

# Ποιότητα Ατμοσφαιρικού Περιβάλλοντος Υ3306

Αν. Καθηγήτρια Μ. Ασημακοπούλου

Γραφείο Γ3

[masim@phys.uoa.gr](mailto:masim@phys.uoa.gr)

Βιβλία:

ΦΥΣΙΚΗ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ, ΠΑΥΛΟΣ ΚΑΣΣΩΜΕΝΟΣ (Κωδ. Ευδόξου: **68386041**)

ΑΕΡΙΑ ΡΥΠΑΝΣΗ, ΤΡΙΑΝΤΑΦΥΛΛΟΥ Γ. ΑΘΑΝΑΣΙΟΣ (Κωδ. Ευδόξου: **68396375**)

ΕΛΕΓΧΟΣ ΑΕΡΙΑΣ ΡΥΠΑΝΣΗΣ C.D.COOPER, F.C.ALLEY

# Ενότητες

- Εισαγωγή στα μοντέλα διάχυσης και διασποράς ρύπων: Περιγραφή αρχών και βασικών παραμέτρων. Στοιχεία εισόδου στα μοντέλα. Εκπομπές. Εφαρμογές.
- Μεθοδολογία μετρήσεων φυσικών παραμέτρων και ατμοσφαιρικών ρύπων. Μετρήσεις Φυσικής Ατμόσφαιρας. Μετρήσεις ατμοσφαιρικής ρύπανσης.
- Μηχανισμοί καθαρισμού της ατμόσφαιρας. Αέρια ρύπανση σε αστικές περιοχές. Ποιότητα ατμοσφαιρικού περιβάλλοντος και αστικό μικροκλίμα.

- Πότε αρχίζει η επιστημονική κοινότητα να δείχνει ενδιαφέρον για τους ρύπους?
- Πως γίνεται η απελευθέρωση ρύπων?
- Ποιες είναι οι δράσεις που ενεργοποιούνται?
- Από τι εξαρτάται η συσσώρευση ρύπων σε μια περιοχή?
- Από τι εξαρτάται η διασπορά ρύπων

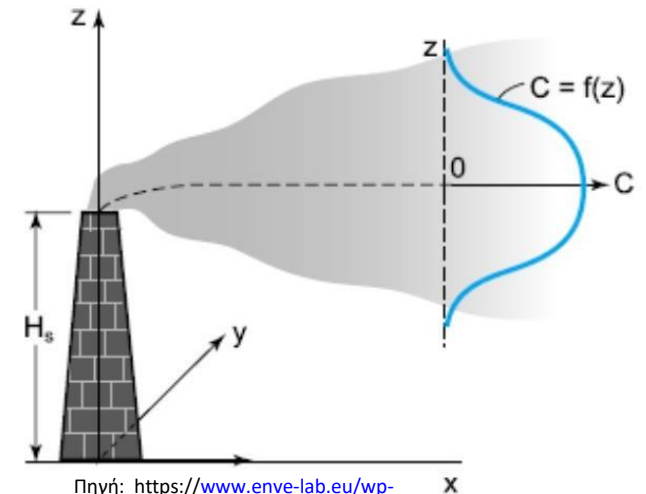
# Βασικά Ερωτήματα

- Συνεισφορά συγκεκριμένης πηγής σε συγκεντρώσεις συγκεκριμένης τοποθεσίας μακριά από την πηγή
- Αποτελεσματική στρατηγική για τη μείωση των ρύπων κάτω από τα πρότυπα ποιότητας του αέρα
- Επίδραση στην ποιότητα της ατμοσφαιρικής ρύπανσης λόγω πρόσθεσης ή αφαίρεσης πηγής
- Σωστός σχεδιασμός και τοποθέτηση πηγών για ελαχιστοποίηση περιβαλλοντικών επιπτώσεων
- Πρόβλεψη για την ποιότητα του αέρα με υπάρχουσες και μελλοντικές ανθρωπογενείς δραστηριότητες

- Πρωτογενής ρύπανση
  - Ανθρώπινες δραστηριότητες σχετικές με παραγωγή ενέργειας και εκμετάλλευση της
- Δευτερογενής/Φωτοχημική ρύπανση – Συγκεντρώσεις όζοντος
  - Σχηματισμός στην ατμόσφαιρα από φωτοχημικούς μετασχηματισμούς πρωτογενών ρύπων και πτητικών οργανικών ενώσεων (άμεση εκπομπή από αστικές περιοχές)
  - Άμεση εκπομπή
  - Το πιο σημαντικό πρόβλημα σε σχέση με την ποιότητα αέρα στις αστικές περιοχές
  - Απαιτείται ακριβής περιγραφή:
    - Εκπομπών των πρόδρομων χημικών ενώσεων
    - Φαινομένων μεταφοράς, διασποράς, ανάμιξης, μετασχηματισμού, απομάκρυνσης
- Εργαλεία
  - Εκστρατείες μετρήσεων
    - Συλλογή πολλών μετρήσεων για την κατάσταση της ατμόσφαιρας/ παροχή δεδομένων αξιολόγησης μοντέλων
  - Εργαστηριακές έρευνες
    - Πληροφορίες για ατμοσφαιρικά φαινόμενα και παραμέτρους μαθηματικών μοντέλων
  - Μαθηματικές προσομοιώσεις
    - Μαθηματική περιγραφή ατμοσφαιρικών διεργασιών

# Διασπορά ρύπων

- Εξαρτάται
  - μετεωρολογικές συνθήκες (διεύθυνση και ταχύτητα του ανέμου, ένταση ατμοσφαιρικής τύρβης, θερμοκρασία και υγρασία της ατμόσφαιρας, είδος ατμοσφαιρικής ευστάθειας)
  - χαρακτηριστικά της πηγής ρύπανσης
  - φύση του ρύπου (είδος και ποσότητα)
  - Τοπογραφία
- Ικανότητα διασποράς της ατμόσφαιρας δεν είναι ούτε σταθερή ούτε ανεξάντλητη
- Μετρήσεις ποιότητας ατμοσφαιρικού περιβάλλοντος ή μοντελοποίηση?
  - Μελέτη μελλοντικών εγκαταστάσεων
  - Μικρότερο κόστος
  - Δυνατότητα προσομοιώσεων πολλαπλών πηγών
  - Επαναληψιμότητα (αξιολόγηση διαφορετικών σεναρίων)



Πηγή: [https://www.enve-lab.eu/wp-content/uploads/2018/12/Μάθημα-12\\_Διασπορά-ρύπων.pdf](https://www.enve-lab.eu/wp-content/uploads/2018/12/Μάθημα-12_Διασπορά-ρύπων.pdf)



Πηγή: [http://www.mie.uth.gr/ekp\\_yliko/dispersion.pdf](http://www.mie.uth.gr/ekp_yliko/dispersion.pdf)

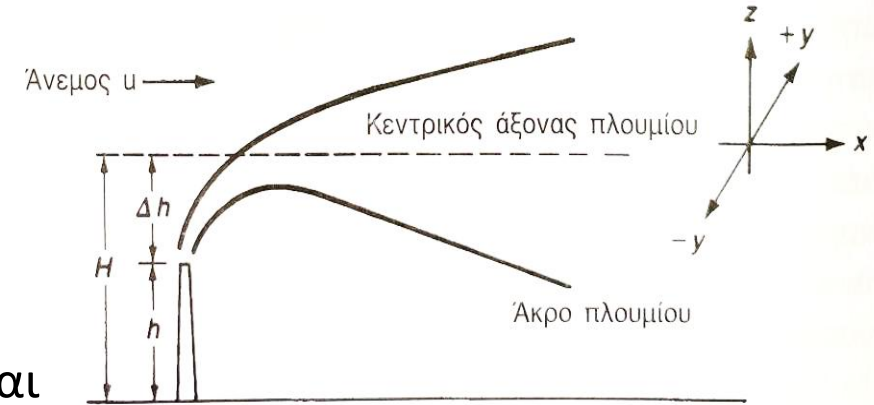
# Διασπορά ρύπων – Ατμοσφαιρικά μοντέλα

- Διασπορά

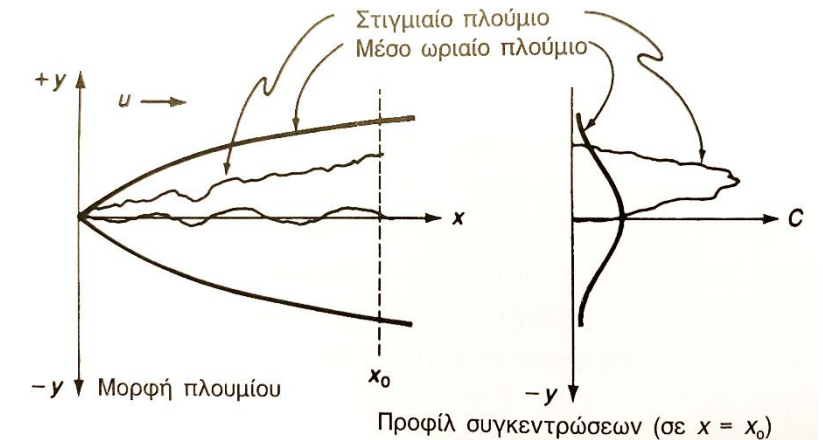
- Περιγραφή πολύπλοκων και πολυπαραμετρικών μαθηματικών εξισώσεων
- Συνεχές ρεύμα ρύπων απελευθερώνεται σε σταθερό άνεμο στην ανοιχτή ατμόσφαιρα
  - Ανύψωση, καμπύλωση και κίνηση με μέσο άνεμο, αραίωση και μεταφορά ρύπων μακριά
    - Εξαρτώνται από: φυσικά χαρακτηριστικά της καμινάδας, διαφορά θερμοκρασίας καυσαερίων και αέρα περιβάλλοντος, ταχύτητα καυσαερίων, ευστάθεια ατμόσφαιρας, ταχύτητα ανέμου

- Ατμοσφαιρικά Μοντέλα διασποράς

- Παραδοχές
- Απαλοιφή όρων για την απλοποίηση των σχέσεων
- Περιγραφή φυσικοχημικών διεργασιών στην ατμόσφαιρα και της χωροχρονικής κατανομής των ρύπων



Πηγή: Cooper and Alley, Έλεγχος Αέριων Ρύπανσης



Πηγή: Cooper and Alley, Έλεγχος Αέριων Ρύπανσης

# Διασπορά ρύπων – Ατμοσφαιρικά μοντέλα

- Τύποι ατμοσφαιρικών μοντέλων υπολογισμού διασποράς ρύπων
  - Φυσικά μοντέλα (προβλήματα στην μοντελοποίηση της πραγματικής κλίμακας της ροής του αέρα)
  - Μαθηματικά Μοντέλα
    - Προγνωστικά
      - Αναλυτικά ή εμπειρικά μοντέλα
        - Μοντέλο θυσάνου Gauss (αδρανής ρύποι)
      - Αριθμητικά μοντέλα (χημικά μετασχηματιζόμενοι ρύποι, αναλυτικές πληροφορίες)
        - Ουλεριανά (μεταβολές στις συγκεντρώσεις σε σχέση με ένα σταθερό σημείο)
        - Λαγκρασιανά (πορεία ρύπων στο χώρο)
    - Διαγνωστικά
    - Στατιστικά Μοντέλα (βραχυπρόσθεσμες προβλέψεις, όχι για επιρροή μεταβολών στις πηγές, ελλιπής πληροφορία)



# Διασπορά ρύπων – Ατμοσφαιρικά μοντέλα

- Βάση της μαθηματικής αποτύπωσης ατμοσφαιρικής διάχυσης: υπολογισμός της συγκέντρωσης μιας ουσίας ως συνάρτηση του χώρου και του χρόνου, λαμβάνοντας υπόψη τη μέση ροή ανέμου και την ατμοσφαιρική τύρβη.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(uC) + \frac{\partial}{\partial x}\left(K \frac{\partial C}{\partial x}\right)$$

- Γκαουσιανό μοντέλο - Μοντέλο θυσάνου Gauss

- Παραδοχές:

- Συνθήκες σταθερής κατάστασης - ατμόσφαιρα ομογενής ως προς τις συνθήκες ευστάθειας ή αστάθειας
- Σταθερός και ομογενής με το ύψος άνεμος (ροή σταθερή σε όλη την έκταση του καπνοθύσανου)
- Σταθερή διαχυτότητα και χαρακτηριστικά ατμόσφαιρας σε όλο το μήκος της διασποράς
- Το επίπεδο του εδάφους δεν μπορεί να απορροφήσει ρύπους / δεν υπάρχει εναπόθεση υλικού
- Ο περιβάλλον χώρος είναι επίπεδος και χωρίς ψηλά εμπόδια
- Οι ρύποι είναι αδρανείς και δεν λαμβάνουν χώρα χημικές αντιδράσεις/χημικοί μετασχηματισμοί
- το διαχεόμενο υλικό είναι αέριο ή σωματιδιακή ύλη <20μm

# Διασπορά ρύπων – Ατμοσφαιρικά μοντέλα

- Γκαουσιανό μοντέλο - Μοντέλο θυσάνου Gauss

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp \left[ -\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2} \right]$$

*C*: συγκέντρωση ρύπου

*Q*: ρυθμός εκπομπής

*u*: ταχύτητα ανέμου (διεύθυνση *x*)

$\sigma_y, \sigma_z$ : συντελεστές διασποράς (διεύθυνση *y, z*)

- Περιορισμοί
  - Συνθήκες μεγάλης αστάθειας (τυρβώδης ροή στο οριακό στρώμα και εμφάνιση έντονα ανοδικών και καθοδικών κινήσεων του αέρα) – ο θύσανος κινείται προς το έδαφος ή προς τη βάση του οριακού στρώματος ανάλογα με τη ροή
  - Εκπομπές κοντά στο έδαφος (μεταβολή της ταχύτητας του ανέμου και της δομής της τύρβης)

# Στόχος Μοντέλου

- Υπολογισμός της συγκέντρωσης ενός ρύπου σε κάθε σημείο του χώρου [C(x,y,z)]

Για την επίτευξη του στόχου χρειάζεται:

- Υπολογισμός της οριζόντιας συνιστώσας (u) της ταχύτητας του ανέμου στο ύψος του χείλους της καμινάδας
- Υπολογισμός της κατακόρυφης ταχύτητας εκροής των καυσαερίων ( $u_s$ ) από την πηγή-καμινάδα
- Υπολογισμός του ενεργού ύψους (H) του θυσάνου
- Απόσταση (xf) κατά μήκος του άξονα xx' του θυσάνου στην οποία παρατηρείται η μέγιστη ανύψωση του θυσάνου (ενεργό ύψος)
- Προσδιορισμός της ευστάθειας ή αστάθειας της ατμόσφαιρας
- Προσδιορισμός μηχανισμού ανύψωσης των ρύπων (άνωση ή ορμή)
- Υπολογισμός της συγκέντρωσης του ρύπου σε κάθε σημείο του χώρου (x,y,z)

# Μοντέλο Θυσάνου (Gauss)

- Χρήση μοντέλων στα οποία η κατανομή των ρύπων θεωρείται κανονική (gauss). Πιο ρεαλιστική απεικόνιση της διασποράς σε στάσιμη ατμόσφαιρα.

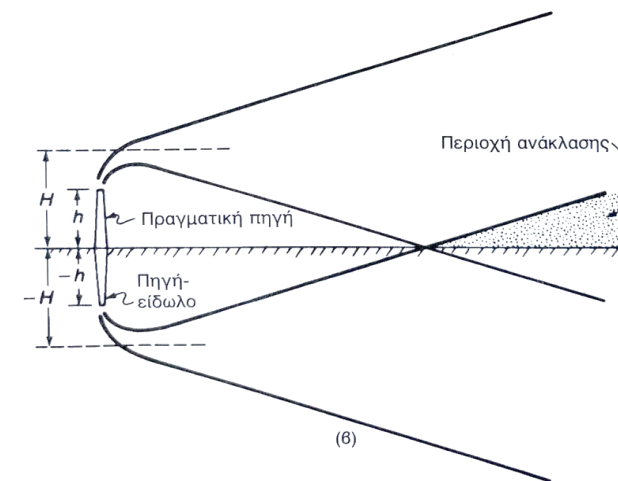
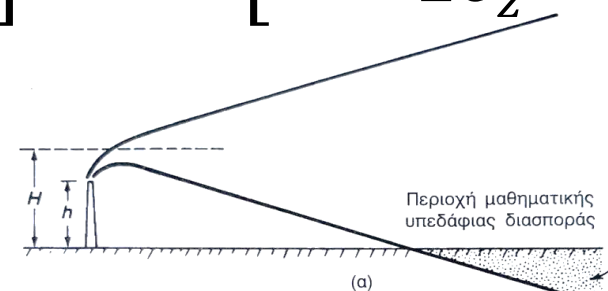
$$c(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_z u} \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right] \left[ \exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right]$$

$c(x, y, z)$  : συγκέντρωση αέριου ρύπου

$Q$  : ρυθμός εκπομπής ρύπου (μg/s)

$\sigma_y, \sigma_z$  : τυπικές αποκλίσεις της κατανομής από τις διευθύνσεις  $y$  και  $z$

$H$  : αποτελεσματικό ύψος εκπομπής ( $H=h+\Delta h$  όπου  $h$ =φυσικό ύψος της καμινάδας και  $\Delta h$ = ανύψωση του πλουμίου)



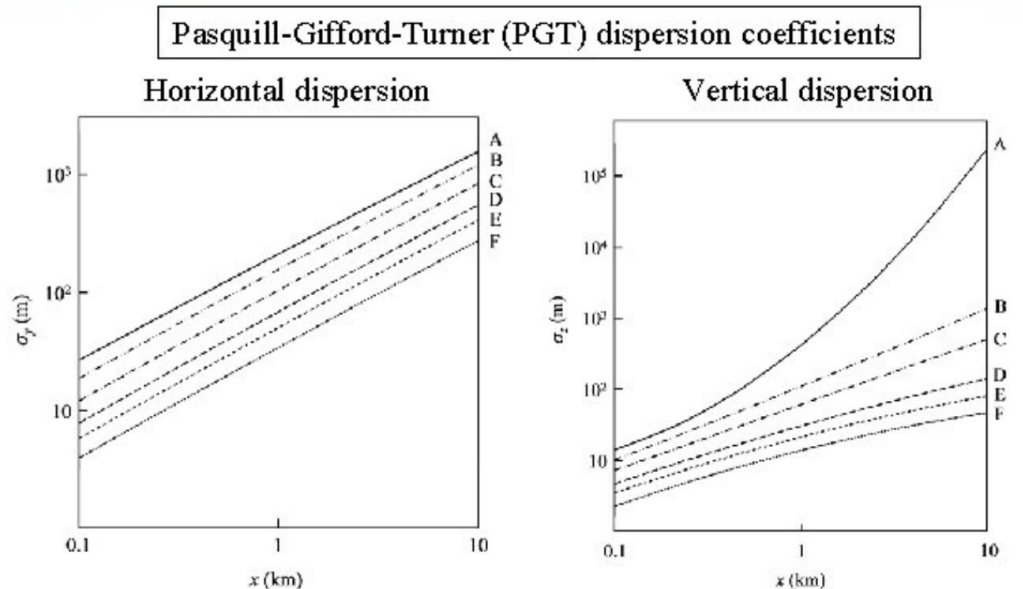
# Μερικές γενικές σχέσεις του γκαουσιανού μοντέλου

- Η συγκέντρωση προς την κατεύθυνση του ανέμου και σε κάθε θέση είναι ανάλογη της ισχύος της πηγής
- Η συγκέντρωση προς την κατεύθυνση του ανέμου στο επίπεδο του εδάφους είναι γενικά αντιστρόφως ανάλογη της ταχύτητας του ανέμου
- Εξαιτίας της αύξησης των παραμέτρων διασποράς όσο η απόσταση προς την κατεύθυνση του ανέμου αυξάνει, η καθ' ύψος συγκέντρωση του κεντρικού άξονα του πλουμίου μειώνεται καθώς αυξάνει το  $x$
- Οι παράμετροι διασποράς αυξάνονται με την αύξηση του στροβιλισμού της ατμόσφαιρας (αστάθεια)
- Η μέγιστη συγκέντρωση στο επίπεδο το εδάφους μειώνεται καθώς το ενεργό ύψος της καμινάδας αυξάνεται

# Κατηγορίες ατμοσφαιρικής σταθερότητας

Γνωρίζουμε ότι:

- Καλή κατακόρυφη ανάμειξη = Ασταθής αέρας
- Παράμετροι διασποράς = ισχυρές συναρτήσεις της ατμοσφαιρικής ευστάθειας και της απόστασης κατά τη φορά του ανέμου



A: very unstable, B: unstable, C: moderately unstable, D: neutral, E: stable, F: very stable  
Source: D.B. Turner, « Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates » (1970)

6 κατηγορίες ατμοσφαιρικής ευστάθειας: A-F  
(A: πιο ασταθής)

Εξισώσεις προσαρμοσμένες στις καμπύλες  
(Martin, 1976)

$$\sigma_y = ax^b$$

$$\sigma_z = cx^d + f$$

a,b,c,d,f: σταθερές που εξαρτώνται από την κατηγορία ευστάθειας και την απόσταση x

# Κατηγορίες ατμοσφαιρικής σταθερότητας

## Κατηγορίες ατμοσφαιρικής ευστάθειας

Wind speed (m s <sup>-1</sup> ) at 10 m	Day			Night	
	Solar radiation <sup>b</sup>			Cloudiness <sup>c</sup>	
	Strong	Moderate	Weak	≥ 4/8	≤ 3/8
< 2	A	A or B	B	F	F
2 to 3	A or B	B	C	E	F
3 to 5	B	B or C	C	D	E
5 to 6	C	C or D	D	D	D
> 6	C	D	D	D	D

(a) Stability categories: A (very unstable), B (unstable), C (moderately unstable), D (neutral), E (stable), F (very stable).

(b) Solar radiation: strong (> 700 W m<sup>-2</sup>), moderate (between 350 and 700 W m<sup>-2</sup>), weak (< 350 W m<sup>-2</sup>)

(c) Cloudiness: fraction of the sky covered by clouds.

$$\sigma_y = ax^b$$

$$\sigma_z = cx^d + f$$

Τιμές σταθερών

Turner, 19

Ευστάθεια	a	b	x < 1 km			x > 1 km		
			c	d	f	c	d	f
A	213	0.894	440.8	1.941	9.27	459.7	2.094	-9.6
B	156	0.894	106.6	1.149	3.3	108.2	1.098	2.0
C	104	0.894	61.0	0.911	0	61.0	0.911	0
D	68	0.894	33.2	0.725	-1.7	44.5	0.516	-13.0
E	50.5	0.894	22.8	0.678	-1.3	55.4	0.305	-34.0
F	34	0.894	14.35	0.740	-0.35	62.6	0.180	-48.6

Martin, 1976

# Παράδειγμα

Καμινάδα εκπέμπει  $110\text{g/s}$  NO σε φυσικό ύψος  $80\text{m}$ , όπου η ταχύτητα του ανέμου είναι  $5\text{m/s}$  σε συννεφιασμένο ουρανό το πρωί. Η ανύψωση του πλουμίου είναι  $20\text{m}$ .

α. Να υπολογιστεί η συγκέντρωση στον κεντρικό άξονα στο επίπεδο του εδάφους σε απόσταση  $2\text{km}$  από την καμινάδα

β. Να υπολογιστεί η συγκέντρωση  $100\text{ m}$  από τον κεντρικό άξονα στην ίδια απόσταση

**Λύση**



# Παράδειγμα

Για ρυθμό εκπομπής  $200\text{g/s}$ , ενεργό ύψος καμινάδας  $80\text{m}$  και ταχύτητα ανέμου  $8\text{m/s}$  σε συνθήκες ισχυρής ηλιοφάνειας, υπολογίστε την συγκέντρωση στο έδαφος ανενεργού χημικά ρύπου α)  $1000\text{m}$  ευθεία προς την κατεύθυνση του ανέμου και β)  $5000\text{m}$  προς την κατεύθυνση του ανέμου.

## Λύση

# μοντέλα διάχυσης και διασποράς ρύπων

- Ζητούμενο: Υπολογισμός της συγκέντρωσης ρύπων σε σημεία ενδιαφέροντος – γνωρίζοντας την εκπομπή(πηγές)
  - Περιγραφή πηγών
  - Γεωγραφική απόσταση από το σημείο μέτρησης
  - Τοπογραφία περιοχής
  - Τρόπος μεταφοράς ρύπων (διασπορά)
- Φωτοχημικά μοντέλα κυψελίδας
  - Απλά
  - Εύκολη εφαρμογή σε σχέση με τα τρισδιάστατα
  - Σχετικά ακριβή
  - Γρήγορα
- Περιγραφή τυρβώδους διάχυσης ανάλογα με το σύστημα συντεταγμένων
  - Μέθοδος Euler (σταθερό σύστημα συντεταγμένων)
  - Μέθοδος Lagrange (σε σχέση με το μεταφερόμενο μέσο)

# Εισαγωγικά

- Χρήση της εξίσωσης συνέχειας/διατήρηση μάζας των χημικών ενώσεων
  - Μοντέλα κυψελίδας (box models)
  - Μοντέλα ριπής (puff models)
- Ατμοσφαιρικά φαινόμενα που επηρεάζουν τις συγκεντρώσεις των χημικών ενώσεων σε μοντέλα κυψελίδας
  - Χωρική και χρονική κατανομή εκπομπών
  - Αποτελεσματικότητα της ανάμιξης των εκπομπών σε τοπικό επίπεδο (διευθυνση)
  - Δυνατότητα εξαερισμού της κυψελίδας στην κορυφή της (ταχύτητα)
  - Μεταφορά από το μέσο άνεμο
  - Εισροή μάζας από την κορυφή του αναμεμειγμένου στρώματος

# Μοντέλα Κυψελίδας – Μέθοδος Euler

- Υποθέσεις μοντέλων κυψελίδας

- Οι εκπομπές αναφέρονται στην συγκεκριμένη περιοχή και είναι ομογενώς κατανεμημένες

$$\frac{\partial Q}{\partial x} = \frac{\partial Q}{\partial y} = 0$$

- Γίνεται γρήγορη και ομοιόμορφη ανάμειξη των εκπομπών στην κυψελίδα

$$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial y} = \frac{\partial C}{\partial z} = 0$$

- Τύποι Φωτοχημικών μοντέλων

- Φωτοχημικό μοντέλο μιας κυψελίδας με σταθερό ύψος
- Φωτοχημικό μοντέλο μιας κυψελίδας με μεταβλητό ύψος
- Φωτοχημικό μοντέλο πολλών κυψελίδων

# Μοντέλα Κυψελίδας – Μέθοδος Euler

- Φωτοχημικό μοντέλο μιας κυψελίδας με σταθερό ύψος
  - Ισοζύγιο μάζας μέσα στην κυψελίδα
  - Ρυθμός μεταβολής της μάζας της χημικής ένωσης
  - Κάτω όριο κυψελίδας: γη
  - Άνω όριο κυψελίδας : βάση μιας αναστροφής  $H(t)$

$$\frac{dm_i}{dt} = \sum source - \sum sinks = F_{i,in} + E_i + P_i - F_{i,out} - L_i - D_i$$

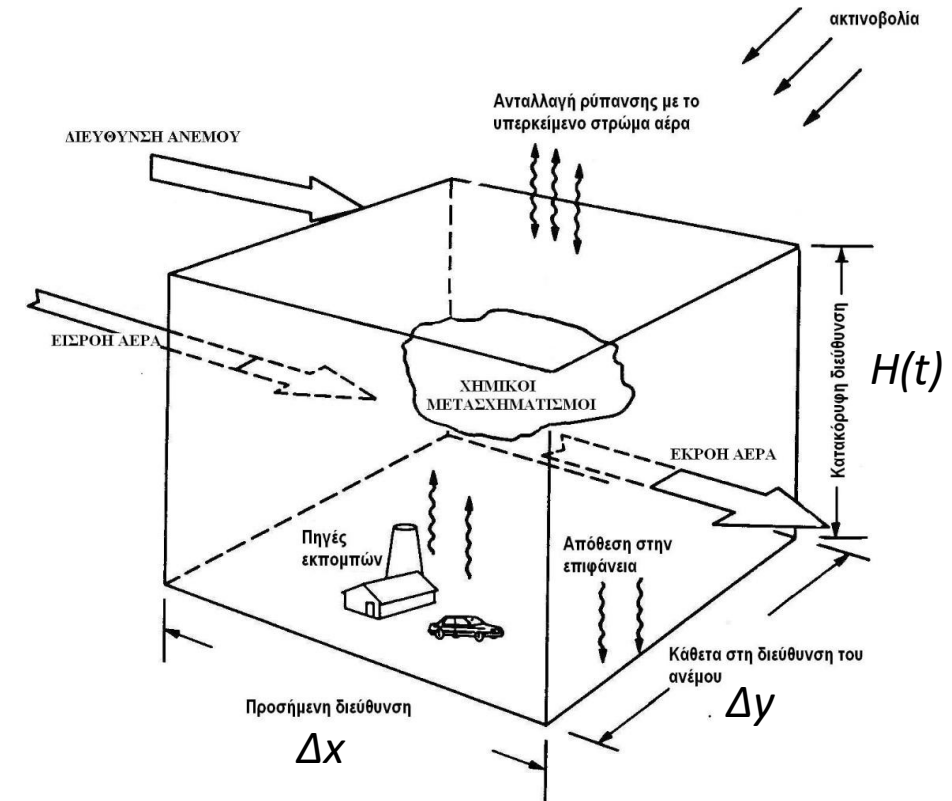
$E_i$ : εκπομπές

$L_i$ : φωτοχημική καταστροφή

$P_i$ : φωτοχημική παραγωγή

$D_i$ : εναπόθεση

$$\frac{dm_i}{dt} = \sum source - \sum sinks = (F_{i,in} + E_i + P_i) - (F_{i,out} + L_i + D_i) = (F_{i,in} - F_{i,out}) + (P_i - L_i) + E_i - D_i$$



# Μοντέλα Κυψελίδας – Μέθοδος Euler

- Ροή μάζας από το περιβάλλον

$$F_{i,in} = \frac{\Delta m_{in}}{dt} = \frac{c_i \Delta V_{in}}{dt} = \frac{H \cdot \Delta y \cdot u \cdot dt \cdot c_i^0}{dt} = H \cdot \Delta y \cdot u \cdot c_i^0$$

- Ροή μάζας προς το περιβάλλον

$$F_{i,out} = \frac{\Delta m_{out}}{dt} = \frac{H \cdot \Delta y \cdot u \cdot dt \cdot c_i}{dt} = H \cdot \Delta y \cdot u \cdot c_i$$

- Οπότε

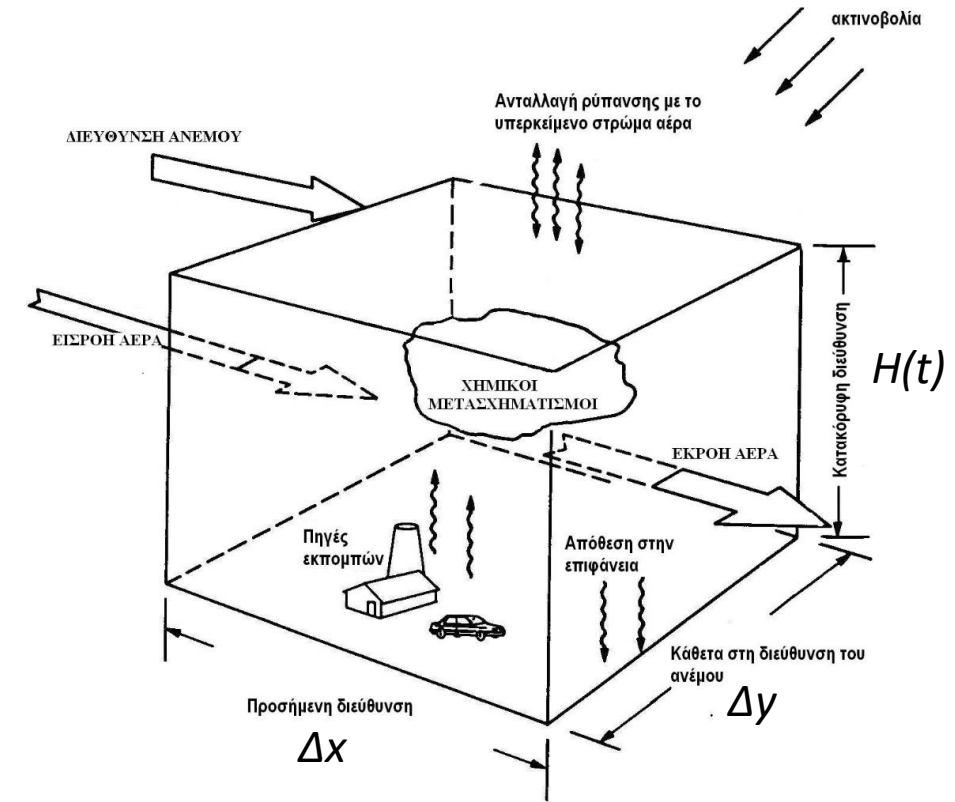
$$\frac{dm_i}{dt} = \frac{d}{dt} (c_i \cdot H \cdot \Delta x \cdot \Delta y) = H \cdot \Delta y \cdot u \cdot c_i^0 - H \cdot \Delta y \cdot u \cdot c_i + R_i \cdot H \cdot \Delta x \cdot \Delta y + E_i - D_i$$

- Διαιρούμε με  $\Delta x \Delta y$

$$\frac{d}{dt} (c_i \cdot H) = \frac{H}{\Delta x} \cdot u \cdot (c_i^0 - c_i) + R_i \cdot H + e_i - d_i$$

Ρυθμός  
εκπομπής/μονάδα  
επιφάνειας

Ρυθμός  
απομάκρυνσης/μο  
νάδα επιφάνειας



# Μοντέλα Κυψελίδας – Μέθοδος Euler

$$\frac{d}{dt}(c_i \cdot H) = \frac{H}{\Delta x} \cdot u \cdot (c_i^0 - c_i) + R_i \cdot H + e_i - d_i$$

- ρυθμός απομάκρυνσης της χημικής ένωσης λόγω ξηρής εναπόθεσης

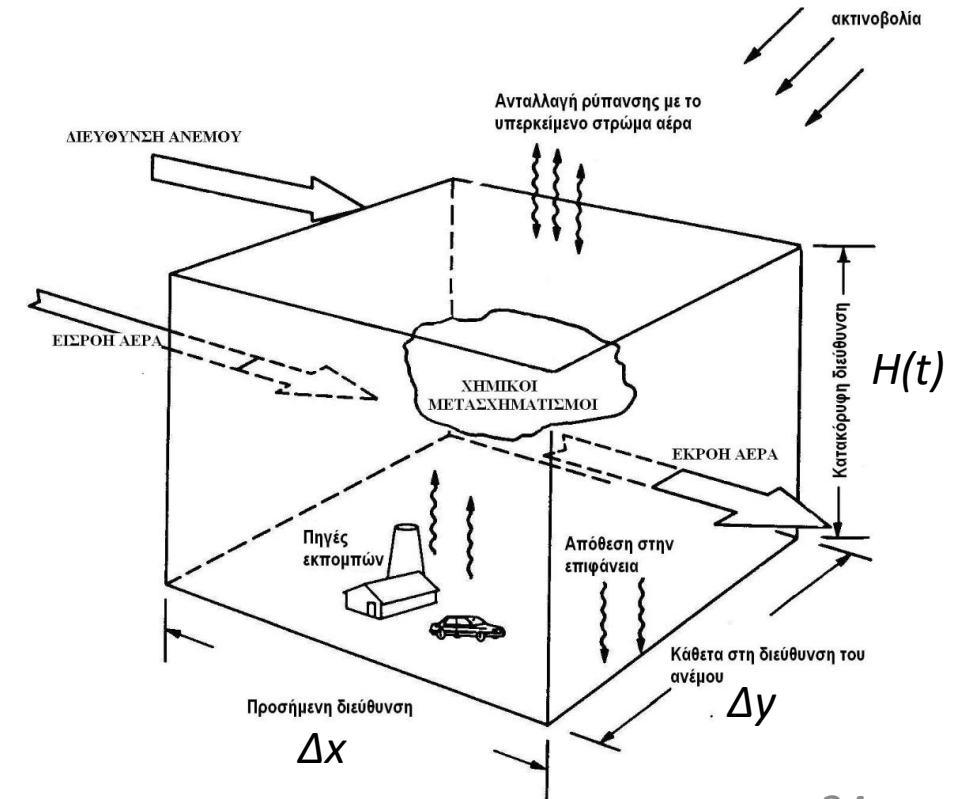
$$d_i = u_{d,i} \cdot c_i$$

- Διαιρούμε με H (H=σταθερό)

$$\frac{d}{dt}(c_i) = \frac{u}{\Delta x} \cdot (c_i^0 - c_i) + R_i + \frac{e_i}{H} - \frac{u_{d,i} \cdot c_i}{H}$$

- Χρόνος παραμονής αέριας μάζας στην κυψελίδα

$$\tau_r = \frac{\Delta x}{u}$$



# Μοντέλα Κυψελίδας – Μέθοδος Euler

## • Φωτοχημικό μοντέλο μιας κυψελίδας με μεταβλητό ύψος

- Το ύψος ανάμειξης μεταβάλλεται λόγω καιρικών συστημάτων
- Μέρος της μάζας της κυψελίδας δεν συνυπολογίζεται στις μεταβολές της συγκέντρωσης του ρύπου
- Μείωση ύψους ανάμειξης: η επίδραση των πηγών και καταβοθρών θα είναι εντονότερη
- Αύξηση ύψους ανάμειξης: εισαγωγή αέρα από πάνω με διαφορετική συγκέντρωση ρύπων

$$m_{H+\Delta H} = m_H + \Delta m$$

$$(c_i + \Delta c_i) \cdot (H + \Delta H) \cdot \Delta x \cdot \Delta y = c_i \cdot H \cdot \Delta x \cdot \Delta y + c_i^a \cdot \Delta H \cdot \Delta x \cdot \Delta y$$

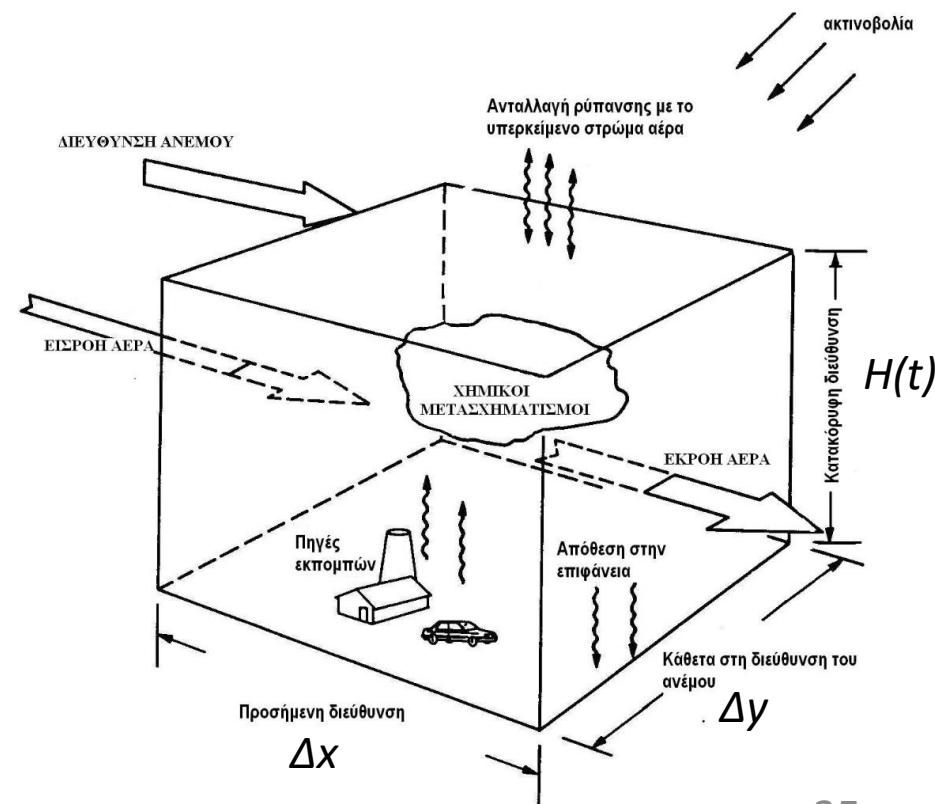
$$(c_i + \Delta c_i) \cdot (H + \Delta H) = c_i \cdot H + c_i^a \cdot \Delta H$$

$$Hc_i + H\Delta c_i + \Delta Hc_i + \Delta H\Delta c_i = Hc_i + \Delta Hc_i^a$$

$$H\Delta c_i + \Delta Hc_i + \Delta H\Delta c_i = \Delta Hc_i^a$$

Διαιρώντας με  $\Delta t$   
και  $\lim \Delta t \rightarrow 0$

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{c_i^a - c_i}{H} \cdot \frac{dH}{dt}$$



Όταν  $c^a > c$  -> αύξηση της συγκέντρωσης της ένωσης



# Μοντέλα Κυψελίδας – Μέθοδος Euler

- Φωτοχημικό μοντέλο μιας κυψελίδας με μεταβλητό ύψος

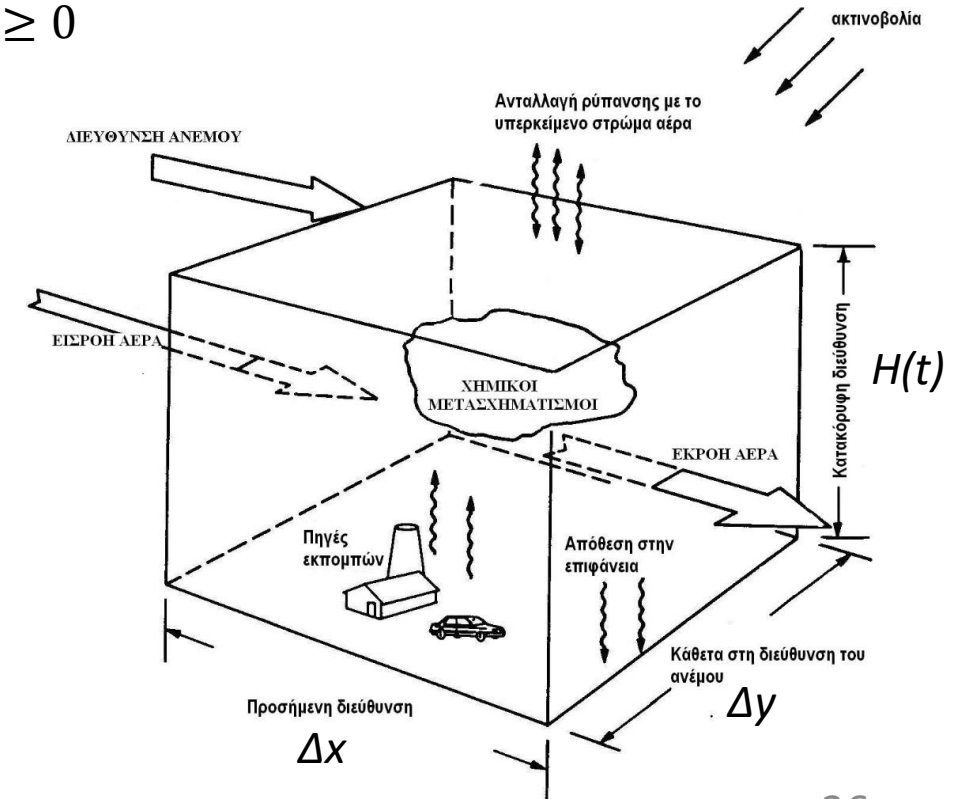
$$\frac{d}{dt}(c_i) = \frac{u}{\Delta x} \cdot (c_i^0 - c_i) + R_i + \frac{e_i}{H} - \frac{u_{d,i} \cdot c_i}{H} \quad \text{όταν } \frac{dH}{dt} \leq 0$$

ταχύτητα  
εναπόθεσης

$$\frac{d}{dt}(c_i) = \frac{u}{\Delta x} \cdot (c_i^0 - c_i) + R_i + \frac{e_i}{H} - \frac{u_{d,i} \cdot c_i}{H} + \frac{c_i^a - c_i}{H} \cdot \frac{dH}{dt} \quad \text{όταν } \frac{dH}{dt} \geq 0$$

Μεταβολή συγκέντρωσης χημικής ένωσης σε μια περιοχή με ομογενή και γρήγορη ανάμειξη συναρτήσεται

- Εκπομπών
- Φωτοχημικών μετασχηματισμών
- Εναπόθεσης
- Μεταφοράς από τον άνεμο
- Εισροής αέρα από την κορυφή της κυψελίδας



# Χρόνος Ζωής χημικής ένωσης

- για εξισώσεις πρώτης τάξης ως προς την συγκέντρωση

$$\tau_r = \frac{\Delta x}{u}$$

- Για πιο πολύπλοκες διαδικασίες καταστροφής/απομάκρυνσης

$$\tau = \frac{m_i}{F_{i,out} + L_i + D_i}$$

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{i,out}} + \frac{1}{\tau_{i,c}} + \frac{1}{\tau_{i,d}}$$

$$\tau_{i,out} = \frac{m_i}{F_{i,out}}$$

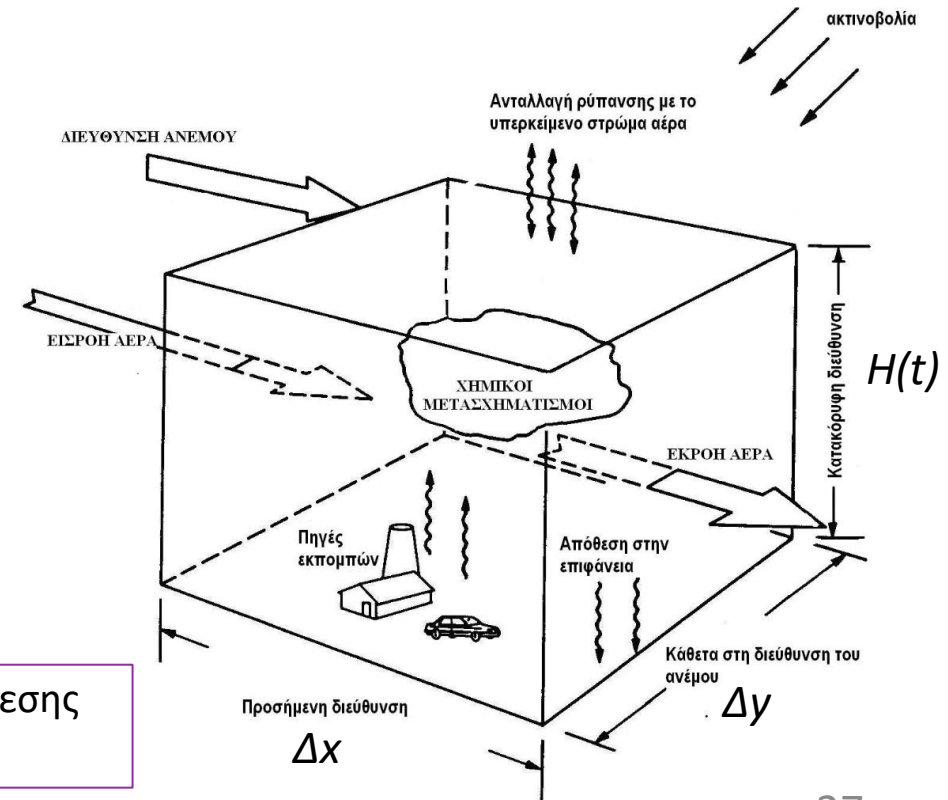
$$\tau_{i,c} = \frac{m_i}{L_i}$$

$$\tau_{i,d} = \frac{m_i}{D_i}$$

διαδικασίες  
απομάκρυνσης ένωσης  
από άνεμο

διαδικασίες καταστροφής  
από φωτοχημικές  
διαδικασίες

διαδικασίες εναπόθεσης  
στο έδαφος



# Φωτοχημικό μοντέλο πολλών κυψελίδων

- Συγκέντρωση πολλών κυψελίδων (K) από εκεί που φυσά ο άνεμος
- Ανταλλαγή αερίων μαζών και ενώσεων
- Σύνδεση κυψελίδων μέσω των όρων μεταφοράς (εισροή και εκροή)
- Σύστημα N(χημικές ενώσεις) xK(κυψελίδες) εξισώσεων

$$\frac{dm_{i,k}}{dt} = \sum source - \sum sinks =$$

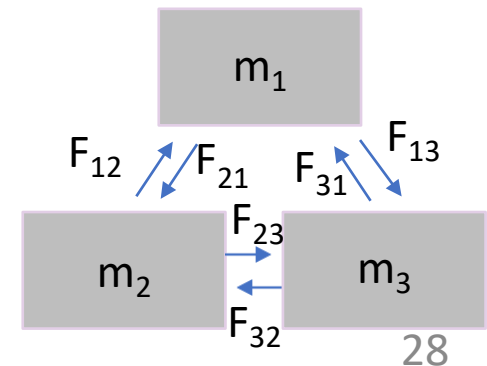
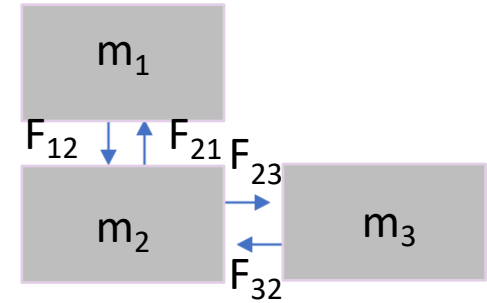
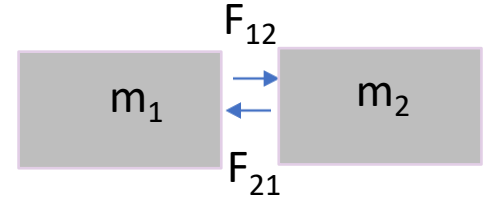
$$\left( \sum_p F_{i,in,k,p} + E_{i,k} + P_{i,k} \right) - \left( \sum_{p'} F_{i,out,k,p'} + L_{i,k} + D_{i,k} \right)$$

$$= \left( \sum_p F_{i,in,k,p} - \sum_{p'} F_{i,out,k,p'} \right) + (P_{i,k} - L_{i,k}) + E_{i,k} - D_{i,k}$$

πχ. Σύστημα 2 κυψελίδων (Nx2 διαφορικές εξισώσεις)

$$\frac{dm_{i,1}}{dt} = F_{i,in,1,2} + E_{i,1} + P_{i,1} - F_{i,out,1,2} - L_{i,1} - D_{i,1}$$

$$\frac{dm_{i,2}}{dt} = F_{i,in,2,1} + E_{i,2} + P_{i,2} - F_{i,out,2,1} - L_{i,2} - D_{i,2}$$



# Φωτοχημικό μοντέλο πολλών κυψελίδων

- Αντίστοιχα υπολογίζεται και ο χρόνος παραμονής των ενώσεων σε κάθε μια κυψελίδα

$$\tau_{i,1} = \frac{m_{i,1}}{F_{i,out,1} + L_{i,1} + D_{i,1}}$$

πχ. Σύστημα 3 κυψελίδων (Nx3)

Συνολικός ρυθμός εκροής  
μάζας από την κυψελίδα 1

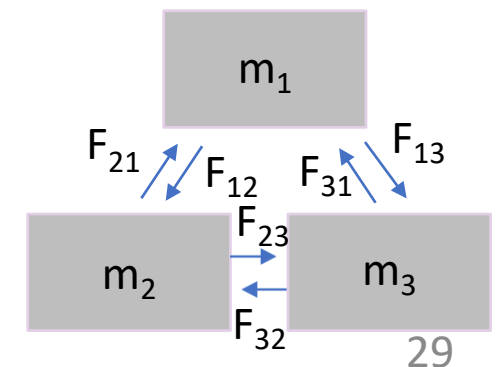
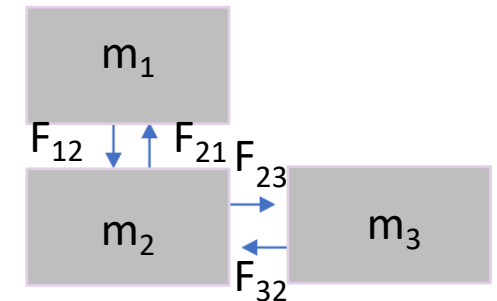
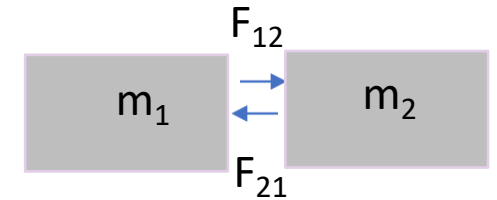
$$F_{i,out,1} = F_{i,out,1,2} + F_{i,out,1,3}$$

$$F_{i,out,2} = F_{i,out,2,1} + F_{i,out,2,3}$$

$$F_{i,out,3} = F_{i,out,3,1} + F_{i,out,3,2}$$

Υπολογισμός χρόνου παραμονής της ένωσης *i* σε μέρος του μοντέλου πχ. κυψελίδες 1,2

$$\tau_{i,1,2} = \frac{m_{i,1} + m_{i,2}}{F_{i,out,1,3} + L_{i,1} + D_{i,1} + F_{i,out,2,3} + L_{i,2} + D_{i,2}}$$



- Κινούμενο σύστημα συντεταγμένων με αντίστοιχες παραδοχές
- Περιγραφή της σύνθεσης της ατμόσφαιρας σε ένα ή περισσότερα στοιχεία του ρευστού (αέριες μάζες) που μετακινούνται με τη μέση ροή αέρα
- Παραδοχή: Οι αέριες μάζες έχουν πολύ μικρές διαστάσεις ώστε να κινούνται με την ίδια ταχύτητα αλλά αρκετά μεγάλες για να περιέχουν σημαντικό αριθμό μορίων
- Πολλά κοινά σημεία με τη μέθοδο Euler

# Μοντέλα Κυψελίδας – Μέθοδος Lagrange

- Ισοζύγιο μάζας χημικής ένωσης μιας κυψελίδας μετακινούμενης με το μέσο οριζόντιο άνεμο (ίδιο σχήμα και μέγεθος)

$$\frac{dm_i}{dt} = \sum source - \sum sinks = P_i - L_i + E_i - D_i$$

$E_i$ : εκπομπές

$P_i$ : φωτοχημική παραγωγή

$L_i$ : φωτοχημική καταστροφή

$D_i$ : εναπόθεση

- Διαφορά με μέθοδο EULER
  - Δεν υπάρχει εισροή-εκροή μάζας – δεν απαιτούνται οριακές συνθήκες
  - Παρέχουν πληροφορία για την χωρική κατανομή των ρύπων
- Δυσκολία στον προσδιορισμό της κίνησης της κυψελίδας
- Παραδοχή 1: όλα τα σημεία της κυψελίδας μετακινούνται με την ίδια ταχύτητα (μπορεί να ισχύει πάντα?)
- Παραδοχή 2: δεν υπάρχει οριζόντια διασπορά/διάχυση

# Τροχιά Κυψελίδας – Μέθοδος Lagrange

- Τροχιά: κίνηση αέριας μάζας πεπερασμένων διαστάσεων στη ροή του ανέμου
  - Ορθή τροχιά: σημείο εκκίνησης η πηγή – πρόβλεψη περιοχών που θα πληγούν από τις εκπομπές
  - Ανάδρομη τροχιά: σημείο εκκίνησης ο αποδέκτης – προσδιορισμός σημείων εκπομπής
- Απαραίτητο στοιχείο για τη χρήση των μοντέλων Lagrange : υπολογισμός τροχιών αερίων μαζών σε συγκεκριμένα χρονικά σημεία της ημέρας που μελετάται
  - Ορθή τροχιά: μελέτη της συγκέντρωσης ρύπων σε συγκεκριμένες χρονικές στιγμές  $t$  από την χρονική στιγμή εκπομπής τους από την πηγή ( $t_0$ )  $\rightarrow t > t_0$
  - Ανάδρομη τροχιά: μελέτη των συγκεντρώσεων σε συγκεκριμένες περιοχές και συγκεκριμένες χρονικές στιγμές  $t \rightarrow t < t_0$

Σε αυτού του είδους τα μοντέλα (μόνος μηχανισμός απομάκρυνσης ξηρή εναπόθεση)  
χαρακτηριστικός χρόνος ζωής των αδρανών χημικών ενώσεων  $\gg$  χρόνο παραμονής τους σε μια περιοχή



$$\tau_{L,i} = \frac{H}{u_{d,i}}$$

$H$ :

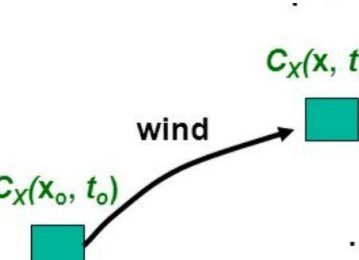
$u_{d,i}$ :

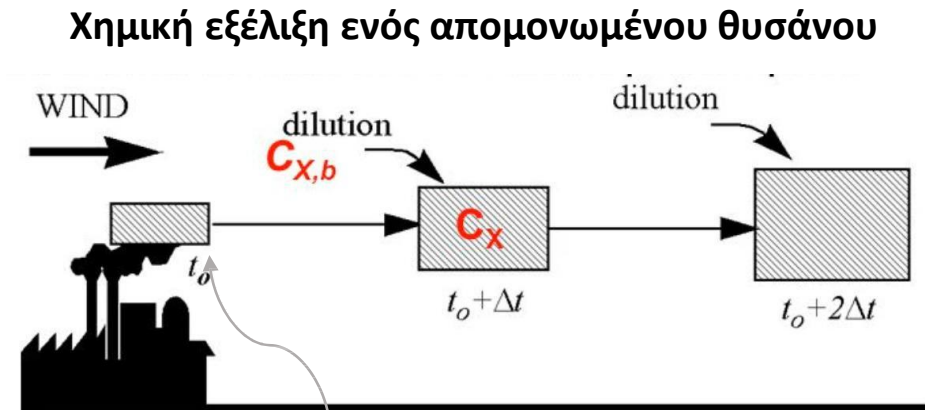
ύψος στήλης

ταχύτητα ξηρής εναπόθεσης

# Φωτοχημικά Μοντέλα μιας Κυψελίδας – Μέθοδος Lagrange

- Υπερυψωμένη και απομονωμένη κυψελίδα – Μοντέλο Ριπής (Puff model)
- Στόχος: χρονική μεταβολή της συγκέντρωσης ρύπου σε μια υπερυψωμένη κυψελίδα που κινείται με τον άνεμο
- Τυρβώδης διάχυση: μεταβάλλει τον όγκο και επιτρέπει την εισροή αέρα από το περιβάλλον -> μεταβολή της συγκέντρωσης με το χρόνο
  - Ρυθμό φωτοχημικής παραγωγής/καταστροφής
  - Ρυθμό αραίωσης (dilution)
- Ισοζύγιο μάζας

$$\frac{dc_i}{dt} = R_i - S_{dil} \Leftrightarrow \frac{dc_i}{dt} = P_i - L_i - k_{dil}(c_i - c_{i,back})$$




Δεν ακουμπά στο έδαφος/δεν επηρεάζεται από νέες πηγές

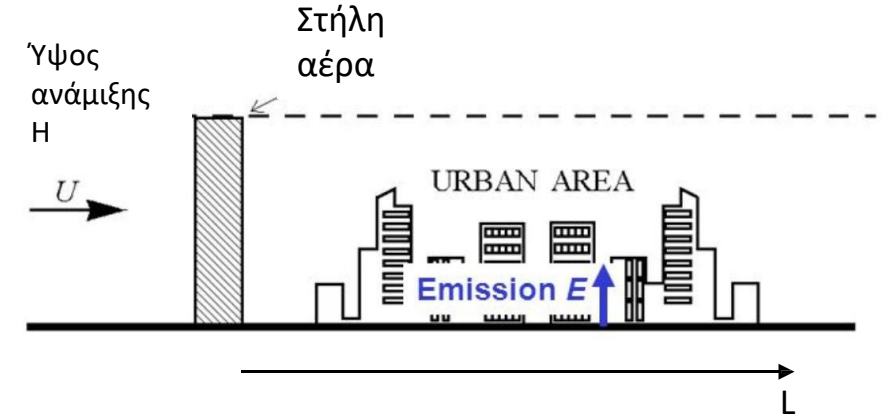
$S_{dil}$  : ρυθμός μεταβολής της συγκέντρωσης της χημικής ένωσης  
 $c_i$  : συγκέντρωση της χημικής ένωσης  
 $c_{i,back}$  : συγκέντρωση υποβάθρου  
 $k_{dil}$  : πρώτη τάξεως σταθερά του ρυθμού εισροής του αέρα από το περιβάλλον στην κυψελίδα



# Φωτοχημικά Μοντέλα μιας Κυψελίδας – Μέθοδος Lagrange

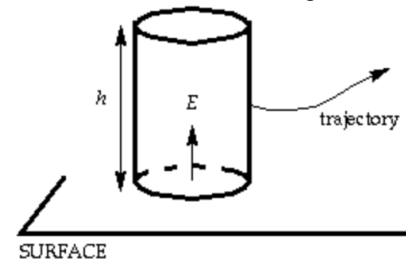
Πηγή: Jacob, 1999

- Κυψελίδα σταθερού Ύψους σε επαφή με το έδαφος
  - Καλή ανάμιξη
  - Αμελητέα οριζόντια ανταλλαγή μάζας
  - Αμελητέα κατακόρυφη ανταλλαγή μάζας με τον αέρα πάνω από τη στήλη

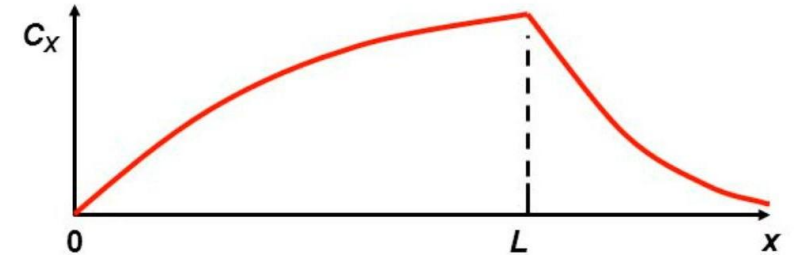


$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{e_i}{H} + R_i - D_i \Leftrightarrow \frac{dc_i}{dt} = \frac{e_i}{H} + P_i - L_i - \frac{u_{d,i}}{H} \cdot c_i$$

$\frac{e_i}{H}$ : εκπομπές: από τα σημεία που περνάει η τροχιά  
 $R_i$ : Ρυθμός φωτοχημικής παραγωγής/ καταστροφής  
 $D_i$ : Ρυθμός ξηρής εναπόθεσης



Αν υπάρχει αρκετή πληροφορία για τον άνεμο και τη κατανομή των εκπομπών ένα μοντέλο στήλης μπορεί να αποδειχθεί καλύτερο από ένα μοντέλο μιας κυψελίδας



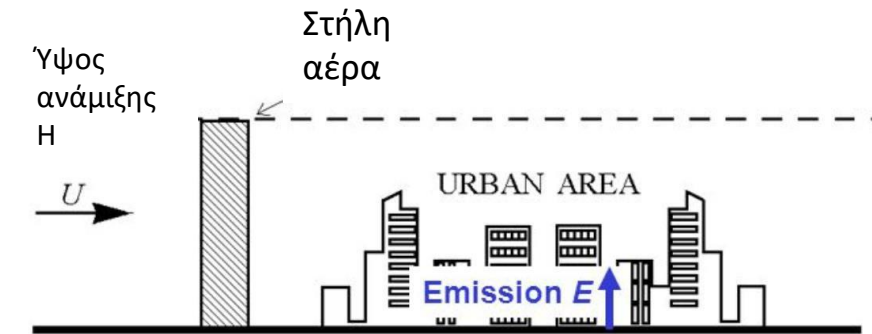
# Φωτοχημικά Μοντέλα μιας Κυψελίδας – Μέθοδος Lagrange

- Κυψελίδα μεταβλητού Ύψους σε επαφή με το έδαφος
  - Δεν αλλάζει σχήμα και μέγεθος (οριζόντια)
  - Ίδια εξίσωση με το μοντέλο Euler χωρίς μεταφορά ύλης

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{e_i}{H} + R_i - \frac{u_{d,i}}{H} \cdot c_i \quad \text{όταν} \quad \frac{dH}{dt} \leq 0$$

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{e_i}{H} + R_i - \frac{u_{d,i}}{H} \cdot c_i + \frac{c_i^a - c_i}{H} \cdot \frac{dH}{dt} \quad \text{όταν} \quad \frac{dH}{dt} \geq 0$$

- Αρχικές συνθήκες:  $c_i(0) = c_i^0$



Συγκέντρωση στην περιοχή από όπου ξεκίνησε η μετακίνηση της κυψελίδας

# Φωτοχημικό Μοντέλο πολλαπλών Κυψελίδων – Μέθοδος Lagrange

- Μια Κυψελίδα χωρίζεται σε μικρότερες οριζόντιες ομοιογενείς κυψελίδες
- Ανταλλαγή μάζας μεταξύ των κυψελίδων (κατακόρυφη τυρβώδης διάχυση)
- Μεταβλητό H
- Πρόβλημα υπολογισμού ρυθμού μεταβολής της συγκέντρωσης μιας χημικής ένωσης σε κάθε κυψελίδα (κατακόρυφη τυρβώδης ανταλλαγή μάζας)

$$\frac{\partial c_{i,j}}{\partial t} = \left. \frac{\partial c_{i,j}}{\partial t} \right|_{z=z_j} + E_{i,j} + R_{i,j} - D_{i,j} \Rightarrow$$

$$\frac{\partial c_{i,j}}{\partial t} = \left. \frac{\partial c_{i,j}}{\partial t} \right|_{z=z_j} + E_{i,j} + (P_{i,j} - L_{i,j}) - D_{i,j} \Rightarrow$$

$$\frac{\partial c_{i,j}}{\partial t} = \left. \frac{\partial c_{i,j}}{\partial t} \right|_{z=z_j} + (P_{i,j} - L_{i,j}) \quad \text{όταν } j \geq 2$$

$$\frac{\partial c_{i,1}}{\partial t} = \left. \frac{\partial c_{i,1}}{\partial t} \right|_{z=z_1} + E_{i,1} + (P_{i,1} - L_{i,1}) - D_{i,1} \quad \text{όταν } j = 1$$

Διαδικασία απομάκρυνσης μέσω ξηρής εναπόθεσης μόνο για την 1<sup>η</sup> κυψελίδα (έδαφος)