Modelado de la Calidad del Aire

Modelos Gaussianos

Ramiro A. Espada
espada@agro.uba.ar

Consultora Oeste

September 1, 2024

Resolución de la ecuación de transporte

Modelar la química atmosférica consiste en resolver la ecuación de transporte:[1]

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

Expresa la *conservación de masa* para una especie c transportado por la atmósfera.

[1] c: concentración de especie quimica, v: velocidad del viento, K: coeficiente de turbulencia, E: tasa de emisión, λ: constante de reacción/degradación.

Resolución de la ecuación de transporte

Modelar la química atmosférica consiste en resolver la ecuación de transporte:[1]

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

Expresa la *conservación de masa* para una especie c transportado por la atmósfera.

Hay dos caminos para resolverla:

Analítico

- Solución exacta.
- Utiliza supuestos y simplificaciones.
- Muy rápidos de computar.

Numérico

- Solución aproximada.
- Sin supuestos ni simplificaciones.
- Demandan mucho poder de cálculo.

[1] c: concentración de especie quimica, v: velocidad del viento, K: coeficiente de turbulencia, E: tasa de emisión, λ: constante de reacción/degradación.

Solución Analítica a Ecuación de Transporte

Solución Analítica

Modelos Gaussianos

Dan la solución a:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -u\frac{\partial c}{\partial x} + K_x\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

[2] $\mu = ut$, $\sigma_x = \sqrt{2K_x t}$

Solución Analítica

Modelos Gaussianos

Dan la solución a:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -u\frac{\partial c}{\partial x} + K_x\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

Cuya solución analítica tiene la forma:[2]

$$c_{(x,t)} = \frac{M}{\sqrt{2\pi}\sigma_x}\exp\left[-\frac{1}{2}\frac{(x-\mu)^2}{\sigma_x^2}\right]$$

[2] $\mu = ut$, $\sigma_x = \sqrt{2K_x t}$

Solución Analítica

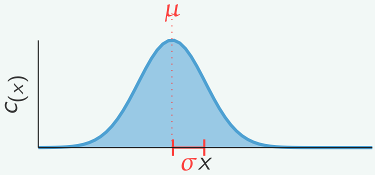
Modelos Gaussianos

Dan la solución a:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -u\frac{\partial c}{\partial x} + K_x\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

Cuya solución analítica tiene la forma:[2]

$$c_{(x,t)} = \frac{M}{\sqrt{2\pi}\sigma_x}\exp\left[-\frac{1}{2}\frac{(x-\mu)^2}{\sigma_x^2}\right]$$



[2] $\mu = ut$, $\sigma_x = \sqrt{2K_x t}$

Intuición solución analítica

Graficar solución analítica:

https://www.desmos.com/calculator

Discusión:

- Interpretar parámetros (μ y σ).
- Representa difusión?
- Representa advección?
- Garantiza conservación de masa?
- Incluir término de decaimiento.

Puff Gaussiano

Puff Gaussiano

Solución transitoria

Resuelve:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -u\frac{\partial c}{\partial x} + K_x\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + K_y\frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + K_z\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}$$

[3] $\mu = ut$, $\sigma_* = \sqrt{2K_* t}$

Puff Gaussiano

Solución transitoria

Resuelve:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -u\frac{\partial c}{\partial x} + K_x\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + K_y\frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + K_z\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}$$

Cuya solución es[3]:

$$C_{(x,y,z,t)} = \frac{M}{\sqrt{2\pi}^3\sigma_x\sigma_y\sigma_z}\exp\left[-\frac{(x-ut)^2}{2\sigma_x^2}\right]\exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right]\exp\left[-\frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right]$$

[3] $\mu = ut$, $\sigma_* = \sqrt{2K_* t}$

Puff Gaussiano

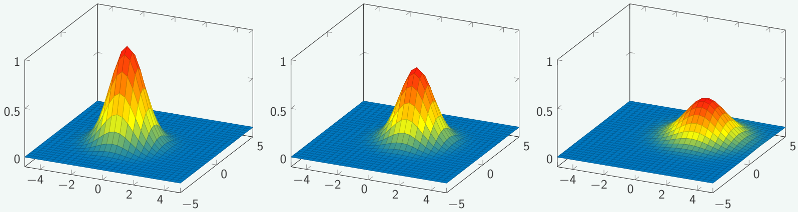
Solución transitoria

Resuelve:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -u\frac{\partial c}{\partial x} + K_x\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + K_y\frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + K_z\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}$$

Cuya solución es[3]:

$$C_{(x,y,z,t)} = \frac{M}{\sqrt{2\pi}^3\sigma_x\sigma_y\sigma_z}\exp\left[-\frac{(x-ut)^2}{2\sigma_x^2}\right]\exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right]\exp\left[-\frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right]$$



[3] $\mu = ut,\ \sigma_* = \sqrt{2K_* t}$

Pluma Gaussiana

Pluma Gaussiana

Solución estacionaria

Si planteamos la condición de equilibrio:[4]

$$\frac{\partial c}{\partial t} = 0 = -u\frac{\partial c}{\partial x} + K_y\frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + K_z\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}$$

Despejando:

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{K_y}{u}\frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{K_z}{u}\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}$$

[4]Despreciamos la mezcla turbulenta en x ya que es muy chico comparado con la advección.

Pluma Gaussiana

Solución estacionaria

Resuelve:

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{K_y}{u}\frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{K_z}{u}\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}$$

[5]Dado que $t = x/u = cte.$, entonces: $\sigma_i = \sqrt{2K_i t} = \sqrt{2K_i x/u}$.

Pluma Gaussiana

Solución estacionaria

Resuelve:

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{K_y}{u}\frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{K_z}{u}\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}$$

Cuya solución es:[5]

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

[5] Dado que $t = x/u = cte.$, entonces: $\sigma_i = \sqrt{2K_i t} = \sqrt{2K_i x/u}$.

Pluma Gaussiana

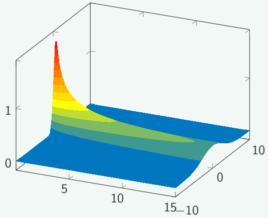
Solución estacionaria

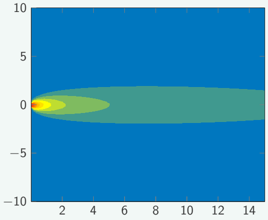
Resuelve:

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{K_y}{u}\frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{K_z}{u}\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}$$

Cuya solución es:[5]

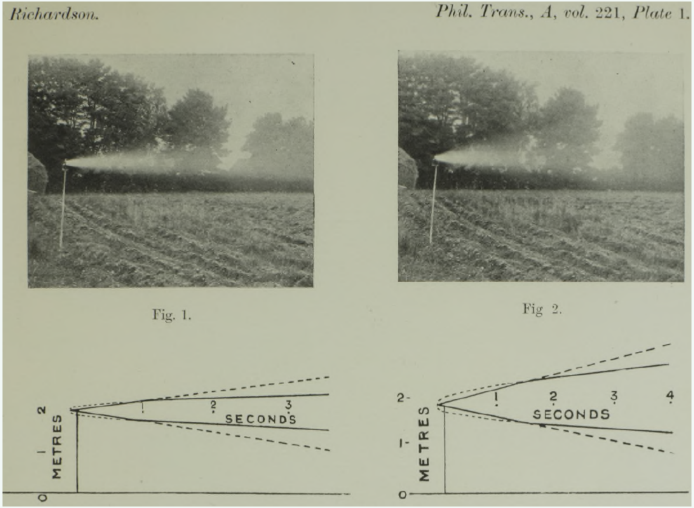
$$c_{(x,y,z)} = \frac{Q}{u\sqrt{2\pi}^2\sigma_y\sigma_z}\exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right]\exp\left[-\frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right]$$





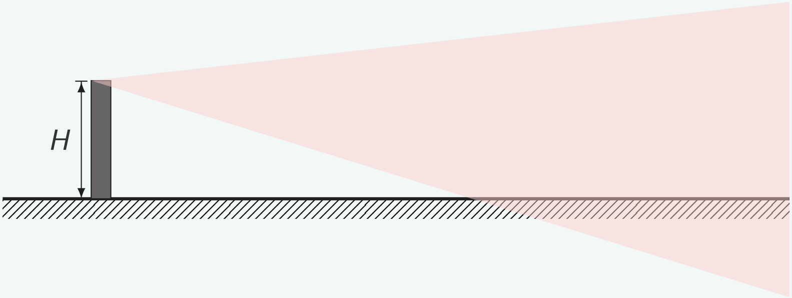
[5]Dado que $t = x/u = cte.$, entonces: $\sigma_i = \sqrt{2K_i t} = \sqrt{2K_i x/u}$.

Comparación Pluma Gaussiana con experimento de Richardson



Modificacciones a modelo Gaussiano

Altura de la fuente



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

Altura efectiva

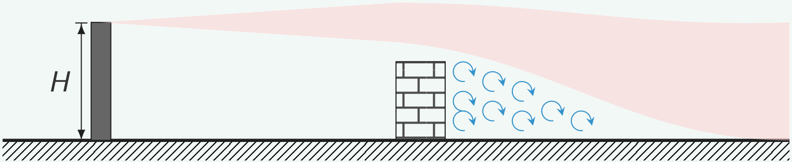
Plume Rise

Elevación por empuje térmico y e impulso en la fuente.

$$C_{(x)} = \frac{Q}{u\sqrt{2\pi}^2 \sigma_y \sigma_z} \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right] \exp\left[-\frac{(z - H - \Delta h)^2}{2\sigma_z^2}\right]$$

Edificios y obstaculos

Downwash

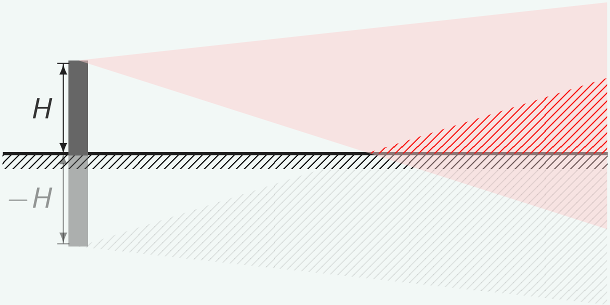


Deflección por sombra turbulenta generada por edificios y obstaculos:

$$C_{(x)} = \frac{Q}{u\sqrt{2\pi}^2 \sigma_y \sigma_z} \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right] \exp\left[-\frac{(z - H - \Delta h)^2}{2\sigma_z^2}\right]$$

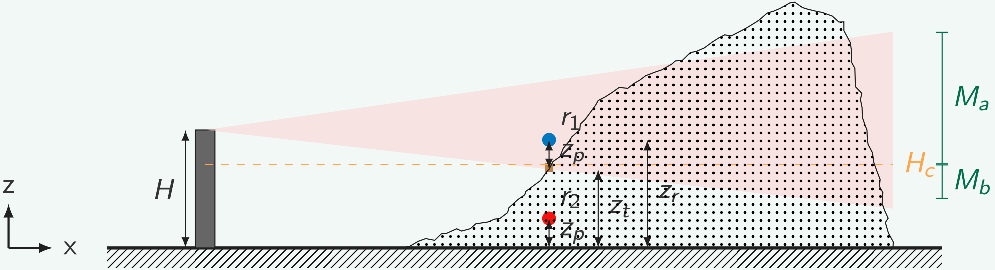
Terreno (plano)

Reflexión



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

Terreno complejo



Se calculan dos plumas, una ignorando el terreno y otra siguiendo el terreno:

$$C_{tot} = f\,C_{ref} + (1-f)\,C_{terr}.$$

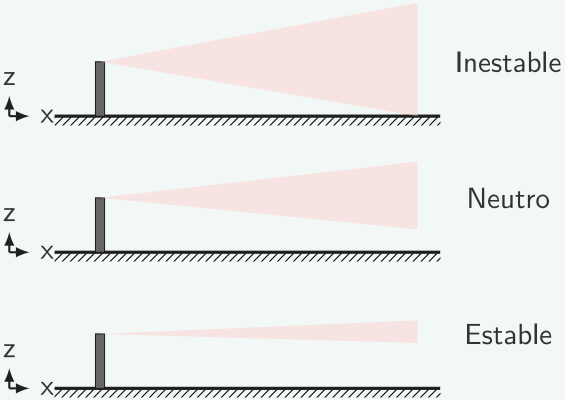
El resultado es una ponderación de estas dos determinadas por el factor f. [6]

[6] donde $f = 0.5 + 0.5\varphi_p$ y $\varphi_p = M_b/M_a\,M_b$. M_a Masa sobre H_c y M_b masa por debajo de H_c. h_c: hill slope scale. H_c: critical dividing streamline

Coeficientes turbulentos

Estabilidad

La estabilidad da idea de la libertad que tienen las maasas de aire para moverse verticalmente.



Coeficientes turbulentos

Parametrizaciones basadas en clases de estabilidad

La clasificación mas usada para determinar la estabilidad atmosférica es la desarrollada por Pasquill (1961) y Gifford (1961). Ellos definieron 6 clases (A-F)[7]

	Día			Noche	
	Radiación solar			Nubosidad	
$u(m/s)$	Fuerte	Media	Débil	Nublado ($> 4/8$)	Despejado ($< 3/8$)
$<$2	A	A-B	B	E	F
2-3	A-B	B	C	E	F
3-5	B	B-C	C	D	E
5-6	C	C-D	D	D	D
$>$6	C	D	D	D	D

Table 1: Clases de Estabilidad

[7] donde A: muy inestable, B: moderadamente estable, C: levemente estable, D neutral, E levemente estable, F: estable.

Coeficientes turbulentos

Parametrizaciones basadas en clases de estabilidad

Briggs (1973), propuso formulas empiricas para el calculo de los σ:

$$\sigma_y = \frac{ax}{(1+bx)^c} \qquad \sigma_z = \frac{dx}{(1+ex)^f}$$

Los coeficientes (a,b,c,d,e,f) están tabulados y dependen de la clase de estabilidad:

C.E	a	b	c	d	e	f
A	0.22	0.0001	0.5	0.2	0	
B	0.16	0.0001	0.5	0.12	0	
C	0.11	0.0001	0.5	0.08	0.0002	0.5
D	0.08	0.0001	0.5	0.06	0.0015	0.5
E	0.06	0.0001	0.5	0.03	0.0003	1
F	0.04	0.0001	0.5	0.016	0.0003	1

Table 2: Rural

C.E	a	b	c	d	e	f
A	0.32	0.0004	0.5	0.24	0.0001	-0.5
B	0.32	0.0004	0.5	0.24	0.0001	-0.5
C	0.22	0.0004	0.5	0.2	0	
D	0.16	0.0004	0.5	0.14	0.0003	0.5
E	0.11	0.0004	0.5	0.08	0.0015	0.5
F	0.11	0.0004	0.5	0.08	0.0015	0.5

Table 3: Urbano

Coeficientes turbulentos

Modificadores temporales

Los coeficientes de Briggs fueron generados con observaciones de promedios de 10 minutos. Para otros promedios temporales se usa:

$$\sigma_{y,2} = \sigma_{y,1}\left(\frac{t_2}{t_1}\right)^p$$

Coeficientes turbulentos

Parametrizaciones continuas

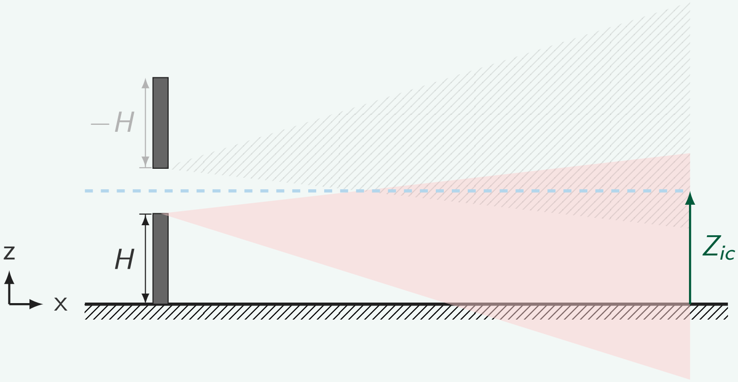
Basadas en el estudio de la turbulencia:

$$\sigma_y = \sigma_v \frac{x}{u} f_y \qquad \sigma_z = \sigma_w \frac{x}{u} f_z$$

donde σ_v y σ_w son los desvíos estándar de la velocidad del viento en la componente y y z respectivamente.

Capa límite

Inversiones Térmicas



Se resuelve de la misma forma que la reflexión en el suelo.

Química y Deposición

Generalmente se aproximan con la ecuación de decaimiento exponencial de primer orden:[8]

$$C_{(x,y,z)} = \frac{Q}{u}\phi_y\phi_z \exp\left[-\lambda\frac{x}{u}\right]$$

[8] $\phi_x = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\exp\left[-\frac{1}{\ldots}\right]}$

Terreno Urbano/Industrial

Un ambiente urbano/industrial se diferencia de uno rural en:

- Rugosidad (por obstaculos)
- Balance radiativo (diferencias en reflectividad, y evaporaciòn)
- Turbulencia afectada por ostaculos (entre obstaculos y sobre ellos)
- Perfil de velocidad de vientos (el perfil calculado por teoria de similitud no funciona a alturas de 1-2 alturas de los obstaculos, es decir 10-20 $z0$).