Abordarea lagrangiană a difuziei poluanţilor în atmosferă (partea a II-a)

Prof. univ. dr. ing. *Georgeta CUCULEANU*

Abstract

In the lagrangian approach to the turbulent diffusion the species concentrations are described relative to the moving fluid. This approach is concerned with the behavior of the fluid particle existing in a carrying turbulent fluid. Lagrangian theory describes the statistics of the pollutant concentration in terms of the statistical properties of the displacements of particles released in the fluid.

1 Introducere

Abordarea lagrangiană a difuziei poluanților în atmosferă se bazeză pe comportarea unei particule (de fluid) aflată într-un fluid purtător ce se mişcă turbulent. O particulă de fluid se defineşte ca un volum de fluid care este omogen din punct de vedere al parametrilor fizici (presiunea, temperatura, viteza, accelerația etc.). Particula este mare în raport cu dimensiunile moleculare, dar suficient de mică spre a se comporta ca un punct care urmează întocmai mişcarea fluidului purtător.

În lucrarea de față se prezintă modelul fizico-matematic care stă la baza abordării lagrangiene a difuziei, expresiile generale ale concentrațiilor de poluanți corespunzătoare şi cazuri particulare ale acestora.

2 Baza teoretică

Să considerăm o particulă, ce se găseşte la momentul t' în punctul $x'(x_1',x_2',x_3')$. Ea se va mişca odată cu fluidul şi va descrie o traiectorie $F[x',t';t]$, unde t este un moment ulterior lui t'. Fie $\varphi(x,t)dx = \varphi(x_1, x_2, x_3, t)\, dx_1\, dx_2\, dx_3$ probabilitatea ca o particulă să se afle la momentul t în elementul de volum $[(x_1, x_1+dx_1)(x_2, x_2+dx_2)(x_3, x_3+dx_3)]$, adică
$x_1 \le F_1 < x_1+dx_1$, $x_2 \le F_2 < x_2+dx_2$ si $x_3 \le F_3 < x_3+dx_3$.

Funcția $\varphi(x,t)$ reprezintă densitatea de probabilitate ca particula să se găseacă în punctul x, la momentul t şi se poate exprima ca produs între două probabilități :

a) densitatea de probabilitate ca particula să se afle în punctul x' la momentul t', $\varphi(x',t')$;
b) densitatea probabilității de tranziție a particulei din punctul x' în punctul x, într-un moment ulterior, t, $Q(x,t \mid x',t')$.

Deoarece punctul x' din spațiu este oarecare, funcția densității de probabilitate va fi:

$$\varphi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} Q(x,t \mid x',t')\varphi(x',t')dx' \quad (1)$$

Dacă în spațiu se află m particule, concentrația medie a ansamblului de particule în punctul x la momentul t, este egală cu

$$\overline{C}(x,t) = \sum_{i=1}^{m} \varphi_i(x,t) \quad (2)$$

unde $\varphi_i(x,t)$ este funcția densității de probabilitate a particulei "i".

Concentrația medie a particulelor într-un punct x la momentul t este egală cu suma dintre concentrația medie a particulelor la mometul t_0 şi concentrația medie a particulelor provenite din sursele aflate în punctul x' în intervalul de timp cuprins între t şi t'.

Ca urmare:

$$\overline{C}(x,t)=\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}Q(x,t|x_0,t_0)\overline{C}(x_0,t_0)dx_0+\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{t_0}^{t}Q(x,t|x',t')S\ (x',t')dx'dt' \quad (3)$$

unde *S (x',t')* este rata de emisie a sursei din punctul *x'*.

Ecuația (3) reprezintă relația lagrangiană fundamentală pentru concentrația poluanților existenți în fluide aflate în mişcare turbulentă.

Deoarece $\overline{C}(x_0,t_0)$ şi $S_i(x',t')$ se presupun cunoscute, determinarea concentrației medii de poluant depinde de evoluția densității probabilității de tranziție. Tranziția particulelor din punctele x_0 şi x' în punctul x se efectuează datorită mişcării fluidului în care se află acestea.

3 Curgere unidimensională

Să considerăm o sursă de poluant cu rata de emisie *S(t)*, situată în originea sistemului de coordonate $x=0$ şi un fluid care curge în direcția *Ox* a sistemului respectiv. Pentru o curgere unidimensională cu viteza u(t), neglijând difuzia moleculară, concentrația de poluant este soluție a ecuației de advecție şi se scrie ca

$$C(x,t)=\int_0^t \delta(x-X(t,t'))S(t')dt \quad (4)$$

unde $\delta(x\text{-}X(t,t'))$ reprezintă funcția delta, iar $X(t, t')$ este distanța străbătută de particulă între momentele t' şi t, calculată cu relația:

$$X(t,t')=\int_{t'}^{t} u(\tau)d\tau \quad (5)$$

unde *u* este viteza instantanee a fluidului.

Cum viteza fluidului este o variabilă aleatoare cu distribuție de probabilitate de tip gaussian, atunci şi distanța pe care se deplasează particula va avea o distribuție de probabilitate, $p_X\,(X,t,t')$, de acelaşi tip:

$$p_x\left(X;t,t'\right)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_X}\exp\left[-\frac{(X-\overline{X})^2}{2\sigma_X{}^2}\right] \quad (6)$$

unde:

$\overline{X}$ este distanța medie parcursă de particulă în intervalul de timp dintre *t'* și *t*;

σ_X^2 - abaterea medie pătratică a distanței , în același interval de timp.

Distanța medie este egală cu produsul dintre viteza medie a fluidului, $\overline{u}$ și timpul de tranziție. Distribuția de probabilitate a distanței parcurse de particulă în intervalul de timp dintre *t'* și *t* reprezintă chiar probabilitatea de tranziție.

Calculul concentrației medii revine la medierea expresiei (4) folosind probabilitatea de tranziție $p_X(X;t,t')$:

$$\overline{C}(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{0}^{t} (x - X(t,t'))S(t')dt' \, p_X(X;t,t')dX = \int_{0}^{t} S(t')p_x(x;t,t')dt' \qquad (7)$$

Pentru obținerea relației (7) s-a folosit următoarea proprietate a funcției delta:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - X(t,t')p_X(X;t,t')dX = p_X(x;t,t') \qquad (8)$$

Pentru o curgere unidimensională a fluidului și o sursă instantanee punctuală care se află la momentul $t=0$ în originea axei, având o rată de emisie egală cu unitatea, concentrația medie de poluant calculată cu relația (7), ținînd cont de expresia probabilității de tranziție, se poate scrie:

$$\overline{C}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x(t)} \exp\left[-\frac{(x-\overline{u}t)^2}{2\sigma_x^2(t)}\right] \qquad (9)$$

unde $\sigma_x^2(t) = \sigma_X^2$.

Când curgerea se efectuează într-un sistem de axe tridimensional concentrația medie a aceleiași surse este dată de expresia:

$$\overline{C}(x,y,z) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}\sigma_x(t)\sigma_y(t)\sigma_z(t)} \exp\left[-\frac{(x-\overline{u}t)^2}{2\sigma_x^2(t)} - \frac{y^2}{2\sigma_y^2(t)} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2(t)}\right] \qquad (10)$$

unde $\sigma_x^2(t)$, $\sigma_y^2(t)$, $\sigma_z^2(t)$ sunt abateriile medii pătratice după cele trei axe ale sistemului de coordonate.

Pentru o sursă punctuală continuă aflată în origine, care emite cu o rată q [g/sec], concentrația medie devine egală cu:

$$\overline{C}(x,y,z)=\frac{q}{2\pi\sigma_y\sigma_z}\exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y{}^2}-\frac{z^2}{2\sigma_z{}^2}\right] \tag{11}$$

Această expresie a concentrației de poluant are un rol important în teoria difuziei atmosferice.

3 Concluzii

Abordarea lagrangiană a difuziei poluanților în atmosferă ia în considerație proprietățile statistice ale deplasării particulelor de poluanți şi este mai simplă decât tratarea euleriană.

Totuşi ea nu se poate aplica atunci când în atmosferă se consideră reacțiile chimice ce au loc între poluanți.

Bibliografie

1	Seinfeld, J.P.	*Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution*, A Wiley Interscience Publication, 1986
2	Zanetti, P.	*Air Pollution Modelling*, Van Nostrand Reinhold, USA, 1990
3	Hurley, P.	„A lagrangian particle–puff approach for plume transport modelling Applications”, *Journal of Applied Meteorology,* 33, 1994, pp. 285-294