

# 1 | Ecuación de transporte

La ecuación que rige el transporte de las especies químicas en la atmósfera (y en cualquier fluido) es la de conservación de la masa ó **ecuación de transporte**. Es una ecuación fundamental y junto a la *primer ley de la termodinámica* y la de *conservación de momentum*, forman las *ecuaciones primitivas* que dan una descripción bastante completa del funcionamiento de la atmósfera.

La ecuación de transporte describe matemáticamente como cambia la concentración de la especie química de interés (que llamaremos  $C$ ) en el tiempo para un punto arbitrario fijo en el espacio.

Para obtener tal descripción hay que analizar todos los procesos involucrados en la creación y destrucción de  $C$ . Los principales procesos son: *emisiones*, el arrastre con el viento ó *advección*, la mezcla ó *difusión turbulenta* y las *reacciones químicas*.



**Fig. 1.1:** Principales fenómenos involucrados en el transporte de contaminantes en aire.

En las siguientes secciones vamos a deducir individualmente las expresiones matemáticas de cada proceso para luego ensamblarlos y obtener finalmente la *ecuación de transporte*.

## 1.1. Emisiones

Este término contempla todos los procesos que incorporan a la especie química bajo estudio a la atmósfera.

En un punto dado la variación en el tiempo de la cantidad de un compuesto  $C$  debido a la emisión será igual a la *tasa de emisión* ( $E$ ) en dicho punto, esto es la

cantidad de compuesto  $C$  que es incorporada a la atmósfera por unidad de tiempo. Por lo tanto:

$$\boxed{\frac{\partial C}{\partial t} = E} \quad (1.1)$$

En la práctica el valor de  $E$  se obtiene mediante mediciones sobre la fuente emisora ó bien puede estimarse utilizando metodologías estandarizadas tales como (AP-42) de la EPA ó la guía del IPCC.

## 1.2. Reacciones químicas

Además del transporte advectivo y los flujos turbulentos hay otros procesos que pueden ser importantes en el transporte de contaminantes: reacciones químicas, fotoquímica, deposición, etc.

Todos estos procesos reducen la cantidad del compuesto y dependen de la concentración del mismo, por lo que suele modelarse con la ecuación de decaimiento exponencial:

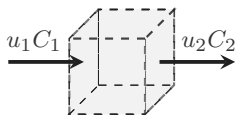
$$\boxed{\frac{\partial C}{\partial t} = -\lambda C} \quad (1.2)$$

donde  $\lambda$  es una constante de decaimiento que puede depender de distintas variables según que proceso se quiera representar. Por ejemplo para el caso de reacciones químicas  $\lambda$  sería proporcional a la concentración de los compuestos reactivos por una constante de reacción, en el caso de procesos fotoquímicos sería proporcional a la irradiancia, etc.

## 1.3. Advección

Una vez que el contaminante esté en la atmósfera los vientos van a ejercer su influencia en el transporte.

Consideremos un elemento de la atmósfera infinitesimal de volumen  $\Delta x \Delta y \Delta z$ :



El cubo recibe una cantidad de  $C_1$  que llega de con velocidad  $u_1$  desde la izquierda, y a su vez desplaza una cantidad  $C_2$  que se va a velocidad  $u_2$  por la derecha. Podemos ver que la variación de  $C$  en nuestro cubo es igual a lo que entra por la izquierda menos lo que sale por la derecha, es decir:

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

Reordenando términos y obtenemos:

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

Si tomamos el límite  $\Delta x \rightarrow 0$  y  $\Delta t \rightarrow 0$ , podemos escribir la siguiente ecuación diferencial:

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

Si realizamos el mismo razonamiento contemplando las 3 direcciones del viento llegaríamos a:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \frac{\partial(uC)}{\partial x} - \frac{\partial(vC)}{\partial y} - \frac{\partial(wC)}{\partial z}$$

donde  $u, v, w$  son las componentes  $x, y, z$  del vector viento respectivamente.

Esta ecuación representa el *flujo advectivo* y es generalmente el mecanismo que domina el transporte de contaminantes.

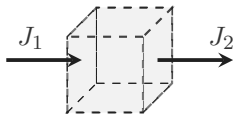
## 1.4. Flujo difusivo

El movimiento errático de las moléculas del compuesto  $C$  inmerso en un medio como el aire genera un flujo neto de partículas ( $J$ ) desde dónde hay mayor concentración de  $C$  hacia donde hay menos, este fenómeno se conoce como *difusión molecular* y está descrito por la *Primer ley de Fick*:

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

donde  $D$  se conoce como coeficiente de difusión.

Usando esta ley y haciendo el balance de masas de la misma forma que lo hicimos para la advección obtendríamos:



$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} J = - \frac{\partial}{\partial x} \left( -D \frac{\partial C}{\partial x} \right)$$

Si asumo que  $D$  es constante en  $x$ , luego:

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

Contemplando el resto de las dimensiones, obtenemos la *Segunda ley de Fick*:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial C}{\partial x^2} + D \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}$$

esta ecuación describe el transporte de  $C$  debido a la difusión molecular.

En la escala que usualmente trabajamos este mecanismo de transporte es extremadamente lento comparado con los mecanismos advectivos, por lo tanto no se tiene en cuenta.

## 1.5. Mezclado turbulento

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

La turbulencia cumple un rol importante en el mezclado de especies químicas en la atmósfera. Además se ha visto que esta mezcla tiene naturaleza difusiva, por lo que es posible utilizar análogamente la *Segunda ley de Fick*.

Para evitar confusiones con la difusión molecular vamos a llamar  $K$  al coeficiente de turbulencia:

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

donde  $K$  es la *constante de mezclado turbulento* es una medida de la intensidad del mezclado por turbulencia y es un parámetro importante de estimar.

## 1.6. La ecuación de transporte

Cuando ensamblamos todos los procesos explicados en las secciones anteriores obtenemos la *ecuación de transporte*<sup>1</sup>:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \underbrace{E}_{\text{Emisión}} - \underbrace{\lambda C}_{\text{Química}} - \underbrace{u \frac{\partial C}{\partial x}}_{\text{Advección}} + \underbrace{K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}}_{\text{Mezclado turbulento}} \quad (1.3)$$

Al resolver esta ecuación diferencial obtendremos una función que nos permitirá saber cuanto vale la concentración del contaminante  $C$  en cada punto del espacio en cada tiempo.

---

<sup>1</sup>En la atmósfera la difusión molecular resulta despreciable frente al resto de los mecanismos y por lo tanto no se tiene en cuenta.