

Sea un fluido definido, por simplicidad, en todo  $\mathbb{R}^3$ .  
 Consideremos en él un campo de velocidades (suficientemente regular):

$$\begin{aligned} \vec{U}: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 &\rightarrow \mathbb{R}^3 \\ (t, \vec{x}) &\rightarrow \vec{U}(t, \vec{x}) = (u(t, \vec{x}), v(t, \vec{x}), w(t, \vec{x})) \end{aligned} \quad (1)$$

Notar que el campo de velocidades depende del tiempo y del espacio.

Consideremos además un campo de densidad (suficientemente regular)

$$\begin{aligned} \rho: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 &\rightarrow \mathbb{R} \\ (t, \vec{x}) &\rightarrow \rho(t, \vec{x}) \end{aligned} \quad (2)$$

Consideremos además un campo de fuerza por unidad de volumen

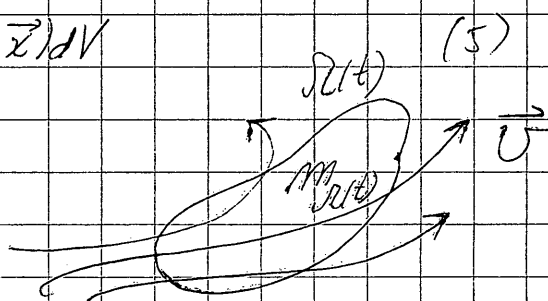
$$\begin{aligned} \vec{f}: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 &\rightarrow \mathbb{R}^3 \\ (t, \vec{x}) &\rightarrow \vec{f}(t, \vec{x}) \end{aligned} \quad (3)$$

y una función sumidero/fuente por unidad de volumen

$$\begin{aligned} g: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 &\rightarrow \mathbb{R} \\ (t, \vec{x}) &\rightarrow g(t, \vec{x}) \end{aligned} \quad (4)$$

En adelante consideraremos un elemento de masa encerrado en un volumen  $\Omega(t)$  (en el instante  $t$ ). Denotando por  $m_{\Omega(t)}$  la masa encerrada en este volumen, se tendrá que:

$$m_{\Omega(t)} = \int_{\Omega(t)} \rho(t, \vec{x}) dV \quad (5)$$



De la ley de conservación de la masa de Lavoisier

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \rho(t, \vec{x}) dV = 0 \quad (6).$$

El lado izquierdo se puede reescribir como (en virtud del teorema de transporte de Reynolds):

$$\int_{\Omega(t)} \frac{\partial \rho(t, \vec{x})}{\partial t} dV + \int_{\partial \Omega(t)} \rho(t, \vec{x}) \vec{U}(t, \vec{x}) \cdot \hat{n} dS = \int_{\Omega(t)} g(t, \vec{x}) dV. \quad (7)$$

Respondo el teorema de la divergencia, (7) se puede escribir como:

$$\int_{\Omega(t)} \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{U}) - g \right\} dV = 0 \quad (8)$$

, de la arbitrariedad de  $\Omega(t)$  se obtiene que:  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{U}) = g$

la cual corresponde a la ecuación de continuidad para el medio continuo.

Supondremos que  $g \equiv 0$ . Así obtenemos:  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{U}) = 0. \quad (I).$

Ahora consideremos el mismo elemento de masa  $m$ .  
Denotemos por  $\vec{P}_{\mathcal{R}(t)}$  el momento asociado.

Entonces, por la segunda ley de Newton, se tendrá que:

$$\frac{d\vec{P}_{\mathcal{R}(t)}}{dt} = \int_{\mathcal{R}(t)} \vec{F}(t, \vec{x}) dV \stackrel{\text{def}}{=} \vec{F}_{\text{ext}}^{\mathcal{R}(t)} \quad (9)$$

y dado que, por definición,  $\vec{P}_{\mathcal{R}(t)} = \int_{\mathcal{R}(t)} \rho \vec{U} dV$ , y, nuevamente,

por el teorema de transporte de Reynolds, se tendrá que:

$$\int_{\mathcal{R}(t)} \frac{\partial}{\partial t} (\rho U_i) dV + \int_{\partial \mathcal{R}(t)} \rho U_i \vec{U} \cdot \vec{n} dS = \int_{\mathcal{R}(t)} f_i dV, \quad \forall i \in \{1, 2, 3\} \quad (10)$$

(donde hemos escrito esta relación por coordenadas  $i$ )

Reemplazando el teorema de la divergencia y eliminando el operador integral, obtenemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho U_i) + \text{div}(\rho U_i \vec{U}) = f_i, \quad \forall i \in \{1, 2, 3\}. \quad (11)$$

Reponiendo la identidad  $\text{div}(\phi \vec{A}) = \nabla \phi \cdot \vec{A} + \phi \text{div}(\vec{A})$ , donde  $\phi$  es campo escalar y  $\vec{A}$  es campo vectorial, podemos reescribir (11) de manera vectorial como:

$$\vec{U} (\partial_t \rho + \text{div}(\rho \vec{U})) + \rho (\partial_t \vec{U} + (\vec{U} \cdot \nabla) \vec{U}) = \vec{f} \quad (12)$$

, lo cual corresponde a la ecuación de conservación de momentum.

Además, para el caso del aire, suponemos que se cumple en buena aproximación la ley de los gases ideales:

$$P = \rho R T \quad (III)$$

Para este caso, también podemos considerar una ecuación para la conservación de la energía (o ecuación de la termodinámica):

$$\rho \left( \frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) T \right) - \frac{1}{P} \left( \frac{\partial P}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) P \right) = Q \quad (IV)$$

donde  $Q: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $(t, \vec{x}) \rightarrow Q(t, \vec{x})$ , corresponde a una función de flujo de calor al sistema.

A primera vista, el mt de ecuaciones I), II), III) IV) y de incógnitas  $(\rho, P, T, \vec{V})$  forman un sistema cerrado de  $6 \times 6$ . Sin embargo esto es un hecho aparente, en el siguiente sentido:

Consideremos el lado derecho de la ecuación de la con. de la energía  $Q$ . Esta función debe ser capaz de capturar la multiplicidad de fenómenos meteorológicos que proporcionan o regulan el flujo externo de energía, por ejemplo:

$$Q \leftarrow \begin{cases} \text{Radiación (corta, larga, ... etc)} \\ \text{Nubosidad} \\ \text{Aerones} \end{cases}$$

Por ejemplo, si interesa considerar la nubosidad, necesariamente se debe incluir una nueva variable  $C_{H_2O}$ , la concentración de agua. De igual forma la presencia de aerones está acoplada con la existencia de diversos compuestos químicos y la misma nubosidad.

Entonces agregaremos ecuaciones para estos compuestos extra (a parte del aire) que dependiendo del caso que interesa estudiar.

Sean entonces las siguientes funciones fuente/unidad por unidad de volumen para el agua y para una especie química genérica.

(Obj: además definiremos el agua se dentro de otras especies por que por un lado involucra la precipitación, y por otro lado por que posee particularidades energéticas asociadas a sus cambios de fase.

$$g_{H_2O} : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$$

$$(t, \vec{x}) \rightarrow g_{H_2O}(t, \vec{x})$$

$$g_c : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$$

$$(t, \vec{x}) \rightarrow g_c(t, \vec{x}).$$

Un desarrollo análogo al de la ecuación de continuidad, no permite obtener las siguientes ecuaciones para las concentraciones de agua y el contaminante:  $C_{H_2O}$  y  $C$ , respectivamente:

$$\frac{\partial}{\partial t} C_{H_2O} + \text{div}(\rho C_{H_2O} \vec{V}) = g_{H_2O}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} C + \text{div}(C \vec{V}) = g_c$$

Nuevamente, los lados derechos  $g_{H_2O}$  y  $g_c$  deben capturar fenómenos complejos como:

$g_{H_2O}$  / humedad  
precipitación  
evotranspiración

$g_c$  / emisiones naturales/antropogénicas  
deposición húmeda/seca  
reacciones químicas

6) Comenzamos ahora el lado derecho de la ecuación de momentum: la fuerza externa:

$$\vec{F}_{ext} = S_L(t)$$

$$\vec{F} = - \frac{1}{\rho} \nabla P \quad \text{fuerza de gradiente de presión.}$$

$$+ \vec{g} \quad \text{fuerza gravitacional, generalmente derivada de un potencial } \phi, \text{ i.e. } \vec{g} = -\nabla \phi.$$

$$+ \mu \Delta \vec{U} \quad \text{fuerza viscosa. (no considerada para el aire).}$$

etc.

Nota: Hay casos en que interesa tomar como referencia sistemas no inerciales. Este es el caso de las ecuaciones de momentum para la escala sinoptica ( $\sim 1000$  km horizontal).

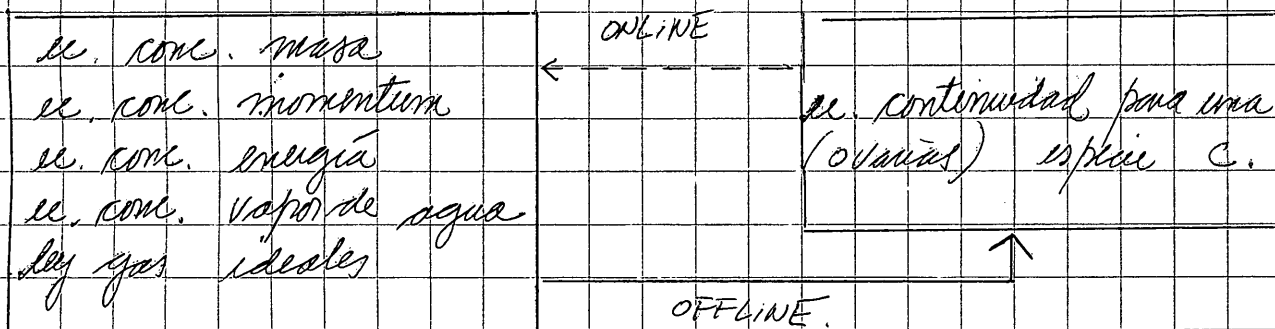
Por un lado, en esta escala, se puede suponer que el fluido es incompresible ( $\Rightarrow \operatorname{div}(\vec{U}) = 0$ ).

Si  $\vec{U}_*$  denota la velocidad del fluido relativo a un sistema que rota solidario a la Tierra con velocidad angular  $\vec{\Omega}$ , entonces la ecuación de momentum se expresa típicamente como:

$$\frac{\partial \vec{U}_*}{\partial t} + (\vec{U}_* \cdot \nabla) \vec{U}_* = - \frac{1}{\rho} \nabla P - \vec{g} - 2\vec{\Omega} \times \vec{U}_*$$

donde surge una nueva fuerza no inercial:  $2\vec{\Omega} \times \vec{U}_*$ , la fuerza de Coriolis.

Así, tenemos el siguiente esquema METEOROLOGÍA / DISPERSIÓN:



METEOROLOGÍA.

DISPERSIÓN.

## Turbulencia y descomposición de Reynolds.

Conducemos la ec. de continuidad para la concentración de un contaminante  $C$ .

$$C = \bar{C} + C'$$

$$\vec{U} = \vec{U} + \vec{U}' \quad , \quad g_c = \bar{g}_c + g_c'$$

$$\text{Así: } \partial_t C = \partial_t \bar{C} + \partial_t C'$$

$$\begin{aligned} \text{div}(C \vec{U}) &= \sum_i \partial_{x_i} (C U_i) = \sum_i \partial_{x_i} ((\bar{C} + C')(\bar{U}_i + U'_i)) \\ &= \sum_i \left\{ \partial_{x_i} (\bar{C} \bar{U}_i) + \partial_{x_i} (C' \bar{U}_i) + \partial_{x_i} (\bar{C} U'_i) + \partial_{x_i} (C' U'_i) \right\} \end{aligned}$$

$$\text{Entonces: } \partial_t C + \text{div}(C \vec{U}) = \bar{g}_c / (\bar{C})$$

$$\begin{aligned} \partial_t \bar{C} + \partial_t C' + \sum_i \left\{ \partial_{x_i} \bar{C} \bar{U}_i + \cancel{\partial_{x_i} (C' \bar{U}_i)} + \cancel{\partial_{x_i} (\bar{C} U'_i)} + \partial_{x_i} (C' U'_i) \right\} \end{aligned}$$

$$\therefore \partial_t \bar{C} + \text{div}(\bar{C} \vec{U}) + \text{div}(C' \vec{U}') = \bar{g}_c$$

Notar que hemos introducido 2 variables (en vez de 1):  $\bar{C}$  y  $C'$ . Esto lleva a un problema de cierre al abordar el problema de la turbulencia.



De relaciones empíricas y/o semi empíricas surgen relaciones de cierre, como la siguiente:

$$C(\vec{v}_i) = -k_i \partial_{x_i} \bar{C} \quad \text{ficc } \{1, 2, 3\}$$

Parametrización

Así la ecuación del contaminante queda:

$$\partial_t \bar{C} + \text{div}(\bar{C} \vec{v}) - \text{div}(K \nabla \bar{C}) = \bar{g}_c$$

con  $K = \text{diag}(k_1, k_2, k_3)$ .

Así, nos quedamos con una ecuación para los valores medios de  $C$ .

Para el caso an. p.e.  $K_0 = k_0 I_d$  (turbulencia isotrópica constante)  
tenemos

$$\partial_t \bar{C} + \text{div}(\bar{C} \vec{v}) - k_0 \Delta \bar{C} = \bar{g}_c$$

↑  
difusión turbulenta.

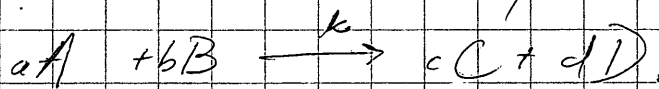
Consideremos los lados derechos de las ecuaciones, de continuidad para un conjunto de especies químicas:  $(C_i)_{i=1}^m$ ,

Interesa explicitar los lados derechos  $(g_i)_{i=1}^m$ .

En general, para estas especies químicas los sumideros/fuentes están asociados a (entre otros):

- deposición húmeda/seca
- emisiones
- reacciones químicas.

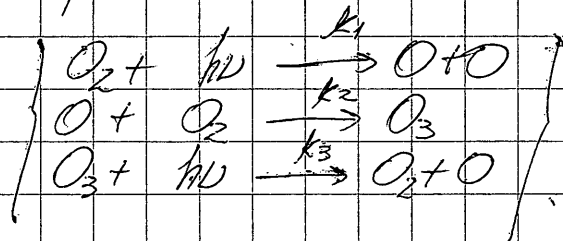
Veamos el caso de las reacciones químicas: para esto consideremos los compuestos químicos  $A, B, C, D$  y la siguiente ecuación que los relaciona:



Entonces:

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} &= -k[A]^a[B]^b & \frac{dC}{dt} &= k[A]^a[B]^b \\ \frac{dB}{dt} &= -k[A]^a[B]^b & \frac{dD}{dt} &= k[A]^a[B]^b \end{aligned}$$

Considerando lo anterior, tomemos como ejemplo el ciclo de Chapman: en la estratosfera se tienen las sigtes relaciones para  $O_3$ :



Supongamos lo siguiente:

- No hay viento ( $\vec{V}=0$ )
- El término de difusión turbulenta es despreciable.
- Homogeneidad espacial de la concentración.

Entonces, la ecuación para  $O_3$ ,  $O$  y  $O_2$  quedan:

$$\frac{d[O_3]}{dt} = g_{O_3} = -k_3 [O_3] + k_2 [O][O_2]$$

$$\frac{d[O]}{dt} = g_O = k_1 [O]^2 - k_2 [O][O_2] + k_3 [O_3]$$

$$\frac{d[O_2]}{dt} = g_{O_2} = -k_1 [O_2] - k_2 [O][O_2] + k_3 [O_3]$$

Nota, lo anterior define un sistema de EDO ACOPLADO y NO LINEAL de primer orden. Dadas las condiciones iniciales

$$[O_3](t=0), [O](t=0), [O_2](t=0)$$

, este sistema se puede resolver numéricamente.

Obj: generalmente, la química implica no linealidad en estas ecuaciones.

Obj: ETD/PRO  $\rightarrow$  CODIGO MATLAB EN U-CURSUS.