

# CAPÍTULO 5

## Modelos numéricos aplicados

*Micaela B. Del Sole y Erica Y. Sanchez*

En este capítulo se abordará el modelado numérico desde la concepción de modelado CFD (*Computational Fluid Dynamics*), asumiendo que una descripción detallada de la fluidodinámica atmosférica aporta una mejor comprensión de la dinámica del contaminante a escalas iguales o menores a las locales. En este capítulo se facilitan los conceptos para comprender qué es el modelado CFD y cómo trabaja, así como también la descripción de los pasos necesarios para desarrollar un proyecto eficiente, tomando como base cursos de entrenamiento de modelado CFD de la compañía ESSS (Engineering Simulation and Scientific Software), proveedora de las licencias ANSYS CFD (ESSS, 2022).

Se comienza aquí con el desarrollo de un marco teórico que introducirá a casos de estudio de dispersión de contaminantes, como así también a los softwares más utilizados.

### CFD

La dinámica de los fluidos computacional, CFD (*Computational Fluid Dynamics*), es la ciencia que predice el movimiento de los fluidos, la transferencia de calor y masa, las reacciones químicas y otros fenómenos relacionados. Para predecir esos fenómenos, CFD resuelve las ecuaciones de conservación de masa, energía y momento. Dada la complejidad de los sistemas de ecuaciones que representan a los fenómenos, es necesario aplicar métodos numéricos para encontrar una solución. Entre ellos se destacan las diferencias finitas, elementos finitos o volúmenes finitos. Su resolución se ejecuta en computadoras con capacidad para realizar un gran número de cálculos por unidad de tiempo. Como resultado, se puede obtener información acerca de la dinámica del fluido, tal como la distribución de presiones, velocidad y temperatura, fuerzas actuantes (sustentación, arrastre), distribución de fases múltiples (gas-líquido, gas-sólido), especies (reacciones, combustión, contaminación), entre otras.

#### ¿Cómo trabaja CFD?

Para realizar un modelado CFD, es necesario comenzar por la discretización del dominio, esto implica representar el espacio continuo en un conjunto finito de celdas o volúmenes de control (Fig. 5.1). En cada una de las celdas se resolverán cada una de las ecuaciones involu-

cradas en el sistema que representa a los fenómenos (Ec. 1). Para ello, estas ecuaciones diferenciales parciales deben ser discretizadas en un conjunto de ecuaciones algebraicas, que luego serán resueltas numéricamente para representar el campo de soluciones.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \phi dV + \oint_A \rho \phi V \cdot dA = \oint_A \Gamma \cdot \nabla \phi \cdot dA + \int_V S \cdot \phi dV \quad \text{Ec. 1}$$

En el lado izquierdo de la Ec.1 se encuentra al primer término que representa a la componente no estacionaria del sistema, que incluye a la variable tiempo, y al segundo término que describe a los fenómenos convectivos. Del lado derecho de la Ec.1 se halla el componente de difusión seguido del término que representa la fuente de emisión.

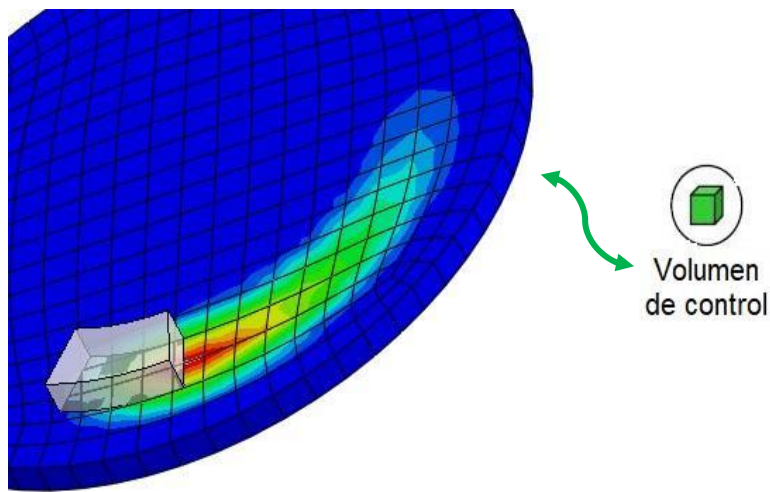


Fig.5.1. Discretización del dominio en volúmenes de control.

Lo interesante de un proyecto de simulación CFD, es que todos siguen la misma secuencia de pasos que va desde la planificación inicial hasta el análisis de los resultados.

**Paso 1-** Identificación del problema

- Definir los objetivos
- Identificación del dominio

**Paso 2-** Preprocesamiento

- Geometría
- Mallado
- Física del modelo
- Configuración del *solver*

**Paso 3-** Procesamiento

- Cálculo de la solución

**Paso 4-** Postprocesamiento

- Análisis de resultados

**Paso 5-** Actualización/ajuste del modelado

### Paso 1- Identificación del problema

Un ejercicio para **definir los objetivos** del modelado y comenzar a evaluar la validez de tu hipótesis inicial, consta en buscar respuestas a las siguientes preguntas:

¿Qué resultado estás buscando? ¿Cómo y para qué lo vas a utilizar? ¿Qué simplificaciones podés asumir en tu modelado respecto al sistema real? ¿Qué modelos físicos necesitas incluir en tu análisis? ¿Contás con toda la información necesaria para ejecutar el modelado CFD? ¿Qué grado de exactitud precisas en tu cálculo? ¿Qué tan rápido necesitas tu resultado? ¿Es el modelado CFD la herramienta adecuada para aplicar?

Definidos los objetivos, es necesario a continuación **identificar el dominio de modelado**. Esto implica limitar el dominio de interés como parte de un gran sistema, y que pueda dar respuesta a los objetivos. El desafío pretende elegir y reunir la información sobre las condiciones de contorno del dominio seleccionado.

### Paso 2- Preprocesamiento

En este paso, es necesario obtener la región fluida de la representación a partir de una **geometría** de modelado. Para ello, puede que ya contemos con un modelo CAD (computer-aided design) o un diseño asistido por computadora, o en su defecto necesitamos utilizar un diseñador para crear la geometría sólida y a partir de ahí elaborar un recinto para aislar el fluido, o ejecutar una extracción de la región fluida interior a un sólido (Fig. 5.2). Recordemos que la simplificación de una geometría puede implicar la remoción de algunos detalles, como puntas o filos, que dificulten alcanzar un buen mallado. Asimismo, resulta importante evaluar si es necesario dividir el dominio en subdominios para adecuar a las condiciones de contorno existentes.

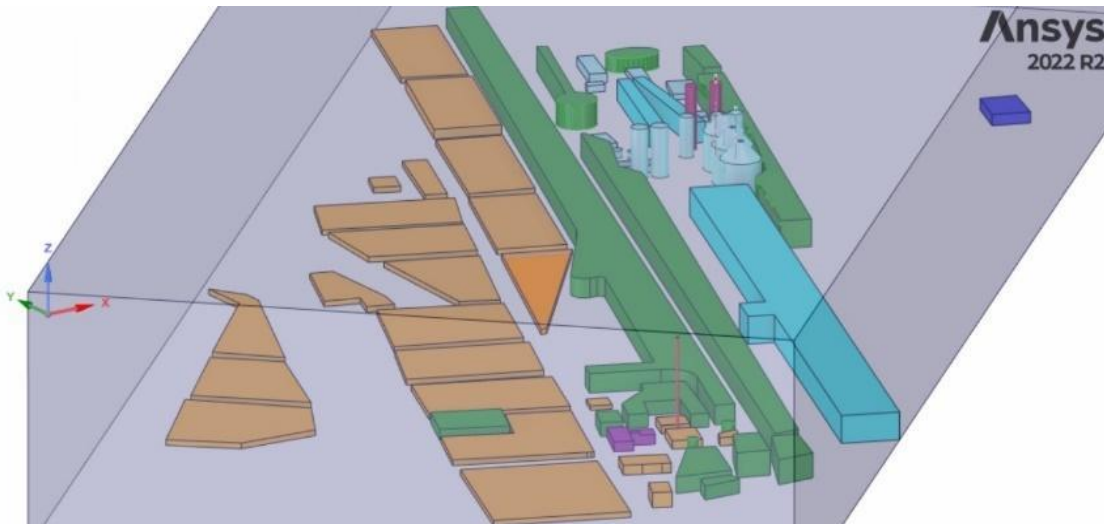


Fig.5.2. Geometría de una zona mixta industrial-residencial.

A continuación, se procede a **diseñar y a crear la malla**, cuyo procedimiento consiste en discretizar el dominio de la región fluida. Para ello, una pregunta a responderse es qué grado de resolución de malla es requerida en cada región del dominio. Si logramos predecir cuáles serán

las regiones en las que se manifiestan los mayores gradientes de las variables de interés, tendremos formulada parte de la respuesta debido a que estos cambios deben ser bien descritos por el modelado, y por tanto también por una buena malla. Otra cuestión por considerar en el mallado es el tipo de elemento a utilizar, entendiendo que siempre se priorizará el uso de aquellos que generen menor difusión numérica en la adaptación de los elementos a las formas geométricas. Si hablamos de elementos volumétricos, los hexaedros se prefieren frente a los tetraedros siempre que se puedan aplicar ya que las mallas con elementos hexaédricos son estructuradas y pueden alinearse al fenómeno físico, asimismo requieren de menos elementos y convergen rápidamente a una solución con buena precisión. En tal sentido estas mallas se vuelven muy eficientes. Si, por lo contrario, nos encontramos con una geometría compleja, no tendremos más opción que trabajar con elementos tetraédricos ya que permiten una buena adaptación a la geometría, y resultan simples para alcanzar una buena calidad de malla (Fig.5.3).

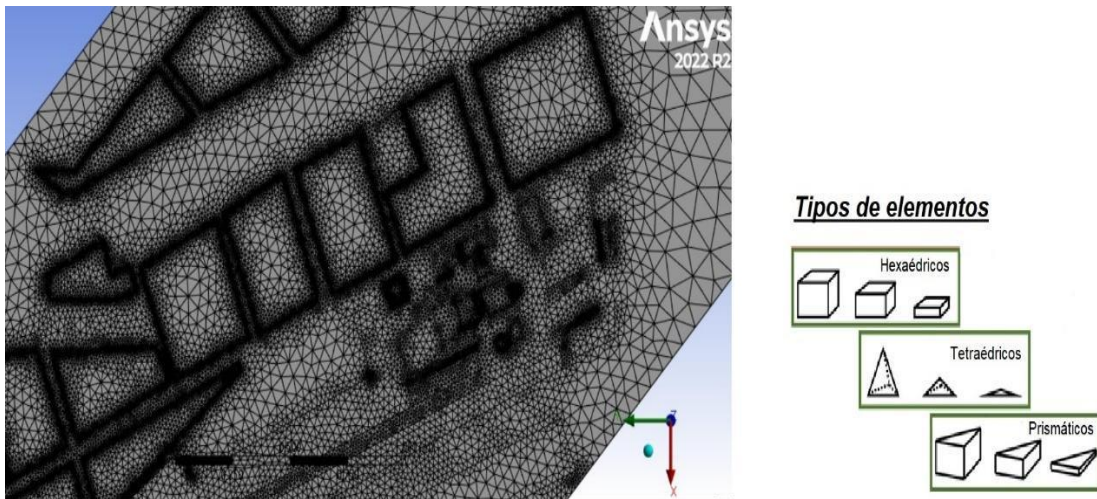


Fig.5.3. Vista de abajo de malla de recinto (Fig.5.2) y tipos de elementos que pueden utilizarse.

En este punto, resulta necesario evaluar si los recursos computacionales con los que contamos son suficientes para ejecutar los cálculos. En tal sentido, será una limitante la cantidad de celdas de la malla y los modelos físicos que utilizaremos.

Tener en cuenta que la calidad del mallado es de suma importancia para alcanzar una buena solución. En este contexto, se deben cuidar la densidad de las celdas, la relación de volumen y dimensiones en celdas adyacentes, el tipo de elementos a usar, el mallado en la capa límite y el refinamiento adaptativo de acuerdo con las soluciones preliminares.

La última tarea dentro de la etapa del preprocesamiento es la **configuración del solver**. Aquí, se definen y se le indica al software las propiedades de los materiales (fluidos, sólidos o mixtos) que se utilizan en el sistema de modelado, las ecuaciones de los modelos físicos apropiados (turbulencia, especies, etc.), las condiciones operativas y de contorno, los valores iniciales o una solución previa, y los monitores de convergencia.

Las condiciones de contorno aseguran que la solución de las ecuaciones de conservación sea única y correspondiente a la situación física de la cual se obtuvieron dichas condiciones. En nuestro sistema de análisis, se debe especificar al menos una condición en algún punto para cada variable a resolver, por tanto, los límites del sistema deben extenderse hasta donde se tenga información real de las variables (caudales, presiones, temperaturas). Asimismo, las condiciones de entrada y de salida deben posicionarse en regiones en donde no existan fuertes gradientes de las variables, tanto en la dirección normal como en la tangencial a la superficie (Fig. 5.4).

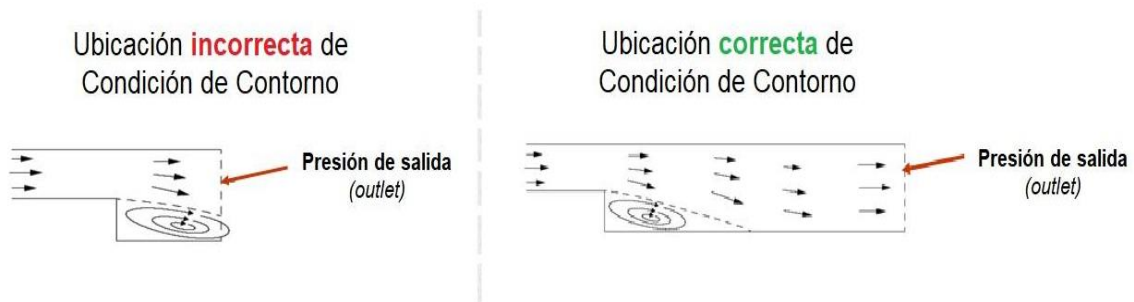


Fig.5.4. Selección de localización de las condiciones de contorno.

### Paso 3- Procesamiento

En los modelos numéricos, las ecuaciones diferenciales son reducidas a elemento algebraicos, donde  $[A]$  es la matriz que contiene las constantes de los modelos que se han de implementar, y ya han sido especificadas,  $[\phi]$  es la matriz de variables y  $[b]$  es la matriz que contiene las condiciones de contorno. Idealmente  $[A] \cdot [\phi] - [b] = 0$ , en la resolución numérica  $[A] \cdot [\phi] - [b] = R$ . En el **cálculo de la solución**, las ecuaciones de conservación discretizadas son resueltas iterativamente en cada celda, hasta alcanzar la convergencia. Dicho en otras palabras, los cálculos se ejecutan hasta que los cambios en los valores estimados de las variables son despreciables entre una iteración y la siguiente. Una forma simple de cuantificar dichos cambios, entre iteración e iteración, es a través del monitoreo de los residuos que nos permiten evaluar el balance global (Fig. 5.5). Entendemos que una solución con mayor precisión se asocia a residuos que tienden a cero. En tal sentido, es necesario poner atención a los factores que influyen sobre la precisión de la solución convergente. Entre ellos podemos destacar a la representación y a la precisión de los modelos físicos con el sistema real, a las suposiciones o hipótesis simplificadoras realizadas, a la resolución e independencia de la malla, y a los errores numéricos.

Los residuos elevados pueden deberse a unas pocas celdas de mala calidad.

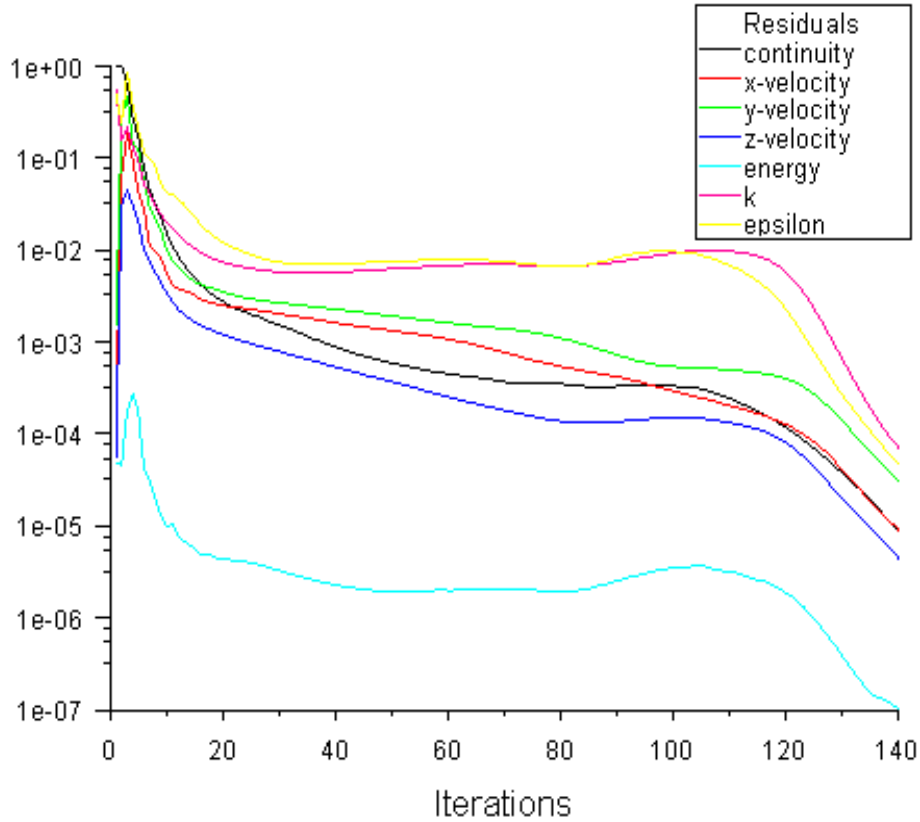


Fig.5.5. Gráfica de los residuos.

#### Paso 4- Postprocesamiento

Este paso consiste en analizar los resultados para **evaluar la solución** y extraer información útil. Las herramientas de visualización pueden ayudar a identificar los patrones de flujo general y su desarrollo, las zonas de altos gradientes, entre otros. Las herramientas de información numérica pueden utilizarse para calcular resultados cuantitativos, por ej: Fuerzas y momentos, coeficientes medios de transferencia de calor, cantidades en coordenadas específicas o integradas de superficie y volumen, balances de flujo, etc (Fig. 5.6).

Cabe destacar que examinar los resultados, nos ayuda a evaluar la bondad de la representación del modelado con el sistema real bajo estudio. Esto es posible, a través de la evaluación del comportamiento físico y la conservación de las cantidades.

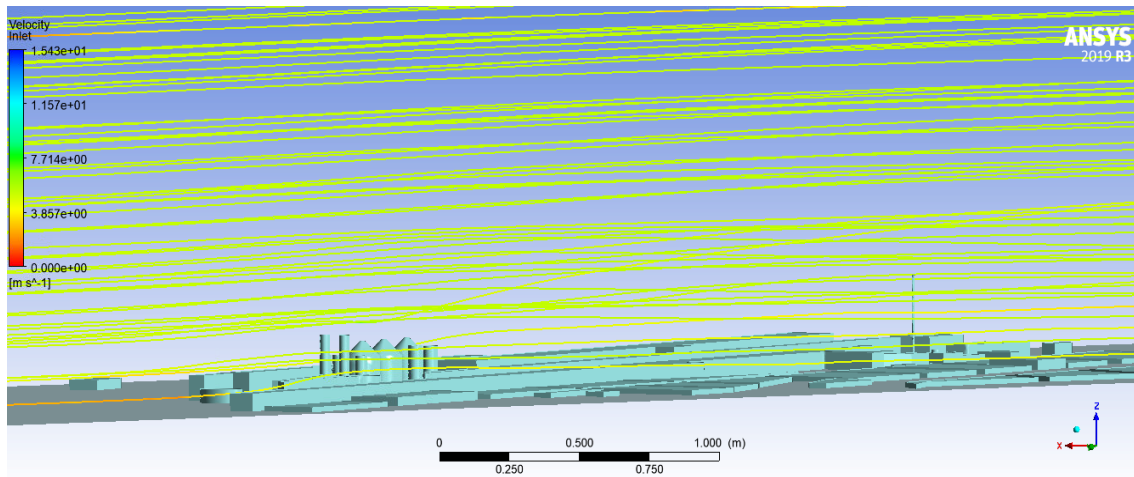


Fig.5.6. Visualización de líneas de flujo.

### Paso 5- Actualización/ajuste del modelado

Finalmente, algunas preguntas y sus respuestas pueden orientarnos a plantear un **ajuste en el modelado** que se desprenden en el análisis de los resultados. Comencemos, ¿los modelos físicos aplicados son apropiados? (Flujo turbulento/laminar, estado estacionario/transiente). ¿Son correctas las condiciones de contorno? (valores y ubicación). ¿La malla es adecuada? (Evaluar si cambia la solución con un refinamiento, o puede definirse la malla como independiente). ¿Los objetivos de la simulación son alcanzados?

## Aplicación en simulación de dispersión de contaminantes

El análisis de dispersión de contaminantes es una tarea muy común en la industria, ya sea en la evaluación de los riesgos potenciales en los escenarios de fuga, en el análisis de la dinámica de los contaminantes en función de los niveles de toxicidad, inflamabilidad u olores, o en la asistencia para la instalación de sensores de humo y vías de escape en el análisis de riesgos.

El estudio de la dispersión de los contaminantes puede abordarse desde un enfoque experimental o numérico, encontrando en cada uno de ellos fortalezas y limitaciones, pero entendiendo que ambos enfoques son complementarios y no excluyentes. El enfoque experimental, si bien ofrece una muy buena representatividad del sistema real, y una gran precisión en los resultados, requiere de una cantidad inicial de recursos que suelen traducirse en altos costos económicos. El enfoque numérico, por su parte, resulta práctico y veloz, y se lo asocia a bajos costos en comparación con lo experimental, pero requiere de un conocimiento técnico específico del usuario y recursos computacionales sofisticados.

Cuando se desea estudiar la dinámica de un contaminante en la atmósfera, debe identificarse en primer lugar cuáles son los parámetros que afectan la dispersión, ya que estos deberán ser necesariamente considerados en nuestra representación del sistema real. En este contexto, hay que destacar a:



- Las condiciones de estabilidad atmosférica, las cuales están asociadas a la intensidad de la turbulencia térmica en la atmósfera. Esta responde a la estratificación vertical de las temperaturas (Fig. 7).

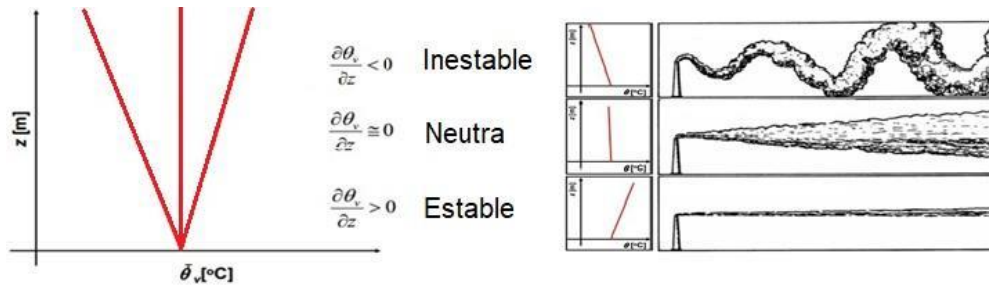


Fig.5.7. Condiciones de estabilidad atmosférica.

- Velocidad y dirección del viento. A medida que la velocidad (intensidad) se incrementa, la pluma se vuelve más alargada y angosta. Asimismo, el contaminante es transportado más rápido a sotavento, pero este también es diluido más rápido por las grandes cantidades de aire con las que se encuentra. El perfil de velocidad de la capa límite atmosférica (ABL, *Atmospheric Boundary Layer*) depende entre otras cosas de la estabilidad de la atmósfera, la cual puede ser representada por una función logarítmica o una función **exponencial**.

**Perfil Exponencial** 
$$v = v_{ref} \left( \frac{z}{z_{ref}} \right)^a$$

**Perfil Logarítmico** 
$$v = \frac{v^*}{K} \left( \ln \left( \frac{z+z_0}{z_0} \right) - \psi \left( \frac{z}{L} \right) \right)$$

Para variables turbulentas, la energía cinética turbulenta ( $k$ ), y la disipación viscosa turbulenta ( $\epsilon$ ), en condiciones atmosféricas neutras, se definen como:

$$k = \frac{v^{*2}}{\sqrt{c_\mu}} \quad \epsilon(z) = \frac{v^{*3}}{K(z+z_0)}$$

- Las condiciones del terreno, que se manifiestan en la turbulencia mecánica por la interacción del desplazamiento de las masas de aire sobre la superficie del terreno, evidencian modificaciones en el perfil del viento. Árboles y edificaciones incrementan la mezcla y por ende la altura de la capa límite, mientras que grandes cuerpos de agua y espacios abiertos la reducen.



El modelado CFD requiere de todas las representaciones mencionadas. En tal sentido, la simulación requiere de una muy buena descripción del flujo cerca de la superficie para una buena predicción de los efectos ABL y de la dispersión. Para ello, es necesario conocer las condiciones atmosféricas y del suelo, utilizar un modelo de turbulencia para capturar los efectos de estratificación atmosférica, y asegurar la homogeneidad horizontal del flujo, ya que los perfiles utilizados como datos de entrada son generalmente perfiles completamente desarrollados y representativos de la rugosidad característica del dominio, y por lo tanto, no deben variar a lo largo del flujo.

Hay que prestar atención a la modelización de la turbulencia. Los efectos de las turbulencias pueden modelarse mediante el enfoque RANS (*Reynolds Average Navier-Stokes*) o simularse completamente mediante la simulación numérica directa (DNS). DNS requiere muchos recursos computacionales. Una solución intermedia es el enfoque de simulación de grandes remolinos (LES) que resuelve directamente los grandes vórtices y utiliza modelos para simular las escalas turbulentas más pequeñas. Aunque el LES es menos costoso que el DNS, sigue requiriendo muchos recursos computacionales para simular escenarios complejos. En consecuencia, el enfoque RANS representa un buen compromiso entre resultados precisos y esfuerzo computacional.

En las últimas décadas, estudios específicos (Pontiggia et al., 2009; Brusca et al., 2016; Moen et al., 2019) han evaluado el peso de diferentes variables sobre el modelado y su representación del sistema real. En tal sentido, se destacan algunas cuestiones como:

- Estudio de convergencia de malla para distintos niveles de refinamiento, que destaca la importancia del refinamiento en la cercanía a la fuente de emisión. Este requisito puede justificarse por el hecho de que los mayores gradientes de concentración se encuentran cerca de la región de inyección de gas y, por tanto, se requieren más elementos de malla para capturarlos adecuadamente.
- Comparación de los resultados utilizando el perfil constante y el perfil logarítmico del viento en la entrada. Se observa que la imposición de un perfil de velocidad logarítmico y de variables de viento turbulento a la entrada del dominio conduce a resultados mucho más precisos en comparación con el caso con un perfil de viento uniforme a la entrada.

A modo de resumen se detalla en el siguiente cuadro la metodología general para realizar un análisis de dispersión de contaminantes atmosféricos utilizando CFD.

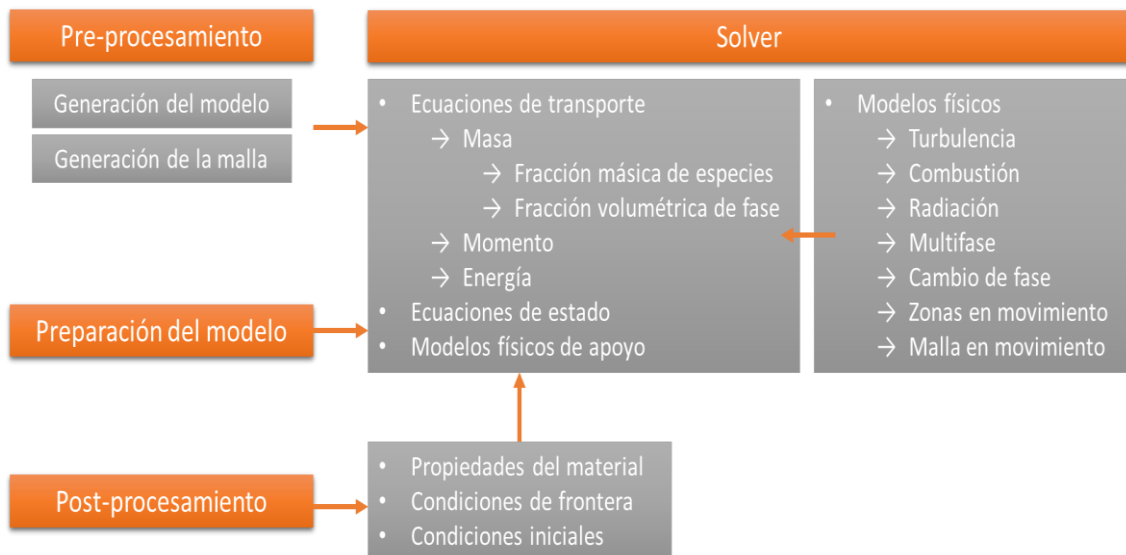


Fig. 5.8. Descripción general de una metodología CFD

## Software más utilizados

Varios son los softwares que pueden asistirnos en la confección de proyectos para el modelado CFD. La elección de uno u otro dependerá de los objetivos y recursos con los que se cuenta.

### ANSYS CFD



ANSYS es un software con licencia comercial que integra diferentes aplicaciones para la ejecución de los pasos mencionados anteriormente: Geometría, mallado, solver y post procesamiento de resultados. Puede ejecutarse bajo sistema operativo Windows o Linux. Ver versiones soportadas con el proveedor.

ANSYS proporciona licencias gratuitas de software de ingeniería de simulación a los estudiantes de todos los niveles. Asimismo, apoya el aprendizaje con cursos gratuitos, foros de comunidad y una gran cantidad de tutoriales enfocados en los estudiantes.

Ansys Student ofrece acceso gratuito a los paquetes basados en Ansys Workbench. Este paquete incluye Ansys Mechanical, Ansys CFD, Ansys Autodyn, Ansys SpaceClaim y Ansys DesignXplorer. Para más información puede acceder a la página web de ANSYS Student en <https://www.ansys.com/academic/students> (Accedido el 27/07/2022).

## FLACS – CFD



FLACS (FLame ACceleration Simulator) es un software con licencia comercial CFD, que se utiliza ampliamente para el modelado de explosiones y de dispersión atmosférica en el ámbito de la seguridad industrial y la evaluación de riesgos. Las principales áreas de aplicación de FLACS son la industria petroquímica, evaluación de procesos, y seguridad nuclear.

FLACS está ampliamente validado y cuenta con módulos dedicados a la simulación de explosiones. También se utiliza ampliamente para simular la dispersión de gases inflamables y tóxicos. Puede ejecutarse bajo sistema operativo Windows o Linux. Ver versiones soportadas con el proveedor.

Una mayor descripción puede encontrarse en <https://www.gexcon.com/software/flacs-cfd/> (Accedido el 27/07/2022)

## CAELinux



CAELinux es una distribución Linux preempaquetada con los principales programas de ingeniería asistida por ordenador de código abierto. CAELinux es gratuito y de código abierto, para todo tipo de uso. Está basado en Ubuntu LTS (12.04 64bit para CAELinux 2013) Cubre todas las fases del desarrollo de productos: desde matemáticas, CAD, análisis de tensiones / térmico / de fluidos, electrónica hasta CAM e impresión 3D.

Una mayor descripción puede encontrarse en <https://www.caelinux.com/CMS3/> (Accedido el 27/07/2022)

## Casos de estudio

### CFD en emergencias químicas

Se sabe que los modelos de calidad del aire predicen el transporte y la dispersión turbulenta de gases o aerosoles después de su liberación a la atmósfera. Con el objetivo de evaluar peligros y riesgos de liberación accidental de materiales peligrosos en los alrededores de sitios de almacenamiento como plantas químicas, tanques, transporte, entre otros, se han implementado estudios en los que se utilizan modelos CFD para simular la liberación (Kisa & Jelemensky, 2009; Sanchez et al., 2013).

Si bien existen modelos analíticos, para analizar la dispersión; como los modelos gaussianos o de gases densos, que se diferencian según la densidad del gas a modelar. Estos son mucho más simples, suponen la pluma con propiedades uniformes en las direcciones vertical y de viento cruzado. Todas las simplificaciones que contemplan no permiten modelar geometrías complejas, suponen geometría plana sin obstáculos o para un modelo bidimensional con un obstáculo simple. Además, consideran el gas como una partícula que no reacciona.

Con la aplicación de modelos CFD se obtienen resultados más reales y precisos, ya que puede resolver la velocidad del viento completamente, en comparación con los modelos más simples donde la velocidad es un valor único o una función de la altura. Se puede modelar cualquier situación peligrosa, incluida la liberación de gas en presencia de edificios. Se puede modelar un fluido bifásico, la fase gaseosa se modela mediante las ecuaciones de equilibrio (de masa, cantidad de movimiento y energía), y la fase líquida se puede modelar con un enfoque multifásico. Esto significa que la segunda fase se puede modelar mediante las mismas ecuaciones que la primera fase o se modelan como partículas discretas, si es que son gotas o partículas.

En Kisa & Jelemensky (2009) se modela una liberación de amoníaco, debido a que es tóxico y cada vez más utilizado en la industria. El amoníaco generalmente se almacena en la fase líquida en recipientes presurizados. Un dato importante es que después de su liberación, se produce un flujo de dos fases cerca del punto de liberación que forma una nube de amoníaco que es más densa que el aire ambiente, fenómeno que se puede simular sin problemas con los modelos CFD.

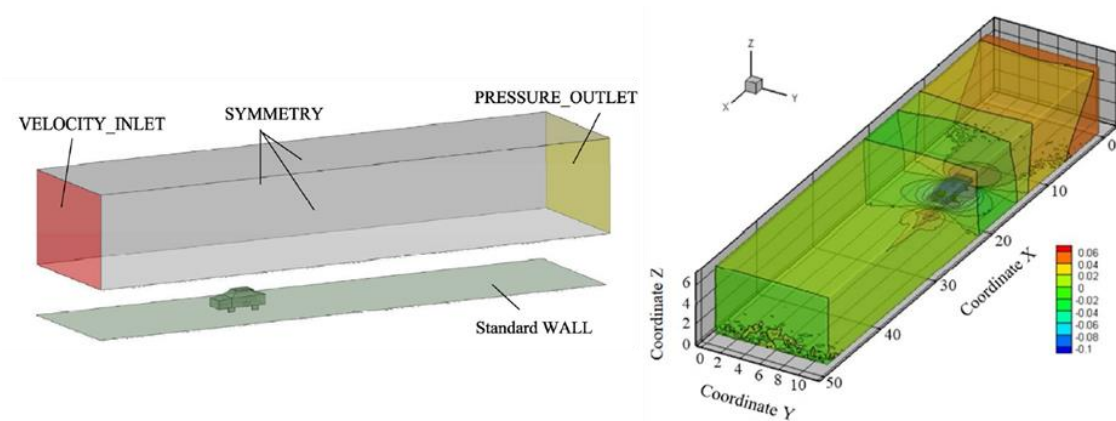
Además, en este trabajo se comparan los resultados obtenidos del modelado CFD por Fluent 6.2 con experimentos de campo de FLADIS realizados con amoníaco licuado a presión. Las condiciones meteorológicas y la intensidad de la fuente se determinaron a partir de los datos experimentales y se simularon mediante el método CFD. También se incluyó el flujo bifásico inicial del amoníaco liberado. La fase líquida se modeló como gotas utilizando modelos de partículas discretas, es decir, el enfoque de Euler-Lagrange para fases continuas y discretas.

Este trabajo muestra que los modelos CFD pueden desempeñar un papel importante en la predicción de gases tóxicos para la preparación y respuesta ante emergencias. Los modelos generalmente utilizados se aproximan a los experimentos de campo que se realizan en campos planos.

## CFD en emisión vehicular

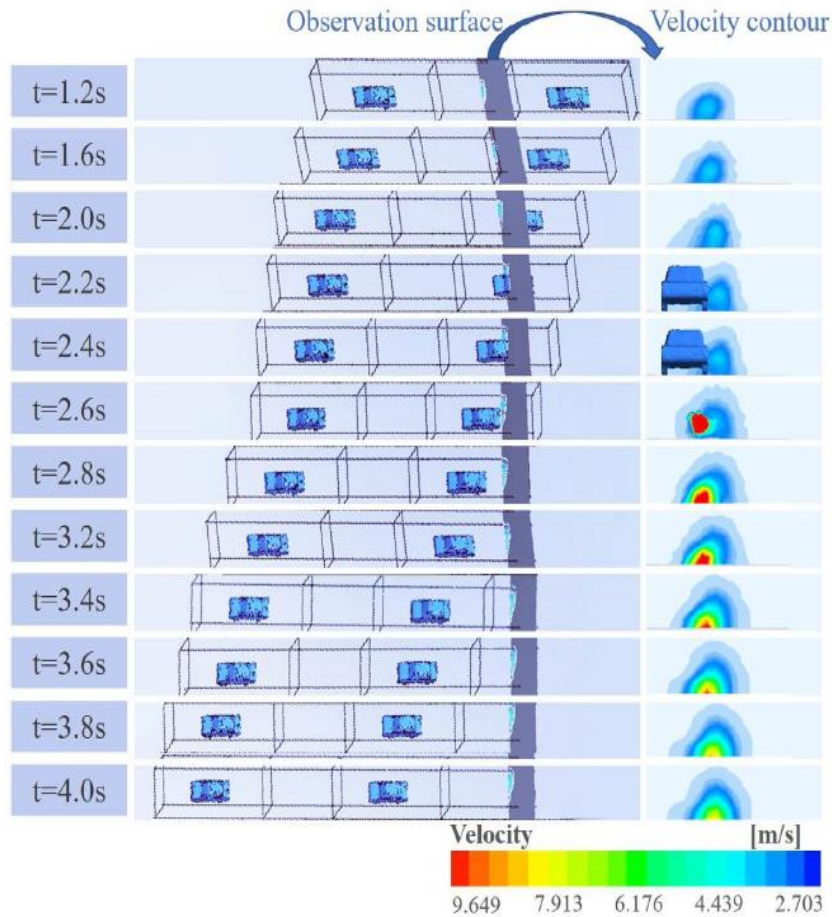
Debido a la creciente urbanización y motorización, el transporte se ha convertido en una de las principales fuentes de emisión de carbono y contaminación del aire, causando graves enfermedades a los residentes de la ciudad. Existen estudios en los cuales se investigan patrones de dispersión de contaminantes relacionados con el tráfico mediante simulación CFD (Jeanjean et al., 2015; Lauriks et al., 2021; Santiago et al., 2021; Sun et al., 2021).

En Sun et al. (2021) además de realizar una simulación en CFD se llevó a cabo una validación de la simulación con experimentos en túnel de viento y mediciones de campo. En este trabajo se analizan diferentes escenarios y para construir los modelos de simulación numérica se eligió un modelo de automóvil de pasajeros típico de la zona de estudio. Para ello, se construyó un modelo de un solo vehículo para obtener la distribución espacio temporal de las concentraciones de monóxido de carbono (CO) alrededor del vehículo. Se midieron los coeficientes de presión de los puntos de control para compararlos con los valores de la prueba del túnel de viento (Fig.5. 9).



**Fig. 5.9.** A la izquierda se muestra un esquema del modelo a estudiar. A la derecha, contornos de presión de la simulación CFD de un solo vehículo. Fuente Sun et al. 2021

Luego, las simulaciones numéricas se extendieron a escenarios empíricos considerando un solo vehículo con un coche que lo sigue (Fig. 5.10), y el paso por un cañón en la calle. Se analizaron progresivamente los campos de concentración de contaminantes en diferentes situaciones, revelando de forma efectiva el mecanismo de difusión de los contaminantes del tráfico urbano.



**Fig. 5.10.** Campo de velocidad de la observación en superficie en diferentes momentos de la simulación transitoria

Bajo los escenarios de un solo vehículo y de seguimiento de un automóvil, los resultados de la simulación concuerdan bien con los resultados medidos o de la prueba del túnel de viento, y se verifica la confiabilidad del modelo CFD.

Los resultados sobre la distribución de los contaminantes del tráfico en los cañones de las calles (Fig. 5.11) también fueron instructivos para estudios posteriores sobre la distribución espaciotemporal de los contaminantes dentro de los cañones de las calles similares, el control de la contaminación del aire y el diseño óptimo de las arquitecturas de los edificios.

Los hallazgos pueden proporcionar una guía técnica en la investigación de la distribución de emisiones de tráfico a lo largo de vías urbanas representativas para el planificador urbano, así como para el diseñador arquitectónico.

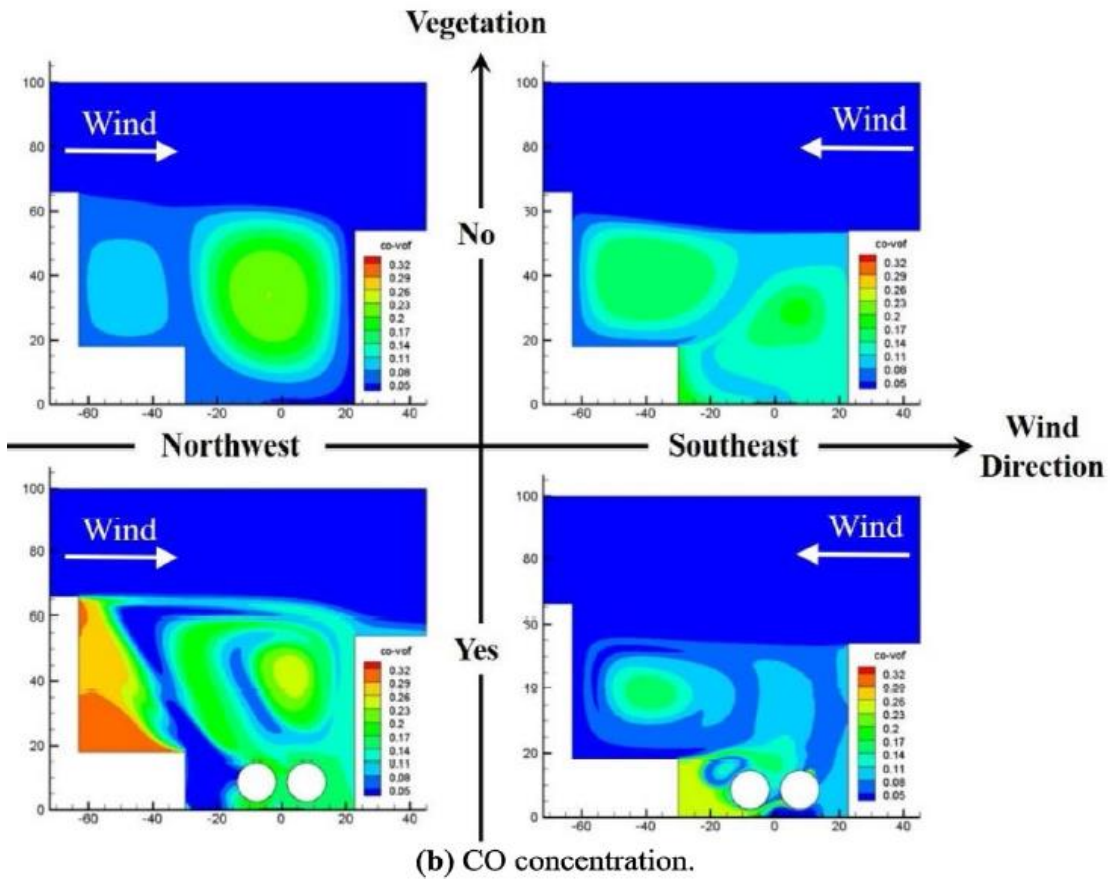


Fig. 5.11. Concentración de CO, resultado de simulación numérica del cañón de la calle, considerando diferente direcciones de viento y presencia de vegetación circundante. Fuente Sun et al. 2021

## CFD con aplicación agrícola

CFD se tiene mucha aplicación para investigar la dispersión de material particulado (MP) (Durand et al., 2021; Torno et al. 2020). Junto con la industria y el transporte, la agricultura es una de las principales fuentes de emisiones primarias de material particulado (PM) en todo el mundo. Presentamos a modo de ejemplo de aplicación el trabajo de Kabelitz et al. (2021), en el cual se analiza la formación de bioaerosoles y la liberación de PM durante la aplicación de estiércol de ganado en el campo y las amenazas asociadas para la salud ambiental y humana (Fig. 5.12). Para ello, se realizaron mediciones en un túnel de viento, en el campo y simulaciones de dinámica de fluidos computacional (CFD).





*Fig. 5.12. Emisiones de PM durante la aplicación de estiércol avícola Foto de la generación de nubes de polvo visibles durante la aplicación de estiércol avícola en el campo.*

Para estimar la contaminación por MP y el riesgo ambiental en los alrededores de un sitio de aplicación de estiércol, se desarrolló un modelo de dinámica de fluidos computacional (CFD), donde el transporte de MP se modeló utilizando la biblioteca de seguimiento de partículas lagrangianas de OpenFOAM, que se describe en Kasper et al. (2019). El modelo simuló la dispersión aérea de MP y fue entrenado con las mediciones obtenidas en campo y en túnel de este estudio y de Kabelitz et al (2020). Con la ayuda del modelo, se puede definir zonas de riesgo para concentraciones de partículas altas, medias y bajas (Fig.5.12). También se calculó la dispersión en el aire de diferentes clases de tamaño de partículas en una sala modelo (Fig. 5.13). Se puede observar que las partículas con diámetros más pequeños (azul) se dispersaron más lejos que las partículas más grandes (rojo). La simulación con CFD permite variar y simular diversos parámetros de entrada (por ejemplo, la velocidad y dirección del viento, la intensidad de la turbulencia del flujo de entrada, el diámetro de las partículas, la densidad y la composición de las partículas en la fuente). El modelo se ejecutó con los parámetros de entrada medidos durante el experimento de campo y se simularon las concentraciones de números de partículas de  $MP_1$ ,  $MP_{2.5}$  y  $MP_{10}$  por  $m^3$  de aire (Fig. 5.14). Estos resultados obtenidos se utilizaron para las estimaciones de riesgo ambiental y sanitario, los cuales se basaron en el Índice de Calidad del Aire (ICA).

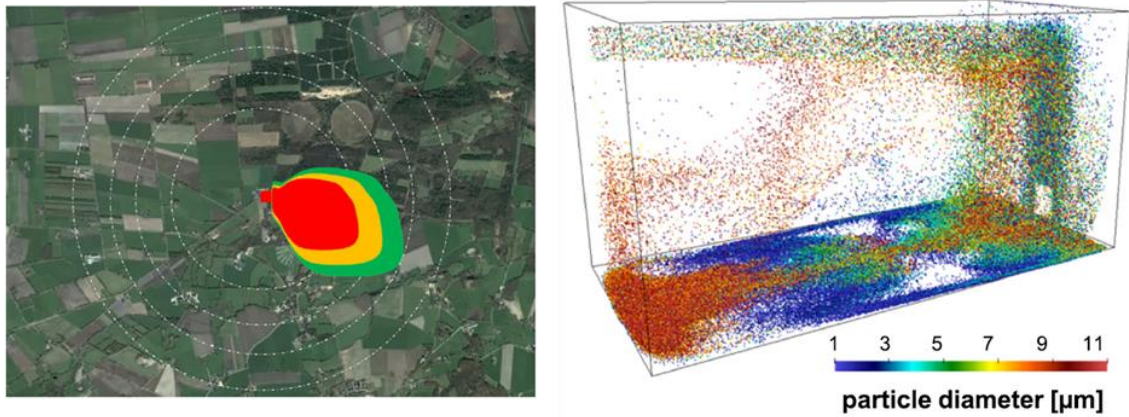


Fig. 5.13. Izquierda: Zonas de riesgo definidas a partir de la modelización en función de la concentración de MP. Derecha: Simulación numérica y modelo de dispersión de partículas con diferentes diámetros (fino = azul, grueso = rojo)

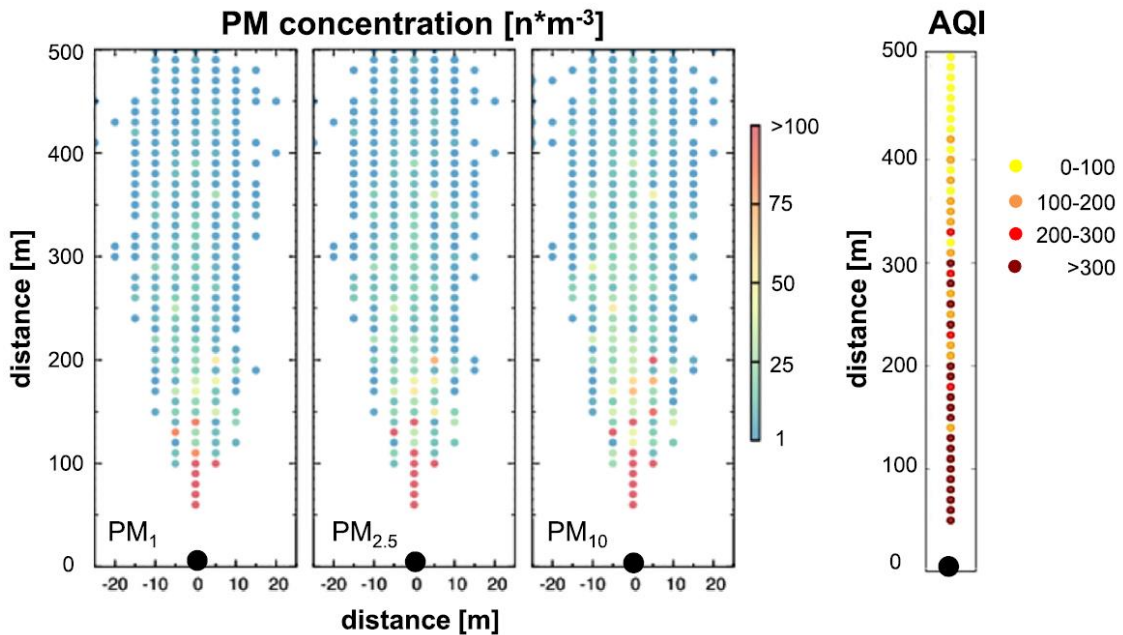


Fig. 5.14. Concentraciones de partículas y niveles de estimación del riesgo relacionados con la distancia de la fuente de emisión de partículas (punto negro). La estimación del riesgo (a la derecha) se basa en las concentraciones de PM<sub>10</sub> utilizando el Índice de Calidad del Aire (ICA) según las cuatro categorías.

Esto demuestra que la versatilidad y la aplicación de CFD permite identificar zonas de riesgo que se pueden utilizar como herramientas en la gestión y así, minimizar el riesgo para la salud pública y el medio ambiente.

## Referencias

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.

- Durand, A., Mehel, A., Fokoua, G., Murzyn, F., Puech, S., & Larrarte, F. (2021). Numerical and experimental investigations on brake particle dispersion in the flow generated by a train in an underground station. *Atmospheric Pollution Research*, 12(10), 101189.
- ESSS (Engineering Simulation and Scientific Software) (26 de julio de 2022). *Software ANSYS: Fluidodinámica*. Recuperado de <https://www.esss.co/es/ansys-simulacion-computacional/fluidodinamica/>
- Jeanjean, A. P., Hinchliffe, G., McMullan, W. A., Monks, P. S., & Leigh, R. J. (2015). A CFD study on the effectiveness of trees to disperse road traffic emissions at a city scale. *Atmospheric Environment*, 120, 1-14.
- Kabelitz, T., Biniash, O., Ammon, C., Nübel, U., Thiel, N., Janke, D., ... & Amon, T. (2021). Particulate matter emissions during field application of poultry manure-The influence of moisture content and treatment. *Science of the Total Environment*, 780, 146652.
- Kasper, R., Turnow, J., & Kornev, N. (2019). Multiphase Eulerian-Lagrangian LES of particulate fouling on structured heat transfer surfaces. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 79, 108462.
- Kiša, M., & Jelemenský, L. (2009). CFD dispersion modelling for emergency preparedness. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 22(1), 97-104.
- Lauriks, T., Longo, R., Baetens, D., Derudi, M., Parente, A., Bellemans, A., ... & Denys, S. (2021). Application of improved CFD modeling for prediction and mitigation of traffic-related air pollution hotspots in a realistic urban street. *Atmospheric Environment*, 246, 118127.
- Moen, A., Mauri, L., & Narasimhamurthy, V. D. (2019). Comparison of k-ε models in gaseous release and dispersion simulations using the CFD code FLACS. *Process Safety and Environmental Protection*, 130, 306-316.
- Pontiggia, M., Derudi, M., Busini, V., & Rota, R. (2009). Hazardous gas dispersion: a CFD model accounting for atmospheric stability classes. *Journal of hazardous materials*, 171(1-3), 739-747.
- Sanchez, E. Y., Lerner, J. C., Porta, A., & Jacovkis, P. M. (2013). Accidental release of chlorine in Chicago: Coupling of an exposure model with a Computational Fluid Dynamics model. *Atmospheric environment*, 64, 47-55.
- Santiago, J. L., Borge, R., Sanchez, B., Quaassdorff, C., De La Paz, D., Martilli, A., ... & Martín, F. (2021). Estimates of pedestrian exposure to atmospheric pollution using high-resolution modelling in a real traffic hot-spot. *Science of The Total Environment*, 755, 142475.
- Sun, D. J., Shi, X., Zhang, Y., & Zhang, L. (2021). Spatiotemporal distribution of traffic emission based on wind tunnel experiment and computational fluid dynamics (CFD) simulation. *Journal of Cleaner Production*, 282, 124495.
- Torno, S., Toraño, J., & Álvarez-Fernández, I. (2020). Simultaneous evaluation of wind flow and dust emissions from conveyor belts using computational fluid dynamics (CFD) modelling and experimental measurements. *Powder technology*, 373, 310-322.