



*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 (m<sup>3</sup>)

n = numero di moli del gas

R = 0.083145 m<sup>3</sup> mb moli<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>

Per poterla applicare

⇒

Qual è il Peso Molecolare dell'aria secca?

Aria Secca. Principali Costituenti

N<sub>2</sub> (PM=28.01) → 78% (in volume)

O<sub>2</sub> (PM=32.00) → 21% (in volume)

Ar (PM=39.95) → 1% (in volume)

Volume occupato da una mole di gas

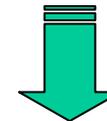
$$V_* = 22.4141 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$$

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

Moli N<sub>2</sub>

Moli O<sub>2</sub>

Moli Ar



**Peso Molecolare Aria = 28.966**

## 2. Concentrazione di molecole in aria

**Costante dei gas R** = 0.083145 m<sup>3</sup> mb mol<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>)

**Numero Avogadro A<sub>v</sub>** = 6.02253 10<sup>23</sup> molecole mole<sup>-1</sup>

$$pV = nRT$$



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



**k<sub>B</sub>** = Costante di Boltzmann

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

**Concentrazione di molecole in aria (Molecole m<sup>3</sup>)**

### Esempio

P = 1013 mb

T = 288 K

N = 2.56 10<sup>25</sup> molecole/m<sup>3</sup>

### 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 ( $1 \text{ m}^3$ ) 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  $\text{m}^{-3}$** )

### **2. Concentrazione di massa:**

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

È la definizione fisicamente più intuitiva che si possa dare

Lo indichiamo con il simbolo  $\rho_x$  ( **$\text{g m}^{-3}$** ). Dato che normalmente siamo interessati a sostanze presenti in tracce, l'unità di misura sarà ( **$\text{mg m}^{-3}$** ) 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: NO<sub>2</sub> (PM<sub>NO<sub>2</sub></sub> = 46.006)

$$\rho_x = 1 \cdot (\mu\text{g} \cdot \text{m}^{-3}) = 10^{-6} \cdot \frac{0.083145 \cdot 288}{1013 \cdot 46.006} = 5.138 \cdot 10^{-10} \left( \frac{\text{moli}_{\text{NO}_2}}{\text{moli}_{\text{aria}}} \right) = 0.5138 \text{ ppb}$$

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

## **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.



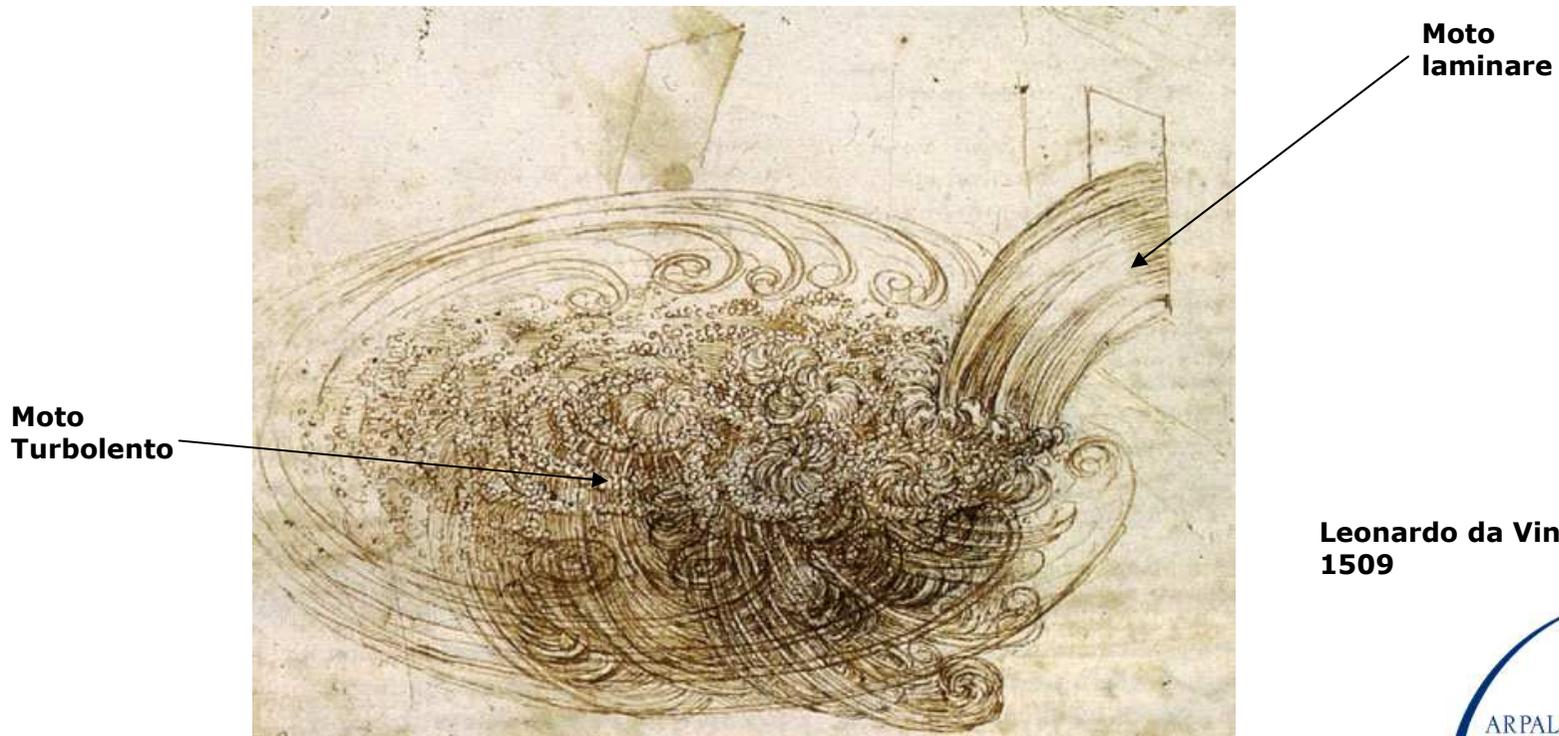
## Moto Turbolento

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**.

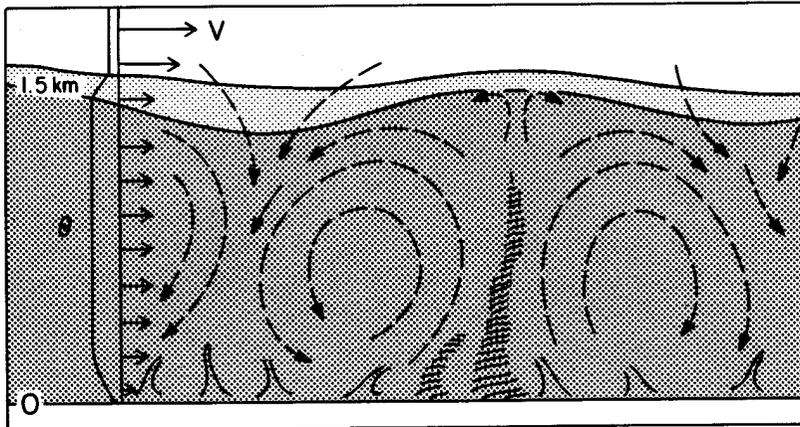
In generale, in esso possiamo individuare un comportamento **sostanzialmente regolare cui si sovrappongono disturbi di dimensione e durata variabile**.

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

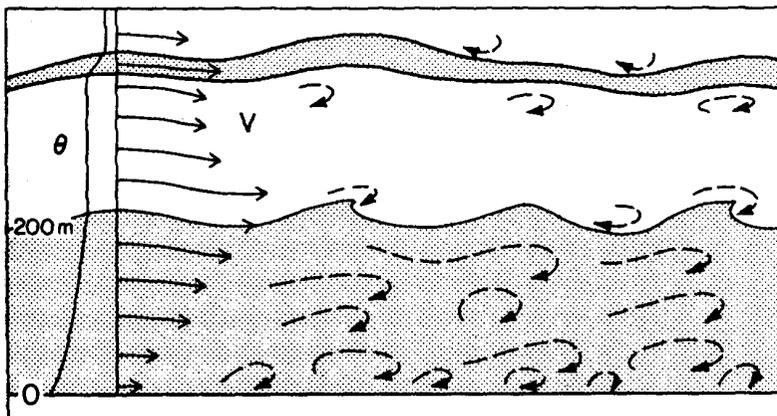




## Situazione Convettiva



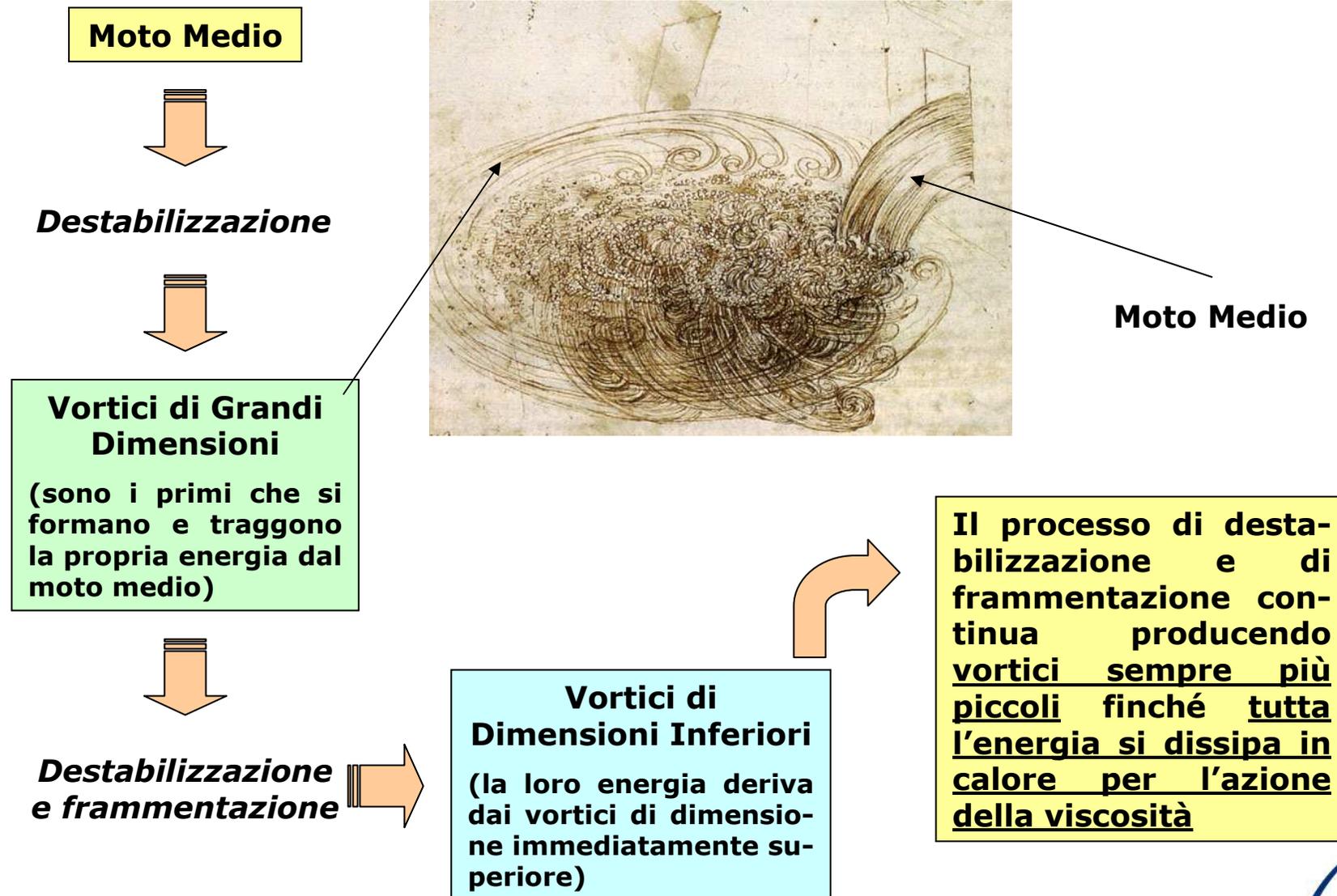
## Situazione Stabile



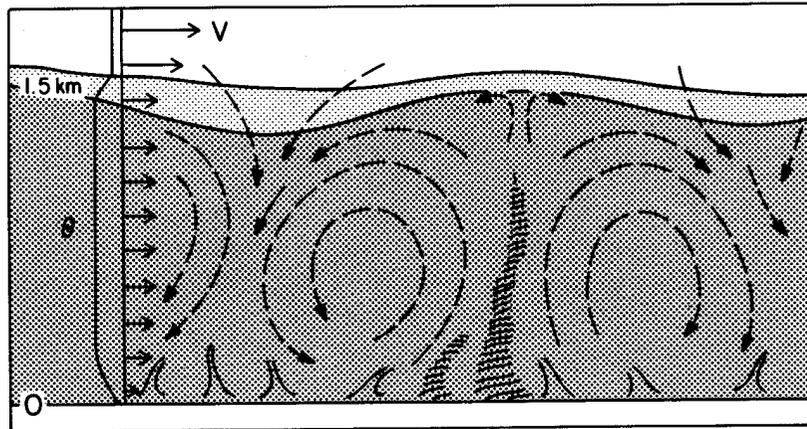
### Elemento Caratteristico del moto turbolento nel PBL

- 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.

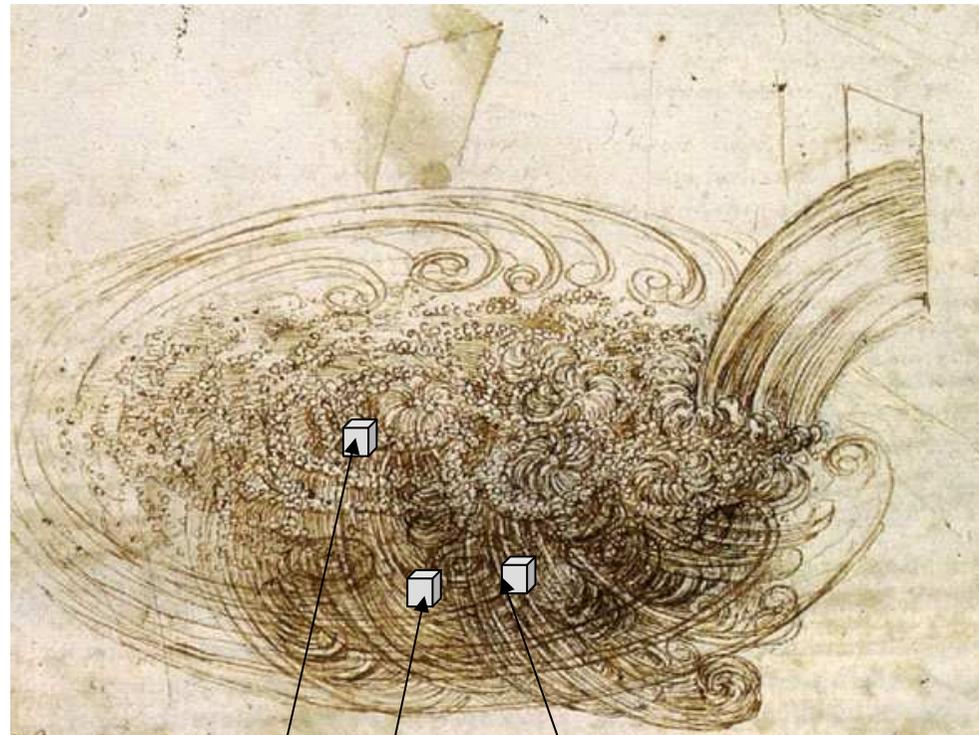


Nella descrizione Lagrangiana la **concentrazione** degli inquinanti nel *PBL* viene **descritta analizzando la traiettoria** (posizione nel tempo) di ogni particella entro il fluido.

**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  $\delta x$ ,  $\delta y$  e  $\delta z$  infinitesimi e paralleli agli assi di riferimento
- le componenti della velocità del vento e la concentrazioni di inquinante siano **variabili istantanee**

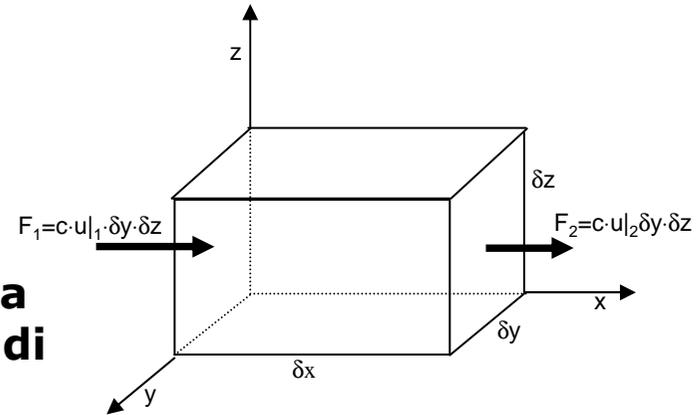
## Bilancio di massa istantaneo

Flusso in transito lungo l'asse x

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

$\delta x$  (infinitesimo) è la distanza che separa le due facce opposte del volume ed quindi

....



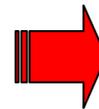
$$c \cdot u_2 = c \cdot u_1 + \left. \frac{\partial(c \cdot u)}{\partial x} \right|_1 \delta x + \frac{1}{2} \cdot \left. \frac{\partial^2(c \cdot u)}{\partial x^2} \right|_1 \delta x^2 + \dots$$

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:

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

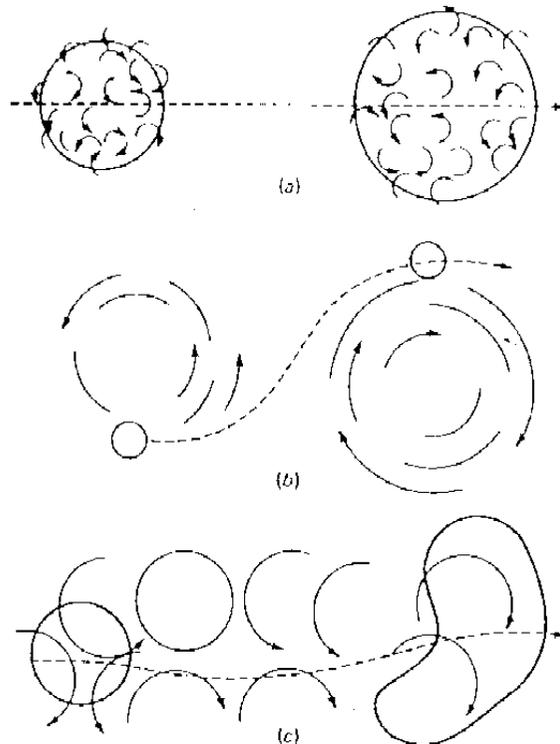
Reazioni di cinetica chimica                      Termine di sorgente

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

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

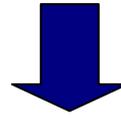
**Concentrazione istantanea =  
concentrazione media + fluttuazione a media nulla**



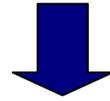
$$\frac{\partial \bar{c}_k}{\partial t} + u \frac{\partial \bar{c}_k}{\partial x} + v \frac{\partial \bar{c}_k}{\partial y} + w \frac{\partial \bar{c}_k}{\partial z} = -\frac{\partial}{\partial x} (\overline{u'c_k'}) - \frac{\partial}{\partial y} (\overline{v'c_k'}) - \frac{\partial}{\partial z} (\overline{w'c_k'})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

### 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.



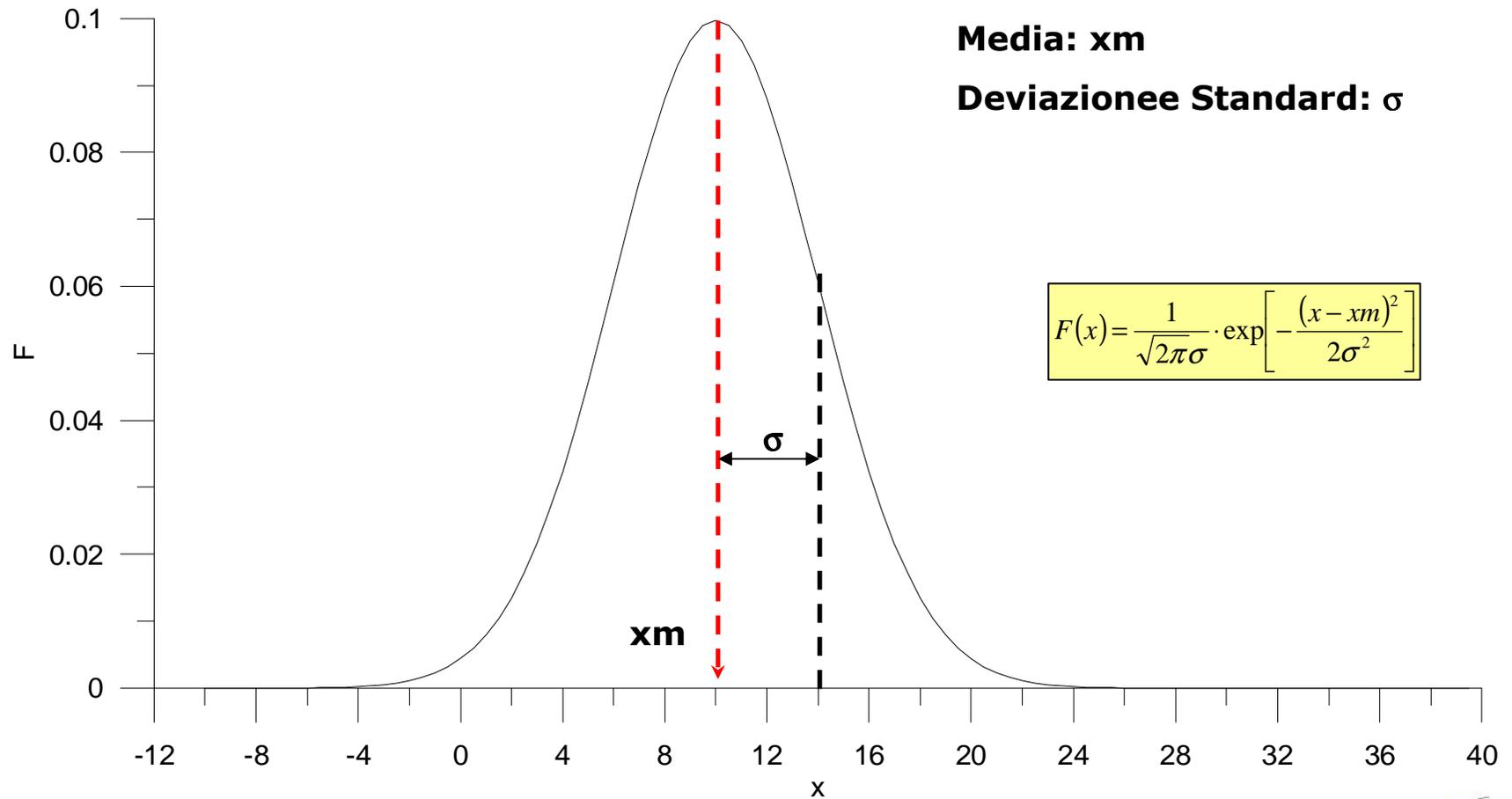
La concentrazione in un punto  $\mathbf{P}(x,y,z)$  al tempo  $t$  è pari a:

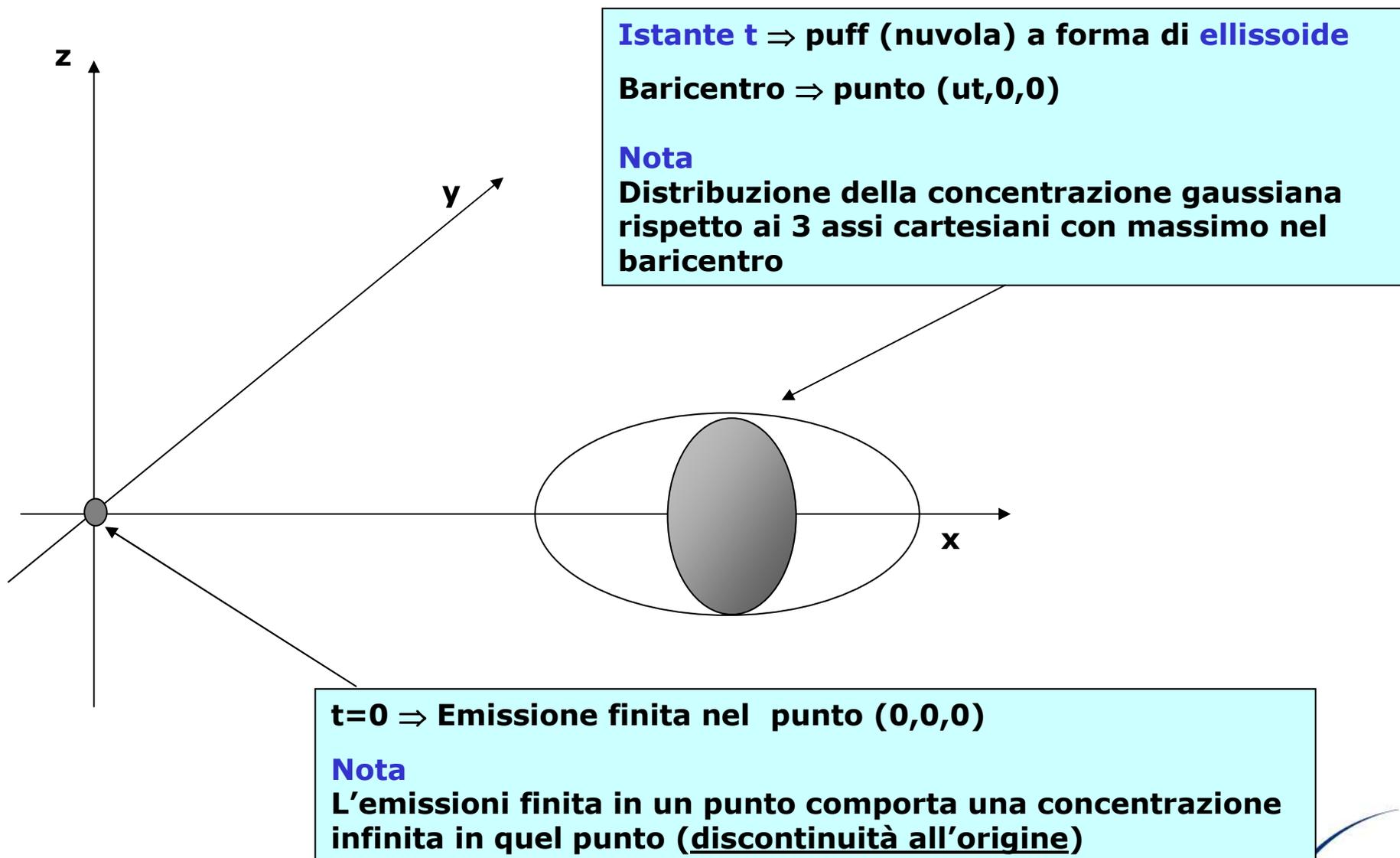
$$c(x, y, z, t) = \frac{q}{(4\pi)^{3/2} (K_{xx} K_{yy} K_{zz})^{1/2}} \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{4t} \left[ \frac{(x-ut)^2}{K_{xx}} + \frac{y^2}{K_{yy}} + \frac{z^2}{K_{zz}} \right] \right\}$$

- $\Rightarrow$  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

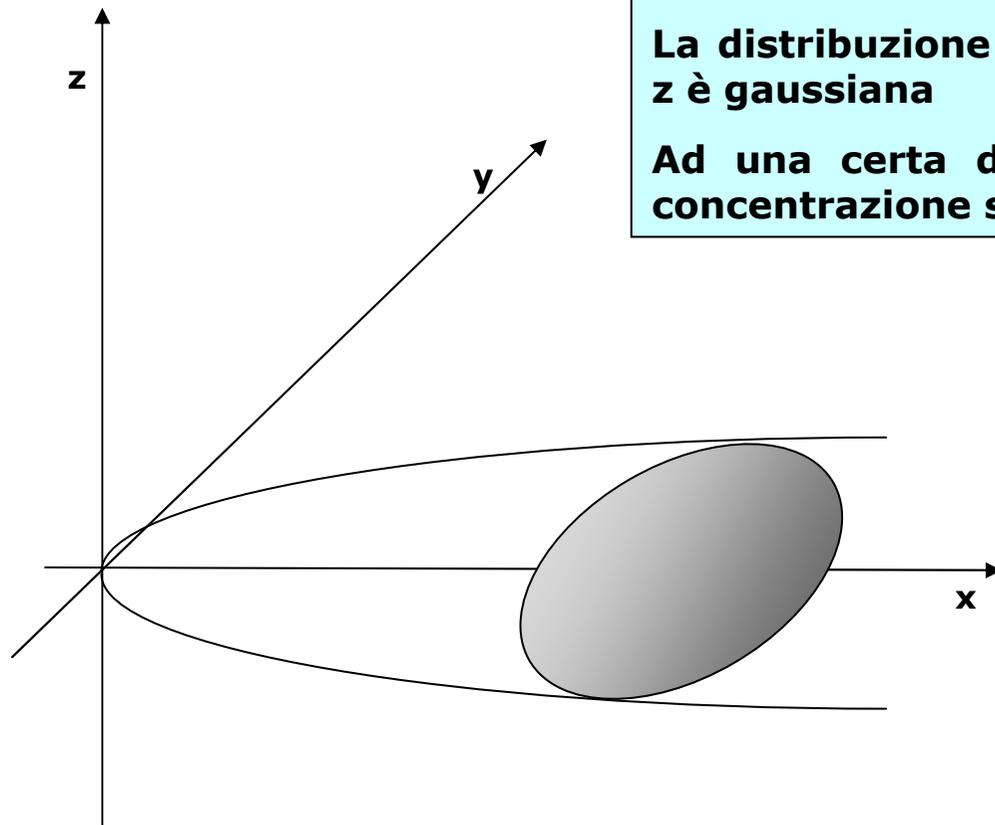
Il *plume* mantiene forma e dimensione costanti nel tempo

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

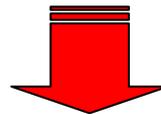
Ad una certa distanza sottovento  $x$  la massima concentrazione sta sull'asse di simmetria del *plume*



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

## 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)...

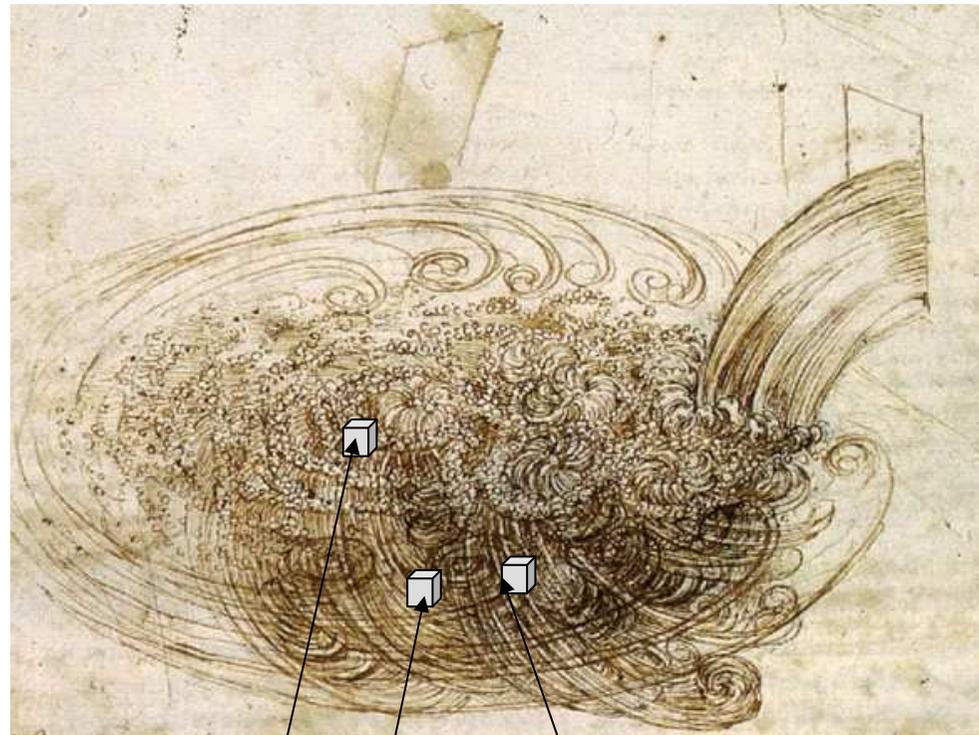


.... quindi ....



*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)**.



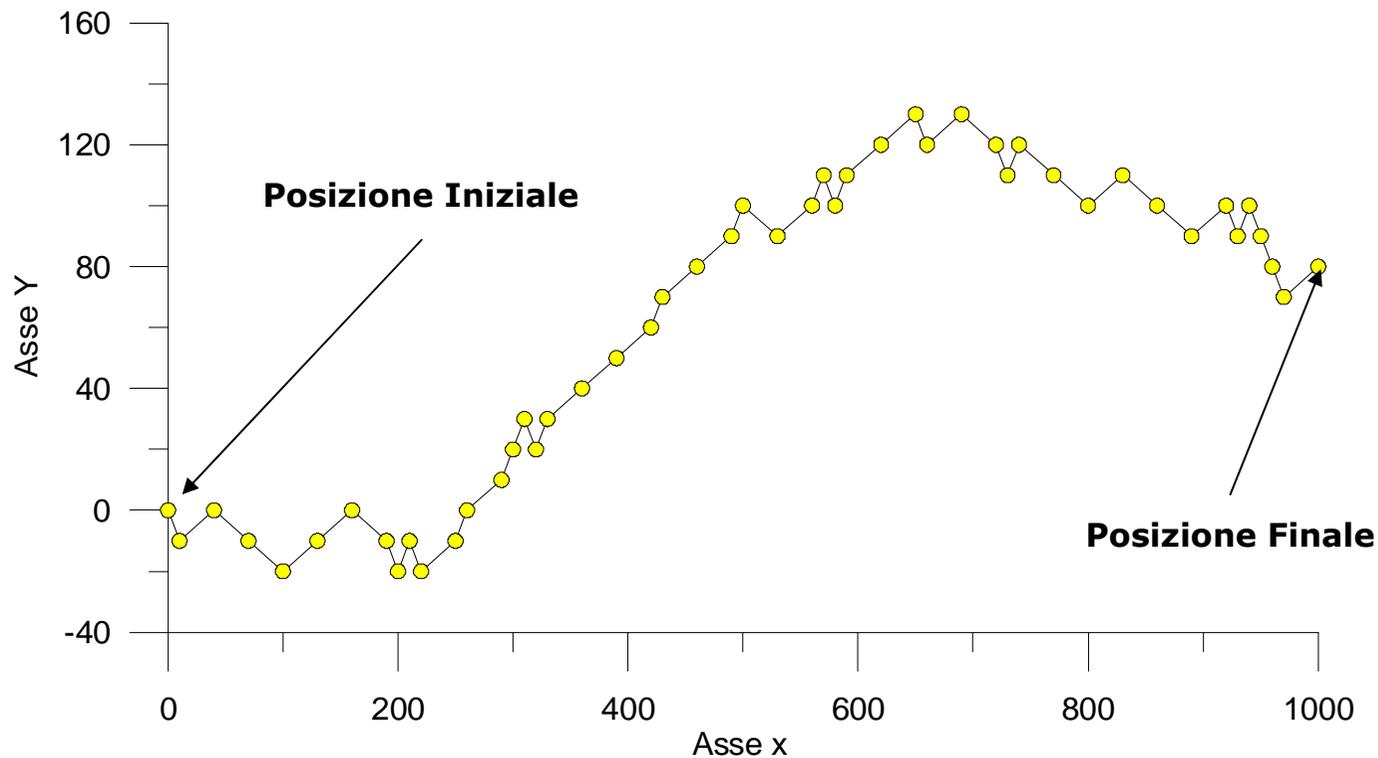
La **particella** emessa si **muoverà** in maniera apparentemente **disordinata**, come l'aria del PBL, e il suo **moto potrà essere descritto solo in termini probabilistici**.

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**.

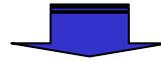
Una particella che a  $t_0$  si trova nella posizione  $\underline{X}_0(x_0, y_0, z_0)$ , negli istanti successivi  $t$  può **muoversi** nell'aria con un **movimento disordinato e casuale**, giungendo ad una **nuova posizione**  $\underline{X}(x, y, z)$ .



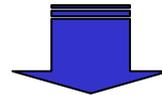
$\underline{X} \Rightarrow \underline{X}(x, y, z; t)$  è la **traiettoria della particella**.



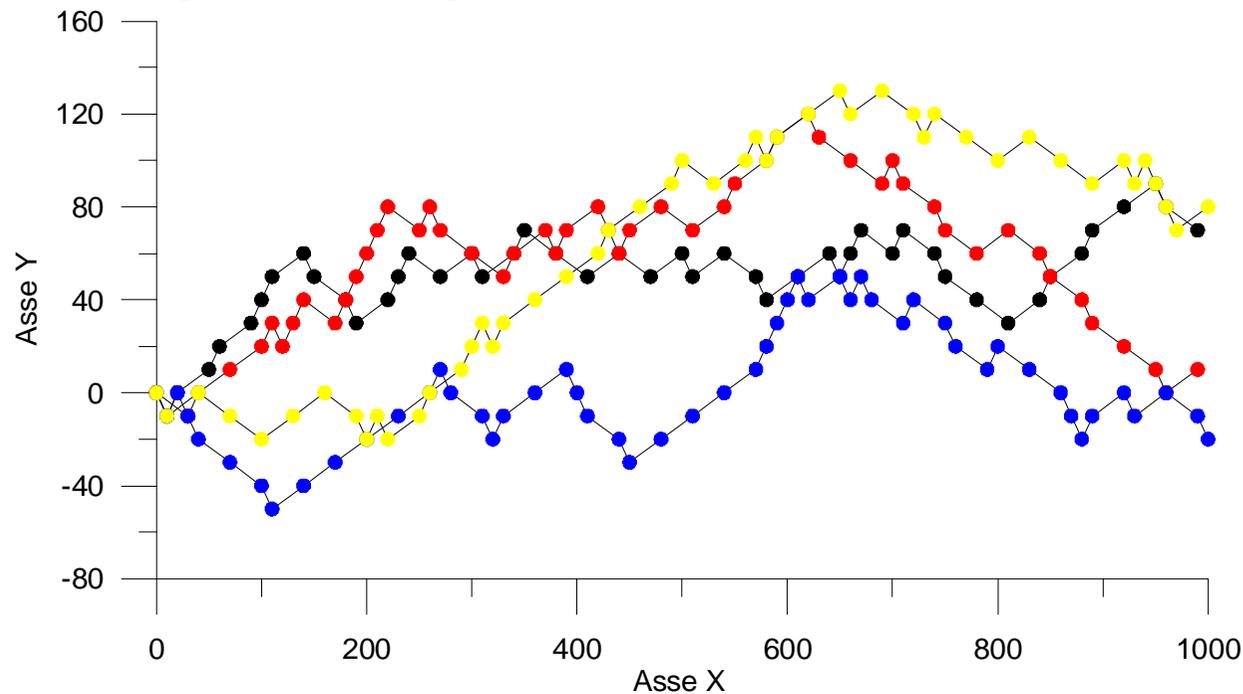
Se si considerano **moltissime particelle diverse**, tutte emesse nel punto  $\underline{X}_0(x_0, y_0, z_0)$ , al tempo  $t_0$ ,



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  $\sigma_w$  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  $z_k(t')$

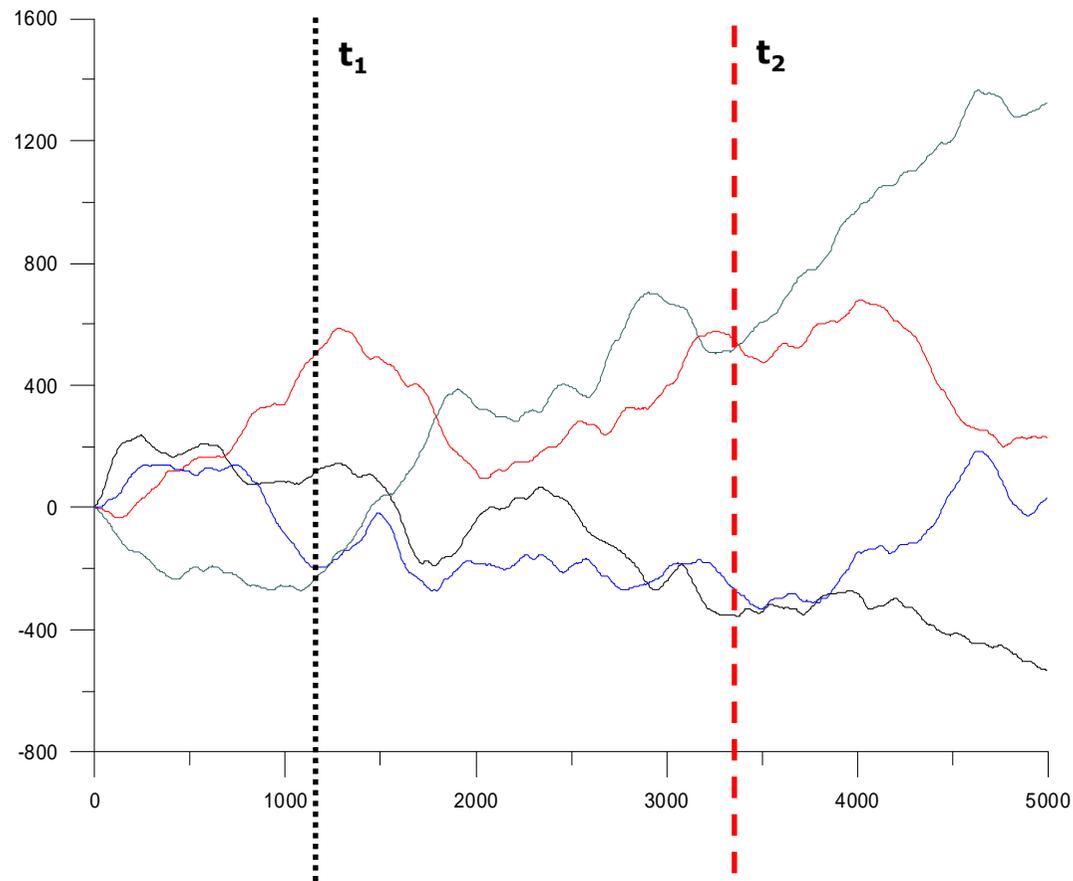
$\Rightarrow$  La velocità ad un istante  $t$  di una particella è data da:

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

$\Rightarrow$  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**

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

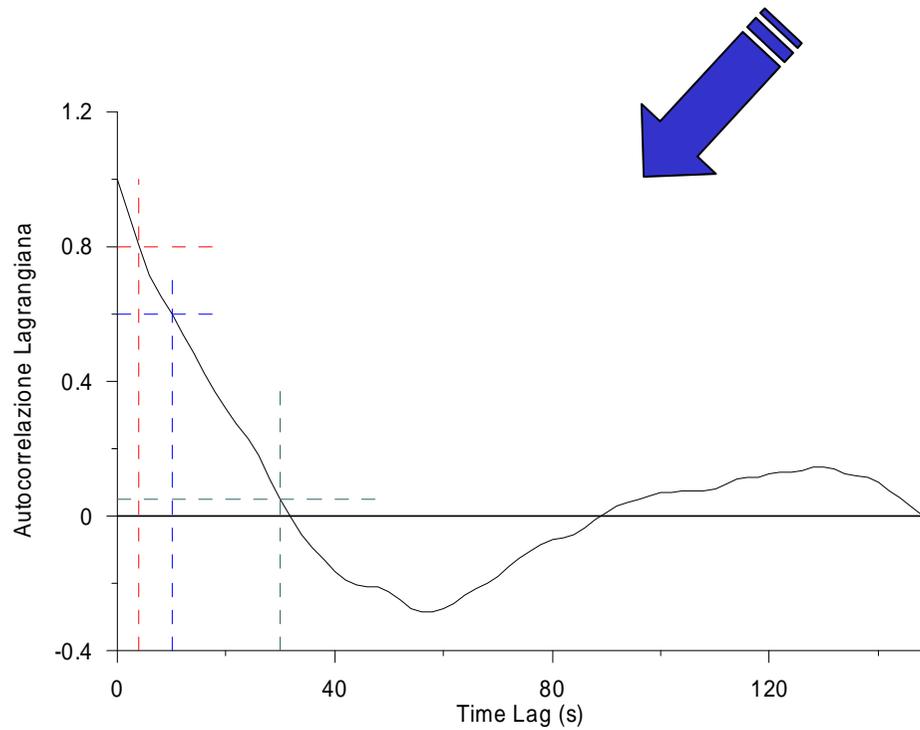
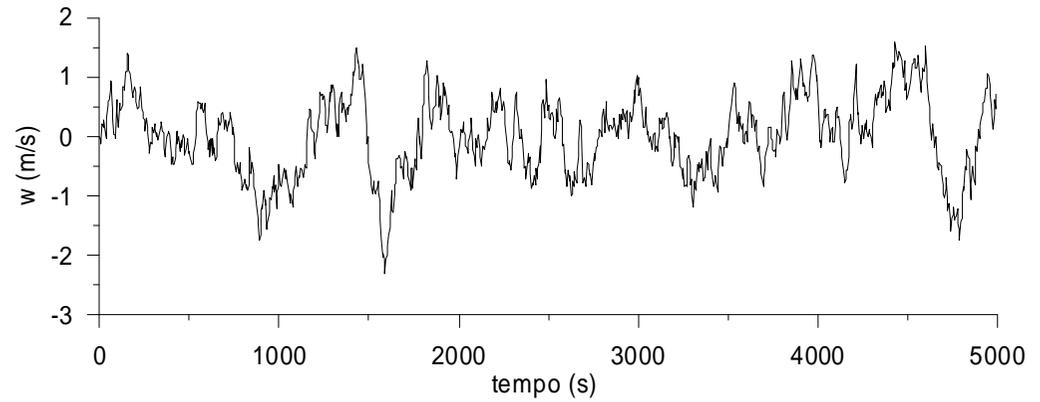
#### **Significato**

- ⇒  $\tau$  = **time lag** = tempo di osservazione considerato tra due valori della variabile stocastica
- ⇒  $\sigma_w^2$  = **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 ( $\tau$ ) è la misura della correlazione riscontrata tra le velocità assunte dalla particella in due distinti istanti separati dall'intervallo temporale  $\tau$**

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

## Esempio

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

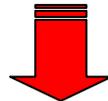


**Per  $\tau = 4$  sec. il ricordo è dell' 80%**  
**Per  $\tau = 10$  sec il ricordo è del 60%**  
**Per  $\tau = 30$  sec. il ricordo è del 5%**

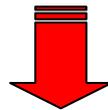
$$\frac{d\overline{z^2}}{dt} = 2 \cdot \overline{w(t) \cdot \int_0^t w(t') \cdot dt} = 2 \cdot \int_0^t \overline{w(t) \cdot w(t')} \cdot dt'$$



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



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



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

## Casi Limite:

⇒ **Campo vicino**  $t \rightarrow 0$

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

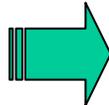
$$\sigma_z^2 = \sigma_w^2 t^2$$

⇒ **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  $\sigma_z$ .

**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  $\tau$  quando  $\tau$  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