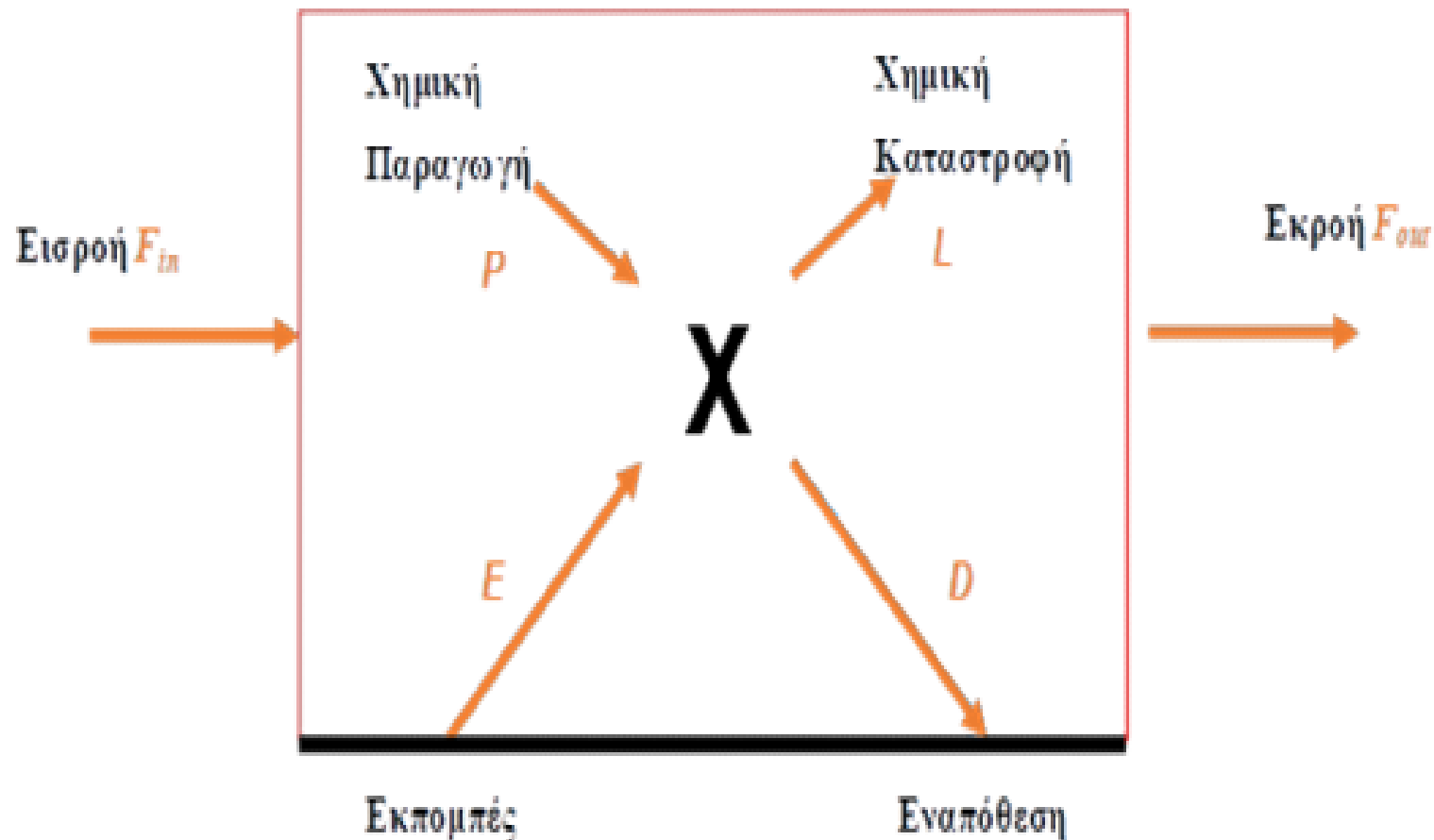


Μοντέλο μηδενικών διαστάσεων

- Μια αρκετά απλή μοντελοποίηση για τον υπολογισμό της συγκέντρωσης του διοξειδίου του άνθρακα στην ατμόσφαιρα μπορεί να γίνει με την χρήση μοντέλου μηδενικών διαστάσεων (μοντέλο όγκου).
- Στο μοντέλο μηδενικών διαστάσεων θεωρούμε τον όγκο ομογενή και τη συγκέντρωση ίδια μέσα σε όλο τον όγκο.

Μοντέλο Μοναδιαίου Όγκου (Αναπροσαρμοσμένο από Jacobson, 1998)



Μοντέλο Μοναδιαίου Όγκου - Συνέχεια

- Η εξίσωση συνέχειας για τη μάζα m ενός ρύπου μέσα σε ένα όγκο αέρα μπορεί να γραφεί ως:

$$\text{Mass balance equation: } \frac{dm}{dt} = \sum \text{sources} - \sum \text{sinks} = F_{in} + E + P - F_{out} - L - D$$

Ορίζουμε επίσης ως ατμοσφαιρικό χρόνο παραμονής τ το πηλίκο

$$\tau = \frac{m}{F_{out} + L + D}$$

Συντελεστές εξίσωσης

Ο ατμοσφαιρικός χρόνος παραμονής μπορεί να εκφραστεί ως

$$\frac{1}{\tau} = \frac{F_{out}}{m} + \frac{L}{m} + \frac{D}{m} = \frac{1}{\tau_{export}} + \frac{1}{\tau_{chem}} + \frac{1}{\tau_{dep}} \quad (29)$$

Η σταθερά καταστροφής k μπορεί να εκφραστεί με τη βοήθεια του χρόνου παραμονής

$$k = \frac{1}{\tau} = k_{export} + k_{chem} + k_{dep} \quad (30)$$

Εξίσωση Συνέχειας

Η εξίσωση συνέχειας εκφράζεται ως

$$\frac{dm}{dt} = S - k m \quad (31)$$

όπου ο όρος S αναφέρεται στο άθροισμα των όρων των εκπομπών, εισροών και χημικής παραγωγής. Η επίλυση της εξίσωσης συνέχειας που είναι μια διαφορική εξίσωση πρώτης τάξης γράφεται ως

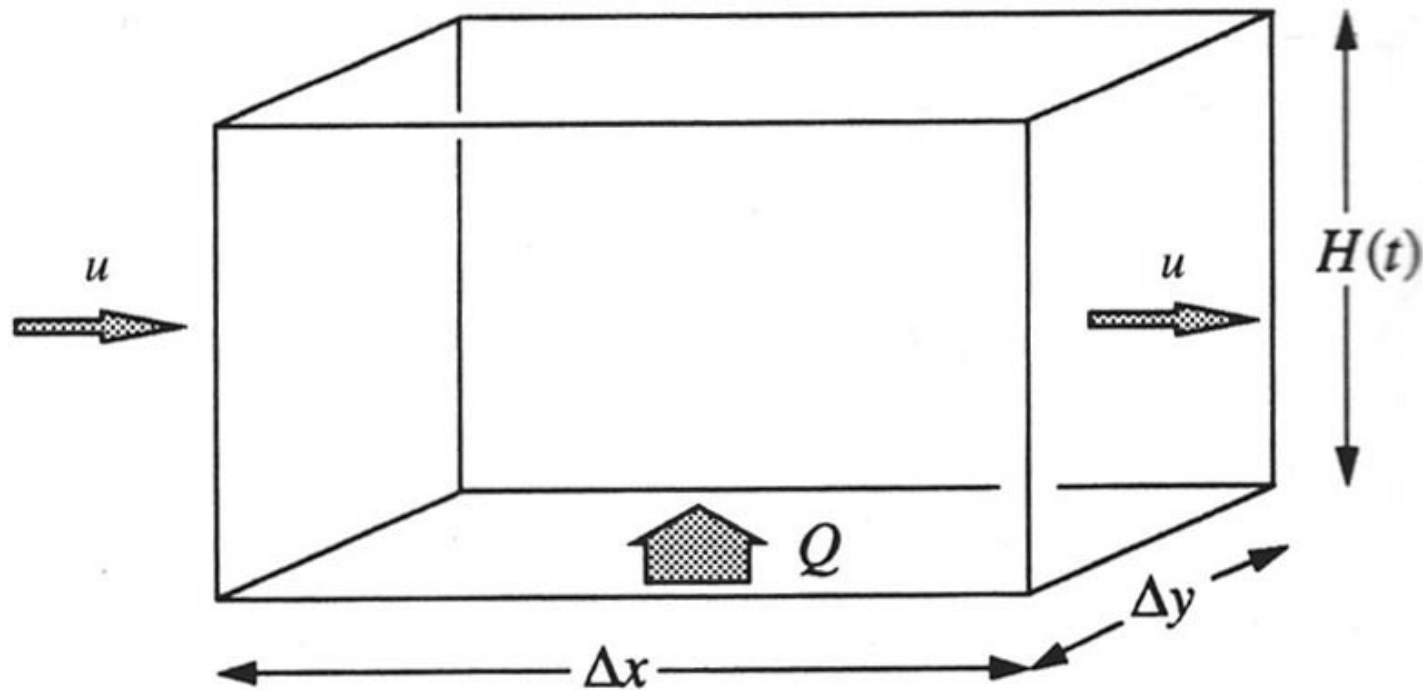
$$m(t) = m(0)e^{-kt} + \frac{S}{k}(1 - e^{-kt}) \quad (32)$$

Εξίσωση Συνέχειας

Όταν S και k έχουν σταθερές τιμές και $t \gg t_0$, τότε dm/dt τείνει στο 0 και η τιμή του m προσεγγίζει το λόγο S/k .

Τότε λέμε ότι έχουμε συνθήκες σταθερής κατάστασης.

Εξίσωση Συνέχειας - Ατμόσφαιρα



Εξίσωση Συνέχειας - Ατμόσφαιρα – Όροι της εξίσωσης συνέχειας

Η μεταβολή στη συγκέντρωση c_i (Kg m^{-3}) ρύπου (i) σε μια κυψελίδα μηδενικού όγκου ($\Delta x \Delta y H$) μπορεί να γραφεί ως $d/dt(c_i \Delta x \Delta y H)$.

Η μεταβολή αυτή προέρχεται από:

Χημική Παραγωγή ($\text{Kg m}^{-3} \text{h}^{-1}$) **P**: $R_i = C_i k_i$
(k_i είναι συντελεστής χημικών αντιδράσεων πρώτης τάξεως)

Χημική Καταστροφή ($\text{Kg m}^{-3} \text{h}^{-1}$) **L**: $R_i = -C_i k_i$

Εκπομπές (Kg h^{-1}) **E**

Εναπόθεση (Kg h^{-1}) **D** = $C_i u_{d,i} \Delta x \Delta y$ ($u_{d,i}$ η ταχύτητα εναπόθεσης)

Όροι της εξίσωσης συνέχειας

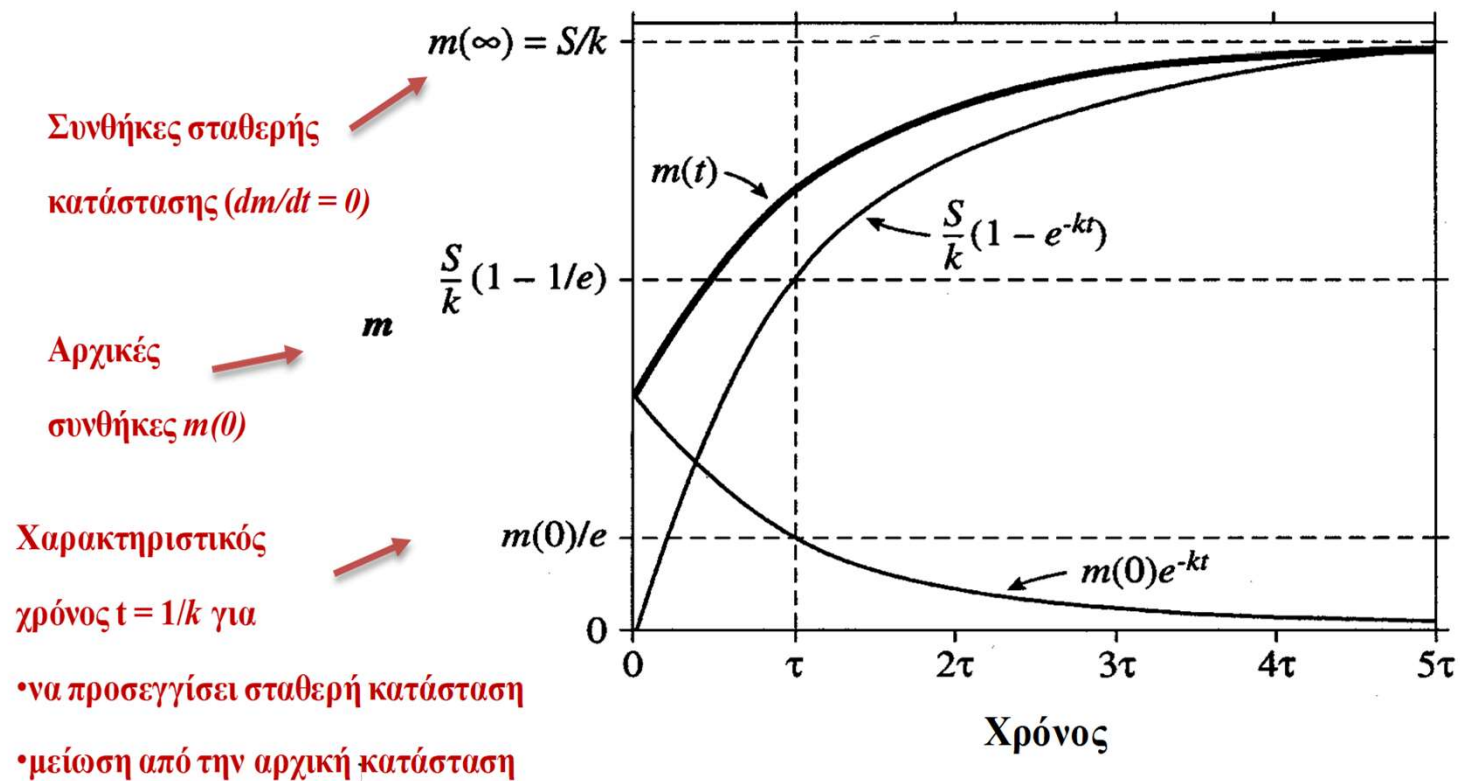
Εισροή (Kg h^{-1}) $F_{in} = u H \Delta y c_o$

(c_o είναι η συγκεντρωση του ρύπου έξω από το μηδενικό όγκο)

Εκροή (Kg h^{-1}) $F_{out} = - u H \Delta y c$

Σύστημα συντεταγμένων Lagrange : δεν υπάρχει ο όρος της μεταφοράς (εισροή – εκροή)

Γραφική παράσταση της επίλυσης της εξίσωσης συνέχειας μηδενικού όγκου



Εξίσωση Συνέχειας - Ατμόσφαιρα

Η αναλυτική μορφή της εξίσωσης συνέχειας μπορεί τελικά να γραφεί ως :

$$\frac{d}{dt}(c_i \Delta x \Delta y H) = Q_i + R_i \Delta x \Delta y H - S_i + u H \Delta y (c_i^o - c_i)$$

Αύξηση του ύψους του οριακού στρώματος

Το παραπάνω πρόβλημα γίνεται πιο ενδιαφέρον όταν έχουμε το οριακό στρώμα $H(t)$ να μεταβάλλεται με το χρόνο. Θεωρούμε ότι έχουμε συγκέντρωση c_i^a του ρύπου πάνω από το αρχικό ύψος του οριακού στρώματος H . Υποθέτουμε επίσης ότι μετά χρόνο Δt το ύψος του οριακού στρώματος αυξάνεται από την τιμή H σε $H + \Delta H$, ενώ η συγκέντρωση του ρύπου μεταβάλλεται από c_i σε $c_i + \Delta c_i$.

Σύστημα συντενταγμένων Euler

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{q_i}{H(t)} + R_i - \frac{v_{d,i}}{H(t)} c_i + \frac{(c_i^o - c_i)}{\tau_r} \quad \text{για } \frac{dH}{dt} \leq 0 \quad (6-1)$$

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{q_i}{H(t)} + R_i - \frac{v_{d,i}}{H(t)} c_i + \frac{(c_i^o - c_i)}{\tau_r} + \frac{c_i^a - c_i}{H(t)} \frac{dH}{dt} \quad \text{για } \frac{dH}{dt} > 0 \quad (6-2)$$

Σύστημα συντεταγμένων Lagrange

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{q_i}{H(t)} + R_i - \frac{v_{d,i}}{H(t)} c_i \quad \text{για } \frac{dH}{dt} \leq 0 \quad (6-1)$$

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{q_i}{H(t)} + R_i - \frac{v_{d,i}}{H(t)} c_i + \frac{c_i^a - c_i}{H(t)} \frac{dH}{dt} \quad \text{για } \frac{dH}{dt} > 0 \quad (6-2)$$

Μοντέλα εσωτερικών χώρων

Υποθέτουμε ότι τα συστατικά μέσα στον όγκο του εσωτερικού χώρου είναι καλά αναμεμιγμένα και γράφουμε την εξίσωση ισορροπίας της μάζας ως συνάρτηση του ρυθμού διείσδυσης από τον εξωτερικό χώρο, τις εσωτερικές πηγές και τις καταβόθρες ως:

$$V \frac{dc}{dt} = Qc_a + E - Qc - kcV \quad (6-1)$$

όπου Q (m^3/s) είναι ο ρυθμός διείσδυσης από τον εξωτερικό χώρο και c_a (g/m^3) είναι η συγκέντρωση των ρύπων στον εξωτερικό χώρο.

Μοντέλα εσωτερικών χώρων - συνέχεια

Η γενική λύση της εξίσωσης 6-1 εκφράζεται ως:

$$c = \frac{\frac{E}{V} + c_a \frac{Q}{V}}{\frac{Q}{V} + k} \left[1 - \exp \left(- \left(\frac{Q}{V} + k \right) t \right) \right] + c_o \exp \left[- \left(\frac{Q}{V} + k \right) t \right] \quad (6-1)$$

όπου c_o είναι η αρχική συγκέντρωση του ρύπου στον εσωτερικό χώρο.

Μοντέλα εσωτερικών χώρων - συνέχεια

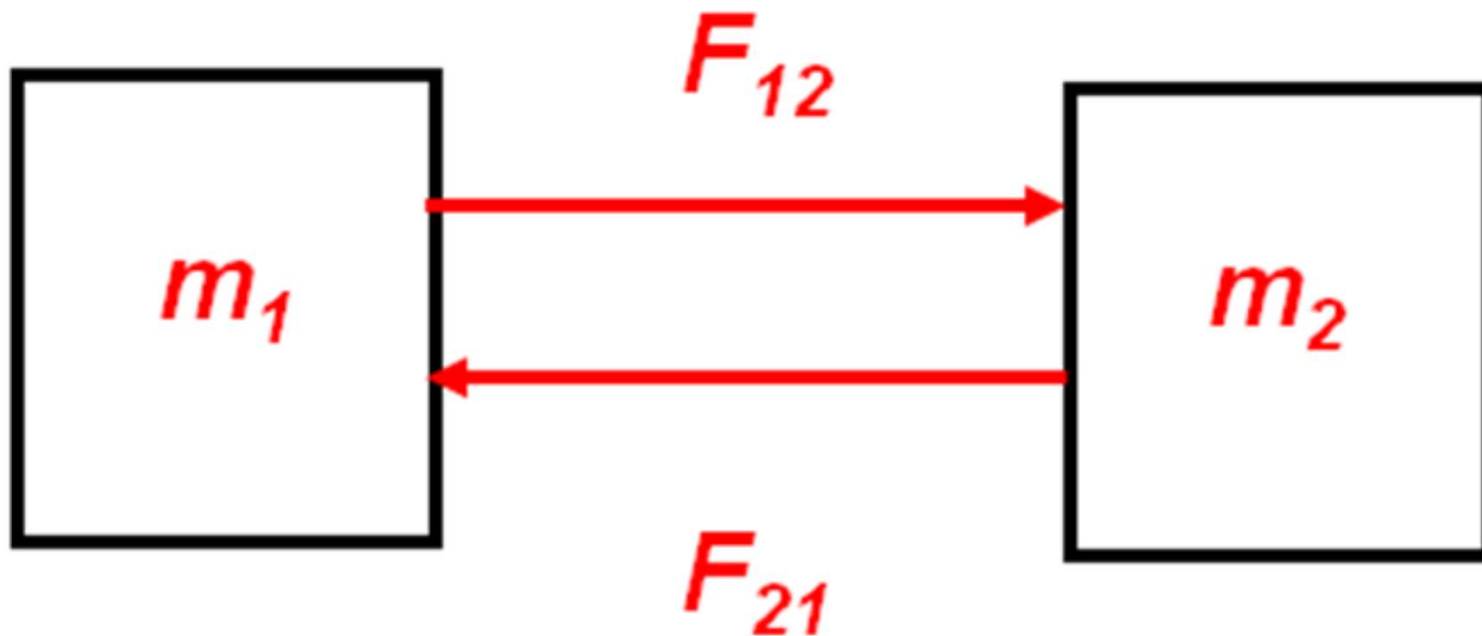
Η λύση σταθερής κατάστασης της παραπάνω εξίσωσης γράφεται ως εξής:

$$c = \frac{Q c_a + E}{Q + k V} \quad (6-1)$$

Πίνακας 6-1: Συντελεστές μέσων ρυθμών αντιδράσεων για ορισμένους ρύπους.

Ρύποι	$\kappa \text{ (s}^{-1}\text{)}$
CO	0.0
HCHO	1.11×10^{-4}
NO	0.0
NO _x (σαν N)	4.17×10^{-5}
Ραδόνιο	2.11×10^{-6}
SO ₂	6.39×10^{-5}

Μοντέλο δύο όγκων μηδενικών διαστάσεων.
Εμφανίζεται η τάση χωρικής μεταβολής μεταξύ
των δύο όγκων



Μοντέλο δύο όγκων μηδενικών διαστάσεων

Σε περίπτωση που έχουμε δύο ομογενείς χώρους που συνδέονται μεταξύ τους μπορούμε να γράψουμε τις εξισώσεις για κάθε ένα όγκο ξεχωριστά (Σχήμα 28). Επομένως για τη μάζα στον όγκο 1 (m_1) μπορούμε να γράψουμε μια συνήθη διαφορική εξίσωση πρώτης τάξης που περιγράφει τη μεταβολή της μάζας:

$$\frac{dm_1}{dt} = E_1 + P_1 - L_1 - D_1 - F_{12} + F_{21} \quad (33)$$

Παρόμοια εξίσωση γράφεται και για τη μάζα m_2 :

$$\frac{dm_2}{dt} = E_2 + P_2 - L_2 - D_2 - F_{21} + F_{12} \quad (34)$$

Μοντέλο δύο όγκων μηδενικών διαστάσεων

Σε περίπτωση που η μεταφορά μάζας ανάμεσα στους δύο όγκους είναι πρώτης τάξης τότε μπορούμε να γράψουμε ότι:

$$\frac{dm_1}{dt} = E_1 + P_1 - L_1 - D_1 - k_{12} m_1 + k_{21} m_2 \quad (35)$$

Παρόμοια εξίσωση γράφουμε και για το m_2 . Επομένως έχουμε να λύσουμε ένα σύστημα διαφορικών εξισώσεων που μπορούν να γραφούν ως αλγεβρικές εξισώσεις στην περίπτωση που το σύστημα θεωρείτε σε σταθερή κατάσταση.