

Resumen

Título : Modelización numérica de emisores puntuales de contaminación atmosférica. Aplicación a La Oroya (Perú).

Autor : Francesco Ferri

Tutor : Agustí Pérez-Foguet

Este trabajo se centra en el análisis comparado de diferentes métodos numéricos para la resolución de problemas de calidad del aire cerca de grandes emisores puntuales. Es un tema de elevado interés científico, por su complejidad y relación con la calidad ambiental. La simulación numérica es una herramienta potente para estimar si las concentraciones de contaminantes respeta o no los límites de inmisión previstos en las normativas.

Los fenómenos que intervienen en el proceso de emisión de contaminantes en la atmósfera son convección, difusión, reacción entre las especies y el carácter transitorio del problema. Estos procesos dan lugar a unas ecuaciones diferenciales parabólicas que pueden ser modelizadas mediante el método de los elementos finitos. Se ha realizado un estudio detallado, en principio, de un modelo simplificado en dos dimensiones con dominios pequeños (de 400 a 2000 elementos) para estudiar, a continuación, el caso tridimensional de La Oroya (Perú) con un dominio de $17 \times 23 \text{ Km}^2$ y alrededor de 1500000 elementos. De este caso de referencia se disponen de datos meteorológicos y de inmisión en superficie. Para los ejemplos 2D ha sido utilizado un código *MATLAB*[®], mientras en el 3D un código *FORTRAN*.

La modelización del problema incluye la interpolación del campo de viento, la sobreelevación del penacho, discretización del dominio y la resolución de las ecuaciones diferenciales. Se ha analizado la influencia de los valores de difusión vertical y horizontal, con distintas mallas de elementos finitos, realizadas por Albert Oliver Serra en el marco del proyecto “Modelos numéricos predictores para gestión medio-ambiental”, Ministerio de Ciencia e Innovación, CGL2008-06003-C03-02.

Finalmente se ha modificado el código *FORTRAN* en formulación estabilizada LS (*Least-squares*) por SUPG (*Streamline-upwind Petrov-Galerkin stabilization simetrizado*). De los resultados numéricos presentados se concluye que los modelos pueden describir adecuadamente el problema de calidad del aire cerca de grandes emisores puntuales, en condiciones de baja difusión vertical. Las formulaciones estabilizadas de elementos finitos con discretizaciones espaciales de precisión adecuada, pueden simular la formación de capas de aire limpio bajo capas de aire contaminado en condiciones de alta estabilidad atmosférica.

Palabras claves : contaminación, convección, difusión, transporte, transitorio, streamline-upwind Petrov-Galerkin, least-squares, Crank-Nicolson, La Oroya.