

Simulación de la calidad del aire con dispersión muy
anisotrópica mediante elementos finitos adaptativos

Lluís Monforte Vila
Tutor: Agustí Pérez-Foguet

Barcelona, febrero de 2011

Resum

En aquest document es simula el problema de qualitat d'aire al voltant d'un emissor puntual en condicions atmosfèriques de calma mitjançant Elements Finitos adaptatius. En concret s'aplica al cas de La Oroya (Perú).

La resolució del problema d'advecció-difusió-reacció mitjançant Elements Finitos acostuma a produir oscil·lacions en la solució. Per tal d'aminorar-les i poder aconseguir les corbes d'inmissió (que típicament prenen valors variats ordres de magnitud inferiors a la concentració emesa) no n'hi ha prou amb la utilització d'esquemes estabilitzats. Per això es proposa emprar un procés adaptatiu mitjançant el qual es canvia la discretització espacial en el rang d'interès de la solució.

S'estudia el comportament de la solució i es proposa un indicador de l'error especialment dissenyat pel problema d'emissors puntuals que delimita les zones on es produeixen les oscil·lacions. S'utilitza un esquema de remallat basat en la imposició d'un volum màxim als elements de certes regions. Aquest algoritme permet evitar recalculat cada interval de temps ja que és possible augmentar en una sola iteració la densitat d'elements en una regió.

Abstract

This document presents an adaptive Finite Element scheme to solve the air quality problem due to a point source emission in calm weather conditions. This scheme is applied to the case of La Oroya (Perú).

The application of FEM for convection-diffusion-reaction problem leads to oscillations in the discrete solution. The use of stabilized schemes is not enough in order to obtain the ground level concentration (which typically takes values several orders of magnitude below the concentration emitted). To this end, an adaptive process is used; this process changes the spatial discretization in the range of interest of the solution.

The behavior of the solution is studied and a new indicator is proposed; this indicator is specially designed for the point emission problem. The remesh process is based on the imposition of a maximum volume to the elements that lie in a certain region. Using this algorithm it is possible to avoid recalculating the solution because it increases the density of elements in a single iteration.

Índice general

1. Introducción	1
2. Modelo matemático y numérico	3
2.1. Ecuación del transporte	3
2.2. Problema variacional	4
2.3. Discretización espacial en elementos finitos	5
2.4. Término estabilizador: GLS	5
2.5. Discretización temporal. Crank-Nicolson	6
2.6. Imposición de las condiciones de contorno	7
3. Indicadores de error	9
3.1. Indicador de la norma L2 del gradiente	10
3.2. Indicador propuesto	10
3.3. Comparación	10
4. Adaptatividad	13
4.1. Remallado	14
4.1.1. Bisección de elementos	14
4.1.2. Imposición de un volumen máximo	18
4.2. Interpolación	19
4.3. Malla inicial	21
5. Caso práctico: La Oroya (Perú)	23
5.1. Modelo	23
5.1.1. Condiciones de contorno	23
5.1.2. Datos topográficos	24
5.1.3. Modelo de viento	24
5.1.4. Difusión	25
5.1.5. Constantes	25
5.2. Resultados	26
5.2.1. Malla	27
5.2.2. Curva de inmición	28
5.2.3. Coste computacional	33

6. Conclusiones	35
Bibliografía	37

Capítulo 1

Introducción

En este estudio se simula el problema de calidad de aire alrededor de un emisor puntual en condiciones atmosféricas en calma mediante Elementos Finitos adaptativos. Los desarrollos realizados se aplican a un caso real en La Oroya (Perú).

Las condiciones atmosféricas de calma se caracterizan por un campo de velocidades del viento horizontal y una dispersión muy anisotrópica -siendo la componente vertical muy inferior a la horizontal. Como se puede apreciar en la imagen 1.1, los datos experimentales de las estaciones de medida cercanas al emisor (G-1 y G-3) muestran un patrón de inmisión nocturno y diurno que no puede explicarse únicamente por la variación del campo de viento, siendo la variación de la dispersión vertical (vinculada al cambio de estabilidad atmosférica) una hipótesis que permite explicar el comportamiento medido. La concentración relativa (en relación a la concentración de la emisión) varía dos o tres órdenes de magnitud entre la noche y la mañana.

El principal problema para poder conseguir estos valores pequeños de las concentraciones son debidos a que la resolución del problema de advección-difusión-reacción mediante Elementos Finitos tiende a producir oscilaciones espaciales en la solución. Existen técnicas para la estabilización, pero con concentraciones relativas tan bajas (10^{-3} a 10^{-7}) las oscilaciones no se reducen sólomente con los esquemas estabilizados.

Se propone un esquema adaptativo basado en un indicador de error diseñado para poder refinar la discretización de FEM en los rangos de interés de la solución; de este modo se adecua la malla (refinar/desrefinar) cada cierto número de pasos de tiempo.

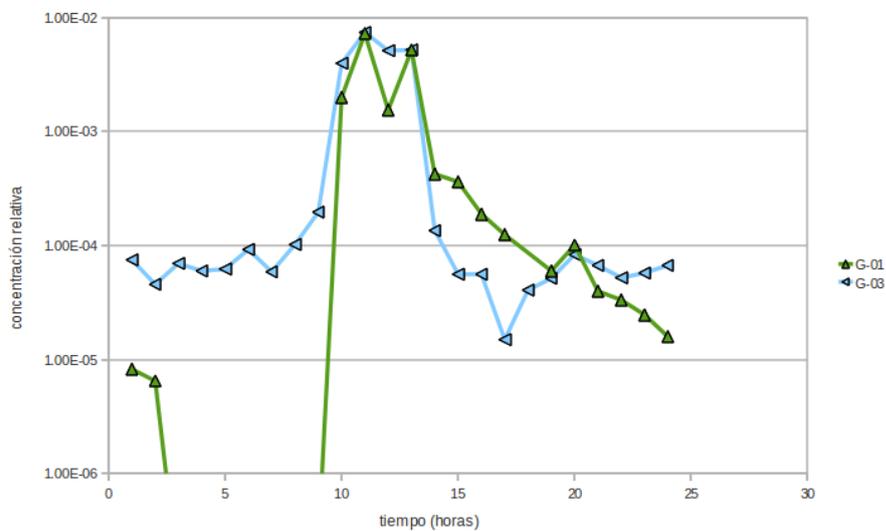


Figura 1.1: Evolución de la concentración de Dixóxido de Azufre durante 24 horas en un día típico (17/7/2008).

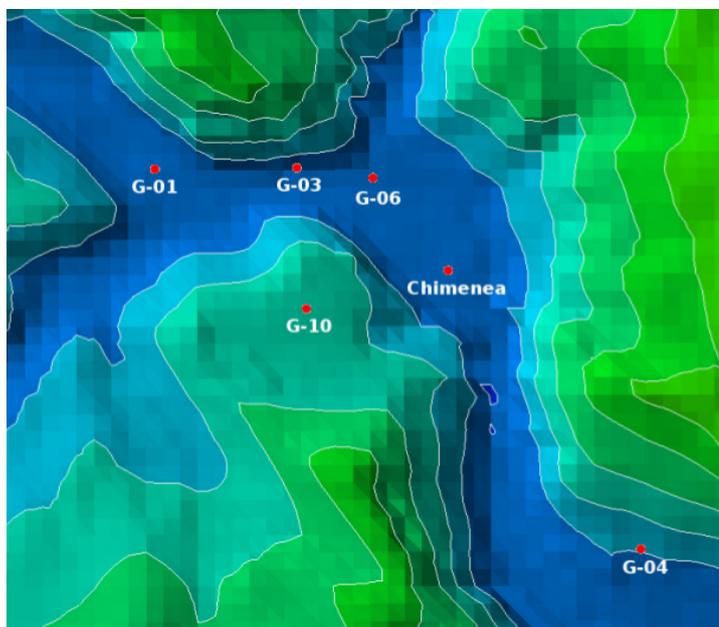


Figura 1.2: Detalle de la zona de estudio, con la posición de las estaciones y del emisor.

Capítulo 2

Modelo matemático y numérico

En este capítulo se va a desarrollar la formulación matemática y numérica del problema de advección-difusión-reacción. Primero se anunciará la ecuación del transporte y el problema variacional equivalente. A continuación se va a presentar la discretización espacial por elementos finitos y la discretización temporal por diferencias finitas. Finalmente, se comentará como se imponen las condiciones de contorno.

2.1. Ecuación del transporte

Desde un punto de vista matemático el problema de advección-difusión-reacción se modeliza con la ecuación (2.1).

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{a} \cdot \nabla u - \nabla(\mathbf{D} \cdot \nabla u) + \sigma u = s & \text{en } \Omega \times (0, T] \\ u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x}) & \text{en } \Omega \\ \mathbf{n} \cdot \mathbf{D} \cdot \nabla u(\mathbf{x}, t) = g_N(\mathbf{x}, t) & \text{en } \Gamma_N \times (0, T] \\ u(\mathbf{x}, t) = g_D(\mathbf{x}, t) & \text{en } \Gamma_D \times (0, T] \end{cases} \quad (2.1)$$

donde $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, que tiene una frontera de Lipschitz $\Gamma = \Gamma_N \cup \Gamma_D$ que cumple $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$, \mathbf{D} es la matriz de difusiones, \mathbf{a} es el campo de velocidad del viento y $\sigma > 0$ es la constante de reacción.

Se asume que:

- $g_N \in C(0, T; L^2(\Gamma_N))$, siendo $C(a, b; V)$ con $a < b$ el espacio de funciones $u : (a, b) \rightarrow V$ tal que la función $t \rightarrow \|u(\cdot, t)\|_V \in C([a, b])$

- $\mathbf{a}(\mathbf{x}, t) : \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^3 \in C(0, T; W^{1,inf}(\Omega)^3)$,
- $s \in C(0, T; L^2(\Omega))$,
- $\mathbf{D}(\mathbf{x}, t) : \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^{3 \times 3} \in C(0, T; W^{1,inf}(\Omega)^{3 \times 3})$. $\mathbf{D}(\mathbf{x}, t)$ es simétrica definida positiva.

Para simplificar la obtención de la forma débil y sin pérdida de generalidad en la ecuación (2.1), sólo se contemplan condiciones de contorno de Dirichlet y de Neumann. Una vez introducida la forma de imposición de las condiciones de contorno en la sección 2.6 se podrán imponer cualquier condición de contorno (Robin).

2.2. Problema variacional

Aplicando el producto interno la ecuación diferencial (2.1) con respecto a $v \in H_D^1(\Omega) = \{v \in H^1(\Omega) : v = 0 \text{ en } \Gamma_D\}$ se llega a :

$$(\partial_t u, v) + (\mathbf{a} \cdot u, v) - (\nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla u), v) + (\sigma u, v) = (s, v)$$

donde $u \in H_{CC}^1 = \{w \in L^2(0, T; H^1(\Omega)) : u = g_D \text{ en } \Gamma_D \times [0, T]\}$ y (\cdot, \cdot) designa a $(\cdot, \cdot)_{L^2(\Omega)}$: el producto interno en $L^2(\Omega)$.

En el término de la difusión se aplica la derivada del producto y el Teorema de la Divergencia. Teniendo en cuenta que por definición $v = 0$ en Γ_D y $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ se puede obtener:

$$\begin{aligned} (\nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla u), v) &= \int_{\Omega} v \nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla u) d\Omega = \\ &= \int_{\Omega} \nabla \cdot (v \mathbf{D} \cdot \nabla u) d\Omega - \int_{\Omega} \nabla v \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla u) d\Omega = \\ &= \int_{\partial\Omega} v \mathbf{n} \cdot \mathbf{D} \cdot \nabla u d\Gamma - \int_{\Omega} \nabla v \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla u) d\Omega = \\ &= \int_{\Gamma_N} v g_N d\Gamma - \int_{\Omega} \nabla v \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla u) d\Omega = (g_N, v)_{\Gamma_N} - (\mathbf{D} \cdot \nabla u, \nabla v) \end{aligned}$$

Introduciendo esta expresión se puede enunciar el problema variacional equivalente a (2.1):

Encontrar $u \in L^2(0, T; H_D^1(\Omega))$ tal que $\partial_t u \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$ y que por $t \in (0, T)$ cumple:

$$\begin{aligned} (\partial_t u, v) + (\mathbf{a} \cdot \nabla u, v) + (\mathbf{D} \cdot \nabla u, \nabla v) + (\sigma u, v) &= \\ &= (s, v) + (g_n, v) \quad \forall v \in H_D^1(\Omega) \end{aligned} \tag{2.2}$$

Se puede demostrar que el problema (2.1) y (2.2) son equivalentes y que existe solución y es única (ver [12]).

2.3. Discretización espacial en elementos finitos

El Método de Galerkin para la aproximación de la solución consiste en definir el problema en un espacio de dimension finita $V_h = \{N_i\} \subset L^2(V)$. En este caso se va a usar como base del espacio V_h el conjunto de polinomios lineales a trozos $N_i(\mathbf{x})$ que quedan definidos por las siguientes propiedades:

- $N_i(\mathbf{x}_j) = \delta_{ij} \quad \forall i, j \in B$
- $N_i \in C^0(\Omega_e) \quad \forall e \in \text{elementos}$

De esta forma se puede escribir la aproximación de la solución del problema como:

$$u_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{j \in B \setminus B_D} u_j(t) N_j(\mathbf{x}) + \sum_{k \in B_D} u_k(t) N_k(\mathbf{x}) \quad (2.3)$$

donde B es el conjunto de los nodos de la malla y B_D es el conjunto de nodos que pertenecen al contorno de Dirichlet.

Introduciendo en la ecuación (2.2) el espacio de dimensión finita a la siguiente formulación del problema:

Encontrar $u_i(t) \in L^2([0, T])$ tal que $\partial_t u_i \in L^2([0, T])$ y que por $t \in (0, T)$ que cumple:

$$\begin{aligned} \left(\sum_{j \in B \setminus B_D} \partial_t u_j N_j + \sum_{k \in B_D} \partial_t u_k N_k, N_i \right) + a \left(\sum_{j \in B \setminus B_D} u_j N_j + \sum_{k \in B_D} u_k N_k, N_i \right) = \\ = l(N_i) \quad \forall i \in B \setminus B_D \end{aligned} \quad (2.4)$$

donde:

$$\begin{aligned} a(v, w) &= (\mathbf{a} \cdot v, w) + (\mathbf{D} \cdot \nabla v, \nabla w) + (\sigma v, w) \\ l(w) &= (s, w) + (g_N, w)_{\Gamma_N} \end{aligned}$$

2.4. Término estabilizador: GLS

El término advectivo tiende a provocar oscilaciones espaciales de la solución y por este motivo existen distintas técnicas para la estabilización. Estas técnicas agregan un nuevo término dependiente del residuo a la ecuación (2.4):

$$(\partial_t u_h, N_i) + a(u_h, N_i) + \sum_e^{n_{elem}} (\mathcal{R}(u_h), \tau \mathcal{P}(N_i))_{\Omega_e} = l(N_i) \quad \forall i \in B \setminus B_D \quad (2.5)$$

donde:

- \mathcal{P} es un término que depende de cada método. En el caso de Galerkin/Least-Square (GLS) en condiciones no estacionarias y para Crank-Nicolson (ver sección 2.5):

$$\mathcal{P}(w) = \frac{w}{\Delta t} + \frac{1}{2}(\mathbf{a} \cdot \nabla w - \nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla w) + \sigma w)$$

- \mathcal{R} es el residuo que se define cómo:

$$\mathcal{R}(u) = \partial_t u + \mathbf{a} \cdot \nabla u - \nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla u) + \sigma u - s$$

Reescribiendo la ecuación (2.5), teniendo en cuenta la linealidad de los operadores, que la base de funciones escogida tiene segunda derivadas nulas y pasando a notación matricial se llega al siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$\mathbf{B} \cdot \partial_t \mathbf{u}(t) + \mathbf{C} \cdot \mathbf{u}(t) = \mathbf{f}(t) \quad (2.6)$$

donde:

$$\mathbf{B}_{i,j} = (1 + \frac{\tau}{\Delta t} + \frac{\tau\sigma}{2})(N_j, N_i) + \frac{\tau}{2}(N_j, \mathbf{a} \cdot \nabla N_i)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{i,j} &= a(N_j, N_i) + \tau(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\sigma}{2})(\mathbf{a} \cdot \nabla N_j, N_i) + \\ &+ \frac{\tau}{2}(\mathbf{a} \cdot \nabla N_j, \mathbf{a} \cdot \nabla N_i) + \sigma\tau(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\sigma}{2})(N_j, N_i) + \frac{\sigma\tau}{2}(N_j, \mathbf{a} \cdot \nabla N_i) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_i(t) &= l(N_i) - \sum_{k \in B_D} u_k \{ a(N_k, N_i) + \tau(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\sigma}{2})(\mathbf{a} \cdot \nabla N_k, N_i) + \\ &+ \frac{\tau}{2}(\mathbf{a} \cdot \nabla N_k, \mathbf{a} \cdot \nabla N_i) + \sigma\tau(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\sigma}{2})(N_k, N_i) + \frac{\sigma\tau}{2}(N_k, \mathbf{a} \cdot \nabla N_i) \} - \\ &- \sum_{k \in B_D} \partial_t u_k \{ \tau(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\sigma}{2})(N_k, N_i) + \frac{\tau}{2}(N_k, \mathbf{a} \cdot \nabla N_i) \} + \\ &+ \tau(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\sigma}{2})(s, N_i) + \frac{\tau}{2}(s, \mathbf{a} \cdot \nabla N_i) \end{aligned}$$

2.5. Discretización temporal. Crank-Nicolson

Para discretizar temporalmente el problema se usa la familia de métodos θ a la que pertenece el método de Crank-Nicolson. Esta familia de métodos se anuncia cómo:

$$\frac{\Delta u_h^n}{\Delta t} = (1 - \theta)\partial_t u_h^{n+1} + \theta\partial_t u_h^n \quad (2.7)$$

donde $\Delta u_h^n = u_h^{n+1} - u_h^n$, ∂_t tiene que ser entendido desde un punto de vista numérico y u_h^n designa a la solución en el instante de tiempo n .

Aplicando la fórmula anterior y teniendo en cuenta la definición de las derivadas del problema en la ecuación (2.6) se llega a:

$$\frac{1}{\Delta t} \mathbf{B}(\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n) = (1 - \theta)\mathbf{f}^{n+1} - \theta\mathbf{f}^n - \mathbf{C}((1 - \theta)\mathbf{u}^{n+1} - \theta\mathbf{u}^n) \quad (2.8)$$

Usando el método de Crank-Nicolson $\theta = \frac{1}{2}$, se obtiene un sistema lineal de ecuaciones de la forma:

$$\mathbf{A}\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{b}(\mathbf{u}^n) \quad (2.9)$$

2.6. Imposición de las condiciones de contorno

Una forma más sencilla para imponer las condiciones de contorno es empleando Multiplicadores de Lagrange. Se considera el problema de la ecuación (2.1) con condiciones de contorno de Neumann nulas en toda la frontera donde no se impongan condiciones de Neumann: $g_N = 0$ en $\partial\Omega \setminus \Gamma_N$ y se escribe el sistema de ecuaciones (2.9), cuya matriz del sistema es singular.

Se escriben matricialmente las condiciones de contorno que deberían de cumplir los nodos a los que no se quiere imponer condiciones de contorno de Neumann:

$$\mathbf{C}\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{c}$$

donde $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{n_{CC} \times n_{nodos}}$ y $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^{n_{CC}}$, n_{CC} es el número de nodos a los que se les impone una condición de contorno distinta a la de Neumann y n_{nodos} es el número de nodos total.

Luego, el problema con las condiciones de contorno deseadas es equivalente a:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{C}^T \\ \mathbf{C} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}^{n+1} \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{b} \\ \mathbf{c} \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

donde $\lambda \in \mathbb{R}^{n_{CC}}$ son los Multiplicadores de Lagrange y $\mathbf{0} \in \mathbb{R}^{n_{CC} \times n_{CC}}$ es una matriz con todas sus componentes nulas.

De esta forma se consigue imponer las condiciones de contorno con más facilidad y se pueden usar otro tipo de condiciones, como por ejemplo las de Robin. Empleando este método aumenta el número de incógnitas del sistema lineal de ecuaciones.

Capítulo 3

Indicadores de error

En la literatura se encuentran distintos estimadores e indicadores de error para problemas de advección-difusión en régimen estacionario [7, 6] y estimadores en régimen transitorio [12, 9]. La mayoría de indicadores propuestos están basados en el gradiente de la solución en el elemento y se le aplican distintas funciones (por ejemplo: la componente máxima del gradiente, la norma en cierto espacio, ...) o en la solución en los nodos del elemento (por ejemplo: la máxima diferencia entre los nodos, ...). Sin embargo, como se señalará, estos indicadores no tienen buen comportamiento para el problema planteado debido a que las oscilaciones se producen en los valores de la concentración muy pequeños, varios órdenes de magnitud interiores al valor de emisión; en estos elementos el gradiente es pequeño y las concentraciones de los distintos nodos es parecida y por lo tanto también lo es el indicador.

A diferencia de los estimadores del error, los indicadores de error no tienen ningún tipo de respaldo matemático, son fórmulas empíricas que no tienen ninguna relación con el error. Por este motivo se anuncian dos propiedades generales de los indicadores con dos ejemplos con el indicador de la norma L2 del gradiente definido en la ecuación (3.1).

Propiedad 1 El indicador puede ser distinto de cero y que el error sea nulo.

Ejemplo 1 Se supone que u es lineal pero no constante y que $u_h = u$. Luego el error es nulo pero el indicador no:

$$\eta_G(\omega) = \|\nabla u_h\|_{L^2(\omega)} \neq 0$$

Propiedad 2 El indicador puede ser nulo y el error ser distinto de cero.

Ejemplo 2 Se supone que u_h es constante y que u es no constante. Luego el indicador del error es nulo ($\nabla u_h = \mathbf{0} \Rightarrow \eta_G(w) = 0$) pero u y u_h son distintas, por lo que el error no es nulo.

3.1. Indicador de la norma L2 del gradiente

En la literatura se encuentran distintos ejemplos del uso del siguiente indicador en problemas de advección-difusión en regimen estacionario:

$$\eta_G(\omega) = \|\nabla u_h\|_{L^2(\omega)} \quad (3.1)$$

Por ejemplo en [7] se estudia el comportamiento de distintos indicadores y estimadores del error. En este artículo solo se estudia el caso estacionario. Se afirma que el indicador de error (3.1) se comporta parecido al estimador de Zienkiewicz-Zhu y se considera aceptable en la mayoría de los ejemplos numéricos propuestos, ya que lo único que se contempla es la norma del error para un cierto número de grados de libertad. El resto de estimadores que se contemplan se califican como bueno o muy bueno. Se puede apreciar en las figuras que tanto el indicador del gradiente como el estimador de Zienkiewicz-Zhu tienden a producir mallas muy finas en las zonas donde el gradiente es mayor y que, como consecuencia, el error se concentra en las zonas donde el gradiente es pequeño. Además, debido a la construcción de los ejemplos, las zonas con el gradiente pequeño son las zonas donde las concentraciones son pequeñas.

3.2. Indicador propuesto

Basado en el comportamiento de la solución, se propone el siguiente indicador:

$$\eta_{log}(\omega) = \begin{cases} 0 & \text{si } u_h(\mathbf{x}_\omega) \leq TOL_{u_h} \\ \|\nabla \log(u_h)\|_{L^2(\omega)} & \text{otros casos} \end{cases} \quad (3.2)$$

siendo \mathbf{x}_ω son las coordenadas del punto de Gauss del elemento ω .

Suponiendo que $u_h(\mathbf{x}_\omega) \geq TOL_{u_h}$ se puede obtener:

$$\eta_{log}(\omega) = \|\nabla \log(u_h)\|_{L^2(\omega)} = \left\| \frac{\nabla u_h}{u_h} \right\|_{L^2(\omega)}$$

3.3. Comparación

Se ha estudiado el comportamiento de los dos indicadores mencionados en el problema de transporte. En la imagen 3.1a se puede ver que la zona con concentraciones bajas es muy amplia y engloba varios órdenes de magnitud. Habitualmente las oscilaciones aparecen en las concentraciones bajas,

el cambio en la solución es pequeño en comparación con el rango de la solución pero cambia varios órdenes de magnitud. Por este motivo, en la imagen 3.1b se puede ver la concentración en escala logarítmica.

En la imagen 3.1e se puede apreciar como el indicador propuesto delimita claramente dos regiones: la primera es la que tiene valores del indicador altos (superiores a 1.5) que coinciden con las regiones donde se producen las oscilaciones en la solución; la segunda es la que tiene valores bajos del indicador (inferiores a 1.5) donde no se ven oscilaciones. En la salida de la chimenea, la resolución de la discretización es elevada (por motivos geométricos) y el indicador toma valores bajos, indicando que la solución es adecuada.

En la imagen 3.1c y en la 3.1d se puede ver que el indicador del gradiente toma valores muy bajos en todo el dominio a excepción de la salida de la chimenea, donde se considera que la solución es adecuada. En cambio, toma valores bajos o muy bajos en las zonas donde se producen las oscilaciones, ya que en estas zonas las concentraciones son pequeñas, del orden de 10^{-4} a 10^{-6} , y la solución no presenta gradientes grandes (la imagen 3.1b está en escala logarítmica).

Por lo tanto, el indicador que se va a usar es el propuesto en la ecuación 3.2 ya que delimita de forma clara las oscilaciones que se producen en las concentraciones bajas, que que son las que se quieren aminorar mediante el proceso adaptativo.

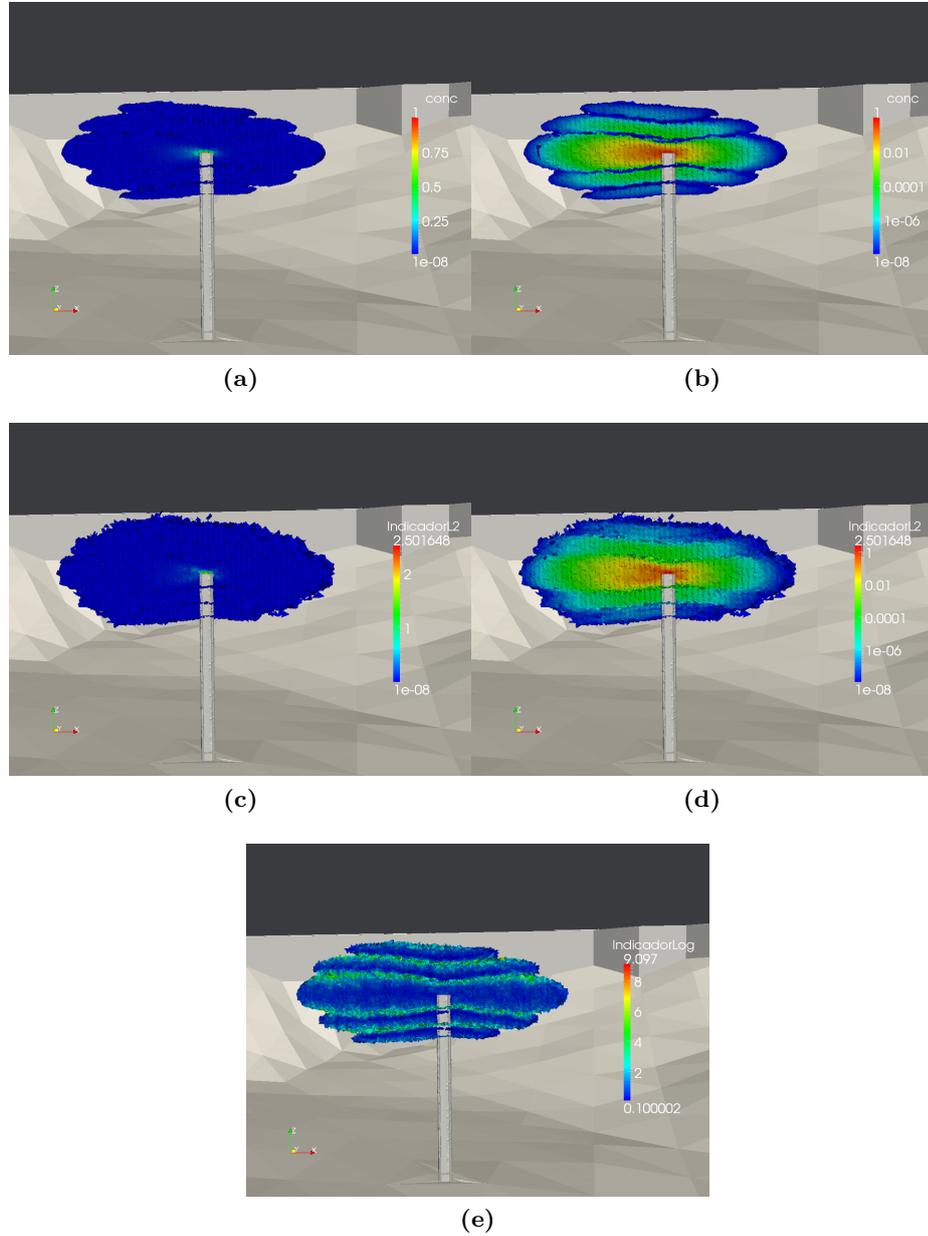


Figura 3.1: Corte según la dirección del viento de: (a) y (b) las concentraciones relativas superiores a 10^{-8} , (e) el valor del indicador propuesto en los elementos cuyo indicador es superior a 0.1, (c) el valor del indicador del gradiente en los elementos cuyo valor es superior a 10^{-8} y (d) el valor del indicador del gradiente en escala logarítmica.

Capítulo 4

Adaptatividad

Los elementos finitos adaptativos consisten en el cambio de la malla de cálculo con el propósito de disminuir el error, empleando mayor densidad de elementos en las zonas dónde el error se considera mayor. Se puede ver un esquema del proceso adaptativo en el algoritmo 1.

Sea \mathcal{T}_n la malla para el intervalo de tiempo $\tau_n = t_{n+1} - t_n$. Para el cálculo del problema de calidad de aire se utiliza una discretización temporal más fina con $\Delta t = \frac{\tau_n}{m}$, $m \in \mathbb{N}$.

Algoritmo 1 Esquema adaptativo

```
Cálculo del problema de advección-difusión-reacción de  $(0, t_1]$  con  $\mathcal{T}_0$ 
 $n = 1$ 
while  $t_n < T$  do
  Cálculo del indicador de error
  Cálculo de la malla  $\mathcal{T}_n$  a partir del indicador
  Interpolar  $u_h(\mathbf{x}, t_n)$  de  $\mathcal{T}_{n-1}$  a  $\mathcal{T}_n$ 
  Cálculo del problema de advección-difusión-reacción de  $(t_n, t_{n+1}]$  con
   $\mathcal{T}_n$ 
   $n = n + 1$ 
end while
```

A diferencia de distintos algoritmos que se encuentran en la literatura para problemas no estacionarios [4, 1], se ha optado para no adaptar ni el paso de tiempo de cálculo, Δt , ni el intervalo de tiempo de remallado, τ_n ; tampoco se itera en el remallado ni se recalcula ningún paso de tiempo con la nueva malla. Esto presenta una ventaja en términos de coste computacional, pero como se describirá en la sección 4.3, la calidad de los resultados queda determinada por la elección de la malla inicial.

4.1. Remallado

Se han probado distintas estrategias de remallado. La primera de ellas es la Bisección de elementos, que consiste en dividir los elementos que tengan un indicador superior a una tolerancia. Como se comentará, esta estrategia no ha dado buenos resultados debido a que no se han mejorado las oscilaciones y que produce elementos de mala calidad y cuyo volumen es demasiado próximo a cero. Finalmente se ha implementado una modificación de un algoritmo muy presente en la literatura que consiste en usar mallas anisotrópicas que se constuyen a partir de una métrica obtenida del estimador del error.

para generar mallas anisotrópicas que consiste en imponer una métrica a la nueva malla [1, 5, 11].

4.1.1. Bisección de elementos

La primera estrategia que empleada es la bisección de elementos. Los elementos que tienen un indicador superior a una tolerancia, se dividen mediante la inserción de nodos en las aristas, en las caras o en el interior. Se muestra un ejemplo en la figura 4.1. De este modo se consigue que los nuevos elementos tengan una calidad similar al del elemento que lo ha creado. En la frontera de los elementos que se deben refinar y los que no, se pueden producir elementos cuya calidad sea mala [3, 8], que pueden mejorarse mediante operaciones topológicas. Este algoritmo no contempla derrefinar.

Este algoritmo se puede implementar dividiendo un elemento en un número cualquiera de elementos (2, 3, 4, 6, 7, 8,...) según el valor del indicador o del estimador pero en la práctica no es recomendable hacerlo a un número superior a 8 debido a que aumenta el número de elementos de mala calidad en la frontera de la zona refinada con la zona no refinada. Como consecuencia no se puede aumentar mucho la densidad de elementos en una zona en una sola iteración. Como medida de la calidad de los elementos se ha usado el Aspect-Ratio, que se define como el ratio entre la longitud del lado mayor y la altura más pequeña. Para conseguir una malla de calidad este ratio tiene que ser lo menor posible.

Se ha implementado este algoritmo, teniendo la precaución de no refinar elementos que tengan un Aspect-Ratio grande o un volumen pequeño. Los nuevos nodos se han insertado mediante el mallador *Tetgen*.

Resultados

Los resultados que se han obtenido no han sido buenos. Se han calculado los primeros 30 segundos de emisión empleando la bisección de elementos y

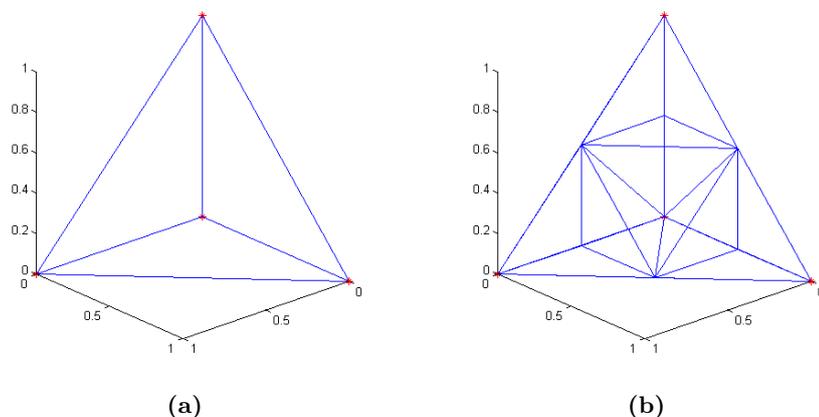


Figura 4.1: Ejemplo de la bisección de elementos en el elemento de referencia: (a) antes de aplicar la bisección y (b) después de aplicar la bisección insertando un nodo a cada arista

como se puede ver en la figura 4.2 la mejora que representa es muy pequeña: las oscilaciones que aparecen son ligeramente inferiores, pero siguen estando en el mismo orden de magnitud.

Además, a medida que se ha remallado, ha disminuido el número de elementos con Aspect-Ratio pequeño y ha agumentado el número de elementos de mala calidad. Se puede ver tanto en el histograma 4.3 como en la tabla de valores 4.1 que los elementos a los que se les aplica la bisección dan lugar a elementos de peor calidad.

Como consecuencia de la disminución de la calidad de la malla se produce un aumento del número de condición de la matriz del sistema de ecuaciones, lo que provoca que el *solver* del sistema lineal de ecuaciones necesite más iteraciones para converger.

Esta estrategia se ha tenido que abandonar porque al fraccionar elementos cuyo volumen es pequeño en relación con el área de sus caras produce elementos cuyo volumen es prácticamente nulo pero el área de sus caras es grande.

En los ejemplos en 2D de [8] también se puede apreciar como disminuye la calidad de la malla, pero debido a que la malla inicial era de cuadriláteros regulares este efecto es menor. Los ejemplos de [3] son en 3 dimensiones, pero debido a que solo se ha refinado la malla pocas veces, la calidad de los elementos es aceptable.

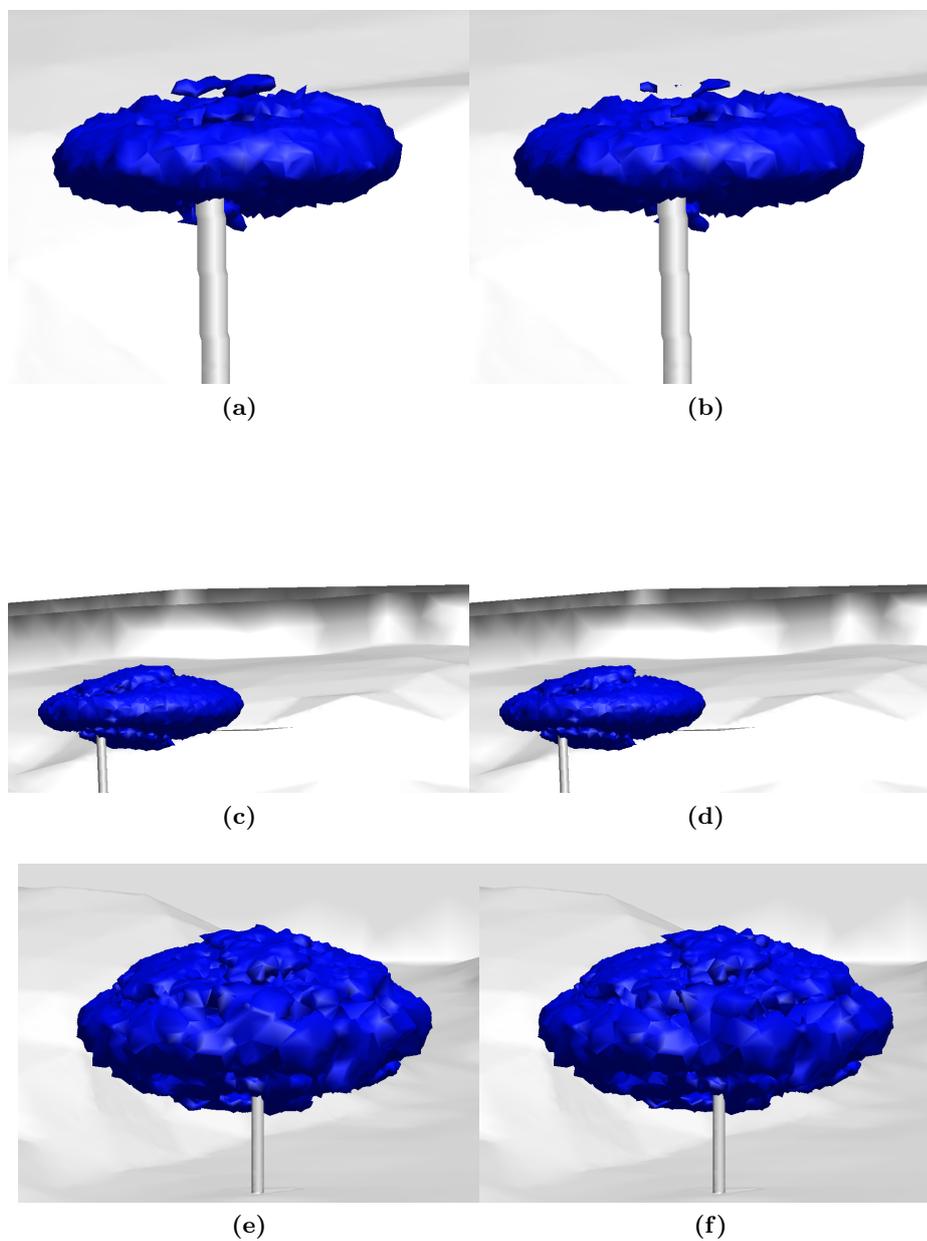


Figura 4.2: Comparación de las isosuperficies a 30 segundos del inicio de la emisión empleando la bisección de elementos; a la izquierda con la malla original y a la derecha remallando cada 10 segundos. (a) y (b) concentración relativa 10^{-3} , (c) y (d) concentración relativa 10^{-4} y (e) y (f) concentración relativa 10^{-5} .

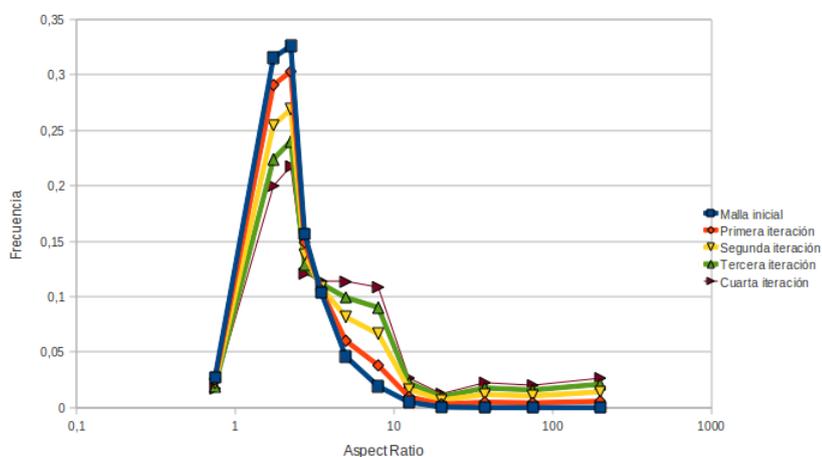


Figura 4.3: Histograma de la evolución del Aspect ratio usando la bisección de elementos

Aspect-ratio	Malla inicial	Primera iteración (10-20s)	Segunda iteración (20-30s)	Tercera iteración (30-40s)	Quarta iteración (40-50s)
<1.5	12986	12896	12684	12469	12231
1.5-2	150141	148868	146608	144059	141659
2-2.5	155131	155036	154757	154410	154165
2.5-3	74459	76224	79092	82438	85625
3-4	49337	54145	62544	71801	80865
4-6	21891	30860	46964	63851	80391
6-10	9158	19488	38303	58022	76926
10-15	2346	4945	9645	14348	18910
15-25	252	1547	3904	6369	8803
25-50	8	2489	6834	11390	15931
50-100	3	2190	6090	10231	14285
>100	7	2932	8149	13570	18799
Total elementos	475719	511620	575574	642598	708590
Iteraciones necesarias para converger	4	16	35	52	98

Tabla 4.1: Tabla de valores de la evolución del Aspect-Ratio usando la bisección de elementos

4.1.2. Imposición de un volumen máximo

En la literatura se encuentran distintos ejemplos en los que la nueva malla que se genera debe cumplir cierta métrica. Por ejemplo, en problemas de convección-difusión para generar mallas de cuadriláteros anisotrópicos en 2D [5, 11, 9] o en otro tipo de problemas en 3D [1]. De esta forma, los nuevos elementos cumplen la métrica impuesta, pero también, de forma implícita, se les ha impuesto cierto requerimiento sobre el volumen (la superficie en 2D).

Debido a que el indicador usado no contempla ningún tipo de relación entre ninguna dirección del elemento, de la solución o ningún parámetro del problema y que se quiere crear elementos con Aspect-Ratio bajos, no hay ninguna razón para seguir esta estrategia en lo que refiere a la métrica de los elementos, pero sí en relación a la imposición del volumen de los elementos.

La nueva malla que se genera debe cumplir que los elementos que esten en ciertas regiones deban tener un volumen inferior a un volumen fijado. Además, esta malla debe cumplir ciertos requerimientos del Aspect-Ratio para poder asegurar la convergencia en la solución del problema de advección-difusión en pocas iteraciones.

Implementación

Este algoritmo se ha implementado mediante una malla de referencia (una malla con muy pocos elementos comparado con el número de elementos de las mallas refinadas) donde se impone, en cada elemento, un volumen máximo que deben cumplir todos los elementos de la nueva malla generada que estén en su interior. Se puede ver detallado en el algoritmo 2.

Se define \mathcal{T}_r como una malla de referencia de Ω y \mathcal{T}_n una malla de Ω , que es un refinamiento de la malla \mathcal{T}_r para $t \in [t_{n+1}, t_n]$; V_i^n el volumen máximo impuesto al elemento i de la malla \mathcal{T}_r y Vol_i^n el volumen del elemento i de la malla \mathcal{T}_n . $\alpha > 0$ y $\beta > 1$ son dos constantes.

Se impone el nuevo volumen máximo que se calcula a partir de un elemento al elemento de la malla de referencia cuyo centroide está más cercano debido a que es más rápido computacionalmente con los algoritmos considerados. En la práctica mayoría de los casos (sobretudo si todos los elementos de la malla de referencia tienen un volumen parecido) se cumple que si un elemento está en el interior de un elemento de la malla de referencia, el centroide de este elemento es el más proximo al centroide del elemento de la malla de referencia.

Es recomendable fijar un volumen mínimo que se puede imponer a la malla de referencia, que sea suficientemente pequeño en comparación con las dimensiones del problema, para no producir un exceso de refinamiento

Algoritmo 2 Obtención de la malla \mathcal{T}_{n+1} imponiendo un volumen máximo

Input: $\mathcal{T}_r, \mathcal{T}_n$

Inicializar $V_e^{n+1} = \beta V_e^n \quad \forall$ elementos de \mathcal{T}_r

for todos los elementos $\omega_i \in \mathcal{T}_n$ **do**

 Cálculo del indicador $\eta(\omega_i)$

if $\eta(\omega_i) > TOL_\eta$ **then**

 Buscar $elemRef$, el elemento de \mathcal{T}_r cuyo centroide es el más proximo al del elemento ω_i

$V_{elemRef}^{n+1} = \min\left(\frac{Vol_i^n}{1+\eta(\omega_i)}, V_{elemRef}^{n+1}\right)$

end if

end for

Crear \mathcal{T}_{n+1} refinando \mathcal{T}_r con la imposición de los volúmenes V_i^{n+1}

que se puede traducir en un número de nodos demasiado grande para el cálculo.

La finalidad de β es no derrefinar en exceso, de forma que si el indicador ha disminuido por debajo de la tolerancia, el volumen máximo que se imponga al elemento de la malla de referencia sea parecido al de la iteración anterior. El valor de esta constante se tiene que escoger teniendo en cuenta:

- un valor alto produce un gran derrefinamiento en un elemento de la malla de referencia dónde antes el indicador tomaba valores altos por lo que derrefinar puede volver a generar un indicador del error alto,
- un valor bajo (pero mayor a la unidad) produce que los elementos de la malla de referencia sean poco derrefinados si el valor del indicador baja sustancialmente, por lo que puede producir que algunos elementos tengan un volumen inferior al necesario y, como consecuencia, tener que resolver un sistema mayor.

4.2. Interpolación

A diferencia del algoritmo de la bisección de elementos, entre dos mallas generadas por este algoritmo sólo se puede asegurar que los únicos nodos presentes en ambas mallas sean los nodos de la malla de referencia por lo que el coste computacional de la interpolación de la solución entre dos mallas consecutivas es muy mayor. Además, con la bisección de elementos queda perfectamente definido a que elemento de la malla previa pertenece un nuevo nodo, cosa que no ocurre con la imposición de un volumen máximo. Por lo tanto, es importante encontrar un mecanismo eficiente de interpolado debido a que se debe de usar repetidas veces.

Empleando la imposición de volumen, el tiempo de cálculo de la interpolación de la solución entre dos mallas (con aproximadamente 1000000 elementos y 120000 nodos) es del orden de 40 minutos, mientras que el tiempo de cálculo de la resolución del problema de advección difusión para 30 segundos y $\Delta t = 0,5$ segundos es del orden de 10 minutos, el cálculo del estimador es del orden de 15 minutos y el cálculo de la nueva malla es inferior al minuto.

Se ha implementado un algoritmo basado en los Árboles Cuaternarios: se divide el dominio en celas, de esta forma se consigue reducir el coste computacional, que es proporcional al número de nodos que se deben interpolar y al número de elementos de la malla anterior, pero no lo es linealmente: se resuelven varios problemas iguales pero cuyo número de nodos a interpolar es muy menor¹. Se puede ver un resumen en el algoritmo 3.

Algoritmo 3 Interpolación de la solución entre \mathcal{T}_n y \mathcal{T}_{n+1}

Input: $\mathcal{T}_r, \mathcal{T}_n$

```

for todas las celas  $C_j$  do
  Buscar todos los nodos  $\mathbf{x}_i \in \mathcal{T}_{n+1}$  y los elementos  $w_k \in \mathcal{T}_n$  en el interior
  de la  $C_j$ 
  for Todos los nodos  $\mathbf{x}_i \in C_j$  do
    Buscar  $w_{ref}$ , el elemento perteneciente a  $C_j$  cuyo centroide es el más
    próximo a  $\mathbf{x}_i$ ;  $d_{min}$  es la distancia entre el centroide y el nodo.
    if el nodo  $\mathbf{x}_i$  está en el elemento  $w_{ref}$  then
      Interpolar
    else
      for todos los elementos  $w_n \in C_j$  cuya distancia sea inferior a  $\beta d_{min}$ 
      ( $\beta > 1$ ) do
        if el nodo  $\mathbf{x}_i$  está en el elemento  $w_n$  then
          Interpolar
        else
          No interpolar
        end if
      end for
    end if
  end for
end for

```

Como se desprende del algoritmo 3, si un nodo y el elemento² que lo contiene pertenecen a distintas celas es imposible que se interpole. Es importante crear una lista con los elementos no interpolados y solucionarlo

¹Existen algoritmos de búsqueda basados en la topología mucho más eficientes.

²Se ha considerado que un elemento pertenece a una celda únicamente si su centroide pertenece a dicha celda.

aunque sea mediante técnicas no eficientes.

4.3. Malla inicial

Una de las decisiones que condiciona la calidad de los resultados en el algoritmo 1 es la elección de la malla inicial. Al no recalcularse el paso de tiempo cada vez que se produce un cambio en la malla, cualquier ondulación espacial que pudiera haber es interpolada a la nueva malla y se transmite a los posteriores pasos de tiempo.

Para solucionar este problema, se ha planteado un algoritmo iterativo, parecido al usado en [1]. Se ha empezado con una malla cualquiera y se ha calculado el problema de advección-difusión-reacción, se ha calculado el indicador de error y se ha remallado siguiendo el algoritmo 2. Este proceso se ha repetido hasta que pocos elementos tenían un indicador mayor a 1,5 y el número de elementos de la nueva malla generada y de la precedente era parecido. De esta forma se consigue una malla que en el primer paso de tiempo la solución presenta pocas oscilaciones y así no se transmiten a los sucesivos pasos de tiempo.

Se puede ver en la figura 4.4 los resultados obtenidos en el proceso iterativo. Se ha tenido que calcular 4 veces el problema de advección-difusión hasta que se ha llegado a dos mallas consecutivas cuyo número de elementos era parecido. No se consigue una malla que tenga pocos elementos cuyo indicador sea inferior a un número prefijado ya que el volumen mínimo que se puede imponer a una región está limitado inferiormente.

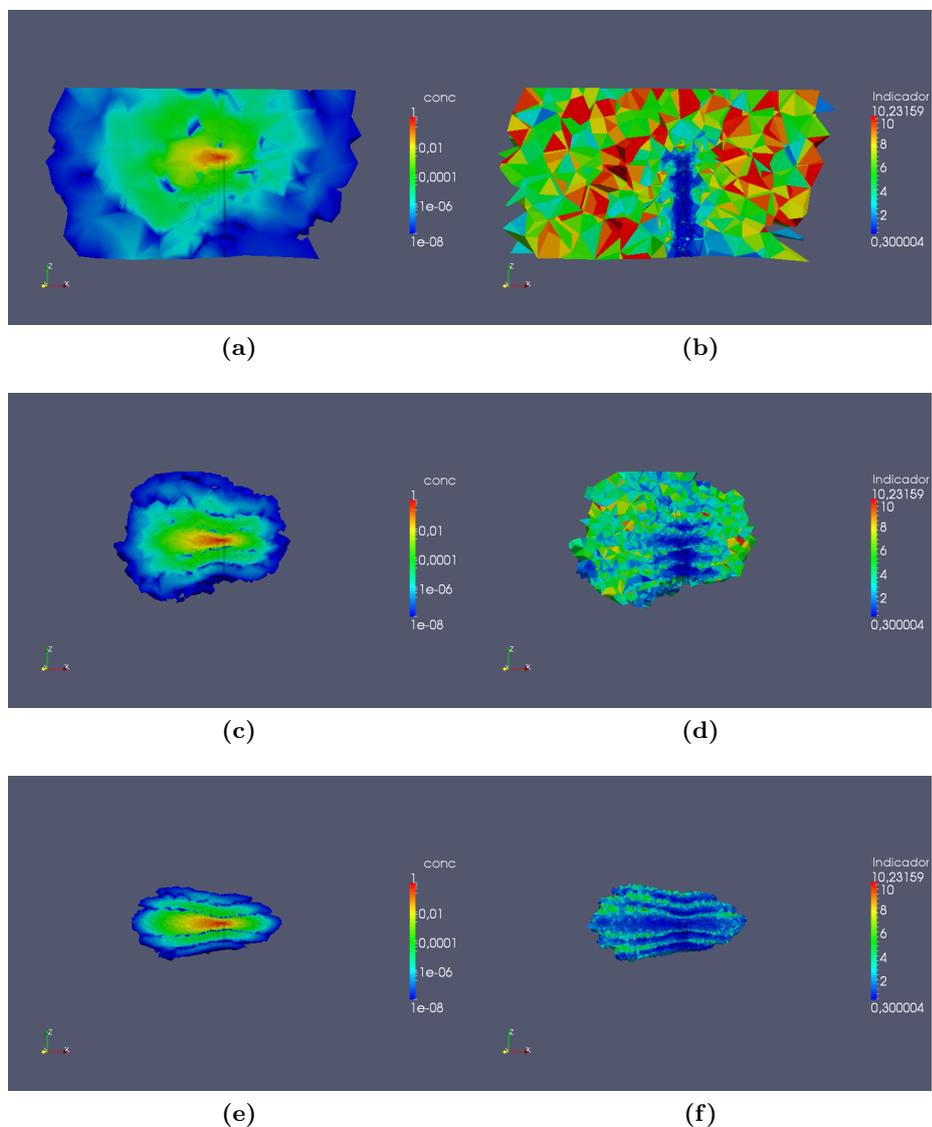


Figura 4.4: Comparación de los resultados a 30 segundos del inicio de emisión obtenidos mediante un proceso iterativo. A la derecha, corte según la dirección del viento de las concentraciones relativas superiores a 10^{-8} ; a la izquierda, corte según la dirección del viento del indicador del error: (a) y (b) malla inicial con 14039 nodos y 72117 elementos; (c) y (d) primera iteración con 34195 nodos y 198663 elementos; (e) y (f) segunda iteración con 86697 nodos y 536448 elementos.

Capítulo 5

Caso práctico: La Oroya (Perú)

La Oroya es una ciudad del centro de Perú, enclabada en las estribaciones de la Cordillera de los Andes. La principal industria es la minera, que explota reservas de Oro, Plata, Antimonio, Arsénico, Bismut y Cadmio entre otros. En los procesos de obtención de estos elementos se produce la fundición de la roca, que libera a la atmósfera metales pesados y dióxido de azufre. Existe una gran contaminación que tiene efectos sobre los habitantes (por ejemplo [10, 2]).

5.1. Modelo

5.1.1. Condiciones de contorno

La ecuación para modelizar el problema de transporte con las condiciones de contorno consideradas son las que siguen:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{a} \cdot \nabla u - \nabla(\mathbf{D} \cdot \nabla u) + \sigma u = s & \text{en } \Omega \times (0, T] \\ u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x}) & \text{en } \Omega \\ \mathbf{n} \cdot \mathbf{D} \cdot \nabla u(\mathbf{x}, t) = \phi_{emis}(\mathbf{x}, t) & \text{en } \Gamma_{emis} \times (0, T] \\ \mathbf{n} \cdot \mathbf{D} \cdot \nabla u(\mathbf{x}, t) = -V_d u(\mathbf{x}, t) & \text{en } \Gamma_{terreno} \times (0, T] \\ \mathbf{n} \cdot \mathbf{D} \cdot \nabla u(\mathbf{x}, t) = 0 & \text{en } \Gamma_{tapa} \times (0, T] \\ u(\mathbf{x}, t) = g_D(\mathbf{x}, t) & \text{en } \Gamma_{altillo} \times (0, T] \end{array} \right. \quad (5.1)$$

donde Γ_{tapa} es la superficie superior, $\Gamma_{altillo}$ es la superficie vertical que junta el terreno con la tapa superior y Γ_{emis} es la salida de la chimenea (ver figura 5.1). El terreno (y las paredes exteriores de la chimenea) tienen

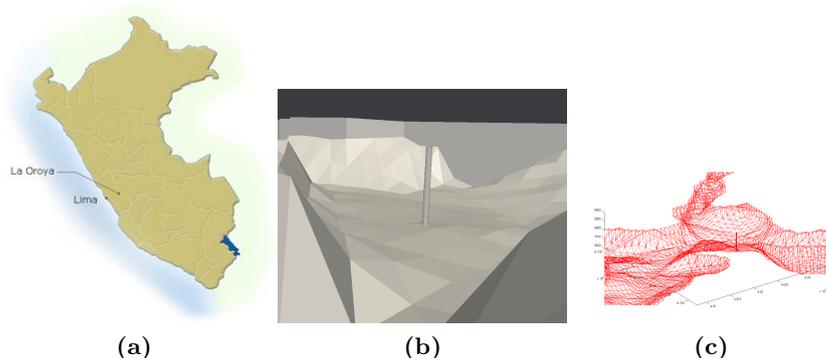


Figura 5.1: (a) mapa general, (b) y (c) detalles de zona de estudio

impuestas condiciones de contorno de Robin: la deposición de contaminante es proporcional a la cantidad de contaminante.

Se ha considerado como zona de estudio toda la zona próxima a la chimenea cuya cota fuera inferior a 3936 metros; la chimenea se encuentra a 3717.5 metros y tiene una longitud de 173 metros. La superficie superior (Γ_{tapa}) se encuentra a 4000 metros.

5.1.2. Datos topográficos

Se dispone de un modelo digital de elevaciones de la zona de estudio; los datos proceden de una malla estructurada de cuadriláteros con un espaciamiento aproximado de 90 metros. Cualquier nodo nuevo que se ha creado en la superficie se ha hecho mediante una interpolación lineal a trozos de la malla anteriormente mencionada transformada a triángulos.

5.1.3. Modelo de viento

Se ha considerado un modelo de viento en calma característico de situaciones atmosféricas estables. El viento es completamente horizontal, según la dirección principal del valle $(-0,2,1)$. El campo de viento se ha modificado para que se ajuste a la topografía: en los elementos de la superficie se le ha dado una componente vertical de tal manera que las componentes planimétricas fueran idénticas y que el viento fuera paralelo al terreno.

No se ha considerado ningún tipo de efecto en el campo de velocidades del viento producido por la emisión debido a la diferencia de temperatura y cantidad de movimiento del aire dentro y fuera de la chimenea. La componente vertical del viento de los elementos próximos a la salida de la chimenea se

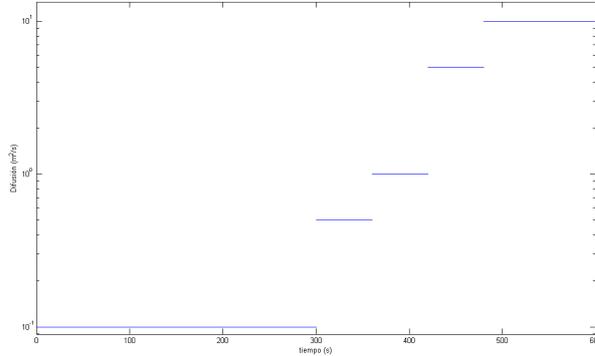


Figura 5.2: Evolución de la difusión vertical en el tiempo

considera nula. Se trata de una hipótesis nada realista que se puede salvar con distintos modelos (P. ej.: Fórmula de Briggs).

5.1.4. Difusión

Se ha supuesto una difusión horizontal, $D_{11} = D_{22} = 10$ constante en el tiempo. La difusión vertical que se considerará se puede ver en la figura 5.2. Se trata de una función constante a trozos. Esta difusión no cumple las condiciones básicas de regularidad respecto al tiempo que se han asumido.

5.1.5. Constantes

Se ha considerado que $u_o = g_D = 10^{-8}$ g/m³, ya que de esta forma queda claro que los valores inferiores a éste tienen un error de redondeo demasiado grande, $\phi_{emis} = 10$ g/(m² s), $v_D = 1,3 \cdot 10^{-3}$ m/s y $\sigma = 1,2 \cdot 10^{-3}$ s⁻¹. Para la discretización temporal del problema se ha usado $\Delta t = 0,5$ s.

En el algoritmo adaptativo se han considerado los siguientes valores: $\tau = 30$ s, $TOL_{u_h} = 0,25 \cdot 10^{-7}$ g/m³, $TOL_{\eta} = 1,35$, $\alpha = 4,0$, $\beta = 2$ y que el volumen mínimo que se puede imponer una región es de 1 m³.

Las constantes del esquema adaptativo deben de ajustarse para llegar a un conjunto que produzca buenos resultados con un número de incógnitas asumibles. El valor de TOL_{u_h} , el valor de la solución en el punto de Gauss a partir del cual el indicador no se supone nulo, se ha escogido porque se desea obtener las isosuperficies de concentración relativa mayor que 10^{-7} .

Para la interpolación, el dominio se ha dividido en 12800 celas (160 según la dirección mayor, 80 en la otra y una en la dirección vertical) ya que un valor mayor reduce el tiempo de cálculo del algoritmo 3 pero aumenta mucho

el número de nodos que no se pueden interpolar mediante este algoritmo y aumenta mucho el coste computacional de la interpolación de dichos nodos.

5.2. Resultados

La solución obtenida concuerda con lo que cabría esperar. En los primeros 300 segundos de emisión el penacho de contaminante se propaga horizontalmente y el flujo vertical es muy pequeño. En la zona que no está influida por el penacho la concentración disminuye debido al término reactivo. A medida que aumenta la difusión vertical el penacho se empieza a desarrollar verticalmente.

Se puede ver en todas las imágenes que tienen difusiones bajas que aparecen dos intercalaciones de concentración muy baja (del orden de 10^{-7}) en el interior del penacho. Disminuyendo el tamaño del elemento estas intercalaciones disminuyen poco pero no tienden a desaparecer y se cree que son debidas al método numérico.

En la figura 5.5 se puede ver como a medida que aumenta la difusión vertical las dos oscilaciones que aparecen en el interior del penacho tienden a desaparecer.

En todas las imágenes se puede apreciar que aparecen oscilaciones en las concentraciones relativas muy bajas (típicamente del orden de 10^{-8}). Estas oscilaciones son pequeñas y no tienen influencia en la solución global ya que cuando se produce un cambio de malla (que tiene un tamaño de elemento de inferior en esta zona) se difunden rápidamente. Además estas oscilaciones están completamente acotadas en el indicador del error, por lo que siempre se puede recalculer el paso de tiempo o usar un tamaño de los elementos inferior para evitarlas.

El origen de algunas de estas oscilaciones (por ejemplo las que aparecen en 5.3c o 5.4c a la izquierda del penacho) se encuentra en la elección de no recalculer el paso de tiempo y de no adaptar el intervalo de tiempo entre dos generaciones de malla consecutivas, τ_n . La malla de cálculo está adaptada para la solución en el inicio del intervalo de tiempo y según avanza el tiempo el penacho se distribuye en regiones de la malla que no han sido adaptadas y cuyo volumen es demasiado grande; al tener un tamaño demasiado grande se producen estas oscilaciones.

Sin embargo, como el intervalo de tiempo entre la generación de dos mallas consecutivas no es muy grande (la solución al inicio y al final no varía mucho) no se produce una gran degradación de la solución. Recalculando, ni que fuera una única vez, el paso de tiempo con la nueva malla generada al final se podrían haber evitado algunas de las oscilaciones que aparecen en las concentraciones relativas bajas. Como se muestra en [1] si no se itera

en el remallado y la solución varía mucho entre dos mallas consecutivas se va produciendo una degradación paulatina en la solución, porque las nuevas mallas generadas están basadas en una solución mala, y la solución final es muy distinta a la solución real.

También hay que tener en cuenta que a las mallas que se generan se les impone ciertos requisitos sobre su calidad, por lo que la variación espacial del volumen de los elementos acostumbra a ser suave, por lo que la malla se ajusta mejor a la solución durante todo el paso de tiempo. Sin embargo esto no ocurre en el instante de tiempo $t = 210$ s (figura 5.4c y 5.4d) donde se produce una oscilación grande a las concentraciones relativas muy bajas. Se produce porque los elementos cercanos al terreno són grandes; obsérvese que quedan claramente delimitados los elementos de la malla de referencia. En el siguiente remallado se refina esta zona pero la ondulación és interpolada a la nueva malla, pero se desvanece rápidamente ya que no se aprecia su influencia en la siguiente imagen.

Se pueden apreciar algunas oscilaciones tanto encima como debajo del penacho. Se cree que estas oscilaciones están causadas porque el volumen máximo que se puede imponer a los elementos está acotado inferiormente. Usando un volumen menor estas oscilaciones disminuirían.

En el tiempo $t = 360$ segundos (figuras 5.5a y 5.5b) se produce una gran oscilación en la zona cercana al terreno debido a que la malla no es lo suficientemente fina. En los casos anteriores se difundían rápidamente, pero en este caso se puede apreciar en las siguientes imágenes que esta oscilación afecta a la solución.

A medida que aumenta la difusión vertical disminuyen las oscilaciones.

5.2.1. Malla

En la tabla 5.1 se detalla la evolución del número de nodos y de elementos que forman la malla en cada intervalo de tiempo. Se puede ver como a medida que aumenta la dimensión del penacho aumenta el número de nodos y de elementos hasta que se produce el cambio de la dispersión vertical. A cada aumento de la difusión se produce una disminución en el número de nodos y de elementos debido a que la mayor dispersión vertical provoca que el gradiente de la concentración sea menor, o sea que el indicador del error sea menor.

También se puede ver en las imágenes 5.3 que en los primeros instantes de tiempo se produce un derrefinamiento en la malla en las zonas colindantes a la isosuperficie de concentración relativa de 10^{-8} . Éste se produce ya que la malla del primer instante de tiempo proviene de un esquema iterativo (ver sección 4.3): debido a que la malla inicial del esquema adaptativo era mala y producía muchas oscilaciones en una región muy grande (muy mayor

a la zona que ocupa el penacho en ese instante de tiempo) se produjo un refinamiento a una zona mayor a la necesaria; este exceso de nodos se va corrigiendo a medida que se producen nuevas mallas. No es inmediato porque se ha impuesto que el volumen que se exige a una región sea como mínimo parecido al volumen que se le ha exigido en la iteración anterior. También se puede ver en la tabla 5.1 que tanto el número de elementos y el de nodos en las dos primeras mallas es parecido porque a parte del derrefinamiento del exceso de nodos añadidos por el proceso iterativo se generan nuevos nodos en las zonas donde el indicador toma valores altos.

Destacar que en la zona de concentraciones altas (superiores a 10^{-3}) la malla es muy grosera en comparación con su zona colindante debido a que el indicador es bajo. Si no fuera por las condiciones de la calidad de la malla que se han impuesto, el volumen de estos elementos sería mucho mayor.

A medida que se produce el aumento de la difusión se produce un derrefinamiento general de la malla y se puede ver que toda la región que tiene concentraciones relativas superiores a 10^{-7} tiene un tamaño de elemento parecido, exceptuando la zona de concentraciones altas (a partir de 0.001) donde el tamaño de elemento es mayor.

Se puede ver en todas las imágenes de todas las mallas que en las proximidades de la chimenea el tamaño de los elementos es pequeño. Esto es debido a que la circunferencia chimenea está discretizada con 16 nodos; para cumplir los requisitos de calidad que se imponen en la malla y no crear elementos con Aspect-Ratio alto se generan elementos pequeños.

5.2.2. Curva de inmisión

En la figura 5.6 se puede ver la curva de inmisión de un punto situado a 91 metros de la chimenea según la dirección del viento. La concentración decrece durante los primeros 300 segundos debido al término reactivo y a la deposición. A partir de ese momento, que es cuando aumenta la difusión vertical, la curva tiene una tendencia ascendente; con los primeros aumentos de la difusión vertical el penacho empieza a desarrollarse verticalmente y con los valores más altos de la difusión es cuando se produce el aumento más importante de la concentración relativa hasta llegar a una situación de equilibrio.

El dato correspondiente a 480 segundos muestra un valor bajo debido a una oscilación que se produce en las concentraciones muy bajas.

El comportamiento que describe esta curva calculada es parecido a los datos experimentales de la figura 1.1: con el aumento de la difusión vertical aumenta la concentración varios órdenes de magnitud. Sin embargo cabe recordar las hipótesis sobre el campo de viento que se han hecho y que el

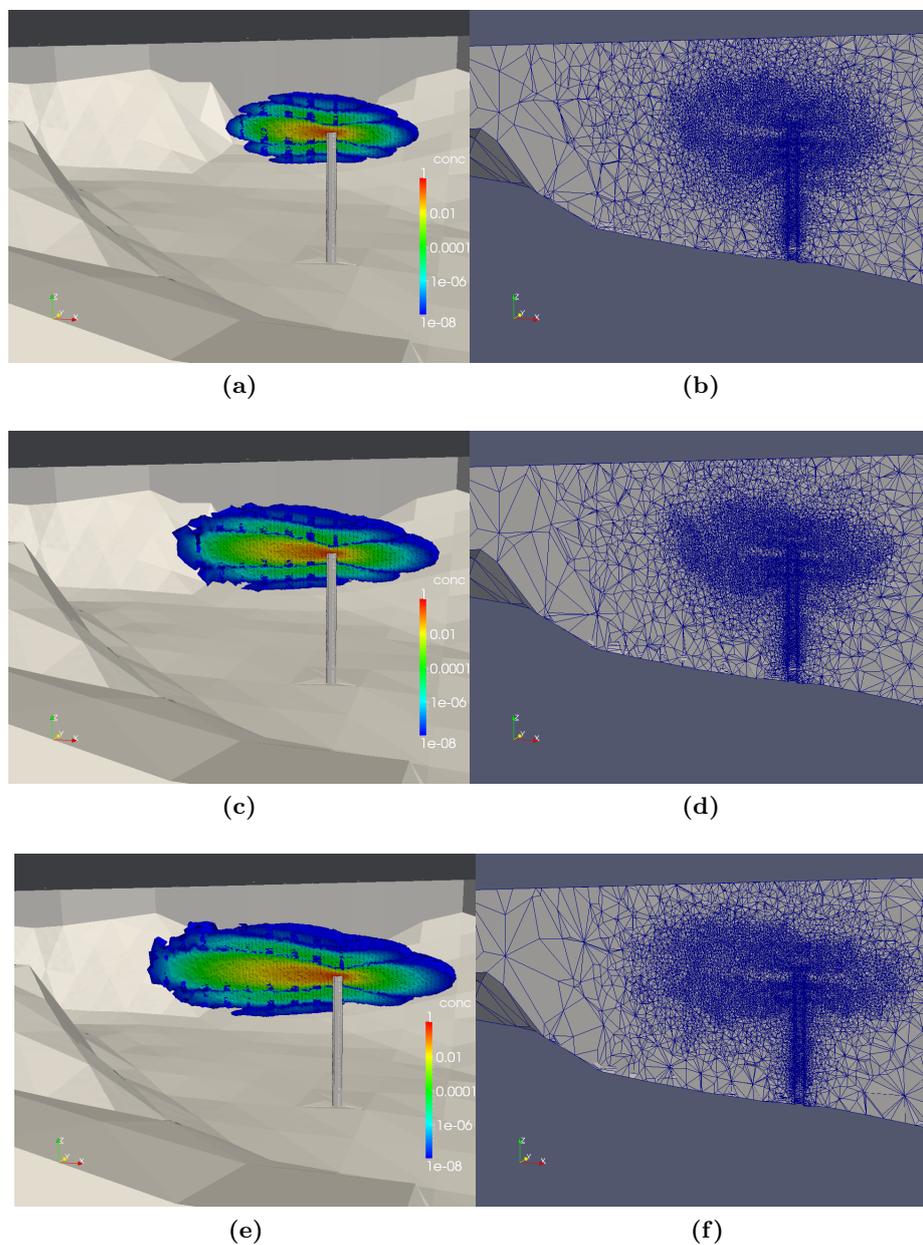


Figura 5.3: Corte según la dirección del viento de las isosuperficies de concentraciones relativas superiores a 10^{-8} (izquierda) y de la malla (derecha): (a) y (b) a 30 segundos del inicio de la emisión, (c) y (d) a 60 segundos del inicio de la emisión y (e) y (f) a 90 segundos del inicio de la emisión.

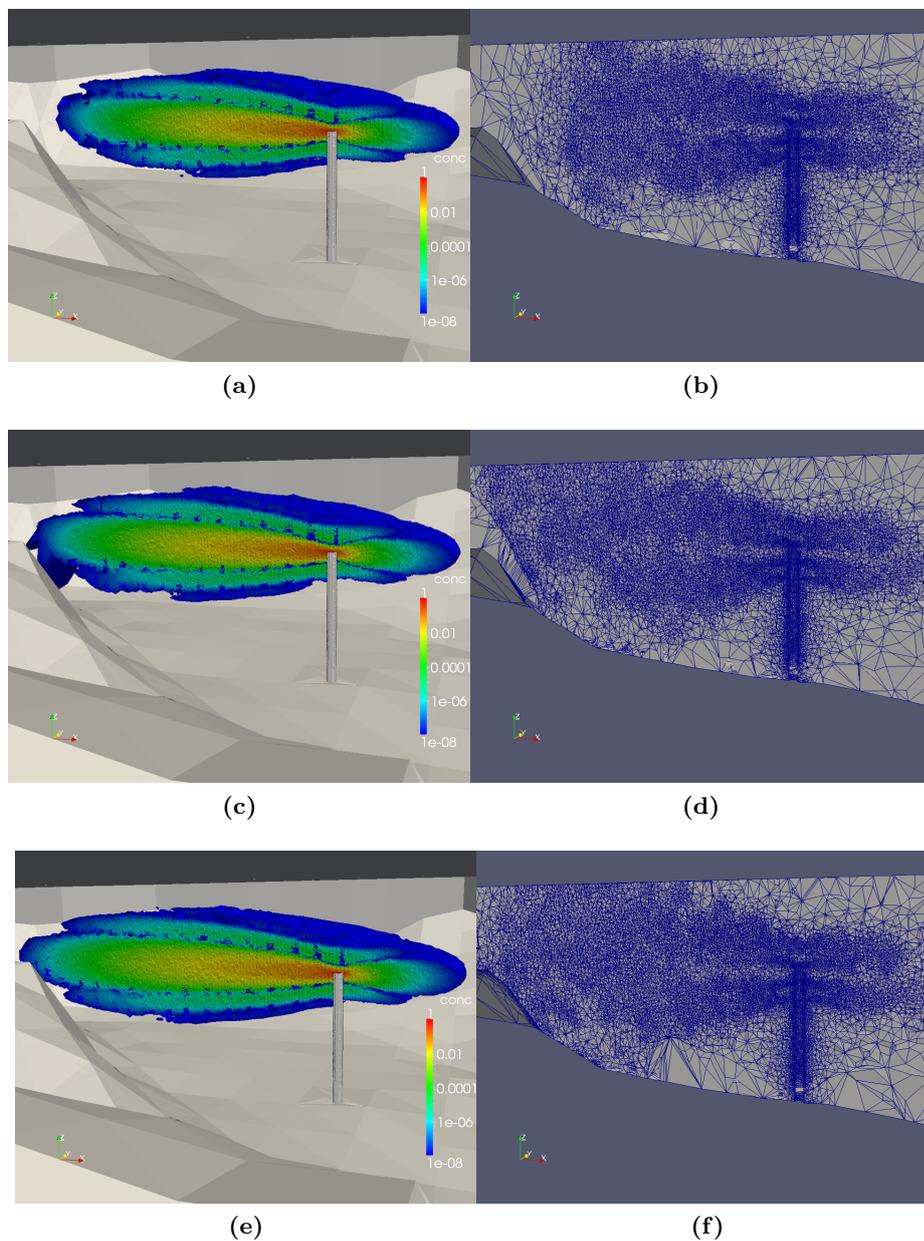


Figura 5.4: Corte según la dirección del viento de las isosuperficies de concentraciones relativas superiores a 10^{-8} (izquierda) y de la malla (derecha): (a) y (b) a 180 segundos del inicio de la emisión, (c) y (d) a 210 segundos del inicio de la emisión y (e) y (f) a 240 segundos del inicio de la emisión.

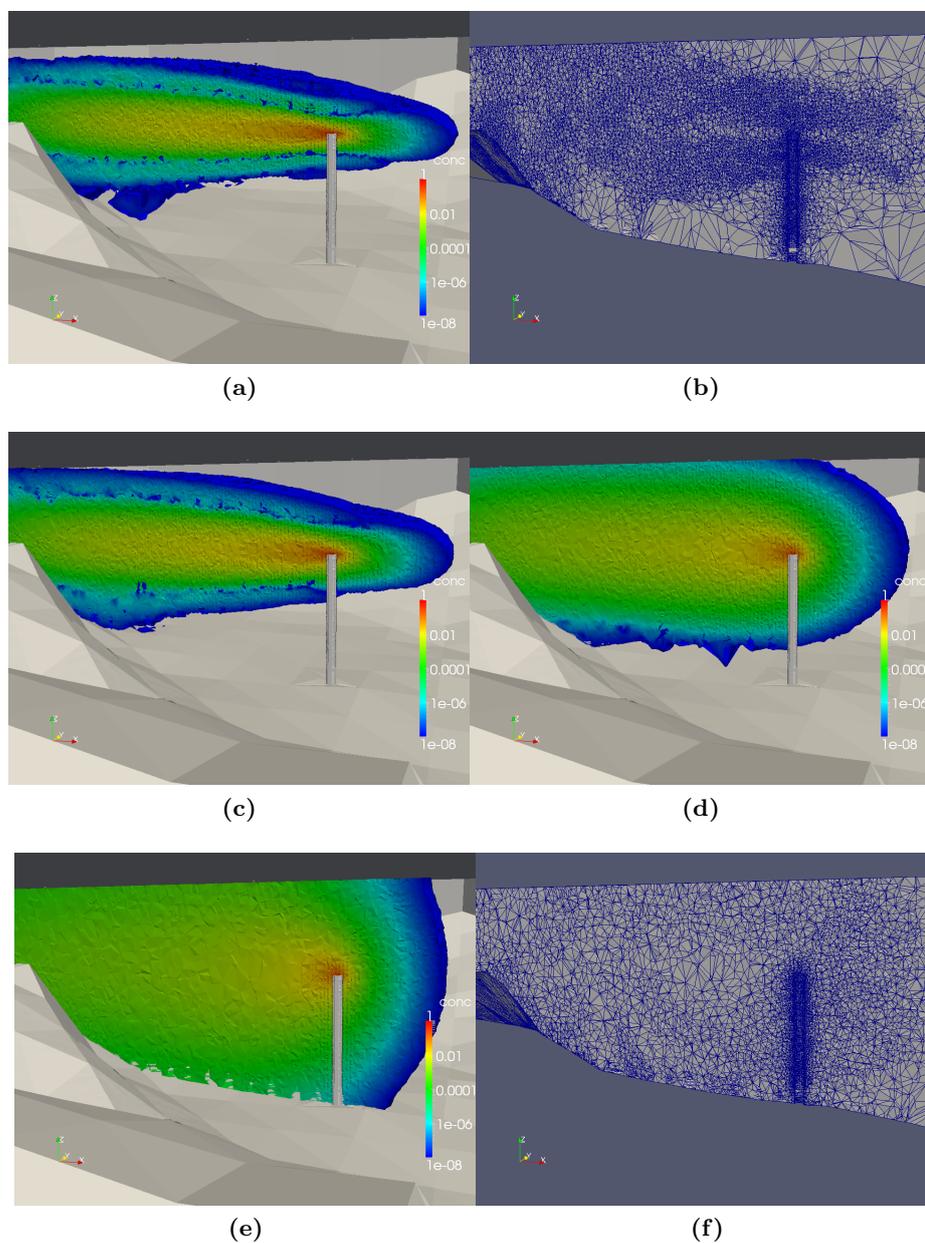


Figura 5.5: Corte según la dirección del viento de las isosuperficies de concentraciones relativas superiores a 10^{-8} : (a) a 360 segundos del inicio de la emisión, (c) a 420 segundos del inicio de la emisión y (d) a 480 segundos del inicio de la emisión y (e) a 600 segundos del inicio de la emisión. (b) y (f) cortes de la malla a 360 segundos y 600 segundos respectivamente.

tiempo inicial	tiempo final	nodos	elementos	$D_v \left(\frac{m^2}{s}\right)$
0	30	171683	1086348	0.1
30	60	174636	1107673	0.1
60	90	217294	1384025	0.1
90	120	285218	1822160	0.1
120	150	334872	2203504	0.1
150	180	404428	2580149	0.1
180	210	450409	2864714	0.1
210	240	487294	3095198	0.1
240	270	528821	3346441	0.1
270	300	561136	3543486	0.1
300	330	579662	3654303	0.5
330	360	361217	2251341	0.5
360	390	365888	2273808	1
390	420	364923	2261763	1
420	450	352499	2177538	5
450	480	300579	1834933	5
480	510	247976	1495756	10
510	540	192131	1144927	10
540	570	145013	855319	10
570	600	116958	684513	10
600	630	98891	575609	10
630	660	88197	511297	10
660	690	81485	472099	10
690	720	77790	450058	10

Tabla 5.1: Tabla de valores de la evolución del número de nodos y de elementos.

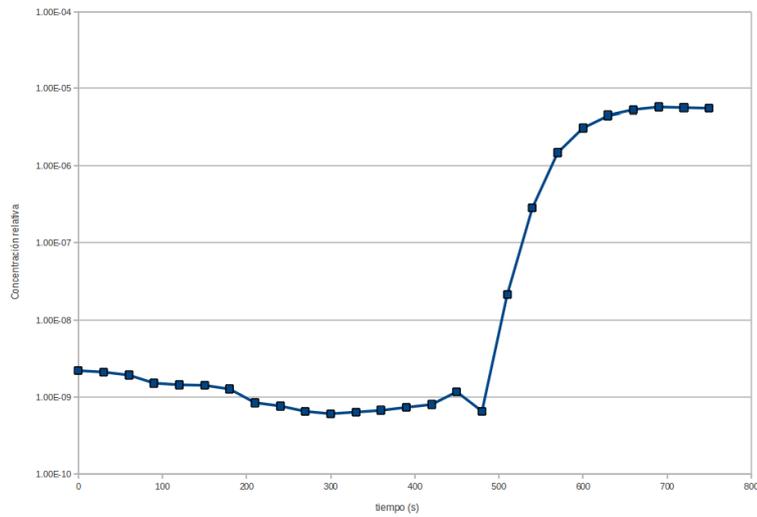


Figura 5.6: Curva de inmisión de un punto situado a 90 metros de la chimenea en la dirección del viento.

aumento de la difusión no es tan rápido, se ha acelerado debido al coste computacional.

5.2.3. Coste computacional

Obviamente, el coste computacional del cálculo del problema empleando un esquema adaptativo es muy superior a no emplearlo: sólo el cálculo de la matriz del sistema cada vez que se produce un cambio en la malla y no sólo cuando cuando se produce un cambio en una propiedad del medio aumenta mucho el tiempo de cálculo. Además los algoritmos de búsqueda implementados no son lo suficientemente eficiente y su coste aumenta de forma no lineal con el número de incógnitas. Para el cálculo de los primeros 300 segundos de emisión se han necesitado 26 horas de cálculo mientras que calcular los mismos 300 segundos con la última malla obtenida tiene un coste de 2 horas.

Capítulo 6

Conclusiones

En la presente tesina se ha conseguido simular el problema de calidad de aire en condiciones atmosféricas de calma. Mediante un procedimiento adaptativo se ha disminuido las oscilaciones que aparecen al resolver el problema de advección-difusión-reacción mediante Elementos Finitos. De acuerdo con los resultados obtenidos, solamente es necesario iterar en el primer remallado si el intervalo de tiempo entre cada generación de malla no es muy grande.

La elección del indicador determina de forma clara la calidad de la solución obtenida. El indicador usado debe contemplar las especificidades del problema a resolver: en el caso del problema de emisiones puntuales se debe tener en cuenta que las oscilaciones se producen en las concentraciones bajas y que no se quiere obtener el valor de la solución sino su orden de magnitud. En este sentido, se ha propuesto un indicador que relaciona de forma biunívoca los elementos cuyo valor es alto con las zonas donde se producen oscilaciones.

Se ha visto que el esquema de remallado usado, basado en la imposición de un volumen máximo en ciertas regiones, permite refinar de una forma muy flexible: en una sola iteración permite aumentar mucho la densidad de elementos en una región. Además, las mallas que se obtienen son de buena calidad y como consecuencia permite resolver el sistema de ecuaciones con pocas iteraciones del solver iterativo.

Principales aportaciones

Las principales aportaciones de esta tesina son:

- Un indicador de error especialmente adecuado para problemas de emisores puntuales debido a que toma valores altos en las zonas donde se producen las oscilaciones, que típicamente son las concentraciones bajas.

- Un esquema de remallado basado en la imposición de un volumen máximo en ciertas regiones.

Líneas futuras

En este trabajo se ha considerado un campo de viento nada realista pero que permite ver con claridad el comportamiento tanto del indicador como del esquema adaptativo. En la actualidad existen distintos modelos de viento que consideran el efecto de la emisión.

Con la implementación actual el tiempo de cálculo es claramente excesivo: para simular 5 minutos hacen falta 26 horas de cálculo. Esto es debido a que los algoritmos de búsqueda que se han implementado son sencillos pero no son eficientes y existen distintas alternativas para mejorar este aspecto. Para mejorar el rendimiento también se puede paralelizar el cálculo; en el caso del cálculo del indicador es sencillo debido a que el indicador de un elemento sólo usa información de ese elemento y no necesita comunicación con sus vecinos.

Sólo se ha estudiado el problema a pequeña escala. Se tendría que plantear un escenario global y ver el comportamiento de el algoritmo adaptativo. Además se podría comparar con los datos experimentales de los que se dispone.

Bibliografía

- [1] F. Alauzet, P.L. George, B. Mohammadi, P. Frey, and H. Borouchaki. Transient fixed point-based unstructured mesh adaptation. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 43(6-7):729–745, 2003.
- [2] Anna K Cederstov and Alberto Barandiaran. *La Oroya no espera*. Sociedad peruana de derecho ambiental, 2002.
- [3] Rupak Biswas and Roger C. Strawn. A new procedure for dynamic adaption of three-dimensional unstructured grids. *Applied Numerical Mathematics*, 13(6):437 – 452, 1994.
- [4] Z. Chen and J. Feng. An adaptive finite element algorithm with reliable and efficient error control for linear parabolic problems. *Mathematics of Computation*, 73(247):1167–1194, 2004.
- [5] Luca Formaggia, Simona Perotto, and Paolo Zunino. An anisotropic a-posteriori error estimate for a convection-diffusion problem. *Computing and Visualization in Science*, 4:99–104, 2001. 10.1007/s007910100061.
- [6] Volker John. A comparison of some error estimators for convection-diffusion problems on a parallel computer. In *Preprint 12/94, Otto-von-Guericke Universitat Magdeburg, Fakultat fur Mathematik*, 1994.
- [7] Volker John. A numerical study of a posteriori error estimators for convection-diffusion equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190(5-7):757 – 781, 2000.
- [8] Rainald Löhner. An adaptive finite element scheme for transient problems in cfd. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 61(3):323 – 338, 1987.
- [9] M. Picasso and V. Prachittham. An adaptive algorithm for the Crank-Nicolson scheme applied to a time-dependent convection-diffusion problem. *Journal of computational and applied mathematics*, 233(4):1139–1154, 2009.

- [10] A.V. Ramírez, PJ Cam, and M. Medina. Plomo sanguíneo en los habitantes de cuatro localidades peruanas. *Rev Panam Salud Pública*, 1(5):344–8, 1997.
- [11] Shuyu Sun and Mary F. Wheeler. Anisotropic and dynamic mesh adaptation for discontinuous galerkin methods applied to reactive transport. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195(25-28):3382 – 3405, 2006. Discontinuous Galerkin Methods.
- [12] R. Verfürth. Robust a posteriori error estimates for nonstationary convection-diffusion equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 43:1783–1802, April 2005.