



*Modelli di Dispersione
degli Inquinanti in Aria*
2011

Parte 1

**Teoria di base della Dispersione degli
Inquinanti in Atmosfera**

*dott. Roberto Sozzi
dott. Andrea Bolignano*

Prima di studiare le modalità di trasporto e di dispersione degli inquinanti in aria è necessario premettere alcuni concetti di base.

1. Peso Molecolare equivalente dell'aria

L'aria (sia secca che umida) è stata considerata come un gas perfetto, quindi rispetta la legge dei gas:

$$pV = nRT$$

P = pressione (mb)

T = temperatura (K)

V = volume (m³)

n = numero di moli del gas

R = 0.083145 m³ mb moli⁻¹ K⁻¹

Per poterla applicare

⇒

Qual è il Peso Molecolare dell'aria secca?

Aria Secca. Principali Costituenti

N₂ (PM=28.01) → 78% (in volume)

O₂ (PM=32.00) → 21% (in volume)

Ar (PM=39.95) → 1% (in volume)

Volume occupato da una mole di gas

$$V_* = 22.4141 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$$

$$(0.78/V_*) 28.01 + (0.21/V_*) 32.00 + (0.01/V_*) 39.95 = PM_{\text{aria}}/V_*$$

Moli N₂

Moli O₂

Moli Ar



Peso Molecolare Aria = 28.966

2. Concentrazione di molecole in aria

Costante dei gas R = 0.083145 m³ mb mol⁻¹ K⁻¹)

Numero Avogadro A_v = 6.02253 10²³ molecole mole⁻¹

$$pV = nRT$$



$$p = \frac{nRT}{V} = \frac{nA_v}{V} \left(\frac{R}{A_v} \right) \cdot T = N \cdot k_B \cdot T$$



k_B = Costante di Boltzmann

$$N = \frac{p}{k_B T}$$

Concentrazione di molecole in aria (Molecole m³)

Esempio

$$P = 1013 \text{ mb}$$

$$T = 288 \text{ K}$$

$$N = 2.56 \cdot 10^{25} \text{ molecole/m}^3$$

Concentrazione di molecole in aria

- **Direttamente proporzionale alla pressione**
- **Inversamente proporzionale alla temperatura**

Quantificazione della presenza di una specie gassosa X in aria

1. Densità Molecolare (Number Density)

È il numero di molecole della specie X presenti nell'unità di volume (1 m^3) di aria secca.

È la definizione di concentrazione più frequentemente impiegata quando vengono modellizzate le reazioni chimiche dell'atmosfera.

La indichiamo con il simbolo N_x (**molecole m^{-3}**)

2. Concentrazione di massa:

È la quantità in peso della specie X presente nell'unità di volume (1 m^3) di aria secca.

È la definizione fisicamente più intuitiva che si possa dare

Lo indichiamo con il simbolo ρ_x (**g m^{-3}**). Dato che normalmente siamo interessati a sostanze presenti in tracce, l'unità di misura sarà (**mg m^{-3}**) o (**$\mu\text{g m}^{-3}$**).

3. Rapporto di mescolanza (Frazione molare, mixing ratio)

È il numero di moli della specie X presenti per ogni mole di aria secca.

È l'unità di misura più frequentemente impiegata nelle misure.

La indichiamo con il simbolo C_x (moli di X / moli di aria)

Dato che una mole di gas occupa 22.4141 litri, un'unità alternativa a (moli X/moli aria) è m^3 di X / m^3 di aria

Dato che siamo interessati a specie presenti in traccia

ppm = $1 \cdot 10^{-6}$ moli X / moli aria

Ppb = $1 \cdot 10^{-9}$ moli X / moli aria

Relazioni tra le varie definizioni di concentrazione

Densità molecolare → Concentrazione in massa

$$\rho = \frac{N_x}{A_v} PM_x$$

Concentrazione in massa ↔ Rapporto di mescolanza

$$C_x = \rho_x \frac{R \cdot T}{p \cdot PM_x}$$

$$\rho_x = C_x \frac{p \cdot PM_x}{R \cdot T}$$

Esempio

P = 1013 mb

T = 288 K

Sostanza: NO₂ (PM_{NO₂} = 46.006)

$$\rho_x = 1 \cdot (\mu\text{g} \cdot \text{m}^{-3}) = 10^{-6} \cdot \frac{0.083145 \cdot 288}{1013 \cdot 46.006} = 5.138 \cdot 10^{-10} \left(\frac{\text{moli}_{NO_2}}{\text{moli}_{aria}} \right) = 0.5138 \text{ ppb}$$

$$C_x = 1 \text{ ppb} = 10^{-9} \cdot \frac{1013 \cdot 46.006}{0.083145 \cdot 288} = 1,9462 \cdot 10^{-6} (\text{g} \cdot \text{m}^{-3}) = 1,9462 (\mu\text{g} \cdot \text{m}^{-3})$$

Inquinanti

Specie chimiche presenti in traccia in aria che hanno effetti potenzialmente negativi sulla salute umana e sugli ecosistemi

A questo punto

... possiamo occuparci del trasporto e della diffusione turbolenta degli inquinanti in aria.

Sono possibili **due distinti approcci teorici alla dispersione degli inquinanti in aria:**

⇒ **Approccio Euleriano**

⇒ **Approccio Lagrangiano**

Approccio Euleriano

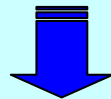
Lo stato del *PBL* e la dispersione degli inquinanti vengono descritti in un quadro di riferimento in cui le varie proprietà del fluido come la velocità $\underline{u}(x,y,z,t)$ e la concentrazione dell'inquinante $\mathbf{c}(x,y,z,t)$ sono definite in ogni punto \underline{x} dello spazio e del tempo t . In sostanza, tale descrizione si realizza scrivendo:

- le varie equazioni che descrivono il moto del fluido (aria)
- le equazioni di conservazione delle differenti specie inquinanti introdotte nell'aria.

Approccio Euleriano = descrizione fluidodinamica di un mezzo continuo e presuppone una visione totalmente deterministica del fenomeno.

Approccio Lagrangiano

Nella descrizione Lagrangiana l'**inquinante** non è considerato un fluido continuo immesso in un altro fluido continuo (aria), ma un **insieme di particelle** (con caratteristiche analoghe al concetto di particella dato in Meteorologia) tra loro **indipendenti** ed **individuabili singolarmente**, immesse in un fluido il cui moto è noto (moto medio e fluttuazioni turbolente).



La descrizione del **moto di ciascuna particella, strettamente legato al moto generale del fluido**, non può più essere ritenuto deterministico, ma **stocastico** a causa della turbolenza del PBL.



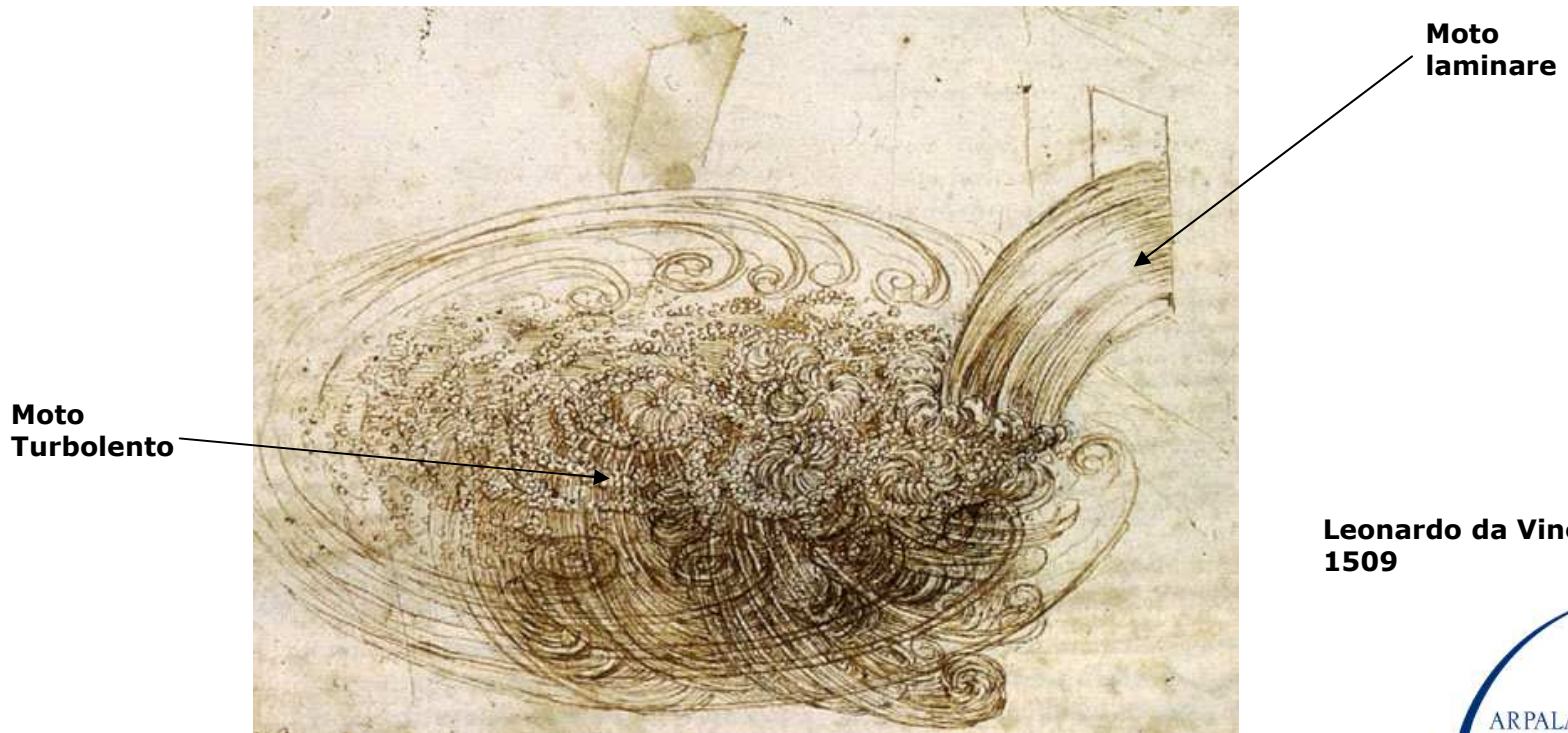
Moto Turbolento

Le osservazioni sperimentali dei fluidi di interesse geofisico (mare, atmosfera) ed ingegneristico (fluidi in condotti) evidenziano un **regime di movimento ben lontano da quello laminare**.

Tale regime di moto risulta estremamente **irregolare e apparentemente privo di logica**.

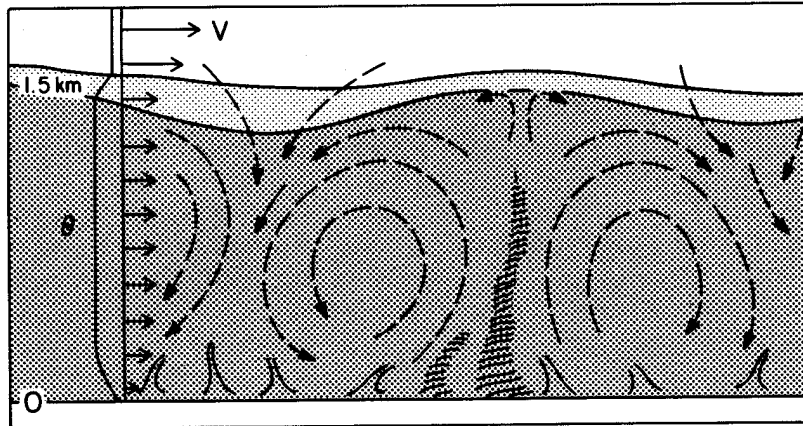
In generale, in esso possiamo individuare un comportamento **sostanzialmente regolare cui si sovrappongono disturbi di dimensione e durata variabile**.

I disturbi a scala maggiore tendono a frantumarsi in disturbi a scala sempre più piccola, suggerendo una sorta di **cascata dimensionale**.

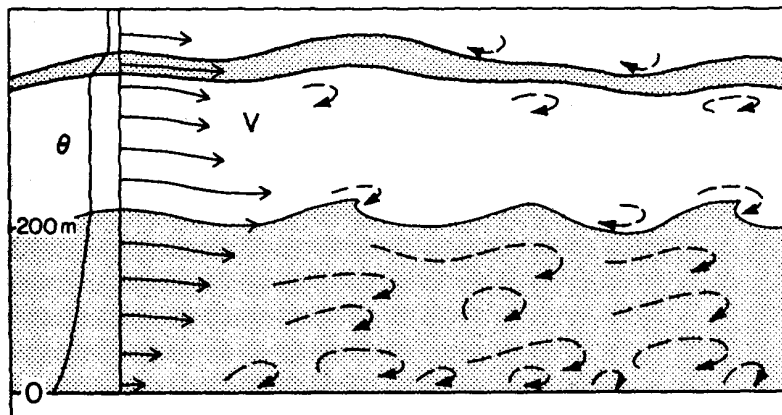




Situazione Convettiva



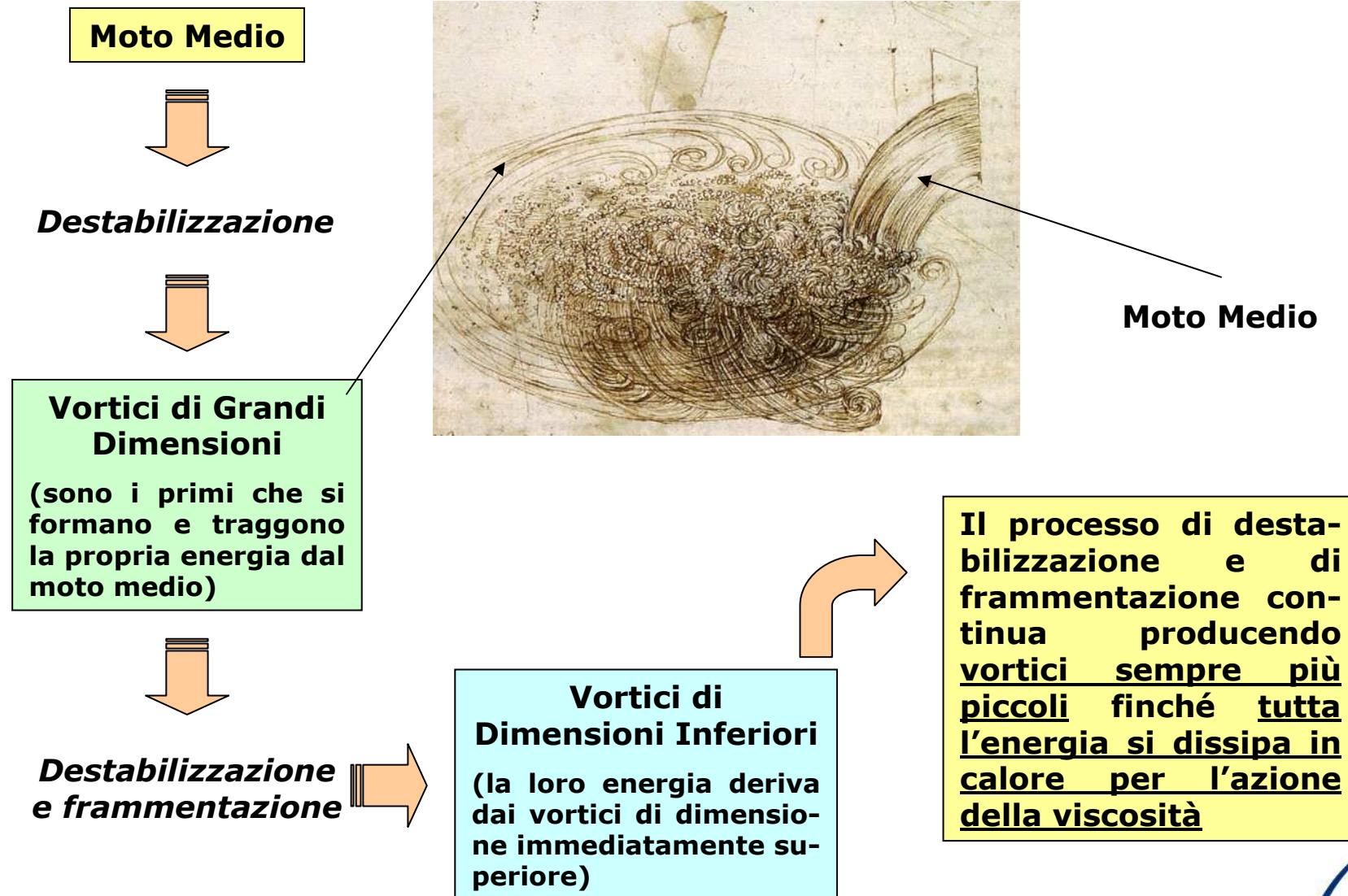
Situazione Stabile



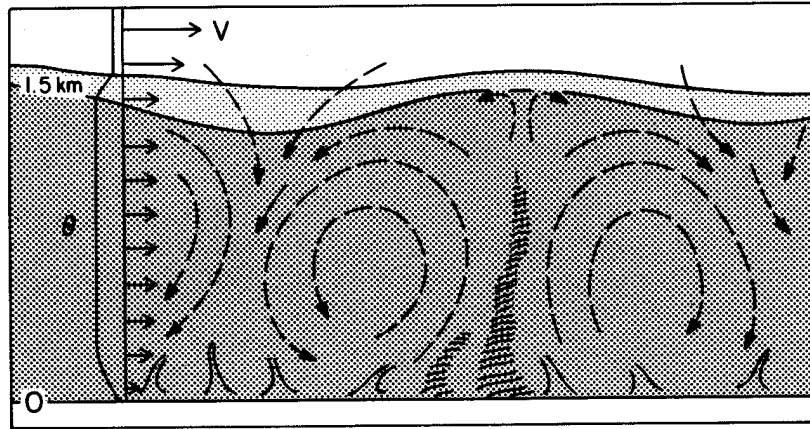
Elemento Caratteristico del moto turbolento nel PBL

- Moto medio di traslazione
- Disturbi nel moto di origine turbolenta (Vortice/Eddy)

Energy Cascade

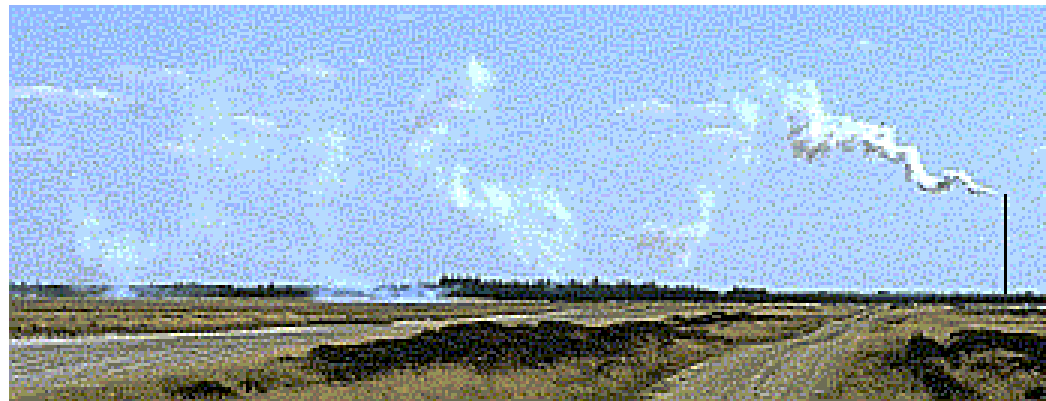


Vortice (Eddy): porzione di PBL di dimensioni finite (L) in cui si localizza un disturbo del moto e/o un disturbo nelle proprietà chimiche e fisiche del fluido.



I vortici a maggiori dimensioni (es quelli convettivi) possono avere forme asimmetriche dovute all'azione del moto medio da cui hanno tratto la propria energia

Energy Cascade → **Produzione di una sequenza di vortici** $i = 1, \dots, N$ con dimensione L_i e velocità caratteristica V_i progressivamente inferiori.

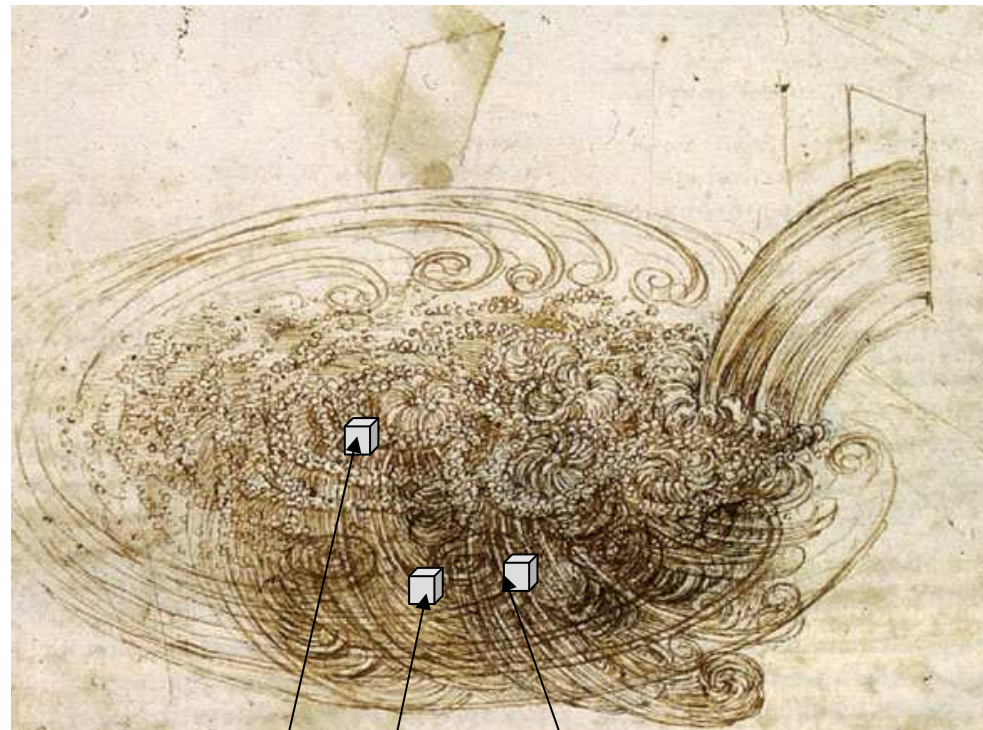


Nella descrizione Lagrangiana la **concentrazione** degli inquinanti nel *PBL* viene **descritta analizzando la traiettoria** (posizione nel tempo) di ogni particella entro il fluido.

**La posizione di ogni particella $X(x_0, t_0, t)$ e
la sua velocità $U(x_0, t_0, t)$
ad ogni istante temporale **dipende:****

- ⇒ dalla **posizione della particella al tempo iniziale t_0** (istante iniziale)
- ⇒ dal **tempo attuale t**
- ⇒ dal **livello di turbolenza del fluido** entro cui si trovano a muoversi le particelle

**Leonardo da Vinci
1509**



Immaginiamo di inserire in questi cubetti dell'inquinante.

La visione Lagrangiana *semplicemente* segue l'evoluzione nel tempo di ogni singola particella *marcata* immessa nel fluido in moto turbolento.

1. La Descrizione Euleriana

Il modello matematico del *PBL* è costituito dalle equazioni di conservazione della quantità di moto, della massa e dell'energia, oltre alla legge dei gas perfetti.

Per descrivere anche la **dispersione della varie specie inquinanti immesse in aria**, è necessario aggiungere a queste le equazioni di conservazione di ciascuna delle specie chimiche che si intende studiare (una per ciascuna specie chimica considerata).

Si consideri, per semplicità:

- **una sola specie inquinante**
- un generico **volume di controllo** costituito da un **parallelepipedo** con lati δx , δy e δz infinitesimi e paralleli agli assi di riferimento
- le componenti della velocità del vento e la concentrazioni di inquinante siano **variabili istantanee**

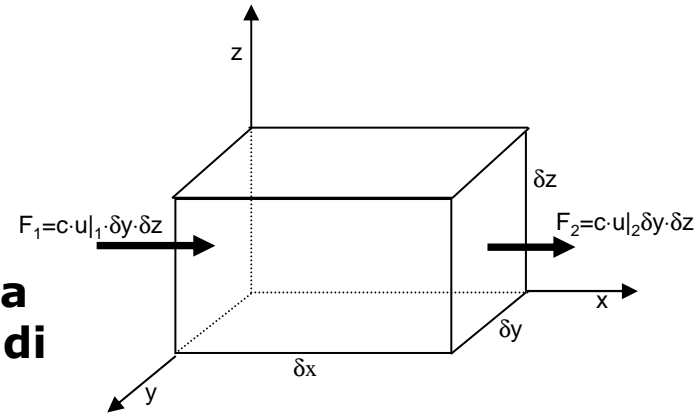
Bilancio di massa istantaneo

Flusso in transito lungo l'asse x

$$F_x = (c \cdot u_1 - c \cdot u_2) \cdot \delta y \cdot \delta z$$

δx (infinitesimo) è la distanza che separa le due facce opposte del volume ed quindi

....



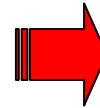
$$c \cdot u_2 = c \cdot u_1 + \left. \frac{\partial(c \cdot u)}{\partial x} \right|_1 \delta x + \frac{1}{2} \cdot \left. \frac{\partial^2(c \cdot u)}{\partial x^2} \right|_1 \delta x^2 + \dots$$

Sviluppo in Serie di Taylor



$$F_x = \left\{ c \cdot u_1 - \left(c \cdot u_1 + \left. \frac{\partial(c \cdot u)}{\partial x} \right|_1 \delta x + \frac{1}{2} \cdot \left. \frac{\partial^2(c \cdot u)}{\partial x^2} \right|_1 \delta x^2 + \dots \right) \right\} \delta y \cdot \delta z$$

$$\approx - \frac{\partial(c \cdot u)}{\partial x} \delta x \cdot \delta y \cdot \delta z$$



Considerazioni simili per i flussi in transito lungo gli assi y e z



La variazione nel tempo della concentrazione di sostanza entro il volume di controllo è pari alla somma algebrica:

- ⇒ **dei flussi in transito lungo x, y e z**
- ⇒ **delle emissioni presenti entro il volume ⇒ S**
- ⇒ **della perdita di sostanza derivante dai processi di rimozione R e dalle trasformazioni chimiche T avvenute entro il volume**



$$\left(\delta x \cdot \delta y \cdot \delta z \cdot \frac{\partial c}{\partial t} \right) = -\delta x \cdot \delta y \cdot \delta z \cdot \left\{ \frac{\partial(c \cdot u)}{\partial x} + \frac{\partial(c \cdot v)}{\partial y} + \frac{\partial(c \cdot w)}{\partial z} \right\} + \delta x \cdot \delta y \cdot \delta z \cdot (S + R + T)$$



$$\frac{\partial c}{\partial t} + \left\{ \frac{\partial(c \cdot u)}{\partial x} + \frac{\partial(c \cdot v)}{\partial y} + \frac{\partial(c \cdot w)}{\partial z} \right\} = S + R + T$$

N.B. Sono stati trascurati i fenomeni di diffusività molecolare, di nessuna rilevanza entro il PBL.

Se si considerano N sostanze, per ciascuna è valido il relativo **bilancio istantaneo di massa** che, per la sostanza k -esima, trascurando la diffusività molecolare e le deposizioni, è dato da:

$$\frac{\partial c_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(uc_k) + \frac{\partial}{\partial y}(vc_k) + \frac{\partial}{\partial z}(wc_k) = + R(c_1, c_2, \dots, c_k, \dots, c_N) + S$$

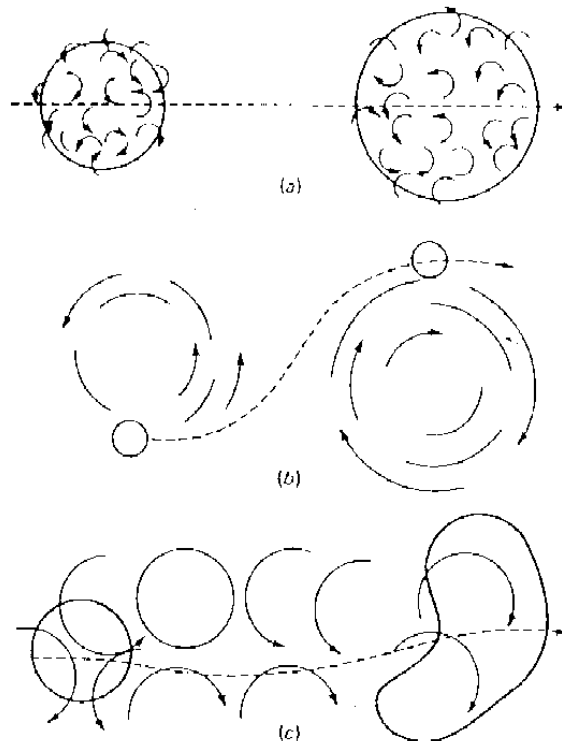
Reazioni di cinetica chimica Termine di sorgente

E' evidente che questa equazione scritta per la specie k -esima:

- **non può essere usata da sola**, ma con tutte le altre equazioni che descrivono nel suo complesso il **PBL**
- e con tutte le equazioni di conservazione relative alle altre specie.

Anche in questo caso, l'insieme di equazioni è un sistema chiuso, ma non risolvibile per le stesse ragioni addotte nel caso della descrizione istantanea del PBL (presenza della turbolenza e comportamento caotico delle soluzioni)

Prima di vedere che si può fare, è importante analizzare dal punto di vista fenomenologico l'influenza della struttura a vortici del *PBL* su un singolo *sbuffo* (*puff*) di inquinante.



Se il *puff* incontra un vortice di dimensione inferiore, è il *puff* che incorpora il vortice.

Se il *puff* incontra un vortice di dimensione maggiore, viene deviata la sua traiettoria o viene *incorporato*.

In un *PBL* reale hanno luogo entrambi i fenomeni

Modello utilizzabile \Rightarrow Ipotesi di Reynolds

$$c_k = \bar{c}_k + c_k'$$

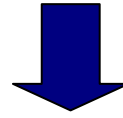
**Concentrazione istantanea =
concentrazione media + fluttuazione a media nulla**



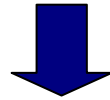
$$\frac{\partial \bar{c}_k}{\partial t} + u \frac{\partial \bar{c}_k}{\partial x} + v \frac{\partial \bar{c}_k}{\partial y} + w \frac{\partial \bar{c}_k}{\partial z} = - \frac{\partial}{\partial x} (\overline{u'c_k'}) - \frac{\partial}{\partial y} (\overline{v'c_k'}) - \frac{\partial}{\partial z} (\overline{w'c_k'}) + R + \bar{S} \quad K=1,2,\dots,N$$

Considerazioni:

- \Rightarrow il termine **R** (Reazioni Chimiche) dipende dalla concentrazione media di ogni specie considerata e quindi le N equazioni restano ancora tra loro legate;
- \Rightarrow l'insieme delle equazioni dipende direttamente dalla *Meteorologia* attraverso il campo di vento medio;
- \Rightarrow e ne dipende anche implicitamente attraverso le covarianze (flussi) tra la concentrazione dei vari inquinanti e le componenti del vento;
- \Rightarrow anche in questo caso, il sistema complessivo di equazioni non è chiuso.



E' necessaria una **Ipotesi di Chiusura** per il sistema



Analogamente a quanto visto per il modello di *PBL*, le possibili chiusure sono numerose e di varia complessità.

La più usata \Rightarrow chiusura di tipo **K**:

I flussi turbolenti vengono espressi mediante i **gradienti locali** delle **variabili medie**



$$\overline{u'c_k'} = -K_{xx} \frac{\partial \bar{c}_k}{\partial x}$$

$$\overline{v'c_k'} = -K_{yy} \frac{\partial \bar{c}_k}{\partial y}$$

$$\overline{w'c_k'} = -K_{zz} \frac{\partial \bar{c}_k}{\partial z}$$

$K_{xx}, K_{yy}, K_{zz} \Rightarrow$ Coefficienti di diffusività turbolenta

Impiego di una chiusura di tipo K



Disaccoppiamento delle equazioni di bilancio di massa degli N inquinanti dalle equazioni che descrivono l'evoluzione delle variabili meteorologiche medie



Operativamente, è possibile prima ricostruire il **campo di vento** (che è poi, **apparentemente**, l'unica variabile meteorologica che interessa) e poi risolvere le **equazioni di dispersione degli inquinanti**.



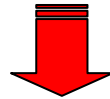
Apparentemente

La turbolenza atmosferica è stata tutta condensata nei coefficienti di diffusione K_{xx} , K_{yy} , K_{zz} .



Determinazione **diretta** mediante il modello meteorologico o **indiretta** mediante **parametrizzazioni** che si fondano tutte, direttamente o indirettamente sulla Teoria della Similarità

Per **semplificare** ulteriormente, si **ipotizzi** che *le varie specie considerate non reagiscano chimicamente tra loro e non presentino decadimenti.*



In questo caso il termine **R si annulla** e le *equazioni per i diversi inquinanti risultano tra loro indipendenti.*

Consideriamo quella di un **generico inquinante**:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + v \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + w \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = - \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[K_{xx} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[K_{yy} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{zz} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right] \right\} + \bar{S}$$

Equazione Semiempirica Euleriana per la descrizione della dispersione di un inquinante in aria

Equazione di base della descrizione euleriana della dispersione di un inquinante in aria

Semiempirica \Rightarrow Risultato delle **semplificazioni** introdotte



- 1) Chiusura di tipo K**
- 2) Disaccoppiamento dal modello meteorologico**
- 3) Parametrizzazione dei coefficienti di diffusività turbolenta**

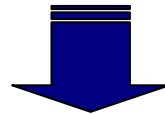
Note.

La chiusura di tipo K presuppone che i flussi nelle tre direzioni siano tra loro indipendenti. Questo non è molto realistico, soprattutto nelle situazioni convettive dove questo modello presenta i maggiori limiti.

Soluzioni Analitiche Tipiche

In **termini generali**, l'equazione semiempirica euleriana, con tutte le semplificazioni adottate e con la conoscenza del campo di vento medio, **non consente una soluzione analitica**.

Se, però, si considerano **situazioni fortemente idealizzate**, è possibile ottenere alcune soluzioni analitiche, **due** delle quali rivestono un'**importanza applicativa notevole**.



1. Soluzione Base Puff

2. Soluzione Base Plume

1. Soluzione Base Puff

Si considerino le condizioni seguenti:

- ⇒ sorgente nell'**origine** del sistema di riferimento (0,0,0) con asse x nella direzione media del vento;
- ⇒ dalla sorgente al tempo $t_0=0$ viene emesso un ***puff istantaneo*** di inquinante (q = massa dell'inquinante);
- ⇒ il ***campo di vento è uniforme*** sia in orizzontale che in verticale e la velocità vale ***U***;
- ⇒ i coefficienti di diffusività turbolenta K_{xx} , K_{yy} , K_{zz} sono costanti.

Nota

La soluzione Base puff è **l'idealizzazione** di un **rilascio istantaneo di una sostanza inquinante**. Un esempio è il rilascio di una sostanza pericolosa dovuto ad un evento accidentale che, per esempio, depressurizza istantaneamente un contenitore in cui tale sostanza era contenuta a pressione superiore a quella atmosferica

Per **queste condizioni** \Rightarrow si può ottenere una **soluzione totalmente analitica** dell'equazione semiempirica euleriana.



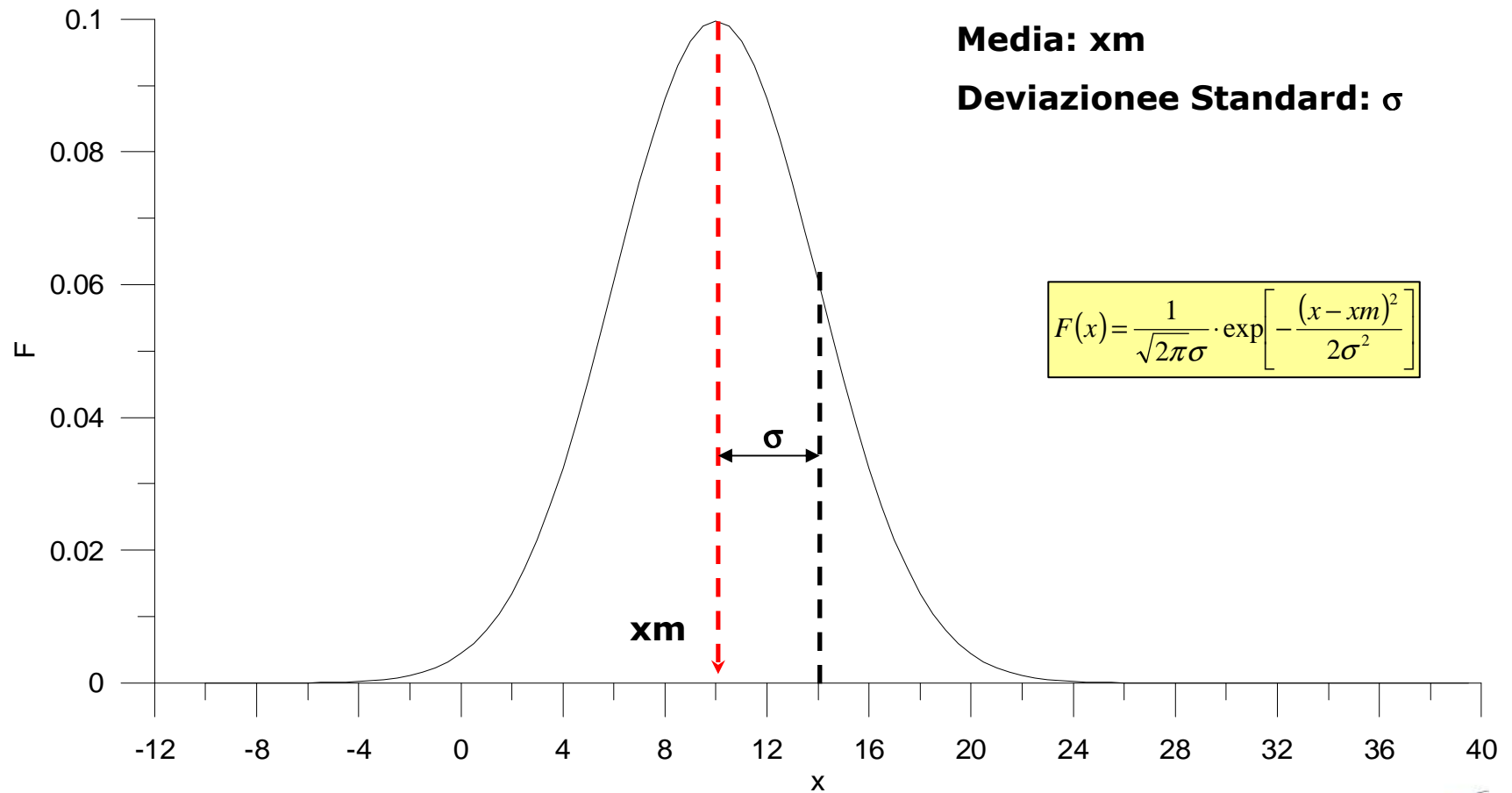
La concentrazione in un punto $\mathbf{P}(x,y,z)$ al tempo t è pari a:

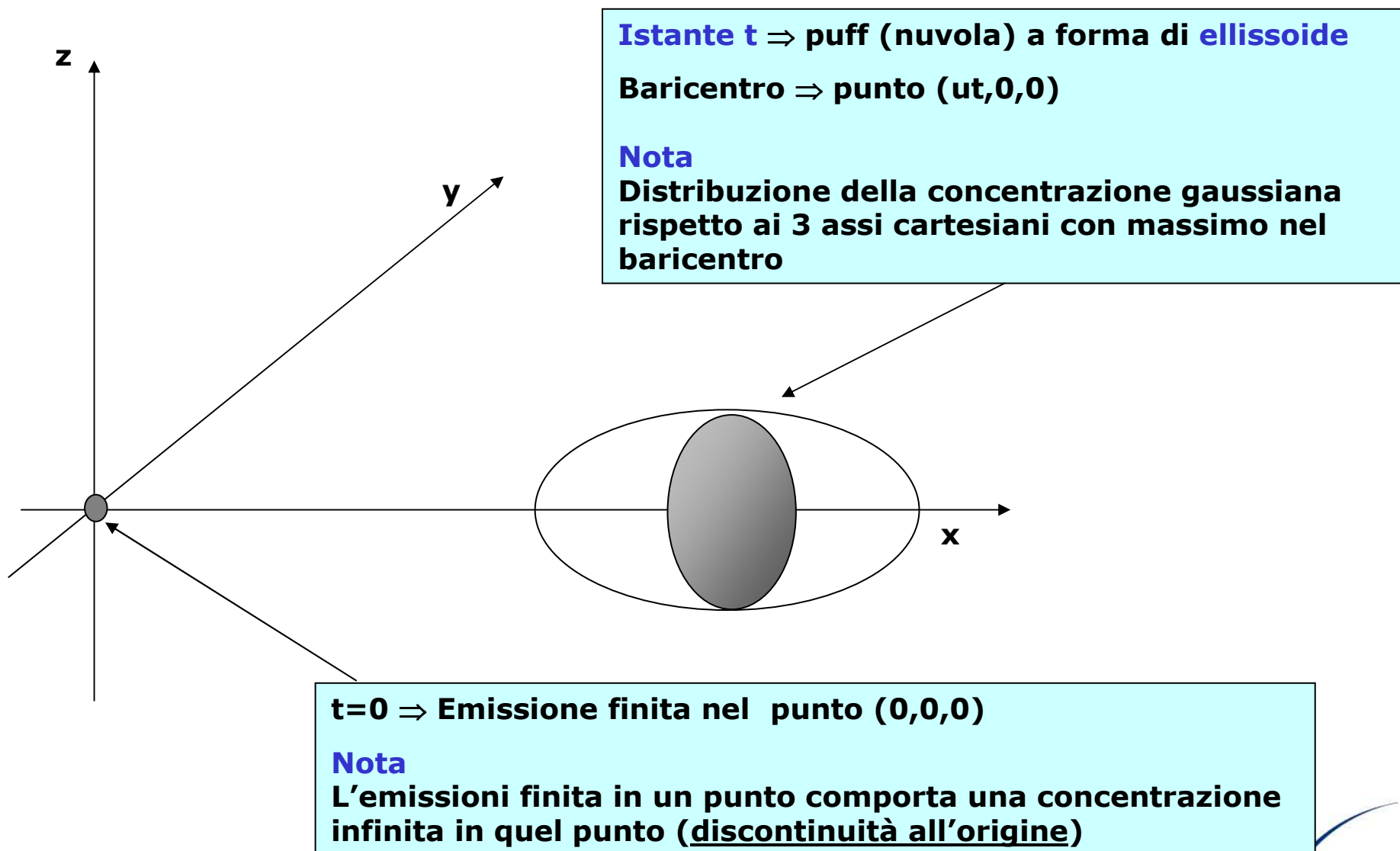
$$c(x, y, z, t) = \frac{q}{(4\pi)^{3/2} (K_{xx} K_{yy} K_{zz})^{1/2}} \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{4t} \left[\frac{(x-ut)^2}{K_{xx}} + \frac{y^2}{K_{yy}} + \frac{z^2}{K_{zz}} \right] \right\}$$

- \Rightarrow La concentrazione nel punto $\mathbf{P}(x,y,z)$ è il risultato della sovrapposizione di tre funzioni di tipo gaussiano, una relativa a ciascun asse cartesiano.
- \Rightarrow La concentrazione varia col tempo dall'istante del rilascio e diminuisce proporzionalmente a $t^{-3/2}$
- \Rightarrow Il puff **inizialmente** ha dimensione infinitesima (un punto) e **poi cresce dimensionalmente nel tempo come un ellissoide**

Gaussiana

Puff





La **concentrazione massima** si trova in corrispondenza del **baricentro** del *puff* e vale

$$c_{\max} = \frac{q}{(4\pi t)^{3/2} (K_{xx} K_{yy} K_{zz})^{1/2}}$$

e **continua a decrescere** in modo direttamente proporzionale a $t^{-3/2}$



Questa soluzione analitica è la base formale per una celebre famiglia di modelli di dispersione denominati
Modelli Gaussiani Puff.

2. Soluzione Base Plume

Si considerino le condizioni seguenti:

- ⇒ una sorgente posta nell'origine del sistema di riferimento $(0,0,0)$ con asse x posto lungo la direzione del vento medio;
- ⇒ dalla sorgente e dal tempo $t_0 = -\infty$ in poi viene emessa una quantità costante di inquinante ($Q =$ tasso di emissione = quantità di inquinante per unità di tempo). Da questo punto nello spazio parte quindi un **pennacchio (plume)** di inquinante;
- ⇒ il campo di vento è considerato uniforme in senso orizzontale e verticale e la velocità è pari a **U** ;
- ⇒ i coefficienti di diffusività turbolenta K_{xx}, K_{yy}, K_{zz} sono costanti.

Nota

Questa situazione ideale simula una sorgente punto che emette con continuità come, per esempio, il fumo di una ciminiera emesso da un impianto energetico o industriale.

Anche in questo caso, è possibile ottenere una **soluzione analitica** dell'equazione euleriana del trasporto e della dispersione degli inquinanti che, questa volta, è **di tipo stazionario (cioè non varia nel tempo)**.

L'espressione analitica che fornisce la **concentrazione in un punto P(x,y,z)** ad **ogni istante** è pari a:

$$c(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_z u} \cdot \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right]$$

dove:

$$\sigma_y = \left(\frac{2x}{u} K_y\right)^{1/2} \quad \sigma_z = \left(\frac{2x}{u} K_z\right)^{1/2}$$

Nota

Questa è una **soluzione stazionaria** e, come si può immaginare, è una delle candidate migliori per la costruzione di un modello semplice che consideri **l'evoluzione nel tempo della dispersione di un inquinante come una successione di stati stazionari**.

Note

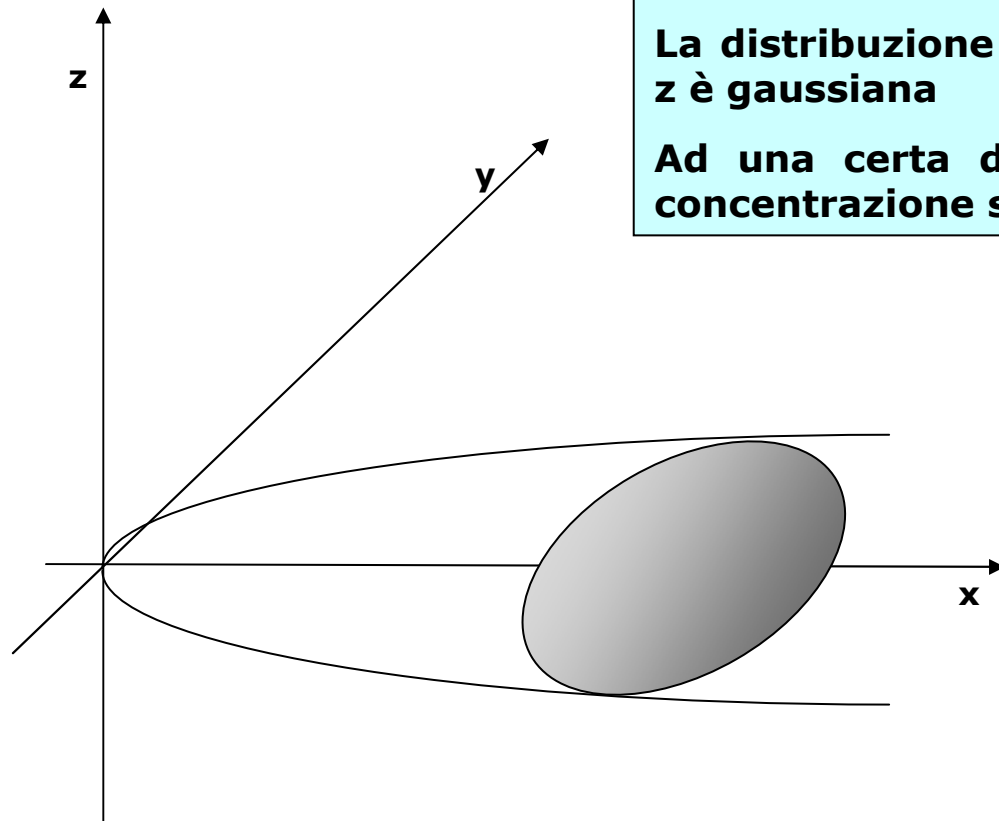
Il *plume* mantiene forma e dimensione costanti nel tempo

Presenta un'origine, ma prosegue indefinitamente all'aumentare di x

La sezione del *plume* nel piano (y,z) ha una forma di ellissoide

La distribuzione di concentrazione in direzione y e z è gaussiana

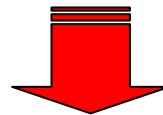
Ad una certa distanza sottovento x la massima concentrazione sta sull'asse di simmetria del *plume*



$$C_{\max}(x) = \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_zU}$$

Riassumendo:

1. La **soluzione base *puff*** idealizza una **tipica situazione non stazionaria** in cui sia individuabile un tempo iniziale di rilascio.
2. La **soluzione base *plume*** idealizza una **tipica situazione indefinitamente stazionaria**
3. Entrambe le soluzioni ipotizzano che l'emissione abbia origine in un punto dello spazio (**sorgente punto**)
4. **Nessuna** di queste soluzioni tiene conto dell'**interazione** del *puff* o del *plume* con barriere rigide come il **suolo**
5. La **meteorologia** considerata è **più che semplificata**.



Le due soluzioni base individuate costituiscono solo il fondamento formale per la costruzione di due tipiche famiglie di modelli operativi (di fatto semiempirici):

- ⇒ **Modelli non stazionari puff**
- ⇒ **Modelli stazionari gaussiani plume**

2. La Descrizione Lagrangiana

Dispersione di inquinante



Movimento di un elevato numero di particelle.

La **massa di ogni particella si conserva nel tempo** (se non hanno luogo reazioni chimiche o processi di decadimento)...

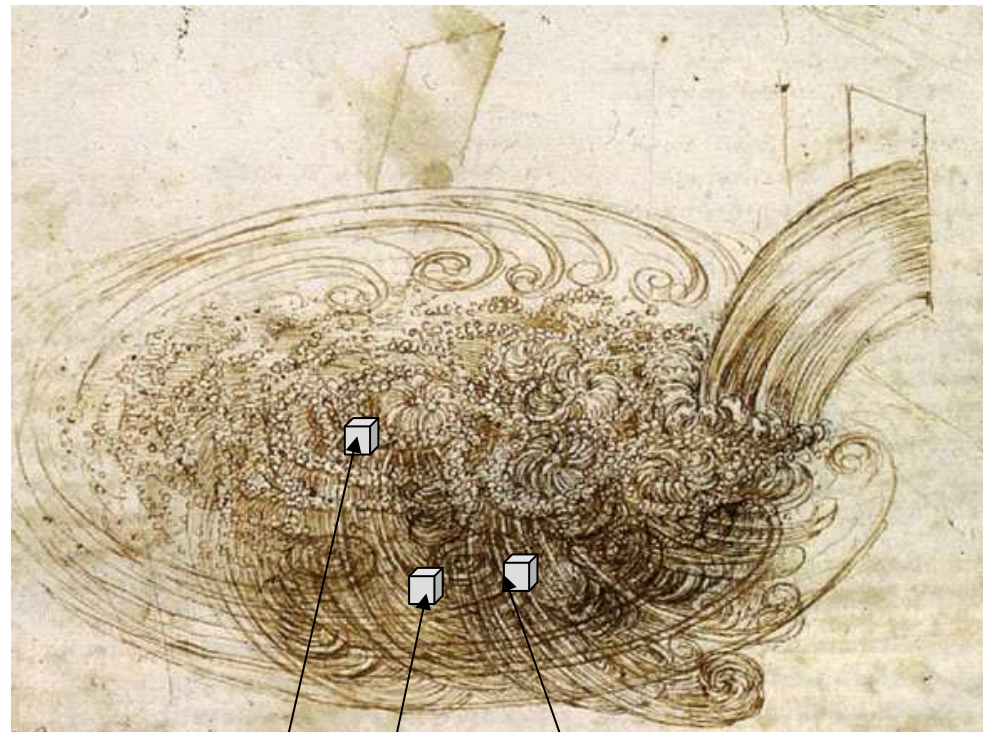


.... quindi



*il campo della concentrazione media cambia solo per la **ridistribuzione** delle particelle nello spazio.*

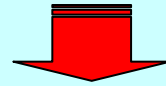
**Leonardo da Vinci
1509**



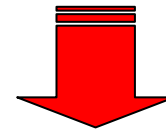
Immaginiamo di inserire in questi cubetti dell'inquinante.

La visione Lagrangiana *semplicemente* segue l'evoluzione nel tempo di ogni singola particella *marcata* immessa nel fluido in moto turbolento.

Se l'asse x è diretto lungo la direzione verso cui spira il vento, l'asse y nella direzione trasversale e z in direzione verticale



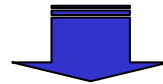
ad un istante t_0 una particella viene **emessa** da una sorgente posta nel punto $\mathbf{P}_0 = \mathbf{P}(x_0, y_0, z_0; t_0)$ e **si muove seguendo i movimenti dell'aria del PBL (medi e turbolenti)**.



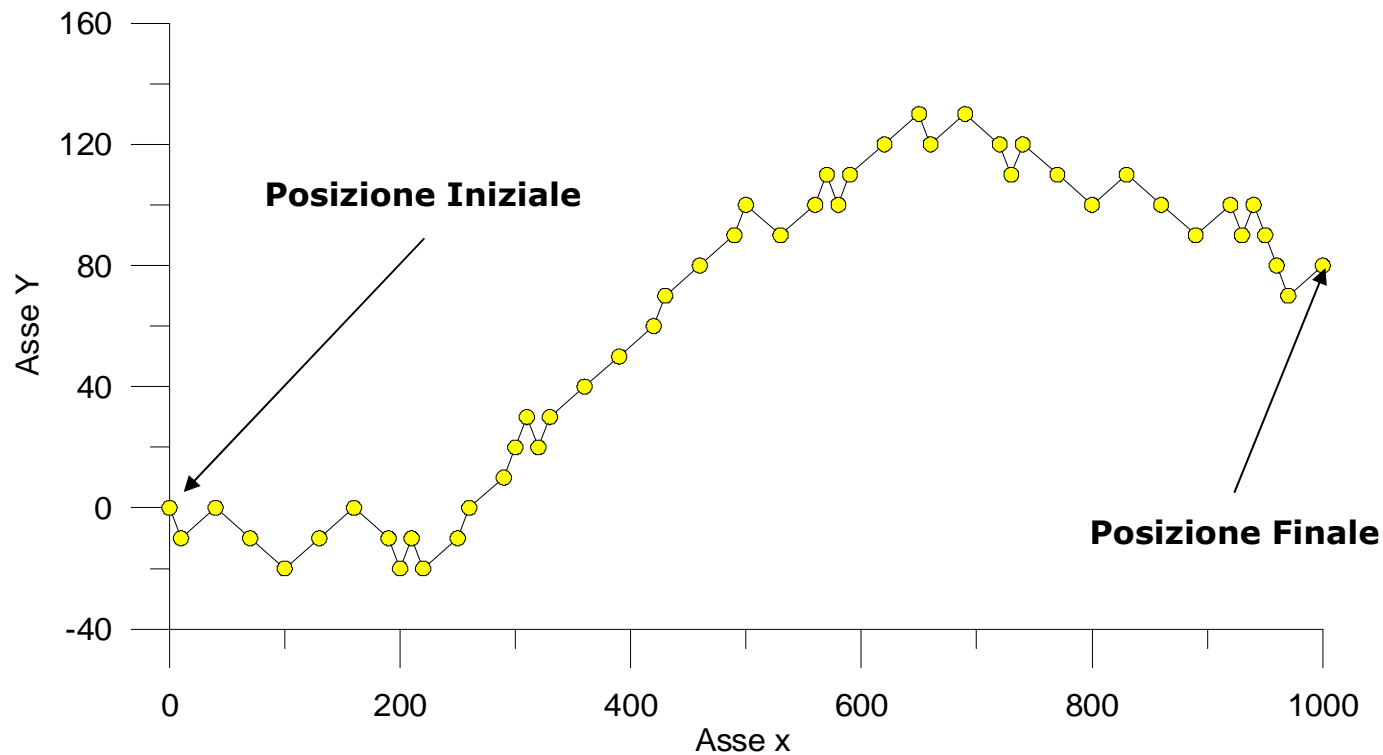
La **particella** emessa si **muoverà** in maniera apparentemente **disordinata**, come l'aria del PBL, e il suo **moto potrà essere descritto solo in termini probabilistici**.

La **Teoria Lagrangiana** abbandona quindi una descrizione deterministica del fenomeno di trasporto e dispersione di una specie in aria a favore di una **descrizione puramente statistica**.

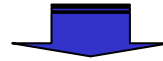
Una particella che a t_0 si trova nella posizione $\underline{X}_0(x_0, y_0, z_0)$, negli istanti successivi t può **muoversi** nell'aria con un **movimento disordinato e casuale**, giungendo ad una **nuova posizione** $\underline{X}(x, y, z)$.



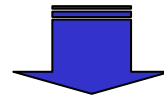
$\underline{X} \Rightarrow \underline{X}(x, y, z; t)$ è la **traiettoria della particella**.



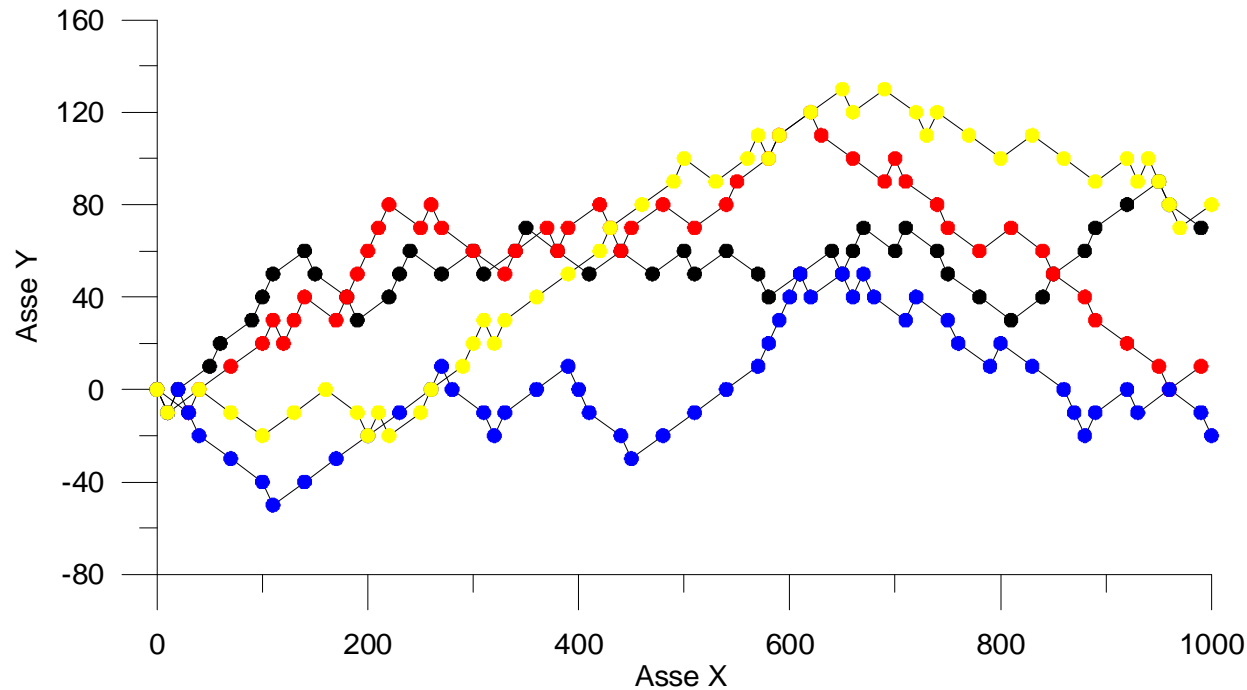
Se si considerano **moltissime particelle diverse**, tutte emesse nel punto $\underline{X}_0(x_0, y_0, z_0)$, al tempo t_0 ,



al tempo t , per la **casualità intrinseca al loro moto**, derivante dalla turbolenza del *PBL*, esse potranno trovarsi in punti diversi dello spazio, cioè:



ciascuna particella possiederà una traiettoria differente.



Si consideri un punto $\mathbf{P}(x,y,z)$ ad un dato **istante t**.

L'approccio Lagrangiano costruisce un modello stocastico della distribuzione

⇒ delle particelle emesse al tempo t

⇒ delle particelle emesse a tutti gli istanti precedenti

determinandone l'influenza nel punto desiderato dello spazio-tempo.

La complessità formale della formulazione generale del modello lagrangiano è formidabile.

Si vedrà più avanti come costruire da essa (o meglio aggirandola, mantenendone i fondamenti teorici) un modello formalmente più semplice e straordinariamente realistico.

Entità stocastica base per la descrizione



Densità di Probabilità di presenza (*pdf*) di una particella $\psi(x,y,z;t)$

$\psi(x,y,z;t) \cdot dx \cdot dy \cdot dz \Rightarrow$ probabilità che una particella si trovi all'istante t in un volumetto d'aria centrato sul punto (x,y,z) di dimensioni $dx \cdot dy \cdot dz$.

Considerazioni del tutto generali portano a definire in termini probabilistici la concentrazione di inquinanti (e quindi di particelle) nello spazio.

Se ipotizziamo che siano presenti al tempo t nello spazio M particelle, ciascuna *dotata* di massa q_k , **in termini probabilistici la concentrazione può essere espressa come:**

$$\langle c(x, y, z; t) \rangle = \sum_{k=1}^M q_k \cdot \psi(x, y, z; t)$$

Questa relazione non è molto espressiva e conviene riscriverla tenendo conto che:

⇒ la **concentrazione** in un punto e in un istante **dipende** da tutte le particelle presenti in aria in precedenza, emesse in un generico istante iniziale t_0 ed **in grado di raggiungere il punto (x, y, z)** al tempo t . In sostanza, tali particelle hanno **subito** una **transizione** da (x_0, y_0, z_0) al tempo t_0 alla posizione (x, y, z) al tempo t .

Probabilità di transizione ⇒ $Q(x, y, z, t | x_0, y_0, z_0, t_0)$

⇒ la concentrazione in un punto al tempo t dipende da **tutte quelle particelle emesse agli istanti precedenti t'** , descritte da una **probabilità di emissione $S(x', y', z', t')$** ed in **grado di effettuare una transizione al punto (x, y, z)** all'istante t .

Se si **ipotizza**, per **semplicità**, che la massa rappresentata da ciascuna particella sia unitaria, la relazione generale che descrive la concentrazione media di una sostanza inquinante al tempo t in un punto dello spazio è data da:

Rappresenta il contributo alla concentrazione derivante da tutte le particelle già presenti al tempo t_0 .

$$\begin{aligned} \langle c(x, y, z, t) \rangle = & \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} Q(x, y, z, t | x_0, y_0, z_0, t_0) \cdot \langle c(x_0, y_0, z_0, t_0) \rangle \cdot dx_0 \cdot dy_0 dz_0 + \\ & \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \int_{-\infty}^{+\infty} dy' \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \int_{t_0}^t Q(x, y, z, t | x', y', z', t') \cdot S(x', y', z', t') \cdot dt' \end{aligned}$$

Rappresenta il contributo alla concentrazione derivante dalle particelle che vengono emesse da t_0 a t .

Senza entrare nei dettagli

Se la turbolenza del PBL è omogenea



Soluzione base plume
Soluzione base puff



Identiche a quelle trovate per l'approccio euleriano con
chiusura K

Visione Euleriana e visione Lagrangiana



Visioni del tutto **parallele ed **equivalenti**
della dispersione degli inquinanti in aria**

Per impiegare realmente l'equazione euleriana della dispersione è necessario adottare una forma di chiusura.

E' stata considerata la chiusura K che ha condotto alle soluzioni base *plume* e *puff*.

Anche le relazioni lagrangiane portano alla soluzione base *plume* e *puff*, senza però alcuna ipotesi di chiusura.

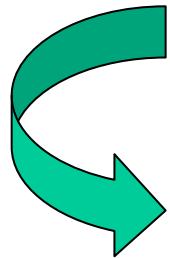
La **Visione Euleriana con chiusura K e
la Visione Lagrangiana
sono equivalenti?**

Per verificare ciò ⇒ **Analisi di Taylor**

Si consideri, per semplificare le cose:

⇒ la dispersione di una sostanza in senso verticale

⇒ in un ambiente a turbolenza omogenea e stazionaria (le proprietà del fluido, **anche** quelle statistiche, non cambiano nello spazio e nel tempo)



⇒ La σ_w sia del fluido che della sostanza dispersa sarà costante nel tempo e nello spazio

⇒ Il coefficiente di diffusività turbolento K_{zz} non *dovrebbe* variare perché si è ipotizzato che sia una proprietà del moto del fluido.

a) Analisi Lagrangiana

Sostanza emessa \Rightarrow un numero rilevante di particelle che si muovono libere in direzione z

\Rightarrow Al tempo $t=0$ ogni particella si trova a $z=0$

\Rightarrow La generica particella k al tempo t' si trova a $z_k(t')$

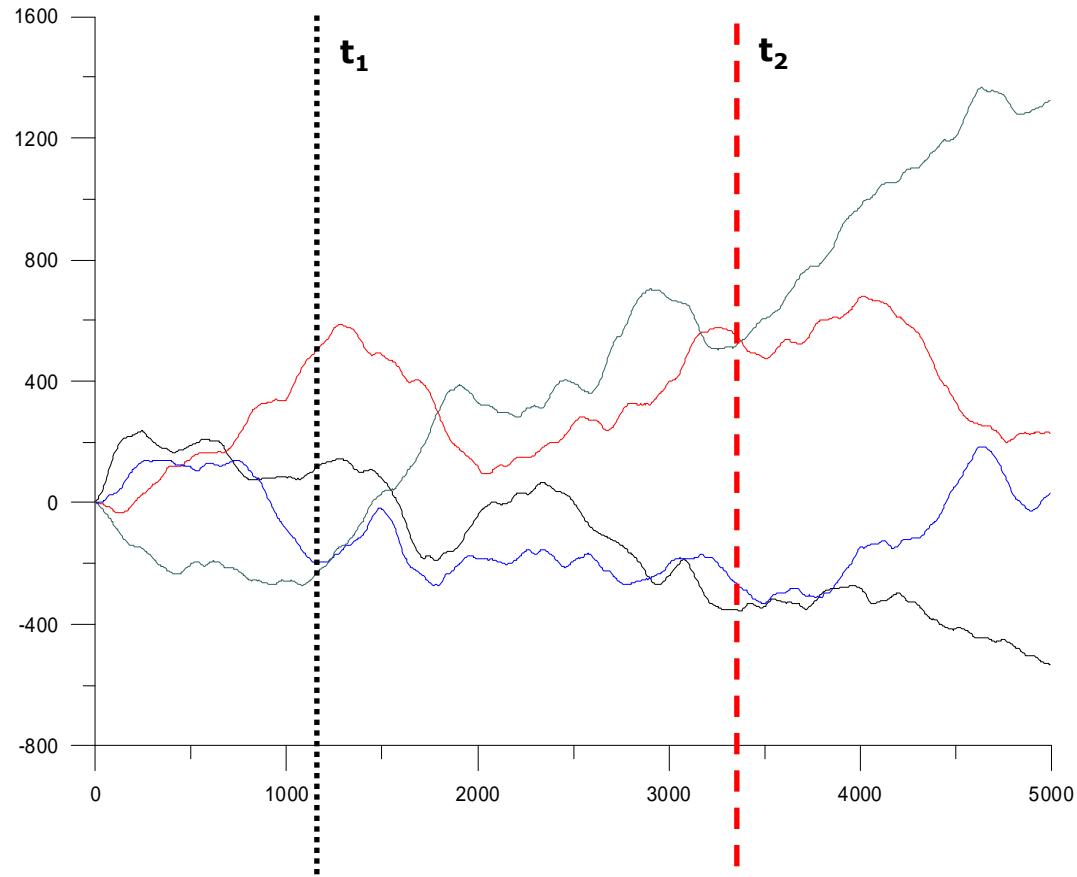
\Rightarrow La velocità ad un istante t di una particella è data da:

$$w(t') = \left(\frac{dz}{dt} \right)_{t=t'}$$

\Rightarrow La sua posizione è espressa da

$$z(t) = \int_0^t w(t') \cdot dt$$

\Rightarrow Il movimento di ogni particella è **la realizzazione di un processo stocastico stazionario**



- ⇒ **Nei vari istanti dopo l'emissione le particelle seguono traiettorie diverse**
- ⇒ **Ad ogni istante è possibile definire una **posizione media d'insieme** delle particelle**
- ⇒ **Ad ogni istante è possibile definire la loro **"dispersione"****

Indicando con z la posizione di una generica particella:

\bar{z} = media di insieme della posizione delle particelle

$\sigma_z^2 = \overline{z^2}$ = dispersione media della posizione delle particelle

Calcoliamo la variazione nel tempo della dispersione delle particelle

$$\frac{d\overline{z^2}}{dt} = \frac{d\overline{z^2}}{dt} = 2 \cdot \overline{z} \cdot \frac{dz}{dt}$$

Ricordando che:

$$\frac{dz}{dt} = w(t)$$

$$z(t) = \int_0^t w(t') \cdot dt'$$



$$\frac{d\overline{z^2}}{dt} = 2 \cdot \overline{w(t) \cdot \int_0^t w(t') \cdot dt'} = 2 \cdot \int_0^t \overline{w(t) \cdot w(t')} \cdot dt'$$

Variazione della dispersione delle particelle al tempo t

La relazione precedente può essere scritta introducendo un parametro statistico di estrema importanza

Coefficiente di autocorrelazione Lagrangiana

$$R(\tau) = \frac{\overline{w(t) \cdot w(t + \tau)}}{\sigma_w^2}$$

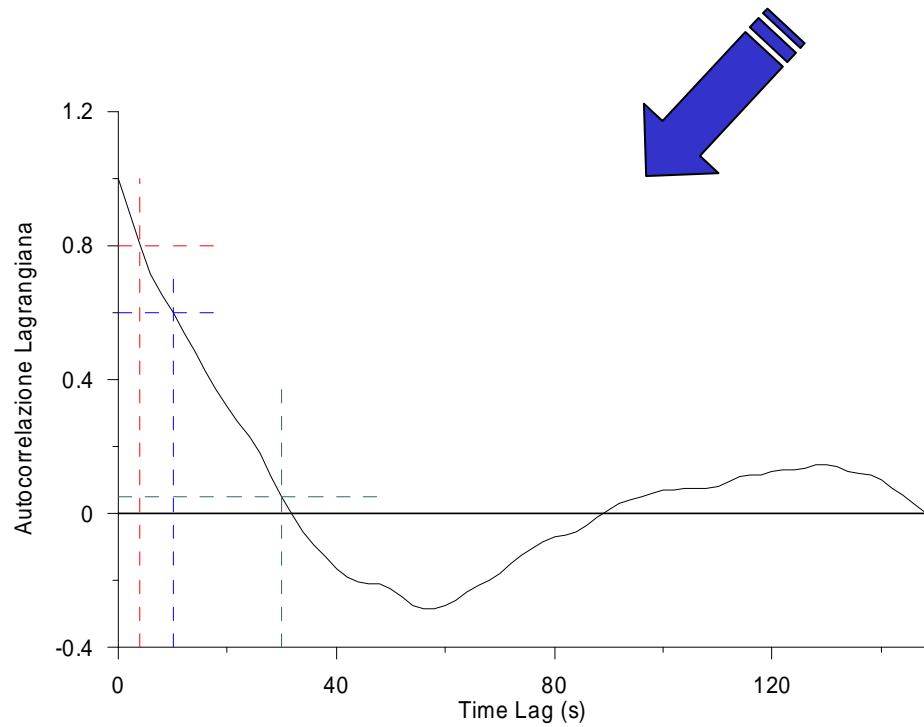
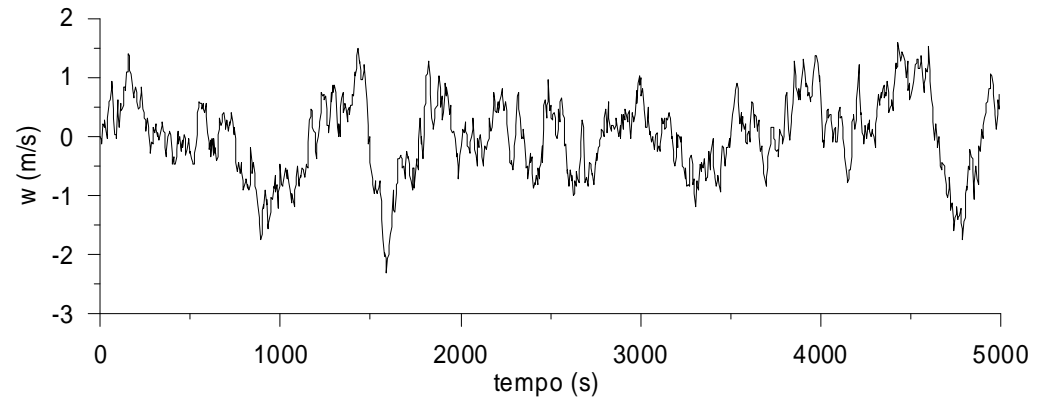
Significato

- ⇒ τ = **time lag** = tempo di osservazione considerato tra due valori della variabile stocastica
- ⇒ σ_w^2 = **varianza della velocità verticale della particella. E' quindi una misura delle irregolarità temporali medie presentate dalla velocità della particella nel suo moto nello spazio**
- ⇒ **R (τ) è la misura della correlazione riscontrata tra le velocità assunte dalla particella in due distinti istanti separati dall'intervallo temporale τ**

E' quindi una sorta di misura di quanto della velocità della particella al tempo t viene ricordato al tempo $t+\tau$

Esempio

$$\sigma_w^2 = 0.44 \text{ (m/s)}$$



Per $\tau = 4$ sec. il ricordo è dell' 80%
Per $\tau = 10$ sec il ricordo è del 60%
Per $\tau = 30$ sec. il ricordo è del 5%

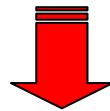
$$\frac{d\overline{z^2}}{dt} = 2 \cdot \overline{w(t) \cdot \int_0^t w(t') \cdot dt} = 2 \cdot \int_0^t \overline{w(t) \cdot w(t')} \cdot dt'$$



$$\frac{d\overline{z^2}}{dt} = \frac{d\sigma_z^2}{dt} = 2 \cdot \sigma_w^2 \int_0^t R(\tau) \cdot d\tau$$



$$\sigma_z^2 = 2 \cdot \sigma_w^2 \int_0^t (t - \tau) \cdot R(\tau) \cdot d\tau$$



La dispersione delle particelle cresce con l'aumentare del tempo dalla loro emissione

Casi Limite:

⇒ **Campo vicino** $t \rightarrow 0$

$$R(\tau) \rightarrow 1$$

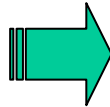
$$\sigma_z^2 = \sigma_w^2 t^2$$

⇒ **Campo lontano** $t \rightarrow \infty$

$$R(\tau) \rightarrow 0$$

$$\sigma_z^2 = 2\sigma_w^2 \cdot T_L \cdot t$$

$$T_L = \int_0^{\infty} R(\tau) \cdot d\tau$$



T_L = Tempo di decorrelazione

E' il tempo (dall'emissione) necessario alla particella per perdere completamente la memoria della propria velocità iniziale

b) Analisi Euleriana con chiusura K

Sostanza emessa \Rightarrow fluido introdotto in un ambiente omogeneo.

Per poter fare il confronto con l'analisi Lagrangiana, si considera solo la concentrazione C^* , integrata lungo x e y e variabile solo con z.

\Rightarrow L'emissione avviene alla quota $z=0$ all'istante $t=0$

\Rightarrow E' assente il trasporto orizzontale $\rightarrow U=0$

\Rightarrow si utilizza una chiusura K che prevede quindi un coefficiente di diffusività turbolenta K_{zz} costante nello spazio

$$\frac{\partial C^*}{\partial t} = K_{zz} \frac{\partial^2 C^*}{\partial z^2}$$

$$\frac{\partial C^*}{\partial t} = K_{zz} \frac{\partial^2 C^*}{\partial z^2}$$



$$C^*(z, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_z} \cdot \exp\left(-\frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right)$$
$$\sigma_z = \sqrt{2K_{zz}t}$$



$$\frac{d\sigma_z^2}{dt} = 2K_{zz}$$

Anche seguendo l'approccio euleriano con chiusura K si è giunti ad una definizione di σ_z .

Le due definizioni sono equivalenti?

(Ricordiamo che il risultato della teoria lagrangiana è del tutto generale, mentre quello euleriano dipende dalla scelta della chiusura K)

Approccio Lagrangiano

$$\frac{d\sigma_z^2}{dt} = 2\sigma_w^2 \int_0^t R(\tau) \cdot d\tau$$
$$\sigma_z^2 = \sigma_w^2 \cdot t^2 \quad \text{Campo Vicino}$$
$$\sigma_z^2 = \sigma_w^2 \cdot T_L \cdot t \quad \text{Campo Lontano}$$

Approccio Euleriano K

$$\frac{d\sigma_z^2}{dt} = 2 \cdot K_{zz}$$
$$\sigma_z^2 = 2 \cdot K_{zz} \cdot t$$

Per conciliare i due risultati bisogna che:

$$2\sigma_w^2 \int_0^t R(\tau) \cdot d\tau = 2K_{zz}$$
$$K_{zz} = \sigma_w^2 \int_0^t R(\tau) \cdot d\tau$$

Paradosso!

La diffusività turbolenta K_{zz} , che dovrebbe essere una proprietà del moto del fluido e quindi costante in un fluido omogeneo, ritorna ad essere una funzione del tempo trascorso dall'emissione dell'inquinante

Analizziamo questo paradosso

Ipotizziamo:

- di considerare una quota $z = 200$ m
- $\sigma_w = 0.5$ m/s (situazione convettiva)
- $U = 2$ m/s

$$T_{Lw} = 236 \text{ s}$$

$$2\sigma_w^2 \int_0^t R(\tau) \cdot d\tau = 2K_{zz}$$
$$K_{zz} = \sigma_w^2 \int_0^t R(\tau) \cdot d\tau$$

$$K_{zz} = \frac{\sigma_w^2}{T_{Lw}} \cdot [1 - \exp(-\tau/T_{Lw})]$$

Una buona
approssimazione per
l'Autocorrelazione
Lagrangiana è:

$$R(\tau) = \exp(\tau/T_{Lw})$$

K_{zz} risulta circa indipendente da τ quando τ è maggiore di circa 540 s.

Ciò implica che, se la velocità media del vento U è di 2 m/s, l'indipendenza di K_{zz} si ha a poco più di 1000 m dall'emissione. Quindi un modello Euleriano a chiusura K simulerà scorrettamente la dispersione di inquinanti ad una distanza inferiore a 1000 metri dal punto di emissione.

Questa è l'**incongruenza logica** insita nell'utilizzo della **visione euleriana con chiusura K**.

Come si nota, tale incongruenza diminuisce col tempo, visto che la soluzione euleriana si sovrappone alla soluzione lagrangiana nel caso limite di campo lontano.



Da ciò si deduce che l'approccio Euleriano con chiusura K non è in grado di descrivere la dispersione di un inquinante se non a grandi distanze dalla sorgente.

Bibliografia Essenziale

R. Sozzi (2003): La Micrometeorologia e la Dispersione degli Inquinanti in Aria (APAT- CTN-ACE)

J.H. Seinfeld, S.N. Pandis (2006): Atmospheric Chemistry and Physics 2° Ed – J.Wiley&Sons

Approfondimenti:

FTM Nieuwstadt, H. van Dop ed. (1982): Turbulence and Air Pollution Modeling – Reidel Publishing Company

A. Venkatram, J.C. Wyngaard ed. (1988): Lectures on Air Pollution Modeling – American Meteorological Society