Abordarea euleriană a difuziei poluanţilor în atmosferă (partea I)

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

Abstract

In the Eulerian approach the behavior of the atmospheric pollutants is described relative to a fixed coordinate system. Thus the pollutant concentration is a function depending on the system coordinates and must satisfy the material balance taken over a volume element. Expressed mathematically, the concentration must satisfy the continuity equation for the atmospheric fluid.

Introducere

Poluanții emişi în atmosferă de diverse surse sunt supuşi unui proces de dispersie, în principal datorită difuziei turbulente, care poate fi studiată folosind fie:

- formalismul eulerian, când concentrația speciilor de poluanți este descrisă în raport cu un sistem de coordonate fix, fie
- formalismul lagrangian, când concentrația speciilor de poluanți este descrisă în raport cu mişcarea fluidului.

Lucrarea prezintă abordarea dispersiei poluanților utilizând formalismul eulerian.

Formalismul eulerian

Se consideră N specii de poluanți prezente în fluidul atmosferic. Concentrația fiecărei specii dintr-un volum elementar trebuie să satisfacă în fiecare moment ecuația de bilanț masic: orice acumulare de substanță în timp, în volumul considerat, datorită advecției (transportul determinat de deplasarea fluidului) este echilibrată de:

- masa substanței produsă în interiorul volumului prin reacții chimice;
- masa substanței emisă de sursele aflate în elementul de volum;
- masa substanței care intră în volum prin difuzie moleculară.

Ca urmare, concentrația fiecărei specii, C_i, trebuie să satisfacă următoarea ecuație de continuitate în sistemul de coordonate $Ox_1x_2x_3$:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t}+\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_j}\left(u_jC_i\right)=D_i\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial^2 C_i}{\partial x_j^2}+R_i\left(C_1....C_N,T\right)+S_i\left(X,t\right) \qquad (1)$$

unde:

u_j - este componenta j a vitezei fluidului;

D_i - coeficientul de difuzie moleculară al speciei i în fluidul considerat;

R_i - rata de generare a speciei i prin reacții chimice, ce depinde de temperatura fluidului;

S_i - rata de emisie a speciei i în punctul $X=(x_1, x_2, x_3)$ şi la momentul t.

În dinamica atmosferei curgerea este turbulentă, iar câmpul vitezei fluidului (aerului), u_j, este o funcție aleatorie ce poate fi scrisă:

$$u_j = \bar{u}_j + u'_j\ , \quad j = 1, 2, 3 \qquad (2)$$

unde:

$\bar{u}_j$ - este viteza medie a fluidului, a cărei scară de variație temporală este de aproximativ 1 h;

u'_j - fluctuația datorată fenomenului de turbulență şi are scara de variație temporală mult mai mică decât 1 h.

Viteza medie a vântului se obține prin medierea valorilor instantanee măsurate la o stație meteo automată pe o perioadă cuprinsă între 30 min. şi 1 h.

Ținând cont de relația (2), ecuația (1) se scrie:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t}+\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\overline{u}_j+u'_j\right)C_i\right]=D_i\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial^2 C_i}{\partial x_j^2}+R_i\left(C_1....C_N,T\right)+S_i\left(X,t\right) \qquad (3)$$

Deoarece u'_j este variabilă aleatorie şi concentrația C_i din ecuația (3) trebuie să aibă o componentă aleatorie (fluctuația). Astfel concentrația se consideră:

$$C_i=\overline{C}_i+C'_i \qquad (4)$$

unde

$\tilde{C}_i$ - este concentrația medie a speciei i

C'_i - fluctuația concentrației ce satisface condiția lui Reynolds, $\tilde{C'}=0$.

Concentrația medie se poate defini ca fiind media realizată pe ansamblul statistic virtual obținut prin reproducerea unui experiment de dispersie de un număr infinit de ori şi măsurarea de fiecare dată a concentrației poluantului. Medierea într-un punct din spațiu X, la un anumit moment t al tuturor valorilor $C_i(X,t)$ ale fiecărui experiment va genera concentrația $\tilde{C}i(X,t)$.

Cazul unei singure specii de poluant

Vom considera în continuare existența unei singure specii de poluant, deci $R_i = 0$. Introducând expresia concentrației dată de (4) în ecuația (3) vor rezulta mai multe variabile (necunoscute) decât ecuații. Pentru a închide sistemul, fluxurile turbulente se vor exprima în funcție de concentrație folosind relațiile (teoria K):

$\overline{u'_j C'}$ $\qquad$ $\overline{u_j C_j}$

$$u'_j C'=-K_j\frac{\partial\overline{C}}{\partial x_j} \qquad (5)$$

unde K_j este coeficientul de difuzie turbulentă după coordonata x_j. În plus, considerând că difuzia moleculară este neglijabilă în raport cu difuzia turbulentă şi atmosfera incompresibilă , ecuaţia (3) devine:

$$\frac{\partial \overline{C}}{\partial t} + \sum_{j=1}^{3} \overline{u}_j \frac{\partial \overline{C}}{\partial t} = \sum_{j=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_j}\left(K_j \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_j} \right) + S(X,t) \tag{6}$$

În cazul unei *surse instantanee* care emite în următoarele condiţii:

- este situată în originea sistemului de coordonate $Ox_1x_2x_3$ (cu $x_1=x$, $x_2=y$, $x_3=z$);
- intensitatea emisie este egală cu S;
- direcţia vântului coincide cu direcţia Ox a sistemului de referinţă;
- viteza vântului este $\tilde{u}$;
- coeficienţii de difuzie turbulentă K_x, K_y, K_z sunt constanţi;

ecuaţia (6) devine:

$$\frac{\partial \overline{C}}{\partial t} + \overline{u}\frac{\partial \overline{C}}{\partial x} = K_x \frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial z^2} \tag{7}$$

cu următoarele condiţii la limită:

1^0 $\tilde{C}(x,y,z,0) = S\delta(x)\delta(y)\delta(z)$ (8)

unde $\delta(x)$, $\delta(y)$, $\delta(z)$ sunt funcţiile Dirac

2^0 $\tilde{C}(x,y,z,t) = 0$ pentru x,y,z $\rightarrow \pm\infty$ (9)

Pentru rezolvarea ecuaţiei (7) se consideră concentraţia medie ca fiind:

$\tilde{C}(x, y,z,t) = C_x(x,t)\cdot C_y(y,t) \cdot C_z(z,t)$ (10)

Ţinând cont de relaţia (10), din condiţia (8) se obţin:

$C_x(x,0) = S^{1/3}\,\delta(x)$; $C_y(y,0) = S^{1/3}\,\delta(y)$; $C_z(z,0) = S^{1/3}\,\delta(z)$ (11)

Folosind metoda transformatei Fourier se obţine soluţia ecuaţiei (7) şi are expresia:

$$\overline{C}(x,y,z,t) = \frac{S}{8(\pi t)^{\frac{3}{2}}\left(K_x K_y K_z\right)^{\frac{1}{2}}}\exp\left\{-\left[\frac{(x-\overline{u}t)^2}{4K_x t} + \frac{y^2}{4K_y t} + \frac{z^2}{4K_z t}\right]\right\} \tag{12}$$

Pentru o *sursa continuă* aflată în originea sistemului de coordonate şi care emite cu o rată q într-o atmosferă infinită, izotropă, caracterizată de un câmp de vânt constant cu viteza $\tilde{u}$ în direcția Ox a sistemului, ecuația difuziei este:

$$\bar{u}\frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = K\left[\frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2}\right] + q\delta(x)\delta(y)\delta(z) \qquad (13)$$

cu condiția la limită

$$\bar{C}(x, y, z) = 0 \qquad (14)$$

pentru $x,y,z \to \pm\infty$

În ecuația (13) K este coeficientul de difuzie turbulentă având aceeaşi valoare după cele trei axe ale sistemului de referință.

Pentru rezolvarea acestei ecuații se foloseşte transformarea de tipul

$$f(x,y,z) = \tilde{C}(x,y,z)\, exp(-kx) \qquad (15)$$

unde $k = \tilde{u}/K$

Soluția ecuației (13) este:

$$\bar{C}(x, y, z) = \frac{q}{4\pi K r}\exp\left[-\frac{\bar{u}(r-x)}{2K}\right] \qquad (16)$$

cu $r^2 = x^2+y^2+z^2$ sau $r = x[1+(y^2+z^2)/x^2]^{½}$

Considerând pana de poluant subțire se poate scrie $y^2+z^2 << x^2$, astfel că r se poate aproxima cu

$$r \sim x\,[1+(y^2+z^2)/(2x^2)] \qquad (17)$$

Cu această aproximație relația(16) devine:

$$\bar{C}(x, y, z) = \frac{q}{4\pi K x}\exp\left[-\frac{\bar{u}(y^2+z^2)}{4Kx}\right] \qquad (18)$$

Când coeficienţii de difuzie turbulentă sunt diferiţi concentraţia va fi egală cu:

$$\overline{C}(x,y,z)=\frac{q}{4\pi\left(K_y K_z\right)^{\frac{1}{2}}x}\exp\left[-\frac{\overline{u}}{4x}\left(\frac{y^2}{K_y}+\frac{z^2}{K_z}\right)\right] \tag{19}$$

Coeficienţii de difuzie care apar în expresiile concentraţiei de poluant deduse mai sus sunt presupuşi constanţi. În realitate aceştia depind de mai mulţi parametri, cei mai importanţi fiind coordonatele, stabilitatea atmosferei şi scara temporală a procesului de dispersie.

Concluzii

Concentraţia poluanţilor în atmosferă determinată prin formalismul eulerian are o formă gaussiană atât pentru surse instantanee, cât şi continue.

Pentru sursele instantanee concentraţia poluanţilor depinde de poziţia punctului faţă de sursă şi timpul scurs din momentul emisiei; cu cât punctul este mai îndepărtat de sursă şi timpul mai mare, cu atât concentraţia poluantului scade.

În cazul surselor continue, concentraţia poluantului depinde de poziţia punctului şi viteza vântului; creşterea vitezei vântului micşorează concentraţia de poluant în orice punct din spaţiu.

Abordarea euleriană a dispersiei poluanţilor este mai convenabilă pentru descrierea curgerii fluidului atmosferic deoarece ecuaţiile mişcării sunt mai simple. De asemenea, permite modelarea difuziei în curgeri mai complexe, cum sunt cele nestaţionare şi neomogene.

Bibliografie

1	Seinfeld, J.H	*Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution,* New York, A Wiley Interscience Publication, 1986
2	Zanetti, P.	*Air Pollution Modeling*, New York, Van Nostrand Reinhold, 1990
3	International Atomic Energy Agency(Viena)	*Atmospheric Dispersion Models for Application in Relation to Radionuclide Releases*, IAEA-TECDOC-379, June 1986
4	Draxler R. R.	*An Improved Gaussian Model for Long -Term Average Air Concentration Estimates,* Atmospheric Environment, vol.14, p.597-601, 1980
5	Pal Arya S	*Air Pollution Meteorology and Dispersion,* Oxford University Press, 1999