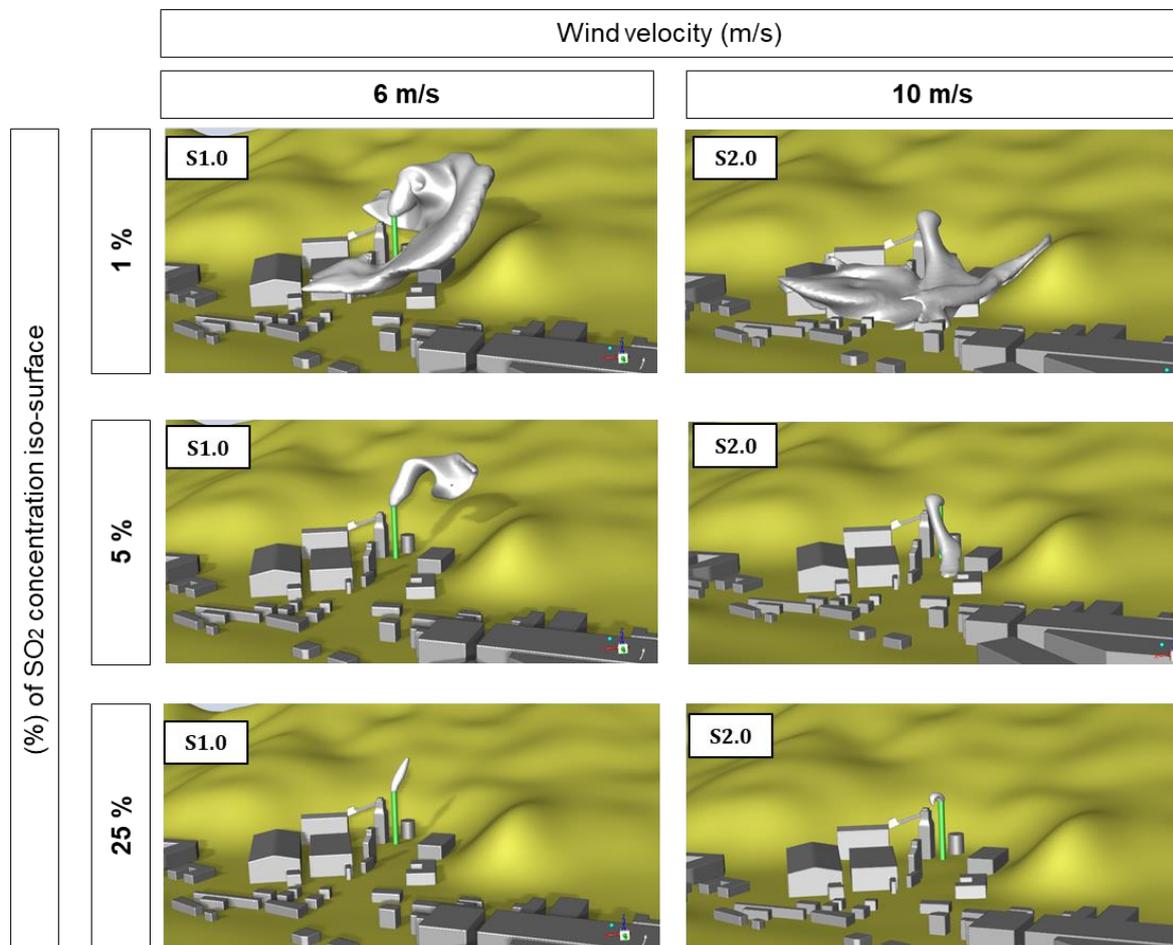


Figure 16. SO₂ iso-concentration surfaces of 1%, 5% and 25% of the source emission level for the two meteorological scenarios.

For Scenario S2.0, the plume exhibits a different behaviour as the stronger winds barely allow it to rise so that the pollutant gases no longer approach the mountainside that was previously affected. In contrast, the industrial facility now receives the greatest impact as the plume falls rapidly downwards, with an almost vertical trajectory, reaching the ground at a higher concentration than in the previous scenario.

As a measure to try to mitigate the impact of the pollutant plume, new simulations were run by varying the exit gases temperature based on the regulation of the heat conversion rates of the facility. Figure 17 shows the SO₂ iso-concentration surfaces for 5% of the emission levels recorded at the exit cross-section, considering the two meteorological scenarios and the different gas outlet temperatures (150 °C, 200 °C and 250 °C).

It can be seen from the figure that increasing the exhaust temperature of gases can have a major impact on the behaviour of the plume. For a 6 m/s wind velocity, increasing the exhaust temperature from 150 °C to 200 °C and significantly limiting the downward dragging of the plume due to the swirling motion. On the other hand, if the exhaust gas temperature rises to 250 °C, the plume cannot drift towards the hillside, resulting in a much higher plume lift. These changes in the plume behaviour contribute to a more effective dilution of the pollutants when approaching ground level.

Also, for a wind velocity of 10 m/s, a gas exit temperature of 200 °C is enough to prevent the plume from collapsing towards the ground of the industrial facility, allowing the plume to expand in a north-easterly direction at a sufficiently safe height from

rooftops of nearby buildings. Increasing the temperature up to 250 °C further improves the dilution mechanisms but it is not necessary to reach such a high temperature to keep the contaminants away from critical areas.

Running CFD simulations for different scenarios and operating conditions has enabled the identification of critical situations in terms of pollutant concentration conditions. Moreover, this tool has helped to define a mitigation strategy, offering a good balance between impact on air quality and operating conditions, the latter determining the costs of the fuel consumption in the plant. The analysis conducted here can be extended, adding other meteorological conditions to cover as many scenarios as possible. This would allow for the adjustment of the emission parameters in most situations.

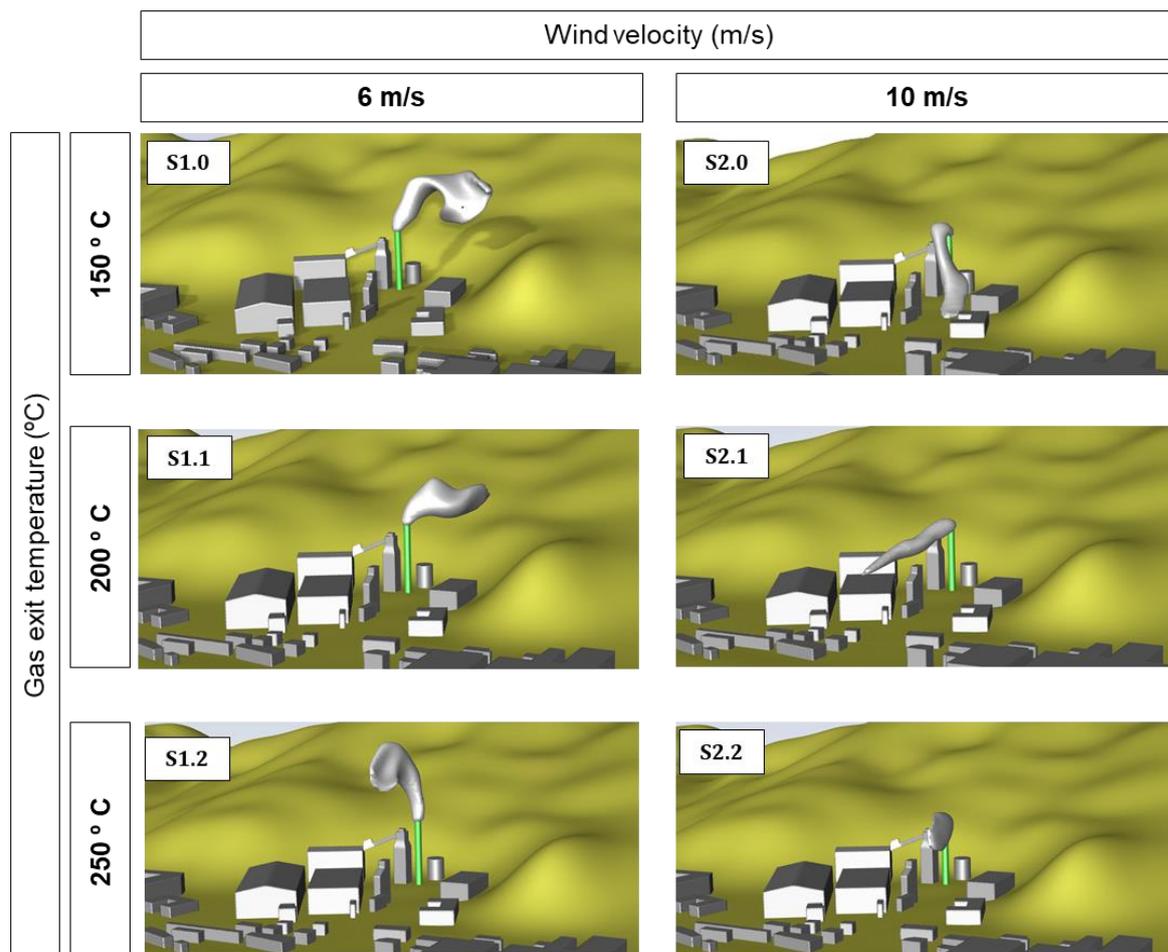


Figure 17. SO₂ iso-concentration surfaces of 5% of the source emission level for the two meteorological scenarios and the different gas exit temperatures assessed.

5. Conclusions

This research has addressed the challenge of simulating the dispersion of pollutants in a case study which, due to its complex nature in terms of flow phenomena, must be tackled using advanced modelling techniques such as CFD.

The complexity and singularity of the selected case study can be summarised as an elevated industrial source located on steep terrain, with mountains in close proximity to the source with elevations well above the height of the chimney. Furthermore, given the location of the source in relation to the hill and the prevailing winds in the area, significant flow recirculation phenomena can be expected in the area.

To address this problem, an original methodology was developed to provide a robust computational domain for cases of complex scenarios such as the one addressed in this

research. This methodology relies on the use of LiDAR elevation data (although other formats of digital terrain elevation models are also valid) to shape the topographic surface of the area, as well as urban planning data to integrate buildings and other civil infrastructure that may impact the flow patterns. This methodology attempts to achieve a clean and smoothed geometry domain, which is one of the main challenges when modelling large areas of terrain with steep characteristics and the presence of multiple urban obstacles.

Failure to generate a sufficiently robust geometry for the CFD model can lead to serious problems in the mesh generation process, compromising the feasibility and reliability of the simulations. In order to facilitate the grid creation process, this research proposes a strategy to generate the geometry domain as a single volume, which consists exclusively of the fluid space encompassing the study area. In addition, not only the most common and traditional guidelines for geometry and mesh generation were followed but other practices identified in the recent bibliography were also utilised to achieve an appropriate geometry and grid design.

With the CFD model in place, the simulations of pollutant dispersion under different meteorological regimes have revealed the detailed plume path in the vicinity of the source. The formation of flow recirculation zones affecting the exhaust section of the chimney were confirmed in the simulations. Also, SO₂ iso-concentration surfaces of different values were computed, revealing unexpected deviations in the path of the plume before it is diluted in the air, while being carried away from the stack section.

On the other hand, the versatility of the CFD models has made it possible to verify the effectiveness of a pollution mitigation measure based on the stack exit temperature, which is obtained via the regulation of the waste heat recovery systems of the plant. In the analysis performed, the effect of three different gas temperatures on the plume dispersion was considered. The simulation results indicate that, under certain meteorological conditions, the plume exhibits changes in its trajectory that cause the pollutants to approach the mountainside to the southwest of the chimney, where some small houses could be exposed to high concentration levels. In this situation, the simulation results also show that increasing the gas exit temperature is useful to keep the plume away from the inhabited area of the mountain during the high exposure events identified in the previous step.

Therefore, the main achievements of the research were a methodology to generate robust computational domains for complex terrain scenarios and the use of the CFD model to assess the effectiveness of a pollution mitigation measure in different weather conditions. These results can be seen as a tool to support the decision-making process in finding a compromise between the environmental pollution impact and the fuel consumption of the plant.

As a continuation of this research, certain future tasks have been identified:

- Testing the described methodology in different locations.
- Carrying out simulations in stratified, stable and unstable atmospheric conditions.
- Comparing the results of the CFD model with those of an operational or fast response formulation.

Author Contributions: Conceptualization, E.A.-Y.; investigation, E.A.-Y. and V.M.F.-P.; methodology, E.A.-Y.; project administration, J.L.C.-C.; resources, J.L.C.-C.; software, V.M.F.-P.; supervision, E.Á.-Á. and M.J.S.-L.; validation, E.Á.-Á. and M.J.S.-L.; visualization, V.M.F.-P.; writing—original draft, E.A.-Y.; writing—review and editing, E.Á.-Á. and M.J.S.-L. All authors have read and agreed to the published version of the manuscript.

Funding: This research was funded by the *Agencia Estatal de Investigación* (AEI) of Spain, grant number DI-17-09630/AEI.

Data Availability Statement: All the data sources are publicly available and have been identified in the article, except the EMU dataset, which can be requested at (http://camp.cos.gmu.edu/data_resources_overview.html (accessed on 20 November 2022)).

Conflicts of Interest: The authors declare no conflict of interest.

References

1. ST/ESA/SER.A/420; World Urbanization Prospects: The 2018 Revision. United Nations. Department of Economic and Social Affairs. Population Division: New York, NY, USA, 2019.
2. European Environment Agency (EEA) Europe's Air Quality Status 2022 (Briefing). 2022. Available online: <https://www.eea.europa.eu/publications/status-of-air-quality-in-Europe-2022> (accessed on 28 November 2022).
3. Schraufnagel, D.E.; Balmes, J.R.; Cowl, C.T.; De Matteis, S.; Jung, S.H.; Mortimer, K.; Perez-Padilla, R.; Rice, M.B.; Riojas-Rodriguez, H.; Sood, A.; et al. Air Pollution and Noncommunicable Diseases: A Review by the Forum of International Respiratory Societies' Environmental Committee, Part 2: Air Pollution and Organ Systems. *Chest* **2019**, *155*, 417–426. [[CrossRef](#)]
4. Lateb, M.; Meroney, R.N.; Yataghene, M.; Fellouah, H.; Saleh, F.; Boufadel, M.C. On the Use of Numerical Modelling for Near-Field Pollutant Dispersion in Urban Environments—A Review. *Environ. Pollut.* **2016**, *208*, 271–283. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
5. Wen, H.; Malki-Epshtein, L. A Parametric Study of the Effect of Roof Height and Morphology on Air Pollution Dispersion in Street Canyons. *J. Wind. Eng. Ind. Aerodyn.* **2018**, *175*, 328–341. [[CrossRef](#)]
6. van Hooff, T.; Blocken, B. Coupled Urban Wind Flow and Indoor Natural Ventilation Modelling on a High-Resolution Grid: A Case Study for the Amsterdam ArenA Stadium. *Environ. Model. Softw.* **2010**, *25*, 51–65. [[CrossRef](#)]
7. Tauviqirrahman, M.; Jamari, J.; Susilowati, S.; Pujiastuti, C.; Setiyana, B.; Pasaribu, A.H.; Ammarullah, M.I. Performance Comparison of Newtonian and Non-Newtonian Fluid on a Heterogeneous Slip/No-Slip Journal Bearing System Based on CFD-FSI Method. *Fluids* **2022**, *7*, 225. [[CrossRef](#)]
8. Jamari, J.; Ammarullah, M.I.; Santoso, G.; Sugiharto, S.; Supriyono, T.; Permana, M.S.; Winarni, T.I.; van der Heide, E. Adopted Walking Condition for Computational Simulation Approach on Bearing of Hip Joint Prosthesis: Review over the Past 30 Years. *Heliyon* **2022**, *8*, e12050. [[CrossRef](#)]
9. Zhao, M.; Faqihah, Z.; Salaha, M.; Ammarullah, M.I.; Nur, N.; Abdullah, A.A.; Umairah, A.; Aziz, A.; Gan, H.-S.; Abdullah, A.H.; et al. Biomechanical Effects of the Porous Structure of Gyroid and Voronoi Hip Implants: A Finite Element Analysis Using an Experimentally Validated Model. *Materials* **2023**, *16*, 3298. [[CrossRef](#)]
10. Ammarullah, M.I.; Hartono, R.; Supriyono, T.; Santoso, G.; Sugiharto, S.; Permana, M.S. Polycrystalline Diamond as a Potential Material for the Hard-on-Hard Bearing of Total Hip Prosthesis: Von Mises Stress Analysis. *Biomedicines* **2023**, *11*, 951. [[CrossRef](#)]
11. Prakoso, A.T.; Basri, H.; Adanta, D.; Yani, I.; Ammarullah, M.I.; Akbar, I.; Ghazali, F.A.; Syahrom, A.; Kamarul, T. The Effect of Tortuosity on Permeability of Porous Scaffold. *Biomedicines* **2023**, *11*, 427. [[CrossRef](#)]
12. Putra, R.U.; Basri, H.; Prakoso, A.T.; Chandra, H.; Ammarullah, M.I.; Akbar, I.; Syahrom, A.; Kamarul, T. Level of Activity Changes Increases the Fatigue Life of the Porous Magnesium Scaffold, as Observed in Dynamic Immersion Tests, over Time. *Sustainability* **2023**, *15*, 823. [[CrossRef](#)]
13. Montazeri, H.; Blocken, B. CFD Simulation of Wind-Induced Pressure Coefficients on Buildings with and without Balconies: Validation and Sensitivity Analysis. *Build Environ.* **2013**, *60*, 137–149. [[CrossRef](#)]
14. Hajra, B.; Stathopoulos, T.; Bahloul, A. The Effect of Upstream Buildings on Near-Field Pollutant Dispersion in the Built Environment. *Atmos. Environ.* **2011**, *45*, 4930–4940. [[CrossRef](#)]
15. Vardoulakis, S.; Fisher, B.E.A.; Pericleous, K.; Gonzalez-Flesca, N. Modelling Air Quality in Street Canyons: A Review. *Atmos. Environ.* **2003**, *37*, 155–182. [[CrossRef](#)]
16. Kubilay, A.; Neophytou, M.K.A.; Matsentides, S.; Loizou, M.; Carmeliet, J. The Pollutant Removal Capacity of Urban Street Canyons as Quantified by the Pollutant Exchange Velocity. *Urban Clim.* **2017**, *21*, 136–153. [[CrossRef](#)]
17. Liu, C.H.; Wong, C.C.C. On the Pollutant Removal, Dispersion, and Entrainment over Two-Dimensional Idealized Street Canyons. *Atmos. Res.* **2014**, *135–136*, 128–142. [[CrossRef](#)]
18. Tong, Z.; Zhang, K.M. The Near-Source Impacts of Diesel Backup Generators in Urban Environments. *Atmos. Environ.* **2015**, *109*, 262–271. [[CrossRef](#)]
19. Refrigerating; Engineers, A.-C. *ASHRAE Handbook: Heating, Ventilating, and Air-Conditioning Applications*; American Society of Heating, Refrigerating and Air Conditioning Engineers: Atlanta, GA, USA, 2003.
20. Kristóf, G.; Rácz, N.; Balogh, M. Adaptation of Pressure Based CFD Solvers for Mesoscale Atmospheric Problems. *Bound. Layer Meteorol.* **2009**, *131*, 85–103. [[CrossRef](#)]
21. Holmes, N.S.; Morawska, L. A Review of Dispersion Modelling and Its Application to the Dispersion of Particles: An Overview of Different Dispersion Models Available. *Atmos. Environ.* **2006**, *40*, 5902–5928. [[CrossRef](#)]
22. Cimorelli, A.J.; Perry, S.G.; Venkatram, A.; Weil, J.C.; Paine, R.J.; Wilson, R.B.; Lee, R.F.; Peters, W.D.; Brode, R.W. AERMOD: A Dispersion Model for Industrial Source Applications. Part I: General Model Formulation and Boundary Layer Characterization. *J. Appl. Meteorol.* **2005**, *44*, 682–693. [[CrossRef](#)]
23. Olesen, H.R.; Berkowicz, R.; Ketzler, M.; Løfstrøm, P. Validation of OML, AERMOD/PRIME and MISKAM Using the Thompson Wind-Tunnel Dataset for Simple Stack-Building Configurations. *Bound. Layer Meteorol.* **2009**, *131*, 73–83. [[CrossRef](#)]
24. Haq, A.u.; Nadeem, Q.; Farooq, A.; Irfan, N.; Ahmad, M.; Ali, M.R. Assessment of AERMOD Modeling System for Application in Complex Terrain in Pakistan. *Atmos. Pollut. Res.* **2019**, *10*, 1492–1497. [[CrossRef](#)]
25. U.S. Environmental Protection Agency; Office of Air Quality Planning and Standards. *Comparison of Regulatory Design Concentrations. AERMOD vs. ISCST3, CTDMPPLUS, ISC-PRIME*; U.S. Environmental Protection Agency Office of Air Quality Planning and Standards Emissions, Monitoring and Analysis Division Research: Triangle Park, NC, USA, 2003.

26. Li, X.X.; Liu, C.H.; Leung, D.Y.C.; Lam, K.M. Recent Progress in CFD Modelling of Wind Field and Pollutant Transport in Street Canyons. *Atmos. Environ.* **2006**, *40*, 5640–5658. [[CrossRef](#)]
27. Mazzoldi, A.; Hill, T.; Colls, J.J. CFD and Gaussian Atmospheric Dispersion Models: A Comparison for Leak from Carbon Dioxide Transportation and Storage Facilities. *Atmos. Environ.* **2008**, *42*, 8046–8054. [[CrossRef](#)]
28. Venkatram, A. *Validation of Concentrations Estimated from Air Dispersion Modeling for Source-Receptor Distances of Less than 100 Meters*; Sacramento, California, California Air Resources Board, Research Division: Sacramento, CA, USA, 2003.
29. Liu, X.; Godbole, A.; Lu, C.; Michal, G.; Venton, P. Optimisation of Dispersion Parameters of Gaussian Plume Model for CO₂ Dispersion. *Environ. Sci. Pollut. Res.* **2015**, *22*, 18288–18299. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
30. Pirhalla, M.; Heist, D.; Perry, S.; Tang, W.; Brouwer, L. Simulations of Dispersion through an Irregular Urban Building Array. *Atmos. Environ.* **2021**, *258*, 118500. [[CrossRef](#)]
31. Hall, R.C. Evaluating Modelling Uncertainty-Project EMU Final Report. In *WS Atkins Report WSA/AM5017/R7*; WS Atkins Consultants Ltd.: Surrey, UK, 1997.
32. Blocken, B. Computational Fluid Dynamics for Urban Physics: Importance, Scales, Possibilities, Limitations and Ten Tips and Tricks towards Accurate and Reliable Simulations. *Build Environ.* **2015**, *91*, 219–245. [[CrossRef](#)]
33. Danny, M.; Lamura, P.; Ammarullah, M.I.; Hidayat, T.; Maula, M.I.; Jamari, J.; Priharyoto Bayuseno, A.; Bayuseno, P. Diameter Ratio and Friction Coefficient Effect on Equivalent Plastic Strain (PEEQ) during Contact between Two Brass Solids. *Cogent Eng.* **2023**, *10*, 2218691. [[CrossRef](#)]
34. Lamura, M.D.P.; Hidayat, T.; Ammarullah, M.I.; Bayuseno, A.P.; Jamari, J. Study of Contact Mechanics between Two Brass Solids in Various Diameter Ratios and Friction Coefficient. *Proc. Inst. Mech. Eng. Part J J. Eng. Tribol.* **2023**. [[CrossRef](#)]
35. Jamari, J.; Ammarullah, M.I.; Santoso, G.; Sugiharto, S.; Supriyono, T.; van der Heide, E. In Silico Contact Pressure of Metal-on-Metal Total Hip Implant with Different Materials Subjected to Gait Loading. *Metals* **2022**, *12*, 1241. [[CrossRef](#)]
36. Cebeci, T.; Bradshaw, P. *Momentum Transfer in Boundary Layers*; Hemisphere: Washington, DC, USA, 1977.
37. Launder, B.E.; Spalding, D.B. The Numerical Computation of Turbulent Flows. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **2023**, *3*, 269–289. [[CrossRef](#)]
38. Blocken, B.; Stathopoulos, T.; Carmeliet, J. CFD Simulation of the Atmospheric Boundary Layer: Wall Function Problems. *Atmos. Environ.* **2007**, *41*, 238–252. [[CrossRef](#)]
39. Tominaga, Y.; Stathopoulos, T. Ten Questions Concerning Modeling of Near-Field Pollutant Dispersion in the Built Environment. *Build Environ.* **2016**, *105*, 390–402. [[CrossRef](#)]
40. Blocken, B.; Janssen, W.D.; van Hooff, T. CFD Simulation for Pedestrian Wind Comfort and Wind Safety in Urban Areas: General Decision Framework and Case Study for the Eindhoven University Campus. *Environ. Model. Softw.* **2012**, *30*, 15–34. [[CrossRef](#)]
41. Lateb, M.; Masson, C.; Stathopoulos, T.; Bédard, C. Numerical Simulation of Pollutant Dispersion around a Building Complex. *Build Environ.* **2010**, *45*, 1788–1798. [[CrossRef](#)]
42. Yang, B.; Zhang, K.M. CFD-Based Turbulent Reactive Flow Simulations of Power Plant Plumes. *Atmos. Environ.* **2017**, *150*, 77–86. [[CrossRef](#)]
43. Tominaga, Y.; Mochida, A.; Yoshie, R.; Kataoka, H.; Nozu, T.; Yoshikawa, M.; Shirasawa, T. AIJ Guidelines for Practical Applications of CFD to Pedestrian Wind Environment around Buildings. *J. Wind. Eng. Ind. Aerodyn.* **2008**, *96*, 1749–1761. [[CrossRef](#)]
44. Franke, J.; Hellsten, A.; Schlünzen, K.H.; Carissimo, B. The COST 732 Best Practice Guideline for CFD Simulation of Flows in the Urban Environment: A Summary. *Int. J. Environ. Pollut.* **2011**, *44*, 419–427. [[CrossRef](#)]
45. Du, Y.; Mak, C.M.; Ai, Z. Modelling of Pedestrian Level Wind Environment on a High-Quality Mesh: A Case Study for the HKPolyU Campus. *Environ. Model. Softw.* **2018**, *103*, 105–119. [[CrossRef](#)]
46. Hong, S.; Lee, I.; Hwang, H.; Seo, I.; Bitog, J.; Kwon, K.; Song, J.; Moon, O.; Kim, K.; Ko, H. CFD Modelling of Livestock Odour Dispersion over Complex Terrain, Part I: Topographical Modelling. *Biosyst. Eng.* **2011**, *108*, 253–264. [[CrossRef](#)]
47. Ha, T.; Lee, I.b.; Kwon, K.-s.; Lee, S.J. Development of a Micro-Scale CFD Model to Predict Wind Environment on Mountainous Terrain. *Comput. Electron. Agric.* **2018**, *149*, 110–120. [[CrossRef](#)]
48. Balogh, M.; Parente, A.; Benocci, C. RANS Simulation of ABL Flow over Complex Terrains Applying an Enhanced K- ϵ Model and Wall Function Formulation: Implementation and Comparison for Fluent and OpenFOAM. *J. Wind. Eng. Ind. Aerodyn.* **2012**, *104–106*, 360–368. [[CrossRef](#)]
49. Mughal, M.O.; Lynch, M.; Yu, F.; Sutton, J. Forecasting and Verification of Winds in an East African Complex Terrain Using Coupled Mesoscale—And Micro-Scale Models. *J. Wind. Eng. Ind. Aerodyn.* **2018**, *176*, 13–20. [[CrossRef](#)]
50. Huang, W.; Zhang, X. Wind Field Simulation over Complex Terrain under Different Inflow Wind Directions. *Wind. Struct. Int. J.* **2019**, *28*, 239–253. [[CrossRef](#)]
51. An, K.; Wong, S.M.; Fung, J.C.H.; Ng, E. Revisit of Prevailing Practice Guidelines and Investigation of Topographical Treatment Techniques in CFD-Based Air Ventilation Assessments. *Build Environ.* **2020**, *169*, 106580. [[CrossRef](#)]
52. Tominaga, Y.; Murakami, S.; Mochida, A. CFD Prediction of Gaseous Diffusion around a Cubic Model Using a Dynamic Mixed SGS Model Based on Composite Grid Technique. *J. Wind. Eng. Ind. Aerodyn.* **1997**, *67–68*, 827–841. [[CrossRef](#)]
53. Richards, P.J.; Hoxey, R.P. Appropriate Boundary Conditions for Computational Wind Engineering Models Using the K- ϵ Turbulence Model. *J. Wind. Eng. Ind. Aerodyn.* **1993**, *46–47*, 145–153. [[CrossRef](#)]

54. Wieringa, J. Updating the Davenport Roughness Classification. *J. Wind. Eng. Ind. Aerodyn.* **1992**, *41*, 357–368. [[CrossRef](#)]
55. Yang, B.; Gu, J.; Zhang, K.M. The Effect of Heat Recovery on Near-Source Plume Dispersion of a Simple Cycle Gas Turbine. *Atmos. Environ.* **2018**, *184*, 47–55. [[CrossRef](#)]

Disclaimer/Publisher's Note: The statements, opinions and data contained in all publications are solely those of the individual author(s) and contributor(s) and not of MDPI and/or the editor(s). MDPI and/or the editor(s) disclaim responsibility for any injury to people or property resulting from any ideas, methods, instructions or products referred to in the content.