



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΟ ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ :
ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΠΡΟΤΥΠΟΠΟΙΗΣΗ ΣΕ ΣΥΓΧΡΟΝΕΣ
ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΕΣ & ΤΗΝ ΟΙΚΟΝΟΜΙΑ



Ε.ΚΕ.Φ.Ε. ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ
ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΩΝ ΕΡΕΥΝΩΝ

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Προσδιορισμός πηγών αέριας
ρύπανσης με τη χρήση αντίστροφων
υπολογιστικών εργαλείων

ΑΡΓΥΡΩ ΑΡ. ΜΠΑΝΙΛΑ
Διπλ. Μηχανολόγος Μηχανικός ΑΠΘ

Αθήνα, Ιούλιος 2011



**ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΟ ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ :
ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΠΡΟΤΥΠΟΠΟΙΗΣΗ ΣΕ ΣΥΓΧΡΟΝΕΣ
ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΕΣ & ΤΗΝ ΟΙΚΟΝΟΜΙΑ**



**Ε.ΚΕ.Φ.Ε. ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ
ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΩΝ ΕΡΕΥΝΩΝ**

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

**Προσδιορισμός πηγών αέριας ρύπανσης με
τη χρήση αντίστροφων υπολογιστικών
εργαλείων**

**ΑΡΓΥΡΩ ΑΡ. ΜΠΑΝΙΔΑ
Διπλ. Μηχανολόγος Μηχανικός ΑΠΘ**

Επιβλέπων: Ιωάννης Μπάρτζης

Εξεταστική Επιτροπή

- 1) Ι. Μπάρτζης, Καθηγητής**
- 2) Ι. Χρυσοβέργης, Καθηγητής**
- 3) Ν. Μαρκάτος, Καθηγητής**

Αθήνα, Ιούλιος 2011

Προσδιορισμός πηγών αέριας ρύπανσης με τη χρήση αντίστροφων υπολογιστικών εργαλείων

ΑΡΓΥΡΩ ΑΡ. ΜΠΑΝΙΛΑ

Περίληψη

Σκοπός της παρούσας εργασίας είναι η επαλήθευση των πηγών ρύπανσης αντίστροφα στο χρόνο με τη χρήση του μετεωρολογικού προγράμματος Hysplit. Επιλέχθηκαν έξι περιοχές της Αττικής ως πηγές ρύπων και η χρονική περίοδος που μελετήθηκε ήταν κατά τους χειμερινούς μήνες Δεκεμβρίου, Ιανουαρίου. Η κάθε μέρα χωρίστηκε σε τέσσερα χρονικά πεδία που το καθένα είχε διάρκεια έξι ωρών και η προσομοίωση έγινε αντίθετα στο χρόνο. Συγκεκριμένα, στο πρόγραμμα Hysplit για την διεξαγωγή των μετεωρολογικών αποτελεσμάτων της κάθε μέρας εισήχθησαν σταδιακά τα χρονικά πεδία -6, -12, -18 και -24 h για το χρονικό βήμα των 10 min. Η μελέτη της τροχιάς των ρύπων διεκπεραιώθηκε για τρία ύψη, αυτά των 10, 100 και 500 m.

Στη συνέχεια, με τη χρήση του προγράμματος matlab έγινε η επεξεργασία των μετεωρολογικών αποτελεσμάτων και προέκυψαν excels για κάθε μέρα, που δείχνουν τη κατανομή των ρύπων σε κάθε κελί του πλέγματος τόσο για τις έξι περιοχές μελέτης όσο και για το συνολικό ελλαδικό χώρο. Έπειτα, τα excels αυτά επεξεργάστηκαν και πάλι με το matlab με σκοπό τη παραγωγή των συχνοτήτων των ρύπων σε κάθε κελί του πλέγματος όχι μόνο των έξι περιοχών αλλά και της Ελλάδας.

Τέλος, έγινε η χαρτογράφηση των αποτελεσμάτων που προέκυψαν από τα στάδια μελέτης που αποδεικνύει ότι οι ρύποι προήλθαν από τις πηγές που θεωρήθηκαν αρχικά.

Λέξεις Κλειδιά: ρύπος, συγκέντρωση, διασπορά, συναγωγή, εναπόθεση

ARGYRO AR. BANILA

Summary

The aim of the present work is the verification of sources of pollution reversely in the time with the use of meteorological program Hysplit. Six regions of Attica were selected as sources of pollutants and the time period that was studied was during the winter months December and January. Each day was separated into four chronological fields that each one had duration of six hours and the simulation took place back in time. Concretely, in the program Hysplit for the conduct of meteorological results of each day, were imported progressively time fields -6, -12, -18 and -24 h for the time step of 10 min. The study of orbit of pollutants was conducting for these three heights, of 10, 100 and 500 m.

Then, with the use of program matlab the processing of meteorological results took place and excels for each day resulted, where they show the distribution of pollutants in each cell of grid concerning the six regions of study as well as the total Hellenic space. Then, these excels were processed once again with the matlab aiming the production of frequencies of pollutants in each cell of grid not only of the six regions but of Greece as well.

Finally, the mapping of the results took place that came out from the stages of study that prove that the pollutants emanated from the sources that were considered initial.

Keywords: pollutant, concentration, dispersion, convective, deposition

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

ΔΟΜΗ, ΣΥΣΤΑΣΗ ΚΑΙ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ ΤΗΣ ΑΤΜΟΣΦΑΙΡΑΣ

1.1 Προέλευση και Εξέλιξη της Ατμόσφαιρας της Γης.....	1
1.2 Χημική Σύσταση της Ατμόσφαιρας.....	2
1.2.1 Βασικά Μεγέθη.....	2
1.2.2 Η Υγρασία της Ατμόσφαιρας.....	4
1.2.3 Κατακόρυφες Μεταβολές της Χημικής Σύστασης της Ατμόσφαιρας.....	5
1.2.4 Ο Καθαρός Αέρας.....	6
1.3 Τα Στρώματα της Ατμόσφαιρας.....	6
1.3.1 Η Τροπόσφαιρα.....	7
1.3.2 Η Στρατόσφαιρα.....	8
1.3.3 Η Μεσόσφαιρα.....	8
1.3.4 Η Θερμόσφαιρα.....	8
1.3.5 Η Εξώσφαιρα.....	9
1.4 Η Ατμόσφαιρα σε Υδροστατική Ισορροπία.....	9
1.5 Η Καταστατική Εξίσωση στην Ατμόσφαιρα.....	10
1.6 Η Δυνητική Θερμοκρασία.....	11
1.7 Ατμοσφαιρική Ευστάθεια.....	11
1.7.1 Δυναμική Ευστάθεια.....	14
1.8 Πρότυπη Ατμόσφαιρα.....	15

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟΥ ΣΥΣΤΗΜΑΤΟΣ ΠΡΟΓΝΩΣΗΣ ΑΤΜΟΣΦΑΙΡΙΚΗΣ ΡΥΠΑΝΣΗΣ ΣΤΗΝ ΕΥΡΥΤΕΡΗ ΠΕΡΙΟΧΗ ΤΗΣ ΑΤΤΙΚΗΣ

2.1 Περιγραφή του χώρου μελέτης.....	16
2.2 Περιγραφή υπολογιστικού συστήματος.....	17
2.3 Μετεωρολογικό μοντέλο MM5.....	18
2.4 Μοντέλο εκτίμησης εκπομπών EmisLab.....	18
2.5 Μοντέλων εκτίμησης αερίων ρύπων CMAQ.....	18
2.6 Αποτελέσματα.....	19
2.6.1 Απογραφή εκπομπών ρύπων.....	19
2.6.2 Μετεωρολογικές συνθήκες και εκτίμηση συγκεντρώσεων.....	20
.....	20

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3 ΔΙΑΚΙΝΗΣΗ ΡΥΠΩΝ ΣΤΗΝ ΑΤΜΟΣΦΑΙΡΑ

3.1 Εισαγωγή.....	21
3.2 Μηχανισμοί Διακίνησης των Ρύπων.....	21
3.3 Διακίνηση Ρύπων.....	24
3.4 Απομάκρυνση Ρύπων.....	24
3.4.1 Ξηρή Εναπόθεση (Dry Deposition).....	24
3.4.2 Υγρή Εναπόθεση (Wet Deposition).....	26
3.4.3 Χημική Καταστροφή.....	27
3.4.4 Ραδιενεργός Διάσπαση.....	28
3.4.5 Χρόνοι Ζωής.....	28
3.4.6 Η Εξίσωση Μεταφοράς Μάζας.....	29

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4 ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΟΥ ΣΥΣΤΗΜΑΤΟΣ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗΣ HYSPLIT_4

4.1 Περίληψη.....	31
4.2 Εισαγωγή.....	31
4.3 Πεδία Μετεωρολογικών δεδομένων.....	32
4.3.1 Απόλυτη πίεση.....	33
4.3.2 Πίεση σίγμα (Pressure Sigma).....	35
4.3.3 Terrain – Sigma.....	35
4.3.4 Υβριδική Απόλυτη Πίεση Σίγμα (Hybrid Absolute Pressure Sigma).....	36
4.4 Κάθετη Κίνηση.....	36
4.5 Ηλιακή Ακτινοβολία στην Επιφάνεια της Γης.....	37
4.6 Οριζόντια μεταφορά.....	37

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5 ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΔΙΑΣΠΟΡΑΣ

5.1 Περιγραφή Διασποράς.....	39
5.2 Σταθερότητα (Stability).....	39
5.3 Υπολογισμός της Θερμότητας και της ορμής της Ροής.....	41
5.4 Κάθετης Ανάμιξης Συντελεστές.....	43
5.5 Συντελεστές Οριζόντιας Ανάμιξης.....	44
5.6 Διάχυση Σωματιδίων.....	45
5.7 Διακυμάνσεις Ταχύτητας Διαταραχής.....	47

5.8 Διασπορά Αερίου Ποσότητας Ρύπου στην Ατμόσφαιρα (Puff Dispersion).....	49
5.9 Υπολογισμός Συγκέντρωσης Αέρα.....	51

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6 ΕΝΑΠΟΘΕΣΗ

6.1 Εισαγωγή.....	53
6.2 Βαρυτική Καθίζηση (Gravitational Settling).....	54
6.3 Ρητή Ξηρή Εναπόθεση.....	54
6.4 Υγρή Απομάκρυνση (Wet Removal).....	55
6.5 Ραδιενεργή Διάσπαση.....	56
6.6 Ξηρή Εναπόθεση με τη Μέθοδο Αντίστασης.....	56
6.7 Ρύπος Επαναιώρησης.....	60

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7 ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΜΕΘΟΔΟΥ ΑΝΑΛΥΣΗΣ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ

7.1 Περιγραφή Μεθόδου PSCF (Potential Source Contribution Function Analysis)	62
7.2 Υπολογιστικό Παράδειγμα.....	63

ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΙ.....	82
-----------------	----

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ.....	89
-------------------	----

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Η παρούσα διπλωματική εργασία είχε ως σκοπό της τη προσομοίωση της τροχιάς των ρύπων πίσω στο χρόνο με τη χρήση μετεωρολογικού προγράμματος. Η ολοκλήρωσή της δε θα ήταν επιτυχής χωρίς τη συμβολή των ερευνητών του Εργαστηρίου Περιβαλλοντικών Ερευνών του Δημόκριτου.

Θα ήθελα στο σημείο αυτό να ευχαριστήσω τον ερευνητή κ. Μιχάλη Καινουριάκη για την ευκαιρία που μου έδωσε να ασχοληθώ με το συγκεκριμένο θέμα. Τον κ. Αθανάσιο Σφέτσο για τη συνεργασία, την εμπιστοσύνη, την υπομονή και τις καθοριστικές παρατηρήσεις του. Τον ερευνητή κ. Νικόλαο Γούναρη για το χρόνο και τη βοήθειά του στη χαρτογράφηση των αποτελεσμάτων.

Ένα μεγάλο ευχαριστώ σε όλο το προσωπικό του εργαστηρίου που στήριξαν τη προσπάθειά μου με την ευγένειά τους, το φιλικό τους χαρακτήρα και τη πεποίθησή τους από την αρχή ότι η περάτωση της εργασίας θα είναι επιτυχής.

Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον καθηγητή κ. Ιωάννη Μπάρτζη για τη τιμή να επιβλέψει το συγκεκριμένο θέμα.

Αργυρώ Μπανίλα

Αθήνα 2011

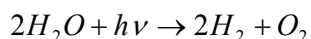
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

ΔΟΜΗ, ΣΥΣΤΑΣΗ ΚΑΙ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ ΤΗΣ ΑΤΜΟΣΦΑΙΡΑΣ

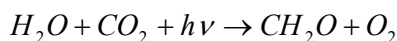
1.1. Προέλευση και Εξέλιξη της Ατμόσφαιρας της Γης

Η γήινη ατμόσφαιρα είναι ένα αέριο στρώμα που περιβάλλει την επιφάνεια της γης και ακολουθεί το σύνολο των κινήσεών της. Είναι δύσκολο να εκτιμήσει κανείς το ύψος της ατμόσφαιρας καθώς υπάρχει διαρκής αραίωση της αέριας μάζας μέχρι το διάστημα. Η ατμόσφαιρα είναι "αισθητή" μέχρι του ύψους των 3000 χλμ. Το 99% της αέριας μάζας είναι μέχρι τα 40 km. Η ηλικία της γης είναι περίπου 4,5 δισεκατομμύρια χρόνια. Σύμφωνα με τις σημερινές αντιλήψεις η πρώτη ατμόσφαιρα της γης πιθανότατα έμοιαζε με αυτή του Ηλίου. Περιείχε μεγάλες ποσότητες υδρογόνου και αδρανών αερίων. Η σημερινή ατμόσφαιρα είναι αποτέλεσμα μια σειράς εξελίξεων που αρχίζει με την έκλυση διαφόρων αερίων από το εσωτερικό της. Στο αρχικό στάδιο η ατμόσφαιρα είχε ως συστατικό το νερό, αλλά όχι το οξυγόνο (αναγωγική ατμόσφαιρα). Η δημιουργία του οξυγόνου ήταν αποτέλεσμα:

1. της φωτοδιάσπασης των υδρατμών με την επίδραση της υπεριώδους ηλιακής ακτινοβολίας. Διεργασία που και σήμερα λειτουργεί στην ανώτερη ατμόσφαιρα



2. της δημιουργίας ζώντων οργανισμών και της φωτοσύνθεσης κατά την οποία οι ζώντες αυτοί οργανισμοί συνθέτουν την τροφή τους από H_2O και CO_2 με την επίδραση της ορατής ηλιακής ακτινοβολίας:



Η συμβολή της φωτοδιάσπασης θεωρείται πολύ μικρότερη σε σχέση με την συμβολή της φωτοσύνθεσης. Η επίδραση ισχυρών πηγών ενέργειας στην πρωταρχική αναγωγική ατμόσφαιρα της γης, οδήγησε στην δημιουργία αμινοξέων και άλλων οργανικών ενώσεων. Οι ουσίες αυτές διαλύθηκαν στο νερό και εκεί προφυλαγμένες από την υπεριώδη ακτινοβολία, καταλυτικά σχημάτισαν μόρια DNA, πρωτεΐνες και διάφορα ένζυμα που είναι απαραίτητα για την δημιουργία της ζωής. Ας σημειωθεί ότι τα μόρια του DNA τα οποία περιέχουν τις γενετικές πληροφορίες, παρουσιάζουν την μέγιστη απορρόφηση στην υπεριώδη ακτινοβολία, γύρω στα 2660 Å, ενώ οι πρωτεΐνες στο φάσμα 2750-2850 Å. Έτσι η έξοδος της πρωτόγονης αυτής ζωής από

το νερό δεν θα μπορούσε να γίνει αν πρώτα δεν είχε δημιουργηθεί στην ατμόσφαιρα κάποιο προστατευτικό αέριο που να απορροφά την υπεριώδη ηλιακή ακτινοβολία σε μήκη κύματος μικρότερα των 3000 Å περίπου.

Μέρος του οξυγόνου που άρχισε να δημιουργείται με τους μηχανισμούς φωτοσύνθεσης πριν από 3 δισεκατομμύρια χρόνια από τους πρώτους υποβρύχιους οργανισμούς, με την επίδραση της υπεριώδους ηλιακής ακτινοβολίας δημιούργησε τα πρώτα ίχνη όζοντος (O_3). Το όζον έχει την ιδιότητα να απορροφά ισχυρά την επιβλαβή ή και καταστρεπτική για τους ζώντες οργανισμούς υπεριώδη ηλιακή ακτινοβολία.

Το στρώμα όζοντος που περιβάλλει σήμερα την γη, στο ύψος της περιοχής της στρατόσφαιρας, απορροφά την υπεριώδη ηλιακή ακτινοβολία στα μήκη κύματος μεταξύ 2000 και 3000 Å. Με την δημιουργία του προστατευτικού στρώματος του όζοντος, οι ζωντανόι οργανισμοί μπόρεσαν να επιβιώσουν και έξω από το νερό. Άρχισαν να δημιουργούνται εκτεταμένα δάση όπου η φωτοσύνθεση κυριαρχεί και έτσι πριν από μισό έως ένα δισεκατομμύρια χρόνια η ατμόσφαιρα της γης περιείχε όσο οξυγόνο έχει και σήμερα.

1.2. Χημική Σύσταση της Ατμόσφαιρας

Η ατμόσφαιρα είναι μίγμα διάφορων αέριων συστατικών που βρίσκονται σε συνεχή κίνηση. Ο τομέας της περιβαλλοντικής επιβάρυνσης "εκδηλώνει ενδιαφέρον" κυρίως για συστατικά που μεταφέρονται μέσω της ατμόσφαιρας και μπορούν να επιβαρύνουν τον άνθρωπο και το περιβάλλον. Είναι οι λεγόμενοι ρύποι και είναι συνήθως μικρής περιεκτικότητας.

1.2.1. Βασικά Μεγέθη

Η περιεκτικότητα ενός συστατικού ορίζεται με διάφορους τρόπους. Στη παρούσα εργασία ενδιαφέρον παρουσιάζουν οι ορισμοί που χρησιμοποιούνται στα προβλήματα μελέτης ποιότητας της ατμόσφαιρας.

Τα παρακάτω μεγέθη ορίζονται σε ένα στοιχειώδη όγκο δV του μείγματος που οι ιδιότητες μπορούν να θεωρηθούν ομοιόμορφες.

Κλασματική μάζα (Mass fraction)

Η κλασματική μάζα q_i ενός συστατικού i σε ένα στοιχειώδες μείγμα ρευστού με μάζα μείγματος δm , ορίζεται ως ο λόγος της μάζας του ρευστού δm_i προς την μάζα μείγματος δm :

$$q_i = \frac{\delta m_i}{\delta m} \quad (1.1)$$

η κλασματική μάζα είναι καθαρός αριθμός.

Συγκέντρωση (Concentration)

Η συγκέντρωση ενός συστατικού i σε ένα στοιχειώδες μείγμα ρευστού ορίζεται ως ο λόγος της μάζας του ρευστού δm_i προς τον στοιχειώδη όγκο του μείγματος δV :

$$C_i = \frac{\delta m_i}{\delta V} \quad (1.2)$$

Η συνήθης μονάδα συγκέντρωσης για ατμοσφαιρικούς ρύπους είναι :

$$[C_i] = 1 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}^3} \quad (1.3)$$

Σε μερικές περιπτώσεις χρησιμοποιεί κανείς τα mg αντί των μg . Εάν ληφθεί υπόψη ότι η πυκνότητα του μείγματος ορίζεται ως:

$$\rho = \frac{\delta m}{\delta V} \quad (1.4)$$

Τότε είναι:

$$C_i = \rho q_i \quad (1.5)$$

Κλασματικός όγκος (Volume fraction)

Ορίζεται μόνο για αέρια. Ο κλασματικός όγκος ω_i ενός συστατικού i σε ένα στοιχειώδες μείγμα αερίου υπό πίεση p είναι ο λόγος της μερικής πίεσης p_i του συστατικού προς την πίεση p και είναι καθαρός αριθμός:

$$\omega_i = \frac{p_i}{p} \quad (1.6)$$

σε πολλές περιπτώσεις εκφράζεται είτε επί τοις %:

$$\omega_i(\%) = 100 \frac{p_i}{p} \quad (1.6^a)$$

είτε σε ppm (parts per million)

$$\omega_i(\text{ppm}) = 10^6 \frac{p_i}{p} \quad (1.6^b)$$

είτε σε ppb (parts per billion)

$$\omega_i(\text{ppb}) = 10^9 \frac{p_i}{p} \quad (1.6^c)$$

Η σχέση, κλασματικού όγκου και κλασματικής μάζας προκύπτει από τη καταστατική εξίσωση των αερίων:

$$\omega_i = q_i \frac{MB}{MB_i} \quad (1.7)$$

όπου: MB: το μοριακό βάρος του αέρα και MB_i: το μοριακό βάρος του συστατικού i.

1.2.2 Η Υγρασία της Ατμόσφαιρας

Η ατμόσφαιρα στο κατώτερο τμήμα της (Τροπόσφαιρα) περιέχει πάντοτε ποσότητες νερού. Το νερό στην ατμόσφαιρα εμφανίζεται και στις τρεις φάσεις:

- στην αέρια φάση σαν υδρατμοί,
- στην υγρή σαν νεφοσταγόνες και
- στην στερεά σαν χιονοκρύσταλλοι ή χαλαζόκοκκοι .

Οι συγκεντρώσεις υδρατμών μπορούν να παρουσιάζουν χρονικά και χωρικά μεγάλες διακυμάνσεις. Οι ημέρες με καθαρό ουρανό και μεγάλη ορατότητα χαρακτηρίζονται σαν ημέρες με χαμηλή υγρασία σε αντίθεση με τη περίπτωση όπου ο καιρός είναι βροχερός ή έχει ομίχλη οπότε η υγρασία είναι σχετικά υψηλή. Το μέγεθός της στην ατμόσφαιρα χαρακτηρίζεται συνήθως από την σχετική υγρασία (RH).

Σαν σχετική υγρασία (relative humidity) σε ένα σημείο της ατμόσφαιρας με θερμοκρασία T και πίεση p, ορίζεται το μέγεθος:

$$RH = \frac{p_v}{p_s} X100 \quad (1.8)$$

όπου: p_v η μερική πίεση (τάση) των υδρατμών σε αυτό το σημείο και p_s η πίεση κορεσμού των υδρατμών που αντιστοιχεί στην θερμοκρασία T του σημείου.

Σχετική υγρασία $RH < 100\%$ σημαίνει ότι η ποσότητα νερού στην ατμόσφαιρα βρίσκεται ολόκληρη υπό την μορφή υδρατμών. Εάν όμως είναι $RH = 100\%$ συμπεραίνεται ότι ο αέρας είναι κορεσμένος από υδρατμούς, υπάρχει δηλαδή η μέγιστη συγκέντρωση υδρατμών στην συγκεκριμένη θερμοκρασία του αέρα και οποιαδήποτε επί πλέον ποσότητα νερού δεν μπορεί παρά να βρίσκεται σε υγρή ή στερεά φάση.

Η ποσότητα των υδρατμών μπορεί να εκφρασθεί και σε κλάσμα όγκου. Εάν ω_v είναι ο κλασματικός όγκος των υδρατμών τότε:

$$RH = \frac{\omega_v}{\omega_{vs}} X100 \text{ αφού } \frac{\omega_v}{\omega_{vs}} = \frac{p_w}{p_s}$$

Δεδομένου ότι ισχύει $\omega_{vs} = \frac{P_s}{p}$ προκύπτει:

$$\omega_v = \frac{RH}{100} \cdot \frac{P_s}{p} \quad (1.9)$$

Εάν ο κλασματικός όγκος εκφραστεί σε ppm τότε:

$$\omega_v(ppm) = 10^6 \frac{RH}{100} \cdot \frac{P_s}{p} \quad (1.9^a)$$

Άλλα μεγέθη μέτρησης υδρατμών είναι:

- η συγκέντρωση υδρατμών, που λέγεται απόλυτη υγρασία (absolute humidity)
- η κλασματική μάζα υδρατμών, που λέγεται ειδική υγρασία (specific humidity)
- η θερμοκρασία σημείου δρόσου (dew point temperature), είναι η θερμοκρασία που πρέπει να ψυχθεί ο αέρας υπό σταθερή πίεση ώστε να γίνει κορεσμένος και
- η θερμοκρασία του υγρού θερμομέτρου (wet-bulb temperature), είναι η θερμοκρασία που πρέπει να ψυχθεί ο αέρας υπό σταθερή ενθαλπία ώστε να γίνει κορεσμένος.

Τόσο η οριζόντια όσο και η κατακόρυφη κατανομή των υδρατμών στην ατμόσφαιρα μπορεί να έχει σημαντικές μεταβολές. Γενικά όμως η ποσότητα των υδρατμών μειώνεται με το ύψος. Μια από τις πολλές εμπειρικές σχέσεις που περιγράφουν μία τυπική μέση κατακόρυφη κατανομή έχει ως εξής:

$$p_v(z) = p_{v,0} \cdot 10^{-\frac{z}{5}} \quad (1.10)$$

όπου: z το κατακόρυφο ύψος σε km, $p_v(z)$ η μερική πίεση των υδρατμών στο ύψος z και $p_{v,0}$ η μερική πίεση των υδρατμών στην επιφάνεια του εδάφους.

1.2.3 Κατακόρυφες Μεταβολές της Χημικής Σύστασης της Ατμόσφαιρας

Η ατμόσφαιρα με βάση την χημική σύσταση μπορεί να διακριθεί σε ομοιόσφαιρα και ετερόσφαιρα. Η ομοιόσφαιρα εκτείνεται από την επιφάνεια της γης μέχρι τα 100 km και χαρακτηρίζεται από ομοιόμορφη περίπου χημική σύνθεση (περίπου σταθερό μοριακό βάρος) εξαιτίας του μηχανισμού κυρίως της τυρβώδους ανάμιξης. Η περιοχή πάνω από την ομοιόσφαιρα, η ετερόσφαιρα, χαρακτηρίζεται κυρίως από την μοριακή διάχυση και τη μοριακή διάσπαση των ατμοσφαιρικών αερίων. Στα μικρότερα ύψη της ετερόσφαιρας κυριαρχούν τα βαρύτερα αέρια ενώ στα μεγαλύτερα ύψη κυριαρχούν τα ελαφρότερα. Με άλλα λόγια η ετερόσφαιρα χαρακτηρίζεται από την βαθμιαία μείωση του μοριακού βάρους των ατμοσφαιρικών αερίων.

1.2.4 Ο Καθαρός Αέρας

Ο καθαρός αέρας είναι μία ιδεατή κατάσταση που αντιστοιχεί σε συνθήκες ατμόσφαιρας χωρίς τις αλλοιώσεις στην χημική σύνθεση που έχει επιφέρει η ανθρώπινη παρουσία. Ακόμα και στις πιο απομακρυσμένες περιοχές της θάλασσας, των ερήμων ή των βουνών ο αέρας θα πρέπει να θεωρείται στην καλύτερη περίπτωση ως αραιωμένος μολυσμένος αέρας αφού οι ρύποι μπορούν να διακινούνται μέσω του ατμοσφαιρικού αέρα σε άλλα σημεία του πλανήτη. Στον Πίνακα 1.1 δίνεται η σύνθεση του τυπικού καθαρού αέρα χωρίς υγρασία (ξηρός αέρας).

ΠΙΝΑΚΑΣ 1.1: Σύνθεση Τυπικού Καθαρού Αέρα χωρίς Υγρασία.[1]

Συστατικά	Συγκέντρωση	
Άζωτο	N ₂	78.08%
Οξυγόνο	O ₂	20.95%
Αργό	Ar	0.93%
Διοξείδιο του άνθρακα	CO ₂	330 ppm
Νέο	Ne	18 ppm
Ήλιο	He	5 ppm
Κρυπτό	Kr	1 ppm
Υδρογόνο	H ₂	0.5 ppm
Ξένο	Xe	0.1 ppm
Όζον	O ₃	0-12 ppm

Τα κύρια συστατικά της ατμόσφαιρας είναι το άζωτο (78%), το οξυγόνο (21 %), το αργό (0.9%) και το νερό(0-3%). Σημειώνεται ότι η περιεκτικότητα του νερού παρουσιάζει σημαντικές μεταβολές τόσο χωρικά όσο και χρονικά, η παρουσία του εκτείνεται κυρίως σε ύψος μέχρι 5 km περίπου.

Στην ατμόσφαιρα όμως υπάρχουν σχεδόν όλες οι χημικές ουσίες που συναντώνται στον πλανήτη γη αλλά σε πολύ μικρότερες συγκεντρώσεις. Πολλές από τις ουσίες αυτές προέρχονται από την αλληλεπίδραση του φυσικού περιβάλλοντος ατμόσφαιρας -εδάφους, θάλασσας. Οι ανθρώπινες δραστηριότητες έχουν συμβάλει ούτως ώστε αφ' ενός μεν αρκετές ουσίες να αυξήσουν σημαντικά τις ατμοσφαιρικές συγκεντρώσεις τους αφ' ετέρου άλλες νέες να κάνουν την εμφάνισή τους στην ατμόσφαιρα.

1.3 Τα Στρώματα της Ατμόσφαιρας

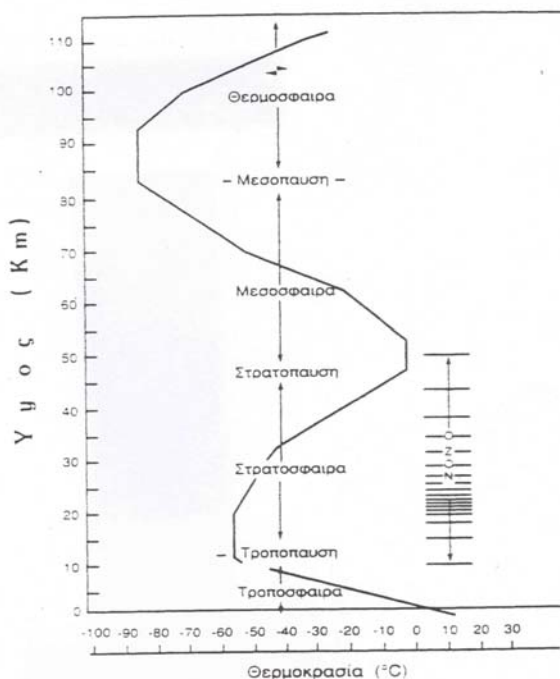
Η θερμοκρασία της ατμόσφαιρας δεν είναι σταθερή . Η τιμή της σε μια συγκεκριμένη θέση, είναι αποτέλεσμα του θερμικού ισοζυγίου. Γενικά η θερμοκρασία είναι μεταβλητή τόσο σε σχέση με τον χρόνο όσο και σε σχέση με την τοποθεσία. Η μέση

κατακόρυφη κατανομή της στην ατμόσφαιρα παρουσιάζει χαρακτηριστικά που επιτρέπουν τη διάκριση της ατμόσφαιρας σε στρώματα τα οποία έχουν ως εξής: Τροπόσφαιρα - Στρατόσφαιρα – Μεσόσφαιρα – Θερμόσφαιρα - Εξώσφαιρα.

Οι επιφάνειες που διαχωρίζουν τις περιοχές αυτές είναι στην πραγματικότητα ζώνες αρκετού πάχους. Οι μεταβατικές αυτές ζώνες είναι:

- Η Τροπόπαυση, (διαχωρίζει την τροπόσφαιρα από την στρατόσφαιρα)
- Η Στρατόπαυση, (διαχωρίζει την στρατόσφαιρα από την μεσόσφαιρα)
- Η Μεσόπαυση, (διαχωρίζει την μεσόσφαιρα από την θερμόσφαιρα)
- Η Θερμόπαυση, (διαχωρίζει την θερμόσφαιρα από την εξώσφαιρα)

Από πλευράς ρύπανσης ενδιαφέρουν κυρίως η Τροπόσφαιρα και η Στρατόσφαιρα. Στο σχήμα 1.1 σκιαγραφούνται τα παραπάνω στρώματα και η τυπική κατανομή θερμοκρασίας με το ύψος.



ΣΧΗΜΑ 1.1: Μέση κατακόρυφη δομή της ατμόσφαιρας.

1.3.1 Η Τροπόσφαιρα

Η τροπόσφαιρα είναι το κατώτερο στρώμα της ατμόσφαιρας και επηρεάζεται άμεσα από την παρουσία εδάφους, μέσου πάχους, περίπου στα 1500 m το οποίο ονομάζεται ατμοσφαιρικό οριακό στρώμα. Στην περιοχή της τροπόσφαιρας παρατηρείται μέση μείωση της θερμοκρασίας με το ύψος της τάξης των $6.5^{\circ}\text{C}/\text{km}$.

Είναι η περιοχή που κυρίως επηρεάζει τον καιρό και το κλίμα και περιέχει το σύνολο της μάζας του νερού που υπάρχει στην ατμόσφαιρα. Το ύψος μέχρι το οποίο εκτείνεται δεν είναι σταθερό, εξαρτάται από το γεωγραφικό πλάτος, την εποχή και

την παρουσία των βαρομετρικών συστημάτων. Στις τροπικές περιοχές το ύψος της κυμαίνεται στα 16 έως 17 km, στις εύκρατες περιοχές στα 11 έως 12 km ενώ στις πολικές 7 έως 8 km.

Το ύψος της τροπόσφαιρας είναι αυξημένο στις θέσεις των αντικυκλώνων και ελαττωμένο στις θέσεις των υφέσεων. Την τροπόπαυση χαρακτηρίζει η σταθερή θερμοκρασία με το ύψος και το πάχος της μεταβάλλεται, υπάρχει κατά μέσο όρο μία μείωση όσο αυξάνεται το γεωγραφικό πλάτος.

Οι θερμοκρασίες που επικρατούν στην τροπόπαυση είναι χαμηλές και κυμαίνονται στους -70 έως -80°C πάνω από τον ισημερινό και από -55 έως -60°C στα μεγαλύτερα γεωγραφικά πλάτη. Είναι χαρακτηριστικό ότι η ψυχρότερη τροπόπαυση βρίσκεται πάνω από την θερμότερη περιοχή της γης.

1.3.2 Η Στρατόσφαιρα

Η στρατόσφαιρα ξεκινά μετά την τροπόπαυση και την χαρακτηρίζει μια μικρή αύξηση της θερμοκρασίας με το ύψος των 35 km περίπου (κατώτερη στρατόσφαιρα) Στην συνέχεια η θερμοκρασία αυξάνει σημαντικά μέχρι του ύψους 50-55 km περίπου (ανώτερη στρατόσφαιρα). Ακολουθεί η στρατόπαυση με θερμοκρασία περίπου σταθερή της τάξης των 0°C , και εδώ οι θερμοκρασιακές μεταβολές δεν διατηρούνται πάντοτε σταθερές. Κατά τον χειμώνα ή την άνοιξη μπορούν να παρατηρηθούν βίαιες μεταβολές ιδιαίτερα στα μεγαλύτερα γεωγραφικά πλάτη. Η περιοχή των 25 - 50 km αποτελεί το στρώμα του στρατοσφαιρικού όζοντος αφού χαρακτηρίζεται από αυξημένη συγκέντρωση όζοντος και είναι γνωστό με τον όρο οζονόσφαιρα. Η παρουσία του όζοντος επηρεάζει άμεσα το θερμικό ισοζύγιο και προκαλεί αύξηση της θερμοκρασίας αφού το όζον απορροφάει τμήμα της υπεριώδους ηλιακής ακτινοβολίας.

1.3.3 Η Μεσόσφαιρα

Στο στρώμα αυτό της ατμόσφαιρας, η θερμοκρασία ελαττώνεται συνεχώς μέχρι το ύψος των 80 km περίπου όπου βρίσκεται η περιοχή της μεσόπαυσης. Η μεσόπαυση είναι η ψυχρότερη περιοχή της γήινης ατμόσφαιρας και φθάνει μέχρι -100°C .

Στην μεσόπαυση και ιδιαίτερα στα μεγάλα γεωγραφικά πλάτη παρατηρούνται τα φωσφορίζοντα νέφη όταν ο ήλιος βρίσκεται 5° - 10° κάτω από τον ορίζοντα. Τα νέφη αυτά αποτελούνται από τεμάχια σκόνης καλυμμένα από πάγο.

1.3.4 Η Θερμόσφαιρα

Στην περιοχή της θερμόσφαιρας έπειτα από μία αρχική ισόθερμη μεταβολή αρχίζει η θερμοκρασία να αυξάνεται με το ύψος μέχρι τους 1000°C στο ύψος των 400-500 km περίπου. Το ακριβές ύψος εξαρτάται από την ηλιακή δραστηριότητα. Το όριο όπου παύει η αύξηση της θερμοκρασίας της θερμόσφαιρας είναι η περιοχή της θερμόπαυσης. Από το ύψος των 300 km αρχίζει η λεγόμενη ιονόσφαιρα στην οποία πραγματοποιείται μερικός ιονισμός των ατμοσφαιρικών συστατικών από την

επίδραση ηλιακής ή σωματιδιακής ακτινοβολίας. Η περιοχή της ιονόσφαιρας εκτείνεται μέσα στην εξώσφαιρα μέχρι του ύψους των 1000 km.

1.3.5 Η Εξώσφαιρα

Από την περιοχή της θερμόπαυσης και πάνω αρχίζει η εξώσφαιρα που χαρακτηρίζεται από ισόθερμη μεταβολή με το ύψος. Στην περιοχή αυτή η αέρια μάζα είναι το ένα δισεκατομμυριοστό της ατμοσφαιρικής. Η πυκνότητα είναι τόσο μικρή ούτως ώστε τα διάφορα σωματίδια να ακολουθούν βαλλιστικές τροχιές όπως οι πύραυλοι με ελεύθερες διαδρομές της τάξης των 100 km, σημειώνεται ότι τα ουδέτερα σωματίδια μπορούν να διαφύγουν την έλξη της γης. Από το ύψος των 1000 km και άνω (πάνω από την ιονόσφαιρα), η κίνηση των φορτισμένων σωματιδίων καθορίζεται από το γήινο μαγνητικό πεδίο. Η περιοχή αυτή λέγεται μαγνητόσφαιρα και τα όριά της μπορούν να φθάσουν και μέχρι την απόσταση 10 γήινων ακτινών (μαγνητόπαυση).

1.4 Η Ατμόσφαιρα σε Υδροστατική Ισορροπία

Η κατακόρυφη δομή της ατμόσφαιρας περιγράφεται από την μεταβολή της πίεσης, της θερμοκρασίας, της πυκνότητας και της χημικής σύστασης σαν συναρτήσεις του ύψους από την επιφάνεια του πλανήτη. Μια καλή προσέγγιση είναι να αγνοηθούν προς στιγμήν τα δυναμικά φαινόμενα από την κίνηση των αερίων μαζών και να θεωρηθεί ότι η ατμόσφαιρα βρίσκεται σε υδροστατική ισορροπία.

Από την θεωρία της μηχανικής των ρευστών είναι γνωστό ότι η μεταβολή της πίεση δίνεται από την εξίσωση:

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g \quad (1.11)$$

όπου: z είναι η απόσταση από την επιφάνεια της γης (m), ρ η πυκνότητα του αέρα στο ύψος z (kg/m^3), g η επιτάχυνση βαρύτητας στο ύψος z (m/s^2), p η ατμοσφαιρική πίεση στο ύψος z (Pa).

Η πίεση σε δύο διαφορετικά ύψη z_1 και z_2 δίνεται από την σχέση:

$$p(z_2) - p(z_1) = -\int_{z_1}^{z_2} \rho g dz \quad (1.12)$$

Η επιτάχυνση βαρύτητας, που είναι το αποτέλεσμα της έλξης της γης και είναι συνάρτηση της απόστασης από το κέντρο της, σε ύψος z δίνεται από την σχέση:

$$g(z) = g_0 \left(\frac{R_\Gamma}{R_\Gamma + z} \right)^2 \quad (1.13)$$

όπου: g_0 η επιτάχυνση βαρύτητας στην μέση επιφάνεια της θάλασσας και R_T η ακτίνα της γης .

Είναι:

$$g_0 = 9.8067 \text{ m/sec}^2 \quad (1.14)$$

$$R_T = 6.371 \cdot 10^6 \text{ m} \quad (1.15)$$

Με βάση την σχέση (1.13) προκύπτει ότι η επιτάχυνση βαρύτητας μεταβάλλεται μόνο κατά 3% στα 100 km ύψους της ατμόσφαιρας. Αυτό επιτρέπει σε πολλές πρακτικές εφαρμογές να προσεγγιστεί με μία σταθερά τιμή, η οποία ισούται με $g \approx 9.81 \text{ m/sec}^2$.

1.5 Η καταστατική Εξίσωση στην Ατμόσφαιρα

Η πυκνότητα του αέρα σε ένα σημείο είναι γενικά συνάρτηση της πίεσης, της θερμοκρασίας και της χημικής σύστασής του σε αυτό το σημείο. Μέχρι του ύψους των 100 km (ομοιόσφαιρα) ο ξηρός αέρας μπορεί να θεωρηθεί ότι έχει σταθερή χημική σύσταση και μοριακό βάρος ίσο με του καθαρού αέρα, $MB \approx 28.96$. Σε αυτή την περίπτωση η μεταβλητότητα της πυκνότητας εξαρτάται εκτός από την πίεση και την θερμοκρασία και από την παρουσία νερού.

Μια καλή προσέγγιση είναι να θεωρηθεί ότι ο ατμοσφαιρικός αέρας συμπεριφέρεται σαν ιδανικό αέριο. Στην περίπτωση του ξηρού αέρα η καταστατική εξίσωση έχει ως εξής:

$$p = \rho R_d T \quad (1.16)$$

Η σταθερά του ξηρού αέρα είναι:

$$R_d = 287 \text{ J/kg/K} \quad (1.17)$$

Εάν ο αέρας είναι υγρός με ειδική υγρασία q_v ($\frac{\text{kg} - \text{υδρατμών}}{\text{Kg} - \text{υγρού αέρα}}$) τότε μπορεί να αποδειχθεί ότι η καταστατική εξίσωση του υγρού αέρα μπορεί να εκφραστεί ως:

$$p = \rho R_d T_v \quad (1.18)$$

όπου:

$$T_v = T(1 + 0.61q_v) \quad (1.19)$$

Για την σχέση (1.19) έχει ληφθεί υπόψη ότι η σταθερά των υδρατμών είναι:

$$R_v = 462 \text{ J/kg/K} \quad (1.20)$$

Η παράμετρος T_v λέγεται εικονική θερμοκρασία υγρού αέρα (virtual temperature). Άρα η πυκνότητά του μπορεί να υπολογισθεί από την σχέση (1.16) ή από την σχέση (1.18). Συνεπώς μπορούν να υπολογισθούν οι πιέσεις από την εξίσωση (1.12).

1.6 Η Δυνητική θερμοκρασία

Στις μετεωρολογικές εφαρμογές συνήθως διευκολύνει η χρήση της δυνητικής θερμοκρασίας. Ως δυνητική θερμοκρασία (potential temperature) θ ορίζεται η θερμοκρασία που θα είχε ο αέρας εάν υφίστατο ισεντροπική μεταβολή σε μία πίεση αναφοράς P_R . Για λόγους απλοποίησης θα θεωρηθεί ξηρός αέρας.

Για ισεντροπική μεταβολή τελείου αερίου ισχύει η σχέση:

$$\frac{T_1}{T_2} = \left(\frac{P_1}{P_2} \right)^{\frac{R_d}{c_{pd}}} \quad (1.21)$$

Με βάση την παραπάνω σχέση προκύπτει:

$$\theta = T \left(\frac{P}{P_R} \right)^{\frac{R_d}{c_{pd}}} \quad (1.22)$$

συνήθως $P_R = 1000mb$.

Εάν υπάρχει παρουσία υγρασίας ορίζεται αντίστοιχα η εικονική δυνητική θερμοκρασία:

$$\theta_v = T_v \left(\frac{P}{P_R} \right)^{\frac{R_d}{c_{pd}}} \quad (1.23)$$

όπου οι τιμές R_d και c_{pd} αναφέρονται στον ξηρό αέρα.

1.7 Ατμοσφαιρική Ευστάθεια

Η κατάσταση του ατμοσφαιρικού αέρα χαρακτηρίζεται κυρίως από την κατανομή πίεσης, θερμοκρασίας και την υγρασία. Σημαντική σημασία όμως έχει και η κατάσταση ισορροπίας της ατμόσφαιρας με την έννοια εάν ευνοεί κατακόρυφες κινήσεις ή όχι. Η ασταθής ατμόσφαιρα σχετίζεται με ενίσχυση των κατακόρυφων κινήσεων. Στην αντίθετη περίπτωση η ατμόσφαιρα είναι ευσταθής. Η κατάσταση ισορροπίας έχει ιδιαίτερη σημασία στην ατμοσφαιρική διασπορά ρύπων, αφού η αστάθεια ενισχύει την τυρβώδη ανάμιξη των ρύπων ενώ η ευστάθεια μπορεί να μειώσει σημαντικά την ικανότητα της ατμόσφαιρας να τους διασκορπίζει.

Έστω μια στοιχειώδη μάζα όγκου V_s που έχει την ίδια πίεση με τον περιβάλλοντα αέρα αλλά διαφορετική πυκνότητα, η συνισταμένη δύναμη F που ασκείται στην μάζα είναι η διαφορά της άνωσης, που ασκείται στην μάζα $A = \rho g V_s$ και του βάρους της $A = \rho_s g V_s$ όπου: ρ η πυκνότητα του περιβάλλοντα αέρα και ρ_s η πυκνότητα της στοιχειώδους μάζας. Έτσι:

$$F = (\rho - \rho_s) g V_s \quad (1.24)$$

Θεωρείται, η στοιχειώδης μάζα στην κατακόρυφη θέση z σε ισορροπία με τον περιβάλλοντα αέρα και η ατμόσφαιρα για χάρη απλότητας θα θεωρηθεί ξηρά σε υδροστατική ισορροπία.

Έστω μία απότομη στοιχειώδη κατακόρυφη μετατόπιση dz της στοιχειώδους μάζας όπου ο περιβάλλοντας αέρας χαρακτηρίζεται από την πίεση $p+dp$, τη θερμοκρασία $T+dT$ και την πυκνότητα $\rho+dp$. Η στοιχειώδης μάζα, θεωρώντας ότι δε διατίθεται κανός χρόνος για συναλλαγή θερμότητας με τον περιβάλλοντα αέρα, υφίσταται ισεντροπική μεταβολή αποκτώντας πυκνότητα $\rho + d\rho_s$. Η πίεση μπορεί να θεωρηθεί ότι είναι η ίδια με του περιβάλλοντα αέρα $p+dp$.

Στη στοιχειώδη μάζα θα ασκηθεί τότε συνισταμένη δύναμη η οποία σύμφωνα με την σχέση (1.24) θα είναι:

$$dF = (d\rho - d\rho_s) g V_s \quad (1.25)$$

Εάν $d\rho > d\rho_s$, η δύναμη dF θα είναι θετική προς τα άνω και έχει ως αποτέλεσμα την περαιτέρω απομάκρυνση της στοιχειώδους μάζας από το σημείο ισορροπίας z . Σε αυτή την περίπτωση η ατμοσφαιρική κατάσταση χαρακτηρίζεται ασταθής.

Εάν $d\rho < d\rho_s$, η δύναμη dF θα είναι θετική προς τα κάτω και έχει ως αποτέλεσμα την τάση επαναφοράς της στοιχειώδους μάζας προς το σημείο ισορροπίας z . Σε αυτή την περίπτωση η ατμοσφαιρική κατάσταση χαρακτηρίζεται ευσταθής.

Εάν $d\rho = d\rho_s$, η δύναμη dF θα είναι μηδενική και το σύστημα στοιχειώδους μάζας -περιβάλλοντα αέρα είναι σε ισορροπία. Σε αυτή την περίπτωση η ατμοσφαιρική κατάσταση χαρακτηρίζεται ουδέτερη.

Για την ισεντροπική μεταβολή τέλειου αερίου ισχύει η σχέση $p\rho^{-\gamma} = const$ με $\gamma = \frac{c_{pd}}{c_{vd}}$.

Η παραγωγή της παραπάνω σχέσης και η χρήση της καταστατικής εξίσωσης $p = \rho R_d T$ καθώς και της υδροστατικής εξίσωσης $dp = -\rho g dz$ οδηγεί:

$$\frac{T}{\rho} \frac{d\rho_s}{dz} = -\frac{g}{\gamma R_d} \quad (1.26)$$

Η παραγώγιση της καταστατικής εξίσωσης $p = \rho R_d T$ και η χρήση της υδροστατικής εξίσωσης $dp = -\rho g dz$ οδηγεί στην σχέση:

$$\frac{T}{\rho} \frac{d\rho}{dz} = -\frac{g}{R_d} - \frac{dT}{dz} \quad (1.27)$$

αφαιρώντας τις εξισώσεις (1.26) και (1.27) κατά μέλη και λαμβάνοντας υπόψη ότι $\gamma = \frac{c_{pd}}{c_{vd}}$ και $R_d = c_{pd} - c_{vd} = c_{vd}(\gamma - 1)$ προκύπτει:

$$\frac{T}{\rho} \left(\frac{d\rho}{dz} - \frac{d\rho_s}{dz} \right) = -\frac{dT}{dz} - \frac{g}{c_{pd}} \quad (1.28)$$

Με βάση την σχέση (1.25) η σχέση (1.28) οδηγεί στα παρακάτω συμπεράσματα:

$$\frac{dT}{dz} > -\frac{g}{c_p}, \text{ η ατμόσφαιρα είναι ευσταθής}$$

$$\frac{dT}{dz} = -\frac{g}{c_p}, \text{ η ατμόσφαιρα είναι ουδέτερη}$$

$$\frac{dT}{dz} < -\frac{g}{c_p}, \text{ η ατμόσφαιρα είναι ασταθής}$$

Η ουδέτερη ατμόσφαιρα αντιστοιχεί στην αδιαβατική θερμοβαθμίδα που στην περίπτωση του ξηρού αέρα είναι $-\frac{g}{c_{pd}} = -0.0098K/m$.

Στην περίπτωση του κεκορεσμένου υγρού αέρα η αδιαβατική θερμοβαθμίδα είναι περίπου $-0.006K/m$.

Στην περίπτωση του υγρού αέρα, η ατμοσφαιρική ευστάθεια μπορεί καλύτερα να εκφραστεί με την εικονική θερμοκρασία T_v . Η αντίστοιχη σχέση της (1.28) θα είναι:

$$\frac{T_v}{\rho} \left(\frac{d\rho}{dz} - \frac{d\rho_s}{dz} \right) = -\frac{dT_v}{dz} - \frac{g}{c_{pd}} \quad (1.28\alpha)$$

Σε αυτή την περίπτωση:

$$\frac{dT_v}{dz} > -\frac{g}{c_{pd}}, \text{ η ατμόσφαιρα είναι ευσταθής}$$

$$\frac{dT_v}{dz} = -\frac{g}{c_{pd}}, \text{ η ατμόσφαιρα είναι ουδέτερη}$$

$$\frac{dT_v}{dz} < -\frac{g}{c_{pd}}, \text{ η ατμόσφαιρα είναι ασταθής}$$

Η ατμοσφαιρική ευστάθεια όμως μπορεί να εκφρασθεί πιο απλά με την κατακόρυφη δυναμική θερμοβαθμίδα. Συγκεκριμένα, με τη παραγωγή ως προς z της σχέσης (1.22) προκύπτει:

$$\frac{T}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{g}{c_p} \quad (1.29)$$

Η αντίστοιχη έκφραση με την θ_v θα είναι:

$$\frac{T_v}{\theta_v} \frac{\partial \theta_v}{\partial z} = \frac{\partial T_v}{\partial z} + \frac{g}{c_{pd}} \quad (1.29\alpha)$$

Συγκρίνοντας την εξίσωση (1.29) με την εξίσωση (1.28) είναι φανερό ότι:

$$\text{Ουδέτερη ατμόσφαιρα: } \frac{\partial \theta}{\partial z} = 0$$

$$\text{Ευσταθής ατμόσφαιρα: } \frac{\partial \theta}{\partial z} > 0$$

$$\text{Ασταθής ατμόσφαιρα: } \frac{\partial \theta}{\partial z} < 0$$

Στην περίπτωση του υγρού αέρα με βάση την σχέση (1.29^α):

$$\text{Ουδέτερη ατμόσφαιρα: } \frac{\partial \theta_v}{\partial z} = 0$$

$$\text{Ευσταθής ατμόσφαιρα: } \frac{\partial \theta_v}{\partial z} > 0$$

$$\text{Ασταθής ατμόσφαιρα: } \frac{\partial \theta_v}{\partial z} < 0$$

1.7.1 Δυναμική Ευστάθεια

Ο παραπάνω ορισμός της ευστάθειας χαρακτηρίζει την λεγόμενη στατική ευστάθεια της ατμόσφαιρας. Οι αέριες μάζες της ατμόσφαιρας βρίσκονται συνήθως σε διαρκή

κίνηση με αποτέλεσμα στο ατμοσφαιρικό οριακό στρώμα να παράγεται ‘μηχανική’ τύρβη, δηλαδή τύρβη λόγω τριβής με το έδαφος. Η παραγωγή της μηχανικής τύρβης είναι ανάλογη του τετραγώνου της βαθμίδας της οριζόντιας ταχύτητας: $G_M \propto \left(\frac{dV_h}{dz}\right)^2$ όπου: G_M η παραγωγή μηχανικής τυρβώδους κινητικής ενέργειας και V_h η οριζόντια συνιστώσα της ταχύτητας.

Η θερμική ενίσχυση ή εξασθένηση της τύρβης εξαρτάται από την στατική ευστάθεια και σε συνθήκες πλήρους ατμοσφαιρικής ευστάθειας η ροή θεωρείται στρωτή. Ένας συνήθης δείκτης της δυναμικής ευστάθειας της ατμόσφαιρας είναι ο αριθμός Richardson:

$$Ri = \frac{\frac{g}{T_v} \frac{d\theta_v}{dz}}{\left(\frac{dV_h}{dz}\right)^2} \quad (1.30)$$

Υπάρχει ένας κρίσιμος αριθμός, $Ri_{cr} < 1$, όπου για $Ri < Ri_{cr}$ επικρατούν οι συνθήκες ατμοσφαιρικής αστάθειας. Στην περίπτωση αυτή η ροή είναι πάντα τυρβώδης ενώ για $Ri > Ri_{cr}$ είναι συνθήκες ατμοσφαιρικής ευστάθειας.

Πλήρως στρωτή ροή θεωρείται όταν $Ri > 1$. Στην περιοχή $Ri_{cr} < Ri < 1$ η ροή μπορεί να είναι στρωτή ή τυρβώδης ανάλογα με την προϊστορία της. Η συμπεριφορά αυτή οφείλεται στο ότι τα κύματα Kelvin - Helmholtz που δίνουν το έναυσμα για την μετάβαση στην τύρβη, καταπνίγονται στην περιοχή $Ri_{cr} < Ri < 1$. Έχει εκτιμηθεί $Ri_{cr} \approx 0.25$.

1.8 Πρότυπη Ατμόσφαιρα

Η πρότυπη ατμόσφαιρα είναι ένα μοντέλο που αντιπροσωπεύει μία μέση κατάσταση όλων των γεωγραφικών πλατών και έχει υιοθετήσει ο Διεθνής Οργανισμός Πολιτικής Αεροπορίας (ICAO).

Ορίζεται ως εξής:

- Η ατμόσφαιρα είναι απόλυτα ξηρή με σταθερή σύσταση έχοντας μέσο μοριακό βάρος 28.9644 (με βάση το C^{12}).
- Η ατμόσφαιρα θεωρείται ότι συμπεριφέρεται σαν ιδανικό αέριο.
- Στην μέση στάθμη της θάλασσας η θερμοκρασία είναι $288.15^{\circ}C$, η πίεση $101325 Pa$ και η επιτάχυνση βαρύτητας $g=9.8067 m/sec^2$.
- Ισχύει η υδροστατική ισορροπία

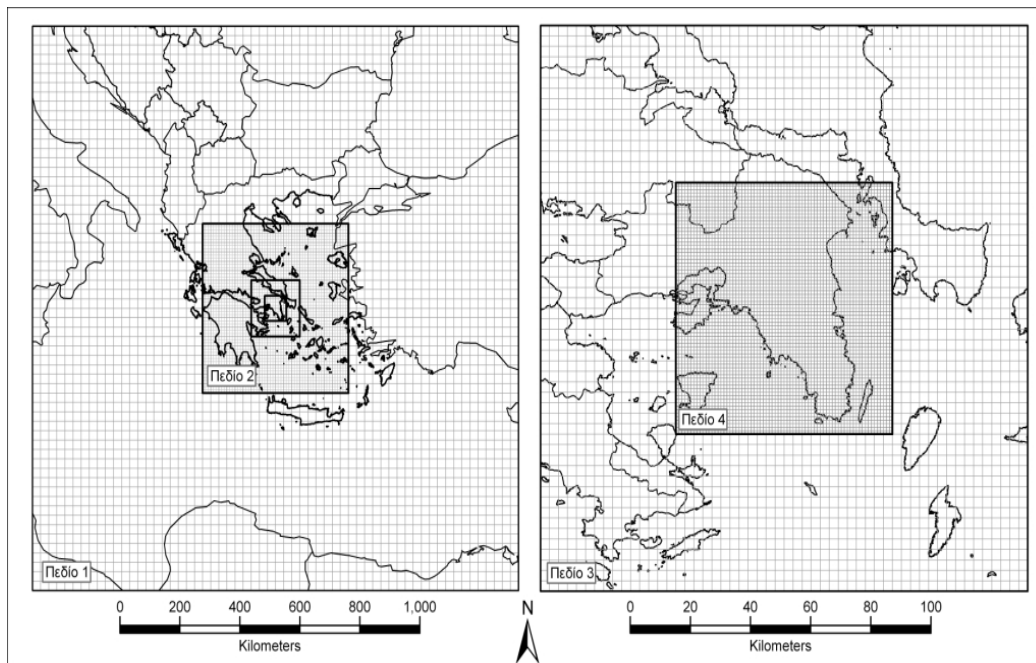
Για ύψη μέχρι 11000 m (Τροπόπαυση) η θερμοβαθμίδα είναι σταθερή και ίση με $6.5^{\circ}C/km$. Για ύψη από 11000 m μέχρι 20000 m η θερμοκρασία είναι σταθερή και ίση με $-56.5^{\circ}C$. Στην συνέχεια μέχρι ύψους 32000 m η θερμοβαθμίδα είναι $+1^{\circ}C/km$.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟΥ ΣΥΣΤΗΜΑΤΟΣ ΠΡΟΓΝΩΣΗΣ ΑΤΜΟΣΦΑΙΡΙΚΗΣ ΡΥΠΑΝΣΗΣ ΣΤΗΝ ΕΥΡΥΤΕΡΗ ΠΕΡΙΟΧΗ ΤΗΣ ΑΤΤΙΚΗΣ

2.1 Περιγραφή του χώρου μελέτης

Τα υπολογιστικά πεδία (computational domains) για το μοντέλο μετεωρολογίας είναι συνολικά 4, απεικονίζονται στο σχήμα 2.1 και τα χαρακτηριστικά τους (κελιά πλέγματος και διαστάσεις) περιγράφονται στο πίνακα 2.1.



ΣΧΗΜΑ 2.1: Απεικόνιση των υπολογιστικών πεδίων των μοντέλων μετεωρολογίας και ποιότητας αέρα.

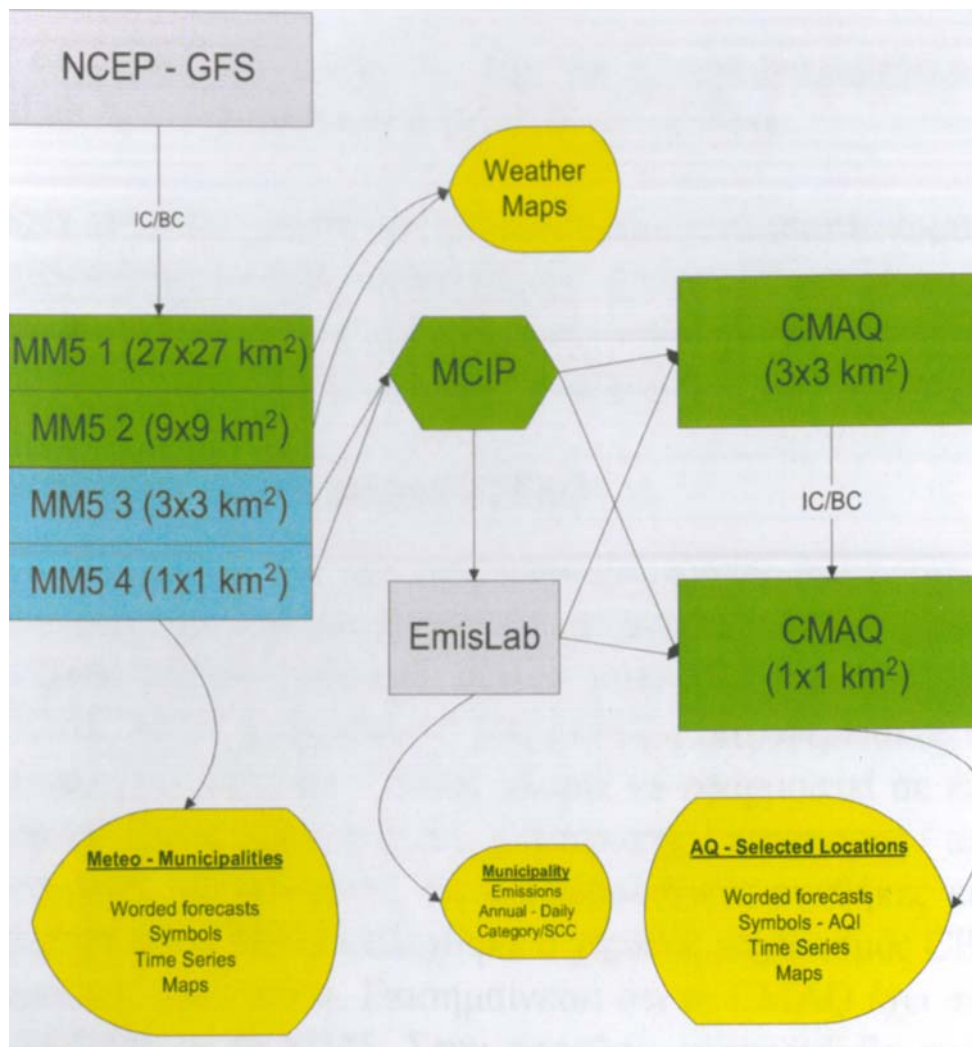
ΠΙΝΑΚΑΣ 2.1: Υπολογιστικά πεδία και χαρακτηριστικά τους.

	Αριθμός κελιών	Διάσταση κελιών (km)
Πεδίο 1	60X60	27X27
Πεδίο 2	54X54	9X9
Πεδίο 3	54X54	3X3
Πεδίο 4	72X72	1X1

Η κεντρική περιοχή εφαρμογής του μοντέλου ποιότητας αέρα συμπίπτει με το Πεδίο 4 του μετεωρολογικού μοντέλου (Σχήμα 2.1) και καλύπτει το μεγαλύτερο τμήμα της Αττικής.

2.2 Περιγραφή υπολογιστικού συστήματος

Το υλικό σύστημα που χρησιμοποιείται για την επίλυση του υπολογιστικού προβλήματος πρόγνωσης καιρού και αέριας ρύπανσης βασίζεται στην αρχιτεκτονική συστοιχίας H/Y Beowulf κατανεμημένης μνήμης. Αποτελείται από έναν H/Y Intel Core 2 [Duo@2.66Ghz](#) με 2GB μνήμης RAM που λειτουργεί ως frontend και είναι συνδεδεμένος με άλλους τέσσερις H/Y Intel Core 2 [Duo@3Ghz](#) που αναλαμβάνουν την επίλυση του υπολογιστικού προβλήματος. Η σύνδεση των H/Y γίνεται μέσω ενός Gigabit Ethernet switch με το πρωτόκολλο TCP/IP. Η θεωρητική επεξεργαστική ισχύς του συστήματος είναι 48 Gflops και η πραγματική LINPACK ισχύς είναι 20Gflops.



ΣΧΗΜΑ 2.2: Περιγραφή υπολογιστικού συστήματος.

2.3 Μετεωρολογικό μοντέλο MM5

Το μοντέλο MM5 (Mesoscale Model 5) αναπτύσσεται εδώ και δεκαετίες από το Pennsylvania State University και την υπηρεσία NCAR (National Center for Atmospheric Research) των Η.Π.Α.. Πρόκειται για ένα μετεωρολογικό μοντέλο μέσης κλίμακας, μη-υδροστατικό, που μπορεί να χρησιμοποιηθεί και σε υψηλή χωρική ανάλυση λίγων χιλιομέτρων. Έχει ευρεία εφαρμογή σε πολλές περιπτώσεις συμπεριλαμβανομένης και της επιχειρησιακής πρόγνωσης. Είναι δοκιμασμένο σε πολλές και διαφορετικές συνθήκες ακόμη και σε περιπτώσεις ακραίων καιρικών φαινομένων και περιοχές πολύπλοκης τοπογραφίας. Δεδομένα από ένα παγκόσμιο μετεωρολογικό μοντέλο (GFS – NCEP) χρησιμοποιούνται ως αρχικές και οριακές συνθήκες. Στη παρούσα εφαρμογή το MM5 λειτουργεί στα τέσσερα ενφωλευμένα πεδία (nested fields) που παρουσιάστηκαν στο Σχήμα 2.1 και στο Πίνακα 2.1, με την τεχνική της αμφίδρομης εμφώλευσης (two-way nesting). Τα παραγόμενα προγνωστικά μετεωρολογικά δεδομένα εισάγονται στο μοντέλο πρόγνωσης αέριας ρύπανσης CMAQ μέσω του προγράμματος επεξεργασίας δεδομένων MCIP.

2.4 Μοντέλο εκτίμησης εκπομπών EmisLab

Ο ρόλος του EmisLAB είναι να προβεί στην εκτίμηση αερίων εκπομπών σε μια περιοχή ενδιαφέροντος, στη χωρική και χρονική ανάλυση που απαιτεί το μοντέλο αέριας ρύπανσης. Οι εκπομπές που μοντελοποιούνται προέρχονται από το Γεωγραφικό Σύστημα Πληροφοριών σε μορφή ascii αρχείων. Σχετικά με την επεξεργασία βιογενών εκπομπών, το EmisLab έχει ενσωματωμένο το BEIS 3.12 (EPA).

Το EmisLab έχει εκτενείς δυνατότητες απεικόνισης των αποτελεσμάτων από χωρική ανάλυση και χρονοσειρές σε επιλεγμένα σημεία. Επίσης τα αποτελέσματα είναι σε κατάλληλη μορφή Input/Output Applications Programming Interface (I/O API) Network Common Data Form (NetCDF) ώστε να χρησιμοποιηθούν από το CMAQ.

2.5 Μοντέλο εκτίμησης αερίων ρύπων CMAQ

Το μοντέλο που επιλέχθηκε για την πρόγνωση της αέριας ρύπανσης είναι το CMAQv.4.6. Χρησιμοποιείται για την πρόγνωση της μεταφοράς και της χημείας του όζοντος, σωματιδίων, τοξικών αερίων ενώσεων, όξινων ρυπαντών. Μπορεί να εφαρμοστεί από μικρές (αστικές, λίγων χιλιομέτρων) έως μεγάλες (περιφερειακές, εκατοντάδων χιλιομέτρων) κλίμακες (multiscale). Επίσης μπορεί να εφαρμοστεί σε ένα μεγάλο εύρος χρονικών κλιμάκων. Κάνει πρόγνωση της μετατροπής, μεταφοράς, απόθεσης πολλών ρυπαντών ταυτόχρονα, με δεδομένες τις μετεωρολογικές συνθήκες και τις πηγές ρύπανσης. Στα πλαίσια του CMAQ επιλέχθηκε ο χημικός μηχανισμός CB-IV με αντιδράσεις για την αέρια και υγρή φάση. Επισημαίνεται ότι το CMAQ έχει αναπτυχθεί ειδικά ώστε να συνεργάζεται με το MM5. Στη παρούσα εφαρμογή θα πραγματοποιούνται υπολογισμοί με το CMAQ σε ένα ευρύτερο πεδίο, όπως τα πεδία 2 ή 3 του Σχήματος 2.1 και στη συνέχεια θα γίνονται οι υπολογισμοί στο Πεδίο 4. Τα αποτελέσματα των υπολογισμών στο Πεδίο 2 ή 3 θα χρησιμοποιούνται ως αρχικές και οριακές συνθήκες συγκεντρώσεων ρύπων για τους υπολογισμούς στο Πεδίο 4.

Με τη βοήθεια κατάλληλων επεξεργαστών τα αποτελέσματα του μοντέλου μπορούν να παρουσιαστούν με εποπτικό τρόπο, ως περιγραφικές προγνώσεις, χάρτες, διαγράμματα χρονοσειρών σε συγκεκριμένες τοποθεσίες.

2.6 Αποτελέσματα

2.6.1 Απογραφή εκπομπών ρύπων

Η απογραφή των αερίων ρύπων για τη περιοχή μελέτης βασίστηκε σε υλικό το οποίο διαθέτει το Εργαστήριο Περιβαλλοντικής Έρευνας του Δημόκριτου. Οι εκπομπές χωρίζονται ανάλογα με την προέλευσή τους σε ανθρωπογενείς και βιογενείς εκπομπές.

Οι ανθρωπογενείς εκπομπές προκαλούνται από την ανθρώπινη δραστηριότητα και προέρχονται από τις εξής πηγές:

Σημειακές Πηγές (Point Sources): Είναι εκπομπές που προέρχονται από μεγάλες βιομηχανικές εγκαταστάσεις και –λόγω καμινάδων– κατανέμονται καθ' ύψος ανάλογα με το ύψος των καμινάδων, τις συνθήκες έκλυσης και τις επικρατούσες μετεωρολογικές συνθήκες.

Επιφανειακές Πηγές (Stationary Area Sources): Οι εκπομπές αυτές προέρχονται από ανθρωπογενείς δραστηριότητες (βιομηχανία, βιοτεχνία, εμπόριο) κοντά στην επιφάνεια του εδάφους, αφορούν μια συγκεκριμένη περιοχή και επομένως κατανέμονται σε ένα ορισμένο πλήθος επιφανειακών κελιών του πλέγματος.

Κινητικές Πηγές (Mobile Sources): Πρόκειται για εκπομπές που προέρχονται από τις χερσαίες, θαλάσσιες και αέριες μετακινήσεις οχημάτων (κυκλοφορία οχημάτων, σιδηροδρόμων, θαλάσσιες μεταφορές, αεροδρόμια).

Θέρμανση: Είναι εκπομπές λόγω της θέρμανσης των κτηρίων, κατανέμονται κοντά στην επιφάνεια του εδάφους και εξαρτώνται από την εποχή του έτους και από την εξωτερική θερμοκρασία.

Επαναιωρούμενα σωματίδια: Πρόκειται για εκπομπές επαναιωρούμενης σκόνης που προέρχεται από διεργασίες εξαρτώμενες από τις μετεωρολογικές συνθήκες (άνεμο, θερμοκρασία και βροχόπτωση).

Βιογενείς εκπομπές: Προέρχονται από τη βλάστηση και εξαρτώνται από τον τύπο και το είδος της (π.χ. καλλιεργημένες εκτάσεις, κωνοφόρα δάση) και τις μετεωρολογικές συνθήκες.

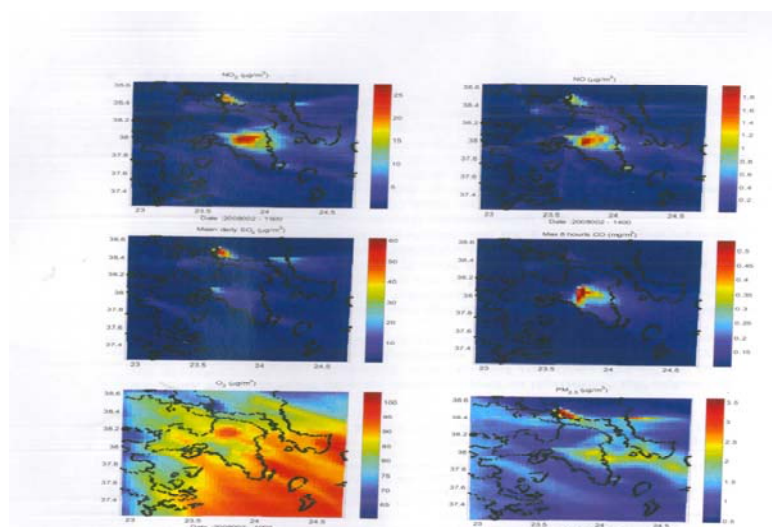
Η σύνθεση των επιμέρους εκπομπών από τις πηγές αυτές αποτελεί την απογραφή των εκπομπών για την περιοχή μελέτης. Η τελική καταγραφή αποδόθηκε στο πλέγμα του Πεδίου 3 και 4 με χωρική ανάλυση 9 και 1 km² αντίστοιχα και χρονική ανάλυση 1 ώρας. Οι ρύποι που αποτελούν την απογραφή των ανθρωπογενών εκπομπών είναι NO_x, SO_x, NMVOC, PM₁₀, PM_{2.5}, NH₃ και εκφράζονται σε kg. Οι ρύποι που

αποτελούν την απογραφή των βιογενών εκπομπών είναι NO, ISOPRENE, TMT, OVC και εκφράζονται σε kg.

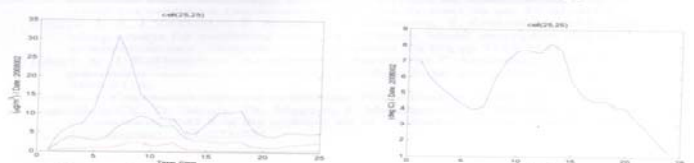
2.6.2 Μετεωρολογικές Συνθήκες κα Εκτίμηση Συγκεννώσεων

Παρουσιάζονται ενδεικτικά τα αποτελέσματα από δοκιμαστική εφαρμογή του συστήματος για μια συγκεκριμένη μέρα (2 Ιανουαρίου 2008). Τα αποτελέσματα αυτά βασίζονται σε προσωρινή απογραφή εκπομπών ρύπων.

Οι υπολογισμοί που παρατίθενται ενδεικτικά έχουν πραγματοποιηθεί στο Πεδίο 3. Για το υπολογιστικό πλέγμα του CMAQ κατά την κατακόρυφη διεύθυνση έχουν ληφθεί έξι στρώματα. Στο Σχήμα 2.3 παρουσιάζονται ενδεικτικά χάρτες ισοκατανομής της συγκέντρωσης ορισμένων ρύπων στο στρώμα που βρίσκεται πλησιέστερα στο επίπεδο του εδάφους. Συγκεκριμένα παρουσιάζεται η κατανομή συγκέντρωσης του NO₂ στις 15:00, του NO στις 14:00, του O₃ στις 10:00 και των PM_{2.5} στις 14:00. Επίσης παρουσιάζονται η μέση ημερήσια τιμή της συγκέντρωσης του SO₂ και η μέγιστη τιμή οκταώρου του O₃. Στο Σχήμα 2.4 παρουσιάζονται για ένα υπολογιστικό κελί στη κεντρική περιοχή του πεδίου υπολογισμών οι χρονοσειρές της συγκέντρωσης του NO₂ στα έξι στρώματα κατά την κατακόρυφη διεύθυνση και η χρονοσειρά της θερμοκρασίας κοντά στο έδαφος.



ΣΧΗΜΑ 3. Παράθεση ενδεικτικών αποτελεσμάτων του CMAQ για το Πεδίο 3.



ΣΧΗΜΑ 4. Παράθεση ενδεικτικών χρονοσειρών για το NO₂ και τη θερμοκρασία

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

ΔΙΑΚΙΝΗΣΗ ΡΥΠΩΝ ΣΤΗΝ ΑΤΜΟΣΦΑΙΡΑ

3.1 Εισαγωγή

Η ατμόσφαιρα είναι ένα μίγμα αέριων συστατικών που βρίσκονται σε συνεχή κίνηση. Οι κινήσεις των μαζών αυτών επηρεάζονται από τη περιστροφή της γης (κίνηση από τα δυτικά προς τα ανατολικά) και από τις αναπτυσσόμενες θερμοκρασίες που είναι το αποτέλεσμα του ενεργειακού ισοζυγίου σε κάθε σημείο της ατμόσφαιρας. Η κίνηση της αέριας μάζας διέπεται από τους νόμους της διατήρησης της μάζας, της ορμής και της ενέργειας για τον αέρα και τα συστατικά του.

Αποτέλεσμα των παραπάνω είναι το γεγονός ότι η συγκέντρωση των ρύπων σε συγκεκριμένη τοποθεσία και σε συγκεκριμένο χρόνο δεν εξαρτάται μόνο από την ποσότητα εκπομπής εκείνη τη στιγμή σε εκείνη τη θέση αλλά εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από τις μετεωρολογικές συνθήκες του παρόντος και του παρελθόντος αφού μπορεί να επηρεαστεί από προηγούμενες εκπομπές σε άλλες θέσεις. Συνεπώς η ατμόσφαιρα δρα όχι μόνο σα δέκτης ρύπων αλλά και ως «χωρικός» και «χρονικός μετασχηματιστής» των επιπέδων ρύπανσης.

3.2 Μηχανισμοί Διακίνησης των Ρύπων

Η συνηθέστερη περίπτωση είναι η έκλυση ενός ρύπου να γίνει μέσα στο ατμοσφαιρικό οριακό στρώμα. Ατμοσφαιρικό οριακό στρώμα είναι το στρώμα όπου η ατμόσφαιρα χαρακτηρίζεται από τυρβώδεις αναταράξεις που έχουν την ιδιότητα να διασκορπίζουν τον ρύπο στις τρεις διευθύνσεις και έτσι να μειώνουν πιο γρήγορα την συγκέντρωσή του. Το ύψος του ατμοσφαιρικού οριακού στρώματος είναι μεταβλητό με μία μέση τιμή περίπου στο ένα χιλιόμετρο. Μπορεί τη νύχτα να κατέβει ακόμη και στα 100 m και την ημέρα που έχει ηλιοφάνεια μπορεί να ανέβει στα 2 km. Μέσα στο ατμοσφαιρικό οριακό στρώμα οι ρύποι υπόκεινται συνήθως σε δύο κύριους μηχανισμούς μεταφοράς:

(α) Μεταφορά (Convection): Η μετακίνηση των ρύπων ακολουθεί την κύρια κατεύθυνση του ανέμου της ατμόσφαιρας.

(β) Διάχυση (Diffusion): Το φαινόμενο της διάχυσης επιτρέπει και κινήσεις κάθετες στην κυρία διεύθυνση του ανέμου.

Μαθηματικά, η κίνηση ενός ρύπου με τον μηχανισμό της μεταφοράς στην συγκεκριμένη θέση και την συγκεκριμένη στιγμή εκφράζεται από την σχέση:

$$F_{i,conv} = u_i C \quad i = 1,2,3 \text{ ή } i = x, y, z \quad (3.1)$$

όπου:

$F_{i,conv}$ η στιγμιαία πυκνότητα ροής της μάζας του ρύπου $[\frac{\mu g}{m^2 s}]$ στην διεύθυνση i λόγω μεταφοράς,

u_i η στιγμιαία ταχύτητα $[\frac{m}{s}]$ του αέρα στην διεύθυνση i ,

C η στιγμιαία συγκέντρωση του ρύπου. $[\frac{\mu g}{m^3}]$.

Αντίστοιχα, η κίνηση ενός ρύπου με τον μηχανισμό της μοριακής διάχυσης στην συγκεκριμένη θέση και την συγκεκριμένη στιγμή εκφράζεται από την σχέση (νόμος του Fick):

$$F_{i,diff} = -D \frac{\partial C}{\partial x_i} \quad i = 1,2,3 \text{ ή } i = x, y, z \quad (3.2)$$

όπου: $F_{i,diff}$ η στιγμιαία πυκνότητα ροής της μάζας του ρύπου $[\frac{\mu g}{m^2 s}]$ στην διεύθυνση i λόγω διάχυσης, D η συντελεστής μοριακής διάχυσης του ρύπου στην ατμόσφαιρα $[\frac{m^2}{s}]$.

Η συνολική στιγμιαία πυκνότητα ροής του ρύπου δίνεται από την σχέση:

$$F_i = F_{i,conv} + F_{i,diff} \quad (3.3)$$

ή

$$F_i = u_i C - D \frac{\partial C}{\partial x_i} \quad (3.3^a)$$

Οι παραπάνω σχέσεις εκφράζουν στιγμιαίες καταστάσεις που είναι δύσκολο να παρακολουθηθούν λόγω της τυρβώδους ροής της ατμόσφαιρας ιδιαίτερα μέσα στο οριακό ατμοσφαιρικό στρώμα. Οι τυρβώδεις στρόβιλοι βοηθούν στην ανάμειξη των ρύπων με μεγαλύτερες αέριες μάζες όσο αυτές μετακινούνται κατά μήκος της διεύθυνσης του ανέμου.

Η στιγμιαία ταχύτητα και η συγκέντρωση μπορούν να χωριστούν στις μεγάλης κλίμακας (χώρου και χρόνου) μέσες τιμές και στις τυρβώδεις διακυμάνσεις τους:

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \text{ και } C = \bar{C} + C'_i \quad (3.4)$$

Σημειώνεται ότι οι μέσες τιμές των τυρβωδών διακυμάνσεων είναι εξ ορισμού μηδενικές.

$$\overline{u'_i} = 0, \overline{C'} = 0 \quad (3.5)$$

Η παραπάνω ανάλυση οδηγεί στην διατύπωση της μέσης πυκνότητας ροής μάζας του ρύπου ως εξής:

$$\overline{F_i} = \overline{u_i} \cdot \overline{C} + \overline{u'_i C'} - D \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_i} \quad (3.6)$$

Το μέγεθος $\overline{u'_i C'}$ έχει κατά κανόνα μη μηδενική τιμή και είναι προϊόν των τυρβωδών διακυμάνσεων της ταχύτητας του ανέμου και της συγκέντρωσης του ρύπου. Ονομάζεται τυρβώδης διάχυση αφού παρουσιάζει φαινομενολογικά σε σχέση με την μέση κίνηση του ανέμου χαρακτηριστικά διάχυσης.

Συνεπάγεται:

$$\overline{F_i} = \overline{F_{i,conv}} + \overline{F_{i,diff}} \quad (3.7)$$

Είναι:

$\overline{F_{i,conv}} = \overline{u_i} \cdot \overline{C}$: η μέση πυκνότητα ροής μάζας του ρύπου λόγω μεταφοράς

$\overline{F_{i,diff}} = \overline{u'_i C'} - D \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_i}$: η μέση πυκνότητα ροής μάζας του ρύπου λόγω τυρβώδους διάχυσης (turbulent diffusion) και μοριακής διάχυσης.

Στο ατμοσφαιρικό οριακό στρώμα συνήθως η τυρβώδης ροή είναι κατά πολύ μεγαλύτερη της στρωτής και ισχύει η προσέγγιση:

$$\overline{F_{i,diff}} \approx \overline{u'_i C'} \quad (3.8)$$

Αξίζει να σημειωθεί, ότι όταν ο ρύπος βρεθεί πάνω από το οριακό στρώμα τότε ο κύριος μηχανισμός είναι η μεταφορά (convection). Η μαθηματική προσέγγιση του όρου $\overline{u'_i C'}$ δεν είναι εύκολη υπόθεση και εξακολουθεί να είναι αντικείμενο έρευνας.

Η απλούστερη και πλέον συνήθης προσέγγιση προκύπτει από την διαπίστωση ότι η τύρβη παρουσιάζει "χαοτικά" χαρακτηριστικά όπως η διάχυση στρωτής ροής. Επομένως κατ' αναλογία της μοριακής διάχυσης :

$$\overline{u'_i C'} = -D_{turb} \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_i} \quad (3.9)$$

Είναι εύκολο να διαπιστώσει πειραματικά κανείς ότι ο συντελεστής τυρβώδους διάχυσης δεν είναι μια σταθερά αλλά μεταβάλλεται χωρικά ή και χρονικά. Ακόμη μεταβάλλεται και ως προς την κατεύθυνση δίνοντάς του χαρακτηριστικά

διανυσματικού μεγέθους αντί βαθμωτού όπως είναι ο συντελεστής μοριακής διάχυσης.

Με άλλα λόγια:

$$\overline{u'_i C'} = -D_{i,turb} \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_i} \quad (3.10)$$

όπου: $D_{i,turb}$ ο συντελεστής τυρβώδους διάχυσης στην κατεύθυνση i .

Οι κύριες παράμετροι που επηρεάζουν την τυρβώδη διάχυση είναι:

- η ταχύτητα του ανέμου
- η ευστάθεια της ατμόσφαιρας
- η θέση σε σχέση με την υποκείμενη επιφάνεια της γης
- η μορφολογία της υποκείμενης επιφάνειας της γης.

3.3 Διακίνηση Ρύπων

Το πώς πηγαίνει και που φθάνει ένας ρύπος όταν μεταφέρεται μετά την εκπομπή του στην ατμόσφαιρα εξαρτάται από τις επικρατούσες μετεωρολογικές συνθήκες και το ύψος έκλυσης. Μπορούν να δοθούν κάποιες τάξεις μεγέθους βασισμένες σε μέσες τυπικές καταστάσεις .

Έστω ότι ο ρύπος εκλύεται μέσα στο κατώτερο ατμοσφαιρικό οριακό στρώμα, τότε σε κατακόρυφη διεύθυνση, σε μία ώρα έχει φτάσει στο ύψος του οριακού στρώματος. Σε μία ημέρα μπορεί να έχει εμφανισθεί στην κατώτερη τροπόσφαιρα. Σε 30 ημέρες μπορεί να έχει διασχίσει όλη την τροπόσφαιρα και σε 12 μήνες είναι πολύ πιθανό να βρίσκεται στην στρατόσφαιρα.

3.4 Απομάκρυνση Ρύπων

Τα παραπάνω ισχύουν εφόσον οι δεν υπάρχουν μηχανισμοί απομάκρυνσης του ρύπου από την ατμόσφαιρα. Στην πραγματικότητα όμως οι περισσότεροι ρύποι καθώς συμπαρασύρονται από τον άνεμο είναι δυνατόν να απομακρυνθούν είτε προς στο έδαφος είτε να καταστραφούν. Οι κύριοι μηχανισμοί απομάκρυνσης είναι:

- η ξηρά εναπόθεση (dry deposition)
- η υγρή εναπόθεση (wet deposition)
- η χημική καταστροφή εφόσον αντιδρούν χημικά
- η ραδιενεργός διάσπαση εφόσον είναι ραδιενεργά

3.4.1 Ξηρή Εναπόθεση (Dry Deposition)

Όταν ο συγκεκριμένος ρύπος βρίσκεται στο ατμοσφαιρικό στρώμα, οι κατακόρυφες αναταράξεις της ατμόσφαιρας ή και οι κατακόρυφοι καθοδικοί άνεμοι βοηθούν στην μεταφορά του στο έδαφος όπου μέρος του επικάθεται σε αυτό. Τα σωματίδια παρουσιάζουν μεγαλύτερη ξηρά εναπόθεση απ' ότι τα αέρια λόγω του βάρους τους.

Σαν ξηρά εναπόθεση θεωρείται η μεταφορά ενός ατμοσφαιρικού ρύπου (αερίου-σωματιδίου) στην επιφάνεια της γης (έδαφος, νερό, βλάστηση), όπου και συγκρατείται και περιλαμβάνει τρία στάδια-συνιστώσες.

Η πρώτη συνιστώσα αντιπροσωπεύει την μεταφορά του ρύπου από το τυρβώδες επιφανειακό υπόστρωμα στο υπόστρωμα στρωτής ροής. Η μεταφορά αυτή εξαρτάται κυρίως από την τυρβώδη διάχυση σε αυτή την περιοχή που καθορίζεται από την ταχύτητα του αέρα, την τραχύτητα του εδάφους και την ατμοσφαιρική ευστάθεια. (αεροδυναμική συνιστώσα(aerodynamic component)).

Η δεύτερη συνιστώσα περιγράφει την μεταφορά μέσω του υποστρώματος της στρωτής ροής προς την επιφάνεια εδάφους και καθορίζεται κυρίως από την μοριακή διάχυση (επιφανειακή συνιστώσα(surface component)). Παρότι το πάχος αυτού του υποστρώματος είναι πολύ μικρό (10^{-2} έως 10^{-1} cm), η διάχυση εδώ έχει πολύ σημαντικό ρόλο στο μέγεθος της ξηράς εναπόθεσης.

Η τρίτη συνιστώσα που αποτελεί και το τελικό στάδιο εναπόθεσης αφορά την τελική μεταφορά και συγκράτηση στην επιφάνεια του εδάφους (συνιστώσα μεταφοράς (transfer component)). Οι φυσικοχημικές και οι ηλεκτροχημικές ιδιότητες του ρύπου (ιδιαίτερα του αερίου) και της γήινης επιφανείας καθορίζουν τον τελευταίο αυτό μηχανισμό.

Για τα σωματίδια πάντα υπάρχει κάποια ξηρά εναπόθεση, αφού από την στιγμή που φθάσουν στο έδαφος κατά κανόνα συγκρατούνται. Για τους αερίου ρύπους που δεν αντιδρούν με το έδαφος, όπως τα ευγενή αέρια δεν υπάρχει καθόλου ξηρά εναπόθεση.

Για τα σωματίδια, ιδιαίτερα τα μεγάλα (διάμετρος 20 m και μεγαλύτερη) σημαντικό ρόλο παίζει η βαρύτητα. Ο συνήθης τρόπος μαθηματικής προσέγγισης της ξηράς εναπόθεσης είναι να ορίσουμε την ταχύτητα ξηράς εναπόθεσης (v_d) για τον συγκεκριμένο ρύπο ως εξής:

$$v_d = \frac{F_{g,d}}{C_g} \quad (3.11)$$

με:

F_d είναι η ροή ξηράς εναπόθεσης του ρύπου στο έδαφος ($\frac{\mu g}{m^2 s}$)

C_g ($\frac{\mu g}{m^3}$) η συγκέντρωση του ρύπου κοντά στο έδαφος (συνήθως 1 m πάνω από την επιφάνεια του εδάφους).

Η ταχύτητα v_d εκτιμάται εμπειρικά με βάση πειραματικές μετρήσεις .

Είναι φανερό από τα παραπάνω, ότι η ταχύτητα ξηράς εναπόθεσης δεν είναι σταθερά αλλά εξαρτάται εκτός από την φύση του ρύπου και από τις μετεωρολογικές συνθήκες και την μορφολογία του εδάφους..

3.4.2 Υγρή Εναπόθεση (Wet Deposition)

Στην πορεία του ο ρύπος μέσα στην ατμόσφαιρα μπορεί να συναντήσει σταγόνες νερού (ομίχλη, σύννεφα, βροχή) όπου μέρος του απορροφάται. Όταν βρέξει, οι σταγόνες της βροχής πέφτουν στο έδαφος συμπαρασύροντας και τον ρύπο που έτσι απομακρύνεται από την ατμόσφαιρα, το φαινόμενο αυτό ονομάζεται 'υγρή εναπόθεση'. Η ποσότητα της υγρής εναπόθεσης εξαρτάται κυρίως, εκτός από τον ίδιο τον ρύπο και από:

- την συγκέντρωση του
- την κατάστασή του (σωματιδιακός ή αέριος)
- τον βαθμό υδατοδιαλυτότητας, εάν είναι αέριο
- το μέγεθός του, εάν είναι σωματίδιο
- την ένταση της βροχής (μετράται συνήθως σε mm/h)
- το ρυθμός 'δέσμευσης' και εν συνεχεία απομάκρυνσης από τις σταγόνες της βροχής προσεγγίζεται μαθηματικά από την σχέση:

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)_w = -\Lambda C \quad (3.12)$$

Λ είναι ο συντελεστής απόπλυσης του ρύπου (washout coefficient) και εξαρτάται κυρίως την φύση του ρύπου και την ένταση της βροχής. Η ροή της υγρής εναπόθεσης θα προέλθει από την συνολική δέσμευση του ρύπου από την κάθε σταγόνα που κινείται κατακόρυφα μέχρι να φθάσει στο έδαφος:

$$F_{g,w} = \int_0^{\infty} \Lambda C dz \quad (3.13)$$

Κατ' αναλογία με την ξηρή εναπόθεση μπορεί να οριστεί και η ταχύτητα υγρής εναπόθεσης:

$$v_w = \frac{F_{g,w}}{C_g} \quad (3.14)$$

Εάν οριστεί ότι το ύψος της κατακόρυφης έκτασης του ρύπου ισούται με:

$$\bar{H} = \frac{1}{C_g} \int_0^{\infty} C dz \quad (3.15)$$

η μέση τιμή του Λ :

$$\bar{\Lambda} = \frac{\int_0^{\infty} \Lambda C dz}{\int_0^{\infty} C dz} \quad (3.16)$$

τότε

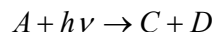
$$v_w = \bar{\Lambda} \cdot \bar{H} \quad (3.17)$$

Ο μηχανισμός υγρής εναπόθεσης συνήθως είναι πολύ πιο αποτελεσματικός από τον μηχανισμό ξηράς εναπόθεσης. Με άλλα λόγια η ταχύτητα υγρής εναπόθεσης είναι συνήθως κατά πολύ μεγαλύτερη από την ξηρή εναπόθεση. Για παράδειγμα εάν ληφθούν οι τυπικές τιμές $v_d = 1 \text{ cm/s}$, $\bar{\Lambda} = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ και $\bar{H} = 1000 \text{ m}$ τότε είναι $v_w = 10 \text{ cm/s}$ και $v_w/v_d = 10$. Είναι χαρακτηριστικό ότι οι περιοχές που επλήγησαν περισσότερο από την ραδιενέργεια κατά το ατύχημα του Τσερνομπίλ ήταν οι περιοχές που παρατηρήθηκαν βροχοπτώσεις κατά την διέλευση του ραδιενεργού νέφους.

3.4.3 Χημική Καταστροφή

Ένας αρκετά αποτελεσματικός τρόπος απομάκρυνσης για ορισμένους χημικά δραστικούς αέριους ρύπους είναι η καταστροφή τους από χημικές αντιδράσεις. Οι ρύποι αντιδρούν με χημικές ουσίες που βρίσκονται στον δρόμο τους και καταστρέφονται δημιουργώντας άλλες ουσίες που μπορεί με την σειρά τους να είναι και αυτές επιβλαβείς. Αυτοί οι ρύποι ονομάζονται δευτερογενείς ρύποι, σε αντίθεση με τους ρύπους που εκπέμπονται κατευθείαν στην ατμόσφαιρα και είναι οι πρωτογενείς ρύποι. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι στην ατμόσφαιρα συμβαίνουν αναρίθμητες χημικές αντιδράσεις ιδιαίτερα την ημέρα παρουσία ηλιοφάνειας.

Οι φωτοχημικές αντιδράσεις (photochemical reactions) είναι του τύπου:



Η σταθερά αντίδρασης k εξαρτάται από το συστατικό A και την ένταση της ηλιακής ακτινοβολίας. Γι αυτό σε ένα τόπο είναι και συνάρτηση της ώρας της ημέρας.

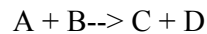
Ο ρυθμός καταστροφής του συστατικού A δίνεται από την σχέση:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -k \cdot C_A \quad (3.18)$$

Παράλληλα δημιουργούνται νέα συστατικά C και D .

$$\frac{\partial C_C}{\partial t} = \frac{\partial C_D}{\partial t} = k \cdot C_A \quad (3.19)$$

Στην ατμόσφαιρα λαμβάνει χώρα και μία σειρά άλλων αντιδράσεων που δεν εξαρτώνται από την ηλιακή ακτινοβολία . Τέτοιες αντιδράσεις είναι συνήθως της μορφής:



Η σταθερά αντίδρασης k δίνεται από την Εξίσωση Arrhenius:

$$k = \alpha \cdot \exp(-\beta/T) \quad (3.20)$$

Οι σταθερές α , β εξαρτώνται από την συγκεκριμένη αντίδραση.

Σε αυτή την περίπτωση, ο ρυθμός καταστροφής για τα συστατικά A και B είναι:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \frac{\partial C_B}{\partial t} = -k \cdot C_A \cdot C_B \quad (3.21)$$

Παράλληλα δημιουργούνται νέα συστατικά C και D με ρυθμούς:

$$\frac{\partial C_C}{\partial t} = \frac{\partial C_D}{\partial t} = k \cdot C_A \cdot C_B \quad (3.22)$$

Σημειώνεται ότι στις εξισώσεις (3.18), (3.19), (3.21) και (3.22) οι συγκεντρώσεις είναι μοριακές .

3.4.4 Ραδιενεργός Διάσπαση

Εάν ο ρύπος είναι ραδιενεργός τότε καταστρέφεται βαθμιαίως μέσω ραδιενεργού διάσπασής του. Η ταχύτητα διάσπασης καθορίζεται από τη σταθερά διάσπασης λ η οποία ορίζεται από την σχέση:

$$\frac{dN(t)}{dt} = -\lambda N(t) \quad (3.23)$$

όπου $N(t)$ είναι ο αριθμός των ραδιενεργών πυρήνων στην μονάδα του όγκου την χρονική στιγμή t .

Η ραδιενεργός διάσπαση συνοδεύεται συνήθως από α - ή β ακτινοβολία μαζί με γ -ακτινοβολία και παράγει νέους πυρήνες που μπορεί να είναι ραδιενεργοί ή όχι. Δηλαδή η καταστροφή ενός πυρήνα σημαίνει πηγή κάποιων άλλων και πηγή ραδιενεργών ακτινοβολιών επίσης.

3.4.5 Χρόνοι ζωής

Ο ρύπος που εκλύεται στην ατμόσφαιρα θα χαθεί κάποια στιγμή κυρίως από υγρή ή ξηρά εναπόθεση ή χημική ή ραδιενεργή καταστροφή. Άρα από την στιγμή που θα εκλυθεί στην ατμόσφαιρα έχει κατά κανόνα ένα πεπερασμένο χρόνο παραμονής σε

αυτήν. Ορίζεται σαν χρόνος ζωής (life time or residence time), τ_i , ενός συστατικού της ατμόσφαιρας, η παράμετρος:

$$\tau = \frac{M}{F} \quad (3.24)$$

M η ποσότητα του συστατικού στην ατμόσφαιρα (kg) και F η ροή απομάκρυνσης του από την ατμόσφαιρα (kg/s).

Σε ορισμένες περιπτώσεις είναι προτιμότεο για λόγους ευκολίας να ορίζεται ο χρόνος ημιζωής (half-life time), $t_{1/2}$, που είναι ο χρόνος που απαιτείται για να μειωθεί η ποσότητα του συστατικού στο ήμισυ. Αυτό γίνεται συνήθως όταν ο ρυθμός μεταβολής της συγκέντρωσής του δίνεται από την σχέση:

$$\frac{dC}{dt} = -\lambda C \quad (3.25)$$

Τέτοιες εξισώσεις χαρακτηρίζουν την ραδιενεργό και την φωτοχημική διάσπαση. Η λύση της παραπάνω εξίσωσης είναι της μορφής:

$$C = C_0 e^{-\lambda t} \quad (3.26)$$

C_0 η αρχική συγκέντρωση.

Με βάση τον ορισμό του χρόνου ημιζωής, προκύπτει:

$$\frac{C_0}{2} = C_0 e^{-\lambda t_{1/2}} \quad (3.27)$$

και

$$t_{1/2} = \frac{0.693}{\lambda} \quad (3.28)$$

Ο χρόνος ζωής, με βάση τον ορισμό του, ισούται με:

$$\tau = \frac{C}{(-dC/dt)} = \frac{1}{\lambda} = 1.565 t_{1/2} \quad (3.29)$$

ή

$$t_{1/2} = 0.693 \tau$$

Ένα άλλο χαρακτηριστικό στις περιπτώσεις αυτές είναι ότι ο χρόνος ζωής (ή ημιζωής) είναι μία σταθερά. Στη γενική περίπτωση όμως ο χρόνος ζωής ενός συγκεκριμένου ρύπου εξαρτάται κατά κανόνα από τις φυσικοχημικές ιδιότητές του,

το επίπεδο συγκέντρωσής του, τις ατμοσφαιρικές συνθήκες και τις συνθήκες εδάφους.

3.4.6. Η Εξίσωση Μεταφοράς Μάζας

Με βάση τις Εξισώσεις (3.6), (3.7) και (3.8) μπορεί να εκφραστεί το ισοζύγιο μάζας ενός συστατικού (ρύπου) στην ατμόσφαιρα σε ένα στοιχειώδη όγκο $dx \cdot dy \cdot dz$. Μπορεί να αποδειχθεί, ότι το ισοζύγιο μάζας του συστατικού με μέση συγκέντρωση $C [\frac{\mu g}{m^3}]$ εκφράζεται με την παρακάτω διαφορική εξίσωση διατήρησης της μάζας:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla(uC + \overline{u'C'}) = Q \quad (3.30)$$

όπου: C είναι η μέση συγκέντρωση στην συγκεκριμένη θέση, u είναι η μέση ταχύτητα ανέμου, $\overline{u'C'}$ είναι η ροή τυρβώδους διάχυσης, Q είναι οι πηγές (θετικές ή αρνητικές) $[\frac{\mu g}{m^3 s}]$.

Με όσα αναφέρθηκαν πιο πάνω η παράμετρος Q εκφράζει τις διάφορες διεργασίες απομάκρυνσης ή δημιουργίας ή εκπομπής του συγκεκριμένου συστατικού.

Πιο συγκεκριμένα:

$$Q = \frac{E}{dx dy dz} + \sum_j \left(\frac{\partial C}{\partial t} \right)_j \quad (3.31)$$

όπου: E είναι ο ρυθμός εκπομπής του συστατικού μέσα στον στοιχειώδη όγκο $dx \cdot dy \cdot dz$ σε $[\frac{\mu g}{s}]$, $\left(\frac{\partial C}{\partial t} \right)_j$ είναι ο ρυθμός δημιουργίας (ή απομάκρυνσης) από την διεργασία j .

Πιο πάνω δίνονται ποσοτικά οι όροι για τις διάφορες διεργασίες όπως η χημική καταστροφή (ή δημιουργία), η υγρή εναπόθεση και η ραδιενεργός διάσπαση. Η ξηρή εναπόθεση εμφανίζεται σαν οριακή συνθήκη στην διεπιφάνεια αέρα εδάφους. Η εξίσωση αυτή είναι αρκετά σύνθετη και προσεγγίζεται συνήθως αριθμητικά.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΟΥ ΣΥΣΤΗΜΑΤΟΣ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗΣ HYSPLIT_4

4.1 Περίληψη

Το HYSPLIT_4 (HYbrid Single-Particle Lagrangian Integrated Trajectory) μοντέλο (Έκδοση 4) είναι ένα ολοκληρωμένο σύστημα για τον υπολογισμό απλών τροχιών έως περίπλοκων διασκορπίσεων και εξομοιώσεων-εναποθέσεων χρησιμοποιώντας προσέγγιση είτε ρύπου είτε σωματιδίου. Το μοντέλο χρησιμοποιεί προηγούμενα σε πλέγμα μετεωρολογικά δεδομένα σε έναν από τους τρεις σχεδιασμούς προσαρμοσμένου χάρτη (Polar, Lambert, Mercator). Οι υπολογισμοί της συγκέντρωσης του αέρα συσχετίζουν τη μάζα-όγκο των ειδών που αποτελούν παράγοντα μόλυνσης με την απελευθέρωση είτε των αερίων, είτε των μορίων, είτε ενός συνδυασμού και των δύο. Ο ρυθμός διασποράς υπολογίζεται από το κατακόρυφο προφίλ διαχυτότητας, τη διάτμηση του αέρα και την οριζόντια παραμόρφωση του πεδίου του αέρα. Οι συγκεντρώσεις του αέρα υπολογίζονται σε ένα συγκεκριμένο σημείο του πλέγματος για τους ρύπους και σαν συγκεντρώσεις μέσου όρου των κελιών για τα σωματίδια.

4.2 Εισαγωγή

Το HYSPLIT μοντέλο έχει εξελιχθεί σε διάφορα στάδια κατά τη διάρκεια της τελευταίας μιάμιση δεκαετίας. Η αρχική έκδοση του μοντέλου (Draxler and Taylor, 1982) χρησιμοποιούσε μόνο παρατηρήσεις ανώτερης ατμόσφαιρας και η διασπορά υπέθεταν ότι αποτελούνταν από μια ομοιόμορφη ανάμιξη κατά τη διάρκεια της ημέρας και ότι δεν υπήρχε ανάμιξη τη νύχτα. Η διασπορά εξαιτίας της διάτμησης του αέρα γινόταν χωρίζοντας το αναμεμιγμένο στρώμα της ημέρας σε μικρότερα στρώματα κάθε νύχτα. Στην επόμενη έκδοση (Draxler and Stunder, 1988), ένα μείγμα ποικίλης δύναμης εισήχθη που βασιζόταν σε ένα χώρο και χρόνου προφίλ ποικίλης διαχυτότητας. Στην τελευταία έκδοσή (HYSPLIT_3–Draxler, 1990; 1992), η χρήση των στοιχείων της ανώτερης ατμόσφαιρας αντικαταστάθηκε από μετεωρολογικά δεδομένα τα οποία προέρχονταν είτε από αναλύσεις είτε από σύντομες αριθμητικές προβλέψεις ρουτίνας καιρού-μοντέλου.

Διάφορα σημαντικά νέα χαρακτηριστικά προστέθηκαν στη τρέχουσα έκδοσή του μοντέλου. Πιο συγκεκριμένα, οι αλγόριθμοι οριζόντιας μεταφοράς (advection algorithms) αναβαθμίστηκαν για να περιέχουν χρονική παρεμβολή. Παρόλο που η μεταφορά και η διασπορά ενός παράγοντα μόλυνσης μπορεί να υπολογιστεί, υπολογίζοντας την απελευθέρωση ενός μόνο ρύπου, ο ρύπος μπορεί τώρα να οριστεί είτε με μία Γκαουσιανή (Gaussian) ή ως το ανώτερο σημείο (top-hat) μιας οριζόντιας κατανομής. Όπως και στις προηγούμενες εκδόσεις, μία ενιαία απελευθερωμένη ριπή επεκτείνεται μέχρι το μέγεθός της να υπερβεί το χώρο του μετεωρολογικού

πλέγματος, το οποίο αποτελείται από κελιά, και στη συνέχεια χωρίζεται σε διάφορους νέους μικρότερους ρύπους. Επιπλέον, προστέθηκε μια τρισδιάστατη διασπορά σωματιδίων που υπολογίζει συγκεντρώσεις αέρα από τη διασπορά ενός αρχικού καθορισμένου αριθμού σωματιδίων. Όλες οι εξισώσεις που χρησιμοποιήθηκαν για τον υπολογισμό της δύναμης της κατακόρυφης ανάμιξης αναθεωρήθηκαν βασισμένες στην πιο πρόσφατη έκδοση, και ο ρυθμός της οριζόντιας διασποράς δεν υποθέτει πλέον ότι είναι συνεχής αλλά μπορεί να ποικίλει σύμφωνα με τη παραμόρφωση του πεδίου του αέρα.

4.3 Πεδία Μετεωρολογικών δεδομένων

Τα πεδία απόδοσης μετεωρολογικού μοντέλου δε χρησιμοποιούνται, συνήθως, απευθείας από το μοντέλο διασποράς χωρίς κάποια προηγούμενη επεξεργασία επειδή τα δεδομένα ίσως να έχουν παραποιηθεί από μια ποικιλία από διαφορετικά κάθετα ισότιμα συστήματα πριν το αποτέλεσμα. Για να διατηρηθεί ένας μεγαλύτερος βαθμός προσβασιμότητας μέσα στη δομή του μοντέλου διασποράς, για παράδειγμα η ικανότητα να χρησιμοποιεί μετεωρολογικά δεδομένα διαφορετικών πηγών για εισαγωγή, τα μετεωρολογικά προφίλ σε κάθε σημείο του οριζόντιου πλέγματος παρεμβάλλονται γραμμικά σε ένα εσωτερικό μοντέλο διασποράς εδάφους ακολουθώντας (σ) ισότιμο σύστημα:

$$\sigma = \frac{(Z_{top} - Z_{mfs})}{(Z_{top} - Z_{gl})} \quad (4.1)$$

όπου όλα τα ύψη εκφράζονται σε σχέση με το επίπεδο αναφοράς που είναι η θάλασσα και όπου Z_{top} είναι το ανώτερο σημείο του ισότιμου συστήματος του μοντέλου διασποράς. Το εσωτερικό ύψος του μοντέλου πάνω από το επίπεδο του εδάφους μπορεί να επιλεγεί σε κάθε διάστημα, παρόλα αυτά μια δευτεροβάθμια σχέση μεταξύ του ύψους (z) και του επιπέδου του μοντέλου καθορίστηκε, έτσι ώστε κάθε επίπεδο ύψους σε σχέση με τον εσωτερικό δείκτη του πρότυπου μοντέλου, k , να καθορίζεται από τη σχέση:

$$z = ak^2 + bk + c \quad (4.2)$$

όπου $a=30$, $b=25$ και $c=5$. Αυτή η σχέση έχει ως αποτέλεσμα τη μείωση της ανάλυσης μακριά από την επιφάνεια, με το πρώτο επίπεδο ($k=1$) στα 10 m, το δεύτερο επίπεδο στα 75 m, το τρίτο επίπεδο στα 200 m, έως το 20οστό επίπεδο στα 11500 m, η διαφορά ανάμεσα στα επίπεδα είναι περίπου στα 1200 m. Οποιαδήποτε κάθετη ανάλυση μπορεί να καθοριστεί αλλάζοντας τις σταθερές στην εξίσωση (4.2). Παρόλα αυτά η εσωτερική ανάλυση του μοντέλου πρέπει να είναι στην ίδια ή σε καλύτερη κατακόρυφη ανάλυση από τα εισαγόμενα δεδομένα.

Το οριζόντιο δίκτυο είναι σχεδιασμένο να είναι πανομοιότυπο με αυτό των μετεωρολογικών δεδομένων. Τρεις διαφορετικοί σχεδιασμοί προσαρμοσμένων χαρτών, Polar, Stereographic, Mercator και Lambert Conformal, υποστηρίζονται χρησιμοποιώντας ένα σύνολο από παγκόσμιες τακτικές μετατροπής χαρτών. (Taylor, 1997).

Πλεγματικά πεδία μετεωρολογικών μεταβλητών είναι επίσης απαραίτητα σε τακτά χρονικά διαστήματα. Το χρονικό διάστημα ανάμεσα στα πεδία πρέπει να είναι σταθερό για κάθε καθορισμένο πλέγμα. Για παράδειγμα το λεπτό πλέγμα τοπικών δεδομένων πιθανόν να είναι διαθέσιμο σε διαστήματα τριών ωρών ενώ το χονδροειδές πλέγμα του παγκόσμιου μοντέλου μπορεί να είναι διαθέσιμο μόνο κάθε έξι ώρες.

Πεδία μετεωρολογικών δεδομένων μπορεί να παρέχουν από ένα έως τέσσερα διαφορετικά ισοδύναμα συστήματα, τα οποία χρησιμοποιούνται από τον ECMWF-the European Centre for Medium-Range Weather Forecasting,:

- πίεση-σίγμα (pressure-sigma)
- απόλυτη-πίεση (pressure-absolute)
 - terrain-sigma
- υβριδική απόλυτη πίεση σίγμα (hybrid absolute-pressure-sigma)

Το μοντέλο απαιτεί U, V (τις οριζόντιες συνιστώσες ανέμου), T (θερμοκρασία), Z (ύψος) ή P (πίεση), P_0 πίεση στην επιφάνεια. Η υγρασία και η κάθετη κίνηση είναι προαιρετικά, παρόλα αυτά τη κάθετη κίνηση μπορεί κανείς να την υπολογίσει βασισμένος στο πώς η κάθετη ισοδυναμία είναι ορισμένη. Εάν πρέπει να συμπεριλαμβάνεται η διαδικασία εναπόθεσης για το διαλυτό αέρα ή για σωματίδια, το μοντέλο επίσης απαιτεί το πεδίο βροχόπτωσης. Οι μετατροπές δεδομένων που απαιτούνται για την καθεμιά από αυτές τις εισαγωγές περιγράφονται με περισσότερες λεπτομέρειες στις παραγράφους που ακολουθούν.

4.3.1 Απόλυτη Πίεση

Όταν τα εισαγόμενα δεδομένα δίνονται σε επιφάνειες πίεσης τότε η μόνη τιμή επιφάνειας που απαιτείται είναι η πίεση. Τα ύψη των επιφανειών πίεσης (Z_p) θεωρείται ότι είναι σχετικά με το msl (Mean Sea Level). Τα πεδία απόδοσης του μοντέλου σε επιφάνειες απόλυτης πίεσης συνήθως παρεμβάλλονται σε αυτές τις επιφάνειες. Η απόδοση της υγρασίας αναμένεται σαν σχετική υγρασία (RH) ενώ η θερμοκρασία θεωρείται ότι είναι μια πραγματική θερμοκρασία (T_v).

Για παράδειγμα, η θερμοκρασία επιφάνειας (T_0) προκύπτει αδιαβατικά από το χαμηλότερο επίπεδο δεδομένων χρησιμοποιώντας τα εισαγόμενα δεδομένα του επιπέδου-1 θερμοκρασία (T_1) και πίεση (P_1),

$$T_0 = T_1 \left(\frac{P_1}{P_0} \right)^{-0.286} \quad (4.3)$$

Το ύψος της επιφάνειας του εδάφους (Z_g) παραποιείται κατευθείαν από το προφίλ εάν το επίπεδο του εδάφους είναι ανάμεσα στα επίπεδα των εισαγόμενων δεδομένων. Διαφορετικά η επιφάνεια του εδάφους υπολογίζεται από την καταστατική εξίσωση:

$$Z_g = Z_1 - R_d T_{01} \ln \left(\frac{P_0}{P_1} \right) g^{-1} \quad (4.4)$$

όπου: R_d είναι η σταθερά των αερίων και για το ξηρό αέρα έχει τη τιμή $R_d=287.04 \text{ Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$, T_{01} είναι η μέση θερμοκρασία ανάμεσα στα δύο πιο χαμηλά επίπεδα δεδομένων και g είναι η επιτάχυνση της βαρύτητας.

Κανονικά οι άνεμοι στο επίπεδο του εδάφους ($\leq 10m$) είναι διαθέσιμοι από τα μετεωρολογικά μοντέλα. Στις σπάνιες περιπτώσεις που αυτά τα πεδία δεν παρέχονται, οι άνεμοι χαμηλού επιπέδου (U_{model}) υπολογίζονται σε όλα τα επίπεδα του μοντέλου (Z_{model}) κάτω από το χαμηλότερο επίπεδο δεδομένων (Z_{data}) χρησιμοποιώντας ένα λογαριθμικό προφίλ για ουδέτερες συνθήκες:

$$U_{\text{model}} = U_{\text{data}} \frac{\ln\left(\frac{Z_{\text{model}}}{Z_0}\right)}{\ln\left(\frac{Z_{\text{data}}}{Z_0}\right)} \quad (4.5)$$

όπου: Z_0 είναι το μήκος της τραχύτητας και οι δείκτες δεδομένων και το μοντέλο αναφέρονται στις τιμές στο χαμηλότερο επίπεδο στο αρχείο εισαγόμενων δεδομένων και στο εσωτερικό μοντέλο του ισοδύναμου συστήματος, αντίστοιχα. Οι ουδέτερες συνθήκες υποθέτονται επειδή τα δεδομένα σταθερότητας δεν έχουν ακόμη επεξεργαστεί σε αυτό το στάδιο των υπολογισμών.

Τα πεδία ανώτερου επιπέδου (όπως U, V, T, RH) παρεμβάλλονται γραμμικά από τα δεδομένα του επιπέδου ύψους έως τα επίπεδα του μοντέλου. Διάφορες επιπρόσθετες εξαρτώμενες μεταβλητές είναι επίσης υπολογίσιμες σε κάθε επίπεδο του μοντέλου όπως η τοπική πυκνότητα (ρ):

$$\rho = k_1 P T^{-1} R_d^{-1} \quad (4.6)$$

όπου P είναι η τοπική πίεση και $k_1 (=100)$ είναι ένας συντελεστής μετατροπής από hPa σε Nm^{-2} .

Επιπλέον η δυνητική θερμοκρασία (potential temperature):

$$\theta = T \left(\frac{1000}{P} \right)^{0.286} \quad (4.7)$$

Εάν κάποιες μετρήσεις της κάθετης κίνησης (W_p) παρέχονται (συνήθως σε μονάδες hPas^{-1}), μετατρέπονται σε (W_σ) σίγμα ισότιμης (s^{-1}):

$$W_\sigma = k_1 W_p \rho^{-1} g^{-1} Z_{\text{top}}^{-1} \quad (4.8)$$

Η εξίσωση (4.8) αμελεί τη κλίση του εδάφους επειδή η απόδοση των πεδίων αρχειοθετήθηκε από τα μετεωρολογικά μοντέλα. Παρόλα αυτά οι τυπική απόδοση πάνω στις επιφάνειες πίεσης είναι συνήθως στα ίδια επίπεδα όπως υπολογίζεται πάνω στο εσωτερικό ισότιμο σύστημα σίγμα του μετεωρολογικού μοντέλου, μόνο με παρεμβολή στις επιφάνειες πίεσης.

4.3.2 Πίεση σίγμα (Pressure Sigma)

Όταν τα εισερχόμενα δεδομένα δίνονται σε επιφάνειες πίεσης σίγμα θεωρείται ότι αυτές οι επιφάνειες αυτές είναι το μητρικό πλέγμα του μετεωρολογικού μοντέλου και ως εκ τούτου η υγρασία αναμένεται ως ειδική υγρασία και η θερμοκρασία θεωρείται ότι είναι μια ξηρή θερμοκρασία. Συνεπώς η πραγματική θερμοκρασία υπολογίζεται από την ειδική υγρασία (Q):

$$T_v = T(1 + 0.61Q) \quad (4.9)$$

πριν την μετατροπή της σε δυνητική θερμοκρασία. Τα ύψη υπολογίζονται για το κάθε επίπεδο δεδομένων ξεχωριστά και αυτό συμβαίνει επειδή τα αρχεία δεδομένων της πίεσης σίγμα δεν τα περιέχουν. Η υψομετρική εξίσωση ενσωματώνεται από την επιφάνεια για την απόκτηση του ύψους του κάθε επιπέδου δεδομένων βασισμένη στη μέση πραγματική θερμοκρασία του στρώματος. Επομένως η αύξηση του ύψους ανάμεσα στα επίπεδα 1 και 2 γίνεται:

$$\Delta z = \ln\left(\frac{P_1}{P_2}\right) R_d T_{v12} g^{-1} \quad (4.10)$$

Η ειδική υγρασία μετατρέπεται σε κλάσμα σχετικής υγρασίας (0 σε 1):

$$RH \approx QP(0.622E_s)^{-1} \quad (4.11)$$

και από την ειδική υγρασία και την αναλογία κορεσμού προκύπτει:

$$E_s = \exp(21.4 - [5351T^{-1}]) \quad (4.12)$$

εκφράζεται σε hPa. Η σχετική υγρασία απαιτείται στους υπολογισμούς και ειδικότερα σε περιπτώσεις που σχετίζονται με τον καθορισμό των επιπέδων των σύννεφων για τις διαδικασίες αφαίρεσης της υγρασίας, τη προσπίπτουσα ηλιακή ακτινοβολία για ξηρή εναπόθεση και χημικές μετατροπές. Η επιφανειακή πίεση, η πυκνότητα, η κάθετη κίνηση και άλλες μεταβλητές υπολογίζονται.

4.3.3 Terrain-Sigma

Οι συντεταγμένες σίγμα που ακολουθούν το έδαφος χρησιμοποιούνται από πολύ λεπτομερή, μέσης κλίμακας, μοντέλα που καλύπτουν ένα περιορισμένο χωρικό πεδίο. Όπως και στις προηγούμενες παραγράφους, οι τιμές της επιφάνειας υπολογίζονται εάν χρειαστεί, ωστόσο το ύψος της επιφάνειας δεν απαιτείται επειδή τα δεδομένα εισόδου είναι ενσωματωμένα σε ένα σύστημα συντεταγμένων το οποίο ακολουθεί τη τοπολογία του εδάφους (terrain following). Ανωτέρου επιπέδου δεδομένα μπορούν να επεξεργαστούν, πριν από αυτό όμως πρέπει το terrain-sigma σύστημα συντεταγμένων των δεδομένων εισαγωγής να μετατραπεί σε terrain-sigma σύστημα του μοντέλου διασποράς.

4.3.4 Υβριδική Απόλυτη Πίεση (Hybrid Absolute Pressure Sigma)

Ένα υβριδικό σύστημα συντεταγμένων, χαρακτηριστικό των πεδίων απόδοσης διαθέσιμο από το ECMWF (1995), αποτελείται από απόλυτη πίεση που προστίθεται στο επίπεδο πίεση-σίγμα. Η διαδικασία μετατροπής είναι σχεδόν ταυτόσημη με τα κανονικά δεδομένα πίεσης-σίγμα όπως περιγράφηκε προηγουμένως. Τα δεδομένα εισαγωγής καθορίζονται από τα επίπεδα υβριδικής πίεσης που δίνονται από τη σχέση:

$$P_k = A_k + B_k P_0 \quad (4.13)$$

όπου: ο δείκτης k δείχνει το επίπεδο, P η πίεση, P_0 η πίεση επιφάνειας, A η αντιστάθμιση της πίεσης και B μια τιμή σίγμα (0-1).

4.4 Κάθετη Κίνηση

Στις περισσότερες περιπτώσεις τα μετεωρολογικά δεδομένα εισόδου θα περιέχουν ένα πεδίο κάθετης κίνησης, συνήθως σε μονάδες πίεσης, και ανεξάρτητα πάνω σε ποιο κάθετο σύστημα συντεταγμένων αυτά τα δεδομένα εισόδου παρέχονται, το πεδίο της κάθετης ταχύτητας είναι σχεδόν πάντα σχετικό με αυτό που περιέχεται στο σύστημα συντεταγμένων terrain following sigma του μετεωρολογικού μοντέλου. Οι υπολογισμοί της τροχιάς και της διασποράς του μοντέλου μπορούν να χρησιμοποιούν αυτά τα πεδία δεδομένων άμεσα επειδή το εσωτερικό σύστημα συντεταγμένων του μοντέλου θα είναι πάντα terrain following ανεξάρτητα από τη μορφή των δεδομένων εισαγωγής. Αυτός είναι ένας από τους πρωταρχικούς λόγους που τα δεδομένα εισαγωγής χρειάζεται να ξαναχαρτογραφηθούν σε ένα κοινό κάθετο σύστημα συντεταγμένων.

Όταν τα πεδία κάθετης κίνησης λείπουν ή ίσως υπάρχουν κάποιες συγκεκριμένες προϋποθέσεις που απαιτούνται για τη προσομοίωση, το μοντέλο διασποράς έχει την επιλογή να αντικαταστήσει αυτά τα πεδία με μία εσωτερικά υπολογιζόμενη κάθετη ταχύτητα υποθέτοντας ότι το κομμάτι που αποτελεί παράγοντα μόλυνσης μεταφέρεται σε κάποια άλλη επιφάνεια. Τα δεδομένα εισαγωγής μπορούν να ξαναχαρτογραφηθούν σε διάφορες επιφάνειες και να υπολογίσουν τη ταχύτητα (W_η) που απαιτείται για να διατηρηθεί το κομμάτι πάνω στην επιλεγμένη επιφάνεια (η):

$$W_\eta = \frac{\left(-\frac{\partial \eta}{\partial t} - u \frac{\partial \eta}{\partial x} - v \frac{\partial \eta}{\partial z} \right)}{\left(\frac{\partial \eta}{\partial z} \right)} \quad (4.14)$$

δεδομένης της κλίσης της επιφάνειας και του τοπικού ρυθμού αλλαγών των επιφανειών, η , οι κάθετες μεταβολές μπορεί να είναι είτε ισοβαρείς (isobaric) (P), isosigma (σ), isopycnic (ρ) ή ισεντροπικές (isentropic) (θ).

4.5 Ηλιακή Ακτινοβολία στην Επιφάνεια της Γης

Κάποιες ειδικές εφαρμογές απαιτούν την επιπλέον παράμετρο της ηλιακής ακτινοβολίας στην επιφάνεια της γης. Εάν δεν είναι διαθέσιμη στο αρχείο των δεδομένων εισαγωγής μπορεί να υπολογιστεί σε κάθε σημείο του μετεωρολογικού πλέγματος βασισμένοι στη νεφοκάλυψη (cloud-over), είναι μια μεταβλητή εκφρασμένη σε όγδοα, και στο ημίτονο της ηλιακής γωνίας έτσι ώστε:

$$G = \sin(a)S\tau \quad (4.15)$$

όπου S η ηλιακή σταθερά συναφείς με το υψηλότερο στρώμα του σύννεφου και τ είναι το κλάσμα που μεταδίδεται μέσα από τα σύννεφα. Υποθέτοντας τη κανονική, στην κορυφή της ατμόσφαιρας, ηλιακή σταθερά να είναι περίπου ίση με 1380 Wm^{-2} και θεωρώντας ότι κατά μέσο όρο το 20% της ακτινοβολίας απορροφάται ή αντανακλάται πίσω στο διάστημα (Sellers, 1972) από μια καθαρή ατμόσφαιρα, τότε $S=11000 \text{ Wm}^{-2}$. Το αποτέλεσμα της νεφοκάλυψης μπορεί να αντιμετωπιστεί ως μία γραμμική συνάρτηση. Για το λόγο αυτό καθορίζεται ένας κρίσιμος συντελεστής μετάδοσης (τ_c) για να είναι ο περιοριστικός παράγοντας από 50% μετάδοση σε 100% κάλυψη του σύννεφου όπως χρησιμοποιήθηκε από τον Koch (1985), έτσι ώστε:

$$T = 1 - A(1 - \tau_c) \quad (4.16)$$

όπου A είναι ένας κλασματικός αριθμός που εκφράζει τη νεφοκάλυψη. Ακολουθώντας μία παρόμοια διαδικασία με αυτή που χρησιμοποιήθηκε από το Nested Grid Model (NGM-Tuccillo, 1988), ο A προσδιορίζεται από τη μέση κλασματική σχετική υγρασία ($RH - 0$ σε 1) και από τα τρία επίπεδα του μοντέλου σίγμα σχετικά με το επίπεδο της μέγιστης RH , έτσι ώστε σε κάθε τοποθεσία του πλέγματος να ισχύει:

$$A = [5(RH - 0.80)]^2 \quad (4.17)$$

και όπου η RH περιορίζεται σε ένα εύρος τιμών από 0.80 έως 1, το οποίο αποφέρει ποσότητες σε σύννεφα από 0 σε 1. Για την υπολογιστική απλότητα ο παράγοντας του πάχους νεφών (cloud-depth) και το ύψος δεν εξετάζονται. Ωστόσο εάν είναι διαθέσιμη πιο λεπτομερείς πληροφόρηση για τα σύννεφα και την ηλιακή ροή από τα αρχεία των μετεωρολογικών δεδομένων, οι παραπάνω υπολογισμοί μπορούν να αντικατασταθούν απευθείας από τα μετεωρολογικά δεδομένα εισαγωγής.

4.6 Οριζόντια Μεταφορά

Η βάση για κάθε λαγκρατζιανό μοντέλο είναι ότι η διασπορά υπολογίζεται ακολουθώντας το σωματίδιο ή το αέριο. Αυτό σημαίνει, ότι η οριζόντια μεταφορά ενός σωματιδίου υπολογίζεται ανεξάρτητα. Ως εκ τούτου αφού τα βασικά μετεωρολογικά δεδομένα (U, V, W) έχουν επεξεργαστεί και παρεμβληθεί στο εσωτερικό πλέγμα του μοντέλου, οι τροχιές μπορούν να υπολογιστούν για τον έλεγχο της οριζόντιας μεταφοράς των στοιχείων του μοντέλου.

Η οριζόντια μεταφορά ενός σωματιδίου ή αερίου υπολογίζεται από το μέσο όρο των διανυσμάτων της ταχύτητας στις τρεις διαστάσεις για μια αρχική θέση $P(t)$ και μια τυχαία τελική θέση $P'(t+\Delta t)$. Τα διανύσματα ταχύτητας παρεμβάλλονται γραμμικά και στο χώρο και στο χρόνο. Η πρώτη τυχαία θέση έχει τη μορφή:

$$P'(t + \Delta t) = P(t) + V(P, t)\Delta t \quad (4.18)$$

και η τελική θέση:

$$P(t + \Delta t) = P(t) + 0.5[V(P, t) + V(P', t + \Delta t)]\Delta t \quad (4.19)$$

Η μέθοδος ολοκλήρωσης είναι πολύ κοινή (για παράδειγμα Kreyszig, 1968) και έχει χρησιμοποιηθεί για την ανάλυση τροχιάς για αρκετό καιρό. Υψηλότερης τάξης μέθοδοι ολοκλήρωσης έχουν διερευνηθεί και απορριφθεί, επειδή οι παρατηρήσεις των δεδομένων παρεμβάλλονται γραμμικά από το πλέγμα έως το σημείο ολοκλήρωσης με αποτέλεσμα υψηλότερης τάξης μέθοδοι να μην αποφέρουν μεγαλύτερη ακρίβεια.

Οι τροχιές τερματίζονται όταν εξέλθουν από τη κορυφή του μοντέλου, αλλά η οριζόντια μεταφορά συνεχίζει κατά μήκος της επιφάνειας όταν οι τροχιές τέμνουν το έδαφος. Η ολοκλήρωση του χρονικού βήματος (Δt) μπορεί να ποικίλει κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης. Υπολογίζεται κατ' απαίτηση ότι η απόσταση της οριζόντιας μεταφοράς για το εκάστοτε χρονικό βήμα μπορεί να είναι μικρότερη από τη πλεγματική απόσταση. Η μέγιστη μεταφορά ταχύτητας U_{\max} καθορίζεται από τη μέγιστη ταχύτητα μεταφοράς σωματιδίου/αερίου κατά τη διάρκεια της προηγούμενης ώρας. Τα χρονικά βήματα μπορεί να ποικίλουν από 1 minute έως 1 hour και υπολογίζονται από τη σχέση:

$$U_{\max} (\text{grid} - \text{units} \quad \text{min}^{-1})\Delta t(\text{min}) < 0.75(\text{grid} - \text{units}) \quad (4.20)$$

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΔΙΑΣΠΟΡΑΣ

5.1 Περιγραφή Διασποράς

Ένα λαγκρατζιανό μοντέλο μπορεί να υπολογίσει τις συγκεντρώσεις αέρα μέσω μιας από τις δύο υποθέσεις:

Σε ένα μοντέλο αερίου, η πηγή προσομοιώνεται, σε τακτά διαστήματα κατά τη διάρκεια της απελευθέρωσης αέριων ρύπων που είναι μολυντές. Το κάθε αέριο περιέχει το κατάλληλο κλάσμα μάζας ρύπου. Μεταφέρεται οριζόντια σύμφωνα με τη τροχιά της κεντρικής θέσης ενώ το μέγεθος του αερίου επεκτείνεται στο χρόνο για να εξηγήσει τη φύση της διασποράς από μια ταραχώδη ατμόσφαιρα.

Σε ένα λαγκρατζιανό μοντέλο σωματιδίων, η πηγή μπορεί να προσομοιωθεί, κατά τη διάρκεια της απελευθέρωσης πολλών σωματιδίων. Επιπλέον στην οριζόντια κίνηση του κάθε σωματιδίου, μία τυχαία συνιστώσα της κίνησης προστίθεται σε κάθε βήμα ακολουθώντας την ατμοσφαιρική διαταραχή εκείνης της ώρας. Κατά αυτόν τον τρόπο ένα σύμπλεγμα από σωματίδια που απελευθερώνονται στο ίδιο σημείο θα επεκταθεί στο χώρο και στο χρόνο προσομοιώνοντας τη φυσική διασπορά της ατμόσφαιρας. Σε ένα ομογενές περιβάλλον το μέγεθος του αερίου (όσον αφορά τις πρότυπες αποκλίσεις) κάθε στιγμή θα αντιστοιχεί στο δεύτερο λεπτό των θέσεων του σωματιδίου.

Μια υβριδική προσέγγιση, αναπτύχθηκε από τον Hurley (1994), ενσωματώθηκε σε αυτή την έκδοση του μοντέλου, στην οποία ο υπολογισμός χρησιμοποιεί μοριακή διασπορά στην κάθετη κατεύθυνση και αέρια διασπορά στην οριζόντια. Ανεξάρτητα με το ποια προσέγγιση χρησιμοποιείται οι συντελεστές σταθερότητας και μίξης χρειάζεται να υπολογιστούν από τα μετεωρολογικά δεδομένα.

5.2 Σταθερότητα (Stability)

Υπάρχουν δύο επιλογές για να υπολογίσει κανείς την οριακή σταθερότητα του στρώματος. Η μέθοδος που προτιμάται είναι η χρησιμοποίηση της ροής της θερμότητας και της ορμής που παρέχεται, εάν είναι διαθέσιμη, από το μετεωρολογικό μοντέλο. Διαφορετικά η θερμοκρασία και οι κλήσεις του ανέμου του κάθε σημείου του πλέγματος χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό της σταθερότητας. Η τελευταία εκδοχή μπορεί να μην είναι ιδανική εάν τα μετεωρολογικά δεδομένα παρέχονται μόνο σε υποχρεωτικές επιφάνειες με μεγάλες αποστάσεις ανάμεσα στα επίπεδα κοντά στο έδαφος. Σε οποιαδήποτε περίπτωση η ταχύτητα τριβής και η θερμοκρασία υπολογίζονται πρώτες, στη συνέχεια υπολογίζεται το μήκος Obukhov.

Πρώτα το βάθος του στρώματος (Z_i) υπολογίζεται σε κάθε σημείο του πλέγματος. Υποθέτει κανείς ότι ισούται με το ύψος στο οποίο η δυνητική θερμοκρασία υπερβαίνει τη τιμή στο έδαφος κατά 2K. Το προφίλ της θερμοκρασίας αναλύεται από την κορυφή έως κάτω (top-down) για να καθορίσει το οριακό βάθος του στρώματος. Η top-down προσέγγιση μειώνει την επιρροή των ρηχών σταθερών στρωμάτων κοντά στο έδαφος. Επιπλέον, ένα ελάχιστο βάθος των 250 m θεωρείται για όλες τις ώρες. Το ύψος επιλέχθηκε να ταιριάζει με το ελάχιστο ύψος τυπικής ανάλυσης των μετεωρολογικών δεδομένων εισαγωγής.

Όταν η ρευστότητα της επιφάνειας είναι διαθέσιμη από το μετεωρολογικό μοντέλο, και εξαρτάται από της μεταβλητές στην έξοδο του μοντέλου, η ταχύτητα τριβής υπολογίζεται μέσα από τη διαβάθμιση του συντελεστή ανταλλαγής (E):

$$u_* = \left(\frac{Eu}{\rho} \right)^{0.5} \quad (5.1)$$

όπου το γινόμενο Eu ισούται με τη τάση ($E = \rho C_D u$ όπου C_D είναι ο συντελεστής αεροδυναμικής αντίστασης (drag coefficient), ή υπολογίζεται κατευθείαν από το διάνυσμα ροής ορμής (momentum fluxes) (F):

$$u_* = \left(\frac{|-F|}{\rho} \right)^{0.5} \quad (5.2)$$

Το διάνυσμα momentum fluxes ($N\ m^{-2}$) μετατρέπεται σε βαθμωτό πριν τον υπολογισμό της ταχύτητας τριβής. Η θερμοκρασία της τριβής υπολογίζεται πάντα από τη λογική ροή της θερμότητας (H):

$$T_* = -H(\rho C_p u_*)^{-1} \quad (5.3)$$

όπου: C_p είναι η σταθερά θερμότητας ($1005\ J\ kg^{-1}\ K^{-1}$) για ξηρό αέρα. Η ταχύτητα της κλίμακας της συναγωγής είναι τότε:

$$W_* = |g u_* T_* Z_i T^{-1}|^{\frac{1}{3}} \quad (5.4)$$

όπου: Z_i είναι το ύψος του οριακού στρώματος της συναγωγής. Σε αυτό το σημείο το μήκος Obukhov L υπολογίζεται από τις τιμές της τριβής για να είναι σε συνοχή με τα παραγόμενα πεδία ροής, έτσι ώστε:

$$\frac{z}{L} = Z_2 k g T_* (u_*^2 T_2)^{-1}, -2 \leq \frac{z}{L} \leq 10 \quad (5.5)$$

όπου: Z_2 υποδεικνύει το ύψος του δεύτερου επιπέδου του μοντέλου, υποθέτοντας ότι είναι το βάθος του στρώματος της επιφάνειας, k είναι η σταθερά Von Karman's (0.40), και g είναι η επιτάχυνση της βαρύτητας ($9.8\ m\ s^{-2}$).

5.3 Υπολογισμός της Θερμότητας και της ορμής της Ροής

Όταν δεν παρέχονται οι ροές από το μετεωρολογικό μοντέλο, μια τυπική κατάσταση ειδικά όταν χρησιμοποιούνται συγκεκριμένα αρχεία δεδομένων, z/L υπολογίζεται από το προφίλ του αέρα και της θερμοκρασίας. Το μετεωρολογικό βάθος χρησιμοποιείται αρχικά για τον υπολογισμό του Richardson Number:

$$R_b' = g\Delta\theta\Delta Z\left\{\theta_{12}\left[(\Delta u)^2 + (\Delta v)^2\right]\right\}^{-1} \quad (5.6)$$

όπου: Δ δείχνει μια κλίση ανάμεσα στα επίπεδα 1 και 2 και θ_{12} είναι το στρώμα της μέσης δυναμική θερμοκρασίας. Το R_b' προσαρμόζεται έτσι ώστε να εξηγεί εκείνα τα αρχεία μετεωρολογικών δεδομένων που έχουν πολύ τραχύ κάθετο διάστημα και οι μετεωρολογικές τιμές στην κορυφή του στρώματος της επιφάνειας (Z_2) παρεμβάλλονται από τα στρώματα των δεδομένων εισαγωγής (Z_d) σε πολύ μεγαλύτερα ύψη. Σε αυτές τις ειδικές περιπτώσεις υποτίθεται ότι:

$$R_b \approx R_b' \left(\frac{Z_2}{Z_d}\right)^2 \quad (5.7)$$

για την αντιστάθμιση της αύξησης του R_b' με το αυξανόμενο βάθος του στρώματος. Ο αριθμός Richards μπορεί να παρουσιαστεί ώστε να είναι ανάλογος με το τετράγωνο του γεωμετρικού μέσου ύψους ανάμεσα στο κάτω μέρος και στη κορυφή του στρώματος (Golder, 1972). Έπειτα η παράμετρος της σταθερότητας z/L , όπου L είναι το μήκος Obukhov, υπολογίζεται από το R_b . Αυτό γίνεται χρησιμοποιώντας εμπειρικές φόρμουλες παρεμβολής που ταιριάζουν με το προφίλ συναρτήσεων Monin-Obukhov που παρέχονται για ένα ύψος στρώματος επιφάνειας 75 m (παρόμοιες εξισώσεις έχουν αποδειχθεί από τον Launiainen (1995) και τους Abdella και McFarlane (1996)):

$$\frac{z}{L} = R_b \left(\frac{s^2}{t} - 0.50\right), R_b \leq 0 \quad (5.8)$$

$$\frac{z}{L} = \left[-t + 2s\beta R_b + (t^2 - 4st\beta R_b + 4s^2\beta R_b)^{\frac{1}{2}}\right] [2\beta(1 - \beta R_b)]^{-1}, 0 \leq R_b < 0.08 \quad (5.9)$$

$$\frac{z}{L} = (0.005s + 41.2)R_b^2 + (1.18s - 1.5v - 1.37)R_b, R_b \geq 0.08 \quad (5.10)$$

και όπου:

$$s = \ln\left(\frac{z}{Z_0} + 1.0\right) \quad (5.11)$$

$$t = \ln\left(\frac{z}{Z_h} + 1.0\right) \quad (5.12)$$

$$v = \ln\left(\frac{Z_0}{Z_h}\right) \quad (5.13)$$

με Z_h να είναι το μήκος της τραχύτητας για τη θερμότητα, Z_0 το μήκος της τραχύτητας για τριβή και $Z_0/Z_h=10$, η παράμετρος $\beta=5$. Η εξίσωση (5.9) είναι μια ακριβής λύση για ένα λογαριθμικό-γραμμικό προφίλ (Choudhury, 1986). Η ταχύτητα τριβής και η θερμοκρασία είναι ίσες με:

$$u_* = kZ_2 \Delta u (\varphi_m \Delta Z)^{-1} \quad (5.14)$$

$$T_* = kZ_2 \Delta \theta (\varphi_h \Delta Z)^{-1} \quad (5.15)$$

όπου k είναι η σταθερά von Karman ($k \approx 0.4$) και τα κανονικοποιημένα προφίλ (φ), για τη θερμότητα (h) και την ορμή (m) αποδείχθηκαν από τους Beljaars και Holtslag (1991), για ένα σταθερό στρώμα επιφάνειας ($0 \leq \frac{z}{L} \leq 10$) ότι δίνονται από τις σχέσεις:

$$\varphi_m = 1 + \frac{z}{L} \left[a + b \exp\left(-d \frac{z}{L}\right) \left(1 - d \frac{z}{L} + c\right) \right] \quad (5.16)$$

$$\varphi_h = \text{Pr} \left\{ 1 + \frac{z}{L} \left[a \left(1 + ab \frac{z}{L}\right)^{\frac{1}{2}} + b \exp\left(-d \frac{z}{L}\right) \left(1 - d \frac{z}{L} + c\right) \right] \right\} \quad (5.17)$$

όπου: Pr είναι ο αριθμός Prandtl (0.923) κατά τη διάρκεια ουδέτερων συνθηκών, και $a = 1$, $b = 2/3$, $c = 5$ και $d = 0.35$.

Για ένα ασταθές στρώμα επιφάνειας ($-2 \leq \frac{z}{L} \leq 0$) οι Betchov και Yaglom (1971), και Kadar και Perepelkin (1989) πρότείνουν:

$$\varphi_m = \left\{ \frac{\left[\left[1 + 0.625 \left(\frac{z}{L} \right)^2 \right] \right]^{\frac{1}{3}}}{\left(1 - 7.5 \frac{z}{L} \right)} \right\} \quad (5.18)$$

και

$$\varphi_h = 0.64 \left\{ \frac{\left[3 - 2.5 \frac{z}{L} \right]}{\left[1 - 10 \frac{z}{L} + 50 \left(\frac{z}{L} \right)^2 \right]} \right\}^{\frac{1}{3}} \quad (5.19)$$

5.4 Κάθετη Ανάμιξης Συντελεστές

Η κάθετη ανάμιξη παραγόντων μόλυνσης υποτίθεται ότι ακολουθεί τους συντελεστές για τη θερμότητα. Μέσα στο οριακό στρώμα η (Boundary Layer, BL), οι συντελεστές κάθετης ανάμιξης υπολογίζονται ακολούθως από τους Troen και Mahrt (1986) και Holtslag και Boville (1993):

$$K_h = k w_h z \left(1 - \frac{z}{Z_i} \right)^2 \quad (5.20)$$

$$w_h = u_* \varphi_h^{-1}, \frac{z}{Z_i} \leq 0.1 \quad (5.21)$$

$$w_h = w_m \text{Pr}^{-1}, 0.1 < \frac{z}{Z_i} < 1 \quad (5.22)$$

Ο αριθμός Prandtl, με φ_h και φ_m που υπολογίζονται στο $z/Z_i=0.1$, δίνεται από:

$$\text{Pr} = \left(\frac{\varphi_h}{\varphi_m} \right) + 7.2k \left(\frac{z}{Z_i} \right) \left(\frac{W_*}{w_m} \right) \quad (5.23)$$

όπου

$$w_m = \left(u_*^3 + 0.6W_*^3 \right)^{\frac{1}{3}} \quad (5.24)$$

και $W_* = 0$ για ουδέτερες και σταθερές συνθήκες.

Αφού το προφίλ K υπολογιστεί, μία μοναδική μέση τιμή για ολόκληρο το BL υπολογίζεται από το προφίλ και αυτή η τιμή αντικαθιστά όλες τις τιμές μέσα στο BL. Κάθε οριζόντιο σημείο του πλέγματος θα έχει μια διαφορετική τιμή.

Ακολουθώντας τους Beljaars και Betts (1993), η μίξη μέσα από την αντιστροφή του στρώματος στο $z = Z_i$ κατά τη διάρκεια των συνθηκών συναγωγής ($W_* > 0$) υπολογίζεται βασιζόμενη στις παραμέτρους ροής της επιφάνειας και στην ισχύ της αντιστροφής, όπου:

$$K_h = C_s H \left(\rho C_p \frac{\partial \theta}{\partial z} \right)^{-1} \quad (5.25)$$

ή

$$K_h = -C_s u_* T_* \left(\frac{\partial \theta}{\partial z} \right)^{-1} \quad (5.26)$$

και $C_s = 0.4$.

Κατά τη διάρκεια σταθερών συνθηκών η ανάμιξη υπολογίζεται όπως περιγράφεται παρακάτω. Πάνω από το BL, η ανάμιξη των παραγόντων μόλυνσης που έχουν απομείνει στην ατμόσφαιρα ορίζεται από τη κάθετη διάχυση για τη θερμότητα χρησιμοποιώντας τη θεωρία του μήκους ανάμιξης (mixing length):

$$K_h = l^2 \left| \frac{\partial V}{\partial z} \right| \varphi_h \left(\frac{l}{L_0} \right)^{-1} \quad (5.27)$$

όπου: l είναι μία σταθερά Blackadar – ο τύπος mixing length σε μέτρα (m) και δίνεται από τη σχέση:

$$l^{-1} = kz^{-1} + 150^{-1} \quad (5.28)$$

και L_0 είναι το τοπικό μήκος Obukhov. Η σταθερή συνάρτηση φ_h δίνεται από την εξίσωση (5.17). αλλά με z/L να ισούται με το λόγο του mixing length:

$$\frac{l}{L_0} = 1.0893 Ri_b \quad (5.29)$$

κατά τη διάρκεια των ουδέτερων συνθηκών ($0 \leq Ri_b \leq 0.001$) και διαφορετικά ισχύει:

$$\frac{l}{L_0} = a_1 + Ri_b \{ a_2 + Ri_b [a_3 + Ri_b (a_4 + a_5 Ri_b)] \} \quad (5.30)$$

με $a_1 = 0.2828 \times 10^{-3}$, $a_2 = 0.8049$, $a_3 = 1.6563$, $a_4 = 0.5090 \times 10^{-2}$ και $a_5 = -1.0063 \times 10^{-3}$.

5.5 Συντελεστές Οριζόντιας Ανάμιξης

Η υποπλεγματική κλίμακα συντελεστών οριζόντιας ανάμιξης υπολογίζεται από τη παραμόρφωση της ταχύτητας:

$$K_{hor} = 2^{-0.5} (cX)^2 \left[\left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right]^{0.5} \quad (5.31)$$

όπου X είναι το μέγεθος του πλέγματος των μετεωρολογικών δεδομένων και $c = 0.14$. Η κλίμακα διασποράς του πλέγματος προσομοιώνεται από τα σωματίδια και τα αέρια οριζόντιας εξάπλωσης σε διαφορετικές συνθήκες ανέμου.

5.6 Διάχυση Σωματιδίων

Και οι δύο εξισώσεις διασποράς, τόσο του αερίου όσο και του σωματιδίου, είναι διαμορφωμένες σε σχέση με την ταχύτητα των στοιχείων της διαταραχής. Αυτή η ταχύτητα είναι μία συνάρτηση της διαταραχής της διάχυσης. Στην εφαρμογή του μοντέλου, η διεργασία της διασποράς αντιπροσωπεύεται με την προσθήκη ενός στοιχείου διαταραχής στη κεντρική ταχύτητα που αποκτάται από τα μετεωρολογικά δεδομένα. Το μοντέλο σωματιδίου μπορεί να εφαρμοστεί είτε στη κάθετη, είτε στην οριζόντια είτε και στις δύο κατευθύνσεις. Η συγκεκριμένη προσέγγιση που χρησιμοποιήθηκε ακολουθεί αυτή που περιγράφηκε από τον Fay (1995).

Μετά τον υπολογισμό της νέας θέσης σε μία βαθμίδα του χρόνου εξαιτίας της ελάχιστης οριζόντιας μεταφοράς του αέρα, ένα στοιχείο διαταραχής προστίθεται στις μέσες θέσεις σωματιδίων (X, Z):

$$X_{final}(t + \Delta t) = X_{mean}(t + \Delta t) + U'(t + \Delta t)\Delta t G \quad (5.32)$$

$$Z_{final}(t + \Delta t) = Z_{mean}(t + \Delta t) + W'(t + \Delta t)\Delta t Z_{top}^{-1} \quad (5.33)$$

όπου η οριζόντιες και κάθετες θέσεις δίνονται στο πλέγμα σε μονάδες σίγμα αντιστοίχως, ενώ η ταχύτητα των στοιχείων διαταραχής είναι σε $m\ s^{-1}$. G και Z_{top} είναι οι απαιτούμενοι παράγοντες μετατροπής μονάδων. Η συνεισφορά της διαταραχής των στοιχείων αέρα (U -οριζόντια, W -κάθετη) προστίθεται στη «μέση» θέση (μόνο εξαιτίας της ελάχιστης ροής) για να δώσει μια τελική θέση από την οποία η οριζόντια μεταφορά του επόμενου χρονικού βήματος υπολογίζεται. Πλήρης αντανάκλαση θεωρείται για τα σωματίδια θεωρείται τα οποία τέμνουν το έδαφος ή το μοντέλο. Η ολοκλήρωση του χρονικού βήματος υπολογίζεται από την ανάγκη αλλαγής στη κάθετη διάσταση.

$$\Delta z_p < 0.5\Delta z \quad (5.34)$$

όπου: Δz το κάθετο διάστημα πλέγματος, και ως εκ τούτου:

$$\Delta t = \frac{(\Delta z)^2}{(8\sigma_w^2 T_{Lw})} \quad (5.35)$$

Η διακύμανση της κάθετης ταχύτητας, σ_w^2 , και η λανγκρατζιανή χρονική κλίμακα, T_{Lw} , αναφέρονται με περισσότερες λεπτομέρειες παρακάτω.

Η οριζόντια ταχύτητα των στοιχείων διαταραχής στο τρέχων χρόνο $U'(t + \Delta t)$ υπολογίζεται από τη ταχύτητα των στοιχείων διαταραχής στο προηγούμενο χρόνο $U'(t)$. Ένας συντελεστής αυτοσυσχέτισης (R) εξαρτάται από το χρονικό βήμα, τη

λανγκρατζιανή χρονική βαθμίδα και από ένα τυχαίο στοιχείο που παράγεται από ένα υπολογιστή (' '). Άρα:

$$U'(t + \Delta t) = R(\Delta t)U'(t) + U''(1 - R(\Delta t))^0.5 \quad (5.36)$$

και για τη κάθετη ταχύτητα διαταραχής:

$$\frac{W'}{\sigma_w(t + \Delta t)} = R(\Delta t) \left(\frac{W'(t)}{\sigma_w(t)} \right) + \left(\frac{W''(t)}{\sigma_w(t)} \right) (1 - R(\Delta t))^0.5 + T_{Lw} (1 - R(\Delta t)) \frac{\partial \sigma_w(t)}{\partial z} \quad (5.37)$$

και όπως ορίζεται από τον Wilson (1983):

$$\sigma_w(t + \Delta t) = \sigma_w(t) + W'(t) \Delta t \frac{\partial \sigma_w(t)}{\partial z} \quad (5.38)$$

Η περίοδος διακύμανσης της ταχύτητας κλίσης στην κάθετη ταχύτητα διαταραχής εφαρμόζεται για να εμποδίσει τη συσσώρευση σωματιδίων στις περιοχές χαμηλής διαταραχής (Legg και Raupach, 1982). Η σπουδαιότητα αυτής της τελευταίας περιόδου είναι κάπως μειωμένη λόγω του μέσου όρου του προφίλ διάχυσης εντός του BL. Για τον υπολογισμό της διαταραχής, θεωρείται μια εκθετική ταχύτητα αυτοσυσχέτισης, της μορφής:

$$R(\Delta t) = \exp\left(-\frac{\Delta t}{T_{Li}}\right) \quad (5.39)$$

έτσι ώστε $T_{Li} = [T_{Lw} \eta' T_{Lu}]$, και όπου T_{Lw} (vertical)=100 s και T_{Lu} (horizontal)= 10800 s (=1/f) θεωρούνται ότι είναι σταθεροί παράγοντες για ευκολία. Αυτές οι τιμές καταλήγουν σε ένα τυχαίο αποτέλεσμα ($R = 0$) κάθετης διάχυσης για τις περισσότερες χρονικές βαθμίδες. Το Γκαουσιανό τυχαίο στοιχείο U'' ή W'' προέρχεται από τον υπολογιστή έτσι ώστε για κάθε στοιχείο να ισχύει:

$$U''(\eta' W'') = \sigma_i \lambda \quad (5.40)$$

όπου λ είναι ένας Γκαουσιανός τυχαίος αριθμός με μέση τιμή το 0 και τυπική απόκλιση το 1. Η τυπική απόκλιση των ταχυτήτων διαταραχής υπολογίζεται από προηγούμενες σχέσεις για κάθετη διάχυση (K_h - εξισώσεις 4.20, 4.26, 4.27) και οριζόντια διάχυση (K_{hor} -εξίσωση 4.31), με:

$$\sigma_i = \left(\frac{K_i}{T_{Li}} \right)^0.5 \quad (5.41)$$

όπου το i αντιπροσωπεύει το κατάλληλο στοιχείο κατεύθυνσης (u ή w).

5.7 Διακυμάνσεις Ταχύτητας Διαταραχής

Η διακύμανση της ταχύτητας διαταραχής μπορεί επίσης να αποκτηθεί απευθείας από τους σταθερούς παράγοντες αντί από τα ενδιάμεσα βήματα υπολογισμού ενός συντελεστή διάχυσης (εξίσωση 5.41). Αυτό επιτρέπει τη χρήση του μετεωρολογικού μοντέλου ΤΚΕ (Turbulent Kinetic Energy field) εάν αυτό είναι διαθέσιμο. Οι διακυμάνσεις της ταχύτητας του οριακού στρώματος ορίζονται ως μία συνάρτηση των u^* , w^* και Z_i κατά τους Kantha και Clayson (2000). Η μέθοδος αυτή δε χρησιμοποιεί τη διάχυση και ως εκ τούτου δεν απαιτούνται υποθέσεις σχετικά με τις κλίμακες διαταραχής. Τόσο η ταχύτητα διαταραχής όσο και η προσέγγιση διάχυσης μπορούν να επιλεγούν από προσομοίωση. Στο σταθερό ή ουδέτερο οριακό στρώμα ισχύει:

$$w'^2 = 3.0u_*^2 \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (5.42)$$

$$u'^2 = 4.0u_*^2 \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (5.43)$$

$$v'^2 = 4.5u_*^2 \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (5.44)$$

Στο σταθερό ή ουδέτερο στρώμα επιφάνειας:

$$w'^2 = 3.0u_*^2 \quad (5.45)$$

$$u'^2 = 4.0u_*^2 \quad (5.46)$$

$$v'^2 = 4.5u_*^2 \quad (5.47)$$

Εάν το ΤΚΕ πεδίο διατίθεται, τότε η διακυμάνσεις της ταχύτητας μπορούν να υπολογιστούν από την ακόλουθη σχέση:

$$E = 0.5(u'^2 + v'^2 + w'^2) \quad (5.48)$$

οι εξισώσεις (4.41) έως (4.47) έχουν ως αποτέλεσμα τις ακόλουθες σταθερές σχέσεις στο ΤΚΕ:

$$w'^2 = 0.52E \quad (5.49)$$

$$u'^2 = 0.70E \quad (5.50)$$

$$v'^2 = 0.78E \quad (5.51)$$

Στο ασταθές οριακό στρώμα, ακολουθώντας ξανά τους Kantha και Clayson (2000) προκύπτει:

$$w'^2 = w_*^2 \left(\frac{z}{z_i} \right)^{\frac{2}{3}} \left(1 - \frac{z}{z_i} \right)^{\frac{2}{3}} \left(1 + 0.5R^{\frac{2}{3}} \right) \quad (5.52)$$

όπου: R είναι η αναλογία της ροής θερμότητας κατά την αναστροφή της ροής στην επιφάνεια. Θεωρείται ότι είναι σταθερό και περίπου ίσο με 2. Κατά τον Garratt (1992) οι οριζόντιες διακυμάνσεις είναι απλώς μια σταθερή συνάρτηση της διαβάθμισης κλίμακας της ταχύτητας συναγωγής:

$$u'^2 = v'^2 = 0.36w_*'^2 \quad (5.53)$$

Στο ασταθές στρώμα επιφάνειας:

$$w'^2 = 1.74u_*'^2 \left(1 - 3\frac{z}{L} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (5.54)$$

$$u'^2 = v'^2 = 0.36w_*'^2 \quad (5.55)$$

Εάν το ΤΚΕ πεδίο είναι διαθέσιμο τότε από τις σχέσεις (5.48) και (5.52) έως (5.55), προκύπτει:

$$w'^2 = \frac{2E}{(1 + K_x)} \quad (5.56)$$

$$u'^2 = v'^2 = 0.5K_x w'^2 \quad (5.57)$$

και ο K_x για το ασταθές στρώμα επιφάνειας, ορίζεται ως:

$$K_x = 0.41 \frac{\left(\frac{w_*'^2}{u_*'^2} \right)}{\left(1 - 3\frac{z}{L} \right)^{\frac{2}{3}}} \quad (5.58)$$

για το ασταθές οριακό στρώμα:

$$K_x = \frac{0.72}{\left[\left(\frac{z}{z_i} \right)^{\frac{2}{3}} \left(1 - \frac{z}{z_i} \right)^{\frac{2}{3}} \left(1 + 0.5R^{\frac{2}{3}} \right) \right]} \quad (5.59)$$

Σε αντίθεση με τη προσέγγιση της διάχυσης (εξίσωση-4.20), η κάθετη διακύμανση της ταχύτητας δεν αναλογεί σε μία μόνο τιμή του οριακού στρώματος. Η διαταραχή ποικίλει με το ύψος σύμφωνα με τις εξισώσεις (4.42)-(4.57). Οι ταχύτητες διαταραχής που δεν αναλογούν είναι πολύ πιο ρεαλιστικές για προσομοιώσεις διασποράς μικρής εμβέλειας. Πρέπει να σημειωθεί ότι η οριζόντια διαταραχή της ταχύτητας αντικαθιστά τη παραμόρφωση που βασίζεται στη διάχυση (4.31). Αν το ΤΚΕ πεδίο διατίθεται, το βάθος του μικτού στρώματος μπορεί να υπολογιστεί από το ΤΚΕ προφίλ αντί του προφίλ της θερμοκρασίας. Σε αυτή τη περίπτωση το βάθος μικτού στρώματος υποτίθεται ότι είναι το ύψος πάνω από το έδαφος στο οποίο το ΤΚΕ πέφτει περισσότερο από το μισό της προηγούμενης τιμής.

5.8 Διασπορά Ποσότητας Ρύπου στην Ατμόσφαιρα (Puff Dispersion)

Η διασπορά αερίου επεξεργάζεται σε δύο χώρους, όταν τα αέριο είναι μικρότερο από το μέγεθος του πλέγματος του μετεωρολογικού μοντέλου και όταν είναι μεγαλύτερο. Στη τελευταία περίπτωση θεωρείται ότι το μετεωρολογικό μοντέλο είναι ικανό να διαλύσει κινήσεις διαταραχής. Τα Γκαουσιανά και τα "top-hat" (ομοιόμορφη κατανομή στο εσωτερικό και μηδέν απ' έξω) αέρια επεξεργάζονται πανομοιότυπα.

Όταν τα αέρια έχουν διαστάσεις μικρότερες από το χώρο του μετεωρολογικού πλέγματος, ο ρυθμός κάθετης ανάπτυξης του αερίου θεωρείται ότι είναι ίσος με:

$$\frac{d\sigma_z^2}{dt} = 2\sigma_w^2 T_L \quad (5.60)$$

και ο ρυθμός οριζόντιας ανάπτυξης:

$$\frac{d\sigma_h}{dt} = \sqrt{2}\sigma_u \quad (5.61)$$

Οι διακυμάνσεις της ταχύτητας διαταραχής υπολογίζονται. Επιπρόσθετες διακυμάνσεις στους ρυθμούς ανάπτυξης επιτυγχάνονται μέσα από τη διαδικασία "puff-splitting" (υπομοντέλα του Hysplit τα οποία διαχωρίζουν τη ποσότητα του ρύπου στην ατμόσφαιρα σε κομμάτια όταν απομακρυνθεί από τη πηγή του) καθώς το αέριο μεγαλώνει σε διαφορετικές μικτές περιοχές.

Στη κάθετη κατεύθυνση, μια διανομή αερίου υποτίθεται ότι είναι πάντα "top-hat". Η άκρη από ένα "top-hat" θεωρείται ότι είναι μια τιμή ίση με $1.54 \sigma_z$. Σε μια Γκαουσιανή κατανομή η τιμή αυτή αντιστοιχεί στο σημείο όπου οι περιοχές πάνω και κάτω από την αντίστοιχη τεταγμένη είναι ίσες. Οι κάθετοι ρυθμοί ανάπτυξης υπολογίζονται από τη κορυφή (t) προς το κάτω μέρος (b) του αερίου ($\pm 1.54\sigma$) έτσι ώστε:

$$\sigma_{zi}^2(t + \Delta t) = \sigma_{zi}^2(t) + 2\sigma_{wi}^2(t) T_L \Delta t \quad (5.62)$$

και

$$\sigma_{zb}^2(t + \Delta t) = \sigma_z^2(t) + 2\sigma_{wb}^2(t)\Gamma_L \Delta t \quad (5.63)$$

Η τελική κάθετη σταθερή παρέκκλιση του αερίου είναι απλά η μέση τιμή των δύο:

$$\sigma_z(t + \Delta t) = 0.5[\sigma_{zt}(t + \Delta t) + \sigma_{zb}(t + \Delta t)] \quad (5.64)$$

Σε κάθε χρονικό βήμα, για αέρια κοντά στα όρια του χώρου του μοντέλου, η σ_z περικόπτεται ώστε ένα αέριο να μη μπορεί να μεγαλώσει κάτω από την επιφάνεια του εδάφους και ούτε στο model-top. Η οριζόντια σταθερή παρέκκλιση του αερίου:

$$\sigma_h(t + \Delta t) = \sigma_h(t) + \sqrt{2}\sigma_u(t)\Delta t \quad (5.65)$$

υπολογίζεται από το στοιχείο της ταχύτητας διαταραχής στην κεντρική θέση του αερίου.

Όταν ένα αέριο επεκτείνεται για να καλύψει διάφορα σημεία του μετεωρολογικού πλέγματος, ένα "top - hat" αέριο χωρίζεται σε τέσσερα αέρια, που το καθένα αποτελεί το 25% της μάζας. Όταν $1.54\sigma_h > L_h$ το αέριο βρίσκεται στις θέσεις $P(x \pm 0.5\sigma_h, y \pm 0.5\sigma_h)$ με L_h να εκφράζει το μέγεθος του πλέγματος του μετεωρολογικού μοντέλου. Ένα μεγάλο Γκαουσιανό αέριο χωρίζεται σε πέντε μικρότερα αέρια όταν $3.0\sigma_h > L_h$, στις ίδιες θέσεις όπως το "top - hat" και με ένα επιπρόσθετο αέριο στη κεντρική θέση. Το κεντρικό αέριο λαμβάνει το 60% της μάζας ενώ τα τέσσερα αέρια που είναι έξω παίρνουν 10% το καθένα. Τα αέρια χωρίζονται κάθετα σε "n" στοιχεία όταν $\pm 1.54\sigma_z > 2\Delta Z$, όπου ΔZ είναι το μέγεθος του κάθετου πλέγματος και "n" είναι ο αριθμός των ΔZ στρωμάτων εντός του $\pm 1.54\sigma_z$. Κάθε νέο αέριο έχει μία θέση, $P_n(Z)$, στο κεντρικό ύψος των "n" στρωμάτων, το καθένα βάθους $\pm 1.54 \frac{\sigma_z}{n}$.

Ο διαχωρισμός του αερίου μπορεί γρήγορα να υπερβεί τη διάσταση του χώρου διάταξης. Υπάρχουν τρεις μηχανισμοί για να απομακρύνουν τα υπέρμετρα αέρια.

1. Κάθε ώρα, τα αέρια ταξινομούνται χωρικά έτσι ώστε τα αέρια που είναι δίπλα το ένα στο άλλο να είναι σε συνεχόμενες τοποθεσίες διάταξης. Τα αέρια των οποίων τα κέντρα είναι μεταξύ $1.0\sigma_h$ και $0.5\sigma_z$, και το σ_h είναι εντός του 0.1 του κάθ' ενός, συγχωνεύονται μαζί. Οι νέοι συντελεστές διασποράς των αερίων είναι ένα σταθμισμένο άθροισμα της μάζας των συμβαλλόμενων ατομικών αερίων.
2. Κάθε έξι ώρες όλα τα αέρια ταξινομούνται σύμφωνα με τη μάζα τους. Εκείνα τα αέρια των οποίων η συσσωρευμένη μάζα είναι μικρότερη από το 10% της συνολικής μάζας ταξινομούνται ξανά σύμφωνα με τη θέση και συγχωνεύονται με λιγότερο περιοριστικά κριτήρια. Για παράδειγμα τα κέντρα να είναι εντός των τιμών $1.75\sigma_h$ και $2.0\sigma_z$, επίσης σ_h εντός του 0.20.

Επιπρόσθετα, τα όρια μπορούν να καθοριστούν ως προς τη μεγαλύτερη ηλικία ενός ρύπου και τη μικρότερη μάζα που το κάθε αέριο επιτρέπεται να έχει. Αυτά

τα όρια μπορεί να τροποποιηθούν σύμφωνα με το πρόβλημα που κάθε φορά κάποιος διαχειρίζεται.

5.9 Υπολογισμός Συγκέντρωσης Αέρα

Οι κατανομές του αερίου μπορούν να καθοριστούν είτε στις κάθετες είτε στις οριζόντιες κατευθύνσεις ή και μόνο στην οριζόντια κατεύθυνση. Για κάθε αέριο, οι συγκεντρώσεις αθροίζονται σε κάθε χρονικό βήμα σε όλα τα σημεία του πλέγματος που εμπίπτουν μέσα στην ορισμένη έκταση του αερίου για "top – hat" κατανομές ($\pm 1.54\sigma_i$), όπου i υποδεικνύει z ή h , ή Γκαουσιανή κατανομή ($\pm 3.0\sigma_h$). Οι κάθετες κατανομές ορίζονται πάντα ως "top – hat" ενώ οι οριζόντιες μπορεί και όχι. Η συνεισφορά της συγκέντρωσης κάθε αερίου μάζας m σε ένα σημείο του πλέγματος, για ένα "top – hat" αέριο, υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\Delta c = m(\pi r^2 \Delta z)^{-1} \quad (5.66)$$

όπου: η κάθετη έκταση $\Delta z = 3.08\sigma_z$ και η οριζόντια ακτίνα $r = 1.54\sigma_h$. Όλοι οι κόμβοι του πλέγματος μέσα στην έκταση του αερίου δέχονται το ίδιο Δc . Η συνεισφορά της συγκέντρωσης ενός Γκαουσιανού αερίου ισούται με:

$$\Delta c = m(2\pi\sigma_h^2 \Delta z)^{-1} \exp\left(-0.5 \frac{x^2}{\sigma_h^2}\right) \quad (5.67)$$

όπου x είναι η απόσταση από το κέντρο του αερίου έως το κόμβο του πλέγματος.

Οι υπολογισμοί των σωματιδίων μπορούν να γίνουν είτε στη κάθετη κατεύθυνση είτε και στις δύο κατευθύνσεις, κάθετη και οριζόντια. Οι υπολογισμοί με μία κάθετη κατανομή σωματιδίου μπορεί να είναι είτε top – hat ή Γκαουσιανή οριζόντια κατανομή. Παρόλα αυτά, οι υπολογισμοί του σωματιδίου αθροίζονται σε ένα κελί του πλέγματος και όχι σε ένα σημείο του. Ένα κελί ορίζεται στο κέντρο του κόμβου και το εμβαδόν του αντιστοιχεί στη μισή απόσταση των γειτονικών κόμβων. Η συνεισφορά της συγκέντρωσης σε ένα κελί από ένα μόνο σωματίδιο μάζας m καθορίζεται από ένα τρισδιάστατο σωματίδιο:

$$\Delta c = m(\Delta x \Delta y \Delta z)^{-1} \quad (5.68)$$

όπου: Δx , Δy , Δz είναι οι διαστάσεις του κελιού του πλέγματος. Για ένα σωματίδιο με οριζόντια "top – hat" κατανομή η συγκέντρωση είναι ίδια με αυτή της εξίσωσης (5.66), αλλά με το Δz να εκφράζει το ύψος του κελιού του πλέγματος. Εάν η οριζόντια κατανομή είναι Γκαουσιανή τότε η συγκέντρωση είναι ίδια όπως στην εξίσωση (5.67), και σε αυτή τη περίπτωση το Δz είναι ορισμένο ως το ύψος του κελιού του πλέγματος. Οι συγκεντρώσεις αυτές προστίθενται σε κάθε κελί του πλέγματος ή κόμβο, σε κάθε χρονικό βήμα οριζόντιας μεταφοράς για όλα τα σωματίδια ή αέρια που τέμνουν εκείνο το σημείο. Η τελική μέση συγκέντρωση είναι το αυξητικό άθροισμα διαιρεμένο από τον αριθμό των χρονικών βημάτων στη μέση περίοδο συγκέντρωσης. Για την αποφυγή της περίπτωσης εκείνης όπου σωματίδια ή αέρια διαφεύγουν ενός σημείου του πλέγματος λόγω μεγάλων χρονικών βημάτων

οριζόντιας μεταφοράς, το χρονικό βήμα υπολογίζεται από την (4.20) χρησιμοποιώντας τη συγκέντρωση του πλεγματού χώρου αντί του μετεωρολογικού πλεγματού χώρου όταν το μοντέλο χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό συγκεντρώσεων αέρα παρά για τον υπολογισμό τροχιών και μόνο.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6

ΕΝΑΠΟΘΕΣΗ

6.1 Εισαγωγή

Υπάρχουν τρεις διαφορετικοί μηχανισμοί απομάκρυνσης, διαθέσιμοι: Ξηρή εναπόθεση, υγρή εναπόθεση (wet depletion) και ραδιενεργή διάσπαση. Η ξηρή εναπόθεση ορίζεται ρητά είτε ως η ταχύτητα εναπόθεσης ή για σωματίδια υπολογίζεται ως το ισοδύναμο της ταχύτητας της βαρυτικής καθίζησης, ή υπολογίζεται χρησιμοποιώντας τη μέθοδο αντίστασης και πληροφορίες σχετικά με τη φύση της επιφάνειας. Ο υπολογισμός της ταχύτητας καθίζησης του σωματιδίου απαιτεί τη διάμετρο και τη πυκνότητα του σωματιδίου. Η υγρή απομάκρυνση μπορεί να οριστεί για διαλυτά αέρια με τον προσδιορισμό της σταθεράς του νόμου του Henry. Η αέρια υγρή απομάκρυνση συμβαίνει μόνο για το κλάσμα του ρύπου κάτω από την επιφάνεια νέφους. Η σωματιδιακή υγρή αφαίρεση ορίζεται από μία σχέση σάρωσης μέσα στο νέφος και από ένα ακριβή συντελεστή σάρωσης (s^{-1}) για ρύπους κάτω από την επιφάνεια νέφους.

Για υπολογιστική απλούστευση, η συνολική εναπόθεση και από τις δύο διαδικασίες, ξηρής και υγρής απομάκρυνσης, εκφράζεται με σταθερούς όρους στο χρόνο. Η σταθερά χρόνου μπορεί να προστεθεί και ως εκ τούτου η συνολική εναπόθεση σε ένα χρονικό βήμα γίνεται:

$$D_{wet+dry} = m \{1 - \exp[-\Delta t(\beta_{dry} + \beta_{gas} + \beta_{inc} + \beta_{bel})]\} \quad (6.1)$$

όπου: m είναι η μάζα του ρύπου είτε του σωματιδίου είτε του αερίου. Η μάζα ρύπου μειώνεται με την ποσότητα εναπόθεσης. Καθεμία από αυτές τις χρονικές σταθερές, για τη ξηρή εναπόθεση (β_{dry}), υγρή απομάκρυνση για αέρια (β_{gas}), για την υγρή απομάκρυνση των σωματιδίων μέσα στο νέφος (β_{inc}), υγρή απομάκρυνση των σωματιδίων κάτω από το νέφος (β_{bel}).

Επιπρόσθετα, με την επιλογή της απομάκρυνσης της μάζας για τη ξηρή εναπόθεση μια προσέγγιση βασισμένη στην πιθανότητα είναι επίσης διαθέσιμη. Σε αυτή τη μέθοδο κάθε σωματίδιο που βρίσκεται μέσα στο στρώμα της εναπόθεσης μπορεί να κολλήσει στην επιφάνεια και να χάσει όλη τη μάζα του. Δίνεται στο σωματίδιο ένας τυχαίος αριθμός (0-1) σε κάθε χρονικό βήμα, και αν ο αριθμός είναι μικρότερος από $\Delta t\beta_{dry}$ το σωματίδιο θα εναποτεθεί.

6.2 Βαρυτική Καθίζηση (Gravitational Settling)

Η καθίζηση σωματιδίου μπορεί να υπολογιστεί ακολουθώντας τον Van der Hoven (1968), όπου η ταχύτητα καθίζησης (V_g) υπολογίζεται για ένα σφαιρικό σωματίδιο από τη διάμετρό του (d_p), τη πυκνότητα του αέρα (ρ) και τη πυκνότητά του (ρ_g):

$$V_g = d_p^2 g (\rho_g - \rho) (18\mu)^{-1} \quad (6.2)$$

όπου: μ είναι το δυναμικό ιξώδες του αέρα ($0.01789 \text{ g}^{-1} \text{ s}^{-1}$).

Έπειτα η ταχύτητα καθίζησης προσαρμόζεται σε μια διόρθωση ολίσθησης (C_c) για μικρά σωματίδια και σε ένα δυναμικό συντελεστή μορφής (α) που πρέπει να υπολογιστεί για τα μη σφαιρικά σωματίδια. Έτσι η τελική ταχύτητα καθίζησης γίνεται:

$$V_s = V_g C_c \alpha^{-1} \quad (6.3)$$

ο α μπορεί να ποικίλλει μεταξύ των αριθμών 1.0 έως 2.0 και η διόρθωση ολίσθησης Cunningham δίνεται από:

$$C_c = 1 + 2 \left(\frac{\Lambda}{d} \right) \left\{ 1.26 + 0.4 \exp \left[-1.1 \frac{d}{(2\Lambda)} \right] \right\} \quad (6.4)$$

Η μοριακή μέση ελεύθερη διαδρομή Λ σε συνθήκες περιβάλλοντος προσεγγίζεται από τη τιμή Λ_{stp} σε STP ($6.53 \times 10^{-8} \text{ m}$) μέσα από τη σχέση:

$$\Lambda = \Lambda_{stp} \left(\frac{\rho_{stp}}{\rho} \right) \quad (6.5)$$

Η ταχύτητα καθίζησης εφαρμόζεται στην κάθετη θέση ρύπου σε κάθε χρονικό βήμα για να επιτρέψει τη σταδιακή βύθιση των σωματιδίων και των αερίων.

6.3 Ρητή Ξηρή Εναπόθεση

Η ξηρή απομάκρυνση υπολογίζεται όταν η βάση του αερίου ή η κεντρική θέση του σωματιδίου είναι μέσα στο στρώμα της επιφάνειας, που συνήθως ορίζεται εσωτερικά στο μοντέλο ως το δεύτερο επίπεδο μετεωρολογικών δεδομένων. Τότε η μάζα εναποτίθεται από τη ξηρή απομάκρυνση:

$$D_{dry} = V_g C \quad (6.6)$$

μπορεί να υπολογιστεί θεωρώντας μια ομοιόμορφη κάθετης συγκέντρωσης κατανομή στο στρώμα εναπόθεσης. Αυτό συνεπάγεται τον υπολογισμό αερίου, επειδή μια "top-hat" κατανομή θεωρείται στη κάθετη κατεύθυνση, και το βάθος του στρώματος

ρύπου, ΔZ_p , ισούται με $\pm 1.54\sigma_z$. Στον υπολογισμό σωματιδίου το ΔZ_p θεωρείται ως το βάθος του στρώματος επιφάνειας. Η ταχύτητα εναπόθεσης μετατρέπεται σε μια χρονική σταθερά από τη σχέση:

$$\beta_{dry} = V_d \Delta Z_p^{-1} \quad (6.7)$$

όπου η ταχύτητα εναπόθεσης μπορεί να υπολογιστεί άμεσα στην εισαγωγή ή υπολογίζεται ως η ταχύτητα καθίζησης.

Μια εναλλακτική λύση για να απομακρυνθεί ένα κλάσμα από τη μάζα του σωματιδίου είναι να υπολογιστεί η πιθανότητα, του γεγονότος ότι ένα σωματίδιο θα εναποθέσει όλη του τη μάζα και στη συνέχεια μόνο ένα κλάσμα θα εναποτεθεί σε κάθε χρονικό βήμα. Σε αυτή τη περίπτωση, εάν R είναι ένας τυχαίος αριθμός από 0 έως 1, τότε ένα σωματίδιο θα εναποτεθεί εάν $R < \beta_{dry} \Delta t$.

6.4 Υγρή Απομάκρυνση (Wet Removal)

Η υγρή απομάκρυνση (Hicks, 1986) χωρίζεται σε δύο διαδικασίες. Σε εκείνες στις οποίες ο μολυσμένος αέρας αναρροφάται συνεχώς μέσα σε ένα νέφος από ένα μολυσμένο οριακό στρώμα και σε εκείνες όπου η βροχή πέφτει μέσα από ένα μολυσμένο στρώμα. Για ρυπογόνα σωματίδια, η απλουστευτική θεώρηση ενός ποσοστού απομάκρυνσης θεωρείται για ρύπους που βρίσκονται μέσα στο στρώμα νέφους και ο συντελεστής απομάκρυνσης χρησιμοποιείται για την απομάκρυνση ρύπου σε βροχή κάτω από ένα στρώμα νέφους. Στα σημεία πλέγματος όπου βρέχει, η βάση νέφους ορίζεται στο επίπεδο όταν το RH φτάνει αρχικά στο 80% και η κορυφή νέφους εκτείνεται όταν το RH πέσει κάτω από το 60%. Όλες οι ποσότητες απομάκρυνσης ρυθμίζονται από τα κλάσμα της μάζας του ρύπου που βρίσκεται μέσα στο στρώμα νέφους ορίζοντας το κλάσμα του ρυπογόνου στρώματος που βρίσκεται κάτω από τη κορυφή νέφους ως (F^t) και το κλάσμα του ρυπογόνου στρώματος που είναι πάνω από τη βάση του νέφους ως (F_b).

Για την υγρή απομάκρυνση σωματιδίων μέσα από διαδικασίες που γίνονται στο εσωτερικό του νέφους ένας λόγος απομάκρυνσης, ο οποίος είναι η αναλογία της συγκέντρωσης του ρύπου στο νερό προς τη συγκέντρωση στον αέρα, εκφράζεται ως υγρή ταχύτητα εναπόθεσης:

$$V_{inc} = SP \quad (6.8)$$

όπου το ποσοστό βροχοπτώσεων δίνεται από το P . Η σταθερά χρόνου για την απομάκρυνση μέσα στο νέφος, δίνεται από τη σχέση:

$$\beta_{inc} = F^t F_b V_{inc} \Delta Z_p^{-1} \quad (6.9)$$

το μέσο ποσοστό απομάκρυνσης ισούται με $S = 3.2 \times 10^5$ όγκου, και όπως και πριν, ΔZ είναι το βάθος του ρυπογόνου στρώματος. Διαφορετικά ποσοστά απομάκρυνσης μπορούν να οριστούν για διαφορετικούς ρύπους. Η απομάκρυνση κάτω από το νέφος

ορίζεται κατ'ευθείαν ως ένα σταθερό ποσοστό, ανεξάρτητο από το ποσοστό βροχοπτώσεων. Η σταθερά απομάκρυνσης κάτω από τα νέφος δίνεται:

$$\beta_{bel} = 5 \times 10^{-5} (1.0 - F_b) \quad (6.10)$$

Η υγρή εναπόθεση των αερίων εξαρτάται από τη διαλυτότητά τους και για αδρανή αέρια είναι μια συνάρτηση της σταθεράς του νόμου του Henry (Molar atm⁻¹). Η ταχύτητα μιας αεριούχας υγρής εναπόθεσης μπορεί να οριστεί ως:

$$V_{gas} = H RTP \quad (6.11)$$

όπου: R είναι η παγκόσμια σταθερά των αερίων (0.082 atm M⁻¹ K⁻¹), T είναι η θερμοκρασία και έτσι η σταθερά χρόνου της αεριούχας υγρής απομάκρυνσης είναι:

$$\beta_{gas} = F' V_{gas} \Delta Z_p^{-1} \quad (6.12)$$

Παρατηρείται ότι η υγρή εναπόθεση των αερίων εφαρμόζεται σε όλα τα επίπεδα του στρώματος νέφους.

6.5 Ραδιενεργή Διάσπαση

Παρόλο που η ραδιενεργή διάσπαση, από μόνη της, δεν καταλήγει σε εναπόθεση, οι εναποτιθέμενοι ραδιενεργοί ρύποι όντως διασπώνται και έτσι τα ποσοστά εναπόθεσης προσαρμόζονται σε κάθε χρονικό βήμα. Η σταθερά διάσπασης για ραδιενεργές διαδικασίες ορίζεται από το χρόνο ημιζωής, T_{1/2}:

$$\beta_{rad} = \frac{\ln 2}{T_{\frac{1}{2}}} \quad (6.13)$$

και η ραδιενεργή διάσπαση της μάζας του ρύπου, είτε στον αέρα ή σε αυτό που έχει εναποτεθεί, γίνεται:

$$m_2 = m_1 \exp(-\beta_{rad} \Delta t) \quad (6.14)$$

6.6 Ξηρή εναπόθεση με τη Μέθοδο Αντίστασης

Αντί να οριστεί η ταχύτητα μιας ξηρής εναπόθεσης για ένα ρύπο, προτιμάται η συνολική ταχύτητα εναπόθεσης η οποία μπορεί να υπολογισθεί από το άθροισμα των διαφόρων αντιστάσεων (Hicks, 1986) και τη ταχύτητα καθίζησης των σωματιδίων, έτσι ώστε να ισχύει:

$$V_d = [R_a + R_b + R_c + R_a R_b V_g]^{-1} + V_g \quad (6.15)$$

όπου οι δείκτες για τις αντιστάσεις R αντιπροσωπεύουν:

- a: το ατμοσφαιρικό στρώμα
- b: το οιονεί – γραμμικό υπόστρωμα
- c: το canopy στρώμα

τα οποία αντιπροσωπεύουν τη μαζική αντίσταση διαφόρων επιφανειών βαρυτικής καθίζησης. Το V_g είναι μηδέν για αέρια και το R_c είναι μηδέν για σωματίδια. Τα συστατικά αντοχής εξαρτώνται από τις μετεωρολογικές συνθήκες όπως και από τις ιδιότητες της επιφάνειας. Οι ιδιότητες της επιφάνειας που χρησιμοποιούνται σε αυτούς τους υπολογισμούς συλλέγονται από εξωτερικές πηγές. Η μέθοδος ακολουθεί πολύ πιστά τις προτάσεις του Wesely (1989) όπως αποτυπώθηκαν στο RADM μοντέλο (Chang, 1990) και ανανεώθηκαν από τους Walmsley και Wesely (1996).

Η ατμοσφαιρική αντίσταση παραμετροποιεί τον περιοριστικό ρόλο της ατμοσφαιρικής διαταραχής και ενσωματώνεται στα αέρια και στα σωματίδια διαμέσου αεροδυναμικής αντίστασης (Wesely και Hicks, 1977):

$$R_a = \text{Pr}_n \frac{\left(\ln \frac{z}{Z_0} - \psi_h \right)}{ku_*} \quad (6.16)$$

Πάνω από τη γη το μήκος της αεροδυναμικής τραχύτητας, Z_0 , είναι σταθερό και καθορίζεται από τη χρήση της γης και τη φυτοκάλυψη. Πάνω από το νερό ισχύει η σχέση Charnock (1958) όπως τροποποιήθηκε από το Smith (1988) :

$$Z_0 = 0.011 \frac{u_*^2}{g} + \frac{\nu}{(9.1u_*)} \quad (6.17)$$

Η παραπάνω σχέση χρησιμοποιείται για να ορίσει το μήκος της αεροδυναμικής τραχύτητας και όπου θ είναι το κινηματικό ιξώδες του αέρα ($\nu = \frac{\mu}{\rho}$). Ο δεύτερος όρος προστέθηκε στην εξίσωση για περιπτώσεις ελαφρού αέρα ($u_* > 0$). Η διόρθωση σταθερότητας για τη θερμότητα υπολογίζεται από:

$$\psi_h = \int \left[\frac{\left(1 - \frac{\varphi_h}{\text{Pr}} \right)}{\left(\frac{z}{L} \right)} \right] d \left(\frac{z}{L} \right) \quad (6.18)$$

όπου: φ_h δίνεται από τις σχέσεις (3.17) και (3.19) και όπου z υπολογίζεται από το ανώτερο στρώμα επιφάνειας.

Για ασταθείς συνθήκες:

$$\psi_h = -2.7283 \frac{z}{L} \quad -0.001 \leq \frac{z}{L} \leq 0 \quad (6.19)$$

$$\psi_h = a_1 + \frac{z}{L} \left(a_2 + \frac{z}{L} \left(a_3 + \frac{z}{L} \left(a_4 + a_5 \frac{z}{L} \right) \right) \right) \quad -2 \leq \frac{z}{L} \leq -0.001 \quad (6.20)$$

με $\alpha_1 = 0.1164 \times 10^{-4}$, $a_2 = -2.7188$, $a_3 = -2.1551$, $a_4 = -0.9859$ και $a_5 = -0.1765$.

Για σταθερές συνθήκες:

$$\psi_h = - \left(1 + ab \frac{z}{L} \right)^{\frac{3}{2}} - b \left(\frac{z}{L} - \frac{c}{d} \right) \exp \left(- \frac{dz}{L} \right) - \frac{bc}{d} + 1 \quad 0 \leq \frac{z}{L} \leq 10 \quad (6.21)$$

όπου: $a = 1$, $b = 2/3$, $c = 5$ και $d = 0.35$.

Η αντίσταση του οιονεί γραμμικού υποστρώματος ενσωματώνει τις επιπτώσεις του γραμμικού στρώματος ακριβώς πάνω από την επιφάνεια. Πάνω από το νερό η αντίσταση του υποστρώματος θεωρείται πολύ μικρή και περιορίζεται μόνο από την ατμοσφαιρική αντίσταση (Slinn και Slinn, 1980). Παρόλα αυτά η αντίσταση πάνω από τη γη για αεριούχα εναπόθεση παραμετροποιείται μέσω του αριθμού Schmidt (S_c) που ακολουθεί τους Wesley και Hicks (1977):

$$R_b = \Pr \left(\frac{d_1}{ku_*} \right) S_c^{d_2} \quad (6.22)$$

στη παραπάνω σχέση οι σταθερές d_1 και d_2 ισούνται με $d_1 = 2$, $d_2 = 2/3$.

Η αντίσταση για τα σωματίδια υπολογίζεται από την ίδια σχέση με έναν επιπρόσθετο όρο (Raupach, 1993):

$$R_b = \Pr \left\{ \left[\left(\frac{d_1}{ku_*} \right) S_c^{d_2} \right]^{-1} + u_* \left[\frac{S_t}{(S_t + p)} \right]^q \right\}^{-1} \quad (6.23)$$

όπου οι σταθερές $p = 0.8$ και $q = 2.0$ (Peters και Eiden, 1992). Ο αριθμός Stokes (S_t) υπολογίζεται από:

$$S_t = (2V_g u_*)(l_* g C_c)^{-1} \quad (6.24)$$

όπου l_* είναι η κλίμακα μήκους του γραμμικού στρώματος ($l_* = \frac{\nu}{u_*}$) και ο αριθμός

Schmidt (S_c) δίνεται από:

$$S_c = \frac{\nu}{D} \quad (6.25)$$

Η διάχυση του συγκεκριμένου αεριούχου ρύπου, D , σχετίζεται με το λόγο μοριακού βάρους του ρύπου (W_p) και του αέρα (W_a) σύμφωνα με το νόμο του Graham:

$$D = \nu \left(\frac{W_a}{W_p} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (6.26)$$

Για σωματιδιακούς ρύπους, η αναλογία διάχυσης δίνεται:

$$D = k_b T C_c (3\pi\mu d_p)^{-1} \quad (6.27)$$

όπου k_b η σταθερά Boltzmann ($1.38 \times 10^{-20} \text{ g}^2 \text{ K}^{-1} \text{ s}^{-2}$).

Η αντίσταση canopy εξαρτάται βασικά από ένα αριθμό φυτοφυσιολογίας και από τα χαρακτηριστικά της επιφάνειας εδάφους τα οποία ελέγχουν την απορρόφηση των αερίων από τα φυτά και ενεργούν παράλληλα. Όπως σημειώθηκε το R_c είναι μηδέν για τα σωματίδια. Η ακόλουθη διαδικασία ακολουθεί τις εξισώσεις και τους συμβολισμούς που περιγράφονται από τον Wesely (1989) για τη συνολική canopy αντίσταση:

$$R_c = \left[\frac{1}{(R_s + R_m)} + \frac{1}{R_{lu}} + \frac{1}{(R_{dc} + R_{cl})} + \frac{1}{(R_{ac} + R_{gs})} \right]^{-1} \quad (6.28)$$

και συντίθεται από το stomatal (s), μεσόφυλλα (m), επιδερμίδες φύλλων ανώτερης canopy (lu), διαδικασία μεταφοράς αερίου από συναγωγή θερμότητας (dc), επιφάνειες μέσα σε κατώτερη canopy (cl), το ύψος της canopy και ο παράγοντας πυκνότητας (ac) και οι αντιστάσεις της επιφάνειας εδάφους (gs). Η συνολική canopy οριοθετείται από μια ελάχιστη τιμή της τάξης του 10 s m^{-1} για να αποτρέψει μη ρεαλιστικές υψηλές ταχύτητες εναπόθεσης κάτω από συγκεκριμένες συνθήκες εδάφους.

Η αντίσταση stomatal εξαρτάται κυρίως από την ηλιακή ακτινοβολία και τα είδη των ρύπων, μπορεί να εκφραστεί ως:

$$R_s = R_i D_{hx} \left[1 + \left\{ \frac{200}{(G + 0.1)} \right\}^2 \right] \left[\frac{400}{(T_s (40 - T_s))} \right] \quad (6.29)$$

όπου G η ηλιακή ακτινοβολία σε W/m^2 , D_{hx} είναι ο λόγος διάχυσης του ατμού του νερού ως προς το ρύπο, T_s είναι η θερμοκρασία περιβάλλοντος σε βαθμούς Κελσίου και R_i είναι η ελάχιστη αντίσταση για τον ατμό του νερού η οποία εξαρτάται από την εποχή και την κάλυψη του εδάφους. Για θερμοκρασίες έξω από τα όρια 0 έως 40 το R_s παίρνει μεγάλες τιμές. Η προσπίπτουσα ηλιακή ακτινοβολία υπολογίζεται σε κάθε σημείο του μετεωρολογικού πλέγματος και βασίζεται στη κάλυψη νέφωσης και το ημίτονο της ηλιακής γωνίας ανύψωσης. Οι άλλες αντιστάσεις εξαρτώνται κυρίως από τη διαλυτότητα και την αντιδραστικότητα του ρύπου. Μια απλή κλασματική εξίσωση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για καθένα από τα R :

$$R_m = \left[\frac{H^*}{3000} + 100f_0 \right]^{-1} \quad (6.30)$$

$$R_{lu} = R_{lu1} [H^* 10^{-5} + f_0]^{-1} \quad (6.31)$$

$$R_{dc} = 100 \left[1 + \frac{1000}{(G+10)} \right] \quad (6.32)$$

$$R_{cl} = \left[H^* \frac{10^{-5}}{R_{cl1}} + \frac{f_0}{R_{cl2}} \right]^{-1} \quad (6.33)$$

$$R_{gs} = \left[H^* \frac{10^{-5}}{R_{gs1}} + \frac{f_0}{R_{gs2}} \right]^{-1} \quad (6.34)$$

όπου H^* είναι μια ενεργή σταθερά του Henry σχετιζόμενη με το SO_2 και f_0 είναι μια ρυπογόνος παράμετρος συγκεκριμένης αντίδρασης. Όλες οι σταθερές ορίζονται στους πίνακες των Wesely (1989) και Chang (1990). Εξαρτώνται από τη χρήση γης και την εποχή. Η σχέση για το R_{dc} έχει απλοποιηθεί θεωρώντας ότι η κλίση του εδάφους είναι μηδέν και η σχέση για την R_{lu} εφαρμόζεται μόνο στις ξηρές επιφάνειες. Επιπροσθέτως, ο όρος ($s\ m^{-1}$):

$$1000 \exp(-T_s - 4) \quad (6.35)$$

προστέθηκε στις εξισώσεις R_{lu} , R_{cl} και R_{gs} για την εφαρμογή σε αυξημένες αντιστάσεις σε κρύες θερμοκρασίες.

6.7 Ρύπος Επαναιώρησης

Η επαναιώρηση του παράγοντα μόλυνσης παραμετροποιείται χρησιμοποιώντας ένα συντελεστή επαναιώρησης του παράγοντα μόλυνσης που αντιπροσωπεύει την αναλογία της συγκέντρωσης του παράγοντα μόλυνσης του αέρα C , με τη ποσότητα που εναποτίθεται στην επιφάνεια S , έτσι ώστε:

$$K = \frac{C}{S} \quad (6.36)$$

όπου: K έχει μονάδες σε m^{-1} με τυπικές τιμές της τάξης του 10^{-6} . Ο παράγοντας επαναιώρησης μπορεί επίσης να εκφραστεί και ως ροή:

$$K = \left(\frac{R}{S} \right) \frac{dS}{dt} \quad (6.37)$$

το R σχετίζεται με την ατμοσφαιρική αντίσταση. Εάν υποθεθεί ότι $R = (ku_*)^{-1}$, τότε η ροή επαναιώρησης που κατευθύνεται προς τα πάνω είναι:

$$\frac{dS}{dt} = ku_* K S \quad (6.38)$$

Η διαδικασία αυτή εφαρμόζεται στο μοντέλο πάνω από τη γη όταν η διαδικασία της εναπόθεσης ξεκινά. Σε κάθε χρονικό βήμα για εκείνα τα σημεία συγκέντρωσης του πλέγματος τα οποία περιέχουν τιμές μη μηδενικής εναπόθεσης, ένα αέριο ή σωματίδιο με μάζα υπολογισμένη σύμφωνα με την εξίσωση (6.38) εκπέμπεται. Το σύνολο της εναπόθεσης σε αυτό το κελί μειώνεται.

Παρουσιάστηκε στις παραπάνω παραγράφους μια λεπτομερής περιγραφή των εξισώσεων HYSPLIT_4, το οποίο είναι ένα Λαγκρατζιανό μοντέλο που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για των υπολογισμό τροχιών και συγκεντρώσεων αέρα. Η διαμόρφωση του μοντέλου είναι πολύ γενική και θα μπορούσε να στηθεί για να εκτελέσει μια ποικιλία από διαφορετικά σενάρια. Γενικά τα Λαγκρατζιανά μοντέλα είναι κατάλληλα για γρήγορους υπολογισμού.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7

ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΜΕΘΟΔΟΥ ΑΝΑΛΥΣΗΣ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ

7.1 Περιγραφή Μεθόδου PSCF (Potential Source Contribution Function Analysis)

Έστω ότι ένα χημικό είδος, X, εκπέμπεται από περιοχές που θεωρούνται πηγές πηγών. Οι πηγές αυτές βρίσκονται μέσα σε μια περιοχή στην οποία πιθανολογείται ότι έχουν εγκατασταθεί αισθητήρια όργανα. Ο αριθμός των πηγών ποικίλει ανάλογα με τις ανάγκες της ανάλυσης. Αφού ξεκινήσει η εκπομπή από τη πηγή ένα τμήμα του χημικού είδους, X, υφίσταται χημικές αντιδράσεις, φτάνει σε ένα ή περισσότερα αισθητήρια όργανα και μετατρέπεται σε είδος της μορφής Y_1, \dots, Y_n . Ένα άλλο τμήμα του είδους X φτάνει επίσης σε ένα ή περισσότερα αισθητήρια όργανα χωρίς να υποστεί κάποια χημική μετατροπή.

Στη παρούσα εργασία οι περιοχές αυτές βρίσκονται στο χώρο της Αττικής και είναι τα Σπάτα, η Αριστοτέλους, ο Πειραιάς, η Αγία Παρασκευή, η Ελευσίνα και οι Θρακομακεδόνες.

Η προσομοίωση έγινε με τη βοήθεια του προγράμματος HYSPLIT_4 εισάγοντας το γεωγραφικό μήκος και πλάτος της κάθε περιοχής. Το πρόγραμμα χρησιμοποίησε μετεωρολογικά δεδομένα και έκταση βήματος στα 10m, 100m και 500m πάνω από την επιφάνεια του εδάφους. Οι τροχιές υπολογίστηκαν για κάθε έξι ώρες στη χρονική περίοδο της μιας ημέρας.

Η κάθε περιοχή υποδιαιρείται σε μία i έως j πλεγματική σειρά. Έστω ότι ο N αντιπροσωπεύει το συνολικό αριθμό του τμήματος των τελικών σημείων της τροχιάς κατά τη διάρκεια της περιόδου μελέτης. Εάν n_{ij} τα τελικά σημεία που βρίσκονται στο ij -οστό κελί, τότε η πιθανότητα του γεγονότος, A_{ij} , θα ισούται με:

$$P[A_{ij}] = \frac{n_{ij}}{N} \quad (7.1)$$

Στο ίδιο ij -οστό κελί εάν υπάρχουν m_{ij} τελικά σημεία τα οποία αντιστοιχούν στις τροχιές που φθάνουν σε μία περιοχή δέκτη με συγκέντρωση ρύπου υψηλότερη από κάποια διευκρινισμένη κρίσιμη τιμή, τότε η πιθανότητα B_{ij} του γεγονότος θα ισούται με:

$$P[B_{ij}] = \frac{m_{ij}}{N} \quad (7.2)$$

Η $PSCF_{ij}$ (Potential Source Contribution Function) ορίζεται από μία υπό όρους πιθανότητα:

$$PSCF_{ij} = P_{ij} = \frac{P[B_{ij}]}{P[A_{ij}]} = WT \frac{m_{ij}}{n_{ij}} \quad (7.3)$$

όπου WT είναι μια αυθαίρετα επιλεγμένη τιμή για περιπτώσεις όπου το n_{ij} είναι μικρό. Μια εμπειρική συνάρτηση βάρους WT προτάθηκε το 1989 από τους Zeng και Horke και εφαρμόστηκε όταν ο αριθμός των σημείων τέλους για ένα ειδικό κελί ήταν τρεις φορές μικρότερος από τις μέσες τιμές των σημείων τέλους ενός κανονικού κελιού. Η σχέση αυτή έχει την ακόλουθη μορφή:

$$W(n_{ij}) = \begin{cases} 1.0 & 48 < n_{ij} \\ 0.7 & 5 < n_{ij} \leq 48 \\ 0.4 & 2 < n_{ij} \leq 5 \\ 0.2 & 2 \leq n_{ij} \end{cases} \quad (7.4)$$

Έτσι για $n_{ij} = 1$ το βάρος ισούται με 0.5, για $n_{ij} = 2$ το βάρος ισούται με 0.68 και για $n_{ij} = 3$ το βάρος ισούται με 0.85. Τα πλεγματικά κελιά που περιέχουν πηγές ρύπανσης αναμένετε να έχουν υψηλές υπό όρους πιθανότητες. Επομένως η συνάρτηση της υπό όρους πιθανότητας PSCF, θα προσδιορίσει εκείνες τις περιοχές πηγών που έχουν τη δυνατότητα να συμβάλουν στην υψηλή συγκέντρωση των μολυσματικών παραγόντων οι οποίοι παρατηρούνται στη περιοχή δέκτη.

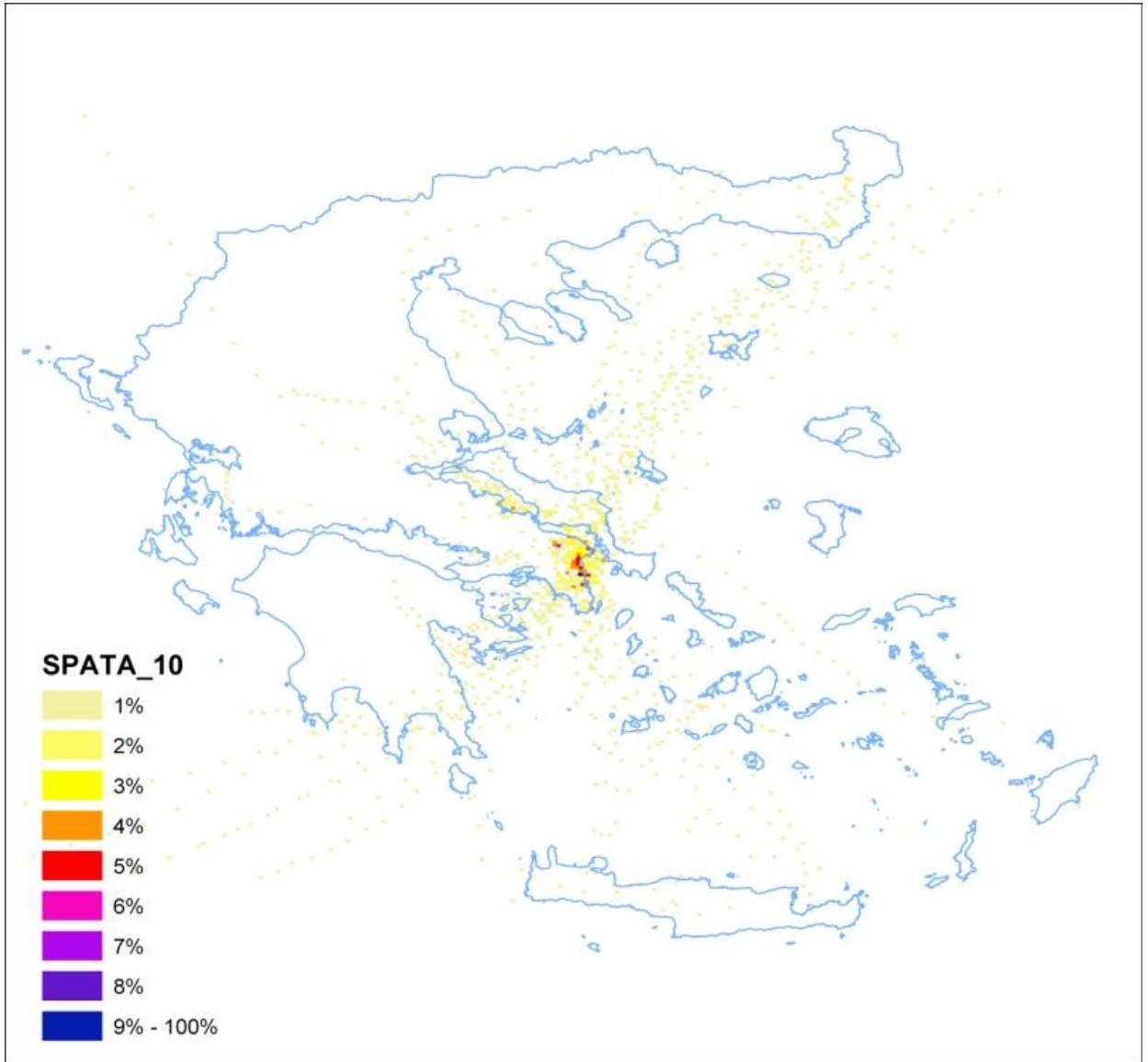
7.2 Υπολογιστικό Μέρος

Η χρονική περίοδος που μελετήθηκε ήταν κατά τους χειμερινούς μήνες Δεκεμβρίου, Ιανουαρίου και συγκεκριμένα από Δεκεμβρίου έως 20 Ιανουαρίου.

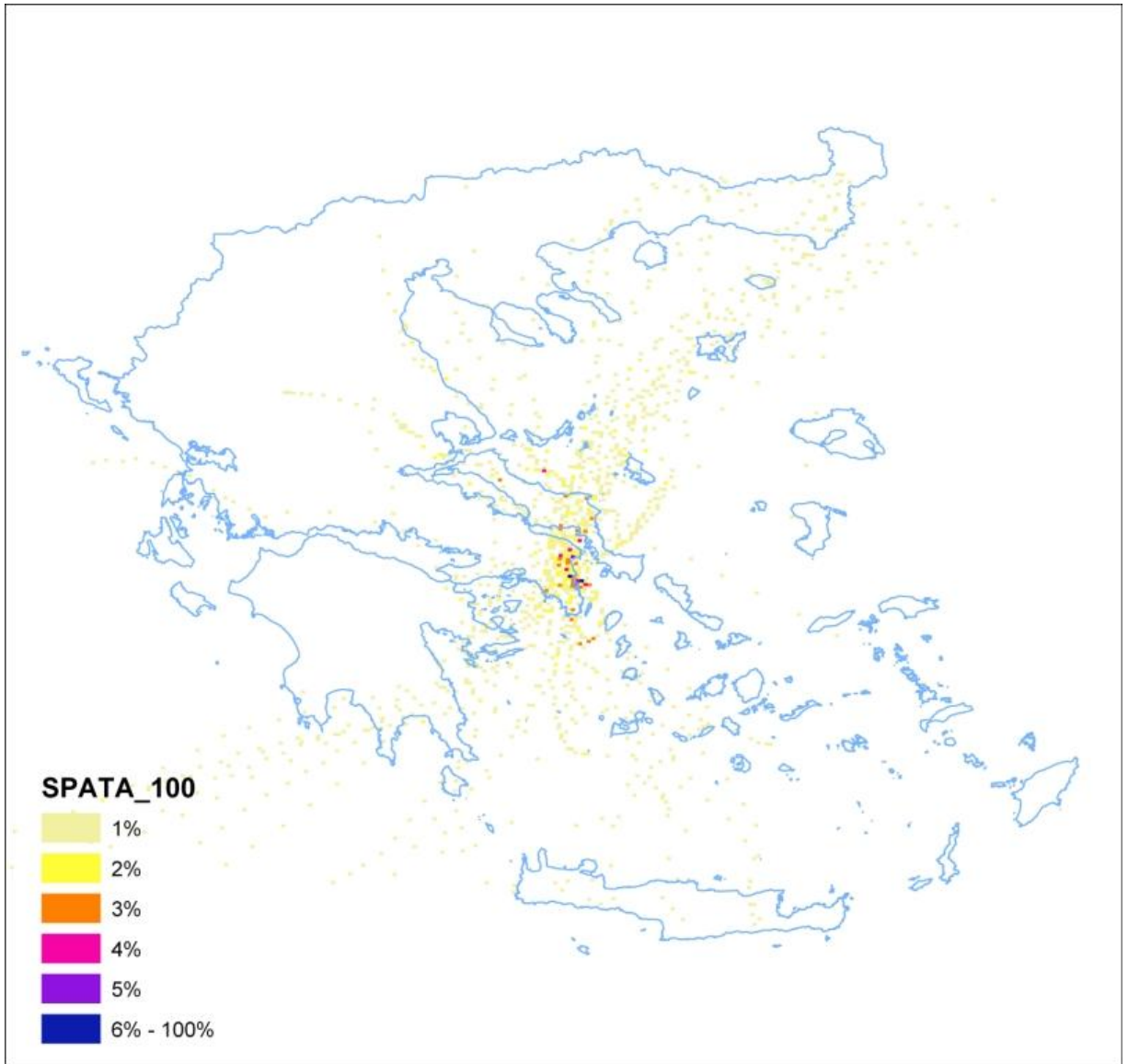
Η κάθε μέρα χωρίστηκε σε τέσσερα χρονικά πεδία που το καθένα είχε διάρκεια έξι ωρών και η προσομοίωση έγινε "πίσω" στο χρόνο. Δηλαδή, στο πρόγραμμα Hysplit για την διεξαγωγή των μετεωρολογικών αποτελεσμάτων της κάθε μέρας εισήχθησαν σταδιακά -6, -12, -18 και -24 h για το χρονικό βήμα των 10 min. Η μελέτη της τροχιάς των ρύπων πίσω στο χρόνο πραγματοποιήθηκε για τρία ύψη αυτά των 10, 100 και 500 m.

Στη συνέχεια, με τη χρήση του προγράμματος matlab έγινε η επεξεργασία των μετεωρολογικών αποτελεσμάτων και προέκυψαν excels για κάθε μέρα που δείχνουν τη κατανομή των ρύπων σε κάθε κελί του πλέγματος τόσο για της έξι περιοχές μελέτης όσο και για το συνολικό ελλαδικό χώρο.

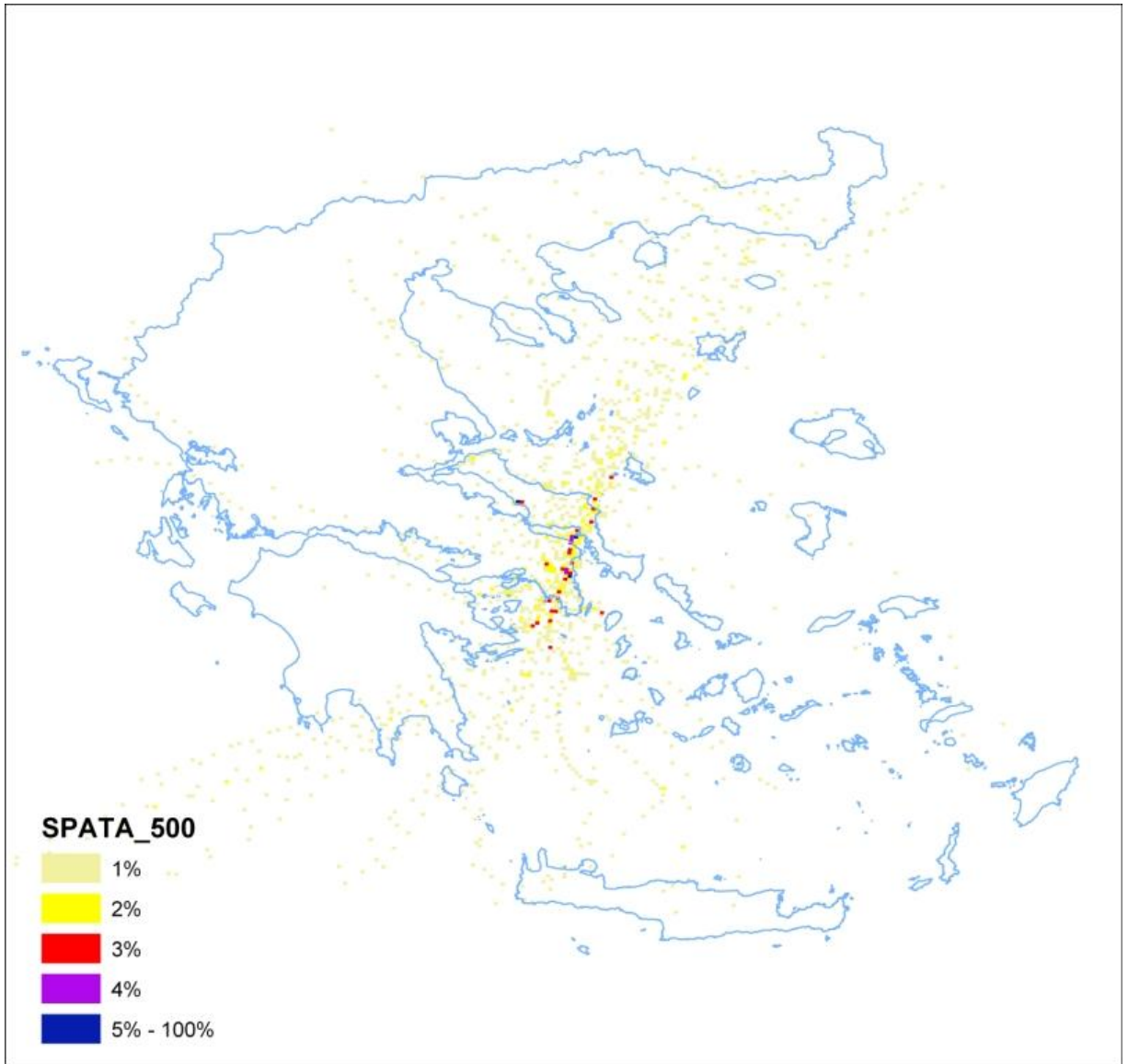
Έπειτα, τα excels αυτά επεξεργάστηκαν και πάλι με το matlab με σκοπό τη παραγωγή των συχνοτήτων των ρύπων σε κάθε κελί τόσο για τις έξι περιοχές όσο και για το συνολικό ελλαδικό χώρο. Στη συνέχεια οι συχνότητες αυτές διαιρέθηκαν με το 116 (αριθμός που προέκυψε από το γινόμενο των ημερών που μελετήθηκαν επί το 4 που εκφράζει τον αριθμό της χρονικής διαίρεσης της μέρας) και πολλαπλασιάστηκαν με το 100 για να προκύψει το ποσοστό του κάθε ρύπου. Τέλος έγινε η ακόλουθη χαρτογράφηση που δείχνει τη τροχιά των ρύπων για κάθε σταθμό, σε διαφορετικό ύψος και τα ποσοστά παρουσιάζονται με τη παλέτα χρωμάτων που απεικονίζεται.



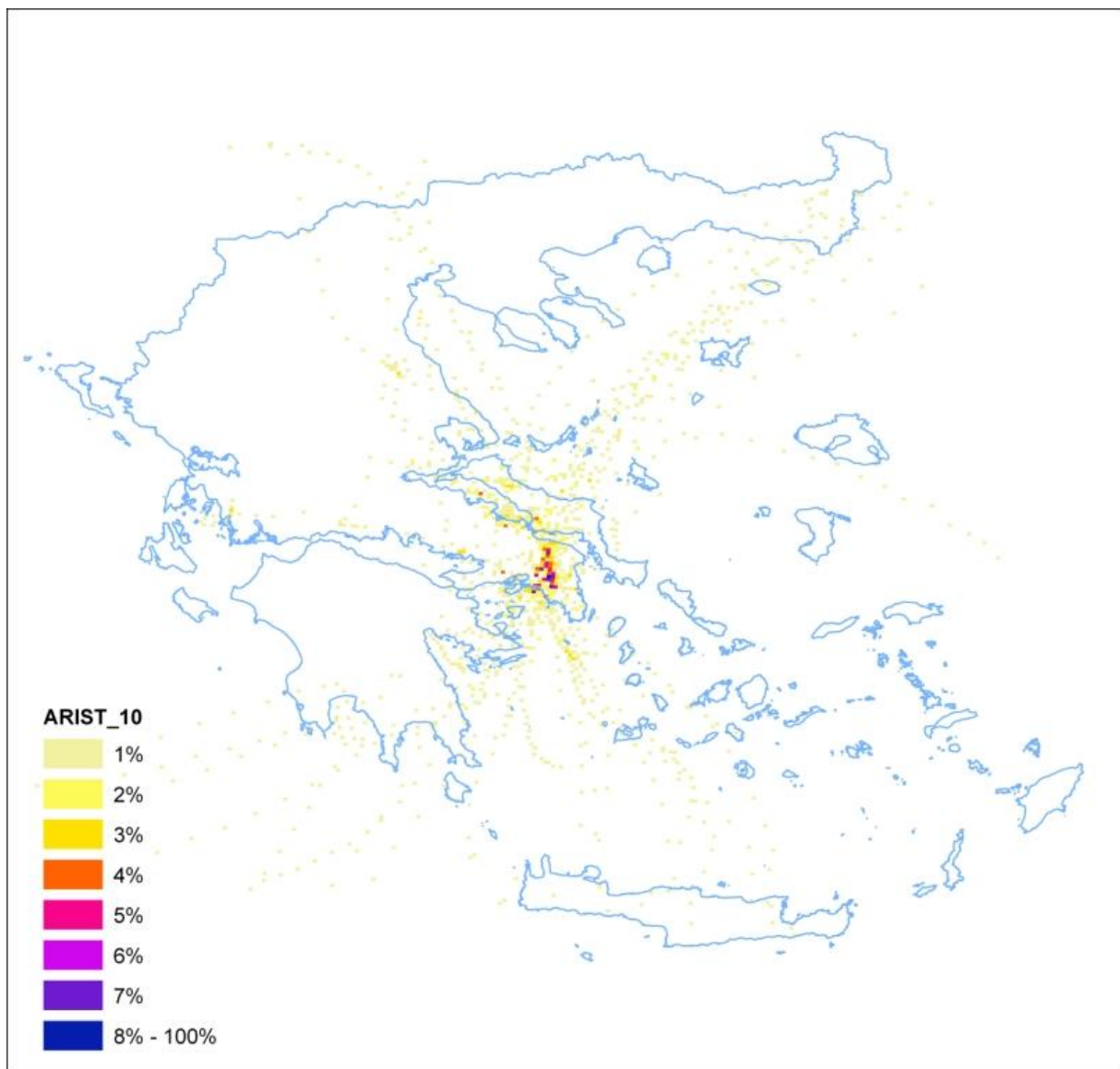
ΕΙΚΟΝΑ 7.1: Κατανομή και ποσοστά των ρύπων για τη περιοχή των Σπάτων σε ύψος 10 m.



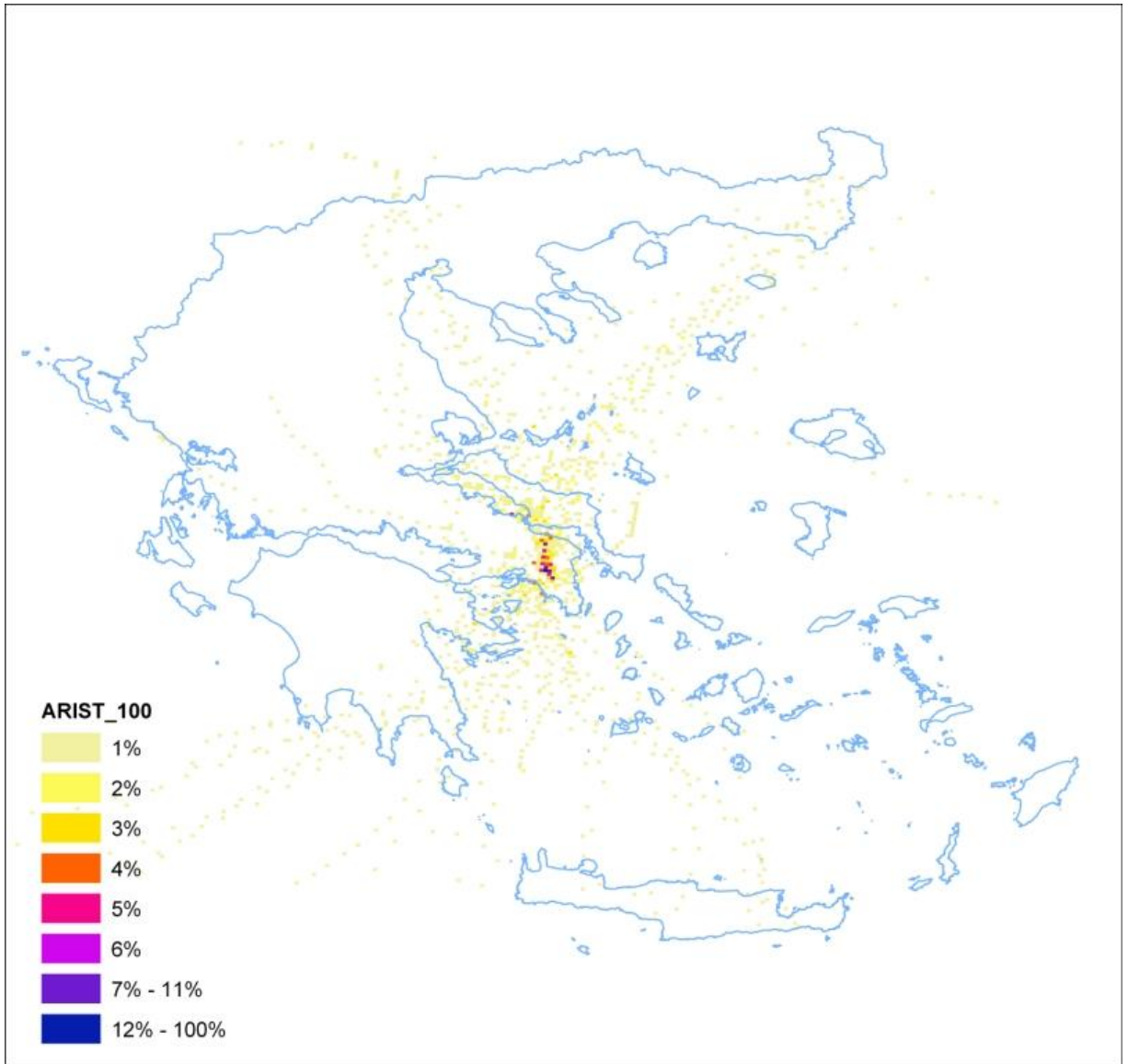
ΕΙΚΟΝΑ 7.2: Κατανομή και ποσοστά των ρύπων για τη περιοχή των Σπάτων σε ύψος 100 m.



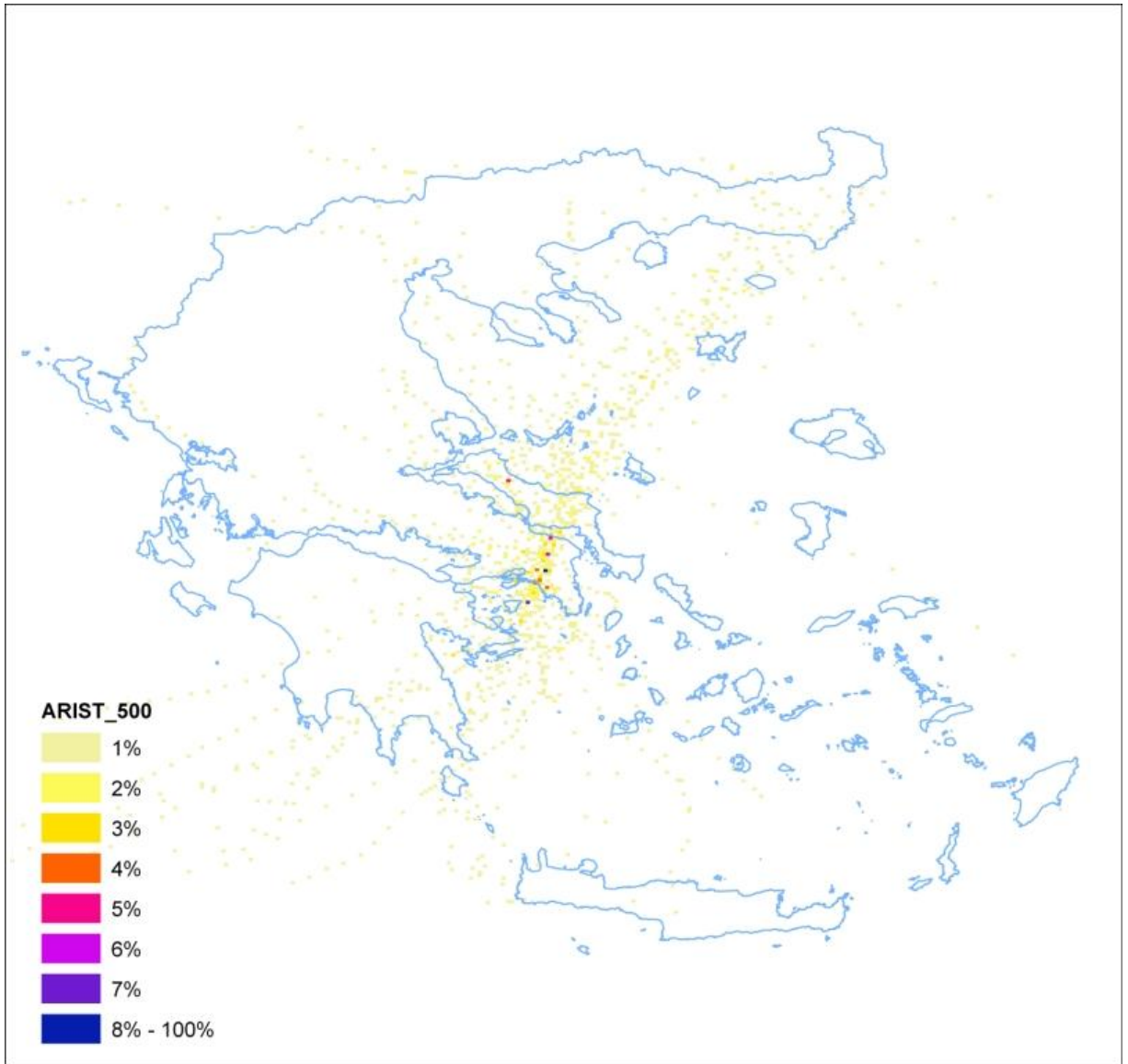
ΕΙΚΟΝΑ 7.3: Κατανομή και ποσοστά των ρύπων για τη περιοχή των Σπάτων σε ύψος 500 m.



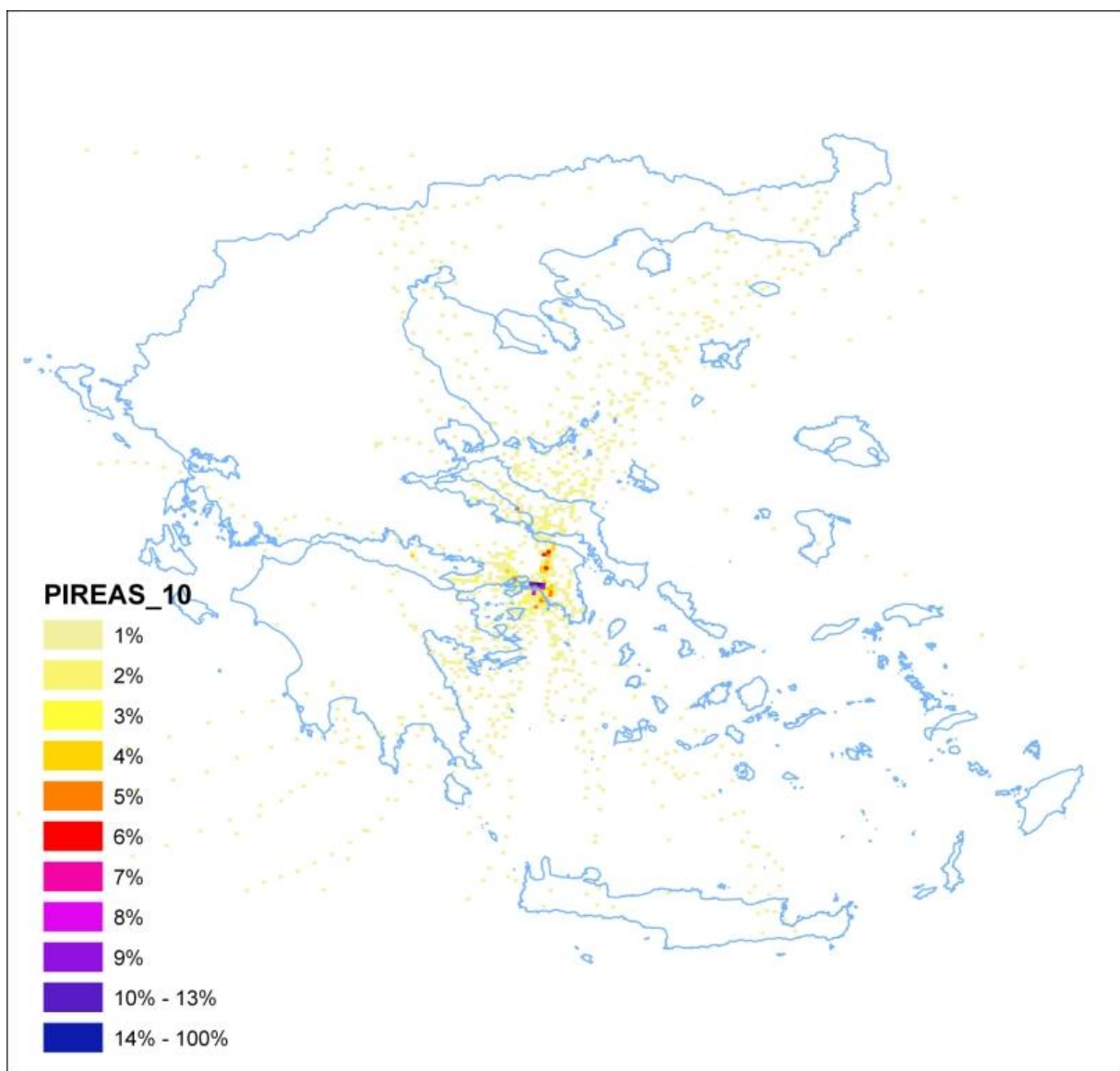
ΕΙΚΟΝΑ 7.4: Κατανομή και ποσοστά των ρύπων για τη περιοχή της Αριστοτέλους σε ύψος 10 m.



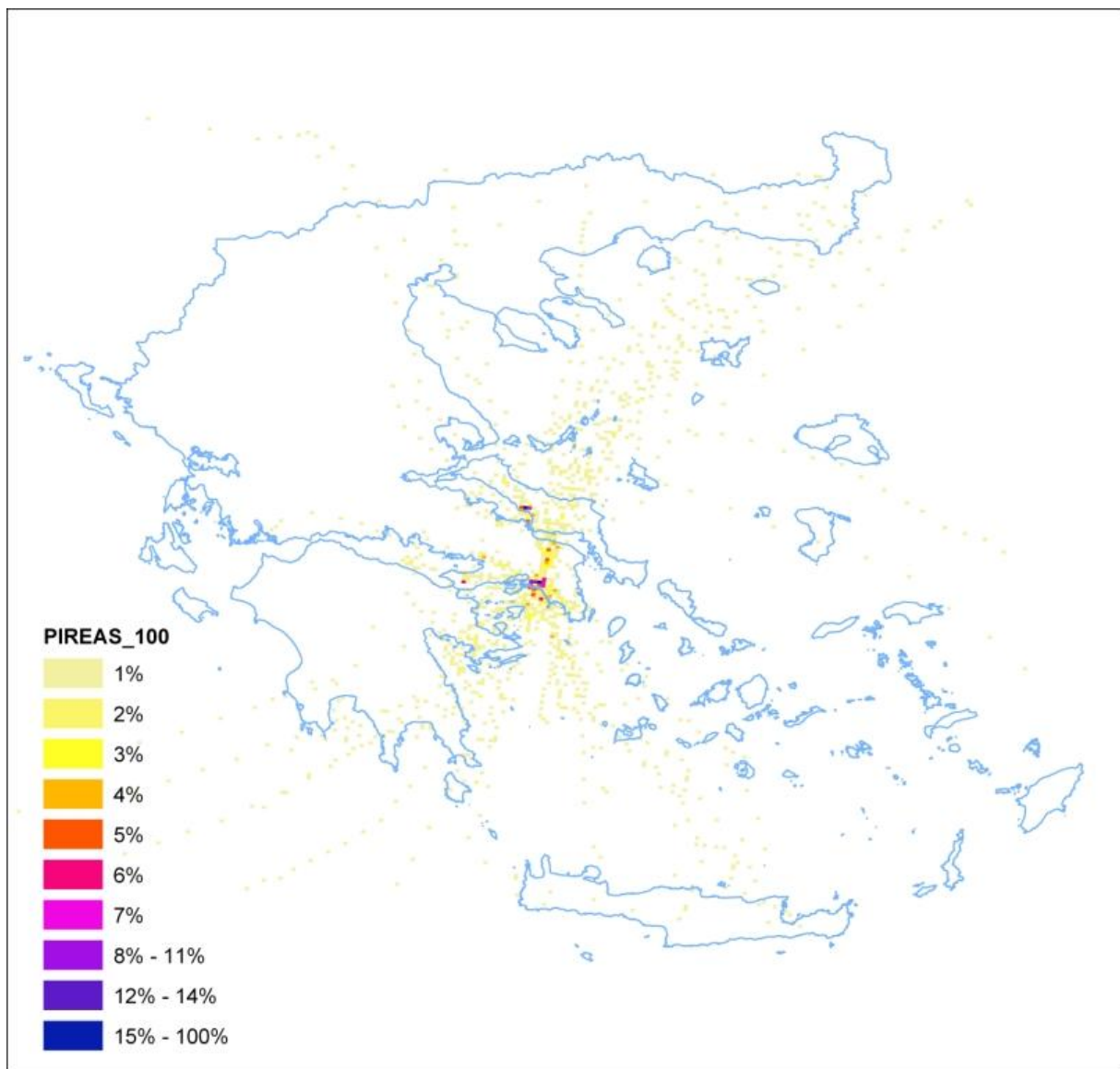
ΕΙΚΟΝΑ 7.5: Κατανομή και ποσοστά των ρύπων για τη περιοχή της Αριστοτέλους σε ύψος 100 m.



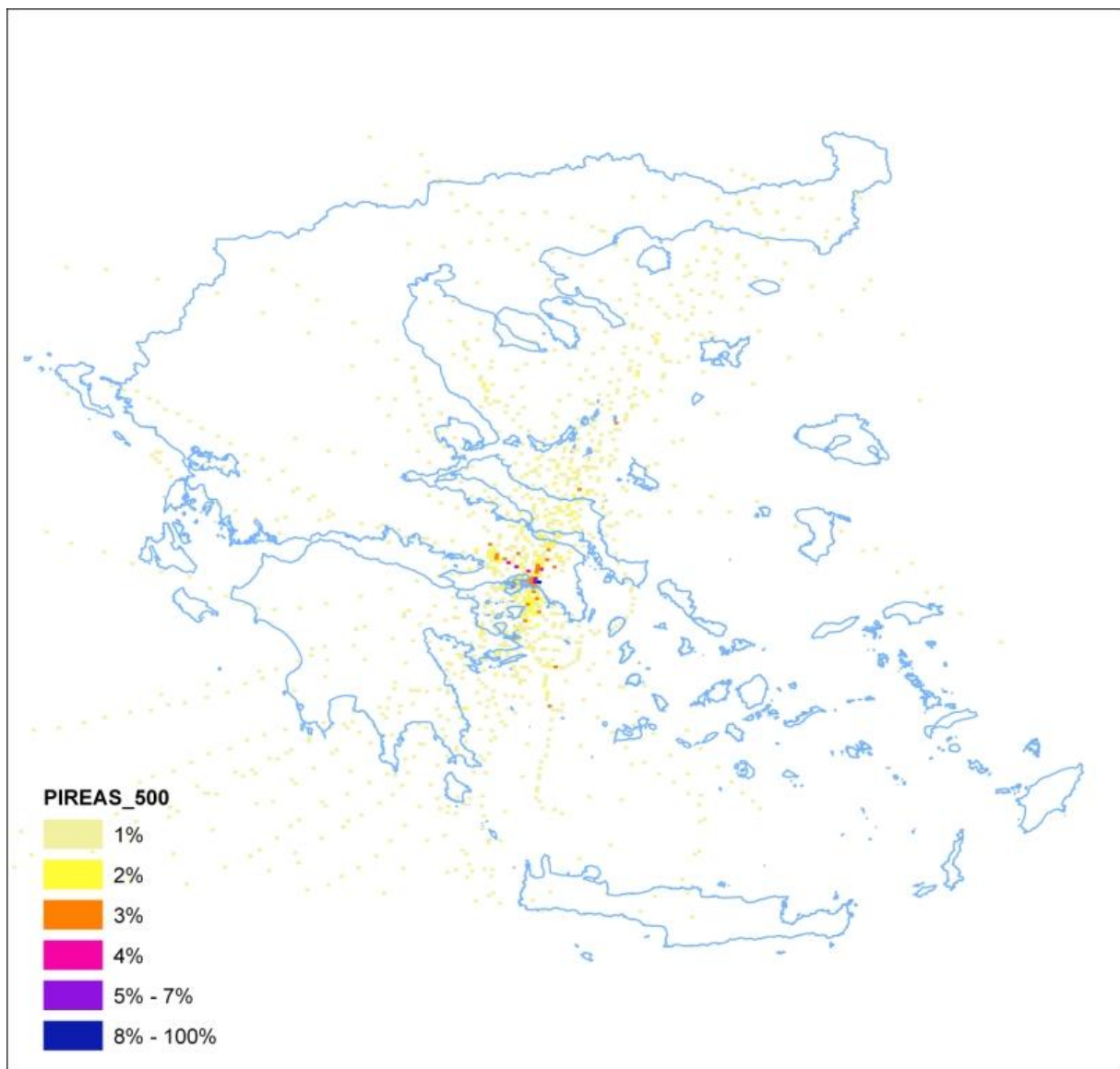
ΕΙΚΟΝΑ 7.6: Κατανομή και ποσοστά των ρύπων για τη περιοχή της Αριστοτέλους σε ύψος 500 m.



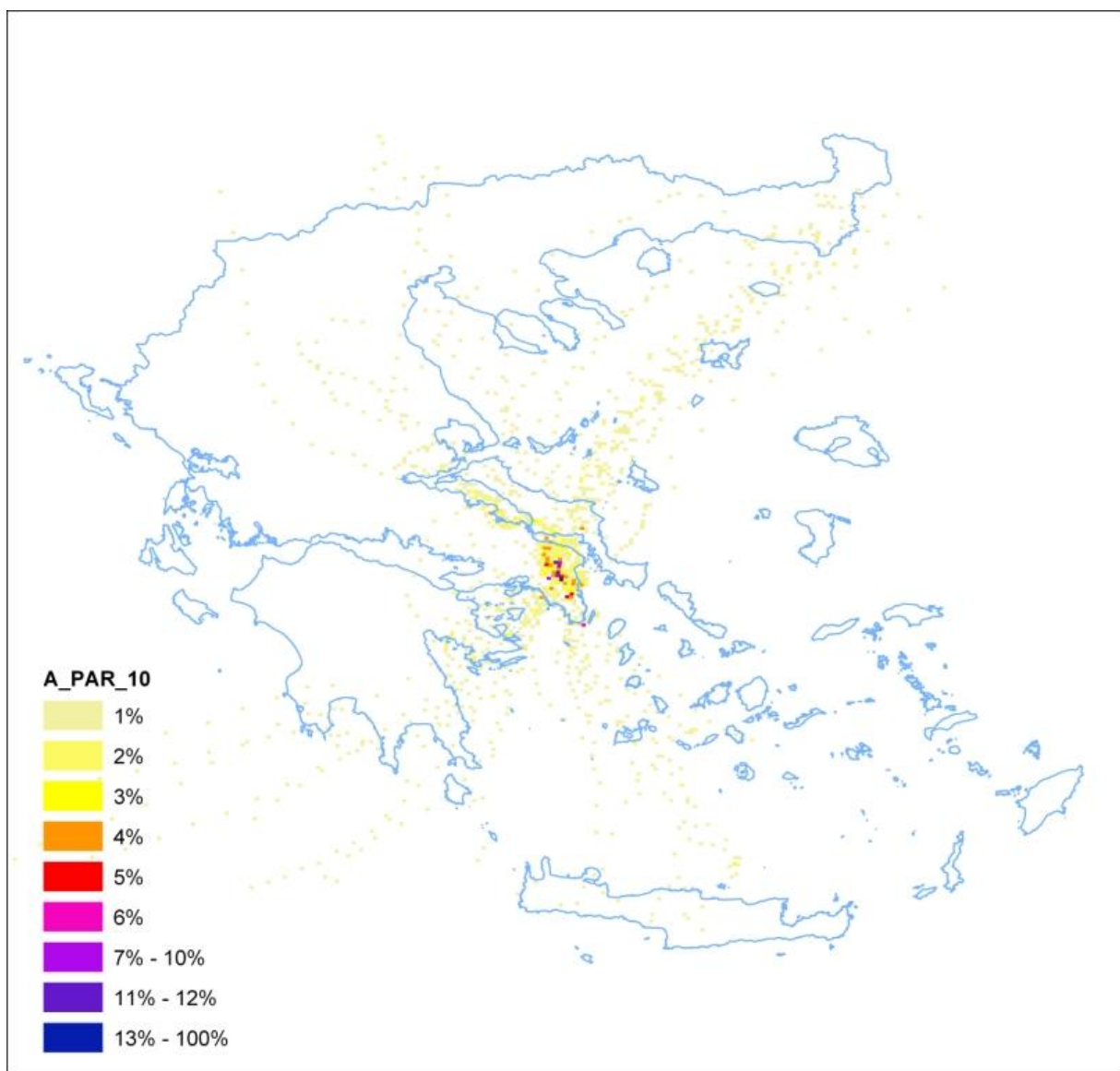
ΕΙΚΟΝΑ 7.7: Κατανομή και ποσοστά των ρύπων για τη περιοχή του Πειραιά σε ύψος 10 m.



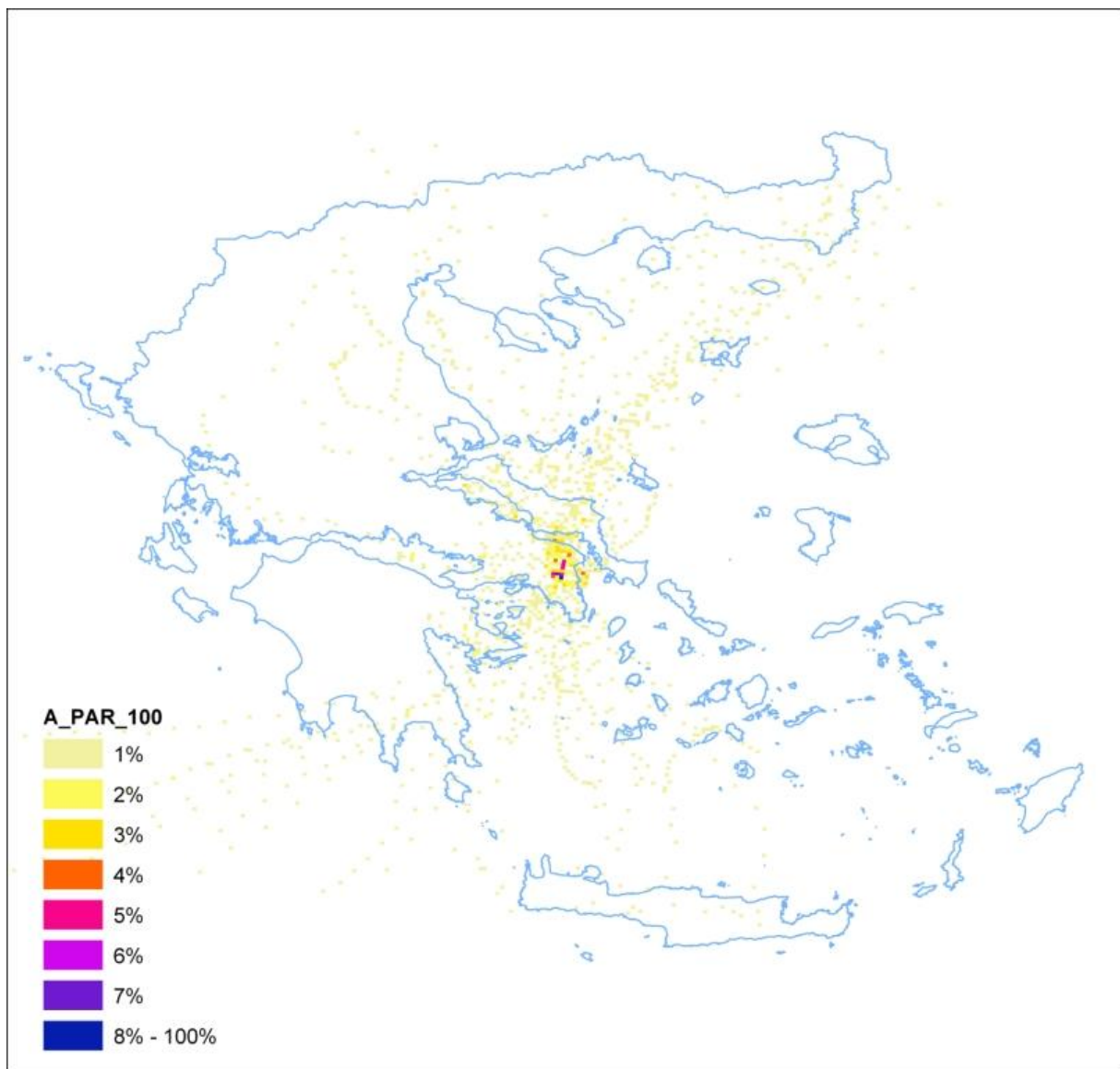
ΕΙΚΟΝΑ 7.8: Κατανομή και ποσοστά των ρύπων για τη περιοχή του Πειραιά σε ύψος 100 m.



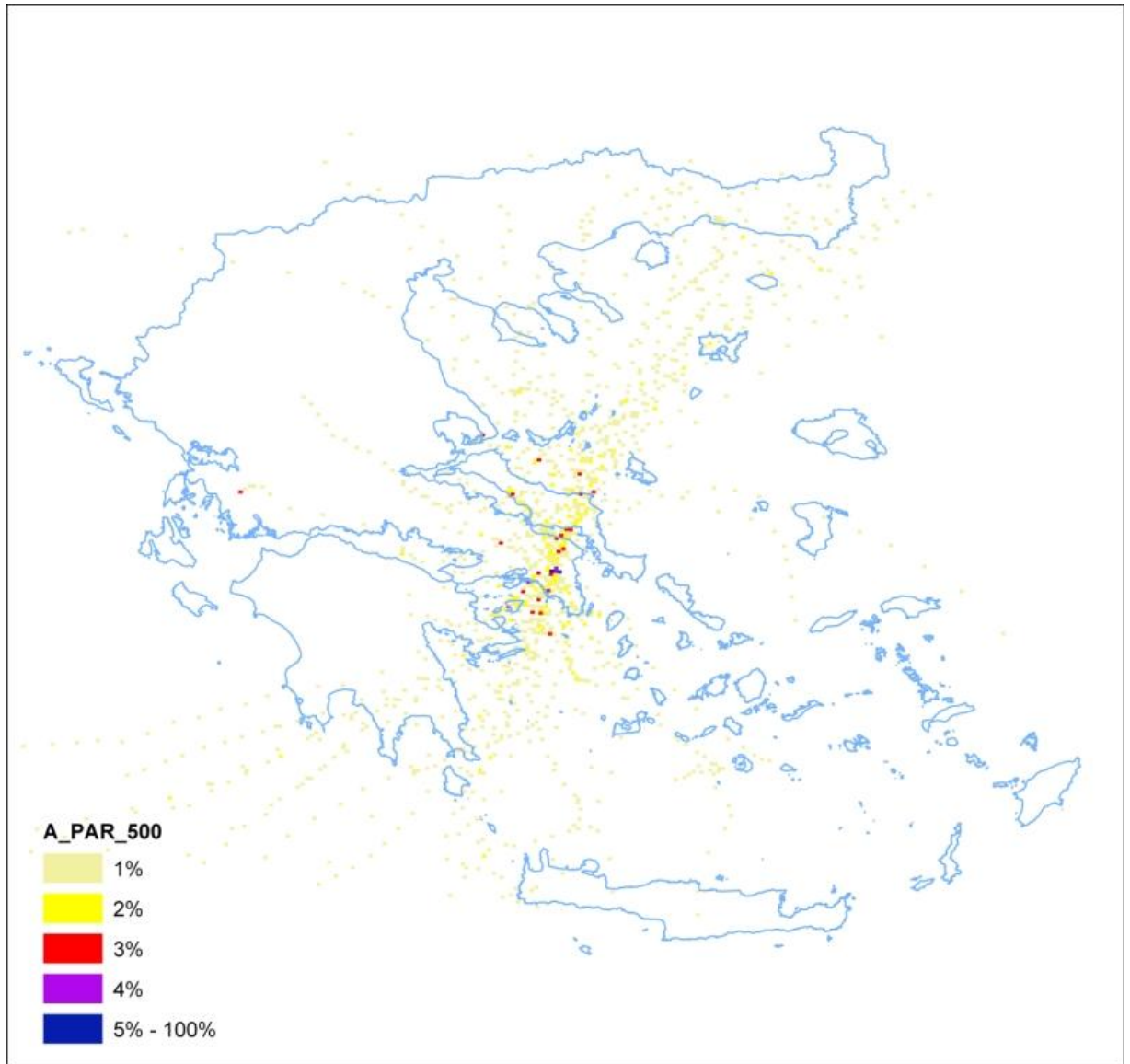
ΕΙΚΟΝΑ 7.9: Κατανομή και ποσοστά των ρύπων για τη περιοχή του Πειραιά σε ύψος 500 m.



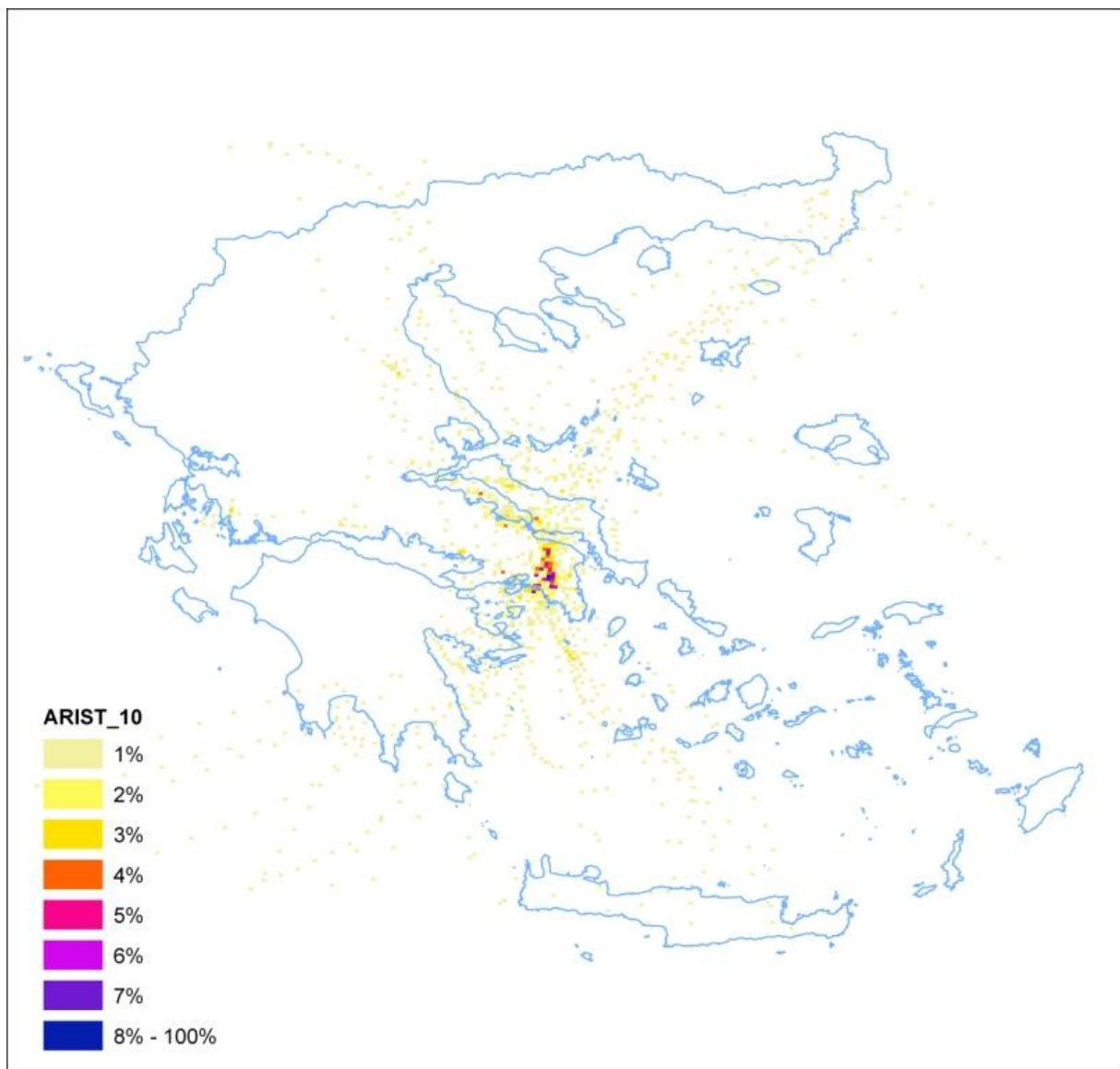
ΕΙΚΟΝΑ 7.10: Κατανομή και ποσοστά των ρύπων για τη περιοχή της Αγ. Παρασκευής σε ύψος 10 m.



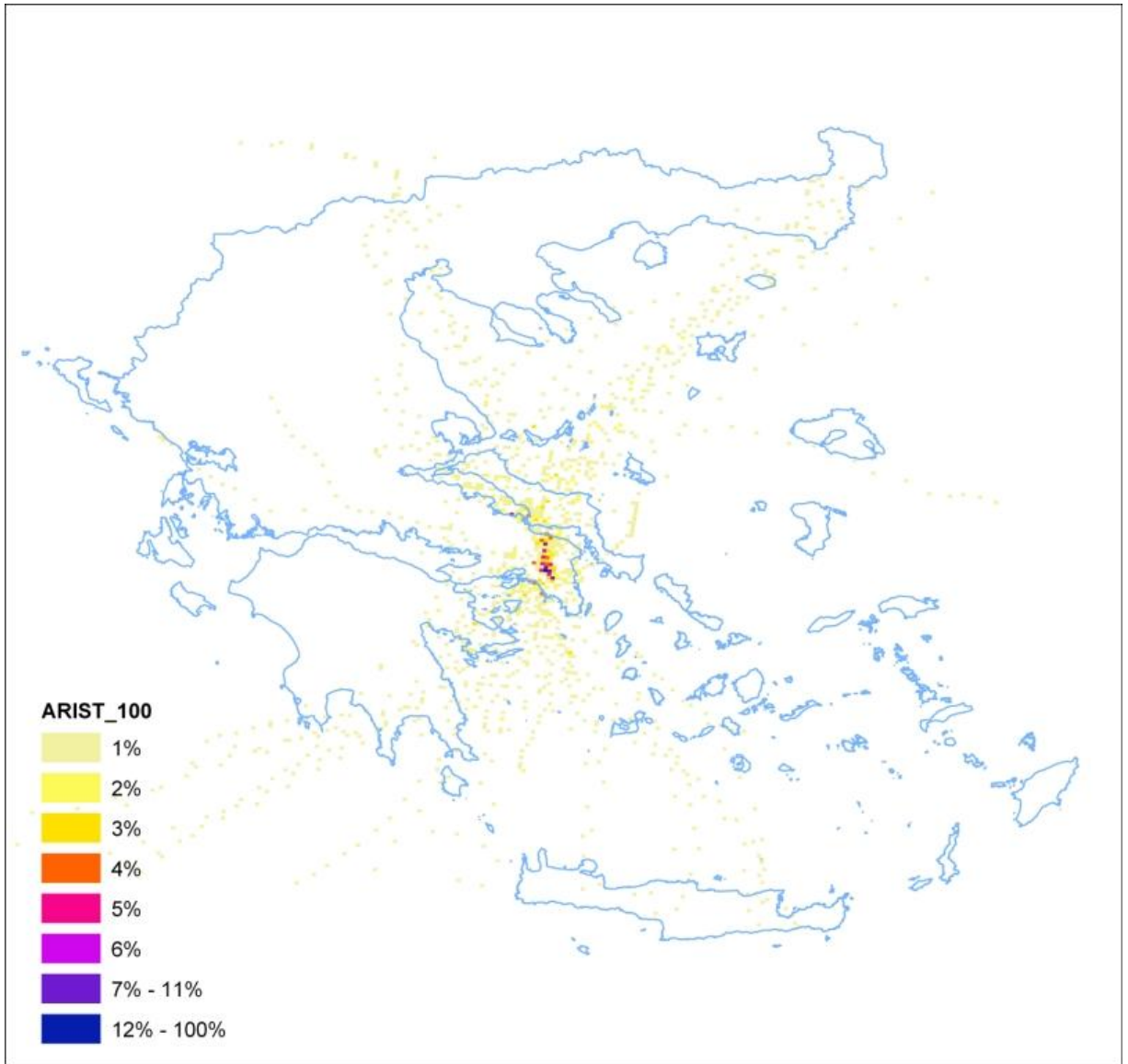
ΕΙΚΟΝΑ 7.11: Κατανομή και ποσοστά των ρύπων για τη περιοχή της Α. Παρασκευής σε ύψος 100 m.



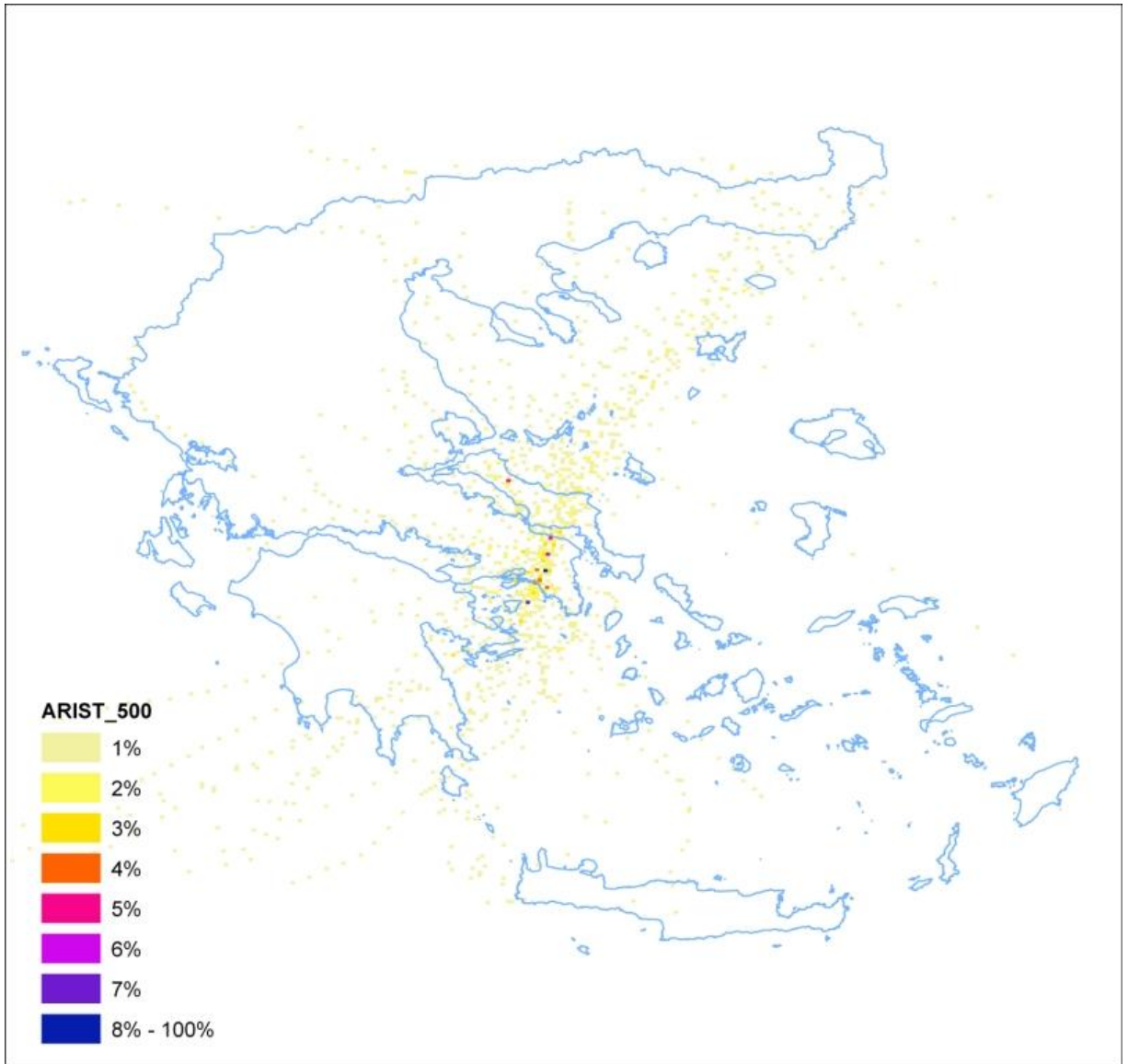
ΕΙΚΟΝΑ 7.12: Κατανομή και ποσοστά των ρύπων για τη περιοχή της Α. Παρασκευής σε ύψος 500 m.



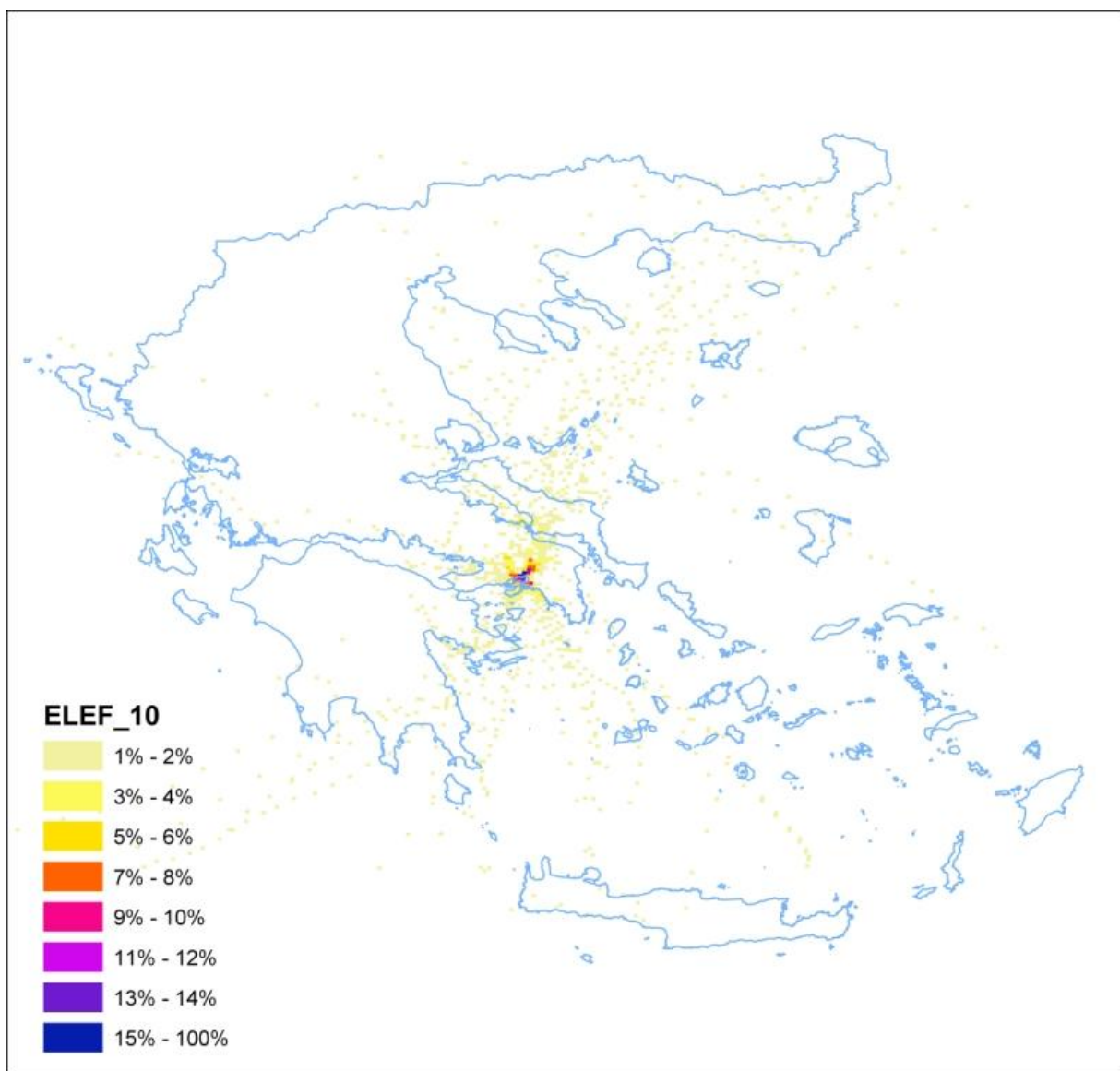
ΕΙΚΟΝΑ 7.13: Κατανομή και ποσοστά των ρύπων για τη περιοχή της Αριστοτέλους σε ύψος 10 m.



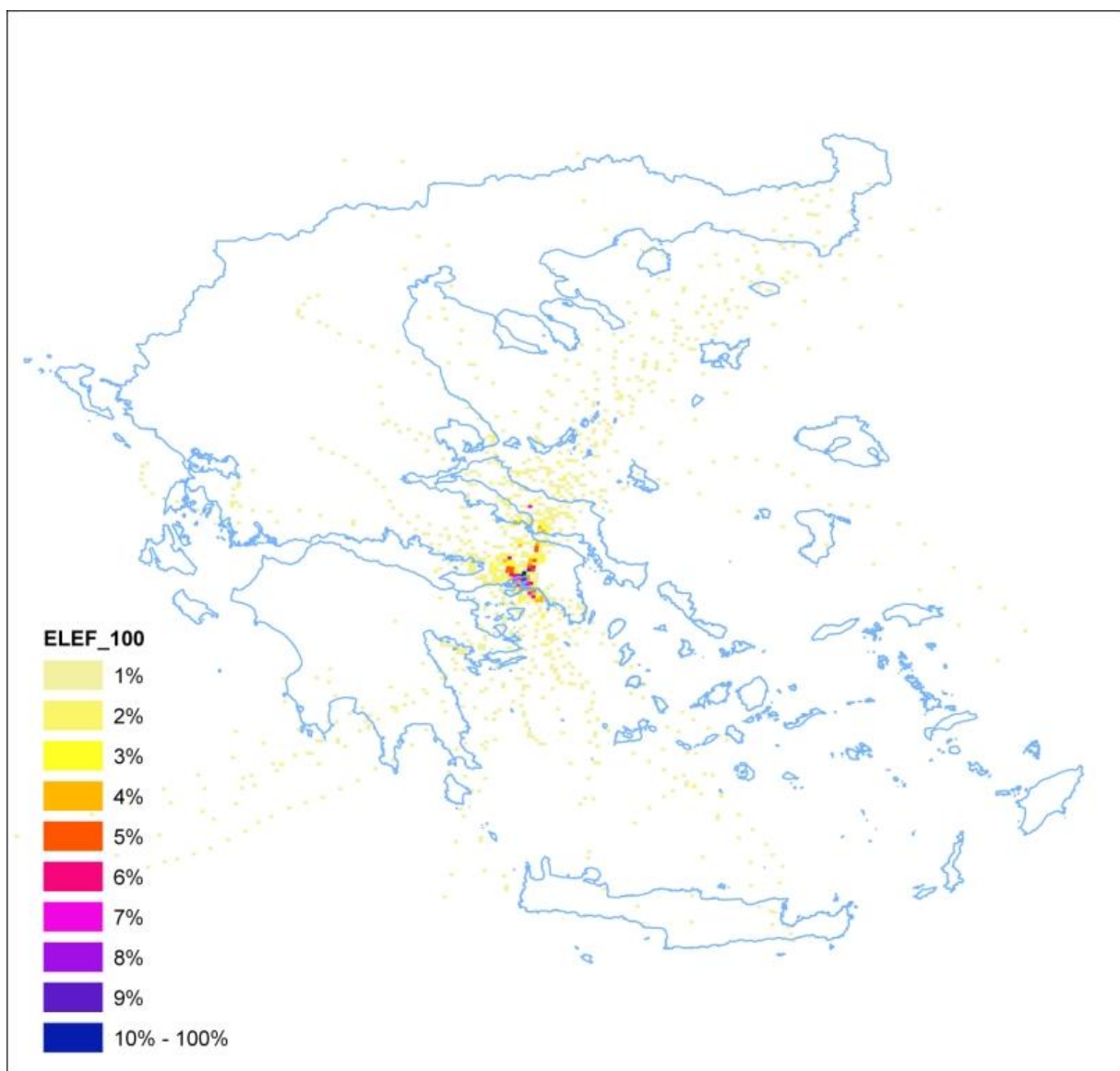
ΕΙΚΟΝΑ 7.14: Κατανομή και ποσοστά των ρύπων για τη περιοχή της Αριστοτέλους σε ύψος 100 m.



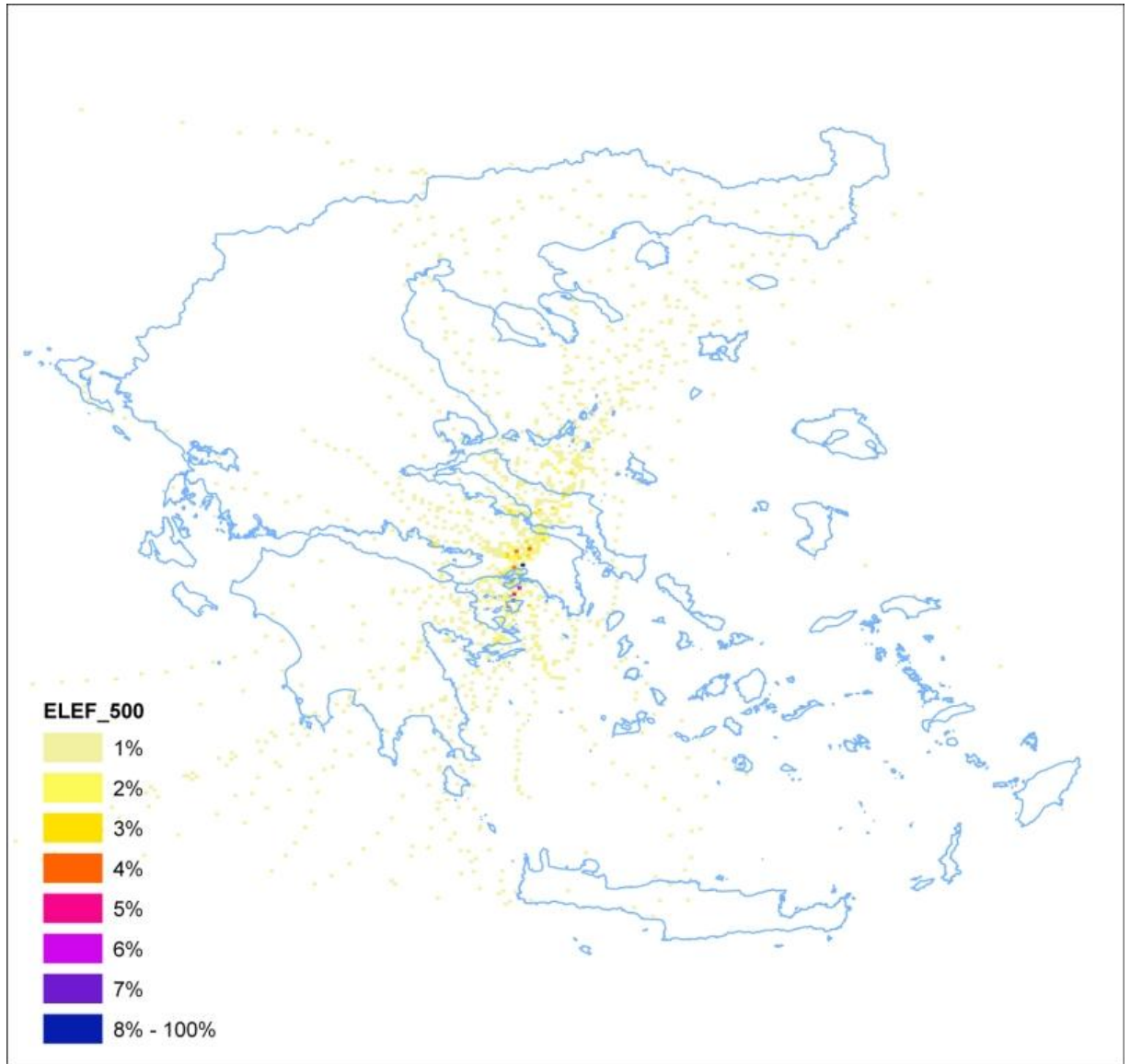
ΕΙΚΟΝΑ 7.15: Κατανομή και ποσοστά των ρύπων για τη περιοχή της Αριστοτέλους σε ύψος 500 m.



ΕΙΚΟΝΑ 7.16: Κατανομή και ποσοστά των ρύπων για τη περιοχή της Ελευσίνας σε ύψος 10 m.



ΕΙΚΟΝΑ 7.17: Κατανομή και ποσοστά των ρύπων για τη περιοχή της Ελευσίνας σε ύψος 100 m.



ΕΙΚΟΝΑ 7.18: Κατανομή και ποσοστά των ρύπων για τη περιοχή της Ελευσίνας σε ύψος 500 m.

ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΙ

Ελληνικοί Χαρακτήρες

A : αντιστάθμιση πίεσης / άνωση

B : τιμή σίγμα από 0-1

E : συντελεστής ανταλλαγής

H : λογική ροή θερμότητας

\bar{H} : ύψος κατακόρυφης έκτασης ρύπου

K : παράγοντας επαναιώρησης

Λ : συντελεστής απόπλυσης ρύπου / μοριακή μέση ελεύθερη διαδρομή

T_* : θερμοκρασία τριβής

T_v : εικονική θερμοκρασία υγρού αέρα

M : ποσότητα συστατικού στην ατμόσφαιρα [kg]

MB : μοριακό βάρος αέρα

MB_i : μοριακό βάρος συστατικού i

$N(t)$: αριθμός ραδιενεργών πυρήνων στη μονάδα του όγκου τη χρονική στιγμή t

α : συντελεστής μορφής

η : επιλεγμένη επιφάνεια

θ : δυνητική θερμοκρασία

λ : σταθερά διάσπασης

μ : δυναμικό ιξώδες

ν : κινηματικό ιξώδες

ρ : πυκνότητα μείγματος / πυκνότητα αέρα σε ύψος z [kg/m³]

σ : ισότιμο σύστημα εσωτερικού μοντέλου διασποράς εδάφους

τ : χρόνος ζωής

φ : κανονικοποιημένο προφίλ

ω_v : κλασματικός όγκος υδρατμών [% ppm]

Αγγλικοί Χαρακτήρες

BL : οριακό στρώμα (Boundary Layer)

C : στιγμιαία συγκέντρωση του ρύπου [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]

C_0 : αρχική συγκέντρωση

C_i : συγκέντρωση συστατικού [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] ή [mg/m^3]

C_p : σταθερά θερμότητας για ξηρό αέρα [$\text{J kg}^{-1} \text{K}$]

C_s : διόρθωση ολίσθησης

C_g : συγκέντρωση ρύπου κοντά στο έδαφος [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]

D : συντελεστής μοριακής διάχυσης του ρύπου στην ατμόσφαιρα [m^2/s]

D_{hx} : λόγος διάχυσης του ατμού του νερού ως προς το ρύπο

$D_{wet+dry}$: συνολική εναπόθεση σε ένα χρονικό βήμα

Z_{top} : κορυφή του ισότιμου συστήματος του μοντέλου διασποράς

Z_{model} : όλα τα επίπεδα του μοντέλου

Z_{data} : χαμηλότερο επίπεδο δεδομένων

Z_0 : μήκος τραχύτητας

Z_h : μήκος τραχύτητας για θερμότητα

Z_i : βάθος οριακού στρώματος

Z_p : ύψος επιφάνειας πίεσης [m]

Z_g : ύψος επιφάνειας εδάφους [m]

E_s : αναλογία κορεσμού [h Pa]

F : συνισταμένη δύναμη που ασκείται στη μάζα / ροή απομάκρυνσης συστατικού από την ατμόσφαιρα [kg/s]

F_i : συνολική στιγμιαία πυκνότητα ροής του ρύπου

\bar{F}_i : μέση πυκνότητα ροής μάζας του ρύπου

$F_{i,conv}$: στιγμιαία πυκνότητα ροής της μάζας του ρύπου λόγω μεταφοράς [$\mu\text{g}/\text{m}^2\text{s}$]

$F_{i,diff}$: στιγμιαία πυκνότητα ροής της μάζας του ρύπου λόγω διάχυσης [$\mu\text{g}/\text{m}^2\text{s}$]

F_d : ροή ξηράς εναπόθεσης του ρύπου στο έδαφος [$\mu\text{g}/\text{m}^2\text{s}$]

G : παράμετρος ηλιακής ακτινοβολίας στην επιφάνεια της γης

G_M : παραγωγή μηχανικής τυρβώδους κινητικής ενέργειας

K_i : συντελεστής κάθετης διάχυσης

L : μήκος Obukhov

L_0 : τοπικό μήκος Obukhov

P_1 : πίεση επιπέδου 1 [N m^{-2}]

P : τοπική πίεση [N m^{-2}]

Pr : αριθμός Prandtl

Q : ειδική υγρασία / πηγές [$\mu\text{g}/\text{m}^3\text{s}$]

R : συντελεστής αυτοσυσχέτισης

R_r : ακτίνα της Γης [m]

R_a : ατμοσφαιρική αντίσταση

R_c : συνολική αντίσταση

R_i : ελάχιστη αντίσταση ατμού νερού

R_d : σταθερά αερίων για ξηρό αέρα [$\text{J kg}^{-1} \text{K}$]

R'_b : αριθμός όγκου Richardson

R_b : παράμετρος για την αντιστάθμιση του R'_b με το αυξανόμενο βάθος στρώματος

RH : σχετική υγρασία

S_t : αριθμός Stokes

S_c : αριθμός Schmidt

S : ηλιακή σταθερά

S : σταθερά μέσου ποσοστού απομάκρυνσης όγκου

T_v : πραγματική θερμοκρασία [K]

T_{01} : μέση θερμοκρασία ανάμεσα στα δύο πιο χαμηλά επίπεδα δεδομένων [K]

T_0 : θερμοκρασία επιφάνειας [K]

T_1 : θερμοκρασία επιπέδου 1 [K]

T_{Lw} : λανγκρατζιανή χρονική κλίμακα

U_{model} : ταχύτητα ανέμου χαμηλού επιπέδου [m s]

U_{max} : μέγιστη ταχύτητα μεταφοράς σωματιδίου/αερίου [m s]

δV : στοιχειώδης όγκος μείγματος

V_g : ταχύτητα καθίζησης

V_s : τελική ταχύτητα καθίζησης / όγκος στοιχειώδους μάζας

V_{inc} : υγρή ταχύτητα εναπόθεσης

W_a : μοριακό βάρος αέρα

W_η : ταχύτητα που απαιτείται για να διατηρηθεί το κομμάτι πάνω στην επιλεγμένη επιφάνεια [m s]

W_p : μοριακό βάρος ρύπου

W_σ : μετρήσεις σίγμα [s^{-1}]

W_* : ταχύτητα κλίμακας συναγωγής

X : μέγεθος πλέγματος μετεωρολογικών δεδομένων

Δ_c : συνεισφορά συγκέντρωσης κάθε αερίου

Δx : οριζόντια διάσταση κελιού πλέγματος

Δy : κάθετη διάσταση κελιού πλέγματος

Δz : ύψος κελιού πλέγματος

ΔZ_p : βάθος στρώματος επιφάνειας

ψ_h : διόρθωση σταθερότητας

u : μέση ταχύτητα ανέμου

u_* : ταχύτητα τριβής

u_i : στιγμιαία ταχύτητα του αέρα στη διεύθυνση i [m/s]

z : ύψος [km ή m]

k : εσωτερικός δείκτης πρότυπου μοντέλου / σταθερά Von Karman

k_b : σταθερά Boltzmann

k_1 : συντελεστής μετατροπής

a : σταθερά

b : σταθερά

c : σταθερά

g : επιτάχυνση βαρύτητας [ms^2]

d_p : διάμετρος σωματιδίου

i : συστατικό

m : προφίλ ορμής

δm : μάζα μείγματος

δm_i : μάζα ρευστού

h : προφίλ θερμότητας

p : μερική πίεση /ατμοσφαιρική πίεση [Pa]

p_i : μερική πίεση συστατικού i

p_v : μερική πίεση υδρατμών

p_s : μερική πίεση κορεσμού υδρατμών

$p_v(z)$: μερική πίεση των υδρατμών στο ύψος z

p_{v0} : μερική πίεση υδρατμών στην επιφάνεια του εδάφους

q_i : κλασματική μάζα

q_v : ειδική υγρασία

q : αριθμός Eiden

x : η απόσταση από το κέντρο του αερίου έως το κόμβο του πλέγματος

w_i : συντελεστής κάθετης ανάμιξης

ω_i : κλασματικός όγκος συστατικού i [% ppm ή % ppb]

σ_w^2 : διακύμανση κάθετης ταχύτητας

β_{dry} : χρονική σταθερά ξηρής εναπόθεσης

β_{gas} : χρονική σταθερά υγρής απομάκρυνσης για αέρα

β_{inc} : χρονική σταθερά υγρής απομάκρυνσης σωματιδίων μέσα στο νέφος

β_{bel} : χρονική σταθερά υγρής απομάκρυνσης σωματιδίων κάτω από το νέφος

β_{rad} : σταθερά διάσπασης για ραδιενεργές διαδικασίες

ρ_g : πυκνότητα σωματιδίου

ρ_s : πυκνότητα στοιχειώδους μάζας

v_d : ταχύτητα ξηράς εναπόθεσης

v_w : ταχύτητα υγρής εναπόθεσης

Βιβλιογραφία

1. Potential source contribution function analysis and source apportionment of sulfur species measured at Rubidoux, CA during the Southern California Air Quality Study, 1987. Ning Gao, Meng-Dawn Cheng and Philip K. Hopke.
2. Evaluation of the potential source contribution function using the 2002 Quebec forest fire episode. Bilkis Ara Begum, Eugene Kim, Cheol-Heon Jeong, Doh-Won Lee, Philip K. Hopke.
3. Identification of sources of pollutants in precipitation measured at the mid-Atlantic US coast using potential source contribution function (PSCF). Derrick Lucey, Lubomir Hadjiiski, Philip K. Hopke, Joseph R. Scudlark, Thomas Church.
4. Atmospheric Environment. Uwayemi M. Sofowote, Hayley Hung, Ankit K. Rastogi, John N. Westgate, Patric F. Deluca, Yushan Su, Brian E. McCarry.
5. Assessing the long-range transport of PAH to a sub-Arctic site using positive matrix factorization and potential source contribution function. Uwayemi M. Sofowote, Hayley Hung, Ankit K. Rastogi, John N. Westgate, Patric F. Deluca, Yushan Su, Brian E. McCarry.
6. Description of the HYSPLIT_4 modeling system. Roland R. Draxler, G. D. Hess.
7. Andronopoulos S., (1992), “A review of vapour cloud dispersion models”, Report EUR 143 29 EN.
8. Baas de A.F., Dop Van Han and Nieuwstadt F.T.M., (1986), “An application of Langevin Equation for inhomogeneous condition to dispersion in a convective boundary layer”, Quar. J.R. Met. Soc. 112, pp. 165-180.
9. Bartzis J. G. (1991), “ADREA-HF. A three-dimensional finite volume code for vapour cloud dispersion in complex terrain”, JRC ISPRA Report, EUR 13580.
10. Bartzis J.G, Varvayanni M., Venetsanos A., Catsaros N., Housiadas C., Horsch G., Statharas J., Amanatidis G.T., Megaritou A., Konte

K.,(1993), “ADREA-I: A three-dimensional finite volume transport code for mesoscale atmospheric transport (The cartesian version)”, Part I: THE MODEL DESCRIPTION, NCSR “Demokritos”, DEMO 93/2 pt. 1.

11. Kunsch J.P., Fanelop T.K., (1995), “Unsteady heat transfer effects on the spreading and dilution of dense cold clouds”, Journal of Hazardous materials, 45, pp. 169-193.

12. Ανάπτυξη επιχειρησιακού συστήματος πρόγνωσης ατμοσφαιρικής ρύπανσης στην ευρύτερη περιοχή της Αττικής.