

Modelado de la Calidad del Aire

Ecuación de transporte

Ramiro A. Espada
espada@agro.uba.ar

Consultora Oeste

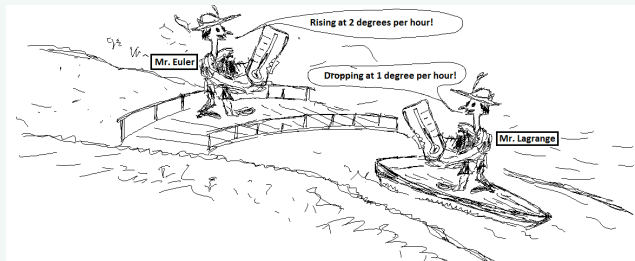
August 31, 2024

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.

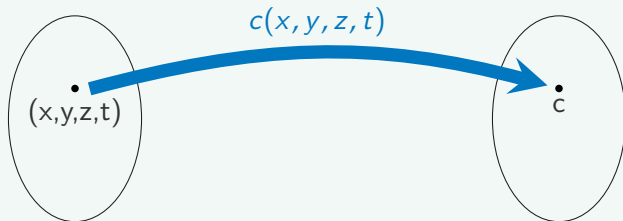


En este curso vamos a adoptar la descripción **Euleriana**.

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*:

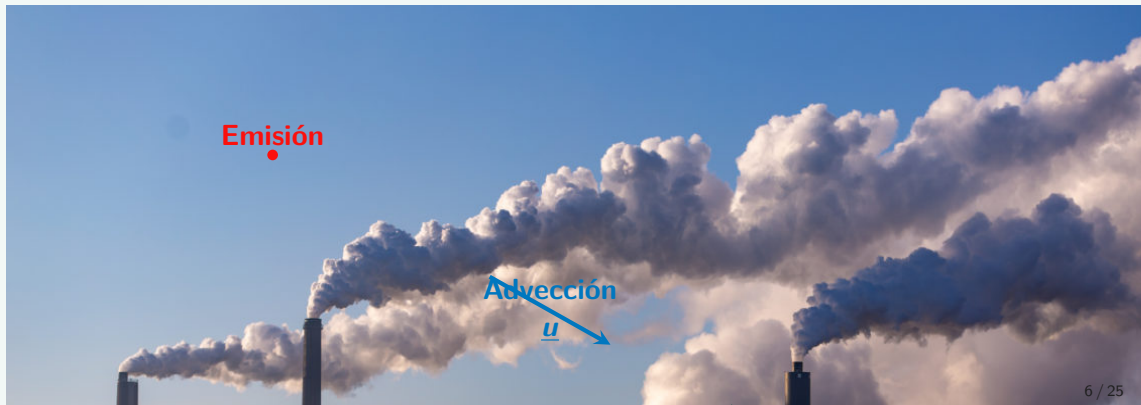


Es una *ecuación diferencial*¹ basada en el **principio de conservación de masa**.

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.

¹Ecuación cuya incógnita es una función

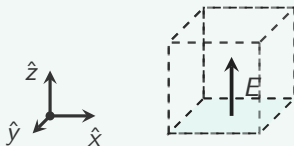


Emisiones

Emisiones

Tasa de producción de c

Representa los procesos que incorporan masa al sistema.

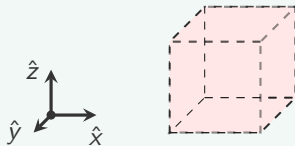


$$\frac{\partial c}{\partial t} = E$$

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

En la práctica, puede ser medido ó estimado.

Reacciones químicas



Vamos a considerar los siguientes procesos:

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

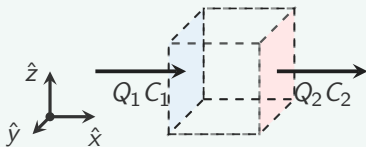
La probabilidad de ocurrencia de estos fenómenos depende de la cantidad de C presente:

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

Advección

Flujo advectivo

Arrastre por el viento



$$\Delta m = (Q_1 c_1 - Q_2 c_2) \Delta t$$

$$\Delta c V = (A u_1 c_1 - A u_2 c_2) \Delta t$$

$$\Delta c \Delta x \Delta y \Delta z = (u_1 c_1 - u_2 c_2) \Delta y \Delta z \Delta t$$

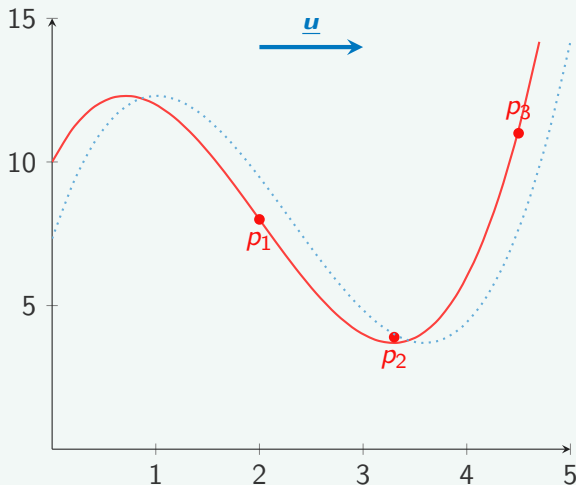
$$\frac{\Delta c}{\Delta t} = - \frac{(u_2 c_2 - u_1 c_1)}{\Delta x}$$

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

$$\boxed{\frac{\partial c}{\partial t} = - \frac{\partial (uc)}{\partial x}}$$

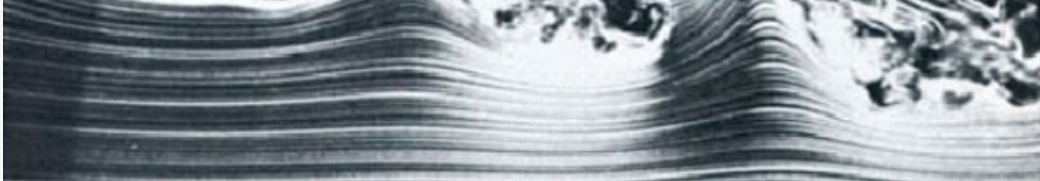
Intuición

Advección



	$-\underline{u}$	$\frac{\partial c}{\partial x} =$	$\frac{\partial c}{\partial t}$
p1	(-)	(\square) =	(\square) \uparrow
p2	(-)	(\square) =	(\square)
p3	(-)	(\square) =	(\square) \downarrow

Mezclado turbulento



2

²tomado de *An album of fluid motion*, de Milton Van Dyke.

Mezclado por turbulencia

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

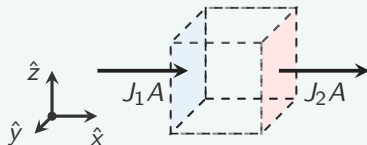
La turbulencia produce mezclado de las especies químicas en la atmósfera.

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.



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

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

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

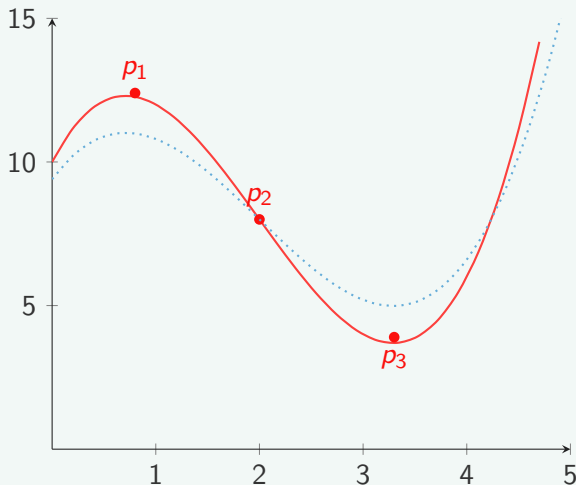
$$\frac{\Delta c}{\Delta t} = - \frac{(-K_2 \frac{\partial c_2}{\partial x}) - (-K_1 \frac{\partial c_1}{\partial x})}{\Delta x}$$

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	(+)	(\square) =	(\square) \downarrow
p2	(+)	(\square) =	(\square)
p3	(+)	(\square) =	(\square) \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 , λ , u y K