

Universidad Católica de Temuco Facultad de Ingeniería Departamento de Ciencias Matemáticas y Física

Desarrollo de un simulador computacional para la evaluación de modelos de advección difusión.

Por

Eduardo Alberto Mancilla Barría

Profesor Guía

Dr. Emilio Cariaga

Actividad Formativa Equivalente, para optar al grado de Magíster en Matemáticas Aplicadas

Temuco - 16 de septiembre de 2021

Universidad Católica de Temuco Facultad de Ingeniería Departamento de Ciencias Matemáticas y Física

COMISIÓN EVALUADORA

Profesor Guía:

Dr. Emilio Cariaga

Profesor informante:

Dr. Nicolás Schiapacasse

Profesor informante:

Dr. Gino Montecinos

Director del Programa (Ministro de fe):

Dr. Jacobo Hernández

Temuco ·····

Perfil de Egreso

Magíster en Matemáticas Aplicadas. Universidad Católica de Temuco.

El egresado del Magíster en Matemáticas Aplicadas es un profesional posgraduado que posee la competencia de aplicar la matemática al análisis de sistemas y procesos complejos en el ámbito de los fenómenos de transporte. Específicamente

Formula ecuaciones diferenciales como modelos matemáticos, en el ámbito de los fenómenos de transporte, para obtener una relación cuantitativa entre las variables relevantes del sistema.

Resuelve ecuaciones diferenciales como modelos matemáticos, utilizando técnicas numéricas y analíticas, para obtener valores cuantitativos de la variable respuesta del sistema.

Utiliza programas computacionales en la resolución, análisis y aplicación de ecuaciones diferenciales al mejoramiento de sistemas complejos en el ámbito de los fenómenos de transporte.

Agradecimientos

En primer lugar, agradecer a mis padres por su inmenso apoyo durante esta etapa de mi vida académica. Esto es por y para ustedes.

Agradezco al equipo de profesores del Magíster de Matemáticas Aplicadas, y a mis compañeros por hacer que cada fin de semana de magíster sea una experiencia agradable.

A mi profesor guía Stefan, al profesor Nicolás y al Dr. Gino Montecinos por su disposición para ayudarme durante la realización de este trabajo de titulación.

A mis compañeros del área de TV Digital de Telefónica del Sur, especialmente a Cristian mi jefe durante esta etapa, por permitirme salir temprano cada viernes para asistir a clases.

A mis amigos Cristian y Karina, por hacerme compañía cada fin de semana durante el tiempo de clases.

A mi hermano Luis y a mi cuñada Maria Isabel por su preocupación y aliento.

Finalmente agradecer a la Alme, que sin su labor de aullar cada día no podría saber cuando son las doce.

Resumen

La ciudad de Temuco, ubicada al sur de Chile,en la actualidad presenta uno de los índices de concentración de material particulado PM_{10} y $PM_{2,5}$ en el aire más altos del país. Esto motivó a un equipo multidisciplinario de la Universidad Católica de Temuco a diseñar de una red de sensores inalámbricos, distribuidos por la ciudad que medirán la concentración de PM_{10} y $PM_{2,5}$; que estará apoyado de simuladores computacionales que permitan predecir el comportamiento de estos contaminantes. En este sentido, el presente documento muestra el diseño y desarrollo de un motor de simulación computacional que resuelve la distribución de una nube de contaminantes por medio de un modelo matemático basado en la ecuación de advección-difusión con componentes de emisión y deposición. La ecuación diferencial gobernante del modelo se resolverá sobre un mallado no-regular utilizando el método de volúmenes finitos para su discretización espacial y utilizando esquemas explícitos e implícitos para resolver la discretización en el tiempo. El principal objetivo del presente trabajo es desarrollar una Prueba de Concepto que permita obtener un algoritmo que esté verificado matemáticamente. Para esto, se desarrollará un conjunto de pruebas utilizando el método de soluciones manufacturadas para comprobar la precisión del código.

Resumen

Today, the city of Temuco, located in southern Chile, has one of the highest concentration rates of particulate matter PM_{10} y $PM_{2,5}$ in the country. This motivated to a multidisciplinary team from the Universidad Católica de Temuco to design a wireless sensor network distributed around the city that will measure the PM_{10} y $PM_{2,5}$ concentration it will be supported by computational simulators, which permit predict the behaviour of these pollutants. Regarding this, the present document shows the design and development of a computational simulator that solves the distribution of a pollutant cloud through a mathematical model based on Advection-Diffusion equation with emission and deposition components. The governing equation of the model is solved over a non-regular mesh using the finite volume method for its spatial discretization and using explicit and implicit schemes to solve the temporal discretization. The main objective of this thesis is to develop a Proof of Concept that allows obtaining a verified mathematical algorithm. To do this, a test suite will be developed using the manufactured solutions method, to check the accuracy of the code.

Índice

1.	Intr	Introducción								
2.	Obj	etivos		4						
3.	Revisión Bibliográfica									
	3.1.	Materi	El Particulado	0 5						
		3.1.1.	Fuentes de Material Particulado	0 5						
		3.1.2.	Liectos de Material Particulado en la salud y el ambiente	0 6						
		3.1.3. 3.1.4.	La situación en Temuco	0 8						
4.	Mat	Materiales y métodos 9								
	4.1.	Modele	o conceptual	9						
		4.1.1.	Dominio Físico	10						
		4.1.2.	Advección	10						
		4.1.3.	Balance del proceso de advección	11						
		4.1.4.	Difusión	12						
		4.1.5.	Ley de Fick	12						
		4.1.6.	Balance de materia	14						
		4.1.7.	Coeficiente de Difusión	15						
		4.1.8.	Emisión	15						
		4.1.9.	Deposición y velocidad del viento	16						
		4.1.10.	Condiciones de Frontera e Inicial	17						
	4.2.	Modele	o Matemático	19						
		4.2.1.	Ecuación de Advección-Difusión-Reacción	19						
	4.3.	Solució	ón Numérica	20						
		4.3.1.	Teorema de la Divergencia de Gauss	20						
		4.3.2.	Volúmenes Finitos	20						
		4.3.3.	Mallas no-Regulares	22						
		4.3.4.	Discretización de los términos de Deposición y Emisión	23						
		4.3.5.	Discretización del termino de Difusión	23						
		4.3.6.	Discretización del termino de Advección	27						
		4.3.7.	Método Upwind	28						
		4.3.8.	Condiciones de Borde	29						
		4.3.9.	Cálculo del Área de los Volúmenes de Control	31						
		4.3.10.	Calculo del vector normal unitario	32						
		4.3.11.	Método de Euler Implícito y Explícito	32						
	4.4.	Simula	ción Computacional	36						
		4.4.1.	Procesamiento y Almacenamiento de la Información Geométrica	36						
		4.4.2.	Procesamiento de la Información de Conectividad	39						
		4.4.3.	Procedimiento de cálculo de las concentraciones.	41						
		4.4.4.	Tratamiento de las condiciones de frontera y celdas pares	47						

	5.1.	pción de las pruebas.	51				
	5.2.	Result	ados	53			
		5.2.1.	Resultados – visualización 2D	53			
		5.2.2.	Resultados – visualización por celda	56			
		5.2.3.	Resultados en mallado grueso	61			
6.	6. Discusión y Conclusiones						
7. Bibliografía							

1. Introducción

Remontándose a la época de la revolución industrial en el siglo XIX, la población ha emigrado a las ciudades en busca de oportunidades debido al surgimiento de una nueva sociedad más industrializada y mecanizada. Este proceso de migración continúa en la actualidad a causa que las industrias, que son las que emplean mayor cantidad de personas, están ubicadas en las zonas urbanizadas. Consecuencia de esta migración en las ciudades se concentra la mayoría de la población, lo que sumado a toda la infraestructura y mecanización de las industrias presentes vayan transformando el paisaje del lugar y también su ecosistema, dando origen al mayor problema que ha generado este proceso migratorio: la **contaminación ambiental**.

La contaminación ambiental, se refiere a la introducción de sustancias u otros elementos físicos en un medio, que ocasiona que este sea inseguro o no apto para su uso. Esta puede ser clasificada en diferentes tipos: hídrica, del suelo, acústica, lumínica y atmosférica, siendo esta última nuestro principal foco de interés. La **contaminación atmosférica**, o del aire, junto a los demás tipos; son las principales causas del efecto invernadero que ha ocasionado que la temperatura del planeta aumente entre 0,10 - 0,14 grados Celsius cada diez años [28], lo que puede ocasionar problemas al largo plazo como derretimiento de glaciares y posibles inundaciones. En lo que respecta al corto plazo, ha ocasionado de forma indirecta diferentes anomalías climáticas en diferentes zonas del planeta; provocando olas de calor en zonas de climas templados, así como olas polares en lugares con climas mediterráneos. Sin embargo, se ha encontrado una relación directa entre la disminución de la calidad del aire –debido a la presencia de elementos nocivos en este- y el aumento en las enfermedades respiratorias en la población, esto además de ser un problema medioambiental, que por sí solo es grave, también es un problema de salud pública.

Entonces, tomando en cuenta lo mencionado anteriormente, es necesario tomar medidas que permitan controlar esta situación. Las cuales deben surgir de organismos gubernamentales, privados y académicos con el fin de disminuir las emisiones de contaminantes a la atmósfera y así reducir los efectos nocivos que estas provocan en las personas y su entorno. En la actualidad, el Ministerio del Medio Ambiente en Chile ha implementado una red de sensores que monitorizan la calidad del aire en las zonas urbanas a lo largo de todo el territorio, este sistema es conocido como **SINCA**, acrónimo de *Sistema Nacional de Calidad del Aire*. Por otro lado, las subsecretarías regionales con apoyo de organismos privados elaboran un **inventario de emisiones**, que se desarrolla en un periodo de 3 a 4 años, el cual cuantifica la cantidad de contaminantes liberados a la atmósfera en las principales áreas urbanas del país. El motivo de realizar mediciones de la concentración y emisión de contaminantes es poder visualizar y cuantificar la presencia de estos y así, poder generar políticas públicas que regulen la emanación de sustancias nocivas y mantener un buen nivel de calidad del aire.

De acuerdo a las mediciones obtenidas por el SINCA y al informe elaborado en el último inventario de emisiones [26, 27], la ciudad de **Temuco** es una de las que presenta mayores índices de contaminación en el país. Esto se debe principalmente a la calefacción residencial, la que es mayoritariamente a combustión a leña, la cual genera altas emisiones de **material par-ticulado** $-PM_{10}$ y $PM_{2,5}$ - a la atmósfera. Si bien, en los últimos años se han implementado políticas para reducir la combustiones a leña entregando subsidios a los hogares para cambiar a tipos de calefacción más sustentables. La calefacción residencial sigue siendo la principal

responsable de los altos índices en materia de contaminación aérea. Otras fuentes importantes de contaminantes son; el alto tráfico vehicular en la ciudad, y las emisiones producidas por actividades industriales. Sin embargo, el aporte de estas es menor –en algunos periodos casi insignificante– en comparación a la calefacción residencial. Esto se puede apreciar en el siguiente gráfico, donde se observa que los meses de invierno coinciden con el periodo con peor calidad del aire.



Figura 1: Distribución anual del inventario de emisiones del año 2017. Fuentes puntuales hace alusión a chimenea o ducto que produce una emisión de contaminantes equivalente a 1000 $m^3/hora$, Fuentes de área se refiere a contaminación por área geográfica de cualquier tipo. Fuentes móviles se considera a la emisión de vehículos motorizados.

Por estas razones, un equipo multidisciplinario de la Universidad Católica de Temuco ha decidido desarrollar una red de sensores inalámbricos de monitoreo paralelo al implementado por SINCA, para medir la calidad del aire en la zona urbana de Temuco. Esta red contará con un mayor número de sensores ubicados en diversos sectores de la ciudad, a diferencia de la red de SINCA que solo cuenta con tres sensores para la conurbación Temuco - Padre las Casas, que tiene una superficie apróximada de $470km^2$. Por lo tanto, para complementar esta red, y como parte del mismo proyecto, se desarrollará un motor de simulación computacional que permitirá generar distintos escenarios de contaminación ambiental, con el fin de poder tomar mejores decisiones al momento de implementar políticas ambientales.

Para el desarrollo del motor de simulación computacional, se plantea modelar la concentración de material particulado mediante un modelo matemático basado en la ecuación de Advección-Difusión sobre un mallado no-regular en dos dimensiones que representa los diferentes sectores del área urbana de estudio. El propósito de realizar este tipo de mallado, tiene relación a cómo se distribuirán los sensores de la red de monitoreo alrededor de la ciudad.

En lo que se refiere al modelamiento de la contaminación del aire, en la actualidad existen diversos tipos de modelos matemáticos que han sido desarrollados para dar solución a este problema. Una gran parte de estos están basados en ecuaciones diferenciales ordinarias o parciales. Donde, muchos de ellos [2, 3, 4, 5, 6, 7, 19] se fundamentan en los principios de la mecánica de fluidos y las leyes de conservación, para estimar el comportamiento de los contaminantes presentes en el aire.

Haciendo énfasis en el problema que se pretende modelar; en esta tesis se plantea una ecuación diferencial que modela los efectos de la difusión y la advección sobre una nube de partículas contaminantes. En conjunto de un componente de deposición y una fuente de emisión que actuarán sobre una región de estudio Ω de dos dimensiones que está delimitada por la frontera $\partial \Omega$. Los efectos de la reacción no serán estudiados en este problema, debido a que por intereses del proyecto solo se desea estimar las concentraciones de material particulado y la porción de este generada por reacciones químicas es despreciable.

Para la solución numérica del problema, la discretización espacial de los componentes de advección y difusión de la ecuación gobernante es desarrollada utilizando un esquema de Volúmenes Finitos basado principalmente en lo propuesto por Mazumder [16] para mallados no-regulares. En el caso del componente de emisión se plantearán diferentes funciones que cumplan este rol, que irán de acuerdo a los escenarios propuestos en las pruebas. La finalidad de esto es encontrar una función que describa el comportamiento del material particulado en un punto fijo en el tiempo.

En síntesis, el objetivo principal de este proyecto de tesis es el desarrollo de un motor computacional que permita simular el comportamiento de una nube de contaminantes sobre la región de estudio Ω , como una prueba de concepto previa, al motor que simulara la contaminación aérea sobre el área urbana de Temuco, que estará basado en estos mismos principios. Esto se realiza principalmente, para asegurar que el código desarrollado sea verificado matemáticamente. Por lo tanto, se realizará una serie de pruebas utilizando diferentes soluciones manufacturadas que permitan, además de verificar la precisión del código, obtener la mejor función que describa el problema a estudiar.

El documento se organiza de la siguiente manera. En el Capítulo 3 se presenta una revisión bibliográfica acerca de la problemática del material particulado, haciendo énfasis en la situación en Chile y en la ciudad de Temuco. El Capítulo 4 presenta los materiales y métodos utilizados para el desarrollo y posterior solución del problema. En la primera sección de este capítulo se presentan los fundamentos en que se basa la ecuación que modela el problema, y en la sección siguiente se presenta el modelo matemático. En la sección 4.3 se presentan las técnicas numéricas utilizadas para la discretización de la ecuación gobernante del modelo y la última sección de este capítulo detalla el algoritmo computacional y cómo se procesa la información para su implementación. El capítulos 5 detalla las diferentes pruebas realizadas y los resultados obtenidos respectivamente en cada una de ellas. Finalmente el capítulo 6 contiene las conclusiones y el detalle de lo que se desea implementar en el futuro, así como las posibles mejoras al algoritmo.

2. Objetivos

Objetivo general

Desarrollar un algoritmo computacional que resuelva numéricamente el transporte de partículas utilizando modelos basados en la ecuación de advección-difusión. Con el propósito de ser usado futuramente para calcular el transporte de material particulado sobre el área urbana de Temuco.

Objetivos específicos

- 1. Creación de distintos tipos de mallados no regulares. Un mallado fino generado de manera automatizada, y uno grueso que represente los distritos del área urbana de Temuco.
- 2. Diseño y desarrollo del motor de simulación numérica computacional que se fundamentará en la discretización de la ecuación que modela el problema.
- 3. Realización de pruebas donde se evaluará la eficacia del algoritmo utilizando diferentes métricas.
- 4. Validación matemática del codigo del simulador.

3. Revisión Bibliográfica

3.1. Material Particulado

La contaminación aérea se puede describir como una mezcla de sustancias químicas, suspendidas en el aire, que son consideradas nocivas para la salud humana, los cuales son emitidos tanto de forma natural como antropogénica. En este conjunto de sustancias, posee gran prescencia gases nocivos como SO_2 , NO_2 , CO_2 , O_3 . Sin embargo, existen otros tipos de particulas las cuales son una mezcla de sustancias orgánicas y inorgánicas que se encuentran es suspensión. Estas se denominan **material particulado** y se componen, generalmente, de residuos de amoniaco, cloruro sódico, carbón, polvos de minerales, hollín, cenizas metálicas y agua.

El material particulado (PM por sus siglas en inglés) se clasifica por el tamaño de la partícula en función de su diámetro. Siendo la clasificación más utilizada la que distingue por los siguientes tamaños: $PM_{2,5}$ (diámetro de 2,5 μ m), y PM_{10} (diámetro de 10 μ m). Siendo el primero el tamaño correspondiente a la **fracción fina** (que corresponde al intervalo de diametro entre los 2 y 3 μ m), el cual contiene la mayoría del material partículado de origen secundario. Por otro lado, el PM_{10} debe su nombre al punto de corte establecido, pues las particulas de este diametro (10μ m) son la de mayor tamaño que pueden pasar por la cavidad torácica. A las partículas ubicadas en la diferencia entre ambos puntos de corte (2,5 y 10), se les denomina **fracción gruesa**.

3.1.1. Fuentes de Material Particulado

Las fuentes emisoras de material particulado se clasifican según su origen en: **naturales** y **antropogénicas**. Entre las fuentes naturales, están las erupciones volcánicas, las tormentas de polvo, el polen de las flores, y el viento que al erosionar los suelos áridos levanta polvo. En cambio, las fuentes antropogénicas, como su nombre lo indica, son generadas por intervención directa o indirecta de humanos. Existen de variados tipos, siendo las principales: el uso de combustibles fósiles (para transporte o calefacción), manejo y transporte de sólidos (en ámbitos de construcción, agricultura) y el procesamiento de metales y minerales en la industria.

Por último, también existe material particulado que se genera como producto de reacciones químicas, ocurridas en la atmósfera, entre contaminantes gaseosos, como el dióxido de azufre (SO_2) , los óxidos de nitrógeno (NO_X) , amoniaco (NH_3) , y compuestos orgánicos volátiles (COV), todos los cuales son emitidos a la atmósfera por diferentes tipos de actividades humanas. A este material particulado se le denomina *secundario* y constituye una fracción importante del material particulado en suspensión, principalmente, en el intervalo de $PM_{2,5}$.

3.1.2. Efectos de Material Particulado en la salud y el ambiente

La contaminación provocada por material particulado ocasiona numerosos efectos negativos en la salud humana, además de otros efectos sobre el ambiente; como el daño de materiales, reducción de visibilidad, cambios en el clima, daño sobre las plantas y el ecosistema.

A continuación se detallan estos efectos.

• Efectos en el clima

Las emisiones de material particulado tienen el potencial para afectar el clima terrestre. Esto debido a su capacidad de absorber y dispersar la radiación solar, lo que conlleva a un desbalance de energía del planeta. Además, las partículas tienen la capacidad de actuar como núcleos de condensación de vapor de agua e influir en la formación de las nubes, de este modo, alterando los patrones de precipitaciones a escala global.

• Efectos en los materiales

La contaminación por material particulado es la principal causa del efecto de ennegrecimiento de las fachadas de edificios y de monumentos en las ciudades. Además, de causar decoloración de superficies pintadas, ensuciamiento de textiles y estructuras por el hollín. Partículas como sulfatos y nitratos promueven la erosión y corrosión de materiales como pinturas y metales, promoviendo daños estructurales. Estos daños son ocasionados por las propiedades electrolíticas, higroscópicas, de ácidez que presentan el material particulados.

• Efectos en la vegetación

La flora se ve afectada por la presencia de cantidades excesivas de partículas atmosféricas. Estas recubren las hojas tapando los estomas, produciendo en las plantas una disminución en la captación de ácido carbónico y disminución en la intensidad de luz recibida. Ocasionando la detención del crecimiento de las plantas, y reducción en el rendimiento de las cosechas.

• Efectos en la visibilidad

Las altas concentraciones de material particulado provocan reducción de la visibilidad, afectando el bienestar de la población. Especialmente en los ámbitos laboral y recreativo. Estos efectos se producen ya sea, por la presencia de una fuente puntual de gran tamaño, o por la presencia de numerosas fuentes repartidas en la extensión de toda un área urbana que provoca una nubosidad que cubre el territorio.

• Efectos en la salud

La exposición prolongada a $PM_{2,5}$ puede causar daños a la salud, debido a que el tamaño de estas partículas es pequeño y pueden atravesar el torrente sanguíneo provocando daños irreparables en el sistema respiratorio. Además, la continua exposición a PM_{10} provoca generalmente problemas respiratorios de mediana gravedad, ya que estas partículas se adhieren a las mucosas de las vías respiratorias no pudiendo atravesar los alvéolos.

3.1.3. La situación en Chile

La mayoría de los sistemas de preemergencia ambiental en el mundo utilizan el material particulado como variable de medición para alertar a la ciudadanía acerca de la calidad del aire pronosticada. En Chile esta acción es realizada por el Ministerio del Medio Ambiente, mediante el *Sistema Nacional de Calidad del Aire* (SINCA), el cual es un sistema de sensores ubicados en estaciones de monitoreo estáticas. El principal problema que presenta el SINCA, es que el histórico de datos presenta muchos vacíos de información y, salvo el caso de Santiago, no realiza predicciones. El sistema anuncia el estado de emergencia actual, utilizando la información

que presenta al momento de almacenarse en sus bases de datos las mediciones obtenidas, sin estimar valores futuros de concentración de contaminante.

La Ley de Bases Generales del Medio Ambiente (Ley No. 19.300) [24, 25] establece la exitencia de dos tipos de normas de calidad ambiental. Las cuales son:

- Norma Primaria: es aquella que establece los valores de las concentraciones y períodos, máximos o mínimos permisibles de elementos, compuestos, sustancias, derivados químicos o biológicos, energías, radiaciones, vibraciones, ruidos o combinación de ellos, cuya presencia o carencia en el ambiente pueda constituir un riesgo para la vida o la salud de la población.
- Norma Secundaria: es aquella que establece los valores de las concentraciones y períodos, máximos o mínimos permisibles de sustancias, elementos, energía o combinación de ellos, cuya presencia o carencia en el ambiente pueda constituir un riesgo para la protección o la conservación del medio ambiente, o la preservación de la naturaleza.

Siendo la norma que regula la concentración de material particulado del tipo primario. Y esta, declara que niveles de valores de concentración de $PM_{2,5}$ y PM_{10} permiten generar situaciones de emergencia ambiental. Estos valores están descritos en las siguientes tablas:

	PM 2.5 $(\mu g/m^3)$
Alerta	80 - 109
Pre Emergencia	110 - 169
Emergencia	> 169

Cuadro 1: Niveles de concentración de PM2,5 que determinan las situaciones de emergencia embientales en Chile.

	PM 10 $(\mu g/m^3)$
Alerta	135 - 239
Pre Emergencia	240 - 329
Emergencia	> 329

Cuadro 2: Niveles de concentración de PM10 que determinan las situaciones de emergencia embientales en Chile.

3.1.4. La situación en Temuco

Desde el año 1997 se realizan mediciones de la calidad del aire en la conurbación **Temuco -Padre las Casas**, los primeros tres años correspondio a una etapa de diagnóstico. Para luego, en mediados del año 2000, empezar las mediciones con equipos oficiales, las que se mantienen hasta la actualidad a cargo del SINCA.

En marzo de 2005, luego de analizar un gran número resultados obtenidos de los monitoreos se reveló que en la zona se habían sobrepasado los límites establecidos por la Norma Primaria del D.S. 59, de 1998 del Ministerio de Secretaria General de la Presidencia, por lo tanto, se declaró a la conurbación como **zona saturada** por material particulado respirable.

De acuerdo a la Ley 19.300, cuando una zona es declarada saturada por superar la cantidad de algún contaminante normado, corresponde elaborar un **Plan de Descontaminación Atmosférica** (PDA). En el caso de Temuco - Padre las Casas, este plan tiene como objetivo disminuir las concentraciones de material particulado respirable, de tal forma que no supere los límites establecidos por la norma vigente. Para el año 2015, este instrumento estaba en proceso de reformulación para tomar en cuenta la promulgación de la norma de calidad del aire para la fracción fina de material particulado respirable.

Recopilando los datos validados más recientes correspondientes al año 2018 de la base de datos del SINCA, específicamente de la estación de Las Encinas. Se obtuvo un promedio anual de $34,05\mu g/m^3$ y $46,72\mu g/m^3$ para el material particulado $PM_{2,5}$ y PM_{10} respectivamente. Siendo lo recomendado por la Organización Mundial de la Salud (OMS) $10\mu g/m^3$ para el caso del $PM_{2,5}$ y $20\mu g/m^3$ para el PM_{10} . Al considerar los promedios diarios obtenidos a través de los registros validados del SINCA, que corresponden a 361 días para las mediciones de PM_{10} y 354 en el caso del $PM_{2,5}$, se obtiene para el primero que 115 de estos registros superan la media de $50\mu g/m^3$, en cambio, para el caso del material particulado fino 110 registros superaron la media de $25\mu g/m^3$ recomendada por la OMS.

Tomando en cuenta la información anterior, los promedios diarios y anuales de las concentraciones de material particulado medidas en Temuco - Padre las Casas superan ampliamente las normas de calidad de aire establecidas en Chile y el extranjero, incluyendo las recomendaciones de la organización Mundial de la Salud. Esta situación se debe principalmente al uso de la leña como combustible de calefacción residencial, ya que en la zona este combustible es más económico que otras alternativas como el kesoreno o el gas licuado.

4. Materiales y métodos

4.1. Modelo conceptual

Los fenómenos de contaminación aérea generalmente están descritos en base a los principios de la Mecánica de Fluidos, esto debido a que la polución es un fluido como tal. Se mueve, se difunde, se emite y se genera. Actualmente existen distintos modelos matemáticos para describir estos fenómenos de contaminación del aire. Siendo los más comunes los basados en **Ecuaciones Diferenciales Parciales** [2, 3, 4, 5, 7], donde la **Ecuación de Advección-Difusión** es la piedra angular de estos modelos. Esta ecuación se cimenta en la **Ley de Fick** que describe la difusión de los fluidos y en el fenómeno de **Advección** que determina cómo las partículas contaminantes se transportan en el aire. A esto, se le añade el fenómeno de emisión de contaminantes, ya sea generado naturalmente, como por actividad humana. Además de las reacciones químicas de los contaminantes y la deposición de estos.

$$\frac{\partial u_s}{\partial t}(x,y,t) + \nabla \cdot (Vu_s) = \nabla \cdot (\mathbb{D}\nabla u_s) + E_s(x,y,t) + Q_s(c_1,c_2,\cdots,c_{N_s}) - ku_s$$
(1)

La ecuación diferencial presentada en (1) se conoce como **Modelo Euleriano de Caja** en su forma de dos dimensiones. Donde u_S representa la concentración de contaminante S, V la velocidad del viento y \mathbb{D} el coeficiente de difusión, k es una función positiva que denota la deposición del contaminante en el espacio, E_s es una función que representa las emisiones de contaminates y Q_s denota las reacciones químicas que se usarán en el modelo y está descrita por funciones no-lineales. Para el caso a estudiar, todos estos parámetros se considerarán independientes de la concentración del contaminante, y sólo, dependerán de la posición espacial y el tiempo.

El desarrollo del Modelo Euleriano Danés, *DEM por sus siglas en inglés*, se inició a principios de la década del 80. En sus comienzos, sólo dos especies de contaminantes fueron estudiadas con este modelo, siendo el dominio espacial el territorio europeo el cual fue discretizado en una malla que se puede considerar "tosca" (32×32), lo cual era equivalente a celdas cuadradas de ($150 \text{ km} \times 150 \text{ km}$). Para el caso de las reacciones químicas sólo se consideraba una reacción química lineal.

Esta versión inicial se fue mejorando constantemente, incrementando el número de componentes químicos que podían ser estudiados con el modelo, se mejoró la resolución espacial utilizando mallas mas finas, se introdujo mecanismos físicos de maneras más adecuada, además de otras mejoras.

Hasta el momento de la publicación [6], el DEM es capaz de analizar hasta 35 componentes con una discretización de mallado 96 × 96 que corresponde a celdas cuadradas de área igual a 2500 km^2 . Estas consideraciones son en base a estudios que se realizan sobre todo el territorio europeo, para el caso de este trabajo se debe adecuar este modelo (1) para ajustarlo a la región que se quiere estudiar y a los componentes ($PM_{2,5}$ y PM_{10}) que se quieren analizar. Se han realizado numerosos estudios de contaminación aérea con modelados que se fundamentan en el DEM (1), tanto para áreas urbanas como en regiones de mayor tamaño, mostrando resultados satisfactorios.[1, 4]

4.1.1. Dominio Físico

El propósito de este trabajo es modelar la contaminación aérea sobre el área urbana de Temuco utilizando mallas no-regulares. Por lo tanto, se considerará esta región como un polígono $(\Omega \subset \mathbb{R}^2)$ que encerrará toda la ciudad. Además, vale mencionar que sólo se estudiarán los efectos de la advección y difusión horizontal, por lo tanto, no se considerará el eje z que representa la altura.



Figura 2: Bosquejo del dominio físico que representa la región de estudio.

4.1.2. Advección

En el sentido físico, especialmente en el campo de la meteorología, la **advección** se define como el transporte de alguna propiedad de la atmósfera por medio de un fluido. Estrictamente en términos más físicos se puede decir que es consecuencia de la aplicación de la *Ley de conservación de la masa* la que comúnmente se expresa como "La materia no se crea ni se destruye, solo se transforma". Tomando en cuenta esta afirmación, es posible medir la cantidad de materia contenida en cierta región del espacio en algún momento dado y concluir que no varía con el flujo, considerando a la materia como la sustancia que compone el fluido.

4.1.3. Balance del proceso de advección

En el proceso de contaminación atmosférica, el transporte de contaminantes se realiza principalmente por la acción del viento. Tomando un *volumen de control* cerrado en donde no existan procesos químicos ni físicos que transforman el estado del contaminante, la masa de aire se conserva. La velocidad del viento en el volumen de control expresada por V(v, u) depende sólo de las coordenadas espaciales, no así, de la concentración del contaminante que será denotada por c_i . En cambio, el flujo de masa será denotado q_j sobre la pared del volumen de control Γ_j , siendo $j \in \{E, O, N, S\}$.



Figura 3: Volumen de control para el balance de materia en el proceso de advección del contaminante.

Tomando como base el balance de materia realizado por el Hess, I. en [22], se deduce. En la coordenada x la entrada y salida de flujo de masa están descritos como:

$$q_O = (c_i v)(\overline{x}, y, t) \Delta y \Delta t$$
$$q_E = -(c_i v)(\overline{x} + \Delta x, y, t) \Delta y \Delta t$$

Por otro lado, en la coordenada y

$$q_{S} = (c_{i}u)(x, \overline{y}, t)\Delta x\Delta t$$
$$q_{N} = -(c_{i}u)(x, \overline{y} + \Delta y, t)\Delta x\Delta t$$

Luego, se suman las entradas y las salidas del sistema cerrado y se divide por $\Delta x \Delta y \Delta t$, obteniendo.

$$\frac{\Delta c_i(x, y, t)\Delta x\Delta t = q_O + q_E + q_S + q_N}{\Delta t}$$
$$\frac{\Delta c_i}{\Delta t} = \frac{(c_i v)(\overline{x}, y, t) - (c_i v)(\overline{x} + \Delta x, y, t)}{\Delta x} + \frac{(c_i u)(x, \overline{y}, t) - (c_i u)(x, \overline{y} + \Delta y, t)}{\Delta y}$$

Finalmente, se aplica límite cuando $(\Delta x, \Delta y, \Delta t) \rightarrow (0, 0, 0)$, resultando:

$$rac{\partial c_i}{\partial t} = -rac{\partial (vc_i))}{\partial x} - rac{\partial (uc_i))}{\partial y}$$

Este ultimo resultado se puede expresar de la siguiente forma, como se muestra en la ecuación (2). Esta expresión es conocida como la **ecuación de advección**, donde V = (v, u) representa la velocidad del viento, que actúa como medio de transporte para la concentración de contaminante c_i en el sistema.

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot (Vc_i) = 0 \tag{2}$$

El termino i = 1, ..., n describe el volumen de control donde se está evaluando la concentración de contaminante que ha sido transportada por la acción del viento al volumen en cuestión.

4.1.4. Difusión

La **difusión** se puede describir como el movimiento de una especie química desde una región de alta concentración hacia una región de baja concentración. Un ejemplo simple sería el dejar caer una gota de tinta en un recipiente que contenga agua. Al momento de tocar la superficie del agua, la mancha de tinta se concentra en el punto donde fue derramada. Sin embargo, al pasar el tiempo la mancha provocada por la tinta sobre la superficie del agua empieza a expandirse hasta alcanzar un punto donde todo el líquido que compone la mezcla tinta-agua llega a un estado de equilibrio de concentración constante.

Este tipo de difusión que ocurre entre dos componentes se le conoce como **difusión binaria** y se rige por la **Ley de Fick** [20] que describe el movimiento de una especie química A a través de una mezcla binaria conformada por A y B debido a un gradiente de concentración de A. Llevando esto al ejemplo anterior, A sería la tinta y B sería la mezcla agua-tinta.

4.1.5. Ley de Fick

Entonces, consideremos un sistema donde actúen dos especies químicas $A ext{ y } B$. Donde la sustancia A será la especie que será difuminada en la sustancia B, la cual se encuentra contenida en una lámina delgada de espesor Y. La concentración de cada una de estas sustancias será denotada por $\omega_A ext{ y } \omega_B$ respectivamente, y representará la masa de la sustancia respectiva dividida por la suma de la masas que componen el sistema.



Figura 4: Mecanismo de difusión de la sustancia A en la lámina.

Como se observa en la figura 4, para el tiempo t menor que cero, la concentracion de la sustancia A, ω_A , es igual a cero en todo el sistema. En caso de un tiempo t mayor a cero, en la superficie inferior de la lamina (y = 0), la concentración de A es igual a ω_{A0} . Este último termino representa la solubilidad de la sustancia A, en el interior de la lámina. Al pasar el tiempo se desarrolla el perfil de fracción de masa, con $\Omega_A = \Omega_{A0}$ en la superficie inferior de la lámina y $\Omega_A = 0$ en la superficie superior de esta.

En estado estacionario, se encontró que el flujo de masa w_{Ay} de la sustancia A en dirección y positiva puede ser descrito como:

$$\frac{w_{Ay}}{Area} = \rho \mathbb{D}_{AB} \frac{\omega_{A0} - 0}{Y} \tag{3}$$

Siendo el lado izquierdo de la ecuación el *flujo de cantidad de masa* de la sustancia A, que es proporcional a la diferencia de concentración dividida por el espesor de la lámina. El término ρ es la densidad del sistema A - B y el factor de proporcionalidad \mathbb{D}_{AB} es la *difusividad* del sistema. Reescribiendo la ecuación (3) para un elemento diferencial en el interior de la lámina.

$$j_{Ay} = -\rho \mathbb{D}_{AB} \frac{\partial \omega_A - 0}{\partial y} \tag{4}$$

En la ecuación (4) el término de la izquierda fue reemplazado por j_{Ay} y denota la densidad de flujo molecular de materia en masa en la dirección y positiva. Esta ecuación (4), es la forma unidimensional de la primera Ley de Fick de la difusión y es válida para cualquier solución binaria sólida, líquida o gaseosa.

4.1.6. Balance de materia

Apoyándose en la ecuación de la Ley de Fick expresada en (4), se puede decir que el flujo de difusión J es directamente proporcional al gradiente de concentraciones ∇c_i multiplicado por el factor de proporcionalidad $-\mathbb{D}$. El término que describe la densidad del sistema se considerará unitario ($\rho = 1$).

$$J = -\mathbb{D}\nabla c_i \tag{5}$$

Utilizando el volumen de control infinitesimal descrito en la Figura 3, y aplicando la Ley de Fick en cada uno de los bordes de este volumen. En la coordenada x se tiene:

$$J_O = -\mathbb{D}(\bar{x}, y, t) \nabla c_i(\bar{x}, y, t) \Delta y$$
$$J_E = -\mathbb{D}(\bar{x} + \Delta x, y, t) \nabla c_i(\bar{x} + \Delta x, y, t) \Delta y$$

En tanto, en la coordenada y

$$J_S = -\mathbb{D}(x, \bar{y}, t) \nabla c_i(x, \bar{y}, t) \Delta x$$
$$J_N = -\mathbb{D}(x, \bar{y} + \Delta y, t) \nabla c_i(x, \bar{y} + \Delta y, t) \Delta x$$

Entonces, realizando el balance sobre el volumen de control.

$$\Delta c_i(x, y, t) \Delta x \Delta y = [(J_O - J_E) \cdot e_1 + (J_S - J_N) \cdot e_2] \Delta t$$

Dividiendo la expresión anterior por $\Delta x \Delta y \Delta t$, se tiene que:

$$\frac{\Delta c_i}{\Delta t}(x,y,t) = -\frac{\left[(\mathbb{D}\nabla c_i)(\bar{x},y,t) - (\mathbb{D}\nabla c_i)(\bar{x}+\Delta x,y,t)\right] \cdot e_1}{\Delta x} - \frac{\left[(\mathbb{D}\nabla c_i)(x,\bar{y},t) - (\mathbb{D}\nabla c_i)(x,\bar{y}+\Delta y,t)\right] \cdot e_2}{\Delta y}$$

Luego, al aplicar límite cuando $(\Delta x, \Delta y, \Delta t) \rightarrow (0, 0, 0)$ da como resultado:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (\mathbb{D} \nabla c_i \cdot e_1) + \frac{\partial}{\partial y} (\mathbb{D} \nabla c_i \cdot e_2)$$

Esto finalmente se expresa como la ecuación de difusión.

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbb{D} \nabla c_i) \tag{6}$$

Tomando las consideraciones de [22] se asumirá que el coeficiente \mathbb{D} no depende de la variable de concentración c_i , sino solamente de las variables espacial y temporal.

Vale aclarar, que los procesos de advección y difusión en términos físicos no ocurren por separado. En este trabajo se explicó de esta manera para hacer más fácil su comprensión.

4.1.7. Coeficiente de Difusión

Para efectos de la difusión de la nube de contaminante se considera un coeficiente de difusión constante \mathbb{D} para todo punto del mapa y en todo instante t. El principal motivo de la elección de un coeficiente constante es la ausencia de datos meteorológicos durante la realización de las pruebas de validación, que es el objetivo de este trabajo; además, que el coeficiente que se plantea utilizar en el momento que se evalúe con datos reales, el cual se basa en la teoría cinética de los gases llevada al ámbito de las partículas no depende de las variables de la ecuación diferencial del modelo. Más detalle sobre este punto se puede ver en la sección de conclusiones.

4.1.8. Emisión

Para el cálculo de la emisión, se considerarán dos términos fuente en la ecuación. Uno va a ser una función dependiente de la posición Q(x, y, t) que estará presente durante todo el tiempo t, pero que tendrá un impacto mínimo en los valores de concentración a estimar. Por otro lado, se considerara un conjunto de **funciones impulso** que están representadas por un **delta de Dirac** que actuará como una fuente emisora con un mayor impacto en los valores a estimar.

Para la búsqueda del término Q(x, y, t), se utiliza el método de la **solución manufacturada** [11], este método es utilizado para la verificación de códigos y la evaluación de errores de discretización. Su uso no tiene propósitos físicos, por lo tanto la función Q(x, y, t) no posee fundamentos teóricos. El método consiste en proponer una solución exacta u(x, y, t) para la ecuación diferencial a estimar. Para la ecuación diferencial se debe buscar el operador lineal L(u) = 0, donde se reemplaza la solución exacta propuesta para así obtener la función $Q(x_i, y_i, t)$.

Para más detalle acerca de este procedimiento, se recomienda ver la sección 5.1 de Solución Manufacturada en el capítulo de Pruebas.

El segundo de los términos fuente es el conjunto de funciones impulso, representado por **delta de Dirac**. Estos impulsos actúan como fuentes emisoras de alto impacto que intervienen en la simulación durante un tiempo y en un lugar determinado. El comportamiento de estas fuentes impulso se asimila al momento peak de contaminación durante un día.

Estos impulsos están ubicados en dos puntos distintos de la malla, que se denotan (x_0, y_0) y (x_1, y_1) y se emiten durante los tiempos τ_0 y τ_1 respectivamente.

$$\delta(x) := \frac{1}{\alpha \sqrt{\pi}} \exp\left(\frac{-x^2}{\alpha^2}\right) \tag{7}$$

$$S(x, y, t) = \delta(x_i - x)\delta(y_i - y)\delta(\tau_i - t)$$
(8)

Donde α es una constante utilizada para la definición numérica para la función delta. Y su valor es 10^{-4}

4.1.9. Deposición y velocidad del viento

El efecto de deposición de contaminantes describe como estos químicos se devuelven a la superficie, esta se puede efectuar de dos formas: Deposición húmeda y deposición seca. La primera ocurre cuando los químicos presentes en el aire se mezclan con la lluvia, es lo que comúnmente se conoce como lluvia ácida. El segundo tipo de deposición ocurre en ausencia de humedad, no necesariamente en su totalidad, por lo que se forman partículas en suspensión las cuales finalmente llegan a la superficie por acción de la gravedad. Si se considera la resistencia del aire, este fenómeno es un proceso muy lento. En modelos de polución del aire [6], la deposición se modela como una función proporcional a la cantidad de contaminante multiplicado por un coeficiente de absorción k, que es la suma de dos coeficientes κ_1 , κ_2 que representan la deposición seca y humeda respectivamente.

Para efecto de este trabajo, se considerará un término de deposición κ constante, dado que para las pruebas a realizar no se tomará en cuenta variables meteorológicas como la lluvia. Al igual que en el caso del coeficiente de difusión, un término físico para estimar el coeficiente de deposición no depende de las variables de la ecuación como se aprecia en la siguiente expresión que representa la deposición por efecto de las precipitaciones.

$$\kappa_{PM} = \omega_R \cdot p_o \cdot u_i \tag{9}$$

Donde ω_R corresponde a la **razón de lavado**, un valor adimensional que es el cociente entre la concentración de contaminante en una gota de lluvia y la concentración de este en el aire en contacto con la gota; donde p_i es la intensidad de precipitaciones y u_i es la concentración de contaminante en la celda.

El producto $\omega_R \cdot p_o$ de la ecuación (9) corresponde al término k del modelo Euleriano de caja presentado en la ecuación (1)

Por otra parte, para la obtención de la velocidad del viento $V(v_x, v_y)$ se emplea una fórmula, que depende de la posición, para calcular cada una de sus componentes.

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{\mathbf{x}}\left(x\,,y\,,t\right) &:= c_{x} + \lambda \,\left(x-y\right) \sin\left(\frac{t}{T_{0}}\right) \\ \mathbf{v}_{\mathbf{y}}\left(x\,,y\,,t\right) &:= c_{y} + \lambda \,\left(x+y\right) \sin\left(\frac{t}{T_{0}}\right) \end{aligned} \tag{10}$$

Se asume que hay advección aun cuando no haya presencia de viento, donde los términos c_x y c_y representan la velocidad basal de advección, en cambio, el término T_0 controla la velocidad y λ es la aceleración.

4.1.10. Condiciones de Frontera e Inicial

Para el diseño del modelo se establece una condición de borde **periódica** donde se asume una continuidad en los extremos de la malla. Esto significa que, al ubicarnos en una celda fronteriza, a esta se le asigna una celda vecina *fantasma* ubicada en la frontera opuesta de la malla. Esto aplica tanto en la frontera norte-sur como en la este-oeste de la región de estudio Ω para todo instante de tiempo t. Por lo tanto, para establecer el flujo de la interfaz de frontera, se debe usar la información de la celda origen en que estamos ubicados, así como de la celda opuesta. Para entender de manera gráfica este emparejamiento, se recomienda ver la siguiente figura.



Figura 5: Relación de una celda frontera con su celda opuesta. Para establecer este emparejamiento se comparan los componentes de los vértices de fronteras de las celdas. En el caso de la presente malla el opuesto de la celda 66 es la celda 58 por tener los mismos valores en sus componentes en x en sus vértices de borde. Lo mismo sucede con la celda 44 y 63 que comparten componentes similares en y.



Figura 6: La celda par actúa como una celda fantasma en la interface donde no existe una celda vecina. En este caso, vemos cómo interactúa la celda 59 sobre la celda frontera 48.

Este emparejamiento entre las celdas fronteras y sus opuestas, se le denominará **celdas pares** y a la interface de frontera opuesta se llamará **lado par** como notación en este documento.

Por lo tanto, para la estimación del flujo en la frontera la concentración de la celda vecina u_{Nb} a la celda fronteriza se le asigna la concentración de la celda opuesta (a.k.a celda par) u_{op} . Para esto, se debe cumplir que los valores de una de los componentes del par de vértices de frontera de la celda de borde sean iguales a los del par de la celda opuesta. Haciendo la notación $v_{a,N} = (x_{a,N}, y_{a,N}), v_{b,N} = (x_{b,N}, y_{b,N})$ y $v_{a,N} = (x_{a,op}, y_{a,op}), v_{b,op} = (x_{b,op}, y_{b,op})$ para los pares de vértices de frontera y opuestos respectivamente, se tiene que

frontera h:
$$u_{Nb} = u_{op}$$
 ssi $x_{a,N} = x_{b,op} \& x_{b,N} = x_{a,op}$
frontera v: $u_{Nb} = u_{op}$ ssi $y_{a,N} = y_{b,op} \& y_{b,N} = y_{a,op}$ (11)

La condición de frontera se divide en dos condiciones: una para emparejar las celdas de borde cuya frontera es paralela al eje x, que se denotan por h (horizontal), y para las que su frontera está ubicada a lo largo del eje y se denotará por v (vertical).

Por otra parte, para establecer la condición inicial se evalúa la concentración en el instante t = 0, en la solución exacta u(x, y, t) propuesta para la ecuación diferencial que define el modelo con objetivo de encontrar el término de emisión Q(u).

$$u_{i,0} = u(x_i, y_i, t = 0) \tag{12}$$

El valor de la condición se calcula en cada una de las celdas que conforman la región de estudio Ω , donde se evalúan los puntos (x_i, y_i) que corresponden al centro de la celda correspondiente.

4.2. Modelo Matemático

A continuación, se detallarán todas las asumpciones y métodos analíticos para la resolución del problema planteado en este documento.

4.2.1. Ecuación de Advección-Difusión-Reacción

Como se mencionó en la introducción de la sección 4.1 el modelo a utilizar se fundamenta en la Ecuación de Advección-Difusión, la cual es también utilizada en varios modelamientos de arrastre de contaminantes, en este caso ajustandose a las condiciones del problema que se quiere resolver. Para este modelo, se considerará esta ecuación en su forma de dos dimensiones, bajo las condiciones planteadas (14 - 15).

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, y, t) + \nabla \cdot (Vu) = \nabla \cdot (\mathbb{D}\nabla u) + Q(x, y, t) - ku(x, y, t)
+ s \cdot t \cdot \delta(x - x_0)\delta(y - y_0)\delta(t - \tau_0)
+ s \cdot t \cdot \delta(x - x_1)\delta(y - y_1)\delta(t - \tau_1)
(x, y, t) \epsilon \Omega \times [0, T]$$
(13)

$$u_i(x, y, 0) = u_o(x, y), \qquad (x, y) \in \Omega$$
(14)

frontera h:
$$u_{Nb} = u_{op}$$
 ssi $x_{a,N} = x_{b,op} \& x_{b,N} = x_{a,op}$
frontera v: $u_{Nb} = u_{op}$ ssi $y_{a,N} = y_{b,op} \& y_{b,N} = y_{a,op}$ (15)

Donde $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ representa la región de estudio donde se evaluara el modelo.

La condición inicial (14) se obtiene a partir de evaluar la solucion exacta propuesta para la solucion manufacturada en el instante inicial (t = 0), asumiendo que ya existe contaminación en la región en ese momento. En cambio la condición de frontera (15) establece que la malla es continua, asumiendo que la concentración de la celda vecina a la frontera, equivale a la de la celda opuesta.

- 1. El área urbana estará delimitada por el rectángul
o $\Omega \subset \mathbb{R}^2$
- 2. Las emisiones de contaminentes sólo se consideraran dentro del área urbana.
- 3. El coeficiente de difusión \mathbb{D} es constante.
- 4. La descomposición de la velocidad del tiempo depende de las ecuaciones().
- 5. Q(x, y, z) es el término fuerte de menor impacto presente en todas las celdas de la región Ω y en todo instante de tiempo t.
- 6. Los impulsos se encuentran ubicados en los puntos (x_0, y_0) y (x_1, y_1) de la región Ω y se emiten en los instantyes τ_0 y τ_1 respectivamente. El parámetro s controla la amplitud del impulso.

4.3. Solución Numérica

4.3.1. Teorema de la Divergencia de Gauss

El teorema de la divergencia de Gauss permite la relación entre el flujo de un campo vectorial a través de una curva cerrada ($\partial \Omega$) con la integral de su divergencia en la superficie (Ω) delimitada por dicha curva. Este teorema en su variante de dos dimensiones, se expresa como sigue:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot F \, dS = \int_{\partial \Omega} F \cdot \hat{n} \, dL \tag{16}$$

F representa el flujo, \hat{n} denota el vector normal que apunta hacia el exterior de la superficie $\partial \Omega$.

4.3.2. Volúmenes Finitos

El método de **volúmenes finitos** se basa en dividir el dominio espacial en subintervalos, llamados volúmenes de control, realizando una aproximación de la integral de flujo sobre cada uno de estos volúmenes. En cada paso del tiempo, se actualizan estos valores usando la aproximación de flujo a través de los bordes de estos intervalos. En el caso unidimensional, se tiene para los flujos en el *i*-ésimo volúmen de control.

$$c_i = (x_{i-\frac{1}{2},j}, x_{i+\frac{1}{2},j}) \tag{17}$$

Siendo Q_i^n la aproximación del valor promedio en el *i*-ésimo intervalo en el tiempo t_n .

$$Q_{i}^{n} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} q(x,t_{n}) dx = \frac{1}{\Delta x} \int_{c_{i}} q(x,t_{n}) dx$$
(18)

Siendo $\Delta x = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}$ es la longitud del segmento por donde circula el flujo q(x, y, t). Si consideramos la función de flujo como una función *suave*, entonces la integral (18) coincide con el valor de q(x, t) en el centro del intervalo. Esto permite trabajar con el promedio de las celdas, por lo tanto, es más facil el uso de las propiedades de leyes conservativas en métodos numéricos de derivadas.

Volúmenes fínitos es un método que se basa en el flujo que circula a traves de las interfaces entre dos celdas contiguas y que va actualizando el valor del flujo q en cada salto de tiempo. Sin embargo, no es posible evaluar las integrales respecto al tiempo, en las interfaces. Por lo que se sugiere trabajar con soluciones numéricas de la forma:

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+\frac{1}{2}}^n - F_{i-\frac{1}{2}}^n)$$
(19)

Donde (20) es la aproximación del flujo promedio en $x=x_{i-\frac{1}{2}}$ en el tiempon

Para llegar a la expresión (19) se aplican leyes de conservación, y se integra respecto al tiempo. Para más detalles ver [17].

$$F_{i-\frac{1}{2}}^{n} \approx \frac{1}{\Delta t} \int_{t_{n}}^{t_{n+1}} f(q(x_{i-\frac{1}{2}},t))dt$$
(20)

Para un problema hiperbólico, como es el caso de la advección, la información se propaga con velocidad finita, tanto que es razonable suponer que se puede obtener el valor del flujo en la interface $F_{i-\frac{1}{2}}$ basandose en los valores promedio en las celdas adyacentes Q_i^n y Q_{i-1}^n . Siendo:

$$F_{i-\frac{1}{2}} \approx \mathfrak{F}(Q_{i-1}^n, Q_i^n) \tag{21}$$

Donde \mathfrak{F} es una función de flujo numérico. Entonces, reescribiendo la ecuación (19) usando las funciones de flujo numérico para cada interface, se tiene:

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathfrak{F}(Q_i^n, Q_{i+1}^n) - \mathfrak{F}(Q_{i-1}^n, Q_i^n))$$
(22)

Aplicando la aproximación por volúmenes finitos [17] para la evaluación de la forma integral de las leyes conservativas en dos dimensiones.

$$\frac{d}{dt} \iint_C q(x, y, t) dx \, dy = -\int_{\partial C} \hat{n}(s) \cdot \hat{f}(s, t) ds \tag{23}$$

Siendo C un volumen de control (*a.k.a celda*), de cualquier forma, y su contorno; \hat{n} la normal que apunta hacia el exterior de C, y $\hat{f}(s,t)$ es el flujo que atraviesa el contorno de la celda, que está definido por dos componentes ortogonales.

$$\hat{f}(s,t) = \begin{bmatrix} f(q(x(s), y(s), t)) \\ g(q(x(s), y(s), t)) \end{bmatrix}$$
(24)

Al integrar la ecuación (23) desde el tiempo t_n a t_{n+1} y dividiendo por el área del volumen de control, descrita por |C|. Se tiene.

$$\frac{1}{|C|} \iint_C q(x, y, t_{n+1}) dx \, dy = \frac{1}{|C|} \iint_C q(x, y, t_n) dx \, dy - \frac{1}{|C|} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\partial C} \hat{n}(s) \cdot \hat{f}(s, t) ds \quad (25)$$

Siendo Q^n la representación de la concentración promedio en la celda C para el tiempo t_n , y asumiendo que el contorno ∂C tiene forma poligonal.

$$Q^{n+1} = Q^n - \frac{\Delta t}{|C|} \sum_{i=1}^N h_i F_i$$
(26)

Donde h_i es la longitud de la interface i, y $F_i = \hat{f}_i \cdot \hat{n}_i$ es el flujo que pasa por la interface i en dirección de la normal \hat{n} .

4.3.3. Mallas no-Regulares

Para este caso de estudio, el mallado a realizar es de celdas no-regulares lo que significa que las áreas no son uniformes, y los segmentos por donde se aproximan los flujos tampoco lo son. Incluso, las formas de los volúmenes de control no son iguales. Esto último debido a la división en forma de distritos del rectángulo Ω que conforma el área de estudio.

Considerando todo lo anterior, resulta necesario realizar ciertos acomodos al método de Volúmenes Fínitos explicado en la sección anterior para ajustarlo a la realidad del problema.

Básicamente, la discretización de un mallado irregular en dos dimensiones es como se muestra a continuación.

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = \frac{1}{A_i} \sum_{j=1}^N \frac{u_j - u_i}{D_{ij}} B_{ij}$$
(27)

Donde u_i representa la concentración del elemento en la celda, en cambio, u_j es el caso de la celda vecina. Siendo $j \in N(i)$ el vecino de la celda i que pertenece al conjunto de vecinos N(i). Por otro lado, B_{ij} representa la longitud de la interfaz que separa las celdas i con su vecina $j \ge D_{ij}$ es la distancia entre los centroides de las celdas $i \ge j$. A_i denota el área de la celda i.

Sin embargo, un elemento que aún no se considera en este planteamiento básico (27) son las componentes del espacio que encierra la región Ω . Dado que para un mallado tradicional (basado en rectángulos) estas suelen ser x, y, para el caso de una malla no-regular estas son la **normal** $\hat{\mathbf{n}}_f$ y la **tangente** $\hat{\mathbf{t}}_f$ de las interfaces f. Esto, en sí, es una generalización de las componentes para todo tipo de mallas dado que tanto las componentes x, y como $\hat{\mathbf{n}}_f$, $\hat{\mathbf{t}}_f$ son ortogonales.

4.3.4. Discretización de los términos de Deposición y Emisión

Al integrar con respecto área de volumen de control la ecuación de advección-difusión (13), para resolver por volúmenes finitos, se obtiene la siguiente expresión.

$$\int_{\Delta t} \int_{c_i} \frac{\partial u_s}{\partial t}(x, y, t) \, dA \, dt = \int_{\Delta t} \int_{c_i} \nabla \cdot (\mathbb{D} \nabla u_{s,i}) dA \, dt - \int_{\Delta t} \int_{c_i} \nabla \cdot (V u_{s,i}) \, dA \, dt - \int_{\Delta t} \int_{c_i} \kappa \, u_{s,i} \, dA \, dt + \int_{\Delta t} \int_{c_i} s(u_{s,i}) \, dA \, dt$$
(28)

Evaluando las integrales de los terminos correspondientes a la deposición $(k \ u(x, y, t))$ y de la emisión (s(x, y, t)) se obtiene como resultado.

$$\int_{c_i} k \ u(x, y, t) \ dA = k_i u_i A_i \tag{29}$$

$$\int_{c_i} s(x, y, t) \, dA = s_i A_i \tag{30}$$

Donde A_i corresponde al área de la celda c_i . El cálculo de su valor se analizará en la sección de Cálculo de Área de Volúmenes de Control

4.3.5. Discretización del termino de Difusión

Considerando un volumen de control c_i perteneciente a la región Ω en \mathbb{R}^2 , el cual está cerrado por la curva ∂c_i , entonces, al integrar con respecto al área el flujo difusivo sobre este volumen de control, se obtiene aplicando el teorema de la divergencia de Gauss como sigue:

$$\int_{c_i} \nabla \cdot (\mathbb{D} \nabla u_i) dA = \int_{\partial c_i} (\mathbb{D} \nabla u_i) \cdot \hat{n} dL$$
(31)



Figura 7: Representación de un Volumen de Control arbitrario de superficie c_i . Se puede observar el diferencial de línea dL en la interface de control y las direcciones salientes de los vectores de flujo y normal.

Al ser la curva ∂c_i el perímetro de un polígono de un número discreto de lados. Entonces, la integral obtenida en (31) se puede escribir como una sumatoria sobre cada interface.

$$\int_{\partial c_i} (\mathbb{D} \nabla u_i) \cdot \hat{n} dL = \sum_{f=1}^{N_{f,i}} \int_{c_{i_f}} (\mathbb{D} \nabla u_i) \cdot \hat{n} dL$$
$$= \sum_{f=1}^{N_{f,i}} [(\mathbb{D} \nabla u_i)_f \cdot \hat{n}_f] L_f$$
$$= \sum_{f=1}^{N_{f,i}} \mathbb{D}_f [(\nabla u_i)_f \cdot \hat{n}_f] L_f$$
(32)

Donde $N_{f,i}$ es el número de lados (interfaces) de la celda i, y L_f es la longitud de la interface. La dificultad se presenta cuando se quiere expresar las cantidades correspondientes al coeficiente de difusión en la interfaz \mathbb{D}_f y el flujo difusivo de la interface $(\nabla u_i)_f$ en términos de los valores de los centros de las celdas.

En dos dimensiones, el gradiente de concentración en la interface f es un vector que se escribe como:

$$(\nabla u_i)_f = \left(\frac{\partial u_i}{\partial x}\right)_f \hat{\mathbf{i}} + \left(\frac{\partial u_i}{\partial y}\right)_f \hat{\mathbf{j}} = [(\nabla u_i)_f \cdot \hat{\mathbf{i}}]\hat{\mathbf{i}} + [(\nabla u_i)_f \cdot \hat{\mathbf{j}}]\hat{\mathbf{j}}$$
(33)

En la ecuación anterior, el vector ha sido descompuesto en dos direcciones perpendiculares en las coordenadas cartesianas $x \in y$. En principio, el vector $(\nabla u_i)_f$ puede ser descompuesto en cualquier par de direcciones mutuamente perpendiculares. Así como la normal y la tangente del segmento de interface f.

$$(\nabla u_i)_f = [(\nabla u_i)_f \cdot \hat{\mathbf{n}}_f] \hat{\mathbf{n}}_f + [(\nabla u_i)_f \cdot \hat{\mathbf{t}}_f] \hat{\mathbf{t}}_f$$
(34)

Luego aplicando el producto punto a la ecuación (34) con el vector l_f , el cual apunta desde el centro de la celda *i* hacia el centro de la celda vecina *j*, como se ve en la Figura 8

$$(\nabla u_i)_f \cdot l_f = [(\nabla u_i)_f \cdot \hat{\mathbf{n}}_f] \hat{\mathbf{n}}_f \cdot l_f + [(\nabla u_i)_f \cdot \hat{\mathbf{t}}_f] \hat{\mathbf{t}}_f \cdot l_f$$
(35)

El producto $\hat{\mathbf{n}}_f \cdot \mathbf{l}_f$ representa la distancia entre los centroides de la celda de origen O y la celda vecina N en la dirección normal al lado f, y se denota como δ_f . Reescribiendo la ecuación anterior, y reemplazando este término en la ecuación (35), se despeja $(\nabla u_i)_f \cdot \hat{\mathbf{n}}_f$, obteniendo:

$$(\nabla u_i)_f \cdot \hat{\mathbf{n}}_f = \frac{(\nabla u_i)_f \cdot l_f}{\delta_f} - \frac{[(\nabla u_i)_f \cdot \hat{\mathbf{t}}_f]\hat{\mathbf{t}}_f \cdot l_f}{\delta_f}$$
(36)

Figura 8: Visualización del vector l_f en un bosquejo de dos celdas adyacentes.

Donde $\hat{\mathbf{t}}_f$ es la tangente unitaria a la interface apuntando desde *b* hacia *a* (ver Figura 8). Se realizarán dos expansiones de Taylor. Una para *i* en *f*, y otra para *j* en *f*.

Entonces, entendiendo a $(u_i)_f$ como el flujo en las interfaces de la celda *i*, se sigue:

$$u_{i} = (u_{i})_{f} + \left(\frac{\partial u_{i}}{\partial x}\right)_{f} (x_{i} - x_{f}) + \left(\frac{\partial u_{i}}{\partial y}\right)_{f} (y_{i} - y_{f}) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^{2} u_{i}}{\partial x^{2}}\right)_{f} (x_{i} - x_{f})^{2} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^{2} u_{i}}{\partial x^{2}}\right)_{f} (y_{i} - y_{f})^{2} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^{2} u_{i}}{\partial x \partial y}\right)_{f} (x_{i} - x_{f})(y_{i} - y_{f}) + \dots$$

$$(37)$$

$$u_{j} = (u_{j})_{f} + \left(\frac{\partial u_{j}}{\partial x}\right)_{f} (x_{j} - x_{f}) + \left(\frac{\partial u_{j}}{\partial y}\right)_{f} (y_{j} - y_{f}) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^{2} u_{j}}{\partial x^{2}}\right)_{f} (x_{j} - x_{f})^{2} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^{2} u_{j}}{\partial x \partial y}\right)_{f} (x_{j} - x_{f})(y_{j} - y_{f}) + \dots$$

$$(38)$$

Por lo tanto restando el valor de concentración de la celda vecina con la celda donde se está ubicado, resulta:

$$u_{j} - u_{i} = + \left(\frac{\partial u_{j}}{\partial x}\right)_{f} (x_{j} - x_{i}) + \left(\frac{\partial u_{j}}{\partial y}\right)_{f} (y_{j} - y_{i}) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^{2} u_{j}}{\partial x^{2}}\right)_{f} [(x_{j} - x_{f})^{2} - (x_{i} - x_{f})^{2}] + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^{2} u_{j}}{\partial y^{2}}\right)_{f} [(y_{j} - y_{f})^{2} - (y_{i} - y_{f})^{2}] + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^{2} u_{j}}{\partial x \partial y}\right)_{f} [(x_{j} - x_{f})(y_{j} - y_{f}) - (x_{i} - x_{f})(y_{i} - y_{f})] + \dots$$

$$(39)$$

Notando $l_f = (x_j - x_i)\hat{\mathbf{i}} + (y_j - y_i)\hat{\mathbf{j}}$ se puede obtener la siguiente aproximación.

$$u_j - u_i \approx (\nabla u_i)_f \cdot l_f \tag{40}$$

Donde el error de truncamiento corresponde a ε

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 u_j}{\partial x^2} \right)_f [(x_j - x_f)^2 - (x_i - x_f)^2] + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 u_j}{\partial y^2} \right)_f [(y_j - y_f)^2 - (y_i - y_f)^2] + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 u_j}{\partial x \partial y} \right)_f [(x_j - x_f)(y_j - y_f) - (x_i - x_f)(y_i - y_f)] + \dots$$
(41)

La ecuación (40) muestra que el flujo normal a la interface f ha sido descompuesto en dos componentes. Una sobre el vector que une los centroides de las celdas adyacentes, y otra tangencial a la interface de borde. Si los vectores normal $\hat{\mathbf{n}}_f$ y l_f están co-alineados, entonces, $\hat{\mathbf{t}}_f \cdot l_f$ es igual a cero, y el flujo tangencial desaparece. En tal escenario, se utiliza la diferencia centrada simple. Pero este último caso no corresponde al mallado propuesto.

Sustituyendo (40) en la ecuación (36)

$$(\nabla u_i)_f \cdot \hat{\mathbf{n}}_f = \frac{u_j - u_i}{\delta_f} - \frac{[(\nabla u_i)_f \cdot \hat{\mathbf{t}}_f]\hat{\mathbf{t}}_f \cdot l_f}{\delta_f}$$
(42)

Haciendo enfoque en el flujo tangencial de la ecuación (42), utilizando el mismo procedimiento para derivar $(\nabla u_i)_f \cdot l_f$. Se puede demostrar que $(\nabla u_i)_f \cdot \hat{\mathbf{t}}_f$ depende de los vértices de la interface que corresponde al segmento \overline{ab} .

$$(\nabla u_i)_f \cdot \hat{\mathbf{t}}_f \approx \frac{u_a - u_b}{|t_f|} \tag{43}$$

Siendo $|t_f|$ la longitud del segmento \overline{ab} . Por otro lado, el valor de $\hat{\mathbf{t}}_f$ puede ser calculado utilizando las coordenadas de los vértices y los centroides de las celdas. Definiendo $J_{t,f}$ como el flujo tangencial sobre la interface f

$$J_{t,f} = [(\nabla u_i)_f \cdot \hat{\mathbf{t}}_f] \hat{\mathbf{t}}_f \cdot l_f = \left[\frac{u_a - u_b}{L_f}\right] \frac{(x_a - x_b)(x_l - x_i) + (y_a - y_b)(y_l - y_i)}{L_f}$$
(44)

Donde $A_f = |t_f|$ corresponde a la longitud de la interface f por donde circula el flujo, (x_l, y_l) es el punto donde intersecta el vector l_f con el segmento \overline{ab} , (x_i, y_i) es el centroide de la celda i. Por último, (x_a, y_a) , (x_b, y_b) son las coordenadas de los puntos a y b. Con respecto a los flujos en estos puntos, los cuales son vértices de las celdas, el cálculo de su valor se realiza mediante la siguiente fórmula:

$$u_{V} = \sum_{i}^{N} \frac{u_{i}/d_{i}}{\sum_{i}^{N} 1/d_{i}}$$
(45)

El término d_i representa la distancia entre el centro de la celda i y el nodo (vértice) V, N es el número de celdas que influyen sobre el nodo V, y u_i es el flujo de la celda i.



Figura 9: Representación gráfica del flujo en los vertices, y como se relaciona con los vertices de las celdas que intersectan en él.

4.3.6. Discretización del termino de Advección

En esta sección se centrará la atención en la discretización de la parte advectiva de la ecuación (13). Se resuelve la integral de área del término advectivo aplicando el Teorema de la divergencia de Gauss:

$$\int_{c_i} \nabla \cdot (Vu_i) \, dA = \int_{\partial c_i} (Vu) \cdot \hat{\mathbf{n}} dL \tag{46}$$

Dónde $\hat{\mathbf{n}}$ es el vector normal a la curva ∂c_i que encierra el volumen de control. Al igual como se resolvió para el caso del término difusivo, se considera el volumen de control como un polígono con un número discreto de caras, así que, la integral de línea puede ser representada como una sumatoria sobre cada lado del perímetro descrito por ∂c_i .

$$\int_{\partial c_i} (Vu) \cdot \hat{\mathbf{n}} \, dL = \sum_{f=1}^{N_{f,i}} (Vu)_f \cdot \hat{\mathbf{n}}_f L_f$$
$$= \sum_{f=1}^{N_{f,i}} (V \cdot \hat{\mathbf{n}} \, L)_f \, u_f$$
$$= \sum_{f=1}^{N_{f,i}} G_f \, u_f$$
(47)

Donde $G_f = (V \cdot \hat{\mathbf{n}} L)_f$ representa el flujo de contaminante sobre la interface f. Tal como se hizo en el caso del término difusivo, la idea es expresar la concentración de contaminante u en términos de los centros de las celdas adyacentes a la interface f. Para este estudio, se utilizará la técnica del **Upwind** que se detalla a continuación.

4.3.7. Método Upwind

El **método Upwind** estima los flujos numéricos, obteniendo la información que se propaga por cada característica basándose en la dirección por donde el flujo debiera venir.

En el caso de la ecuación de advección sólo hay una velocidad, ya sea positiva o negativa, el método Upwind al ser generalmente de "un sólo lado", el valor de u_i^{n+1} puede ser determinado por valores de celdas contiguas. Por lo tanto, este método debe ser utilizado previo al cálculo de la concentración por advección en la celda. Siendo necesario conocer el valor de G_f obtenido en la ecuación (47).

Entonces considerando la dirección del viento como parámetro para determinar el valor de u_f , el cual es definido según el valor de cada celda adyacente a la interface f. Matemáticamente, asumiendo que el vector normal apunta desde la celda de origen i hacia su vecina j; el esquema Upwind se puede escribir:

$$u_f = \begin{cases} u_i, & si \ G_f > 0\\ u_j, & si \ G_f < 0 \end{cases}$$
(48)

Por lo tanto, el valor de $G_f u_f$ para efectos computacionales se define como:
$$G_f u_f = \frac{G_f + |G_f|}{2} u_i - \frac{G_f - |G_f|}{2} u_j \tag{49}$$

Reemplazando esta igualdad (49) en (47). Finalmente se obtiene la discretización del término difusivo.

$$\int_{c_i} \nabla \cdot (Vu_i) \, dA = \sum_{f=1}^{N_{f,i}} \frac{G_f + |G_f|}{2} u_i - \frac{G_f - |G_f|}{2} u_j \tag{50}$$

4.3.8. Condiciones de Borde

Las condiciones de borde se aplican a las interfaces de los volúmenes de control que esten adyacentes a la frontera. Esto implica que cuando la sumatoria sobre las interfaces en la ecuación (32) va ser calculada, las interfaces de borde necesitan un trato especial.

La interface de borde se denota como B. El vector l_B para esta interface, apunta desde el centro de la celda O, hacia el centro del segmento que representa la interface B. Esto en vez de apuntar al centro de la celda adyacente, la cual en este caso no existe. La condición de borde impuesta en la interface B es una condición continua donde se establece una celda vecina en la frontera que se obtiene desde una celda ubicada en el extremo opuesto en la región Ω que encierra la malla.

La ecuación discretizada para la celda de frontera O es obtenida aplicando el método de volúmenes finitos (32), tal como en las celdas interiores. Para luego dividir el recorrido de las interfaces de las celdas en dos ciclos. Uno que recorra las interfaces interiores, y otro que recorrerá las interfaces adyacentes a la frontera.



Figura 10: Visualización de una celda adyacente a la frontera. Se observa que el vector normal de la interface fronteriza B apunta hacia afuera.

En el caso de la Figura 10. La celda O tiene una sola interface de frontera. Por lo tanto, la ecuación (32) para esta celda tiene la forma.

$$\sum_{f=1, f \neq B}^{N_{f,O}} \mathbb{D}_f \left[(\nabla u)_f \cdot \hat{\mathbf{n}}_f \right] L_f + \mathbb{D}_B \left[(\nabla u)_B \cdot \hat{\mathbf{n}}_B \right] L_B$$
(51)

La componente normal del vector gradiente en la frontera puede ser expresado de la misma forma como se realizó en las interfaces interiores. Primero, se debe escribir el vector en términos de sus vectores normal y tangente. Para luego realizar un producto punto con el vector l_B para así obtener:

$$(\nabla u_B) \cdot l_B = \left[(\nabla u)_B \cdot \hat{\mathbf{n}}_B \right] \hat{\mathbf{n}}_B \cdot l_B + \left[(\nabla u)_B \cdot \hat{\mathbf{t}}_B \right] \hat{\mathbf{t}}_B \cdot l_B$$
(52)

Usando $\delta_B = \hat{\mathbf{n}}_B \cdot l_B$ y haciendo uso de la aproximación $(\nabla u)_B \cdot l_B \approx u_B - u_O$ la ecuación anterior es reconstruida para obtener una expresión para la componente normal del vector gradiente en la frontera.

$$(\nabla u_B) \cdot \hat{\mathbf{n}}_B = \frac{u_B - u_O}{\delta_B} - \frac{\left[(\nabla u)_B \cdot \hat{\mathbf{t}}_B \right] \hat{\mathbf{t}}_B \cdot l_B}{\delta_B} = \frac{u_B - u_O}{\delta_B} - \frac{J_{T,B}}{\delta_B}$$
(53)

Donde $J_{T,B} = \left[(\nabla u)_B \cdot \hat{\mathbf{t}}_B \right] \hat{\mathbf{t}}_B \cdot l_B$ denota el flujo tangencial en la frontera.

En caso que el vector normal y el vector l_B estén co-alineados, el producto $\hat{\mathbf{t}}_B \cdot l_B$ es igual a cero y el flujo tangencial se omite. Como en el caso de las interfaces interiores, este flujo se calcula utilizando los flujos de los vértices.

$$J_{T,B} = \left[\frac{u_a - u_b}{L_B}\right] \hat{\mathbf{t}}_B \cdot l_B \tag{54}$$

En este punto comienza a diferenciarse de manera más notoria con respecto al cálculo del flujo en las interfaces interiores. Asignando u_B como la concentración de la celda par, en cambio la longitud del segmento l_B es igual a la suma de las distancias entre los centros de la celda frontera y su interface de borde de la celda de frontera O donde se está ubicado y de la celda opuesta que fue emparejada.

$$l_B = l_{B,O} + l_{B,op} \tag{55}$$

Siendo L_B la longitud del segmento de la interface de borde B. Sustituyendo lo obtenido en (54) en la ecuación (53), luego reemplazando en la ecuación (51), y utilizando la expresión que se obtuvo en (42). Se puede conseguir una forma general del método de volúmenes finitos para la difusión en las celdas que tengan interfaces internas y de borde.

$$\int_{\partial c_i} (\mathbb{D} \nabla u_i) \cdot \hat{\mathbf{n}}_f dL = \sum_{f=1, f \neq B}^{N_{f,i}} \mathbb{D}_f \left(\frac{u_{j(f)} - u_i}{\delta_f} - \left[\frac{u_{a(f)} - u_{b(f)}}{\delta_f L_f} \right] \hat{\mathbf{t}}_f \cdot l_f \right) L_f + \mathbb{D}_B \left(\frac{u_{j(B)} - u_i}{\delta_B} - \left[\frac{u_{a(B)} - u_{b(B)}}{\delta_B L_B} \right] \hat{\mathbf{t}}_B \cdot l_B \right) L_B$$
(56)

En la ecuación anterior (56) se cambió la denominación de la celda O a i, para ir acorde al resto del texto. El término $u_{j(f)}$ denota el vecino j asociado a la interface f de la celda. Por otro lado, el término $N_{f,i}$ denota el número máximo de interfaces interiores de la celda i, así como, $N_{B,i}$ indica la cantidad de interfaces de frontera que tiene la celda.

Por otro lado, en el caso de la advección, en la condición de borde se reemplaza la concentración u_j por el valor de esta en la celda par. En cambio, para el cálculo del término $G_B = (V \cdot \hat{\mathbf{n}}L)_B$, V es la velocidad del viento correspondiente a la celda, $\hat{\mathbf{n}}_B$ es la normal de la interface de frontera de longitud L_B .

$$G_B u_B = \frac{G_B + |G_B|}{2} u_i - \frac{G_B - |G_B|}{2} u_j \tag{57}$$

4.3.9. Cálculo del Área de los Volúmenes de Control

El cálculo de las áreas de los volúmenes de control es una de las cantidades que deben ser determinadas antes de resolver las ecuaciones discretizadas mediante volúmenes finitos. El bloque básico de los volúmenes de control es el triangulo, por lo cual, se recomienda que cualquier otra figura geometrica sea dividida a esta forma base [16].

Por lo tanto, para el cálculo de este ítem se hará uso de la **fórmula del área de Gauss**, la que se expresa mediante la siguiente ecuación.

$$A = \frac{1}{2} \left| \sum_{i=1}^{n-1} x_i \, y_{i+1} + x_n \, y_1 - \sum_{i=1}^{n-1} x_{i+1} \, y_i - x_1 \, y_n \right|$$
(58)

Donde, n es el numero de lados del polígono, x_i , y_i son los vértices de la celda. Entonces, considerando que todas se llevarán a la forma base (triángulos), para el mallado de este estudio el área de todas las celdas queda expresada de la siguiente manera.

$$A = \frac{1}{2} \left| \sum_{i=1}^{2} x_i \, y_{i+1} + x_3 \, y_1 - \sum_{i=1}^{2} x_{i+1} \, y_i - x_1 \, y_3 \right| \tag{59}$$

4.3.10. Calculo del vector normal unitario

Al igual que el área de las celdas, este ítem debe ser calculado previo a la resolución computacional de la ecuación. Para ello, es necesario calcular las componentes del vector tangente unitario de cada una de las interfaces para cada celda.

$$t_{x,f} = \frac{x_2 - x_1}{\sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}} = \frac{y_2 - y_1}{L_f}$$

$$t_{y,f} = \frac{y_2 - y_1}{\sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}} = \frac{y_2 - y_1}{L_f}$$
(60)

Asumiendo, que la malla en dos dimensiones está en el plano xy. Para obtener la unidad normal desde la tangente unitaria. Se forzan las siguientes relaciones.

$$\hat{\mathbf{n}}_{f} \cdot \hat{\mathbf{t}}_{f} = 0$$

$$\hat{\mathbf{n}}_{f} \times \hat{\mathbf{t}}_{f} = \hat{\mathbf{k}}_{f}$$
(61)

La primera de estas dos ecuaciones (61) establece que la normal y la tangente son perpendiculares entre sí, mientras la segunda dice que el producto cruz entre estos dos vectores dará como resultado un vector unitario en dirección z. Escribiendo estas ecuaciones en términos de los componentes de los vectores, tenemos el siguiente sistema:

$$n_{x,f} t_{x,f} + n_{y,f} t_{y,f} = 0$$

$$n_{x,f} t_{x,f} - n_{y,f} t_{y,f} = 1$$
(62)

Resolviendo el sistema (62) se tiene que: $n_{x,f} = t_{y,f}, n_{y,f} = -t_{x,f}$

Como se puede apreciar en la figura (7), el vector normal debe apuntar hacia el exterior de la celda donde se evalúa la concentración de contaminante, y por lo tanto, su valor es inverso en la celda adyacente a la interface.

4.3.11. Método de Euler Implícito y Explícito

Luego de realizar la discretización a nivel espacial de la ecuación (13) que modela el problema, es momento de evaluar con respecto al paso del tiempo. Al haber solamente una variable, se pueden utilizar las técnicas para resolver *ecuaciones diferenciales ordinarias* (EDO).

Una de estas técnicas es el **método de Euler** [18] que surge como una extrapolación para estimar un nuevo valor y_{i+1} a partir de su valor anterior y_i , una pendiente ϕ y una distancia h.

$$y_{i+1} = y_i + \phi \ h \tag{63}$$



Figura 11: Descripción gráfica del método de Euler

Siendo la primera derivada una estimación directa de la pendiente en x_i de la Figura 11, se tiene que $\phi = f(x_i, y_i)$, resultando:

$$y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i)h (64)$$

La expresión anterior se conoce como **método de euler explícito**; la cual se puede expresar en los términos de las variables que se utilizan en este documento, obteniendo lo siguiente.

$$u^{t_{n+1}} = u^{t_n} + f(u^{t_n}) \ \Delta t \tag{65}$$

Donde $t_{n+1} = t_n + \Delta t$, siendo Δt el tamaño del paso del tiempo, y $f(u^{t_n})$ es la **función semidiscretizada** que se obtuvo al realizar la discretización espacial de la advección y difusión evaluando los valores anteriores de concentración u^{t_n} . Esta función $f(u^{t_n})$ se evalúa en cada celda y se expresa como:

$$f(u^{t_n})_i = \sum_{f=1}^{N_{f,i}} \mathbb{D}_f[(\nabla u_i)_f \cdot \hat{n}_f] L_f + \mathbb{D}_B[(\nabla u_i)_B \cdot \hat{n}_B] L_B$$
$$- \left(\sum_{f=1}^{N_{f,i}} G_f \ u_f + G_B \ u_B\right) + Q(x_i, y_i, t)$$
$$+ s \cdot t \cdot \delta(x_i - x_0) \delta(y_i - y_0) \delta(t - \tau_0)$$
$$+ s \cdot t \cdot \delta(x_i - x_1) \delta(y_i - y_1) \delta(t - \tau_1)$$
(66)

Para el caso de el mallado no regular, el tamaño del paso del tiempo Δt no es constante. Por lo tanto, este debe ser recalculado en cada iteración:

$$\Delta t = min \left[\frac{Area}{max \left[\frac{\sqrt{v_x^2 + v_y^2 + \mathbb{D}}}{Area} \right]} \right] \cdot CFL$$
(67)

Se obtiene como el resultado del producto entre el valor de la condición CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) y el mínimo valor de la razón entre el área de las celdas y el valor máximo de la razón entre el área y la velocidad del viento.

Esto se realiza con el fin de mantener la estabilidad del método explícito. Y el uso de las áreas y las velocidades del viento en cada una de las celdas obedece al hecho de que están presentes en la estimación de los flujos de la función semi-discreta (66).

La finalidad de calcular el tamaño del paso del tiempo Δt en cada iteración, puede resultar incómodo a la hora de obtener resultados que se requieran sean presentados en intervalos de tiempo constantes. Existe una técnica que permite lograr este objetivo, sin necesidad de perder la estabilidad en los resultados. Esta técnica es conocida como el **método de Euler implícito** que cumple lo anterior a cambio de un costo computacional mayor en cada iteración. Este costo puede considerarse relativo, debido a que al ser un método más estable, se puede realizar un menor número de iteraciones para completar todo el intervalo de tiempo.

El método implícito se expresa de la siguiente forma:

$$u^{t_{n+1}} = u^{t_n} + f(u^{t_{n+1}}) \ \Delta t \tag{68}$$

A diferencia de la forma explícita, la función semi-discreta $f(u^{t_{n+1}})$ es evaluada con los valores de concentración de la siguiente iteración. Lo cual es un problema, debido a que el término $u^{t_{n+1}}$ a determinar depende de si mismo para su estimación. Por lo tanto, para dar solución a esto se linealiza la función $f(u^{t_{n+1}})$.

$$f(u^{t_{n+1}}) = f(u^{t_n}) + J_f(u)\Delta u$$
(69)

Donde $\Delta u = u^{t_{n+1}} - u^{t_n}$ y $J_f(u)$ es la matriz Jacobiana de dimensiones $m \times m$ para la función semi-discreta $f(u^{t_n})$. Siendo m igual al número total de celdas de la malla.

$$J_f(u) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(u)}{\partial u_1} & \frac{\partial f_1(u)}{\partial u_2} & \cdots & \frac{\partial f_1(u)}{\partial u_m} \\ \frac{\partial f_2(u)}{\partial u_1} & \frac{\partial f_2(u)}{\partial u_2} & \cdots & \frac{\partial f_2(u)}{\partial u_m} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f_m(u)}{\partial u_1} & \frac{\partial f_m(u)}{\partial u_2} & \cdots & \frac{\partial f_m(u)}{\partial u_m} \end{bmatrix}$$
(70)

Por otro lado, tanto $f(u^{t_{n+1}})$ y $f(u^{t_n})$ son vectores de dimensión m que almacenan los valores de la semi-discretización, actual y anterior respectivamente, para cada una de las celdas.

Reordenando los términos de la ecuación (68)

$$\Delta u = \Delta t f(u^{t_{n+1}}) \tag{71}$$

Reemplazando (69) en la ecuación anterior.

$$I\Delta u = \Delta t \left[f(u^{t_n}) + J_f(u)\Delta u \right]$$
(72)

Reagrupando términos se tiene el siguiente sistema de ecuaciones lineales:

$$[I - \Delta t \ J_f(u)] \ \Delta u = \Delta t \ f(u^{t_n}) \tag{73}$$

El sistema anterior se puede llevar a la forma $A \cdot x = b$. Donde $A = I - \Delta t J_f(u)$, $b = \Delta t f(u^{t_n})$ y $x = \Delta u$ sería el vector incógnita de dimensión m a encontrar. Siendo I la matriz identidad. Luego de resolver este sistema utilizando algún método numérico para la resolución de sistemas lineales, se procede al cálculo del valor de concentración $u(t + \Delta t) = u(t) + \Delta u$ para luego pasar a la siguiente iteración.

4.4. Simulación Computacional

4.4.1. Procesamiento y Almacenamiento de la Información Geométrica

En esta sección se abordará el tema del procesamiento de la geometría de la malla, en otros términos, la generación de la misma. Tomando en cuenta el problema a resolver, se aborda en una región que abarca una ciudad, es necesario un número acotado de celdas para subdividir el área de estudio. Además, esta subdivisión en celdas debe estar acorde a la geometría de la ciudad. Por todo lo anterior, se decidió realizar la generación de la malla de forma manual utilizando el lenguaje de programación Python en conjunto a la librería gráfica **OpenMesh**.

Se generaron dos tipos de mallas, una malla gruesa con una cantidad reducida de celdas y otra más refinada con un número de celdas mayor.

La primera se generó manualmente pensando en que esta representará las zonas de una ciudad. Para esto, primero se definen los vértices de la malla y luego se procede a definir las celdas, las que se conforman como un conjunto de tres vértices que forman el triángulo que encerrará la celda. En el caso de los lados (interfaces) esto son generados automáticamente por la librería al momento de crear las celdas.

En el caso de la malla refinada, al ser un conjunto con un alto número de celdas (sobre 1000 celdas), se creó un script que la genere de forma automática donde se asigna una región delimitada por los intervalos x, y, un tipo de distribución (en este caso la teselación de Delaunay). Con esta información se procede a generar los vértices y celdas que conforman la malla.



Figura 12: Estructura del mallado grueso. Los puntos rojos denotan los vertices, los números en el centro de las celdas indican el índice de estas.

Teniendo en cuenta la información que se debe disponer previo a la resolución de la discretización del modelo, hasta el momento, solamente se tiene el número de vértices, las coordenadas de estos y el número de caras. Todos definidos por la generación manual de la malla. Por otro lado, mediante el uso de un comando de la librería se puede obtener el número de interfaces (edges en OpenMesh).

	Cantidad
Número de Celdas	66
Número de Vértices	43
Número de Interfaces	100

Cuadro 3: Información de la cantidad de ítems relacionados a la malla generada.

Entonces, quedaría por obtener la información acerca de los baricentros de las celdas, área de las celdas, centros de las interfaces, longitudes de las interfaces y los vectores normales unitarios. Para lo cual, es necesario realizar rutinas de programación que permitan calcular y guardar esta información. A continuación, se muestra el diagrama de flujo que esquematiza estas rutinas.



Figura 13: Diagrama de flujo para el calculo de elementos de información geométrica.

OpenMesh tiene funciones que permiten recorrer elementos de la malla generada sin necesidad de crear índices auxiliares. Para recorrer todas las celdas (faces) de la malla se utiliza mesh.faces(), en el caso de recorrer los vértices y las interfaces (edges) de una celda fh específica se usan mesh.fv(fh) y mesh.fe(fh) respectivamente.

$$B_i(x,y) = \left(\frac{x_A + x_B + x_C}{3}, \frac{y_A + y_B + y_C}{3}\right)$$
(74)

Para el cálculo de los baricentros se utiliza la expresión (74). En el caso del cálculo del área de la celda correspondiente se usa la fórmula expresada en (59).Por otro lado, para la comprensión del cálculo de la información referente a las interfaces se requiere mayor explicación, debido a que es necesario conocer cómo el simulador recorre los bordes de las celdas. Sin embargo, esto puede explicarse de la siguiente manera.

La Figura 14 muestra una celda triangular de vertices A, B, C los cuales están almacenados en ese orden. De igual manera, sus interfaces 1, 2, 3 se almacenan en el orden correspondiente. Por lo tanto, para establecer la relación vertices-interfaces esta se puede expresar, de forma general, como:



Figura 14: Celda triangular de vértices A, B, C

De manera similar, OpenMesh trabaja las relaciones entre las interfaces y las celdas vecinas. Por ejemplo, la celda 11 de la malla gruesa, de la Figura 12, sus vértices están indicados en el orden [vh16, vh17, vh20]. Si llamamos a las interfaces A al segmento que va de los vértices vh16 a vh17, B al conformado por vh17 a vh20, y C al segmento restante. El orden en que se recorren estas interfaces es C, A, B, dado que **OpenMesh** recorre desde el vértice que encierra la celda (vh20 en este caso). Por lo tanto, las celdas vecinas de la celda 11 se ordenarán correspondiente al orden de las interfaces, resultando [10, 3, 12] siendo cada celda correspondida con su interface respectiva. Sin embargo, se presenta el problema de las celdas que presentan interfaces de frontera, donde este orden se ve alterado. Este caso se analizará con detalle en la siguiente sección.

De manera similar, **OpenMesh** trabaja las relaciones entre las interfaces y las celdas vecinas. Por ejemplo, la celda 11 de la malla gruesa, de la Figura 12, sus interfaces están almacenadas en el orden 21, 19, 16. Por lo tanto, las celdas vecinas de la celda 11 se ordenarán según al orden de las interfaces, resultando 12, 10, 8 siendo cada celda correspondida con su interface respectiva. Sin embargo, se presenta el problema de las celdas que presentan interfaces de frontera, donde este orden se ve alterado. Este caso se analizará con detalle en la siguiente sección.

4.4.2. Procesamiento de la Información de Conectividad

Como se mencionó en la sección anterior, la conectividad entre las celdas no es algo que se conozca automáticamente, pues sólo el generador de malla conoce esta información y esta debe ser descifrada antes de ser comunicada al solver de volúmenes finítos.

Procesar esta información implica la extracción y almacenamiento de ciertos identificadores en formatos apropiados, tal que esta información pueda ser leída facilmente al momento de ser usada por el solver. Para lo cual, es importante seguir la siguiente notación.

- Cada celda tiene un único ID global. Se denota por el número en el centro de las celdas de la Figura 12. Se generó manualmente.
- Cada nodo tiene un único ID global. Se denota por el número negro al lado del punto rojo en las intercecciones de las celdas de la Figura 12. Se generó manualmente.
- Cada interface tiene un único ID global. Este identificador es generado por la librería.
- Cada interface posee también un ID local, el cual es referente a la celda donde se está posicionado. Este identificador es generado por la librería.
- Cada vertice tiene un ID local, en referencia a la celda donde se está posicionado, el cual es generado por la librería.
- Cada celda adyacente posee un ID local, referente a la celda donde se está posicionado. Este identificador es generado por la librería. Con excepción en las celdas que posean interfaces de frontera.

Anteriormente se analizó las relaciones de conectividad vertice-interface y interfaces-celdas vecinas, las cuales proporcionaban la información de conectividad correspondiente.

Sin embargo, aparece el problema referente a las celdas con interfaces de frontera, las cuales poseen un número mayor de interfaces que celdas vecinas. Lo cual genera que la relación interface-celdas no se cumpla como tal.

Para dar solución a este problema, se debe realizar un ajuste en el arreglo de interconectividad entre celdas link_cell_to_cell . Con este fin, se realiza una rutina que agrega una celda "fictícia" en el lugar que deja vacante la interface de frontera y así poder equiparar en cantidad ambos ítems y satisfacer la relación.

La rutina del diagrama de la Figura (15), recorre todas las celdas de la malla (mesh.faces()), luego las interfaces (mesh.fe(fh)) y las celdas vecinas (mesh.ff(fh)) de la celda de referencia. La libreria OpenMesh posee comandos para obtener los índices globales de celdas, vértices e interfaces (fh.idx(), vh.idx(), eh.idx() respectivamente) los cuales son almacenados en variables auxiliares. También se hará uso de dos arreglos auxiliares: FronterAux y AuxCell. El primero almacenará un valor de bandera para identificar si la interface es frontera, mientras el segundo almacena las celdas adyacentes.

Para rellenar el arreglo auxiliar FronterAux, se hace uso de los centros de los segmentos de interface. Si el valor de estos segmentos es igual a 2 ó 3 en el caso del eje x, o equivalente a 2 ó 3 en el eje y, se considerará como una interface de frontera y se le asignará un valor igual a 1, caso contrario se rellenará con un cero. Este arreglo, FronterAux, siempre tendrá

un tamaño igual a la cantidad de lados de la geometría de la celda, en contraparte, el tamaño de AuxCell varía según la celda sea fronteriza o no.

Luego se recorre el arreglo FronterAux preguntando si el valor de bandera almacenado corresponde a cero o uno. A medida que esto sucede, se va rellenando el arreglo bidimensional link_cell_to_cell. En caso que el valor de bandera corresponda a un uno, se rellenará la casilla del arreglo link_cell_to_cell con un índice auxiliar -1, por otro lado, si el valor bandera es cero; se rellenará con el índice de celda obtenido del arreglo AuxCell.



Figura 15: Diagrama de flujo para la interconectividad de celdas vecinas.

La elección del valor -1 como índice auxiliar no es al azar, sino que responde a dos inquietudes. Primero al ser un valor negativo, no coincidirá con ningún otro valor de índice, y la otra razón, es para mantener la condición de variable entera.

4.4.3. Procedimiento de cálculo de las concentraciones.

Para la simulación computacional, se desarrolló una aplicación computacional utilizando **Python** en conjunto al set de librerias **Anaconda**. Algunas de estas librerias son NumPy que contiene funciones matemáticas, similares a MATLAB, y Pandas que es una librería de manejo de ficheros que permite administrar base de datos provenientes en diversos formatos, para luego conformar conjuntos de datos llamados **DataFrames** que son manipulables en el entorno de Python.

En esta sección se explicará en detalle, y en forma gráfica, como funciona la aplicación que efectúa la simulación de material particulado.

Para introducir, será necesario explicar la función de algunas **variables generales** que deben ser inicializada antes de el desarrollo del simulador como tal.

aUPM_timecell

Se define como una lista que almacena el histórico los valores de concentración u obtenidos en todas las celdas para todo el tiempo t. Se inicializa con los valores iniciales u_0 . Es la variable que se imprime para obtener los resultados del simulador.

aUPM_timevertex y aUPM_timeedge

Cumplen una función similar a la variable anteriormente mencionada, en este caso enfocada en las concentraciones de los vértices y celdas respectivamente. A diferencia de su símil de las celdas, estas listas se inicializan vacías.

hExacta

Almacena los valores exactos de concentración calculados. Se inicializa con los valores iniciales u_0 .

A continuación se describe cómo se desarrolló el **solver** de este simulador. Con motivo del conjunto de pruebas a realizar, se diseñaron dos algoritmos distintos, uno para resolver utilizando el método de Euler explícito y otro para su caso implícito. A pesar de que el caso implícito por su complejidad tiene varios pasos más en su diseño. Ambas metodologías comparten un número considerable de pasos por lo que se detallarán en conjunto.

Después de ya haber obtenido la información geométrica, y de conectividad de la malla. El siguiente paso a realizar es la inicialización de las variables del solver, entre las que se incluyen los parámetros de la ecuación a evaluar y los valores iniciales de concentración u_0 para cada una de las celdas. Para estos últimos se recorre cada una de las celdas y se evalúan en la función exacta $u_0 = u(x, y, 0)$ en el instante $t_0 = 0$.



Figura 16: Diagrama general del simulador de material particulado en su forma explícita.

Habiendo inicializado las variables, se inicia el solver que funcionará mientras el tiempo t sea menor que el tiempo límite señalado en la variable tEnd.

Lo primero a estimar son los valores de las concentraciones en cada uno de los vértices de la malla. Para esto, con la ayuda de las funciones otorgadas por **OpenMesh**, se recorren todos los vértices de la malla. Para cada uno, se obtiene su índice global correspondiente y se almacena en **nVertex**, luego también usando una de las funciones de **OpenMesh** se recorren todas las celdas que intersectan en el nodo correspondiente y se obtiene el índice para cada celda su índice global que se guarda en la variable **nCell**. Con esta información, se obtiene el coeficiente $w_{v,i} = u_V/u_i$ (ver Ecuación (45)) para estimar el aporte de concentración de la celda al vértice (45). Luego para obtener la concentración u_V del vértice se suman todos estos valores obtenidos anteriormente. Luego se almacena el valor estimado para el vértice en el arreglo temporal **aU_vtc_PM** para despues de haber recorrido todos los vértices, almacenarlos en el historial correspondiente **aUPM_timevertex**.



Figura 17: Diagrama general del simulador de material particulado en su forma implícita.



Figura 18: Diagrama de flujo de la estimación de la concentración en los vértices de la malla.

Algorithm 1 Cálculo del la concentración de los vértices.

Input: La concentraciones de la celdas u_i , el número total de vértices N_v . Output: Valor estimado de la concentración u_{vh} . for $vh \in \{1, \ldots, N_v - 1\}$ do \triangleright Obtener índice global n Vertex_{vh} for $fh \in vh$ do Recorre las celdas fh que intersectan el vértice vh. \triangleright Obtener índice global de la celda $nCell_{fh}$ \triangleright Obtener $\omega_{vh,fh} = \frac{1/d_{fh}}{\sum_{fh}^{N_v,fh} 1/d_{fh}}$. Ver ecuación (45) \triangleright Calcula el aporte de la celda fh al vértice vh. $u_{vh,fh} = \omega_{vh,fh} \cdot u_{fh}$ end for \triangleright Se suman todos los aportes para obtener $u_{vh} = \sum_{fh}^{N_v,fh} u_{vh,fh}$

Luego, se pasa a estimar el f(u) para los métodos explícitos e implícitos. Este f(u) es la ecuación semi-discretizada y contiene los valores discretizados de los flujos advectivos y difusivos, además de los términos $Q(x_i, y_i, t)$ y los deltas de Dirac.

Para realizar la estimación primero se calcula la velocidad del viento v_x y v_y según (10), y se inicializan las listas que contendrán los valores del flujo de advección y difusión como arreglos vacíos. Aquí se procede a recorrer los lados de la celda fh, para cada uno de ellos se obtiene los índices de la interface nEdge y de la celda vecina correspondiente nCell_v. Este último utilizando la información de conectividad proporcionada por la matriz de relación celda-celda link_cell_to_cell. En el siguiente paso, se establece la diferencia si la interface corresponde a ser de frontera o interior. Para esto se consulta si el valor nCell_v es igual al valor bandera -1, en caso de resultar True, se asigna como celda vecina la celda par nCell_p y tambien se asigna un lado par, en caso contrario se omite este paso.

La utilización tanto del **lado par** y de la **celda par** surge de la **condición de frontera** que están planteadas en el problema de test con que se realizarán las pruebas del simulador. La obtención de estas relaciones se explicará más adelante en la sección 4.4.4.

Volviendo al algoritmo, se calcula la distancia δ_f que resulta del producto de $\hat{\mathbf{n}}_f \cdot \mathbf{l}_f$ (36). Siendo \mathbf{l}_f la distancia entre los baricentros de las celdas adyacentes a la interface f donde se estima el flujo.

$$\mathbf{l}_f = bar_{O,f} - bar_{N,f}$$

Para el caso frontera (nCell_v = -1), la fórmula anterior no funciona, por lo tanto, se realiza como la suma de las distancias entre el baricentro de la celda y el centro del lado de frontera de la celda O y la celda par p.

$$\mathbf{l}_f = (bar_{O,f} - cen_b) + (bar_{N,p} - cen_p)$$

Donde *bar* denota el centro de la celda y *cen* el centro de las interfaces de borde. Los subíndices N, O, f, b, p denotan celda vecina, celda origen, interface de flujo (interior), interface de frontera y elemento par respectivamente.



Figura 19: Diagrama de flujo de la estimación del flujo en las celdas.

Algorithm 2 Cálculo del término difusivo de una celda.

Input: La concentración de la celda u_i , de los vertices $u_{a_f,i}$, $u_{b_f,i}$; y el indice global de la celda $nCell_i$. **Output:** Valor estimado de la difusión en la celda $v_{-}dif_{i}$. \triangleright Almacenamiento temporal de flujos: aDif_{f,i} = [] for f = 0, 1, 2 do \triangleright Obtener $nCell_v_f$, $nEdge_f$ \triangleright Obtener vértices a_f, b_f if $nCell_v_f = -1$ then \triangleright nCell_p_f = Celda Par \triangleright nEdge_p_f = Lado Par end if Para los siguientes pasos se utiliza la información de $nCell_p_f$ y $nEdge_p_f$ si la interface f es de frontera. Caso contrario se utiliza $nCell_v_f$ y $nEdge_f$. \triangleright Cálculo δ_f \triangleright Estimación del producto $\hat{\mathbf{t}}_f \cdot \mathbf{l}_f$ \triangleright Estimar el flujo difusivo $diff_f$ en la interface f de la celda i. \triangleright Almacenar resultado en aDif_{f,i} end for $\triangleright v_{-}dif_i = \sum_{f=0}^2 diff_f$

Luego con esta información se calculan el flujo tangencial sobre la interface $J_{t,f}$ (44) y el término G_f para el flujo advectivo, a continuación se estiman los flujos advectivos y difusivos para el lado de la celda, y finalmente se almacenan en el arreglo auxiliar correspondiente.

Terminado de recorrer los lados de la celda y haber calculado los flujos, advectivos y difusivos; para cada uno de los lados, estos se suman para así obtener los valores de difusión y advección de la celda. Después, se calcula el término de emisión constante $Q(x_i, y_i, t)$ y los valores delta de Dirac para la celda u_i . Finalmente estos valores se suman (66) y se obtiene el resultado de la ecuación semi-discretizada f(u) para la celda.

Algorithm 3 Cálculo del término advectivo de una celda.

Input: La concentración de la celda u_i , el indice global de la celda $nCell_i$. **Output:** Valor estimado de la difusión en la celda v_adv_i . ▷ Cálculo de v_x y v_y . Ver ecuación (10). ▷ Almacenamiento temporal de flujos: $aAdv_{f,i} = []$ **for** f = 0, 1, 2 **do** ▷ Obtener $nCell_v_f$, $nEdge_f$ y L_f **if** $nCell_v_f = -1$ **then** ▷ $nCell_p_f = Celda Par$ ▷ $nEdge_p_f = Lado Par$ **end if** Para los siguientes pasos se utiliza la información de $nCell_p_f$ y $nEdge_p_f$ si la interface f es de frontera. Caso contrario se utiliza $nCell_v_f$ y $nEdge_f$. ▷ Cálculo $G_f = V_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_f L_f$. ▷ Estimar el flujo advectivo, usando el método Upwind (50), adv_f para la interface f. ▷ Almacenar resultado en $aAdv_{f,i}$

end for $\triangleright v_{-}adv_i = \sum_{f=0}^2 adv_f$

En este punto, empieza la diferenciación entre el **método explicito** y su variante **implícita**. Para el caso explícito, se calcula el siguiente valor de u utilizando la información de concentración del tiempo anterior.

$$u^{t+\Delta t} = u^t + f(u^t)$$

Luego se calcula el valor de la función exacta u(x, y, t) y se almacenan estos resultados en sus respectivos históricos. Esto se repite para cada una de las celdas. Finalmente, se evalúa el siguiente valor de Δt usando la ecuación (67) para pasar al siguiente valor de t.

En el caso implícito, después de calcular la función semi-discreta f(u) se evalúa u en la función exacta u(x, y, t) para cada una de las celdas de la malla. luego se almacenan los resultados. Tras ello se procede a calcular el Δu que es la diferencia de concentración entre el tiempo actual y el siguiente, resolviendolo como un sistema de ecuaciones lineales del tipo Ax + b = 0. Para esto es necesario una matriz jacobiana (70) que debe ser generada anteriormente, y del arreglo que contenga el valor de f(u) para todas las celdas. Anterior al paso de la siguiente iteración, se procede a estimar el valor de u para todas las celdas de la malla, como sigue:

$$u^{t+\Delta t} = u^t + \Delta u$$

4.4.4. Tratamiento de las condiciones de frontera y celdas pares.

Como se ha mencionado en las secciones 4.1.10 y 4.3.8, dadas las condiciones de fronteras **periódicas** del modelo es necesario establecer algún algoritmo que nos permita encontrar esta periodicidad en la malla.

Si pensamos en un mallado regular de $M \times N$ celdas, al momento de evaluar la discretización se recorre cada una de las M celdas contenidas en las N filas que conforman la malla. Los índices correspondientes a las concentraciones de la primera celda de cada fila serían $u_{0,N}$ y para la última $u_{M-1,N}$, siendo $N \in \mathbb{N}$. Obviamente estas celdas sólo tienen una celda vecina por ser extremas, por lo tanto, no existe una celda vecina de índice $-1, N \circ M, N$ donde se pueda evaluar la condición como tal. Por lo tanto, se establece lo siguiente:

$$u_{-1,N} = u_{M-1,N} u_{M-1,N} = u_{0,N}$$
(76)

Lo anterior surge de una deducción simple. Sin embargo, para el caso de las mallas no-regulares el tema de la periodicidad en la malla se convierte en un asunto más complejo por el hecho de que no se va evaluando fila por fila como una malla regular, sino que las celdas tienen una formación algo más aleatoria. Por lo tanto, para dar solución a este problema, se ideó el sistema de **celdas pares** y **lados pares**.

Este sistema de **celdas pares** y **lados pares** se basa en ir comparando los componentes de los vértices situados en las fronteras y así ir emparejando celdas que contengan una de sus componentes iguales en sus dos vértices frontera. Para que este sistema funcione es necesario que en la malla generada las celdas fronterizas solamente tengan una interface de borde.

Antes de dar inicio al algoritmo, es necesario inicializar algunas variables necesarias. Los arreglos ladoPar y celdaPar contienen los emparejamientos correspondientes para cada una de las celdas. Se inicializan como un arreglo de tamaño igual al número de celdas de la malla y con valores de bandera -1. También son necesarias unas variables llamadas nMaxCx, nMinCx nMaxCy y nMinCy que guardan los límites máximos y mínimos de la malla.



Figura 20: Diagrama de flujo de la rutina para la búsqueda de las celdas pares y lados pares

Con lo anterior listo, se procede a recorrer cada una de las celdas **fh** de la malla, donde se rescata su índice global **nCell** y se inicializa un arreglo vacío **aVt1** donde se guardaran los componentes de cada vértice de la celda. Después de ello se preguntará si la celda **fh**, que llamaremos origen, en que estamos ubicados, es frontera o no. Si la respuesta resulta ser **True** se sigue con el algoritmo, en caso contrario, se evalúa la siguiente celda.

Luego, se guardan los componentes de los vértices en aVt1 para después seguir con la obtención de los índices de las celdas vecinas cVecina a la celda origen para lo que es necesario la información recopilada en el arreglo de conectividad link_cell_to_cell. Donde preguntaremos si son una interfaz de frontera, evaluando el valor bandera -1 que indica esta condición. En caso de obtener una respuesta positiva se almacenan las componentes de los vértices situados sobre la frontera de la celda en las variables para lo que es necesario la información recopilada en el arreglo de conectividad a y b.

Nuevamente se recorren todas las celdas de la malla, con motivo de comparar. Primero se obtiene el índice de la celda nCell_p y se inicia un arreglo vacío aVt2 que es homólogo en función a aVt1. Luego, se pregunta si la celda a comparar es de frontera. Si la es respuesta positiva se continúa con el algoritmo, en el caso opuesto se evalúa la celda siguiente. A continuación se rellena el arreglo aVt2 con los componentes de los vértices, y se procede a recorrer las interfaces y las celdas vecinas de la celda fh de comparación. Utilizando la información almacenada en link_cell_to_cell y link_cell_to_edge se obtienen los valores para cVecina2 y nEdge_p respectivamente. Luego, se procede a evaluar si cVecina2 igualmente como se hizo anteriormente y se obtienen las componentes de los vértices de frontera que se almacenan en las variables c y d.

Con los componentes de los vectores de frontera ya obtenidos y guardados en las variables

a,b,c y d se puede comenzar a realizar la comparación para así establecer la **celda par** y el **lado par** para la celda de borde. Si consideramos $\mathbf{a} = (x_a, y_a)$ y $\mathbf{b} = (x_b, y_b)$ como los vertices de borde de la celda origen que queremos conocer su **celda par**. Y los puntos $\mathbf{c} = (x_c, y_c)$ y d $= (x_d, y_d)$ como los vértices de borde de la celda a emparejar. La comparación se realiza de la siguiente manera: Primero se comparan las componentes x de cada par de puntos, evaluando las siguientes condiciones.

$$x_a = x_d \& x_c = x_b \tag{77}$$

En caso de cumplirse ambas condiciones a la **celda par** se le asigna $nCell_p$ y su **lado par** el indice $nEdge_p$. Por el contrario, se pasa a comparar las componentes y de los puntos obtenidos.

$$y_a = y_d \& y_c = y_b \tag{78}$$

Si satisface las condiciones, se asignan la **celda par** y **lado par** igual que para el caso anterior. En caso contrario, se procede a evaluar la siguiente celda vecina y lado de la celda origen.

El hecho de comparar solamente **a** con **d** y **b** con **c**, se fundamenta en cómo esta conformada la malla y como se recorren los elementos de esta por parte de la librería.

Algorithm 4 Busqueda de Celdas Pares

Input: El indice global de la celda $nCell_i$, matrices de información de conectividad, número total de celdas N_f . **Output:** Arreglo de celdas pares y lados pares con su información correspondiente. for $fh \in \{1, ..., N_f - 1\}$ do \triangleright Obtener $nCell_{fh}$ ▷ Inicializar arreglo a_Vt1 = [] if *fh* es frontera **then** for $vh \in \{0, 1, 2\}$ do \triangleright Almacenar (vh_x, vh_y) en a_Vt1 end for for $i \in \{0, 1, 2\}$ do $\triangleright c Vecina = link_cell_to_cell_nCell_n, i$ if cVecina = -1 then $\triangleright a = a_V t 1_{i-1}, b = a_V t 1_i$ for $fh \in \{1, ..., N_f - 1\}$ do \triangleright Obtener *nCell_p_{fh}* \triangleright Inicializar arreglo a_Vt2 = [] if *fh* es frontera **then** for $vh \in \{0, 1, 2\}$ do \triangleright Almacenar (vh_x, vh_y) en a_Vt2 end for for $j \in \{0, 1, 2\}$ do $\triangleright cVecina2 = link_cell_to_cell_nCell_p_{fh}, j$ \triangleright *nEdge_p* = link_cell_to_cell_*nCell_p*_{fh}, *j* if cVecina2 = -1 then $\triangleright \mathbf{c} = \mathbf{a}_{-} \mathbf{V} \mathbf{t} \mathbf{2}_{i-1}, \mathbf{d} = \mathbf{a}_{-} \mathbf{V} \mathbf{t} \mathbf{2}_{i}$ if $c_x = b_x \& a_x = d_x$ then \triangleright celdaPar $_{nCell_{fh}} = nCell_{p_{fh}}$ \triangleright ladoPar $_{nCell_{fh}} = nEdge_{-}p$ end if if $c_y = b_y \& a_y = d_y$ then \triangleright celdaPar_{nCell_fh} = nCell_p_{fh} \triangleright ladoPar_{nCell fh} = nEdge_p end if end if end for end if end for end if end for end if end for $\triangleright v_{-}adv_i = \sum_{f=0}^2 adv_f$

5. Pruebas y Resultados

Con motivo de verificar la efectividad del funcionamiento del simulador computacional, se realizaron un conjunto pruebas para comprobar que los resultados estimados corresponden a una correcta aproximación matemática. Estas pruebas fueron realizadas tanto para el método explícito como implícito, y probadas en la malla gruesa y refinada, las que están encerradas en un rectángulo de límites x = [-5, 5], y = [-5, 5].

5.1. Descripción de las pruebas.

Como se mencionó en la sección 4.1.8 correspondiente a la Emisión, el **método de solu**ción manufacturada [11] permite validar matemáticamente la codificación, verificando que resuelva de forma correcta la ecuación gobernante del modelo. Para esto se propone una **so**lucion exacta u(x, y, t) para la ecuación gobernante (13), la cual no cumple un proposito físico sino que puramente analítico.

Para este test se propuso la siguiente solución exacta para la ecuación (13):

$$u(x, y, t) = \exp^{-\sigma \left(\left(-t \left(\sin \left(\frac{t}{T_{\theta}} \right) (y+x) \lambda + c_{y} \right) - y_{c} + y \right)^{2} + \left(-t \left(\sin \left(\frac{t}{T_{\theta}} \right) (x-y) \lambda + c_{x} \right) - x_{c} + x \right)^{2} \right)} + \frac{s \cdot t \, \exp^{-\frac{(-y_{1}+y-t)^{2}}{\alpha^{2}} - \frac{(-x_{1}+x-t)^{2}}{\alpha^{2}} - \frac{(t-\tau_{1})^{2}}{\alpha^{2}}}}{\alpha^{3} \pi^{\frac{3}{2}}} + a_{\theta}$$

$$(79)$$

Esta solución propuesta (79) cumple con lo planteado en el modelo. O sea, es la generación de dos impulsos en los puntos (x_0, y_0) y (x_1, y_1) de la región Ω que se activan en los tiempos τ_0 y τ_1 . Sobre estos impulsos actúan la advección y la difusión que están representadas en el primer término exponencial de esta solución, el cual produce el movimiento de la nube de partículas desde el punto donde se origina el primer impulso hacia el origen del siguiente.

La ecuación (13) se reescribe de la siguiente manera (80), y se evalúa la solución propuesta (79), como las componentes de la velocidad (10) para encontrar el operador L(U) que permita generar el término fuente Q.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathbb{D}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) - v_x(x, y, t)\frac{\partial u}{\partial x} - v_y(x, y, t)\frac{\partial u}{\partial y} + k \cdot u
+ s \cdot t \cdot \delta(x - x_0)\delta(y - y_0)\delta(t - \tau_0)
+ s \cdot t \cdot \delta(x - x_1)\delta(y - y_1)\delta(t - \tau_1)$$
(80)

Siendo el operador L(U(x, y, t))

$$L(U(x, y, t)) = \frac{\partial u}{\partial t} - \mathbb{D}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) + v_x(x, y, t)\frac{\partial u}{\partial x} + v_y(x, y, t)\frac{\partial u}{\partial y} + k \cdot u$$

$$- s \cdot t \cdot \delta(x - x_0)\delta(y - y_0)\delta(t - \tau_0)$$

$$- s \cdot t \cdot \delta(x - x_1)\delta(y - y_1)\delta(t - \tau_1)$$
(81)

Al evaluar, utilizando el software **wxMaxima**, la solución u(x, y, t) propuesta en el operador L(U), da como resultado el término fuente Q(x, y, t) que sigue:

$$Q(x, y, t) = -\mathbb{D} + \left(\sin\left(\frac{t}{T_{0}}\right)(y+x) \ \lambda + c_{y}\right) + \left(\sin\left(\frac{t}{T_{0}}\right)(x-y) \ \lambda + c_{x}\right) \\ + k - \sigma \exp^{-\sigma\left(\left(-t\left(\sin\left(\frac{t}{T_{0}}\right)(y+x) \ \lambda + c_{y}\right) - yc+y\right)^{2} + \left(-t\left(\sin\left(\frac{t}{T_{0}}\right)(x-y) \ \lambda + c_{x}\right) - xc+x\right)^{2}\right)\right)} \\ + \frac{s \cdot t\left(\frac{2(-y_{1}+y-t)}{\alpha^{2}} + \frac{2(-x_{1}+x-t)}{\alpha^{2}} - \frac{2(t-\tau_{1})}{\alpha^{2}}\right) \exp^{-\frac{(-y_{1}+y-t)^{2}}{\alpha^{2}} - \frac{(-x_{1}+x-t)^{2}}{\alpha^{2}} - \frac{(t-\tau_{1})^{2}}{\alpha^{2}}} \\ + \frac{s \cdot \exp^{-\frac{(-y_{1}+y-t)^{2}}{\alpha^{2}} - \frac{(-x_{1}+x-t)^{2}}{\alpha^{2}} - \frac{(t-\tau_{1})^{2}}{\alpha^{2}}}{\alpha^{3}\pi^{\frac{3}{2}}} - \frac{s \cdot \exp^{-\frac{(y-y_{1})^{2}}{\alpha^{2}} - \frac{(x-x_{1})^{2}}{\alpha^{2}} - \frac{(t-\tau_{0})^{2}}{\alpha^{2}}} \\ + \frac{s \cdot t\left(\frac{2(-y_{0}+y-t)}{\alpha^{2}} + \frac{2(-x_{0}+x-t)}{\alpha^{2}} - \frac{2(t-\tau_{0})}{\alpha^{2}}\right)}{\alpha^{3}\pi^{\frac{3}{2}}} - \frac{s \cdot \exp^{-\frac{(y-y+t)^{2}}{\alpha^{2}} - \frac{(x-x_{0})^{2}}{\alpha^{2}} - \frac{(t-\tau_{0})^{2}}{\alpha^{2}}} \\ + \frac{s \cdot \exp^{-\frac{(-y_{0}+y-t)^{2}}{\alpha^{2}} - \frac{(-x_{0}+x-t)^{2}}{\alpha^{2}} - \frac{(t-\tau_{0})^{2}}{\alpha^{2}}}}{\alpha^{3}\pi^{\frac{3}{2}}}} - \frac{s \cdot \exp^{-\frac{(y-y_{0})^{2}}{\alpha^{2}} - \frac{(x-x_{0})^{2}}{\alpha^{2}} - \frac{(t-\tau_{0})^{2}}{\alpha^{2}}}}{\alpha^{3}\pi^{\frac{3}{2}}}}$$

$$(82)$$

Para esta prueba se utilizaron los siguientes valores para los parámetros de la ecuación: Los puntos $(x_0, y_0) = (2,5,2,5), (x_1, y_1) = (0,0)$ es donde están ubicadas las fuentes emisoras descritas por la sumatoria de impulsos (deltas de Dirac), las que se accionan en los tiempos $T_0 = 0,22, T_1 = 7,0$ respectivamente. El impulso (x_1, y_1) alcanza su valor máximo en un tiempo superior al tiempo límite $t_{end} = 3,0$ de estas pruebas. Por otro lado, para el cálculo de la velocidad del viento $V = (v_x, v_y)$; las velocidades basales de advección tienen valores $c_x = 1,5, c_y = 1,5$, y la aceleración de control es igual a $\lambda = 0,1$. Los valores del coeficiente de difusión constante y el coeficiente de disposición constante con $\mathbb{D} = 0,001, \kappa = 0,01$ respectivamente. Finalmente, los valores utilizados como parámetros de control, siendo la amplitud del término fuente s = 0,001, y la variable σ , que es utilizada para establecer la condición inicial u(x, y, 0), se asigna un valor $\sigma = 2$. Todos estos parámetros al igual que los resultados son adimensionales.

5.2. Resultados

5.2.1. Resultados – visualización 2D



Figura 21: Escala de color para los diagramas de visualización en dos dimensiones.



Figura 22: Resultados del esquema explícito en el tiempo en la malla fina para la Prueba 1. Se compara el resultado estimado (arriba), con el resultado exacto (abajo). El codigo de colores puede ser consultado al inicio de la subsección.

Al comparar la visualización 2D de los resultados obtenidos, tanto para el esquema explícito como implícito, se puede apreciar que en los resultados estimados las concentraciones u_i no logran alcanzar los peaks que se obtienen al evaluar la solución exacta propuesta en la malla. Este suceso, que ocurre en los valores de tiempos intermedios, es consecuencia del efecto de la **difusión numérica** proporcionada por la estimación, que para compensar la concentración y mantener de cierta manera la conservatividad, aumenta el valor u_i en las celdas cercanas a donde se encuentra el máximo de concentración. Esto se puede observar en la nube verde claro que, en general, es mayor en la gráfica de los valores estimados obtenidos.



Figura 23: Resultados del esquema implícito en el tiempo en la malla fina para la Prueba 1. Se compara el resultado estimado (arriba), con el resultado exacto (abajo). El codigo de colores puede ser consultado al inicio de la subsección.

Con respecto a la **difusión numérica**, se describe como un fenómeno que ocurre en las soluciones discretizadas de ecuaciones de conservación, siendo una de las principales fuentes de errores numéricos [12, 13]. Este efecto puede ser separado en dos componentes: una **transver**sal a la corriente y otra **longitudinal** que va en sentido de la corriente difusiva. La primera ocurre cuando existen gradientes en una cantidad convectiva perpendicular al flujo, y la dirección del flujo es oblicua a las líneas del mallado, o sea que se debe a una multidimensionalidad del flujo. La segunda ocurre cuando existen gradientes paralelos al flujo, está más presente en simulaciones unidimensionales.

5.2.2. Resultados – visualización por celda.



Figura 24: Resultados a lo largo del tiempo para las celdas esquinas de la malla. En la parte superior se ubican las esquinas noroeste y noreste, al inferior las esquinas suroeste y sureste. La concentración estimada se indica por la línea azul, y los valores de la exacta por la línea roja.



Figura 25: Resultados a lo largo del tiempo para las celdas de la frontera norte de la malla, de oeste a este. La concentración estimada se indica por la línea azul, y los valores de la exacta por la línea roja.



Figura 26: Resultados a lo largo del tiempo para las celdas de la frontera sur de la malla, de oeste a este. La concentración estimada se indica por la línea azul, y los valores de la exacta por la línea roja.



Figura 27: Resultados a lo largo del tiempo para las celdas de la frontera oeste (arriba en dirección norte-sur) y este (abajo en dirección sur-norte) de la malla, de oeste a este. La concentración estimada se indica por la línea azul, y los valores de la exacta por la línea roja.



Figura 28: Resultados a lo largo del tiempo para las interiores ubicadas en el sector oeste de la malla. La concentración estimada se indica por la línea azul, y los valores de la exacta por la línea roja.



Figura 29: Resultados a lo largo del tiempo para las interiores ubicadas en el sector este de la malla. La concentración estimada se indica por la línea azul, y los valores de la exacta por la línea roja.



Figura 30: Resultados a lo largo del tiempo para las celdas ubicadas cercanas al centro de la malla. La concentración estimada se indica por la línea azul, y los valores de la exacta por la línea roja.

El efecto de la difusión numérica mencionado en el párrafo anterior, puede ser observado en las gráficas de las celdas interiores 135 y 648, donde al haber un peak de concentración, superior a 1,8; que sobresale de los demás valores; en los resultados estimados no logra alcanzar estos peaks; y para compensar, por conservatividad, la curva de concentración se alarga. Esto ocasiona que se mantengan en niveles de concentracion medio por un periodo de tiempo mas largo que el obtenido al evaluar el resultado exacto, ocasionando que la nube de color verde claro que se ve en las Figuras 23 y 22 tenga un mayor tamaño en los resultados estimados.

Por otro lado, el efecto de la inestabilidad está casi ausente en los resultados graficados. En las celdas donde se puede apreciar este efecto están ubicadas en la frontera norte de la malla, aquí se puede observar que en los primeros instantes de t se produce unas perturbaciones en las curvas estimadas que no están presentes en los valores evaluados en u(x, y, t).

En las celdas de borde, especialmente en el extremo Oeste de la malla, ocurre un fenómeno de una pequeña alza en la concentración estimada u_i cuando se t es cercano al tiempo t_{end} . Esto se debe a la acción de la **condición de borde periódica** que, por su naturaleza, hace que los valores de u_i de las celdas fronteras se traspasen al extremo opuesto. Esta condición no es evaluada en la solución exacta propuesta u(x, y, t), por motivos de coste computacional al momento de generar las gráficas de los resultados y considerar que su evaluación resulta irrelevante para los objetivos de este trabajo. Por lo tanto, hay que tomar en consideración el error generado por este efecto al momento de evaluar este ítem.

Con respecto a la evaluación del error, se calculará el **error relativo porcentual promedio** ε_r para todas las iteraciones en las celdas de la muestra. Se debe considerar que lo mostrado en estos resultados es una respresentación parcial de un total de 1600 celdas que componen la malla refinada. En cuanto a los resultados obtenidos en el cálculo del error, se comprueba que el máximo error relativo se obtiene al estimar los peaks de concentración, que se produce en las celdas 668 y 135, lo que se debe justamente al efecto de la difusión numérica. Con respecto a la influencia que podría tener la no evaluación de la condición de borde periódica en la función exacta se puede apreciar que el error obtenido es casi testimonial en algunos casos, como en las celdas de la frontera norte. Siendo el máximo valor obtenido un 0,3 % en la frontera oeste de la malla. Recordar que este error es generado por la desición del autor de no evaluar la condición de borde en la celda por razones explicadas anteriormente. Finalmente, al comparar los errores porcentuales obtenidos en los esquemas explícito e implícito, se aprecia por los valores tabulados que la diferencia de resultados es casi imperceptible entre ambos métodos en esta prueba, obteniendo el esquema implícito una ligera ventaja de presición.

Celda	ε_r	ε_r	Colda	ε_r	ε_r		
	$\mathbf{Exp.}$	Imp.	Celua	Exp.	Imp.		
	Esquina	.S	Frontera Norte				
17	0.0018	0.0014	51	0.0015	0.0019		
5	0.0003	0.0002	65	0.0060	0.0060		
27	0.0048	0.0037	38	0.0009	0.0008		
10	0.0007	0.0006	78	0.0050	0.0041		
	Centro		Frontera Sur				
1327	1.7734	1.7587	43	0.0928	0.0944		
812	0.9254	0.9235	45	1.8822	1.8420		
1100	0.8910	0.9073	48	0.0044	0.0041		
			71	0.0041	0.0036		

 $\varepsilon_r = \frac{valor \; exacto - valor \; estimado}{valor \; exacto} \cdot 100 \,\%$

Cuadro 4: 1	Error r	relativo	porcentual	para	un co	njunto	de	celdas	de	muestra	para	la	malla	fina.
Valores en	porcer	ntaje %	0											

Celda	ε_r	ε_r	Colda	ε_r	ε_r		
	Exp.	Imp.	Celua	Exp.	Imp.		
Fro	ntera O	este	Interior Oeste				
21	0.1838	0.1621	966	0.0103	0.0078		
24	0.3255	0.2872	491	0.0223	0.0225		
69	0.0025	0.0023	189	0.0003	0.0003		
			135	3.6017	3.6478		
Fre	ontera E	\mathbf{ste}	Interior Este				
57	0.2678	0.2303	656	1.0669	0.8966		
34	0.2001	0.1667	689	0.2144	0.1954		
77	0.0028	0.0026	668	3.6876	3.6173		
			1502	0.1477	0.1482		

Cuadro 5: Error relativo porcentual para un conjunto de celdas de muestra para la malla fina. Valores en porcentaje $\,\%$

5.2.3. Resultados en mallado grueso



Figura 31: Resultados a lo largo del tiempo para las celdas esquinas de la malla gruesa. La concentración estimada se indica por la línea azul, y los valores de la exacta por la línea roja.



Figura 32: Resultados a lo largo del tiempo para un conjunto de celdas frontera de la malla gruesa. La concentración estimada se indica por la línea azul, y los valores de la exacta por la línea roja.



Figura 33: Resultados a lo largo del tiempo para un conjunto de celdas interiores de la malla gruesa. La concentración estimada se indica por la línea azul, y los valores de la exacta por la línea roja.



Figura 34: Visualización 2D de los resultados obtenidos por el esquema explícito (arriba), y de la solución exacta propuesta (abajo). La escala de colores se indica al inicio de la subsección 5.2.1

Para llevar a cabo la prueba en la malla gruesa, se utilizó un valor de CFL = 0,01 en la resolución obtenida por el esquema explícito y un valor $\Delta t = 0,00175$ para la solución mediante el método implícito. Resultando un total de 701 y 1712 iteraciones respectivamente en cada caso. A la vista de los resultados obtenidos, observando las gráficas, se puede apreciar que los valores son similares en ambos esquemas.



Figura 35: Visualización 2D de los resultados obtenidos por el esquema implícito (arriba), y de la solución exacta propuesta (abajo). La escala de colores se indica al inicio de la subsección 5.2.1

Mediante una simple observación de las Figuras 31, 32, 33; se aprecia el evidente problema de la inestabilidad del modelo al aplicarse en el mallado grueso. Esto es un problema, debido a que este tipo de mallado es el que se quiere aplicar al momento de utilizar el algoritmo computacional para simular la contaminación del aire en la ciudad de Temuco, que es el objetivo de su desarrollo. En el caso de la visualización 2D de los resultados se observa que el patrón de movimiento de la nube de concentración de las estimaciones, en ambos casos, es similar al resultado exacto propuesto. Sin embargo, aquí se puede apreciar el otro gran problema de la malla refinada, que es la falta de información. Esto se nota al observar los resultados exactos, donde en la visualización 2D de la malla refinada se resalta la presencia de los puntos de alta concentración (tonos anaranjados). Esto que puede solamente parecer un aspecto visual, al momento de realizar la estimación estos puntos no son considerados, lo cual afecta la precisión de los resultados.

Por otro lado, como era esperable, también se presenta el problema de la difusión numérica, que ocasiona la homogeneidad en los resultados estimados en las gráficas en dos dimensiones. Por esta razón, más la inestabilidad producida por la cantidad reducida de celdas, se debe aplicar un equilibrio en el número de iteraciones a realizar, ya que, un número bajo reduce el efecto de la simulación numérica a costo de una mayor inestabilidad, por otro lado, al aumentar las iteraciones las consecuencias son las opuestas.

Celda	$arepsilon_r$ Exp.	$arepsilon_r$ Imp.	Celda	$arepsilon_r$ Exp.	$arepsilon_r$ Imp.			
	Esquina	S	Interiores					
48	0.2462	0.2586	17	3.1097	3.0383			
41	0.5649	0.5579	23	4.8019	4.8133			
65	0.7974	0.7812	34	9.0571	9.0817			
58	0.4223	0.4101	24	2.9056	2.9103			
Frontera			11	0.8336	0.8406			
44	1.3033	1.3013						
6	1.1086	1.1004						
62	1.2683	1.2496						
55	1.6559	1.7251						

Cuadro 6: Error relativo porcentual para un conjunto de celdas de muestra para la malla gruesa. Valores en porcentaje%



Figura 36: Ubicación del conjunto de celdas de prueba en el mallado grueso.
6. Discusión y Conclusiones

Analizando y comparando los resultados mostrados en la visualización 2D, se observa que la estimación realizada por el algoritmo logra imitar el comportamiento de la nube de contaminante, especialmente en lo que se refiere al traslado de la misma, a pesar de los efectos negativos de la difusión numérica en el algoritmo, lo cual produce un descenso en la precisión de los valores obtenidos. Esto se logró tanto en las pruebas realizadas sobre la malla fina como en la malla gruesa, con mejores resultados en el primer caso. El peor desempeño obtenido por los resultados en la malla gruesa se debe principalmente a la inestabilidad del modelo al ser aplicado sobre este tipo de mallado. Situación que se pensaba en evitar aplicando el esquema implícito para estimar los resultados en cada paso de tiempo. Sin embargo, por los resultados visuales, y métricas de estimación del error; se obtuvo que para ambos esquemas los resultados fueron similares entre sí, con algunas diferencias casi imperceptibles.

Si pensamos en el objetivo final de realizar este simulador computacional que consiste en evaluar la contaminación aérea sobre el área urbana de Temuco. Lo ideal es estimar los valores futuros sobre el mallado grueso diseñado para estas pruebas, el que está planificado de tal forma que represente las diferentes zonas de la ciudad. Sin embargo, tras el evidente peor rendimiento en comparación a los resultados que se obtuvo al evaluar sobre el mallado fino; una posible solución es refinar aún más la malla (ver Figura 27). No obstante, aquí aparece otro dilema; cuánto se puede refinar el mallado para que aún represente las zonas de la ciudad como se planteó inicialmente con el menor costo en términos de pérdida de precisión en los valores estimados.

Por otro lado, la inestabilidad temporal puede ser resuelta aplicando esquemas de integración del tiempo que tienen como base las series de tiempo [15]. Estos esquemas permiten utilizar pasos de tiempo más grandes para la resolución sin un gran costo en la precisión de la aproximación de los resultados. Por lo que, el uso de estos tipos de esquemas puede ser una buena alternativa de estudio para solventar las perturbaciones ocasionadas por la inestabilidad en el mallado grueso. Conviene considerar que, disminuir la cantidad de pasos de tiempo significa una reducción en el efecto ocasionado por la difusión numérica en el modelo.

Para un futuro cercano, se tiene planteado realizar pruebas con funciones fuente periódicas que representen los ciclos de emisión del material particulado en la ciudad. Una posible idea es usar funciones impulso, similares a las utilizadas en las pruebas realizadas, las que estarán ubicadas en distintos puntos de la región Ω con la diferencia que en vez que se activen en un tiempo determinado, estarán sujetas a una función periódica (en principio una función sinusoidal) que se encargará de establecer el ciclo.

El siguiente paso, para profundizar el simulador, será aplicar datos meteorológicos para las simulaciones, lo ideal es que cada celda de la malla tengan distintos valores meteorológicos, ya que están ubicadas en diferentes condiciones geográficas, como el caso de las celdas que encierran el cerro Ñielol que tiene una altura de 335 metros sobre el nivel del mar, donde las condiciones de presión y viento son distintas a otros puntos de la región ubicados en zonas más bajas. En un principio, estas variables serán estimadas según su altura y tomando como base los valores registrados por las estaciones de monitoreo del SINCA.

En este punto, se podrían realizar pruebas con un **coeficiente de difusión** de acuerdo a la realidad física del problema, que estará basado en los principios de la **Teoría Cinética de los Gases** aplicada al caso de **nubes de partículas** [23], debido a que se ha logrado establecer que las partículas que componen estas nubes poseen un movimiento aleatorio producto de las colisiones con las moléculas del fluido que las contiene, en este caso el aire. Este tipo de movimiento aleatorio es conocido como **movimiento Browniano**.

$$\mathbb{D} = \frac{K_B T C_c}{3\pi\mu d_P} \tag{83}$$

Donde K_B corresponde a la constante de Boltzmann que equivale a $1,380648 \times 10^{23} [J/K]$, T es la temperatura absoluta, μ es la viscosidad del medio (aire), d_P es el diámetro de las partículas suspendidas expresadas en metros. Por último, C_c es el factor de corrección de Cunningham que es una variable adimensional que permite calcular el efecto del arrastre sobre las partículas.

Otro aspecto clave a considerar en futuras pruebas es establecer los valores de concentración para la **condición inicial** en cada una de las celdas. Aquí es necesario apoyarse en el **inventario de emisiones** [27], el cual nos permitirá estimar cuánta concentración de contaminante es emitida en cada zona de la ciudad. Estos valores, deben ser tratados cuidadosamente para ser llevados a las celdas, y serán acompañados con valores de concentración obtenidos en cada una de las tres estaciones del SINCA para el momento que se establezca como punto de inicio para estas pruebas.

Finalmente, para cuando se supere esta etapa de pruebas con datos reales, y condiciones de frontera e iniciales establecidas; se pasará a la etapa de simulación de datos donde será necesario utilizar modelos de meteorología para alimentar el simulador computacional. En este punto, las estimaciones resultantes se podrían comparar con las mediciones obtenidas por la red de sensores y de acuerdo a estos datos ir ajustando las funciones del modelo para así estimar valores de manera más precisa.

7. Bibliografía

Referencias

- DEHGAN, M., «Numerical solution of the three-dimensional advection-diffusion equation», Applied Mathematics and Computation, 150, pág 5-19, (2004)
- [2] ALBANY R., DUDA F., PIMENTEL L.G., «On the modeling of atmospheric pollutant dispersion during a diurnal cycle: A finite element study», Atmospheric Environment, 104, pág 19-27, (2015)
- [3] COSTA C., TIRABASSI T., VILHENA M., MOREIRA D., «A general formulation for pollutant dispersion in the atmosphere», *Journal of Engineering Mathematics*, 74, pág 159-173, (2012)
- [4] PEPPER D.W., BAKER A.J., «A high-order accurate numerical algorithm for threedimensional transport prediction», Computers & Fluids, 8, pág 371-390, (1980)
- [5] OSTROMSKY T., ZLATEV Z., «Parallel Implementation of a Large-Scale 3-D Air Pollution Model», International Conference on Large-Scale Scientific Computing, pág 309-316, (2001)
- [6] ZLATEV Z., DIMOV I., Computational and Numerical Challenges in Environmental Modelling, 1st edition, Elsevier Science, Elsevier, Amsterdam, 2006
- [7] LEELÖSSY A., MOLNÁR F., IZSÁK F., HAVASI A. LAGZI I. MÉSZÁROS R., «Dispersion modeling of air pollutants in the atmosphere: a review», *Central European Journal of Geosciences*, 6, pág 257-278, (2014)
- [8] AGARWAL R.C., HALT D.W., «A compact High-Order unstructured grid methods for the solution os Euler equations», *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **31**, pág 121-147, (1999)
- [9] WU Y., LIU J., ZHAI J., CONG L., WANG Y., MA W., ET AL., «Comparison of dry and wet deposition of particulate matter in near-surface waters during summer», *PLOS One* 13: e0199241, 6, (2018)
- [10] MARIRAJ MOHAN S., «An overview of particulate dry deposition: measuring methods, deposition velocity and controlling factors» International Journal of Environmental Science and Technology, 13, pág 387–402, (2016)
- [11] ROACHE P., «Code Verification by the Method of Manufactured Solutions», Journal of Fluids Engineering, 124, pág 4-10, American Society of Mechanical Engineers (2001)
- [12] KARADIMOU D. P., MARKATOS N. C., «Study of the Numerical Diffusion in Computational Calculations.» Numerical Simulations in Engineering and Science, pág 65, IntechOpen (2018)
- [13] DE SOUZA BRAUN M. P., MINETO A. T., NAVARRO H. A., CABEZAS-GÓMEZ L., DA SILVA R. C., «The effect of numerical diffusion and the influence of computational grid over gas-solid two-phase flow in a bubbling fluidized bed.» *Mathematical and Computer Modelling*, **52**, pág 1390–1402, Elsevier (2010)

- [14] EYMARD R., GALLOUET T., HERBIN R., «Finite Volume Methods» Handbook of numerical analysis, 7, pág 713–1018, Elsevier, (2000)
- [15] TAYEH C., MITTAL H.V.R., GUEVEL Y., CADOU J.M., «Numerical time perturbation and resummation methods for level-set functions » Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, Elsevier, (2021)
- [16] MAZUMDER S., Numerical Methods for Partial Differential Equations, 1st edition, Academic Press, Elsevier, Londres, (2015)
- [17] LEVEQUE R., Finite Volumes Methods for Hiperbolic Equations, Cambridge University Press, Cambridge (2002)
- [18] CHAPRA S., CANALE R., Numerical methods for engineers, 5th Edition, Mcgraw-Hill, New York (2006)
- [19] JACOBSON M.Z. Fundamentals of Atmospheric Modelling, Cambridge University Press, Cambridge (1999)
- [20] BIRD R.B., STEWART W., LIGHTFOOT N. Transport Phenomena, 2nd Edition, Limusa-Wiley (2002)
- [21] CALDER K., Atmospheric diffusion of Particulate Material, considered as boundary value problem., U.S. Army Chemical Corps Biological Laboratories (1960)
- [22] HESS I., «Análisis numérico de un problema inverso originado en el fenómeno de contaminación urbana.» Tesis de magíster. Universidad del Bío Bío, Chile. (2016)
- [23] EINSTEIN A., FÜRTH R., COWPER A.D., Insvestigation on the Theory of the Brownian Movement, 1st edition, Dover Publications, Inc., USA, (1956)
- [24] DTO-12 09-MAY-2011 **MINISTERIO** DEL **MEDIO** AMBIENTE, Lev Chile _ Biblioteca del Congreso Nacional. Santiago Chile. de https://www.leychile.cl/Navegar/index.html?idNorma=1025202
- [25] DTO-59 25-MAY-1998 MINISTERIO SECRETARÍA GENERAL DE LA PRESIDEN-CIA (1998), Comisión Nacional del Medio Ambiente, Ley Chile - Biblioteca del Congreso Nacional. Santiago de Chile. https://www.leychile.cl/Navegar/index.html?idNorma=99434
- [26] Preguntas frecuentes Sistema de Información Nacional de Calidad del Aire. https://sinca.mma.gob.cl/index.php/pagina/index/id/faq. Consultado el 26 de Agosto de 2019.
- [27] Actualización del Inventario de Emisiones atmosféricas para las comunas de Temuco y Padre las Casas, año base 2017 SEREMI del Medio Ambiente, Región de la Araucanía. SICAM (2018)
- [28] Cambio Climático, Organización de Naciones Unidas https://www.un.org/es/globalissues/climate-change. Consultado el 26 de Julio de 2021.
- [29] Conjugate Gradient Method, Gael Lederrey. https://gist.github.com/glederrey

Índice de figuras

1.	Distribución anual del inventario de emisiones del año 2017. Fuentes puntuales hace alusión a chimenea o ducto que produce una emisión de contaminantes equivalente a 1000 $m^3/hora$, Fuentes de área se refiere a contaminación por área geográfica de cualquier tipo. Fuentes móviles se considera a la emisión de	
	vehículos motorizados.	2
2. 3.	Bosquejo del dominio físico que representa la región de estudio Volumen de control para el balance de materia en el proceso de advección del contaminante.	10
4. 5.	Mecanismo de difusión de la sustancia A en la lámina	13
	y	17
6.	La celda par actúa como una celda fantasma en la interface donde no existe una celda vecina. En este caso, vemos cómo interactúa la celda 59 sobre la celda	
7.	frontera 48	17
	salientes de los vectores de flujo y normal	24
8.	Visualización del vector l_f en un bosquejo de dos celdas adyacentes	25
9.	Representación gráfica del flujo en los vertices, y como se relaciona con los vertices de las celdas que intersectan en él	27
10.	Visualización de una celda adyacente a la frontera. Se observa que el vector normal de la interface fronteriza <i>B</i> apunta hacia afuera.	29
11.	Descripción gráfica del método de Euler	33
12.	Estructura del mallado grueso. Los puntos rojos denotan los vertices, los núme-	26
19	ros en el centro de las celdas indican el indice de estas	30 27
10. 17	Colda triangular de vártices $A B C$	38
15	Diagrama de fluio para la interconectividad de celdas vecinas	40
16.	Diagrama general del simulador de material particulado en su forma explícita.	42
17.	Diagrama general del simulador de material particulado en su forma implícita.	43
18.	Diagrama de flujo de la estimación de la concentración en los vértices de la malla.	43
19.	Diagrama de flujo de la estimación del flujo en las celdas.	45
20.	Diagrama de flujo de la rutina para la búsqueda de las celdas pares y lados pares	48
21.	Escala de color para los diagramas de visualización en dos dimensiones	53
22.	Resultados del esquema explícito en el tiempo en la malla fina para la Prueba	
23.	 Se compara el resultado estimado (arriba), con el resultado exacto (abajo). El codigo de colores puede ser consultado al inicio de la subsección. Resultados del esquema implícito en el tiempo en la malla fina para la Prueba Se compara el resultado estimado (arriba), con el resultado exacto (abajo). 	53
	El codigo de colores puede ser consultado al inicio de la subsección	54

24.	Resultados a lo largo del tiempo para las celdas esquinas de la malla. En la parte superior se ubican las esquinas noroeste y noreste, al inferior las esquinas surceste y surceste. La concentración estimada se indica por la línea azul, y los	
	valores de la exacta por la línea roja	56
25.	Resultados a lo largo del tiempo para las celdas de la frontera norte de la malla, de oeste a este. La concentración estimada se indica por la línea azul, y	
	los valores de la exacta por la línea roja	56
26.	Resultados a lo largo del tiempo para las celdas de la frontera sur de la malla, de oeste a este. La concentración estimada se indica por la línea azul, y los	
27.	valores de la exacta por la línea roja	57
	dirección norte-sur) y este (abajo en dirección sur-norte) de la malla, de oeste a este. La concentración estimada se indica por la línea azul, y los valores de	
	la exacta por la línea roja	57
28.	Resultados a lo largo del tiempo para las interiores ubicadas en el sector oeste de la malla La concentración estimada se indica por la línea azul, y los valores	
	de la exacta por la línea roja	58
29.	Resultados a lo largo del tiempo para las interiores ubicadas en el sector este	
	de la malla. La concentracion estimada se indica por la linea azul, y los valores de la exacta por la línea roja.	58
30.	Resultados a lo largo del tiempo para las celdas ubicadas cercanas al centro de la malla. La concentración estimada se indica por la línea azul, y los valores de	00
~ .	la exacta por la línea roja.	59
31.	Resultados a lo largo del tiempo para las celdas esquinas de la malla gruesa. La concentración estimada se indica por la línea azul, y los valores de la exacta	
3 0	por la línea roja	61
52.	gruesa. La concentración estimada se indica por la línea azul, y los valores de	
00	la exacta por la línea roja	61
JJ.	Resultados a lo largo del tiempo para un conjunto de celdas interiores de la malla gruesa. La concentración estimada se indica por la línea azul, v los valores	
	de la exacta por la línea roja.	62
34.	Visualización 2D de los resultados obtenidos por el esquema explícito (arriba), y de la solución exacta propuesta (abaio). La escala de colores se indica al inicio	
	de la subsección 5.2.1	62
35.	Visualización 2D de los resultados obtenidos por el esquema implícito (arriba), y de la solución exacta propuesta (abajo). La escala de colores se indica al inicio	
9.6	de la subsección 5.2.1	63
36.	Ubicación del conjunto de celdas de prueba en el mallado grueso.	64

Todas las imágenes son de elaboración propia. A excepción de la Figuras 30 [27] y 11 [18].

Índice de cuadros

1.	Niveles de concentración de $PM2,5$ que determinan las situaciones de emer-	
	gencia embientales en Chile	7
2.	Niveles de concentración de $PM10$ que determinan las situaciones de emergen-	
	cia embientales en Chile	7
3.	Información de la cantidad de ítems relacionados a la malla generada	37
4.	Error relativo porcentual para un conjunto de celdas de muestra para la malla	
	fina. Valores en porcentaje $\%$	60
5.	Error relativo porcentual para un conjunto de celdas de muestra para la malla	
	fina. Valores en porcentaje $\%$	60
6.	Error relativo porcentual para un conjunto de celdas de muestra para la malla	
	gruesa. Valores en porcentaje %	64