



# Modelado de la Calidad del Aire

## Ecuación de transporte

FAUBA

27 de mayo de 2022



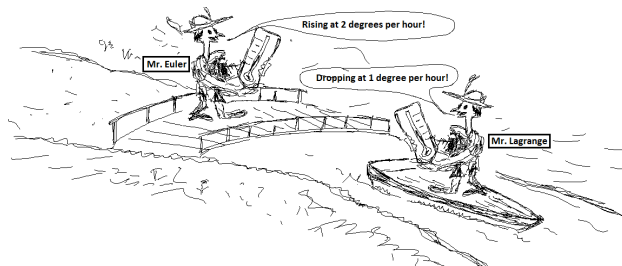
# Introducción

# Descripción del transporte



Dos formas *equivalentes* de pensar el problema:

- ▶ Descripción **Lagrangiana** ó enfoque *material*: Estudiar como se mueve un contaminante en el tiempo y espacio.
- ▶ Descripción **Euleriana** ó enfoque de *campos*: Estudiar como cambia con el tiempo la concentración de un contaminante en el espacio.



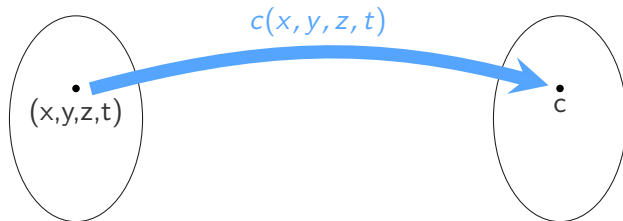
En este curso vamos a adoptar la descripción **Euleriana**.

# Representación del transporte



**Objetivo del curso:** Representar la concentración de un contaminante atmosférico ( $C$ ) en el espacio y en el tiempo.

Podemos usar el concepto de *función*:



# Ecuación de transporte



Es una *ecuación diferencial*<sup>1</sup> basada en el **principio de conservación de masa**.

Describe cómo cambia la concentración de una especie química (C) en el tiempo para un punto del espacio.

Se deduce de analizar todos los procesos que generan un cambio en la concentración en un punto arbitrario del espacio.

---

<sup>1</sup>Ecuación cuya incógnita es una función



**Emisión**

**Advección**

$u$

**Mezcla**

**Química**



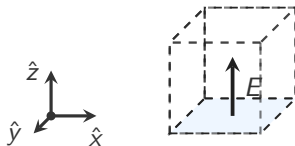
# Emisiones

# Emisiones



## Tasa de producción de C

Representa los procesos que incorporan masa al sistema.



$$\boxed{\frac{\partial C}{\partial t} = E}$$

$E$  depende del espacio y el tiempo (donde y cuando es emitido).

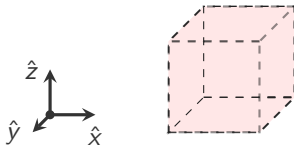
En la práctica, puede ser medido ó estimado.





# Reacciones químicas

# Reacciones químicas



Vamos a considerar los siguientes procesos:

- ▶ Química
- ▶ Fotoquímica
- ▶ Lavado
- ▶ Deposición seca

La probabilidad de ocurrencia de estos fenómenos depende de la cantidad de  $C$  presente:

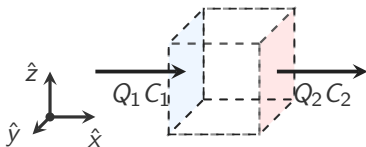
$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\lambda C$$



# Advección

# Flujo advectivo

Arrastre por el viento



$$\Delta m = (Q_1 C_1 - Q_2 C_2) \Delta t$$

$$\Delta C V = (A u_1 C_1 - A u_2 C_2) \Delta t$$

$$\Delta C \Delta x \Delta y \Delta z = (u_1 C_1 - u_2 C_2) \Delta y \Delta z \Delta t$$

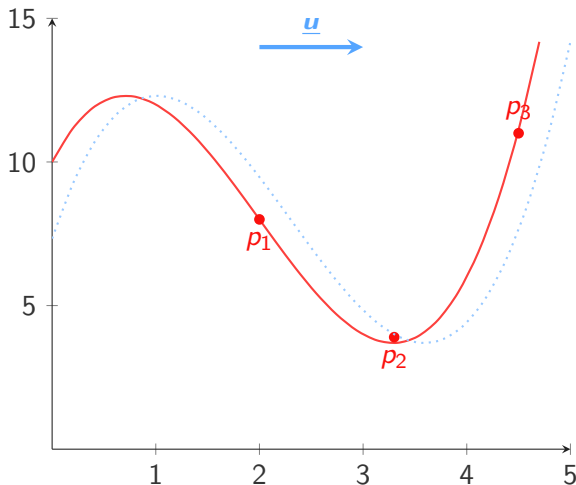
$$\frac{\Delta C}{\Delta t} = - \frac{(u_2 C_2 - u_1 C_1)}{\Delta x}$$

En el límite  $\Delta x \rightarrow 0$ ,  $\Delta t \rightarrow 0$ :

$$\boxed{\frac{\partial C}{\partial t} = - \frac{\partial (u C)}{\partial x}}$$

# Intuición

## Advección

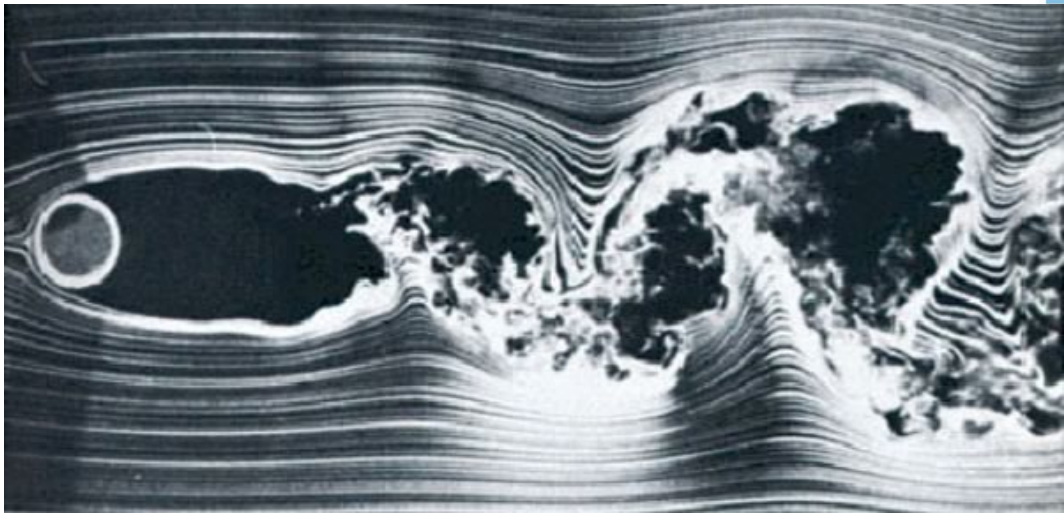


$$- \quad \underline{u} \quad \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}$$

p1	( <input type="checkbox"/> )	( <input type="checkbox"/> )	( <input type="checkbox"/> )	= ( <input type="checkbox"/> ) ↑
p2	( <input type="checkbox"/> )	( <input type="checkbox"/> )	( <input type="checkbox"/> )	= ( <input type="checkbox"/> )
p3	( <input type="checkbox"/> )	( <input type="checkbox"/> )	( <input type="checkbox"/> )	= ( <input type="checkbox"/> ) ↓



# Mezclado turbulento



# Turbulencia



## Mezclado por turbulencia

*La turbulencia es parte del flujo no principal que experimenta variaciones abruptas, irregulares, y caóticas.*

La turbulencia produce mezclado de las especies químicas en la atmósfera.

El mezclado debido a la turbulencia tiene naturaleza difusiva, por lo tanto aplica la

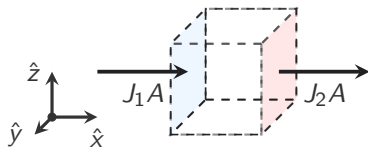
Primer ley de Fick:

$$J = -K \frac{\partial C}{\partial x}$$

El flujo neto de C (J) debido a la difusión es negativamente proporcional al gradiente de concentraciones.



# Mezclado turbulento



$$\Delta m = (J_1 A - J_2 A) \Delta t$$

$$\Delta C \Delta x \Delta y \Delta z = (J_1 - J_2) \Delta y \Delta z \Delta t$$

$$\frac{\Delta C}{\Delta t} = \frac{J_1 - J_2}{\Delta x}$$

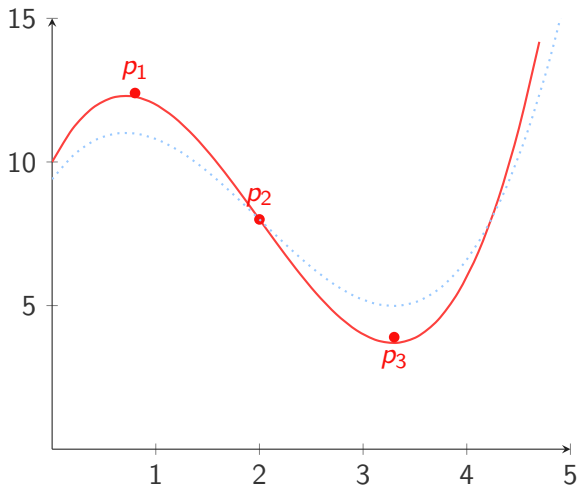
$$\frac{\Delta C}{\Delta t} = - \frac{(-K_2 \frac{\partial C_2}{\partial x}) - (-K_1 \frac{\partial C_1}{\partial x})}{\Delta x}$$

En el límite  $\Delta x \rightarrow 0$ ,  $\Delta t \rightarrow 0$ :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} - K \frac{\partial C}{\partial x} = K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

# Intuición

## Difusión



	$K$	$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$	$=$	$\frac{\partial C}{\partial t}$
p1	( <input type="checkbox"/> )	( <input type="checkbox"/> )	$=$	( <input type="checkbox"/> ) $\downarrow$
p2	( <input type="checkbox"/> )	( <input type="checkbox"/> )	$=$	( <input type="checkbox"/> )
p3	( <input type="checkbox"/> )	( <input type="checkbox"/> )	$=$	( <input type="checkbox"/> ) $\uparrow$



# Ecuación de transporte

# Ecuación de transporte



Finalmente, si sumamos todos los procesos, la ecuación de transporte nos queda:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \underbrace{E}_{\text{Emisión}} - \underbrace{\lambda C}_{\text{Química}} - \underbrace{u \frac{\partial C}{\partial x}}_{\text{Advección}} + \underbrace{K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}}_{\text{Mezclado turbulento}}$$

Para cada situación va a ser necesario definir los parámetros:  $E$ ,  $\lambda$ ,  $u$  y  $K$