Modelado de la Calidad del Aire

Ecuación de transporte

FAUBA

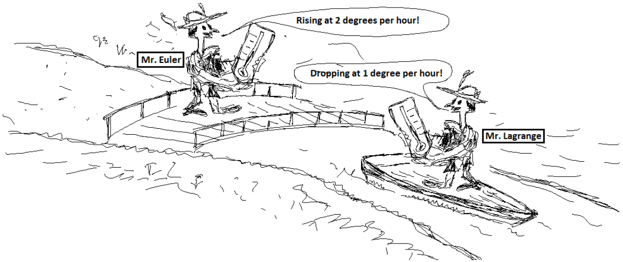
21 de mayo de 2022

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 la concentración de un contaminante en el tiempo y espacio.

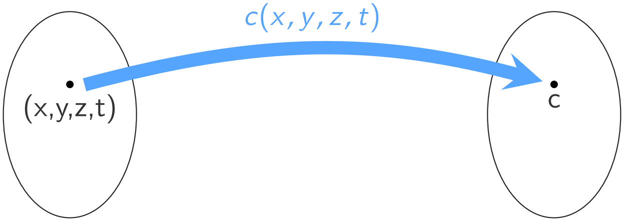


En este curso vamos a adoptar la descripción **Euleriana**.

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*[1] 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.

[1] Ecuación cuya incógnita es una función

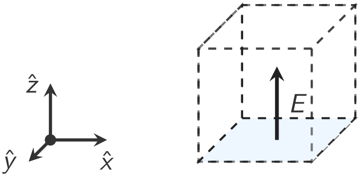

Emisión
Advección
$\underline{u}$
Mezcla
Química

Emisiones

Emisiones

Tasa de producción de C

Representa los procesos que incorporan masa al sistema.

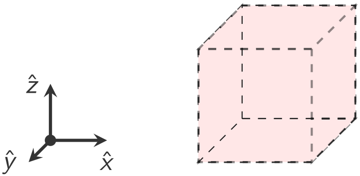


$$\boxed{\frac{\partial C}{\partial t} = E}$$

E depende del espacio y el tiempo (donde y cuando es emitido).
En la pràctica, puede ser medido ó estimado.

Reacciones químicas

Reacciones químicas



Vamos a considerar los siguientes procesos:

- Química
- Fotoquímica
- Lavado
- Deposicion seca

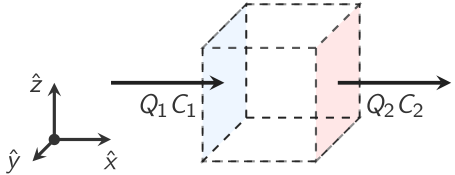
La probabilidad de ocurrencia de estos fenómenos depende de la cantidad de C presente:

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

Advección

Flujo advectivo

Arrastre por el viento



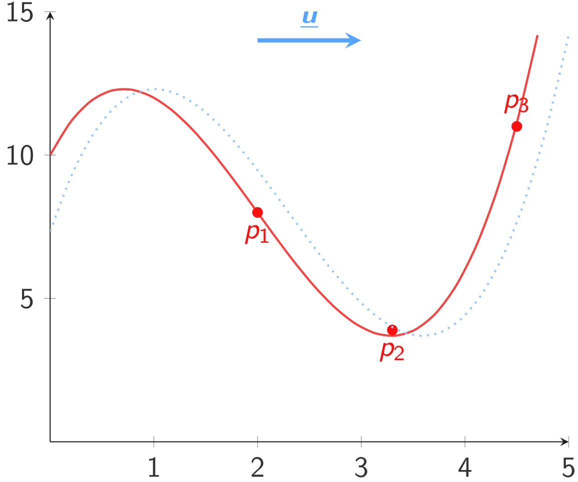
$$
\begin{aligned}
\Delta m &= ({\color{cyan}Q_1 C_1} - {\color{red}Q_2 C_2})\Delta t \\
\Delta C\, V &= (A u_1 C_1 - A u_2 C_2)\Delta t \\
\Delta C\, \Delta x \Delta y \Delta z &= (u_1 C_1 - u_2 C_2)\Delta y \Delta z \Delta t \\
\frac{\Delta C}{\Delta t} &= -\frac{(u_2 C_2 - u_1 C_1)}{\Delta x}
\end{aligned}
$$

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

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

Intuición

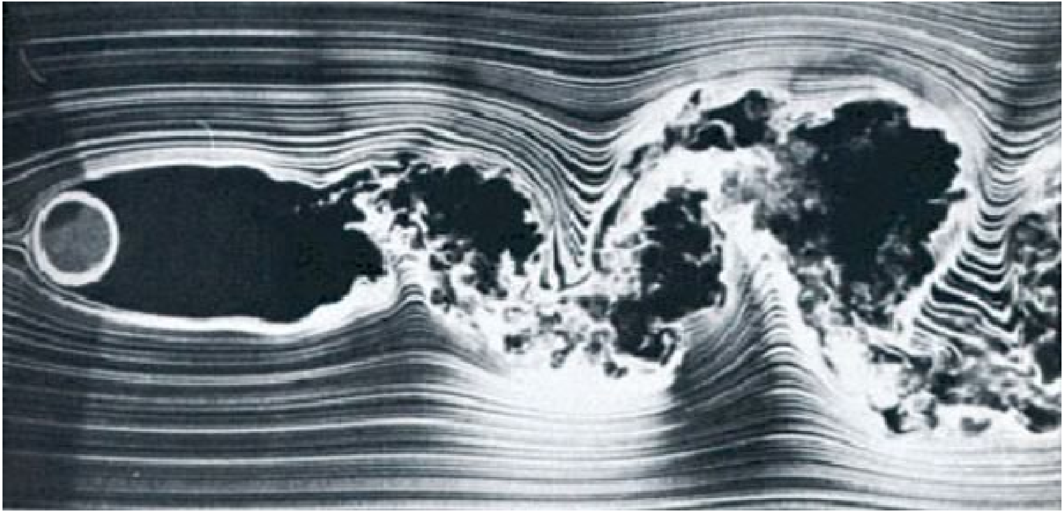
Advección



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

p1	($\square$)	($\square$)	($\square$)	=	($\square$) $\uparrow$
p2	($\square$)	($\square$)	($\square$)	=	($\square$)
p3	($\square$)	($\square$)	($\square$)	=	($\square$) $\downarrow$

Mezclado turbulento



Turbulencia

Mezclado por turbulencia

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

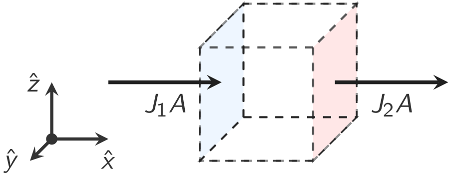
La turbulencia produce mezclado de las especies químicas en la atmósfera.

El mezclado debido a la turbulencia tiene naturaleza difusiva, por lo tanto aplica la Primer ley de Fick:

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

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

Mezclado turbulento



$$\Delta m = ({\color{blue}J_1 A} - {\color{red}J_2 A})\Delta t$$

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

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

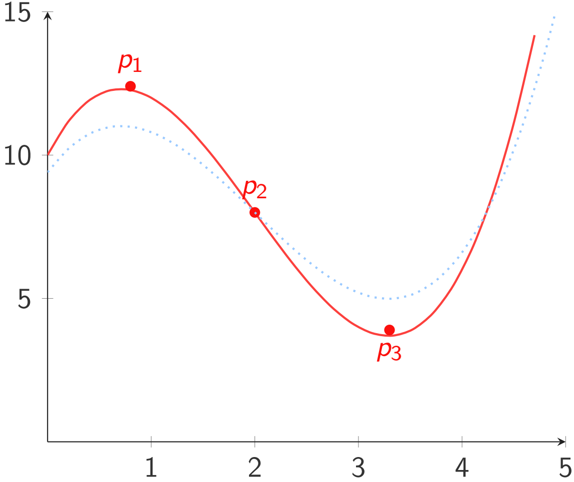
$$\frac{\Delta C}{\Delta t} = -\frac{(-K_2 \frac{\partial C_2}{\partial x}) - (-K_1 \frac{\partial C_1}{\partial x})}{\Delta x}$$

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

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

Intuición

Difusión



	$+$	K	$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$	$= \frac{\partial C}{\partial t}$
p1	$(\square)$	$(\square)$	$(\square)$	$= (\square) \downarrow$
p2	$(\square)$	$(\square)$	$(\square)$	$= (\square)$
p3	$(\square)$	$(\square)$	$(\square)$	$= (\square) \uparrow$

Ecuación de continuidad

Ecuación de transporte

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

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

Para cada situación va a ser necesesario definir los parámetros: E, λ, u y K