

4

Θεωρία Βαθμωτής Μεταφοράς

Όπως αναφέρθηκε στο πρώτο κεφάλαιο, η διάχυση των ρύπων περιορίζεται κυρίως μέσα στο χαμηλότερο τμήμα της τροπόσφαιρας, το στρώμα ανάμειξης. Το σημαντικότερο χαρακτηριστικό του στρώματος αυτού είναι ο τυρβώδης χαρακτήρας της ροής που επικρατεί εκεί. Η τυρβώδης ροή χαρακτηρίζεται από ακανόνιστες, σχεδόν τυχαίες διακυμάνσεις στις ατμοσφαιρικές μεταβλητές, όπως η ταχύτητα και η διεύθυνση του ανέμου, η θερμοκρασία και οι συγκεντρώσεις διαφόρων ιχνοστοιχείων. Ο ακανόνιστος χαρακτήρας των διακυμάνσεων αυτών δημιουργεί μεγάλες δυσκολίες στην θεωρητική ανάλυση της διάχυσης υλικού. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα οι θεωρίες που αναπτύχθηκαν να έχουν ημι-εμπειρικό χαρακτήρα.

Η θεωρητική μελέτη της διάχυσης σε τυρβώδη ροή έχει αναπτυχθεί σε τρεις γενικές κατευθύνσεις, την θεωρία βαθμωτής μεταφοράς (gradient transfer theory), την στατιστική θεωρία (statistical theory) και τη θεωρία ομοιότητας (similarity theory). Η **θεωρία βαθμωτής μεταφοράς** χρησιμοποιείται ευρύτατα σε πολλές εφαρμογές στη μετεωρολογία και την ατμοσφαιρική διάχυση, και βασίζεται σε ένα συγκεκριμένο φυσικό μοντέλο όσον αφορά την ανάμειξη. Πιο συγκεκριμένα, η βασική υπόθεση στην οποία βασίζεται η θεωρία αυτή είναι ότι η τύρβη δημιουργεί μία ροή υλικού αντίθετα προς την φορά της βαθμίδας της συγκέντρωσης του υλικού. Η ροή αυτή είναι ευθέως ανάλογη προς το μέγεθος της βαθμίδας. Τα βασικά χαρακτηριστικά των θεωριών βαθμωτής μεταφοράς παρουσιάζονται αναλυτικότερα στην συνέχεια αυτού του κεφαλαίου. Η θεμελίωση της **στατιστικής θεωρίας** βασίζεται στον στοχαστικό (τυχαίο) χαρακτήρα των τυρβωδών κινήσεων που ευθύνονται για τη διάχυση. Έτσι η συμπεριφορά (τροχιά) συγκεκριμένων στοιχείων της ροής μπορεί να περιγραφεί από μια στατιστική συνάρτηση η οποία βασίζεται στις στατιστικές ιδιότητες της ροής. Στην **θεωρία ομοιότητας** ορίζονται πρώτα οι βασικές, ρυθμιστικές, παράμετροι και κατόπιν αναπτύσσονται φυσικοί νόμοι οι οποίοι συνδέουν την διάχυση με αυτές τις παραμέτρους. Η ανάπτυξη αυτών των νόμων ομοιότητας βασίζεται σε μια τεχνική η οποία ονομάζεται διαστατική ανάλυση στα πλαίσια της οποίας παράγονται αδιάστατες ποσότητες από τις υπό μελέτη μεταβλητές μέσω της κανονικοποίησης τους.

Οι θεωρίες αυτές αναπτύχθηκαν τον 20^ο αιώνα και αποτελούν ακόμη τη βάση για την θεωρητική περιγραφή της ατμοσφαιρικής διάχυσης. Η σημαντικότερη εξέλιξη τις τελευταίες δεκαετίες είναι η ανάπτυξη αριθμητικών μοντέλων τα οποία χρησιμοποιούν βασικές εξισώσεις οι οποίες βασίζονται στις αρχές διατήρησης της φυσικής. Το πρόβλημα σε αυτή την περίπτωση μετατοπίζεται στην παραμετροποίηση ορισμένων αγνώστων όρων που υπάρχουν σε αυτές τις εξισώσεις. Η παραμετροποίηση αυτή γίνεται συνήθως από μια εξελιγμένη μορφή της θεωρίας βαθμωτής μεταφοράς.

4.1 Συγκέντρωση και ροή ρύπων

Η πρωτεύουσα μεταβλητή που περιγράφει τα επίπεδα ρύπανσης στην ατμόσφαιρα είναι η συγκέντρωση των ρύπων. Η συγκέντρωση μπορεί να περιγραφεί είτε κατ' όγκο (π.χ. μέρη το δισεκατομμύριο, ppb, και μέρη το εκατομμύριο, ppm) είτε κατά βάρος (μάζα ρύπου ανά μονάδα όγκου αέρα, $\mu\text{g}/\text{m}^3$). Η συγκέντρωση των αιωρούμενων σωματιδίων εκφράζεται πάντα σε $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ενώ η συγκέντρωση των αερίων ρύπων συναντάται είτε σε μονάδες κατά βάρος είτε σε μονάδες κατ' όγκο. Η σχέση ανάμεσα στις διάφορες μονάδες μέτρησης της συγκέντρωσης των ατμοσφαιρικών ρύπων περιγράφεται στο κεφάλαιο 7.4.

Η ροή ενός ρύπου στην ατμόσφαιρα (ή σε κάποιο άλλο ρευστό) είναι η ποσότητα του ρύπου η οποία μεταφέρεται ανά μονάδα επιφανείας, ανά μονάδα χρόνου σε μια συγκεκριμένη διεύθυνση. Όπως η ροή θερμότητας και ορμής έτσι και η ροή μάζας είναι ένα διανυσματικό μέγεθος. Αποτελείται από δύο μέρη, την μεταφορά λόγω της ροής και την μεταφορά λόγω διάχυσης. Η μεταφορά λόγω της ροής ισούται με την συγκέντρωση του ρύπου επί το διάνυσμα της ταχύτητας. Όταν η ταχύτητα μηδενίζεται τότε και η μεταφορά λόγω ροής μηδενίζεται. Η μεταφορά λόγω διάχυσης υπάρχει και όταν η ροή είναι μηδενική. Η επίδραση της διάχυσης είναι μηδενική μόνο όταν ο αέρας είναι καλά αναμεμιγμένος και η βαθμίδα της συγκέντρωσης είναι μηδενική.

4.2 Στατιστική περιγραφή των τυρβωδών διακυμάνσεων

Όπως προαναφέρθηκε, η ροή στο κατώτερο τμήμα της ατμόσφαιρας (το οποίο ονομάζεται στρώμα ανάμειξης ή ατμοσφαιρικό οριακό στρώμα) είναι τυρβώδης. Η τύρβη είναι υπεύθυνη για την αποτελεσματική διάχυση των ρύπων μέσα στο στρώμα αυτό. Για τον λόγο αυτό, ο υπολογισμός της διάχυσης απαιτεί γνώση των χαρακτηριστικών των τυρβωδών διακυμάνσεων. Ο τυχαίος χαρακτήρας των διακυμάνσεων αυτών δημιουργεί θεμελιώδη προβλήματα στη μαθηματική περιγραφή

τους οπότε αντί τον ακριβή υπολογισμό των τιμών των μεταβλητών στον χώρο και τον χρόνο επιλέγουμε να υπολογίσουμε κάποια στατιστικά χαρακτηριστικά τους.

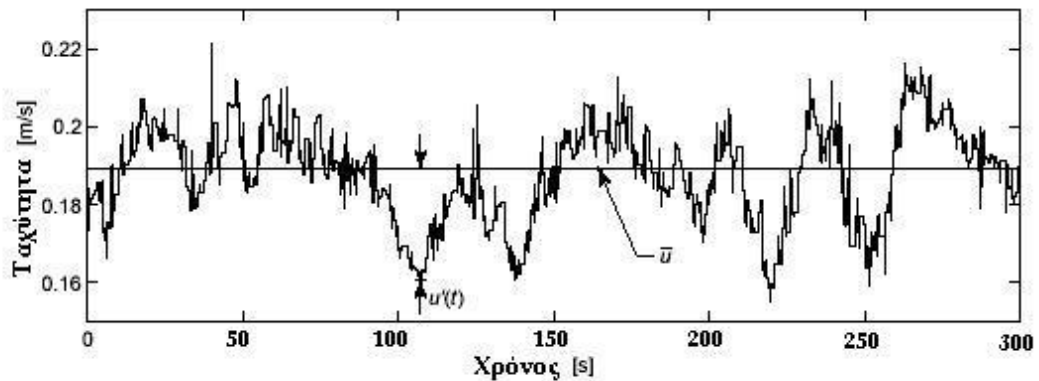
Η στατιστική περιγραφή της τύρβης βασίζεται συνήθως στο διαχωρισμό του τυρβώδους τμήματος της ροής από το μέσο, μη-τυρβώδες (μεγάλης κλίμακας). Η προσέγγιση αυτή χρησιμοποιήθηκε για πρώτη φορά το 1895 από τον Osborne Reynolds και συνεχίζει μέχρι και σήμερα να είναι η επικρατέστερη μέθοδος για την ποσοτική επεξεργασία των τυρβωδών ροών. Η μέθοδος βασίζεται στην παρακάτω γενική εξίσωση:

$$A = \bar{A} + a' \quad (4.1)$$

όπου A είναι η στιγμιαία τιμή κάποιας ατμοσφαιρικής μεταβλητής, \bar{A} είναι η μέση τιμή της μεταβλητής και a' είναι η στιγμιαία απόκλιση της. Με αυτό τον τρόπο μπορούμε να χωρίσουμε όλες τις σχετικές ατμοσφαιρικές μεταβλητές στις μέσες τιμές τους και τις τυρβώδεις αποκλίσεις:

$$\begin{aligned} u &= \bar{u} + u' \\ v &= \bar{v} + v' \\ w &= \bar{w} + w' \\ \theta &= \bar{\theta} + \theta' \\ \chi &= \bar{\chi} + \chi' \end{aligned} \quad (4.2)$$

όπου u, v και w είναι οι τρεις συνιστώσες του ανέμου, αντίστοιχα, θ είναι η δυναμική θερμοκρασία, και χ είναι η συγκέντρωση κάποιου συστατικού της ατμόσφαιρας (π.χ. κάποιου ρύπου).



Σχήμα 4.1 Παράδειγμα μετρήσεων γρήγορης απόκρισης της ταχύτητας του αέρα. Στο σχήμα φαίνεται η μέση τιμή για χρονικό διάστημα 3 λεπτών όπως και ένα παράδειγμα στιγμιαίας απόκλισης.

Η μέση τιμή της μεταβλητής A ορίζεται από την σχέση:

$$\bar{A} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A_i \quad (4.3)$$

όπου η μεταβλητή A μπορεί να είναι συνάρτηση του χρόνου, του χώρου ή και των δύο.

Η μέση τιμή της μεταβλητής μπορεί να ορισθεί σαν:

- η χρονική μέση τιμή,
- η χωρική μέση τιμή, ή
- η μέση τιμή συνόλου.

Η χρονική μέση τιμή αναφέρεται σε ένα συγκεκριμένο σημείο στο χώρο και υπολογίζεται από το άθροισμα των τιμών της μεταβλητής A για μια χρονική περίοδο T . Είναι ο πιο συνηθισμένος τρόπος υπολογισμού της μέσης τιμής ατμοσφαιρικών παραμέτρων λόγω του γεγονότος ότι οι περισσότερες μετρήσεις γίνονται σε συνεχή βάση σε κάποιο σταθερό σημείο στο χώρο (χρονοσειρές μετρήσεων). Χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι η μέτρηση του ανέμου με ένα ακουστικό ανεμόμετρο το οποίο τοποθετείται πάνω σε ένα ιστό και μετράει τις τρεις συνιστώσες του ανέμου με συχνότητα 20 Hz (20 φορές το δευτερόλεπτο). Η μέση τιμή κάθε μίας

από τις μεταβλητές υπολογίζεται για ένα συγκεκριμένο χρονικό διάστημα, το οποίο για ατμοσφαιρικές εφαρμογές είναι συνήθως $T = 10^3-10^4$ δευτερόλεπτα. Σε αυτό το διάστημα συλλέγονται 20000-200000 στιγμιαίες τιμές της κάθε μεταβλητής αντίστοιχα. Οι μετεωρολογικές μετρήσεις ρουτίνας συλλέγονται με πολύ χαμηλότερη συχνότητα (συνήθως $\sim 1-60$ s) και η μέση τιμή για το ίδιο διάστημα, T , υπολογίζεται από πολύ μικρότερο αριθμό στιγμιαίων τιμών.

Το χρονικό διάστημα υπολογισμού της μέσης τιμής πρέπει να επιλεγεί κατάλληλα για να προκύψει μία ικανοποιητική και χωρίς μεγάλες διακυμάνσεις μέση τιμή χωρίς όμως να συγκαλύπτονται σημαντικές μεταβολές όπως π.χ. ο ημερήσιος κύκλος των μεταβλητών του ατμοσφαιρικού οριακού στρώματος. Για τις περισσότερες εφαρμογές, η μέση τιμή για χρονικά διαστήματα ~ 1 ώρας (ή λίγο μικρότερο) θεωρείται ότι παρουσιάζει μικρές, σχετικά, διακυμάνσεις στον χρόνο ενώ η στιγμιαία απόκλιση παρουσιάζει μεγάλες διακυμάνσεις ακόμη και σε μικρές χρονικές κλίμακες, μόλις λίγων δευτερολέπτων. Πρέπει πάντως να τονισθεί ότι η χρονική κλίμακα των διακυμάνσεων εξαρτάται από το ύψος στο οποίο γίνονται οι μετρήσεις καθώς και από τις συνθήκες που επικρατούν στην ατμόσφαιρα (κυρίως τις συνθήκες ευστάθειας και το ύψος του ατμοσφαιρικού οριακού στρώματος). Η εκλογή του χρονικού διαστήματος υπολογισμού της μέσης τιμής θα πρέπει επίσης να λαμβάνει υπόψη τόσο τις ιδιαίτερες συνθήκες όσο και τις απαιτήσεις της εφαρμογής για την οποία πραγματοποιούνται οι μετρήσεις. Ιδιαίτερα όταν οι μετρήσεις πραγματοποιούνται για την μελέτη/παρακολούθηση της ποιότητας αέρα η εκλογή του χρονικού διαστήματος θα πρέπει να είναι συμβατή με την αντίστοιχη των συγκεντρώσεων των ρύπων και των παραμέτρων διασποράς. Στις περισσότερες περιπτώσεις, οι μέσες τιμές υπολογίζονται για χρονικά διαστήματα 1 ώρας.

Η χωρική μέση τιμή υπολογίζεται από μετρήσεις οι οποίες πραγματοποιούνται ταυτόχρονα σε διαφορετικά σημεία στο χώρο. Αυτό μπορεί να γίνει π.χ., είτε χρησιμοποιώντας έναν αριθμό από αισθητήρες τοποθετημένους σε διαφορετικά γεωγραφικά σημεία είτε από έναν αισθητήρα τοποθετημένο σε μια πλατφόρμα που κινείται πολύ γρήγορα, συνήθως αεροπλάνο, και μπορεί να πραγματοποιεί σχεδόν ταυτόχρονες μετρήσεις σε διαφορετικά γεωγραφικά σημεία. Παλιότερα, αυτός ο τύπος μετρήσεων δεν ήταν πολύ συνηθισμένος λόγω μεγάλων απαιτήσεων σε αριθμό αισθητήρων και του αντίστοιχου οικονομικού κόστους. Τις τελευταίες λίγες δεκαετίες όμως, η χωρική μέση τιμή χρησιμοποιείται ευρέως στην ανάλυση δεδομένων τηλεπισκόπισης (RADAR, LIDAR, SODAR).

Ο μέσος όρος συνόλου αναφέρεται σε μετρήσεις που πραγματοποιούνται κάτω από ταυτόσημες συνθήκες. Αυτό μπορεί να επιτευχθεί μέσα σε ένα εργαστήριο όπου οι συνθήκες είναι ελεγχόμενες και μπορούμε να επαναλαμβάνουμε το ίδιο πείραμα πολλές φορές. Η κατάσταση στην ατμόσφαιρα είναι διαφορετική και είναι πρακτικά απίθανο να πραγματοποιήσουμε τις μετρήσεις σε επαναλαμβανόμενες καιρικές συνθήκες.

Από τους παραπάνω εναλλακτικούς τρόπους προσδιορισμού της μέσης τιμής των ποσοτήτων του ατμοσφαιρικού οριακού στρώματος ο χρονικός μέσος όρος είναι με μεγάλη διαφορά ο δημοφιλέστερος ενώ ο μέσος όρος συνόλου είναι προτιμητέος από θεωρητική πράξη αλλά δεν έχει εφαρμογή στην καθημερινή πρακτική. Το γεγονός ότι διαφορετικοί τύποι μέσων τιμών χρησιμοποιούνται στην θεωρία και στις μετρήσεις εισάγει μια πρόσθετη αβεβαιότητα στους υπολογισμούς μας.

Στους υπολογισμούς εφαρμόζονται οι παρακάτω κανόνες:

$$\overline{\bar{u}} = \bar{u}, \quad \overline{u'} = 0, \quad \overline{\bar{u} \cdot \bar{v}} = \bar{u} \cdot \bar{v}, \quad \overline{u \cdot u'} = 0, \quad \overline{u \cdot v} = \bar{u} \cdot \bar{v} + \overline{u' \cdot v'} \quad (4.4)$$

Μία άλλη σημαντική παράμετρος για την περιγραφή της τύρβης είναι η μεταβλητότητα η οποία ορίζεται από την εξίσωση:

$$\sigma_A^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (A_i - \bar{A})^2 = \overline{a'^2} \quad (4.5)$$

Σε πολλές περιπτώσεις, για λόγους ευκολίας, η μεταβλητότητα υπολογίζεται χρησιμοποιώντας το N και όχι το N-1 στον παρανομαστή της εξίσωσης (4.5). Αυτό πρακτικά δεν αλλάζει το αποτέλεσμα λόγω των μεγάλων τιμών του N.

Οι μεταβλητότητες των διαφόρων ποσοτήτων του ατμοσφαιρικού οριακού στρώματος θεωρούνται ότι αποτελούν ένα μέτρο της έντασης της τύρβης.

Η τυπική απόκλιση ορίζεται σαν η τετραγωνική ρίζα της μεταβλητότητας:

$$\sigma_A = \sqrt{\sigma_A^2} = \left(\overline{a'^2}\right)^{1/2} \quad (4.6)$$

Η τυπική απόκλιση έχει τις ίδιες διαστάσεις όπως η ίδια η μεταβλητή και είναι ένα μέτρο της διασποράς των τιμών από την μέση τιμή. Για παράδειγμα, η τυπική απόκλιση της ταχύτητας του ανέμου μπορεί να θεωρηθεί σαν η μέση ριπή του ανέμου. Γενικά πάντως, μεγάλες τιμές της τυπικής απόκλισης σημαίνουν έντονες τυρβώδεις κινήσεις.

Η συμμεταβλητότητα υποδεικνύει το βαθμό της κοινής μεταβολής μεταξύ δύο μεταβλητών και ορίζεται από την σχέση:

$$\text{cov ar}(A, B) = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} (A_i - \bar{A}) \cdot (B_i - \bar{B}) = \overline{a' \cdot b'} \quad (4.7)$$

Οι συμμεταβλητότητες μεταξύ των διαφόρων μεταβλητών είναι εξαιρετικής σημασίας για την μελέτη του ατμοσφαιρικού οριακού στρώματος γενικότερα αλλά και της διάχυσης μέσα σε αυτό. Όταν μία από τις μεταβλητές είναι η ταχύτητα, π.χ. η A είναι η κατακόρυφη ταχύτητα του ανέμου, τότε η συμμεταβλητότητα $\overline{a' \cdot b'}$ αντιπροσωπεύει την τυρβώδη ροή της B . Ιδιαίτερη σημασία έχουν οι συμμεταβλητότητες των διαφόρων μεταβλητών με την στιγμιαία απόκλιση της κατακόρυφης συνιστώσας του ανέμου, w' . Για παράδειγμα $\overline{w' \cdot \theta'}$ είναι η κατακόρυφη τυρβώδης ροή της θερμότητας (πιο συγκεκριμένα η κινηματική ροή θερμότητας με μονάδες $K \cdot m/s$) και $\overline{w' \cdot \chi'}$ είναι η αντίστοιχη ροή της μάζας ενός ρύπου με συγκέντρωση χ .

Οι συμμεταβλητότητες με την μεγαλύτερη σημασία στη μελέτη του ατμοσφαιρικού οριακού στρώματος είναι αυτές που προκύπτουν από το προϊόν της τυρβώδους κατακόρυφης ταχύτητας, w' , με τις άλλες μεταβλητές (π.χ. θ' , u' , χ' κτλ). Ο λόγος είναι ότι η μέση κατακόρυφη ταχύτητα, \overline{w} , είναι περίπου ίση με το μηδέν στο μεγαλύτερο μέρος του ατμοσφαιρικού οριακού στρώματος. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα οι κατακόρυφες ροές στο ατμοσφαιρικό οριακό στρώμα να κυριαρχούνται από την τυρβώδη συνιστώσα τους. Αντίθετα, στις οριζόντιες ροές έχουν σημαντική συνεισφορά τόσο ο μέσος άνεμος όσο και οι τυρβώδεις κινήσεις.

4.3 Βασικό πρότυπο βαθμωτής μεταφοράς.

Η διαφορική εξίσωση από την οποία ξεκινούν οι περισσότερες μαθηματικές προσεγγίσεις του προβλήματος της διάχυσης βασίζεται στην αρχή διατήρησης της μάζας. Αν χ είναι η συγκέντρωση ενός ρύπου (μάζα ανά μονάδα όγκου) τότε η παρακάτω εξίσωση εκφράζει την μεταβολή της με τον χρόνο:

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} = - \left[\frac{\partial(u\chi)}{\partial x} + \frac{\partial(v\chi)}{\partial y} + \frac{\partial(w\chi)}{\partial z} + R + S \right] \quad (4.8)$$

όπου το R αντιπροσωπεύει τον ρυθμό μεταβολής της συγκέντρωσης λόγω χημικών μετασχηματισμών ενώ το S αντιπροσωπεύει τον ρυθμό εκπομπής ή καταστροφής του ρύπου.

Αν στην παραπάνω εξίσωση σχηματίσουμε την μέση τιμή και εισάγουμε τις εξισώσεις (4.2) τότε λαμβάνουμε:

$$\frac{\partial \bar{\chi}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial z} = - \left[\frac{\partial(\bar{u}'\chi')}{\partial x} + \frac{\partial(\bar{v}'\chi')}{\partial y} + \frac{\partial(\bar{w}'\chi')}{\partial z} \right] + \bar{R} + \bar{S} \quad (4.9)$$

Η ιδιαιτερότητα της εξίσωσης (4.9) βρίσκεται στο γεγονός της εμφάνισης των τριών συμμεταβλητοτήτων στην δεξιά μεριά της εξίσωσης οι οποίες, όπως προαναφέρθηκε, εκφράζουν την τυρβώδη μεταφορά της μάζας του ρύπου. Προκειμένου να επιλυθεί αυτή η εξίσωση θα πρέπει να προσδιορισθούν αυτοί οι όροι. Ο απλούστερος και ο πιο δημοφιλής τρόπος παραμετροποίησης αυτών των όρων βασίζεται στη υπόθεση βαθμωτής μεταφοράς. Σύμφωνα με αυτή την προσέγγιση, οι τυρβώδεις ροές μάζας είναι ανάλογες της βαθμίδας της μέσης συγκέντρωσης

$$\bar{u}'\chi' = -K_x \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial x}$$

$$\bar{v}'\chi' = -K_y \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial y} \quad (4.10)$$

$$\bar{w}'\chi' = -K_z \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial z}$$

Οι συντελεστές K_x , K_y και K_z ονομάζονται συντελεστές τυρβώδους διάχυσης ή απλώς συντελεστές K (αντίστοιχα η θεωρία ονομάζεται συχνά θεωρία των K , K -theory).

Αντικαθιστώντας τις εξισώσεις (4.10) στην (4.9) λαμβάνουμε:

$$\frac{\partial \bar{\chi}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial z} = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial z} \right) \right] + \bar{R} + \bar{S} \quad (4.11)$$

Οι όροι της παραπάνω εξίσωσης αντιπροσωπεύουν διαφορετικές ατμοσφαιρικές διεργασίες:

$$\bar{u} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial x}, \bar{v} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial y}, \bar{w} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial z} : \text{Οι τρεις όροι αντιπροσωπεύουν την μεταφορά των ρύπων}$$

από τις τρεις συνιστώσες του μέσου ανέμου.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial x} \right), \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial y} \right), \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial z} \right):$$
 Αντιπροσωπεύουν την διάχυση η

οποία επιτελείται από την ατμοσφαιρική τύρβη. Οι δύο πρώτοι όροι, οι οποίοι περιγράφουν την οριζόντια διάχυση είναι συνήθως πολύ μικρότεροι από τους αντίστοιχους που περιγράφουν τη μεταφορά από τον μέσο άνεμο και σε πολλές εφαρμογές παραλείπονται. Ο τρίτος όρος είναι σημαντικά μεγαλύτερος από τον αντίστοιχο που περιγράφει τη μεταφορά από τον μέσο κατακόρυφο άνεμο.

Αν τα K στην παραπάνω εξίσωση θεωρηθούν σταθερά ανεξάρτητα των x, y και z τότε η απλοποιημένη εξίσωση που προκύπτει ονομάζεται εξίσωση του Fick (η διάχυση αυτή ονομάζεται κατά Fick, Fickian diffusion). Το όνομα προέρχεται από τον Γερμανό φυσιολόγο Adolf Eugen Fick ο οποίος το 1855 παρουσίασε την εξίσωση διάχυσης για ουδέτερο σωματίδιο. Το σημαντικότερο χαρακτηριστικό αυτής της περίπτωσης είναι ότι η κατανομή της ρύπανσης σε ένα θύσανο σε συνάρτηση της απόστασης από τον κεντρικό του άξονα είναι κανονική (δηλ. ακολουθεί το πρότυπο Gauss). Πειραματικά δεδομένα, όμως, δείχνουν ότι τα K μεταβάλλονται συστηματικά με την απόσταση από την πηγή, το ύψος και τις ατμοσφαιρικές συνθήκες. Κατά συνέπεια η προσέγγιση κατά Fick δεν χρησιμοποιείται στις περισσότερες εφαρμογές όπου εφαρμόζονται διάφορες μορφές μεταβλητών K .

4.4 Δισδιάστατη μορφή της εξίσωσης

Η θεωρία βαθμωτής μεταφοράς είναι ιδιαίτερα επιτυχής όταν η ατμοσφαιρική τύρβη είναι μικρής κλίμακας συγκρινόμενη με τις διαστάσεις του θυσάνου. Τυρβώδεις στρόβιλοι μικρής κλίμακας επικρατούν συνήθως σε μικρό ύψος, οπότε το πρότυπο βαθμωτής μεταφοράς είναι ιδιαίτερα αποτελεσματικό όταν η εκπομπή των ρύπων γίνεται κοντά στο έδαφος.

Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα στο οποίο το πρότυπο της βαθμωτής μεταφοράς μπορεί να εφαρμοσθεί με επιτυχία είναι η περίπτωση κατά την οποία υπάρχει στο επίπεδο του εδάφους κάθετα στον άνεμο μια συνεχής γραμμική πηγή πολύ μεγάλου μήκους ($\rightarrow \infty$). Σε αυτή την περίπτωση οι μέσες ταχύτητες \bar{v} και \bar{w} είναι μηδενικές και αν υποθέσουμε ότι οι συγκεντρώσεις δεν μεταβάλλονται με τον χρόνο ($\partial \bar{\chi} / \partial t = 0$), η εξίσωση (4.11) για ένα αδρανή ρύπο μειώνεται στην παρακάτω

$$\bar{u} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial z} \right) \quad (4.12)$$

Υποθέτοντας ότι ο συντελεστής ανταλλαγής K και ο άνεμος ακολουθούν ένα εκθετικό νόμο μπορούμε να γράψουμε ότι

$$K_z(z) = K_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^n \quad (4.13)$$

$$\bar{u}(z) = \bar{u}_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^m \quad (4.14)$$

όπου τα K_1 και \bar{u}_1 είναι οι τιμές των K_z και \bar{u} σε ένα ύψος αναφοράς z_1 και τα m και n είναι συντελεστές που δεν εξαρτώνται από το ύψος. Οι παρακάτω οριακές συνθήκες ισχύουν σε αυτή την περίπτωση:

$$\bar{\chi} \rightarrow 0 \text{ όπως τα } x, z \rightarrow \infty \quad (4.15)$$

$$\bar{\chi} \rightarrow \infty \text{ στο } x=z=0 \quad (4.16)$$

$$K_z \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial z} \rightarrow 0 \text{ όπως το } z \rightarrow 0, x \geq 0 \quad (4.17)$$

και

$$\int_0^{\infty} \bar{u} \cdot \overline{\chi(x, z)} dz = Q \quad (4.18)$$

όπου Q είναι ο ρυθμός εκπομπής ανά μονάδα μήκους της γραμμικής πηγής.

Η λύση της εξίσωσης είναι

$$\overline{\chi(x, z)} = \frac{Q \cdot r}{z_1 \cdot u_1 \Gamma(s)} \left[\frac{z_1^2 \cdot \bar{u}_1}{r^2 \cdot K_1 \cdot x} \right]^s \exp \left[\frac{z_1^{2-r} \cdot \bar{u}_1 \cdot z^r}{r^2 \cdot K_1 \cdot x} \right] \quad (4.19)$$

όπου $r=m-n+2>0$, $s=(m+1)/r$ και Γ είναι η συνάρτηση Γάμμα. Αντιπροσωπευτικές τιμές των παραμέτρων παρουσιάζονται στον πίνακα 4.1

ΠΙΝΑΚΑΣ 4.1

Συνάρτηση Γάμμα για τυπικές τιμές του s

m	N	S	$\Gamma(s)$
0.9	0.1	0.679	1.33
0.8	0.2	0.692	1.31
0.7	0.3	0.708	1.29
0.6	0.4	0.727	1.26
0.5	0.5	0.750	1.23
0.4	0.6	0.778	1.19
0.3	0.7	0.813	1.15
0.2	0.8	0.857	1.11
0.1	0.9	0.917	1.06
0	0	0.5	1.77

4.5 Παραμετροποίηση των συντελεστών τυρβώδους διάχυσης

Οι τρεις συντελεστές τυρβώδους διάχυσης, K_x , K_y και K_z δεν έχουν την ίδια βαρύτητα στους υπολογισμούς διασποράς. Η οριζόντια διάχυση είναι συνήθως σημαντικά μικρότερη της μεταφοράς από τον μέσο οριζόντιο άνεμο. Αντίθετα, η κατακόρυφη διάχυση είναι σε όλες τις περιπτώσεις πολύ σημαντική δεδομένου ότι η μέση ταχύτητα του κατακόρυφου ανέμου κοντά στο έδαφος είναι συνήθως αμελητέα. Κατά συνέπεια είναι απαραίτητο να προσδιορισθεί η τιμή του K_z όπως επίσης και η μεταβολή του με το ύψος μέσα στο στρώμα ανάμειξης.

Όπως προαναφέρθηκε, θεωρώντας ότι οι συντελεστές K δεν μεταβάλλονται στο χώρο και το χρόνο προκύπτει μια απλοποιημένη μορφή της εξίσωσης (4.11). Το σημαντικότερο πλεονέκτημα αυτής της προσέγγισης είναι η απλότητα της τελικής εξίσωσης. Λεπτομερέστερες λύσεις του προβλήματος βασίζονται στην θεωρία ομοιότητας του ατμοσφαιρικού οριακού στρώματος και περιγράφουν τους συντελεστές K σαν συναρτήσεις των βασικών παραμέτρων του οριακού στρώματος οι οποίες μεταβάλλονται τόσο στο χρόνο όσο και στο χώρο. Στο στρώμα επιφανείας (τα κατώτερα 50-100 μέτρα της τροπόσφαιρας) χρησιμοποιούνται σε πολλές περιπτώσεις οι παρακάτω εξισώσεις:

$$K_z = \frac{ku_*z}{\phi_h(z/L)} \quad (4.20)$$

$$\phi_h(z/L) = \left(1 - 16 \frac{z}{L}\right)^{-1/2} \quad (z/L < 0, \text{ αστάθεια}) \quad (4.21)$$

$$\phi_h(z/L) = 1 + 5 \frac{z}{L} \quad (z/L > 0, \text{ ευστάθεια}) \quad (4.22)$$

$$L = - \frac{u_*^3}{(g/\theta)kw'\theta'} \quad (4.23)$$

όπου k είναι η σταθερά von Karman ($=0.4$), u_* είναι η ταχύτητα τριβής και L είναι το μήκος Obukhov.