

Ποιότητα Ατμοσφαιρικού Περιβάλλοντος Υ3306

Αν. Καθηγήτρια Μ. Ασημακοπούλου

Γραφείο Γ3

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.

Εισαγωγή

- 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

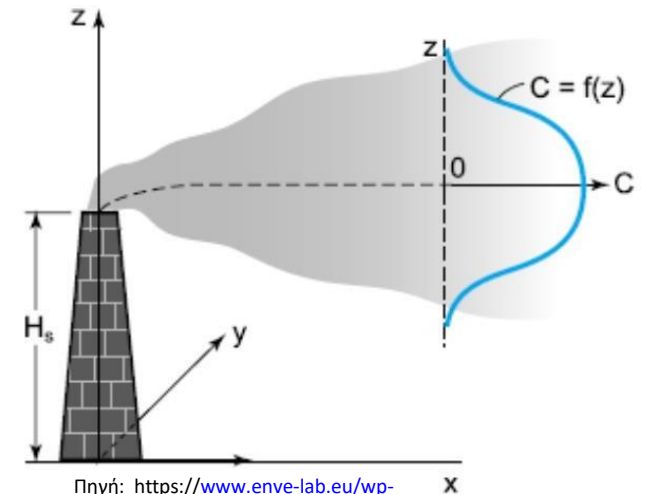
- Συνεισφορά συγκεκριμένης πηγής σε συγκεντρώσεις συγκεκριμένης τοποθεσίας μακριά από την πηγή
- Αποτελεσματική στρατηγική για τη μείωση των ρύπων κάτω από τα πρότυπα ποιότητας του αέρα
- Επίδραση στην ποιότητα της ατμοσφαιρικής ρύπανσης λόγω πρόσθεσης ή αφαίρεσης πηγής
- Σωστός σχεδιασμός και τοποθέτηση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

Υπενθύμιση

- 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



Πηγή: http://www.mie.uth.gr/ekp_yliko/dispersion.pdf

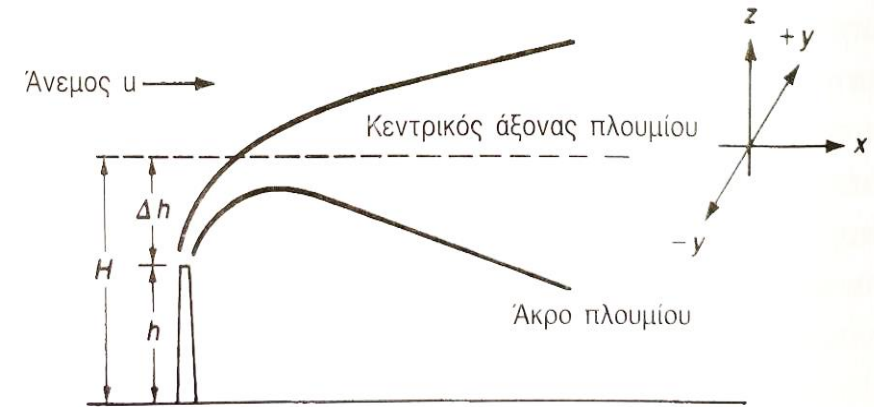
Διασπορά ρύπων – Ατμοσφαιρικά μοντέλα

- Διασπορά

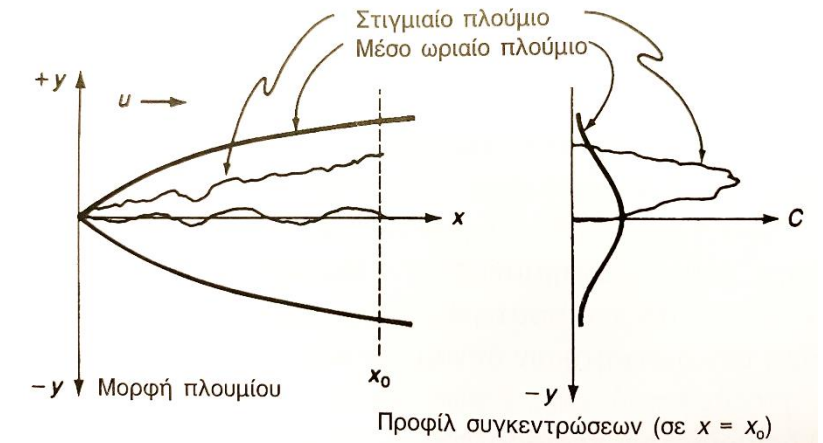
- Περιγραφή πολύπλοκων και πολυπαραμετρικών μαθηματικών εξισώσεων
- Συνεχές ρεύμα ρύπων απελευθερώνεται σε σταθερό άνεμο στην ανοιχτή ατμόσφαιρα
 - Ανύψωση, καμπύλωση και κίνηση με μέσο άνεμο, αραίωση και μεταφορά ρύπων μακριά

- 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
 - Αριθμητικά μοντέλα
 - 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)

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*)

σ_y , σ_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 (x_f) 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.

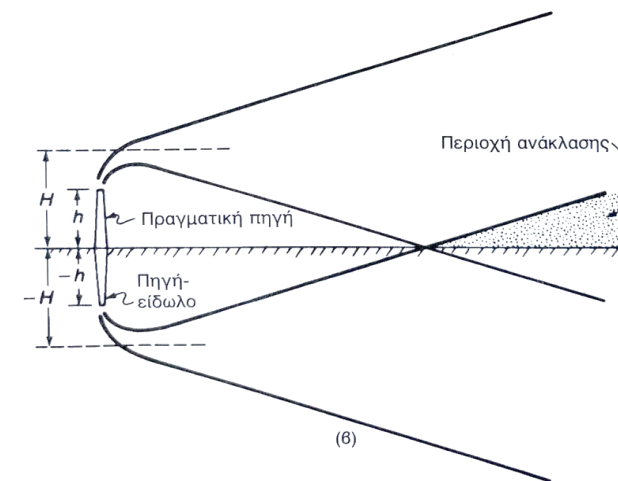
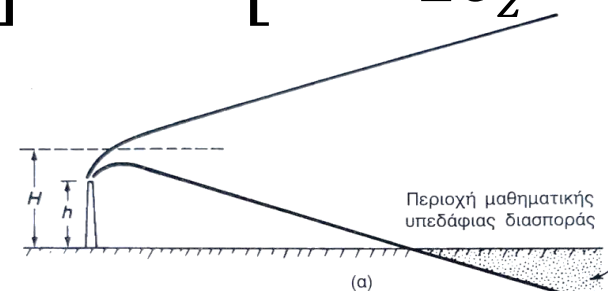
$$c(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_z u} \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma^2}\right] \left[\exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right]$$

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

Q : ρυθμός εκπομπής ρύπου (μg/s)

σ_y, σ_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 Δh = ανύψωση του πλουμίου)



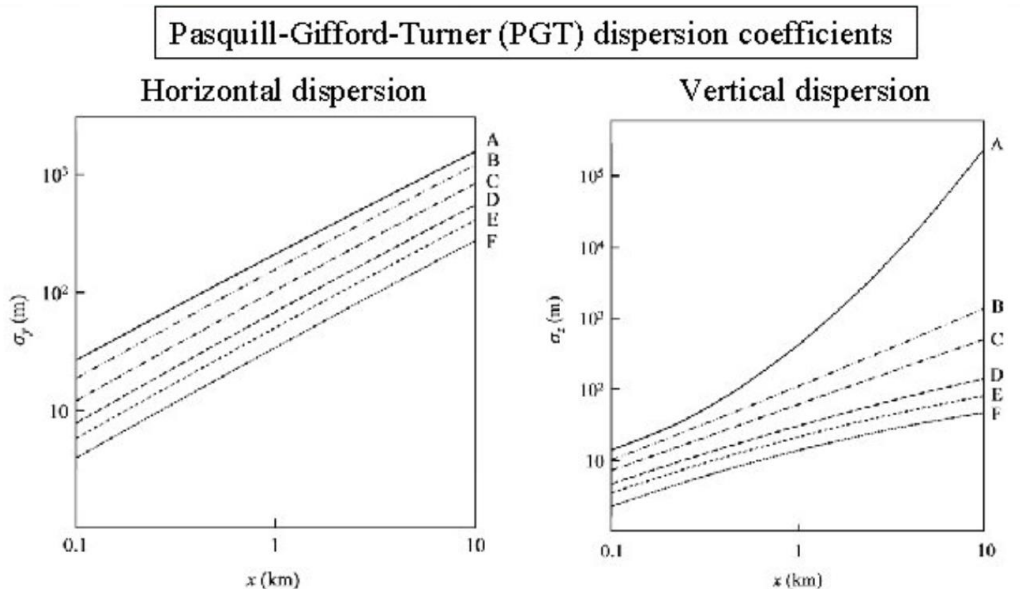
Μερικές γενικές σχέσεις του γκαουσιανού μοντέλου

- 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 ⁻¹) at 10 m	Day			Night	
	Solar radiation ^b			Cloudiness ^c	
	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⁻²), moderate (between 350 and 700 W m⁻²), weak (< 350 W m⁻²)

(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 110g/s NO σε φυσικό ύψος 80m , όπου η ταχύτητα του ανέμου είναι 5m/s σε συννεφιασμένο ουρανό το πρωί. Η ανύψωση του πλουμίου είναι 20m .

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

β. Να υπολογιστεί η συγκέντρωση 100 m από τον κεντρικό άξονα στην ίδια απόσταση

Λύση

Παράδειγμα

Για ρυθμό εκπομπής 200g/s , ενεργό ύψος καμινάδας 80m και ταχύτητα ανέμου 8m/s σε συνθήκες ισχυρής ηλιοφάνειας, υπολογίστε την συγκέντρωση στο έδαφος ανενεργού χημικά ρύπου α) 1000m ευθεία προς την κατεύθυνση του ανέμου και β) 5000m 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 ομοιογενείς $\frac{\partial Q}{\partial x} = \frac{\partial Q}{\partial y} = 0$

- 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 $H(t)$

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

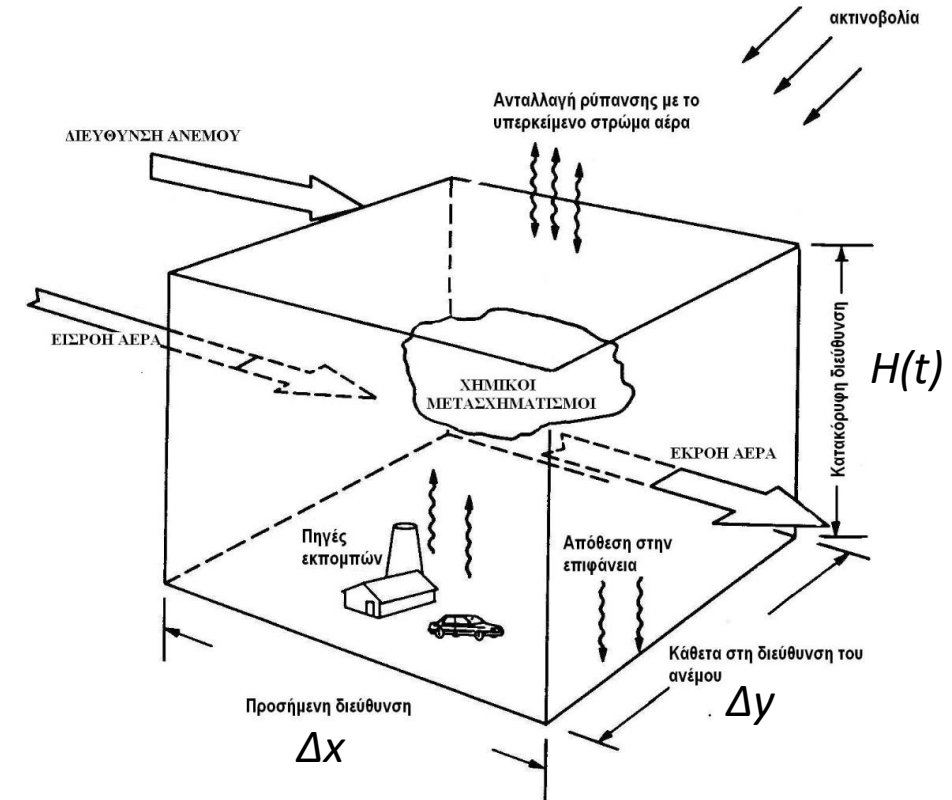
E_i : εκπομπές

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

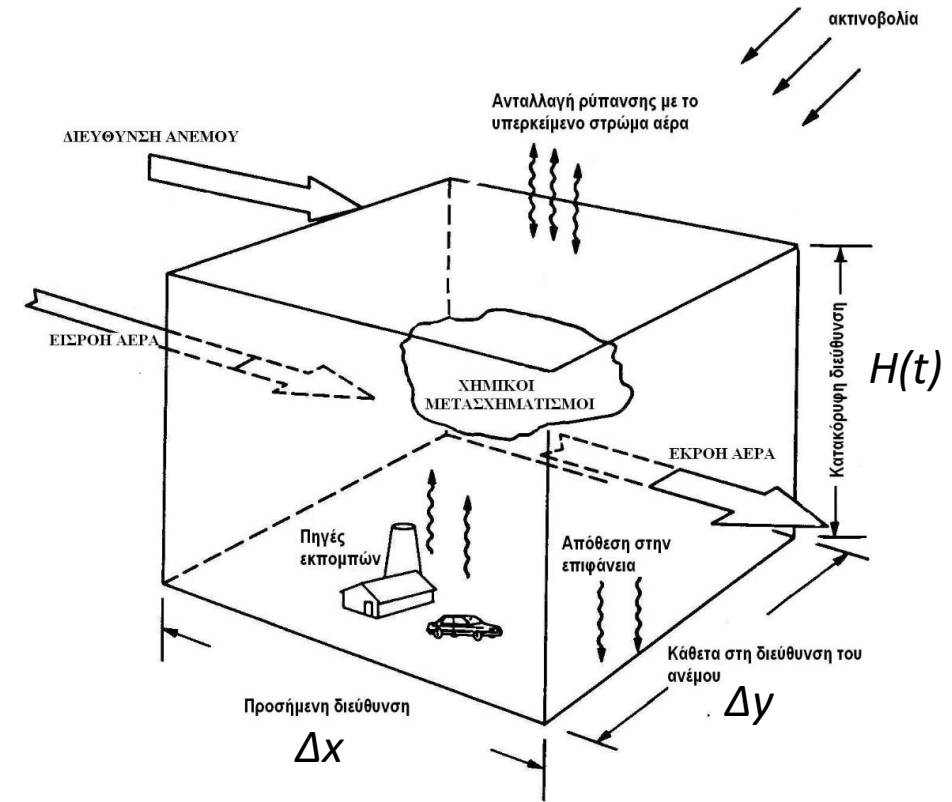
$$\frac{dm_i}{dt} = \frac{d}{dt} (c_i \cdot H \cdot \Delta x \cdot \Delta y) = H \cdot \Delta y \cdot u \cdot c_i^0 - H \cdot \Delta y \cdot u \cdot c_i + R_i \cdot H \cdot \Delta x \cdot \Delta y + E_i - D_i$$

- 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

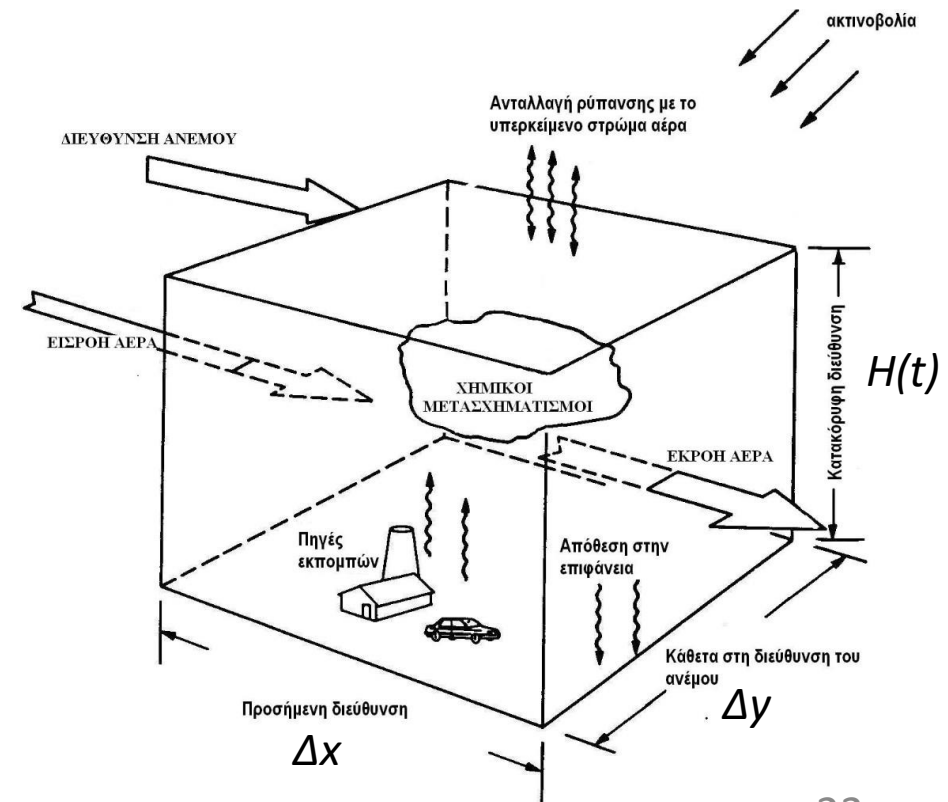
$$d_i = u_{d,i} \cdot c_i$$

- 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

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

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

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

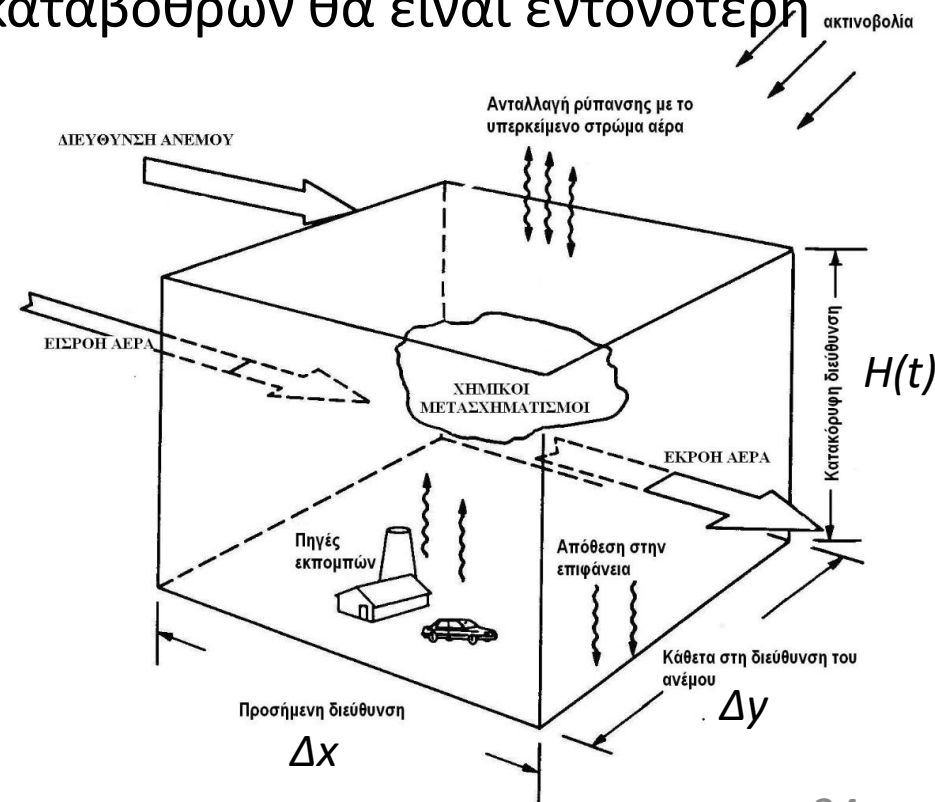
$$Hc_i + H\Delta c_i + \Delta Hc_i + \Delta H\Delta c_i = Hc_i + \Delta Hc_i^a$$

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

Διαιρώντας με Δt
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

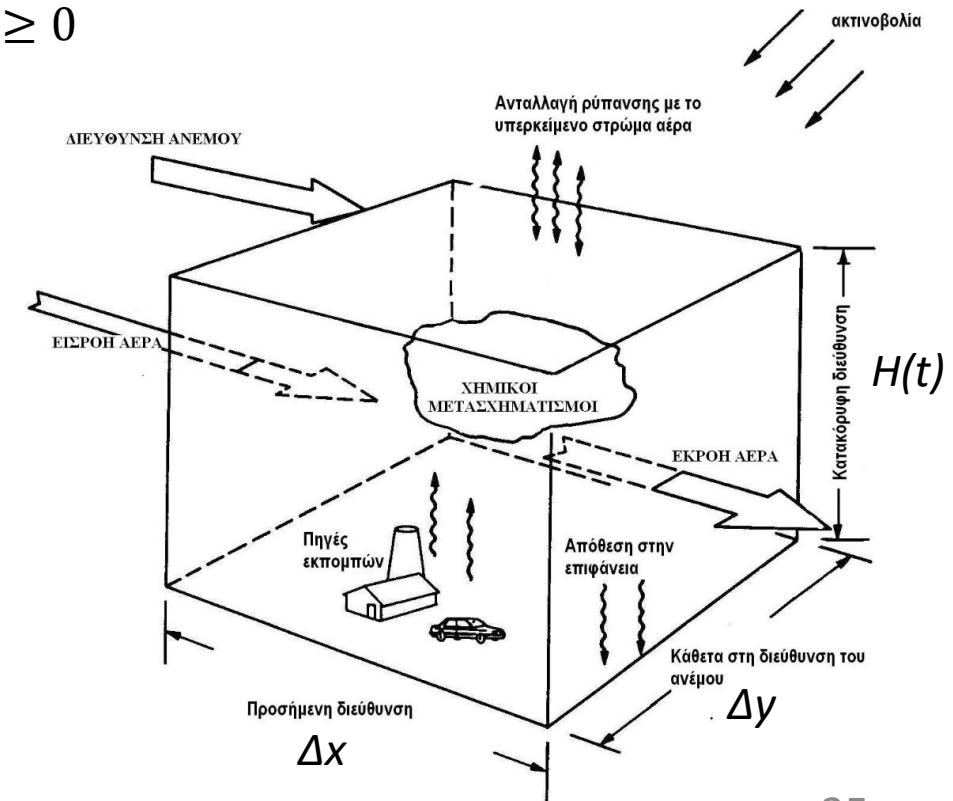
$$\frac{d}{dt}(c_i) = \frac{u}{\Delta x} \cdot (c_i^0 - c_i) + R_i + \frac{e_i}{H} - \frac{u_{d,i} \cdot c_i}{H} \quad \text{όταν } \frac{dH}{dt} \leq 0$$

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 ομοιογενή και γρήγορη ανάμειξη συναρτήσει

- 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

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

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

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

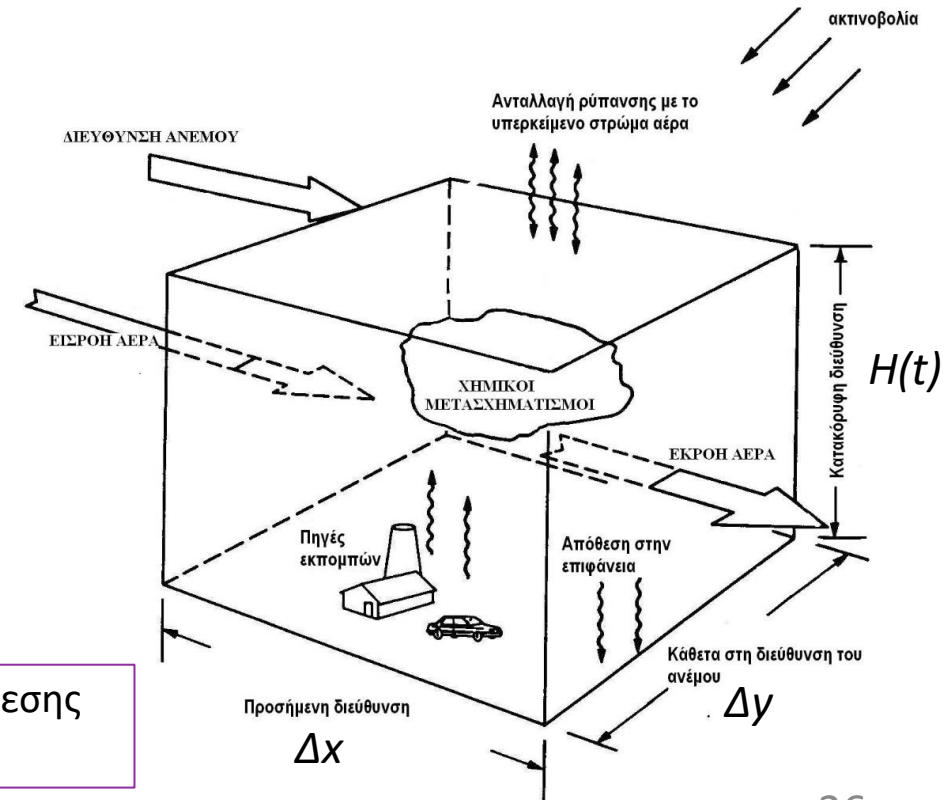
$$\tau_{i,c} = \frac{m_i}{L_i}$$

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

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

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

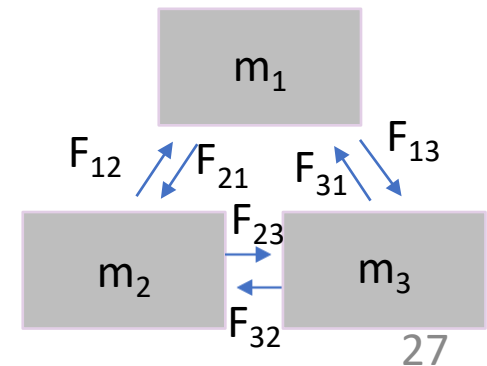
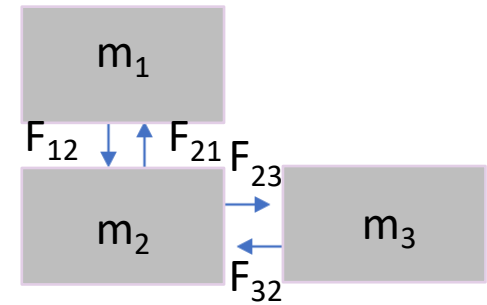
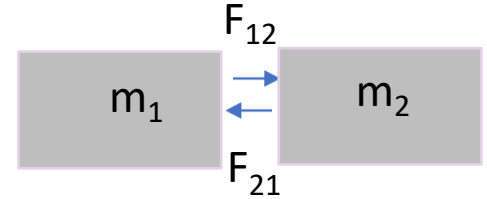
$$\left(\sum_p F_{i,in,k,p} + E_{i,k} + P_{i,k} \right) - \left(\sum_{p'} F_{i,out,k,p'} + L_{i,k} + D_{i,k} \right)$$

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

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

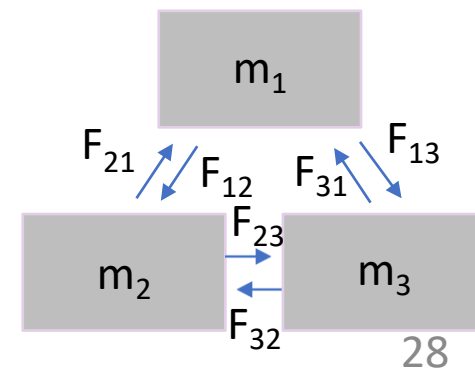
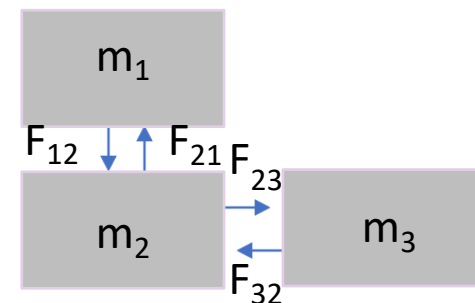
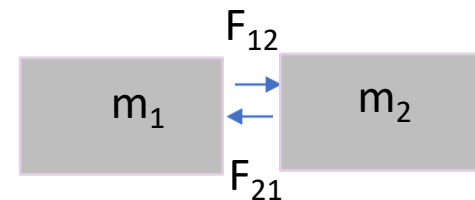
$$F_{i,out,1} = F_{i,out,1,2} + F_{i,out,1,3}$$

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

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

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 $t \rightarrow t < t_0$

χαρακτηριστικός χρόνος ζωής των αδρανών χημικών ενώσεων \gg χρόνο παραμονής τους σε μια περιοχή

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

H :

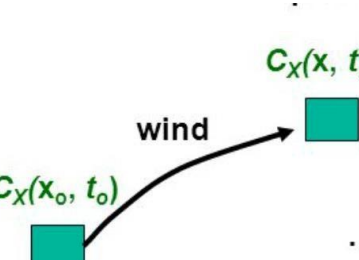
$u_{d,i}$:

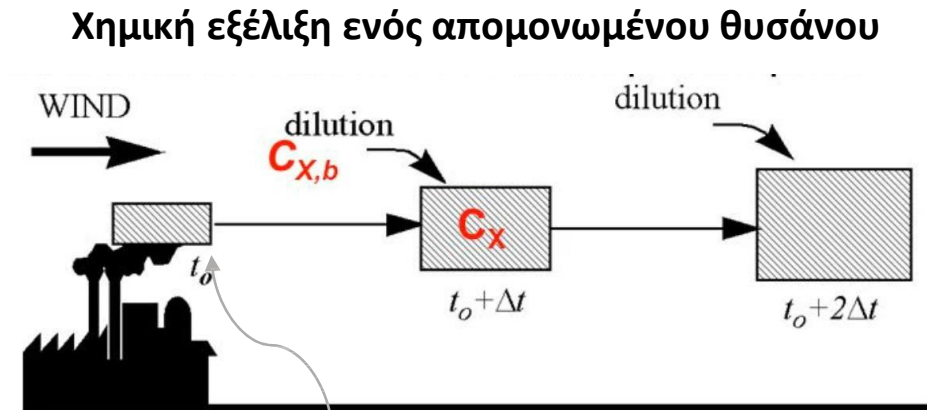
ύψος στήλης

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

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




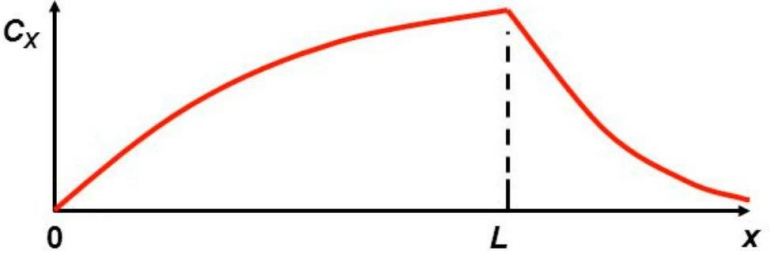
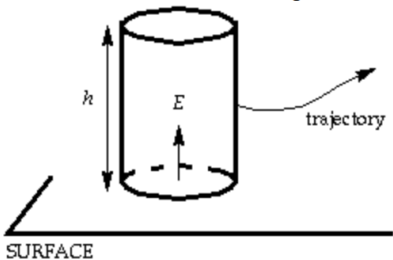
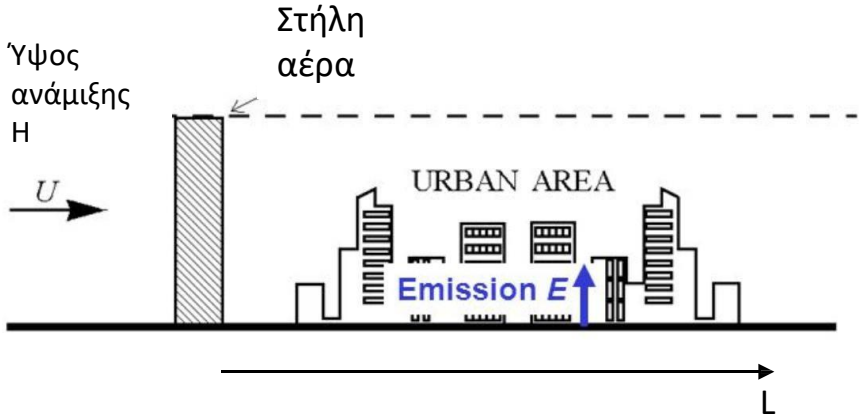
Δεν ακουμπά στο έδαφος/δεν επηρεάζεται από νέες πηγές

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



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

εκπομπές: από τα σημεία που περνάει η τροχιά
 Ρυθμός φωτοχημικής παραγωγής/ καταστροφής
 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

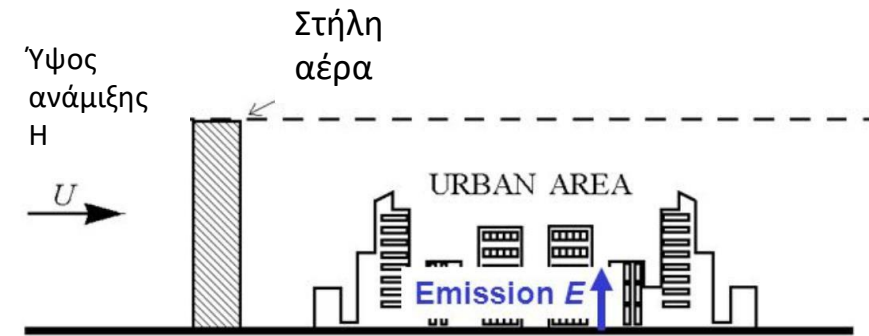
Φωτοχημικά Μοντέλα μιας Κυψελίδας – Μέθοδος Lagrange

- 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^η κυψελίδα (έδαφος)