

مدل سازی انتشار BTEX از یک آشغال سوز صنعتی در شرایط ناپایدار با استفاده از روش عددی تفکیک معادلات

نثارک اسلامی^۱، اسماعیل فاتحی فر^{۲*} و محمدعلی کی نژاد^۳

^۱ دانشجوی دکتری مرکز تحقیقات مهندسی محیط زیست، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی سهند، تبریز
^۲ استاد مرکز تحقیقات مهندسی محیط زیست، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی سهند، تبریز
^۳ استاد مرکز تحقیقات مهندسی محیط زیست، دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه صنعتی سهند، تبریز

(دریافت: ۹۵/۱۱/۲، پذیرش: ۹۶/۷/۱۷، نشر آنلاین: ۹۶/۷/۱۸)

چکیده

به دلیل محدودیت‌های قانونی، پایش انتشار ترکیبات آلی فرار باید از مبدأ صورت پذیرد. از جمله ابزارهای توانمند و قابل اعتماد برای بررسی انتشار و غلظت آلاینده‌ها، مدل‌های پخش آلودگی هوا می‌باشند. هم‌چنین از آنجایی که اندازه‌گیری غلظت آلاینده‌ها در هر نقطه امکان‌پذیر نیست این مدل‌ها می‌توانند برای بررسی و استنتاج غلظت در آن نقاط مورد استفاده قرار گیرند. علی‌رغم تمایل زیاد برای استفاده از یک روش حل عددی بهینه برای مدل‌های پخش آلودگی هوا، به دلیل تنوع فرآیندهای دخیل در پدیده انتقال آلاینده‌ها، انجام این کار امری بسیار پیچیده است. به این منظور می‌توان با استفاده از روش عددی تفکیک معادلات، معادلات دیفرانسیل جزئی توصیف کننده پدیده انتقال آلاینده‌ها را به قسمت‌های کوچک‌تری تقسیم‌بندی نمود. مزیت استفاده از این روش این است که در این حالت می‌توان فرآیندهای فیزیکی و شیمیایی مؤثر در هر یک از ابعاد را به طور جداگانه بررسی کرد و هر قسمت را با روش‌های عددی مناسب حل نمود. در اغلب کارهای گذشته پیش‌بینی غلظت بر اساس انجام یک سری عملیات آماری بر روی داده‌های اندازه‌گیری شده می‌باشد و یا برای ورودی مدل نیاز به داده‌های زیادی هست که همیشه این داده‌ها در دسترس نیست. در این پژوهش از روش یاد شده با استفاده از موازنه جرم و داده‌های هواشناسی برای به دست آوردن نحوه پخش BTEX از زباله‌سوز پتروشیمی تبریز استفاده شده است. به راحتی می‌توان پارامترهای مختلف از جمله شرایط آب و هوایی و مشخصات منابع انتشار را با استفاده از این مدل‌سازی تغییر داد و اثر آن را بر میزان انتشار بررسی نمود.

کلیدواژه‌ها: BTEX، مدل‌سازی، انتشار ناپایدار، تفکیک معادلات.

۱- مقدمه

تولوتن و زایلن تشکیل می‌دهند که با نام BTEX شناخته می‌شوند (Caselli و همکاران، ۲۰۱۰، Minh و Lan، ۲۰۱۳). امروزه به علت افزایش غلظت این مواد در اتمسفر تحقیقات زیادی در این زمینه صورت می‌گیرد (Zhang و همکاران، ۲۰۱۲). در سال ۱۹۵۰ دانشمندان دریافتند که اکسیداسیون ترکیبات آلی فرار در حضور NOx و نور خورشید منجر به تولید ازن می‌شود (Haagen-Smit، ۱۹۵۲). ازن جزء ترکیبات سمی است و افزایش غلظت آن در اتمسفر یکی از مشکلات زیست محیطی محسوب می‌شود (Lelieveld و همکاران، ۲۰۰۲). در سال ۱۹۷۰ کنترل میزان ازن تولیدی به علت تخمین نادرست ترکیبات آلی فرار ناموفق بود. بنابراین لازم است که ترکیبات آلی فرار از جمله BTEX برای

آلودگی هوا به شرایطی گفته می‌شود که در نتیجه فعالیت‌های انسانی، موادی با غلظت خیلی بالاتر از حالت معمول به تروپوسفر وارد شده و آثار مضر بر روی انسان‌ها، حیوانات و گیاهان می‌گذارد. این تعریف می‌تواند شامل هر نوع ماده‌ای باشد. ممکن است ماده‌ای به خودی خود مضر نباشد اما وجود بیش از حد طبیعی آن در اتمسفر مضراتی داشته باشد (Pandis و Seinfeld، ۲۰۰۶). ترکیبات آلی فرار (VOCs) ترکیبات آلی با نقطه جوش نسبتاً پایین هستند و به آسانی تبخیر می‌شوند (Jacobson، ۲۰۰۲). این ترکیبات یکی از عوامل مهم آلودگی هوا است. سهم قابل توجهی از ترکیبات آلی فرار منتشر شده در اتمسفر را بنزن، اتیل بنزن،

1. Volatile Organic Compounds

* نویسنده مسئول؛ شماره تماس: ۰۴۱-۳۳۴۵۹۱۴۱

به طور کلی از مدل‌های ریاضی پخش آلودگی هوا می‌توان برای شرح و تفسیر داده‌های تجربی، بررسی کیفیت هوا در زمان حال یا گذشته، پایش انتشارات تصادفی و ارزیابی خطرات منطقه، شناسایی منابع آلاینده، بررسی میزان آلاینده‌گی یک منبع مشخص و کمک به مدیریت و طراحی منطقه استفاده کرد (Moreira و Vilhena، ۲۰۱۰). در شرایط ایده‌آل، یک مدل کامل، غلظت حاصله از مجموعه‌ای از نشرها از هر منبع خاص، در شرایط هواشناسی ویژه، در هر محل و هر دوره زمانی با ضریب اطمینان بالا را پیش‌بینی می‌کند که البته بهترین مدل‌های موجود با حالت ایده‌آل فاصله دارند (ظروفچی و همکاران، ۱۳۹۳).

در این پژوهش، نحوه انتشار ناپایدار و سه بعدی BTEX از زباله‌سوز پتروشیمی تبریز به روش حل عددی تفکیک معادلات با استفاده از نرم‌افزار MATLAB مورد ارزیابی قرار گرفته است. مهم‌ترین مزایای استفاده از روش تفکیک معادلات این است که با معادلات دیفرانسیل ساده‌تری مواجه می‌شویم و استفاده از روش‌های عددی مختلف برای معادلات تفکیک شده امکان‌پذیر است که در نتیجه نتایج مدل بهبود می‌یابد.

۲- روش تحقیق

مدل‌های پخش آلاینده‌های هوا که با معادلات ریاضی دیفرانسیل جزئی توصیف می‌شوند، در بیشتر موارد با استفاده از روش‌های تحلیلی قابل حل نبوده و نیازمند استفاده از روش‌های حل عددی برای دستیابی به پاسخ مدل می‌باشند. از آن‌جا که روش‌های حل عددی دارای تنوع و گستردگی زیادی هستند، انتخاب یک روش بهینه برای استفاده در حل مدل‌های پخش آلاینده‌ها کار چندان ساده‌ای نیست. اغلب مدل‌های موجود جهت مدل‌سازی پخش غلظت آلودگی هوا، دارای موازنه جرمی ساده‌ای هستند. معادله موازنه کلی را می‌توان به صورت زیر نوشت (دنورز، ۱۳۸۰):

$$-(\text{کلیه جریان‌های ورودی}) = (\text{میزان تجمع}) \\ - (\text{تخریب}) - (\text{میزان تولید}) + (\text{کلیه جریان‌های خروجی})$$

با توجه به معادله اساسی بقای جرم، در یک مدل پخش آلودگی چهار مکانیزم عمده از جمله مکانیزم انتقال جرم توده‌ای عمدتاً توسط سرعت باد، مکانیزم نفوذ مولکولی، حذف توسط ته‌نشینی و نهایتاً تولید و مصرف توسط واکنش‌های شیمیایی دخیل هستند. بنابراین معادله کلی پخش آلاینده‌های گازی با استفاده از معادله اساسی موازنه جرم در حالت کلی به صورت معادله رابطه (۱) خواهد بود.

ارزیابی صحیح مشکلات زیست محیطی با استفاده از مدل‌های پخش آلودگی هوا تخمین زده شود (Trainer و همکاران، ۱۹۸۷). امروزه محققان به دلیل سرطان‌زا بودن این ترکیبات و فراوانی آن‌ها در محیط‌های شهری، تحقیقات زیادی در این زمینه انجام داده‌اند (Zhang و همکاران، ۲۰۱۰؛ Scheepers و همکاران، ۲۰۱۰؛ Caselli و همکاران، ۲۰۱۰). از جمله این که با استفاده از داده‌های اندازه‌گیری شده و علم آمار الگویی برای انتشار آنها ارائه می‌دهند و عموماً پیش‌بینی‌ها بر اساس تغییر آب و هوا صورت می‌گیرد (Stojić و همکاران، ۲۰۱۵؛ Lemke و O'Leary، ۲۰۱۴).

در راستای طرح توسعه پایدار و به منظور بهینه‌سازی استفاده از منابع و به دلیل محدودیت‌های قانونی، می‌بایست انتشار BTEX از منابع تولید، تحت پایش قرار گرفته و کنترل انتشار آن‌ها در مبدأ صورت پذیرد. با تعیین غلظت و نحوه پخش آن‌ها از منابع تولید، می‌توان گام مهمی در جهت کاهش و کنترل آلاینده‌ها برداشت. پیش‌بینی غلظت آلاینده‌ها با استفاده از مدل‌های پخش آلودگی هوا در اتخاذ تصمیمات لازم برای پیشگیری و کاهش اثرات زیان‌بار آن‌ها مهم است (محمدی و همکاران، ۱۳۹۵).

مدل‌های پخش آلودگی هوا از جمله ابزارهای توانمند و قابل اعتماد برای بررسی انتشار و غلظت آلاینده‌ها می‌باشند. با توجه به این که اندازه‌گیری غلظت آلاینده در هر نقطه امکان‌پذیر نمی‌باشد، مدل‌ها می‌توانند به عنوان وسیله‌ای برای استنتاج غلظت در آن نقاط مورد استفاده قرار بگیرند. با استفاده از ترکیب اطلاعات جمعیتی یک ناحیه و نتایج حاصل از مدل، می‌توان تخمینی از میزان تأثیر آلاینده‌ها بر سلامتی افراد ارائه نمود. مدل‌های پخش آلودگی هوا از دیرباز برای سیاست‌های کوتاه مدت و بلند مدت استفاده شده است. به عنوان نمونه مدل‌های پیش‌بینی کوتاه مدت برای آگاه کردن اذهان عمومی در مورد امکان داشتن هوای آلوده در یک منطقه خاص در روزهای آتی و تصمیم‌گیری در مورد استراتژی‌های جلوگیری و کاهش آلودگی استفاده می‌شود. مدل‌های بلند مدت پخش آلودگی هوا نیز معمولاً برای ارزیابی استراتژی‌های کاهش آلودگی هوا و کنترل رعایت استانداردهای منابع انتشار و همچنین دستیابی به استانداردهای آلودگی هوا مورد استفاده قرار می‌گیرند (Gurjar و همکاران، ۲۰۱۰). علاوه بر این اگرچه با اندازه‌گیری آلودگی هوا اطلاعات کمی مهمی در مورد غلظت در محیط به دست می‌آید، اما این اطلاعات فقط می‌تواند کیفیت هوا را در مکان‌ها و زمان‌های خاص بیان کند و برای شناسایی عوامل ایجاد آلودگی نمی‌تواند کمکی بکند. در حالی که با استفاده از مدل‌سازی پخش آلودگی هوا می‌توان عوامل و علل ایجاد آلودگی هوا از جمله میزان انتشار از منابع، و فرآیندهای فیزیکی و شیمیایی انتقال آلاینده‌ها را بررسی نمود (Daly و Zannetti، ۲۰۰۷).

اجزاء کوچکتر تقسیم شود. علاوه بر تقسیم رابطه (۱) بر اساس فرآیند مؤثر در انتقال آلاینده‌ها، تقسیم‌بندی‌های دیگری نیز بر اساس نوع معادلات ریاضی، پارامترهای موجود در معادلات ریاضی نیز انجام گرفته است. با این وجود استفاده از تقسیم‌بندی رابطه (۱) بر اساس فرآیندهای مؤثر در انتقال آلاینده‌ها، مرسوم‌تر می‌باشد.

با توجه به این‌که معادله دیفرانسیل جزئی رابطه (۱) در سه بعد ارائه شده است، یکی از روش‌های رایج دیگر در تقسیم معادلات، تقسیم معادله کلی به اجزاء کوچکتر در ابعاد سطحی (x, y) و ارتفاع (z) می‌باشد. در این حالت فرآیندهای فیزیکی و شیمیایی مؤثر در هر یک از این ابعاد به طور جداگانه بررسی و با روش‌های عددی حل می‌شوند.

۲-۱-۱- معادلات در ابعاد سطحی (x, y)

به منظور کاهش ابعاد رابطه (۱) به دو بعد x, y محاسبات با فرض ارتفاع ثابت z_0 انجام می‌گیرد. با در نظر گرفتن نقطه‌ای از منطقه مورد مطالعه با مشخصات (x, y, z_0) در صفحه (x, y) رابطه (۱) به صورت روابط (۲) تا (۵) نوشته می‌شود.

$$\frac{\partial C^1}{\partial t} = \frac{\partial(uC^1)}{\partial x} - \frac{\partial(vC^1)}{\partial y} \quad (2)$$

جابجایی افقی

$$\frac{\partial C^2}{\partial t} = + \frac{\partial}{\partial x} (K_x \frac{\partial C^2}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (K_y \frac{\partial C^2}{\partial y}) \quad (3)$$

نفوذ

$$\frac{\partial C^3}{\partial t} = -(k_{1s} + k_{2s})C^3(x, y, z_0, t) \quad (4)$$

ته نشینی

$$\frac{\partial C^4}{\partial t} = +E_s(x, y, z_0, t) \quad (5)$$

انتشار از منابع و

$$+ Q_s(c_1^4, c_2^4, \dots, c_q^4), \quad s = 1, 2, \dots, q$$

واکنش‌های شیمیایی

که در آن q تعداد آلاینده‌های مورد مطالعه است.

۲-۱-۲- معادلات در امتداد ارتفاع

با در نظر گرفتن نقطه ثابت (x_0, y_0) در صفحه xy و خط‌های فرضی با مختصات (x_0, y_0, z) در منطقه مورد مطالعه، معادله حاکم بر بعد سوم بر اساس معادله کلی انتقال آلاینده‌ها به صورت رابطه (۶) است.

$$\frac{\partial C^5}{\partial t} = - \frac{\partial(wC^5)}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} (K_z \frac{\partial C^5}{\partial z}) \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} = & \frac{\partial(uC)}{\partial x} - \frac{\partial(vC)}{\partial y} - \frac{\partial(wC)}{\partial z} \\ & + \frac{\partial}{\partial x} (K_x \frac{\partial C}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (K_y \frac{\partial C}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z} (K_z \frac{\partial C}{\partial z}) \\ & + E_s \\ & - (k_{1s} + k_{2s})C \\ & + Q_s(c_1, c_2, \dots, c_q), \quad s = 1, 2, \dots, q \end{aligned} \quad (1)$$

سه جمله اول سمت راست این معادله بیانگر فرآیند جابجایی افقی در سه جهت اصلی x, y و z بوده که با معادلات دیفرانسیلی جزئی توصیف می‌شود. سه جمله بعدی پدیده نفوذ را توصیف می‌کند. این معادلات نیز معادلات دیفرانسیل جزئی می‌باشند. جمله E_s میزان انتشار از منابع آلاینده و دو جمله بعدی نیز معادلات ریاضی مربوط به ته نشینی خشک و تر در منطقه مورد مطالعه را نشان می‌دهند. جمله آخر نیز مربوط به واکنش آلاینده-ها است (Fatehifar و همکاران، ۲۰۰۶).

۲-۱-۲- تقسیم معادله کلی انتقال آلاینده‌ها

علی‌رغم تمایل زیاد پژوهش‌گران برای استفاده از یک روش حل عددی بهینه برای کل معادله دیفرانسیل جزئی مربوط به رابطه (۱)، این کار چندان ساده نیست. زیرا فرآیندهای مؤثر در پدیده انتقال آلاینده‌ها مطابق عبارات ریاضی سمت راست معادله (۱) دارای تنوع زیادی بوده و مؤلفه‌های فیزیکی مؤثر در این فرآیندها نیز متفاوت می‌باشند.

معادلات دیفرانسیلی جزئی توصیف کننده پدیده انتقال آلاینده‌ها را می‌توان با استفاده از روش حل عددی تفکیک معادلات جزئی به قسمت‌های کوچک‌تری تقسیم‌بندی نمود. تقسیم معادلات بر اساس شرایط فیزیکی مسئله حالت بهینه‌ای از این تقسیم‌بندی محسوب می‌شود. در این صورت با استفاده از روش‌های حل عددی این اجزاء کوچک مدل پخش آلاینده‌ها حل شده و در انتها با تجمیع نتایج حل تک تک این قسمت‌ها، پاسخ نهایی مدل پخش حاصل می‌گردد. گاهی ممکن است هر یک از این قسمت‌های معادله پخش آلاینده‌ها که بر اساس فرآیندهای مؤثر بر انتقال آلاینده‌ها تعریف شده‌اند، با استفاده از روش‌های عددی متفاوتی حل گردند.

انتخاب روش حل عددی مناسب، به مؤلفه‌های فیزیکی حاکم بر مسئله مورد مطالعه بستگی دارد و استفاده از این روش‌های عددی، بر اساس پارامترهای عبارات ریاضی سمت راست معادله (۱) خواهد بود. با توجه به تفاوت فرآیندهای انتقال آلاینده‌ها، امکان تأمین تمامی نیازمندی‌های لازم برای حل معادله دیفرانسیل جزئی معادله (۱) به طور هم‌زمان امکان‌پذیر نبوده و لازم است این معادله کلی بر اساس فرآیندهای انتقال آلاینده‌ها به

۲- جهت اصلی انتقال (حاصل از باد) به عنوان محور x انتخاب می‌شود.

۳- انتقال مواد آلاینده توسط باد در جهت x بر نفوذ در پایین دست باد غالب می‌باشد. یعنی:

$$u \left(\frac{dc}{dx} \right) > K_x \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right)$$

۴- $(w=v=0)$ سرعت باد فقط در جهت x به صورت تابعی از ارتفاع فرض می‌شود.

۵- ته‌نشینی در سیستم وجود ندارد $(S_i=0)$.

۶- واکنش شیمیایی در سیستم وجود ندارد $(Q_i=0)$.

۲-۲- شرایط اولیه و مرزی

برای حل معادله، شرایط اولیه و مرزی به قرار زیر است:

$$1- \text{ در } t=0, C_i(x, y, z, t) = 0$$

$$2- \text{ در } x=0, C_i(x, y, z, t) = 0$$

$$3- \text{ در } y=0, \frac{\partial C}{\partial y} = 0$$

$$4- \text{ در } y=W, \frac{\partial C}{\partial y} = 0$$

$$5- \text{ در } z=0, \frac{\partial C}{\partial z} = 0$$

$$6- \text{ در } z \text{ برابر ارتفاع اختلاط, } \frac{\partial C}{\partial z} = 0$$

در روابط بالا W ، عرض منطقه مورد مطالعه است و شرایط مرزی با توجه به مفاهیم زیر به دست آمده‌اند:

- ۱- باد ورودی به منطقه عاری از آلودگی است (شرط شماره ۲)
- ۲- آلودگی در سطح $W=y$ و $y=0$ نهایتاً زایل می‌شود (شرط‌های شماره ۳ و ۴).
- ۳- آلاینده‌ها از زمین انعکاس می‌یابند (شرط شماره ۵).
- ۴- هیچ وارونگی دمایی مرتفع وجود نداشته، آلاینده‌ها بدون محدودیت در جهت عمودی تا z برابر ارتفاع اختلاط پخش می‌شوند (شرط شماره ۵) (Kahforoshan و همکاران، ۲۰۰۸).

۲-۳- پارامترهای مورد نیاز برای مدل‌سازی

۲-۳-۱- ارتفاع مؤثر دودکش

یکی از پارامترهایی که در حل مدل‌های پخش لازم است محل واقعی ورود آلاینده‌ها به محیط می‌باشد. موقعی که آلاینده‌های هوا از یک دودکش منتشر می‌شوند پیش از آن که در یک سطح قرار گیرند، به طرف بالا صعود می‌کنند. فاصله نقطه‌هایی تا سطح زمین ارتفاع مؤثر^۲ نامیده می‌شود. ارتفاع مؤثر دودکش H ، نه تنها ارتفاع فیزیکی دودکش h است بلکه مقدار افزایش ارتفاع توده دود (Δh) را نیز در برمی‌گیرد. ارتفاع دودکش

بنابراین با استفاده از روش تفکیک، معادله دیفرانسیل جزئی رابطه (۱) به ۶ معادله دیفرانسیلی تقسیم می‌شود که می‌توانند به صورت مجزا از هم و به طور هم‌زمان حل شوند. هر چند می‌توان هر یک از جملات ریاضی رابطه (۵) را مانند تقسیم‌بندی معادلات دیفرانسیل جزئی بر اساس فرآیندهای مؤثر بر پدیده انتقال آلاینده‌ها به معادلات جابجایی و نفوذ روابط (۲) و (۳) افزود، اما این کار ممکن است حل این معادلات را با مشکل مواجه سازد.

البته واضح است که روابط (۲) تا (۶) می‌بایست در هر بازه زمانی مورد محاسبه با هم ترکیب شده و در بازه زمانی بعدی دوباره به صورت مجزا مورد محاسبه قرار گیرند. در این صورت داده‌های به دست آمده در هر نقطه به عنوان داده‌های ورودی نقطه بعد محسوب شده و در معادلات پنج‌گانه فوق در قدم بعدی مورد استفاده قرار خواهند گرفت. مراحل کار بدین ترتیب است که معادلات جابجایی افقی (رابطه (۲)) با استفاده از شرایط اولیه حل شده و غلظت نهایی به دست آمده در این دامنه زمانی، برای حل معادلات نفوذ (رابطه (۳)) مورد استفاده قرار می‌گیرد. نتایج غلظت به دست آمده از رابطه (۳) را نیز می‌توان برای حل معادلات ته‌نشینی در بازه زمانی مورد نظر به کار برد. این روند تا دست یافتن به نتایج رابطه (۶) ادامه داشته و در انتها نتایج رابطه (۶) به عنوان نتایج تخمینی مدل پخش در این بازه زمانی محسوب شده و محاسبات در دامنه زمانی بعدی آغاز می‌گردد. به منظور کاهش خطای محاسباتی نتایج تخمینی محاسبات بازه زمانی بعدی به صورت برعکس و از رابطه (۶) شروع شده و به روابط (۲) ختم می‌شود. در این حالت نیز نتایج تخمینی رابطه (۲) به عنوان نتایج تخمینی مدل پخش آلاینده‌ها در بازه زمانی مورد محاسبه محسوب شده و محاسبات این پنج معادله در مرحله زمانی بعدی آغاز می‌شود.

مزیت عمده استفاده از روش تفکیک معادلات این است که در هر مرحله با معادلات دیفرانسیل ساده‌تری مواجه می‌شویم. همچنین استفاده از روش‌های عددی مختلف برای روابط (۲) تا (۶) امکان پذیر بوده و در صورت استفاده از یک روش بهینه برای حل عددی هر یک از این معادلات، دقت مدل پخش به میزان قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌یابد.

در صورت استفاده از مدل‌های پخش دو بعدی، استفاده از روش فوق ساده‌تر از حل معادله کلی رابطه (۱) بوده و نیازی به محاسبات در امتداد ارتفاع نخواهد بود. با این وجود، به کار بردن این معادله برای فرآیندهای واقعی در اتمسفر مشکل است. لذا، جهت استفاده از این معادله فرضیات زیر هم در نظر گرفته می‌شود:

- ۱- آلاینده از یک منبع نقطه‌ای پیوسته سرچشمه می‌گیرد.

جدول ۱- روابط به کار برده شده برای محاسبه ضریب نفوذ K_v (Fatehifar, ۲۰۰۵ و Jia-Yeong و همکاران، ۱۹۸۷).

حالت پایداری	ضریب نفوذ
خنثی	$k_v = ku_* z e^{-4z/H}$
پایدار	$k_v = \frac{ku_* z}{0.74 + 4.7 z/L} e^{-b\eta}$ $b = 0.91$ $\eta = (z/L)\mu^{-1/2}$ $\mu = \frac{u_*}{ fL }$
ناپایدار	$k_v = w_* H [2.5(kz/H)^{3/5} (1 - 1.5 z/L)^{1/4}]$ $0 \leq z/H < 0.05$ $k_v = w_* H [0.021 + 0.408(z/H) + 1.352(z/H)^2 - 4.096(z/H)^3 + 2.56(z/H)^4]$ $0.05 \leq z/H < 0.6$ $k_v = w_* H [0.2 \exp(6 - 10 z/H)]$ $0.6 \leq z/H < 1.1$

در این تحقیق از یک مقدار متوسط برابر $50 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ برای K_H در شرایط مختلف پایداری اتمسفری استفاده شده است (Jia-Yeong و همکاران، ۱۹۸۷).

۲-۳-۳- سرعت باد

سرعت باد در اکثر اوقات در بیشتر قسمت‌های تروپوسفر با ارتفاع افزایش می‌یابد. دلیل این امر این است که اصطکاک زمین، سرعت باد را کاهش می‌دهد. باد یکی از عوامل مهم انتشار مواد آلوده کننده در جو می‌باشد. بدیهی است که مواد آلاینده هم‌سو با جریان باد انتشار یافته و چون جهت باد متغیر است، بدین جهت آلاینده‌ها هم به صورت افقی و هم در جهت عمودی حرکت می‌کنند. در این تحقیق از معادله توانی سرعت باد (رابطه (۷)) برای محاسبه سرعت باد در ارتفاعات مختلف استفاده شده است (Jia-Yeong و همکاران، ۱۹۸۷).

$$u_s = u_{ref} \left(\frac{h_s}{z_{ref}} \right)^p \quad (7)$$

در رابطه (۷)، u_{ref} سرعت اندازه‌گیری شده باد در ارتفاع مشخص، z_{ref} ارتفاع مشخص اندازه‌گیری سرعت باد که معمولاً 10 متر در نظر گرفته می‌شود، p ثابت پروفیل باد و u_s سرعت باد در ارتفاع z می‌باشد. مقادیر p برای حالت‌های مختلف پایداری اتمسفر در جدول (۲) آورده شده است. این معادله تا ارتفاع 200 متری مورد استفاده قرار می‌گیرد. برای ارتفاع بیشتر از 200 m سرعت

مورد استفاده در محاسبات بایستی ارتفاع مؤثر دودکش باشد. معمولاً معادله هلند و معادله بریگ (Kabel و Heinsohn، ۱۹۹۶) برای پیش‌بینی میزان ارتفاع مؤثر دودکش مورد استفاده قرار می‌گیرند (روابط (۸) تا (۱۰)).

$$H = h + \Delta h \quad (8)$$

$$\Delta h = \frac{v_s D}{u} \left(1.5 + 2.68 \times 10^{-3} PD \frac{(T_s - T_a)}{T_s} \right) \quad (9)$$

$$\Delta h = \frac{114CF^{1/3}}{u} \quad (10)$$

$$F = \frac{v_s g D^2 (T_s - T_a)}{4T_a} \quad C = 1.58 - 41.4 \frac{\Delta \theta}{\Delta z}$$

در رابطه (۹) و (۱۰) v_s سرعت گازهای دودکش، D قطر داخلی دودکش، u سرعت باد، P فشار اتمسفری، T_s دمای گازهای خروجی دودکش بر حسب کلوین، T_a دمای اتمسفر بر حسب کلوین و $\frac{\Delta \theta}{\Delta z}$ اختلاف پتانسیل دمایی می‌باشند.

۲-۳-۲- ضرایب نفوذ

ضرایب نفوذ در مدل‌سازی پخش آلاینده‌ها در ارتباط با حرکت آلاینده‌ها در نتیجه جریان‌های عمودی و افقی در نظر گرفته می‌شوند. برای محاسبه ضرایب نفوذ معمولاً از روابط تجربی استفاده می‌شود. مقادیر این ضرایب در لایه مرزی (که سرعت باد تحت تأثیر لایه مرزی است) و ارتفاعات بالاتر متفاوت هستند. در لایه مرزی حرارتی مهم‌ترین عواملی که آشفتگی را کنترل می‌کنند عبارتند از: عمق لایه مرزی (CBL) ، ارتفاع اختلاط و مقیاس سرعت حرارتی w_* که به صورت رابطه (۱۱) بیان می‌شود:

$$w_* = u_* \left(-\frac{1}{k} \frac{H}{L} \right)^{1/3} \quad (11)$$

در رابطه بالا، k پارامترهای نفوذ عمودی و افقی جریان آشفته معمولاً بر اساس تئوری لایه آشفته است. این تئوری در سال‌های اخیر از طریق مطالعات تجربی، اصلاح شده و بر این اساس با در نظر گرفتن شرایط پایداری مختلف، روابط تجربی لازم برای محاسبه شارش آشفتگی در لایه مرزی، ارائه شده است. در جدول (۱)، K_v برای حالت‌های مختلف پایداری اتمسفر ارائه شده است. در روابط ارائه شده، Z ارتفاع از سطح زمین، u^* سرعت اصطکاکی، L طول مونین-بوخوف، f پارامتر کورولیس زمین^۵ معادل 10^{-4} است (Fatehifar، ۲۰۰۵) در مطالعات صورت گرفته مشخص شد، که توزیع غلظت به تغییرات K_H زیاد حساس نیست.

5. Coriolis parameter of the earth

3. Convective Boundary Layer

4. Convective velocity scale

جدول ۳- مشخصات منبع انتشار مدل سازی شده

ارتفاع منبع انتشار (متر)	۴۰
قطر منبع انتشار (متر)	۱/۸
سرعت خروج آلاینده‌ها (متر بر ثانیه)	۵/۳۶
دمای خروجی آلاینده‌ها (درجه سانتی‌گراد)	۶۲/۲
شدت جریان خروجی آلاینده‌ها (میلی گرم بر ثانیه)	۰/۱۸
سرعت باد در ارتفاع ۱۰ متر در جهت X (متر بر ثانیه)	۳
دمای محیط (درجه کلوین)	۲۹۸
طول منطقه مورد مطالعه (متر)	۱۰۰۰
عرض منطقه مورد مطالعه (متر)	۱۰۰۰
طول × عرض × ارتفاع شبکه (متر)	۶۰×۲۰×۱۰۰
بازه زمانی (Δt) (دقیقه)	۱۰

ثابت فرض می‌شود و برابر با مقدار سرعت در ارتفاع ۲۰۰ متری است (Jeremy و Abhishek، ۲۰۱۰).

جدول ۲- مقادیر p برای حالت‌های مختلف پایداری اتمسفر (Jeremy و Abhishek، ۲۰۱۰)

مقدار توان در مناطق شهری	مقدار توان در مناطق روستایی	کلاس پایداری
۰/۱	۰/۰۷	A
۰/۱۵	۰/۰۷	B
۰/۲۰	۰/۱۰	C
۰/۲۵	۰/۱۵	D
۰/۲۵	۰/۳۵	E
۰/۳۰	۰/۵۵	F

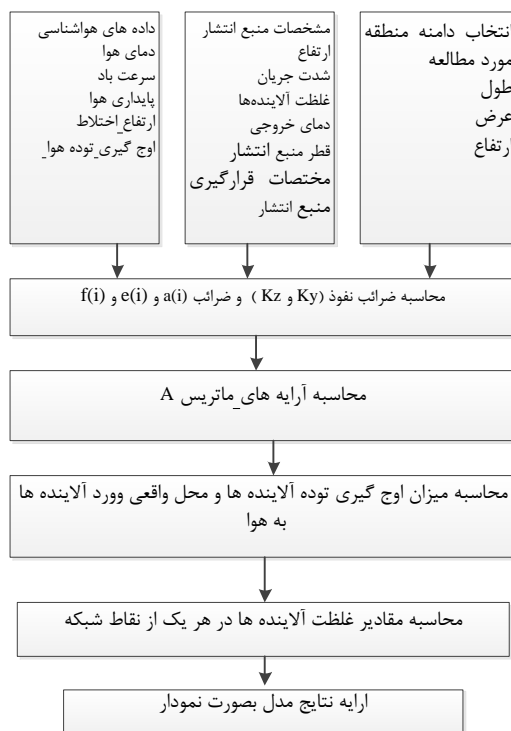
۳- بحث و نتایج

۳-۱- مدل سازی پخش BTEX برای یک منبع انتشار

در نمودار (۱) الگوریتم محاسباتی مورد استفاده در نرم‌افزار MATLAB برای به دست آوردن آرایه‌های ماتریس غلظت آلاینده‌ها نشان داده شده است. در این پژوهش از روش تفاضل محدود برای حل عددی هر کدام از معادلات دیفرانسیل استفاده شده است. منطقه مورد مطالعه دارای طول و عرض ۱ km و ارتفاعی برابر با ارتفاع اختلاط است. منبع انتشار که یک زباله‌سوز صنعتی است، به ارتفاع ۴۰ m و به فاصله ۱۵ m از مبدأ مختصات در جهت X و Y قرار دارد. جهت مدل‌سازی، منطقه به شبکه‌های سلولی سه‌بعدی تقسیم شده است. فرض بر این است که آلاینده‌ها به صورت همگن در هر سلول مخلوط می‌شوند و انتقال از هر سلول به سلول دیگر از طریق انتقال و نفوذ صورت می‌گیرد. نتایج حاصل از مدل به صورت نمودار به عنوان خروجی نرم‌افزار ارائه می‌گردد. از بین چهار آلاینده BTEX، بنزن به عنوان نمونه در این مقاله بررسی شده است. با توجه به در نظر نگرفتن ترم واکنش شیمیایی در معادله انتشار می‌توان این نتایج را به سه آلاینده دیگر نیز تعمیم داد. در جدول (۳) مشخصات منبع انتشار مورد نظر آورده شده است.

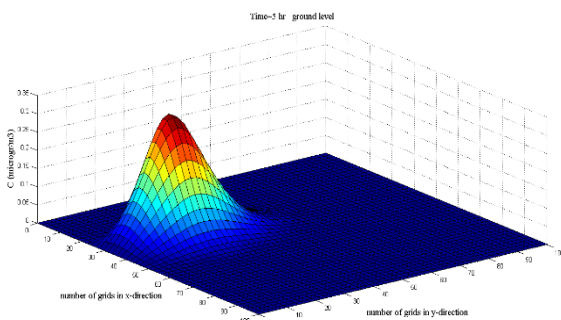
در شکل‌های (۱) و (۲) تغییرات غلظت آلاینده بنزن در سطح زمین و در ارتفاع اختلاط، بعد از ۵ ساعت از شروع به کار زباله‌سوز، که از نتایج مدل ارائه شده در نرم‌افزار MATLAB حاصل شده، آورده شده است. زباله‌سوز به فاصله ۱۵ متری از مبدأ مختصات قرار دارد. همان طوری که در شکل دیده می‌شود بیشترین غلظت آلاینده در سطح زمین برابر با $0/3 \mu\text{gr}/\text{m}^3$ و در فاصله ۲۸ متری در جهت X و ۲۴ متری در جهت Y پیش‌بینی می‌شود.

هم‌چنین بیش‌ترین غلظت آلاینده در ارتفاع اختلاط در فاصله ۴۸ متری در جهت X و ۳۰ متری در جهت Y است و برابر با $3 \times 10^{-17} \mu\text{gr}/\text{m}^3$ می‌باشد. طبق شکل غلظت بنزن در ارتفاع اختلاط ناچیز است.

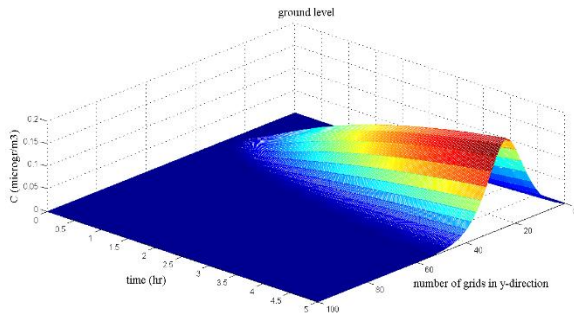


نمودار ۱- الگوریتم محاسباتی مورد استفاده در نرم‌افزار

MATLAB



شکل ۱- الگوی پخش بنزن در سطح زمین با استفاده از نتایج مدل ارائه شده



شکل ۵- تغییرات غلظت آلاینده بنزن بر حسب زمان در فاصله ۲۵ متری از محور مختصات در جهت X با استفاده از نتایج مدل ارائه شده

با در نظر گرفتن ترم تغییرات غلظت با زمان در معادله انتقال جرم می‌توان نحوه تغییر غلظت با زمان را نیز با استفاده از نرم‌افزار بررسی نمود. شکل‌های (۴) و (۵) نحوه انتقال آلودگی و تغییرات غلظت بنزن را بر حسب زمان به ترتیب در جهت X و Y و در سطح زمین و به فاصله ۲۵m از منبع انتشار نشان می‌دهد.

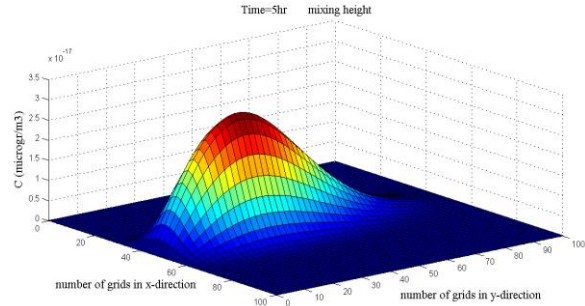
۳-۲- بررسی تأثیر پارامترهای مؤثر بر انتشار آلاینده‌ها

می‌توان با استفاده از مدل ارائه شده، تأثیر هر یک از پارامترهای جوی بر نتایج تخمینی را مورد بررسی قرار داد. سرعت و جهت باد و نوع پایداری اتمسفر مهم‌ترین پارامترهایی هستند که بر پخش آلودگی هوا تأثیر می‌گذراند می‌گذراند (Abhishek و Jeremy، ۲۰۱۰). هم‌چنین می‌توان با استفاده از مدل ارائه شده تأثیر هر یک از مشخصات منبع انتشار در نحوه پخش آلاینده‌ها را نیز مشخص کرد.

۳-۲-۱- سرعت باد

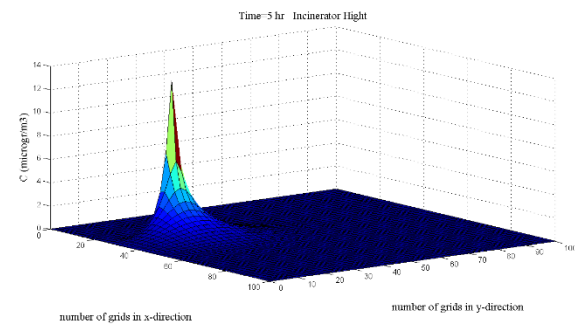
شکل (۶) سرعت و جهت بادهای غالب در محل مورد مطالعه را به صورت نمودار گلباد نشان می‌دهد. جهت باد غالب از غرب به شرق است که جهت مثبت محور X در نظر گرفته شده است. سرعت باد در روز مورد مطالعه بین ۰/۵ تا ۸ متر بر ثانیه نوسان کرده است و میانگین سرعت ۴ متر بر ثانیه می‌باشد.

شکل (۷) تأثیر سرعت باد بر روی غلظت بنزن در سطح زمین را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود به دلیل افزایش طول اختلاط با افزایش سرعت باد آلاینده‌ها تا فاصله دورتری نسبت به منابع آلاینده، منتقل می‌شوند. مقدار بیشینه غلظت در سطح زمین نیز با افزایش سرعت باد کاهش پیدا می‌کند.

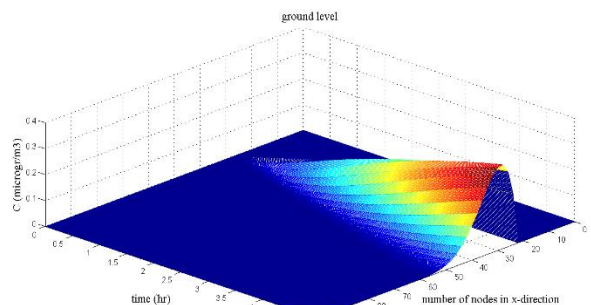


شکل ۲- الگوی پخش بنزن در ارتفاع اختلاط با استفاده از نتایج مدل ارائه شده

شکل (۳) تغییرات غلظت بنزن در ارتفاعی برابر با ارتفاع منبع انتشار بعد از گذشت ۵ ساعت را نشان می‌دهد. با توجه به نمودار می‌توان نحوه انتقال آلاینده در راستای X در جهت باد را ملاحظه نمود. همان‌طوری که قبلاً اشاره شد در این جهت، انتقال از نوع جابجایی و در جهت مثبت است. در راستای Y که با مکانیزم نفوذ انجام می‌شود انتقال کندتر از جهت X و انتشار در دو جهت Y نسبت به زیاله‌سوز صورت می‌گیرد.



شکل ۳- الگوی پخش بنزن در اطراف آشغال‌سوز در ارتفاع هم-سطح با آن با استفاده از نتایج مدل ارائه شده



شکل ۴- الگوی پخش بنزن بر حسب زمان در فاصله ۲۵ متری از محور مختصات در جهت Y با استفاده از نتایج مدل ارائه شده

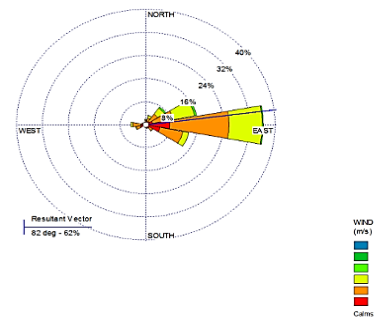
جریان انتشار آن‌ها از منبع انتشار می‌باشد. با استفاده از مدل می‌توان اثر تغییرات غلظت در اطراف منبع انتشار نسبت به غلظت در اتمسفر را تخمین زد.

۴- نتیجه‌گیری

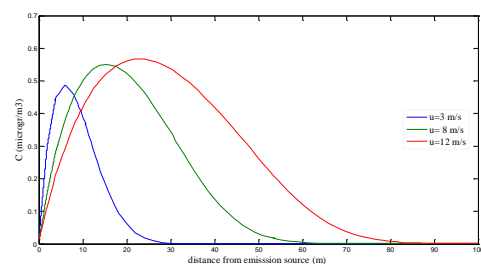
در این پژوهش، نحوه انتشار ناپایدار و سه بعدی BTEX از زباله‌سوز پتروشیمی تبریز به روش حل عددی تفکیک معادلات با استفاده از نرم‌افزار MATLAB مورد ارزیابی قرار گرفت. با استفاده از روش عددی تفکیک معادلات، معادلات دیفرانسیل جزئی پخش آلاینده‌ها به قسمت‌های کوچک‌تری تقسیم‌بندی شد. با توجه به این‌که این معادله، از نوع معادله با مشتقات جزئی و شامل تغییرات غلظت بر واحد زمان است و نیز به دلیل تنوع فرآیندهای دخیل در پدیده انتقال آلاینده‌ها، امکان تأمین تمامی نیازمندی‌های لازم برای حل معادله دیفرانسیل جزئی به طور هم‌زمان امری بسیار پیچیده است. مهم‌ترین مزایای استفاده از این روش این است که با معادلات دیفرانسیل ساده‌تری مواجه می‌شویم و برای حل هر کدام از معادلات دیفرانسیل از روش‌های عددی بهینه می‌توان استفاده کرد و در نتیجه نتایج مدل را بهبود داد. در این پژوهش با روش تفکیک معادلات معادله اصلی انتشار مواد آلاینده به ۴ معادله دیفرانسیل ساده تبدیل و برای حل هر کدام از معادلات از روش تفاضل محدود استفاده شد. با توجه به نتایج مدل پخش BTEX، تأثیر پارامترهای جوی از جمله سرعت باد و پایداری اتمسفر بر نحوه پخش مورد ارزیابی قرار گرفت. با استفاده از مدل ارائه شده می‌توان تأثیر مشخصه‌های منبع انتشار بر نحوه پخش آلاینده‌ها و غلظت آن‌ها در محیط را نیز مورد ارزیابی قرار داده و در تصمیمات راهبردی برای کنترل انتشار آلاینده‌ها استفاده نمود.

۵- مراجع

- دنورزن، ترجمه ترکیان، نعمت‌پور ک، "مهندسی آلودگی هوا"، دانشگاه صنایع و معادن ایران، ۱۳۸۰.
- ظروفچی بنیس خ، فاتحی فر، احمدی ج، محمدی م، "مدل‌سازی پخش آلودگی هوا با استفاده از نرم‌افزار ISCST در اطراف پالایشگاه تبریز"، نشریه مهندسی عمران و محیط زیست، ۴۴ (۴)، ۱۳۹۳.
- محمدی ن، ظروفچی بنیس خ، شاکر خطیبی م، فاتحی فر، ا، بهروزسرنند ع، محمودیان، ا، شیخ‌الاسلامی ف، "پیش‌بینی غلظت آلاینده‌های گازی در هوای شهر تبریز با استفاده از شبکه عصبی"، نشریه مهندسی عمران و محیط زیست، جلد ۴۶، شماره ۲، تابستان ۱۳۹۵.
- Abhishek T, Jeremy C, "Air Pollution (Measurement, modelling and mitigation)", New York, Routledge, 2010.



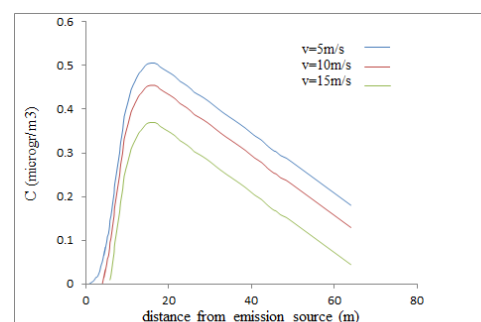
شکل ۶- گلباد روز مورد مطالعه تبر ماه



شکل ۷- تأثیر سرعت باد بر نحوه پخش آن‌ها در سطح زمین

۳-۲-۳- سرعت خروج آلاینده‌ها از منبع انتشار

با افزایش سرعت خروجی آلاینده‌ها از منبع انتشار، اوج‌گیری توده آلاینده بیشتر شده و به همین دلیل میزان پخش آلاینده‌ها در محیط و غلظت آلاینده‌ها در سطح زمین کاهش می‌یابد. در نمودار شکل (۸) تأثیر سرعت خروجی آلاینده‌ها بر نحوه پخش آن‌ها در سطح زمین نشان داده شده است.



شکل ۸- تأثیر سرعت خروجی آلاینده‌ها بر پخش آن‌ها در سطح زمین

۳-۲-۳- غلظت خروجی آلاینده‌ها از منبع انتشار

کاملاً واضح است که با افزایش غلظت خروجی آلاینده‌ها از منبع انتشار، غلظت آلاینده‌ها در سطح زمین نیز افزایش خواهد یافت و مؤثرترین راهبرد کاهش آلودگی هوا، کاهش غلظت و شدت

- Zhang Y, Mu Y, Liu J, Mellouki A, "Levels, sources and health risks of carbonyls and BTEX in the ambient air of Beijing, China", *Journal of Environmental Sciences*, 2012, 24 (1), 124-130.
- Caselli M, de Gennaro G, Marzocca A, Trizio L, Tutino M, "Assessment of the impact of the vehicular traffic on BTEX concentration in ring roads in urban areas of Bari (Italy)", *Chemosphere*, 2010, 81 (3), 306-311.
- Daly A, Zannetti P, "Air Pollution Modeling", The Arab School for Science and Technology (ASST) and The EnviroComp Institute, 2007.
- Fatehifar E, "Development of an optimal design of a multi-pollutant air quality monitoring network", PhD. Thesis, Shiraz University, Shiraz, Iran, 2005.
- Fatehifar E, Elkamel A, Taheri M, "A MATLAB-Based Modeling and Simulation Program for Dispersion of Multipollutants From an Industrial Stack for Educational Use in a Course on Air Pollution Control", *Computer Applications in Engineering Education*, 2006, 14 (4), 300-312.
- Gurjar B R, Molina L T, Ojha C S P, "Air Pollution", CRC Press is an imprint of Taylor & Francis Group, 2010.
- Haagen-Smit A J, "Chemistry and physiology of Los Angeles smog", *Industrial Engineering Chemistry*, 1952, 44 (6), 1342-1347.
- Heinsohn RJ, Kabel RL, "Sources and control of air pollution", Prentice Hall, 1999.
- Jacobson MZ, "Atmospheric Pollution", New York, Cambridge University Press, 2002.
- Kahforoshan D, Fatehifar E, Babalou AA, Ebrahimin AR, Elkamel A, Soltan JS, "Modeling and Evaluation of Air pollution from a Gaseous Flare in an Oil and Gas Processing Area", WSEAS Conferences, Spain, Santander, Cantabria, January 2008.
- Ku J-Y, Rao ST, Rao KS, "Numerical simulation of air pollution in urban areas: Model development", *Atmospheric Environment*, 1987, 21 (1), 201-212.
- Lan TTN, Minh PA, "BTEX pollution caused by motorcycles in the megacity of HoChiMinh", *Journal of Environmental Sciences*, 2013, 25 (2), 348-356.
- Lelieveld J, Berresheim H, Borrmann S, "Global air pollution crossroads over the Mediterranean", *Science of The Total Environment*, 2002, 298 (5594), 794-802.
- Moreira D, Vilhena M, "Air pollution and Turbulence", New York, CRC press, 2010.
- O'Leary BF, Lemke LD, "Modeling spatiotemporal variability of intra-urban air pollutants in Detroit: A pragmatic approach", *Atmospheric Environment*, 2014, 94, 417-427.
- Scheepers PTJ, Konings J, Demirel G, Gaga EO, Anzion R, Peer PGM, Dogeroglu T, Ornektekin S, Van Doorn W, "Determination of exposure to benzene, toluene and xylenes in Turkish primary school children by analysis of breath and by environmental passive sampling", *Science of The Total Environment*, 2010, 408 (20), 4863-4870.
- Seinfeld JH, Pandis SN, "Atmospheric Chemistry And Physics", John Wiley & Sons, Inc, 2006.
- Stojić A, Maletić D, Stanišić Stojić S, Mijić Z, Šoštarić A, "Forecasting of VOC emissions from traffic and industry using classification and regression multivariate methods", *Science of The Total Environment*, 2015, 521, 19-26.
- Trainer M, Williams E J, Parrish DD, "Models and observations of the impact of natural hydrocarbons on rural ozone", *Nature*, 1987, 329 (6141), 705-712.

EXTENDED ABSTRACTS

Unsteady state modeling of BTEX dispersion from an Industrial Incinerator using splitting method

Nesarak Eslami ^a, Esmail Fatehifar ^{a,*}, Mohammad Ali Kaynejad ^b

^a Environmental Engineering Research Center, Faculty of Chemical Engineering, Sahand University of Technology, Tabriz

^b Environmental Engineering Research Center, Faculty of Civil Engineering, Sahand University of Technology, Tabriz

Received: 21 January 2017; Accepted: 09 October 2017

Keywords:

BTEX, modeling, unsteady state dispersion, splitting.

1. Introduction

Nowadays air pollution is an important problem in all over the world (Mohammadi et al., 2016). Volatile organic compounds (VOCs) are regarded as significant air pollutants. The most important VOCs, especially in urban areas, are BTEX (benzene, toluene, ethylbenzene, and xylene) (Monod et al., 2001, Lan and Minh, 2013). BTEX emissions have adverse effects on the environment and health of human beings (Peavy et al., 1985).

Necessary substitute for air quality monitoring is the air quality modeling (Benis et al., 2015). The Models can be used to prognosticate the effect of a potential emitter, which is useful for permitting new sources. In addition, they can be used to simulate ambient pollution concentrations under various policy options, as a tool for both making and justify a decision (Holmes and Morawska, 2006).

When developing an air pollution model, five main physical and chemical processes need to be considered. These processes include horizontal transport (advection), horizontal diffusion, deposition, chemical reactions plus emissions and vertical transport and diffusion. The mathematical description of these processes results in a system of partial differential equation is shown in equation (1).

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial(uC)}{\partial x} - \frac{\partial(vC)}{\partial y} - \frac{\partial(wC)}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + E_s - (k_1 + k_2)C + Q_s (c_1, c_2, \dots, c_q), \quad s = 1, 2, \dots, q \quad (1)$$

where u , v , and w are wind velocity components, C defines the concentrations of the chemical species involved in the model, E_s , K_x , K_y describe the emission sources, and the diffusion coefficients are illustrated by K_x , K_y , K_z , K_{1s} and K_{2s} are deposition coefficients and $Q_s (c_1, c_2, \dots, c_q)$ explains the chemical reactions (Fatehifar et al., 2006). It is a very difficult task, applying a common numerical method directly to the whole system of PDE's. System of PDE's, by which a large air pollution model is described, can be split into different subsystems. In this paper, the computational procedure employed in the MATLAB program to model unsteady state dispersion of BTEX from incinerator using splitting method.

2. Methodology

Different physical processes lead to different terms in the right hand of the equations in (1) and therefore have several properties. It is very hard to meet requirements altogether. This is the reason some kind of

* Esmail Fatehifar

E-mail addresses: nesarakeslami@gmail.com (Nesarak Eslami), fatehifar@sut.ac.ir (Esmail Fatehifar), ma_kaynejad@sut.ac.ir (Mohammad Ali Kaynejad). www.SID.ir

splitting is required to be applied. Several splitting procedures have been proposed in the literature (Zlatev and Dimov, 2006).

In this paper, the system of PDE's (1) is split into five POE systems, which can be solved separately at every time step.

$$\frac{\partial C^1}{\partial t} = -\frac{\partial(uC^1)}{\partial x} - \frac{\partial(vC^1)}{\partial y} \tag{2}$$

$$\frac{\partial C^2}{\partial t} = +\frac{\partial}{\partial x}(K_x \frac{\partial C^2}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(K_y \frac{\partial C^2}{\partial y}) \tag{3}$$

$$\frac{\partial C^3}{\partial t} = -(k_{1s} + k_{2s})C^3(x, y, z_0, t) \tag{4}$$

$$\frac{\partial C^4}{\partial t} = +E_s(x, y, z_0, t) + Q_s(c_1^4, c_2^4, \dots, c_q^4), \quad s = 1, 2, \dots, q \tag{5}$$

$$\frac{\partial C^5}{\partial t} = -\frac{\partial(wC^5)}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z}(K_z \frac{\partial C^5}{\partial z}) \tag{6}$$

The following single partial differential equation could be studied instead of the system of PDE's (1). For this kind of systems, we assume there is no deposition ($K_{1s}=K_{2s}=0$) and no reaction ($Q_s=0$) in system. Also, wind velocity in y and z-direction are neglected. Furthermore, transport by bulk motion in the x-direction exceeds diffusion in the x-direction ($K_x=0$).

3. Results and discussion

In this paper, the computational procedure was employed in the MATLAB program to obtain the pollution concentration matrix [C] for one incinerator. First, the meteorological data and incinerator characteristics data are input to the program through an interactive user interface. Then, the element of matrix [C] and necessary parameters like eddy diffusivity and plume rise are calculated. Finally, results are present in an easy to visualize graphical form. Table 1. shows the incinerator parameters that were used to perform the simulation.

Table 1. Incinerator parameters

incinerator Height (m)	40	Emission rate (g/s)	0.18
incinerator Diameter (m)	1.8	Wind Speed at z=10m (m/s)	4
Exit Velocity (m/s)	5.36	Ambient Temperature (K)	298
Exit Temperature (°C)	62.2	dx×dy×dz	60×20×100

Fig. 1. shows pollution dispersion for the incinerator under conditions that were described in Table 1. after 5hr at ground level and mixing height.

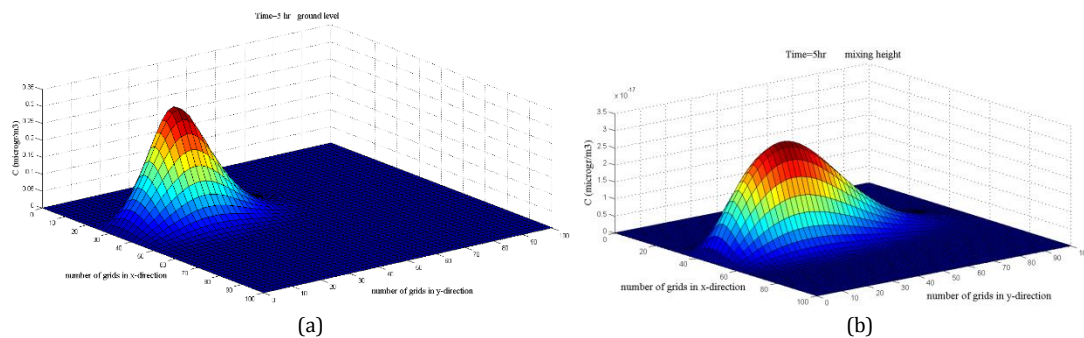


Fig. 1. Benzene concentration distribution at: a) ground level and, b) mixing height

Effects of meteorological condition like atmospheric stability, wind velocity and exit velocity on pollutants dispersion can be easily studied using the program. As Fig. 2. shows, when exit velocity increases, plume rise increases and dispersion of pollutant increases and finally ground level concentration decreases.

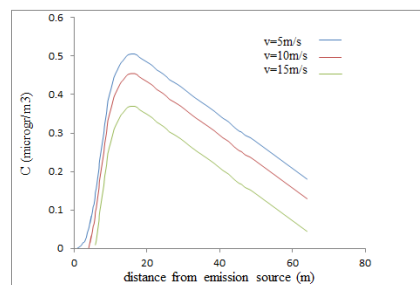


Fig. 2. Effect of exit velocity on the dispersion of pollutants

Advection process (the transport due to the wind) is one of the most important processes in air pollution dispersion. Increasing wind velocity will cause an increase in horizontal dispersion. As Fig. 3. shows, pollution dispersion increases when wind velocity increases and pollutants go far from the incinerator region.

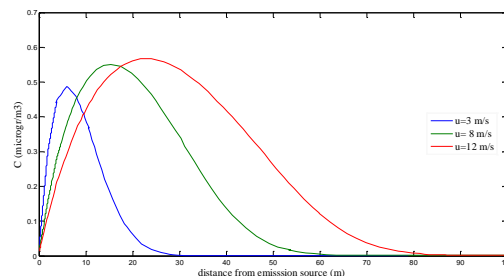


Fig. 3. Effect of wind velocity on pollutant dispersion

4. Conclusions

Three-dimensional simulations of pollutants dispersion from an incinerator have been conducted. The splitting method has been used and the program has been written using MATLAB. Working with simpler systems is the most important advantages of this method. Also, Different numerical methods can be used in the solution of the different systems. Thus, the numerical model can be easily optimized. The result show that splitting method is efficient method for modeling dispersion of BTEX.

5. References

- Benis KZ, Fatehifar E, Ahmadi J, Mohammadi M, "Simulation of Pollution Distribution around the Tabriz Oil Refining Company by using ISCST Model", *Journal of Civil and Environmental Engineering*, 2015, 44 (4), 77-106.
- Fatehifar E, Elkamel A, Taheri M, "A MATLAB-Based Modeling and Simulation Program for Dispersion of Multipollutants From an Industrial Stack for Educational Use in a Course on Air Pollution Control", *Computer Applications in Engineering Education*, 2006, 14 (4), 300-312.
- Holmes N, Morawska L, "A Review of Dispersion Modelling and its application to the dispersion of particles: An overview of different dispersion models available", *Atmospheric Environment*, 2006, 40 (30), 5902-5928.
- Lan TTN, Minh PA, "BTEX pollution caused by motorcycles in the megacity of HoChiMinh", *Journal of Environmental Sciences*, 2013, 25 (2), 348-356.
- Mohammadi N, Benis KZ, Shakerkhatibi M, Fatehifar E, Sarand AB, Mahmoudian A, Sheikholeslami F, "Forecasting Concentrations of Gaseous Air Pollutants Using Artificial Neural Networks in Tabriz", *Journal of Civil and Environmental Engineering*, 2016, 46 (2), 83-104.
- Monod A, Sive BC, Avino P, Chen T, Blake DR, Sherwood Rowland F, "Monoaromatic compounds in ambient air of various cities: a focus on correlations between the xylenes and ethylbenzene", *Atmospheric Environment*, 2001, 35 (1), 135-149.
- Peavy HS, Rowe D R, George Tchobanoglous, "Environmental engineering", New York, McGraw-Hill, 1985.
- Zlatev Z, Dimov I, "Computational and Numerical Challenges in Environmental Modelling", oxford, 2006.