Meteorologia e Micrometeorologia per l'inquinamento atmosferico 2011

Parte 9

# Tecniche Numeriche per un Modello Operativo di PBL

dott. Roberto Sozzi dott. Andrea Bolignano



#### Modello Operativo del PBL → Insieme di Equazioni differenziali alle Derivate Parziali (PDE)

Un esempio:

$$\frac{\partial \overline{u}}{\partial t} + \overline{u} \frac{\partial \overline{u}}{\partial x} + \overline{v} \frac{\partial \overline{u}}{\partial y} + \overline{w} \frac{\partial \overline{u}}{\partial z} = -\frac{1}{\overline{\rho}} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x} + f\overline{v} + K_h \left[ \frac{\partial^2 \overline{u}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \overline{u}}{\partial y^2} \right] + K_z \frac{\partial^2 \overline{u}}{\partial z^2}$$
$$\frac{\partial \overline{v}}{\partial t} + \overline{u} \frac{\partial \overline{v}}{\partial x} + \overline{v} \frac{\partial \overline{v}}{\partial y} + \overline{w} \frac{\partial \overline{v}}{\partial z} = -\frac{1}{\overline{\rho}} \frac{\partial \overline{p}}{\partial y} - f\overline{u} + K_h \left[ \frac{\partial^2 \overline{v}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \overline{v}}{\partial y^2} \right] + K_z \frac{\partial^2 \overline{v}}{\partial z^2}$$
$$\frac{\partial \overline{w}}{\partial t} + \overline{u} \frac{\partial \overline{w}}{\partial x} + \overline{v} \frac{\partial \overline{w}}{\partial y} + \overline{w} \frac{\partial \overline{w}}{\partial z} = -\frac{1}{\overline{\rho}} \frac{\partial \overline{p}}{\partial z} - g + K_h \left[ \frac{\partial^2 \overline{w}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \overline{w}}{\partial y^2} \right] + K_z \frac{\partial^2 \overline{w}}{\partial z^2}$$

cui si aggiungono la PDE per la temperatura media e per l'umidità

Vogliamo ottenere la soluzione del modello

La distribuzione spaziale e temporale delle variabili che caratterizzano il PBL, cioè u(x,y,z,t), v(x,y,z,t), w(x,y,z,t), ecc.

ARPALAZIO

In condizioni realistiche non si conoscono soluzioni analitiche al problema.

Risulta, quindi, necessario cercare una soluzione numerica.

- Nel modello di PBL sono presenti prevalentemente operatori differenziali
- I computer sono in grado di eseguire le operazioni algebriche, ma non sono in grado di eseguire direttamente le operazioni differenziali.



Per poter ottenere la soluzione del modello di PBL dobbiamo inevitabilmente <u>approssimare numericamente</u> <u>tutti gli operatori differenziali</u>

Ottenendo, alla fine, solo equazioni algebriche che i computer sono in grado di trattare direttamente

# I tre quesiti fondamentali

#### 1) Cosa voglio ottenere

Voglio ottenere i <u>campi</u> delle variabili che caratterizzano il PBL, cioè la loro <u>distribuzione spaziale e temporale</u>. Nella versione più semplice del modello le variabili in esame sono i valori medi delle tre componenti cartesiane del moto, della temperatura potenziale, della pressione e dell'umidità dell'aria.

#### 2) Dove

Voglio conoscere questi campi in un <u>dominio specifico dello spazio</u> (dominio di interesse), in cui la frontiera inferiore coincide col suolo, e in <u>uno specifico intervallo temporale</u> a partire da un istante iniziale  $t_0$ 

#### 3) Come

Voglio conoscere tutti questi campi in ogni punto del dominio di interesse e in ogni istante nell'intervallo temporale considerato.

**Cosa posso ottenere con un'approssimazione numerica** 

## 1) Dominio di Calcolo

Il Dominio di Calcolo (cioè l'ambito spaziale in cui vengono effettuati i calcoli e le approssimazioni) coincide col Dominio di Interesse nella sua forma e nella sua estensione spaziale e temporale.

Il <u>Dominio di Indagine</u> è costituito da un insieme continuo ed infinito di punti nello spazio-tempo.

Il Dominio di Calcolo è discreto.

Nello <u>spazio</u>  $\Rightarrow$  il parallelepipedo spaziale che lo costituisce viene suddiviso in un insieme di celle (per es. tutte uguali)  $\rightarrow$  <u>Discretizzazione</u> <u>dello spazio</u>.

Quindi, in pratica, ripartisco i tre spigoli (x,y,z) del dominio di forma parallelepida in  $N_{x'}$ ,  $N_v$ ,  $N_z$  intervalli discreti.

Dominio di Calcolo ⇒ <u>griglia di calcolo</u> costituita da:

 $\rightarrow N_x \cdot N_y \cdot N_z \underline{celle}$ 

 $\rightarrow$  (N<sub>x</sub>+1)·(N<sub>y</sub>+1)·(N<sub>z</sub>+1) <u>nodi</u>



$$\mathbf{t}_{n} = \mathbf{t}_{n-1} + \Delta \mathbf{t}$$



## 2) Campi discreti

Non sono più interessato a conoscere il valore dei campi meteorologici ad ogni punto P(x,y,z,t) del Dominio di Interesse, ma sono interessato solo al valore che essi assumono in corrispondenza dei nodi della Griglia di Calcolo

 $\mathbf{P}_{ijkn} = \mathbf{P}(\mathbf{x}_{i\prime}\mathbf{y}_{j\prime}\mathbf{z}_{k\prime}\mathbf{t}_{n})$ 

In pratica, introducendo la discretizzazione dello spazio e del tempo

realizzo una funzione di filtraggio sul campo, perché non sono più in grado di evidenziare fenomeni che presentano una scala spaziale inferiore alla dimensione geometrica della cella di calcolo ed una scala temporale inferiore a  $\Delta t$  (e quindi con una frequenza propria maggiore di 1/ $\Delta t$ ).

#### 3) Approssimazione degli operatori differenziali

Devo approssimare tutte le equazione differenziali alle derivate parziali PDE in modo che compaiano solo equazioni algebriche, visto che i computer possono eseguire solo questo tipo di operazioni matematiche.

#### **Approssimazione delle PDE alle differenze finite**

Gli operatori differenziali presenti nelle PDE che costituiscono il modello operativo del PBL sono:

 $\sim -$ 

- Derivate parziali prime rispetto al tempo	⇒	$\frac{\partial F}{\partial t}$
- Derivate parziali prime rispetto allo spazio	⇒	$\frac{\partial F}{\partial x}$
- Derivate parziali seconde rispetto allo spazio	⇒	$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}$

#### 1) Derivate parziali prime rispetto allo spazio

Consideriamo il caso monodimensionale. In questo caso il dominio di calcolo è costituito solo dall'asse x discretizzato.

Il punto di partenza è lo sviluppo in Serie di Taylor della funzione F(x):

$$F(x + \Delta x) = F(x) + \Delta x \cdot \frac{\partial F}{\partial x}\Big|_{x} + \frac{\Delta x^{2}}{2!} \cdot \frac{\partial^{2} F}{\partial x^{2}}\Big|_{x} + \frac{\Delta x^{3}}{3!} \cdot \frac{\partial^{3} F}{\partial x^{3}}\Big|_{x} + O(\Delta x^{4})$$



 $F(x+\Delta x)$  è data da F(x) (la funzione calcolata nel punto x) più una serie di <u>fattori correttivi</u> sempre costituiti dal prodotto di  $\Delta x^n$  (diviso per n!) con n=1, 2, ..., per la rispettiva <u>derivata n-esima calcolata nel punto x</u>.



a) Approssimazione in avanti (forward) della derivata prima nello spazio

$$F(x + \Delta x) = F(x) + \Delta x \cdot \frac{\partial F}{\partial x}\Big|_{x} + \frac{\Delta x^{2}}{2!} \cdot \frac{\partial^{2} F}{\partial x^{2}}\Big|_{x} + \frac{\Delta x^{3}}{3!} \cdot \frac{\partial^{3} F}{\partial x^{3}}\Big|_{x} + O(\Delta x^{4})$$

$$F(x + \Delta x) - F(x) = \Delta x \cdot \frac{\partial F}{\partial x}\Big|_{x} + O(\Delta x^{2})$$

$$\frac{\partial F}{\partial x}\Big|_{x} \approx \frac{F(x + \Delta x) - F(x)}{\Delta x}$$

b) Approssimazione all'indietro (backward) della derivata prima nello spazio

$$F(x - \Delta x) = F(x) - \Delta x \cdot \frac{\partial F}{\partial x}\Big|_{x} + \frac{\Delta x^{2}}{2!} \cdot \frac{\partial^{2} F}{\partial x^{2}}\Big|_{x} - \frac{\Delta x^{3}}{3!} \cdot \frac{\partial^{3} F}{\partial x^{3}}\Big|_{x} + O(\Delta x^{4})$$

$$= F(x) - F(x - \Delta x) = \Delta x \cdot \frac{\partial F}{\partial x}\Big|_{x} + O(\Delta x^{2})$$

$$\frac{\partial F}{\partial x}\Big|_{x} \approx \frac{F(x) - F(x - \Delta x)}{\Delta x}$$
ARPALAZIO

c) Approssimazione centrale (centered) della derivata prima nello spazio

$$F(x + \Delta x) = F(x) + \Delta x \cdot \frac{\partial F}{\partial x}\Big|_{x} + \frac{\Delta x^{2}}{2!} \cdot \frac{\partial^{2} F}{\partial x^{2}}\Big|_{x} + \frac{\Delta x^{3}}{3!} \cdot \frac{\partial^{3} F}{\partial x^{3}}\Big|_{x} + O(\Delta x^{4})$$

$$F(x - \Delta x) = F(x) - \Delta x \cdot \frac{\partial F}{\partial x}\Big|_{x} + \frac{\Delta x^{2}}{2!} \cdot \frac{\partial^{2} F}{\partial x^{2}}\Big|_{x} - \frac{\Delta x^{3}}{3!} \cdot \frac{\partial^{3} F}{\partial x^{3}}\Big|_{x} + O(\Delta x^{4})$$

#### Le sottraggo membro a membro

$$F(x + \Delta x) - F(x - \Delta x) = 2\Delta x \cdot \frac{\partial F}{\partial x}\Big|_{x} + O(\Delta x^{3})$$
$$\frac{\partial F}{\partial x}\Big|_{x} \approx \frac{F(x + \Delta x) - F(x - \Delta x)}{2\Delta x}$$

Almeno apparentemente questa approssimazione numerica è più precisa perché:

- se esprimiamo  $\Delta x$  avendo come unità di misura l'intera estensione L = Nx· $\Delta x$ ,  $\Delta x$ <1;
- approssimazioni forward e backward hanno errore  $O(\Delta x^2)$
- approssimazione centrale ha errore O(Δx<sup>3</sup>)

### 2) Derivate parziali seconde rispetto allo spazio

Consideriamo sempre il caso monodimensionale. In questo caso il dominio di calcolo è costituito solo dall'asse x discretizzato.

Il punto di partenza è l'insieme dei due sviluppi in Serie di Taylor di F(x):

$$F(x + \Delta x) = F(x) + \Delta x \cdot \frac{\partial F}{\partial x}\Big|_{x} + \frac{\Delta x^{2}}{2!} \cdot \frac{\partial^{2} F}{\partial x^{2}}\Big|_{x} + \frac{\Delta x^{3}}{3!} \cdot \frac{\partial^{3} F}{\partial x^{3}}\Big|_{x} + O(\Delta x^{4})$$

$$F(x - \Delta x) = F(x) - \Delta x \cdot \frac{\partial F}{\partial x}\Big|_{x} + \frac{\Delta x^{2}}{2!} \cdot \frac{\partial^{2} F}{\partial x^{2}}\Big|_{x} - \frac{\Delta x^{3}}{3!} \cdot \frac{\partial^{3} F}{\partial x^{3}}\Big|_{x} + O(\Delta x^{4})$$

#### Le sommo membro a membro

$$F(x + \Delta x) + F(x - \Delta x) = 2F(x) + \frac{\Delta x^2}{2!} \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} \Big|_x + O(\Delta x^4)$$
$$\underbrace{\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}}_{x} \cong \frac{F(x + \Delta x) - 2F(x) + F(x - \Delta x)}{\Delta x^2}$$







#### 3) Derivate parziali prima rispetto al tempo

Il Dominio di calcolo, ancora monodimensionale, è l'asse dei tempi x discretizzato.

Il punto di partenza lo sviluppo in Serie di Taylor di F(t):

$$F(x + \Delta t) = F(t) + \Delta t \cdot \frac{\partial F}{\partial t}\Big|_{t} + \frac{\Delta t^{2}}{2!} \cdot \frac{\partial^{2} F}{\partial t^{2}}\Big|_{t} + \frac{\Delta t^{3}}{3!} \cdot \frac{\partial^{3} F}{\partial t^{3}}\Big|_{x} + O(\Delta t^{4})$$

In maniera del tutto analoga a quanto fatto per la derivata prima nello spazio, otteniamo lo schema *forward-in-time* (FT)

$$\left. \frac{\partial F}{\partial t} \right|_{t} \cong \frac{F(x + \Delta t) - F(t)}{\Delta t}$$

Se, invece, consideriamo i due sviluppi seguenti, otteniamo lo schema *leap-frog* (salto della cavallina):

$$F(x + \Delta t) = F(t) + \Delta t \cdot \frac{\partial F}{\partial t}\Big|_{t} + \frac{\Delta t^{2}}{2!} \cdot \frac{\partial^{2} F}{\partial t^{2}}\Big|_{t} + \frac{\Delta t^{3}}{3!} \cdot \frac{\partial^{3} F}{\partial t^{3}}\Big|_{x} + O(\Delta t^{4})$$

$$F(x - \Delta t) = F(t) - \Delta t \cdot \frac{\partial F}{\partial t}\Big|_{t} + \frac{\Delta t^{2}}{2!} \cdot \frac{\partial^{2} F}{\partial t^{2}}\Big|_{t} - \frac{\Delta t^{3}}{3!} \cdot \frac{\partial^{3} F}{\partial t^{3}}\Big|_{x} + O(\Delta t^{4})$$

$$\frac{\partial F}{\partial t}\Big|_{t} \cong \frac{F(x + \Delta t) - F(t - \Delta t)}{2\Delta t}$$
ARPALAZIO

Introduzione alla risoluzione numerica delle PDE del modlelo di PBL

In linea di principio, discretizzo tutte le PDE del modello di PBL operando su una griglia cartesiana così definita:

Dominio spaziale:

Asse  $x \rightarrow Nx$  nodi, spaziati  $\Delta x$ 

Asse  $y \rightarrow Ny$  nodi spaziati  $\Delta y$ 

Asse  $z \rightarrow Nz$  nodi spaziati  $\Delta z$ 

**Dominio temporale:** 

N nodi spaziati  $\Delta t$  a partire da un istante iniziale  $t_o$ 

Alla fine della discretizzazione ottengo un problema algebrico che può essere risolto alla peggio con i noti metodi dell'algebra lineare.

In generale, il problema così affrontato è complesso e non facile da risolvere per le sue dimensioni e perché non è immediato individuare quale siano gli schemi numerici più appropriati per discretizzare le varie derivate parziali

In genere si adotta una strategia che separa le varie parti delle equazioni in maniera opportuna e le risolve in successione.

Per illustrare questo metodo (noto come operator-splitting) consideriamo una delle PDE del modello, in particolare l'equazione di conservazione di uno scalare F in cui si è adottata la chiusura K:

$$\frac{\partial F}{\partial t} = -\left(U\frac{\partial F}{\partial x} + V\frac{\partial F}{\partial y} + W\frac{\partial F}{\partial z}\right) + K\left(\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 F}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 F}{\partial z^2}\right)$$
tasso di variazione Trasporto Diffusione

I i processi fisici coinvolti nell'equazione di conservazione dello scalare F sono i seguenti:

- Trasporto dello scalare lungo la direzione x
- Trasporto dello scalare lungo la direzione y
- Trasporto dello scalare lungo la direzione z
- Diffusione turbolenta lungo la direzione x
- Diffusione turbolenta lungo la direzione y
- Diffusione turbolenta lungo la direzione z

In generale, nell'equazione potrebbe essere presente anche un termine di sorgente ed altri termini che descrivono la deposizione al suolo di scalare e le eventuali reazioni chimiche.



#### Il metodo Operator-Splitting ipotizza che i vari processi descritti dall'equazione di conservazione di F abbiano luogo in sequenza, uno dopo l'altro.

In pratica:

1) Al tempo $t_o$ dispongo del valore iniziale di F, che indichiamo come F <sup>o</sup>			
2) Durante il time-step $\Delta t$ , F <sup>o</sup> viene trasportata lungo	x	$\Rightarrow F_{(1)}^1$	
3) Durante il time step $\Delta t$ , $F_{(1)}^1$ viene trasportata lungo	y y	$\Rightarrow \mathbf{F_{(2)}^{1}}$	
4) Durante il time step $\Delta t \ F_{(2)}^1$ viene trasportata lungo	z	$\Rightarrow \mathbf{F_{(3)}^{1}}$	
5) Durante il time step $\Delta t F_{(3)}^1$ viene diffusa lungo	x	$\Rightarrow F_{(4)}^{1}$	
6) Durante il time step $\Delta t F_{(4)}^1$ viene diffusa lungo	У	$\Rightarrow \mathbf{F_{(5)}^{1}}$	
7) Durante il time step $\Delta t F_{(5)}^1$ viene diffusa lungo	z	$\Rightarrow F^2$	

8) Ripeto i passi 2 -7 per il time-step successivo

L'importanza di questo metodo sta nel fatto che, per ogni passo di integrazione si considera un unico processo fisico la volta e ciò consente di trattarlo numericamente nelle maniera migliore.

Se si segue questa logica, l'equazione di conservazione dello scalare F può essere scomposta in:

⇒ Tre processi di trasporto, ciascuno secondo una delle direzioni cardinali e descritto dall'equazione:

$$\frac{\partial F}{\partial t} = -U_i \frac{\partial F}{\partial x_i}$$

⇒ Tre processi di diffusione turbolenta nelle tre direzioni cardinali, ciascuno descritto dall'equazione:

$$\frac{\partial F}{\partial t} = K_i \frac{\partial^2 F}{\partial x_i^2}$$

Queste due equazione differenziali (quella del trasporto e quella della diffusione) sono ben note nella Fisica Matematica e nel Calcolo Numerico e per esse sono disponibili algoritmi numerici di risoluzione numerica di cui sono conosciute le caratteristiche.



## Trasporto lungo la direzione x



#### Idealmente



Quindi la forma funzionale dovrebbe essere trasportata rigidamente lungo l'asse x con velocità U.



#### Si possono adottare diversi schemi numerici.

## A) Schema Forward-in-Time, Centered-in-Space ⇒ FTCS



È uno schema totalmente esplicito



È uno schema numerico totalmente esplicito perché:

 $\Rightarrow$  Se al tempo t<sup>n</sup> conosco <u>in ogni nodo</u> della griglia monodimensionale il campo F<sup>n</sup><sub>i,j</sub>

⇒ Con semplicissime operazioni algebriche ottengo <u>direttamente</u> il campo  $F^{n+1}_{i,j}$  in tutti i nodi della griglia.

# Questo è vero per tutti i nodi tranne per i nodi 1 e Nx.

Ricordiamo che <u>teoricamente</u> una PDE per essere risolta, deve poter contare non solo sulle condizioni iniziali F<sup>0</sup>, ma anche sulle condizioni al contorno.

<u>Pertanto</u>, per poter utilizzare lo schema numerico devo:

⇒ Conoscere il valore di F<sup>0</sup> all'istante t<sub>0</sub> in ogni nodo di griglia (condizioni iniziali)

 $\Rightarrow$  Conoscere ad ogni istante t<sub>n</sub> il valore di F<sup>n</sup><sub>1</sub> e F<sup>n</sup><sub>Nx</sub> (condizioni al contorno)

Vedremo successivamente come fare a disporre di queste informazioni.

Lo schema numerico FTCS, anche se molto naturale e formalmente corretto, non può essere usato in pratica perché è sempre instabile

#### Instabilità

Se, per esempio, al tempo  $t_0$  il campo F è rappresentato da un'armonica, ai tempi successivi tale armonica si deforma e si amplifica senza controllo.

# Se, però, nello schema FTCS sostituisco F<sup>n</sup>i con la media di F<sup>n</sup>i+1 e F<sup>n</sup>i-

1

$$F_i^{n+1} = \frac{1-C}{2} F_{i+1}^n + \frac{1+C}{2} F_{i-1}^n$$
  

$$C = U \Delta t / \Delta x \quad \text{Numero di Courant}$$

### Schema di Lax

Questo schema numerico è <u>stabile</u> (nel senso che non si amplifica indefinitamente), ma presenta una diffusione artificiale (pseudodiffusione) che:

- distorce il segnale

- se il segnale fosse una gaussiana, ne aumenterebbe indefinitamente la deviazione standard

- a tempi infiniti l'intero segnale si appiattirebbe, tendendo ovunque a zero.

# **B) Schema Up-Wind**

Sono una famiglia di metodi numerici che presentano discretizzazioni diverse a seconda del segno della velocità di trasporto U.

a) Sono stabili con condizione  $\rightarrow$  C = U $\Delta$ t/ $\Delta$ x  $\leq$  1  $\Rightarrow \Delta$ x  $\leq$  U $\Delta$ t

b) Mostrano una pseudodiffusione che, però, può essere diminuita con opportuni accorgimenti

Lo schema più semplice della famiglia è il seguente:

$$F_i^{n+1} = F_i^n + \Delta t \cdot \begin{cases} -U \frac{F_{i+1}^n - F_i^n}{\Delta x} & \text{se } U < 0\\ -U \frac{F_i^n - F_{i-1}^n}{\Delta x} & \text{se } U > 0 \end{cases}$$



#### **Diffusione turbolenta lungo la direzione x**

$$\frac{\partial F}{\partial t} = K \frac{\partial^2 F}{\partial x^2}$$

# a) Metodo totalmente esplicito FTCS

$$\frac{F_{i}^{n+1} - F_{i}^{n}}{\Delta t} = K \left[ \frac{F_{i-1}^{n} - 2F_{i}^{n} + F_{i+1}^{n}}{\Delta x^{2}} \right]$$

Se conosco  $F^n \rightarrow ottengo \ \underline{direttament} e \ F^{n+1}$ 

Questo schema numerico **è sempre totalmente instabile** e quindi non può **mai** essere usato

### b) Metodo totalmente implicito FTCS

$$\frac{F_i^{n+1} - F_i^n}{\Delta t} = K \left[ \frac{F_{i-1}^{n+1} - 2F_i^{n+1} + F_{i+1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right]$$

Questo schema numerico è completamente stabile

Richiede, però, la **risoluzione di un sistema di equazioni algebriche** (normalmente di grandi dimensioni) ad ogni time step  $\Delta t$ .

## Schema numerico più utilizzato in pratica

#### c) Schema di Crank-Nicholson



Questo schema è sempre stabile

Bisogna risolvere un sistema di equazioni algebriche che però è tridiagonale e quindi facilmente risolubile.

# Riassumendo ....

**Periodo di Calcolo**  $\rightarrow$  **Intervalli temporali** regolari spaziati  $\Delta t$ 

Equazioni differenziali alle derivate parziali → approssimazione numerica alle differenze finite nei vari nodi della griglia delle derivate spaziali e temporali.

Il <u>cuore</u> di tutto è la discretizzazione numerica delle equazione e la risoluzione algebrica del problema che ne deriva. Tutto ciò è un <u>Capitolo</u> importante dell'<u>Analisi Numerica</u> ed è:

- un argomento trattato rigorosamente
- affascinante

ma

A volte sembra magico e quasi sempre richiede un ... tocco di arte.

## **Bibliografia Essenziale**

R. Sozzi, T. Georgiadis, M. Valentini (2002): Introduzione alla turbolenza atmosferica (ed. Pitagora)

# Approfondimenti:

R.A. Pielke (2002): Mesoscale meteorological modeling (Academic Press)

M. Jacobson (1999): Fundamental of atmospheric modeling

E. Kalnay (2003): Atmospheric modeling, data assimilation and predictability (Cambridge University Press)

J.H. Ferziger, M. Peric (2002): Computational methods for fluid dynamics (Springer)

