Modelli di Dispersione degli Inquinanti in Aria
2011

Parte 5

Modello Lagrangiano a Particelle

dott. Roberto Sozzi
dott. Andrea Bolignano

ARPALAZIO

Considerazione Preliminare

Aria del PBL

Visione macroscopica → **fluido continuo** il cui **stato** presenta spiccate caratteristiche pseudo-casuali (**turbolenza**) evidenti nelle irregolarità delle misure delle principali variabili che lo descrivono. Tali irregolarità sono ben *descritte* adottando un **punto di vista statistico**.

Visione microscopica → **insieme di molecole** di varie specie chimiche in **continuo movimento caotico** (*pseudo-casuale*) nello *spazio* e nel *tempo*.

Il loro movimento non può essere seguito nel dettaglio, molecola per molecola, ma il **risultato collettivo** *del loro evolvere nello spazio e nel tempo* può essere **catturato** in un punto **P**(x,y,z) e ad un istante t da una *misura* (euleriana) fatta in quel punto.

E' ovvia la correttezza della visione microscopica del PBL, ma per scopi pratici, è più semplice e operativa una Descrizione Macroscopica $\Rightarrow$ Fluidodinamica.

Emissione di una sostanza inquinante in $P(x_0,y_0,z_0;t_0)$:

Visione microscopica: in **P**($x_0,y_0,z_0;t_0$) vengono a trovarsi **un certo numero** (*enorme* comunque) di **molecole** della **sostanza inquinante**, dotate ciascuna di proprie proprietà dinamiche (velocità). Tali molecole, negli istanti t successivi a t_0, si muovono con le altre molecole dell'aria e le caratteristiche del loro moto dipenderà delle **condizioni dinamiche iniziali** e dalla **interazione** con le molecole d'aria circostanti

Visione macroscopica: nel punto **P**($x_0,y_0,z_0;t_0$) viene immessa una **quantità di un fluido continuo** avente proprie caratteristiche iniziali (velocità, temperatura, densità) che, negli istanti t successivi a t_0, si **miscelerà** con l'aria circostante.

Tutti i modelli di dispersione visti finora adottano un approccio macroscopico

In essi, l'effetto della turbolenza deve essere in qualche modo **parametrizzato** mediante **parametri *ad hoc***
(es. parametri di dispersione nei modelli gaussiani e ibridi, tensore di diffusione turbolenta nei modelli euleriani)

Modello Lagrangiano a Particelle

Adotta una versione semplificata dell'approccio microscopico.

Modello di tipo totalmente statistico non nel senso di una descrizione statistica dell'intero fenomeno, ma di una descrizione statistica del movimento delle differenti particelle di inquinante entro l'aria.

Elementi di base di un Modello Lagrangiano a Particelle (LPM)

Particelle ⇒ l'emissione di molecole in **P**($x_0, y_0, z_0; t_0$) è **simulata** con l'introduzione in **P** di un numero rilevante di entità astratte (**particelle**), cioè di ***porzioni piccole ed elementare di sostanza inquinante.*** Si ha che:

- ogni particella ha un volume irrilevante
- ad ogni particella emessa viene attribuita una massa **Q** di sostanza inquinante
- conserva la propria massa (nessuna reazione chimica o impoverimento per deposizione)
- possiede in **P**($x_0, y_0, z_0; t_0$) una propria velocità iniziale
- continua il proprio moto negli istanti successivi a t_0 descrivendo una traiettoria nello spazio e nel tempo
- le particelle non interagiscono tra loro
- le particelle interagiscono *in qualche modo* con l'ambiente circostante variando la propria traiettoria istante dopo istante

ARPALAZIO

Aria del PBL $\Rightarrow$ viene **ancora** descritta come un **fluido continuo in moto turbolento**.

La sue **caratteristiche** sono quelle descritte dalla Micrometeorologia e tale **descrizione** è di **tipo** strettamente **euleriano**, cioè in ogni punto **P**(x,y,z;t) il fluido possiede:

- un **vettore velocità media** e un **valore medio** per le altre grandezze macroscopiche che ne definiscono lo **stato medio**
- i **momenti di vario ordine** relativi alle variabili di interesse (varianze delle componenti della velocità, covarianze tra componenti della velocità e tra queste e la temperatura)
- in qualche modo **influenza** la traiettoria di ogni singola particella

Obiettivo del modello

Descrizione **ad ogni istante $t>t_0$ della** **traiettoria** **di ogni singola particella**

Le caratteristiche macroscopiche del fluido in cui sono immesse le particelle sono quelle di un fenomeno stocastico

Ipotesi Principe di un LPM

Il movimento di ogni singola particella è la realizzazione di un processo stocastico continuo, vista l'interazione con l'aria circostante che presenta caratteristiche stocastiche

Processo stocastico

⇒ Un **processo fisico** (es. il movimento di un punto) che ***evolve nello spazio e nel tempo*** a partire da un ***punto iniziale*** $\mathbf{P}(x_0,y_0,z_0;t_0)$ in modo casuale, con ben precise caratteristiche statistiche.

⇒ Se lo **stesso processo** (es. il movimento della stessa particella) ***potesse ripetersi un'infinità di altre volte nelle stesse condizioni*** (e per la Statistica ciò è possibile), la sua evoluzione avrebbe **infinite realizzazioni** a priori **diverse**.

⇒ Ogni singola **particella** evolve nello spazio-tempo seguendo le leggi di un **processo stocastico.**

⇒ La **non interazione** ipotizzata per le particelle comporta che i vari **processi stocastici** siano tra loro **indipendenti** .

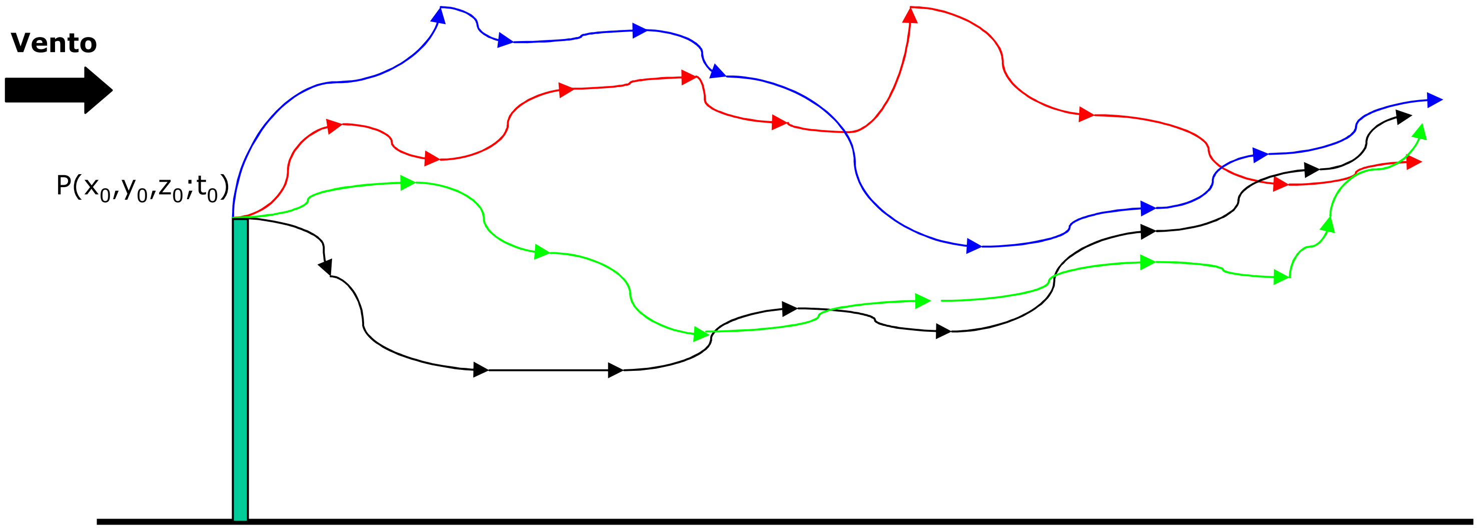
Logica del LPM

⇒ Le particelle vengono emesse insieme da $P(x_0,y_0,z_0;t_0)$

⇒ Ogni particella segue nel tempo una **realizzazione** di traiettoria

⇒ La traiettoria di ogni particella è a priori diversa

⇒ LPM segue ogni singola traiettoria



LPM segue la traiettoria di ogni singola particella

⇒ Ad un istante **t** considera un punto **P**(*x,y,z;t*)

⇒ Individua, centrato su P, un piccolo volume di spazio (es. un cubo) → **volume di campionamento V**

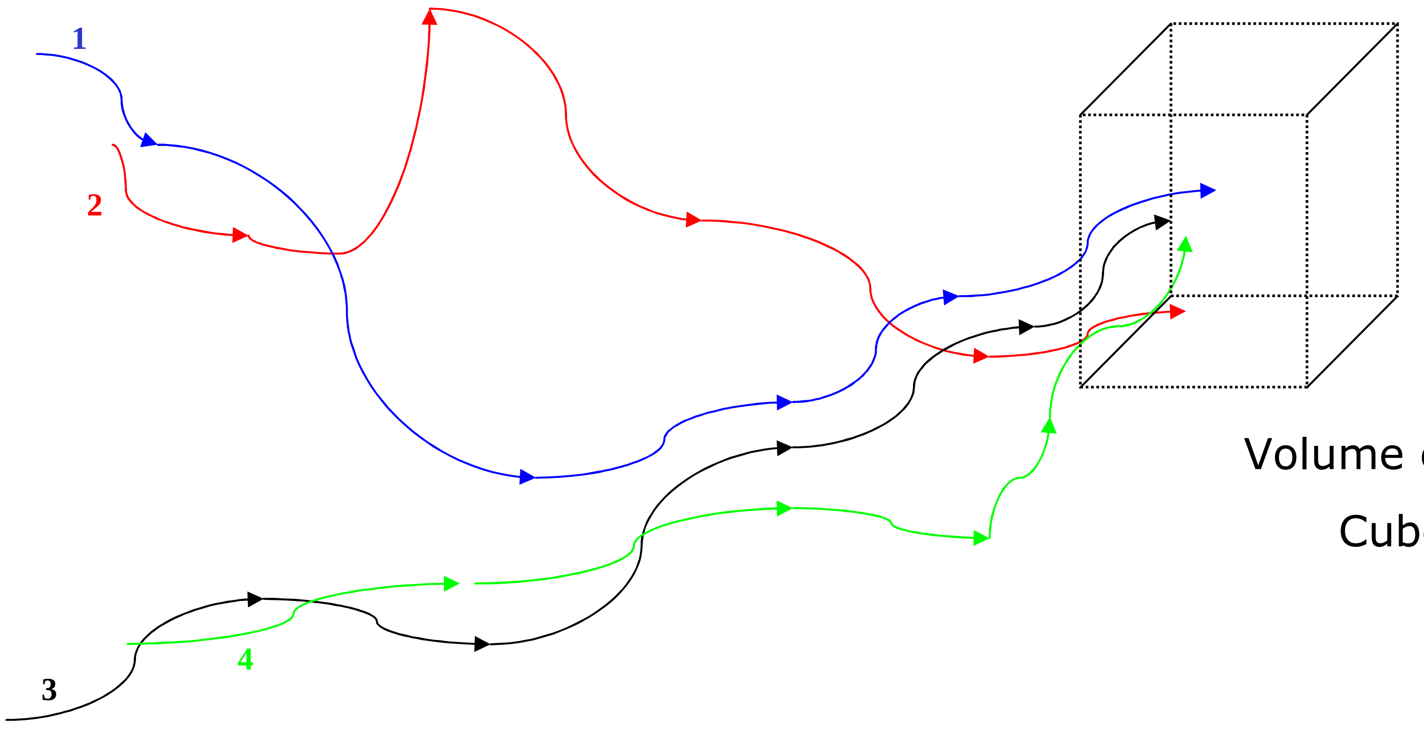
⇒ Individua **quali particelle** si trovano all'istante *t* **entro** il volume di campionamento

⇒ Siano **N** le **particelle presenti**, ognuna contenente una **quantità Q_i** di **sostanza inquinante**

⇒ Si definisce **concentrazione** nel punto **P** all'istante **t**

$$\boxed{C(x,,y,z;t) = \frac{\sum_{i=1}^{N} Q_i}{V}}$$

ARPALAZIO



Volume campionamento

Cubo lato 10 m

Particella 1 $\rightarrow$ Q_1 = 5 mg/m^3

Particella 1 $\rightarrow$ Q_2 = 10 mg/m^3

Particella 1 $\rightarrow$ Q_3 = 7 mg/m^3

Particella 1 $\rightarrow$ Q_4 = 20 mg/m^3

$$C(x,y,z;t) = \frac{Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4}{V} = \frac{5+10+7+20}{10 \cdot 10 \cdot 10} \cdot \frac{mg}{m^3} = 42 \mu g / m_3$$

Essenza di un LPM

Ricostruzione simulata della traiettoria di ogni singola particella

Sia data una ***generica particella p*** in un sistema di riferimento cartesiano ortogonale:

Traiettoria di *p*

$$\begin{cases} x_p(x,y,z;t) = x\left[x_o(t_0), y_0(t_0), z_0(t_0); t\right] \\ y_p(x,y,z;t) = y\left[x_o(t_0), y_0(t_0), z_0(t_0); t\right] \\ z_p(x,y,z;t) = z\left[x_o(t_0), y_0(t_0), z_0(t_0); t\right] \end{cases}$$

Velocità di *p*

$$\begin{cases} u_p(x,y,z;t) = \dfrac{dx_p}{dt} = u_p\left[u_o(t_0), v_0(t_0), w_0(t_0); t\right] \\ v_p(x,y,z;t) = \dfrac{dy_p}{dt} = v_p\left[u_o(t_0), v_0(t_0), w_0(t_0); t\right] \\ w_p(x,y,z;t) = \dfrac{dy_p}{dt} = w_p\left[u_o(t_0), v_0(t_0), w_0(t_0); t\right] \end{cases}$$

LPM considera come processo stocastico

$\Rightarrow$ **non** la posizione nel tempo di una singola particella

$\Rightarrow$ **ma la sua posizione e la sua velocità nel tempo.**

Traiettoria nello **Spazio delle Fasi** $(x,y,z,u_p,v_p,w_p;t)$

Ogni singola componente della velocità è un processo stocastico

NB. **Per semplicità**, si ipotizzi che **non ci siano interdipendenze** tra le varie componenti della velocità della particella che considereremo **processi stocastici distinti e indipendenti.**

Modellizzazione di una generica componente (es. u_p) della velocità di una particella

Processo stocastico u_p

$$u_p(x,y,z;t) = \overline{u_p}(x,y,z;t) + u'_p(x,y,z;t)$$

Ipotesi A

La particella si trova *immersa* nell'aria e, in media, viene **trascinata** dal **moto medio** dell'atmosfera

Componente Deterministica

$$\overline{u_p} = \overline{u}$$

$$\overline{u} = \text{velocità media eureliana dell'aria}$$

Ipotesi B

La fluttuazione è **propria** della particella e dipende:

- dalla sua storia passata
- dal livello di turbolenza propria dell'aria circostante

Componente Stocastica

Studio della parte stocastica di una componente della velocità di una particella

Modello Semplificato

$\Rightarrow$ la particella viene ***trasportata orizzontalmente*** dal **moto medio** delle masse d'aria (**Trasporto deterministico**)

$$u_p(x,y,z;t)=\overline{u}_p(x,y,z;t)=\overline{u}(x,y,z;t) \;\Rightarrow\; u_p^{'}(x,y,z;t)=0$$
$$v_p(x,y,z;t)=\overline{v}_p(x,y,z;t)=\overline{v}(x,y,z;t) \;\Rightarrow\; v_p^{'}(x,y,z;t)=0$$

$\Rightarrow$ La particella presenta una ***traslazione nulla in verticale*** e **fluttua stocasticamente** in verticale

$$w_p(x,y,z;t)=w_p^{'}(x,y,z;t)$$
$$\overline{w}_p=0$$

Processo stocastico w'_p

$\Downarrow$

Dipende dalla storia della particella

Ipotesi C

Processo Stocastico di tipo Markoviano

Il futuro è determinato solo dal presente ed è indipendente dal passato
(**processo senza memoria**)

Al processo stocastico w'_p si applica <u>direttamente</u> la Teoria dei Processi Stocastici Markoviani

Al tempo *t* una particella possiede una fluttuazione di velocità verticale $w_p(t)$

Secondo la Teoria dei Processi Markoviani, w_p al tempo *t+dt* (*dt* intervallo di tempo piccolo) è data dall'Equazione di Langevin

$$\boxed{dw_p = w_p(t+dt) - w_p(t) = a_w(z, w_p, t)\cdot dt + b_w(z, w_p, t)\cdot d\xi}$$

Coefficiente di Drift

Coefficiente di diffusione

Processo Incrementale di Wiener

Processo stocastico gaussiano a media nulla e varianza *dt*.

$a_w(z,w,t)\cdot dt$	$\rightarrow$	**termine deterministico dipendente solo da *dt***
$b_w(z,w,t)\cdot d\xi$	$\rightarrow$	**termine stocastico dipendente dalla variabile stocastica $d\xi$ che a sua volta dipende da *dt***

ARPALAZIO

Generazione Numerica di realizzazioni di un processo incrementale di Wiener

dξ $\rightarrow$ variabile stocastica che segue una **distribuzione gaussiana N(0,dt)** con:

- *Media nulla*
- *Varianza dt*

Nell'equazione di Langevin, ogni volta che compare **d**ξ, significa che **tale variabile assume un valore estratto a caso** da una distribuzione **N(0,dt)**

Teorema della Statistica

Se: $X = N(m,s^2)$ e $Y = N(0,1)$

$$\mathbf{X = m + s \cdot Y}$$

Procedura di generazione numerica di due realizzazioni $d\xi_1$ e $d\xi_2$

1) Estrazione di 2 numeri u_1 e u_2 **realizzazioni** di una variabile stocastica distribuita uniformemente tra 0 e 1;

2) Calcolo di

$$V_1 = 2u_1 - 1$$
$$V_2 = 2u_2 + 1$$
$$W = V_1^2 + V_2^2$$

$$Y = \sqrt{-\ln W / W}$$

3) Si ottengono due realizzazioni X_1 e X_2 di una variabile **N(0,1)**

$$X_1 = V_1 Y$$
$$X_2 = V_2 Y$$

4) $d\xi 1$ e $d\xi 2$ (distribuiti come N(0,dt)) sono dati da

$$d\xi_1 = \sqrt{dt} \cdot X_1$$
$$d\xi_2 = \sqrt{dt} \cdot X_2$$

ARPALAZIO

Esercizio

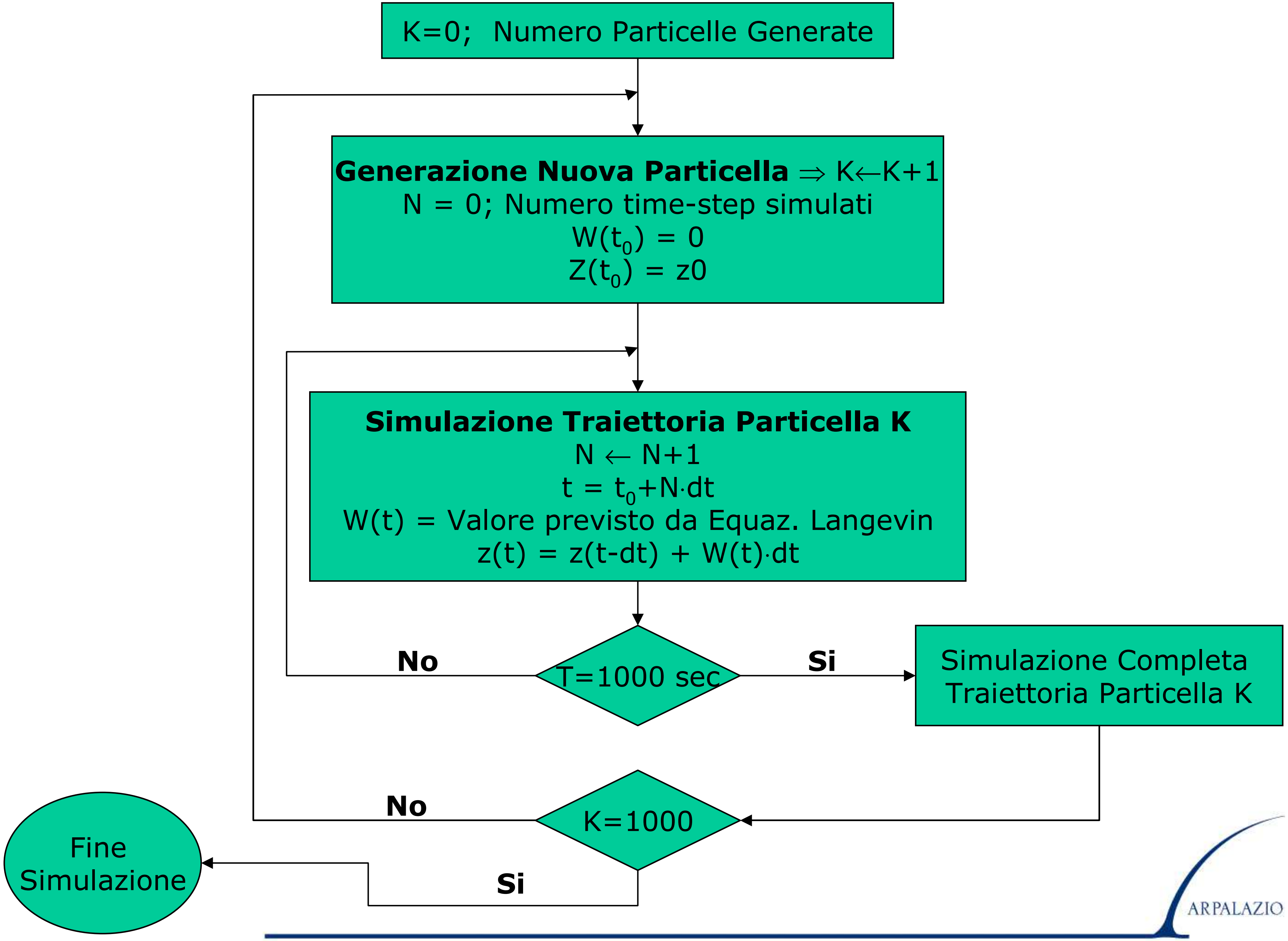
Vediamo se questo modello parziale porta a risultati utili anche se non si è in grado, per ora, di dare un valore ai coefficienti a_w e b_w.

Si consideri un'**emissione contemporanea di 1000 Particelle**:

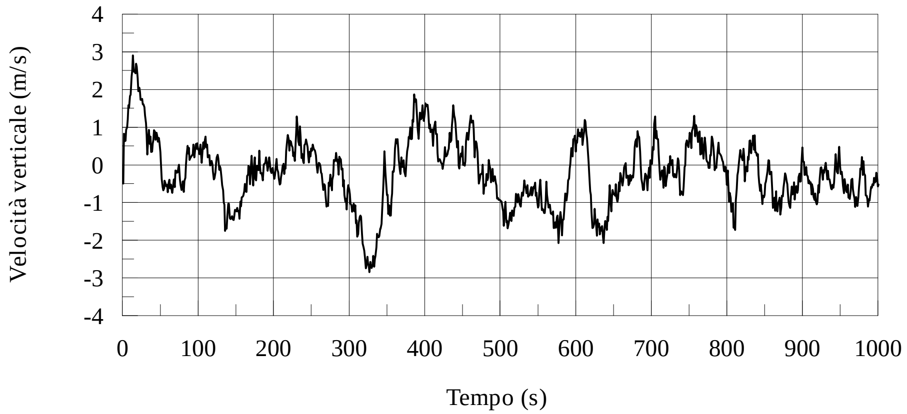
- ogni particella si trova all'istante iniziale ***t*=0** in $\mathbf{P(0,0,z_0)}$
- all'istante iniziale la particella è ferma ed in particolare $\mathbf{w_0=0}$
- dt = 1 secondo
- $a_w(z,w,t) = \mathbf{a_w(w)} = -0.03\ w$
- $b_w(z,w,t) = \mathbf{b_w} = 0.23$
- la simulazione viene condotta per **1000 secondi**
- la particella è soggetta ad un trasporto trasversale nullo e ad un trasporto longitudinale dovuto ad un **vento medio pari a 1 m/s**

$$\boxed{w_p(t+dt) = w_p(t) + a_w \cdot dt + b_w \cdot d\xi}$$

Si esegue una simulazione Monte Carlo

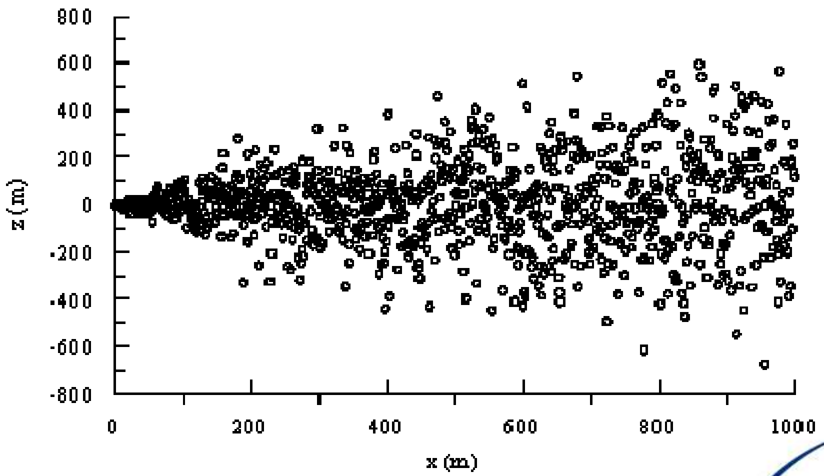

K=0; Numero Particelle Generate
Generazione Nuova Particella ⇒ K←K+1
N = 0; Numero time-step simulati
W(t0) = 0
Z(t0) = z0
Simulazione Traiettoria Particella K
N ← N+1
t = t0+N·dt
W(t) = Valore previsto da Equaz. Langevin
z(t) = z(t-dt) + W(t)·dt
No
T=1000 sec
Si
Simulazione Completa Traiettoria Particella K
No
K=1000
Fine Simulazione
Si
ARPALAZIO

Risultati della Simulazione Monte Carlo



Andamento nel tempo della velocità verticale della particella

Distribuzione delle particelle nello spazio bidimensionale (x,z)



Commento

Il modello descrive effettivamente un processo di diffusione. Se si riuscisse a porre in relazione a_w e b_w alla turbolenza del PBL, sarebbe possibile ottenere un modello di dispersione utilizzabile

ARPALAZIO

Il modello risulta **promettente**, ma per usarlo, è **indispensabile**

individuare un modo per determinare i termini $a_w(z,w,t)$ e $b_w(z,w,t)$

Tale modo dovrebbe poter **consentire** di sfruttare al meglio la **conoscenza statistica del moto dell'aria del PBL**

Dall'equazione di Langevin non si può ottenere, per ora, nulla di più.

E' necessario acquisire maggiori informazioni su un Processo Stocastico Markoviano.

Descrizione alternativa di un Processo Stocastico Markoviano

Ad ogni particella è associabile una Funzione di Densità di Probabilità P(z,w,t)

⇓

P(z,w,t) = probabilità che, al tempo *t*, una particella si venga a trovare ad una quota nell'intervallo z÷ z+dz con una velocità verticale compresa tra w_p e w_p+dw_p

⇓

Modo alternativo di descrivere l'evoluzione di una particella

Equazione di Langevin $\Rightarrow$ seguo la particella in ogni istante dal suo rilascio (istante iniziale t_0) ed in ogni punto e ne registro la traiettoria. In sostanza seguo una realizzazione del processo stocastico con cui è descritta.

Utilizzo di P(z,w,t) $\Rightarrow$ mi pongo in un punto dello spazio-tempo (o meglio in un punto dello Spazio delle Fasi) e mi domando quale sia la probabilità di trovare proprio in quel punto quella particella, o meglio una particella qualunque avente la data velocità w

La Teoria dei Processi Stocastici Markoviani individua un modo per descrivere P(z,w,t)

Equazione di Fokker-Plank

Equazione di Fokker-Planck

Equazione differenziale alle derivate parziali che descrive l'evoluzione rispetto a *z*, *w* e *t* della Funzione Densità di Probabilità P(z,w,t)

$$\frac{\partial}{\partial t}P(z,w,t)+\frac{\partial}{\partial z}\left[w\cdot P(z,w,t)\right]=$$
$$-\frac{\partial}{\partial w}\left[a_w\cdot P(z,w,t)\right]+\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial w^2}\left[b_w^2\cdot P(z,w,t)\right]$$

Questa equazione, di fatto, contiene le stesse informazioni contenute nell'equazione di Langevin, anche se la forma matematica e statistica è notevolmente differente.

Un'**osservazione di fondamentale importanza** è che in questa equazione sono presenti gli **stessi parametri** $\mathbf{a_w}$ e $\mathbf{b_w}$ dell'equazione di Langevin.

Non si nota, però, alcun collegamento tra le caratteristiche statistiche delle particelle P(z,w,t) e quelle statistiche dell'aria $P_a(z,w,t)$

$P(z,w,t)$ = probabilità che al tempo *t* **una particella di sostanza inquinante** possieda una quota z÷z+dz e una velocità verticale w÷w+dw

$P_a(z,w,t)$= probabilità che al tempo *t* un **particella d'aria del PBL** possieda una quota z÷z+dz e una velocità verticale w÷ w+dw

La Micrometeorologia consente di descrivere con ottimo dettaglio le caratteristiche statistiche dell'aria del PBL e quindi, in qualche modo, anche $P_a(z,w,t)$

Per come è stata ottenuta e formulata, l'equazione di Fokker-Planck, a rigore, si riferisce a $P(z,w,t)$ e <u>non</u> a $P_a(z,w,t)$

Well Mixed Condition

(Thomson, 1987)

Se, però, si accetta la constatazione sperimentale che l'**evoluzione di particelle completamente rimescolate nel PBL resta tale** nel tempo e si descrive ciò mediante l'equazione di Fokker-Planck, si **ottiene** che

$$P_a(z,w,t) = P(z,w,t)$$

Questo non è un **risultato cosmetico**, ma è **essenziale** perché la statistica dell'aria del PBL può essere ben conosciuta e caratterizzata con la Micrometeorologia.

A questo punto si ha che:

- l'equazione di Langevin descrive la traiettoria di una particella nel PBL e richiede la conoscenza di a_w e b_w
- l'equazione di Fokker-Planck descrive in modo differenziale $P(z,w,t)$ che è equivalente a meno di una costante a $P_a(z,w,t)$
- a_w e b_w stanno in entrambe le equazioni

ARPALAZIO

Determinazione di b_w

Un parametro stastistico importante in Micrometeorologia Teorica è la **Funzione di Struttura Lagrangiana definita come:**

$$D(dt) = \overline{\left[w_p(t+dt) - w_p(t)\right]^2}$$

E' uno dei modi con cui esprimere l'autocorrelazione della velocità verticale di una particella

E' lagrangiana perché si riferisce alla traiettoria di una particella d'aria presa singolarmente

ARPALAZIO

Micrometeorologia

Relazione di Similarità

$$D(dt) = C_0 \cdot \varepsilon \cdot dt$$

Costante Universale (≅3)

ε = tasso di dissipazione di Energia Cinetica Turbolenta

La Funzione di Struttura è direttamente proporzionale ad tasso di dissipazione dell'Energia Cinetica Turbolenta e all'intervallo di *dt*.

Questa Relazione di Similarità è vera quando *dt* è maggiore del Tempo Caratteristico di Kolmogorov e inferiore al tempo di scala Lagrangiano

Calcoliamo La Funzione di Struttura impiegando direttamente l'Equazione di Langevin

Si ottiene:

$$D(dt)=\overline{\left[w_p(t+dt)-w_p(dt)\right]^2}=\overline{\left[a_w dt+b_w d\xi\right]^2}=\overline{\left[a_w^2\cdot dt^2+b_w^2\cdot d\xi^2+2a_w b_w\cdot dt\cdot d\xi\right]}$$

L'intervallo *dt* è molto piccolo $\rightarrow$ **vengono trascurati tutti i termini in cui dt è presente con potenza maggiore di 1**

<u>Analisi dei singoli termini</u>:

$\overline{a_w^2 dt^2}=a_w^2 dt^2$ $\Rightarrow$ **trascurato perché dell'ordine di *dt²***

$\overline{b_w^2 d\xi^2}=b_w^2\overline{d\xi^2}=b_w^2 dt$ $\Rightarrow$ **tenuto** (il **processo stocastico d**ξ è il processo incrementale di Wiener che ha media nulla e varianza dt)

$$\underbrace{\overline{2a_w b_w dt\cdot d\xi}=2a_w b_w dt\cdot\overline{d\xi}=0}$$

$$\boxed{D(dt)=b_w^2 dt}$$

Quindi si ha che:

$$\boxed{D(dt) = C_0\varepsilon \cdot dt = b_w^2 dt}$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{b_w = \sqrt{C_0\varepsilon}}$$

E' stato quindi possibile individuare un'espressione del tutto generale per il <u>Coefficiente di Diffusione</u> b_w.

Dipendente solo da ε, parametro fondamentale della turbolenza del PBL

Resta da individuare un modo per determinare il coefficiente di drift a_w

ARPALAZIO

Dall'equazione di Langevin non è possibile ottenere a_w

Si consideri l'equazione di Fokker-Planck

$$\frac{\partial}{\partial t}P_a(z,w,t)+\frac{\partial}{\partial z}\left[w\cdot P_a(z,w,t)\right]=$$
$$-\frac{\partial}{\partial w}\left[a_w\cdot P_a(z,w,t)\right]+\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial w^2}\left[b_w^2\cdot P_a(z,w,t)\right]$$

Considerazioni

1. Per la ***well-mixed condition*** è espressa in termini di $P_a(x,y,z;t)$, cioè di una funzione di distribuzione statistica relativa alla turbolenza del PBL che può essere nota mediante la Micrometeorologia
2. Il coefficiente di diffusione b_w è stato determinato
3. L'unica incognita è il coefficiente di drift a_w

Se si utilizza una $P_a(z,w;t)$ ⇒ Si ottiene a_w

1. Turbolenza Gaussiana Omogenea e Stazionaria

In un *PBL* reale non si ha mai una Turbolenza Gaussiana Omogenea se si considera la velocità verticale, mentre è una buona approssimazione per le fluttuazioni delle componenti orizzontali della velocità.

Vista la piccolezza di *dt* la stazionarietà è sempre una buona approssimazione.

Prendendo comunque come riferimento w, l'espressione di $P_a(z,w;t)$ dipende quindi solo da w e vale:

$$\boxed{P_a(z,w;t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_w} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}\cdot\left(\frac{w}{\sigma_w}\right)^2\right]}$$

σ_w è un parametro ben studiato nel PBL, può essere prodotto da modelli numerici di PBL e, oltre a tutto, è esprimibile mediante opportune Funzione di Similarità

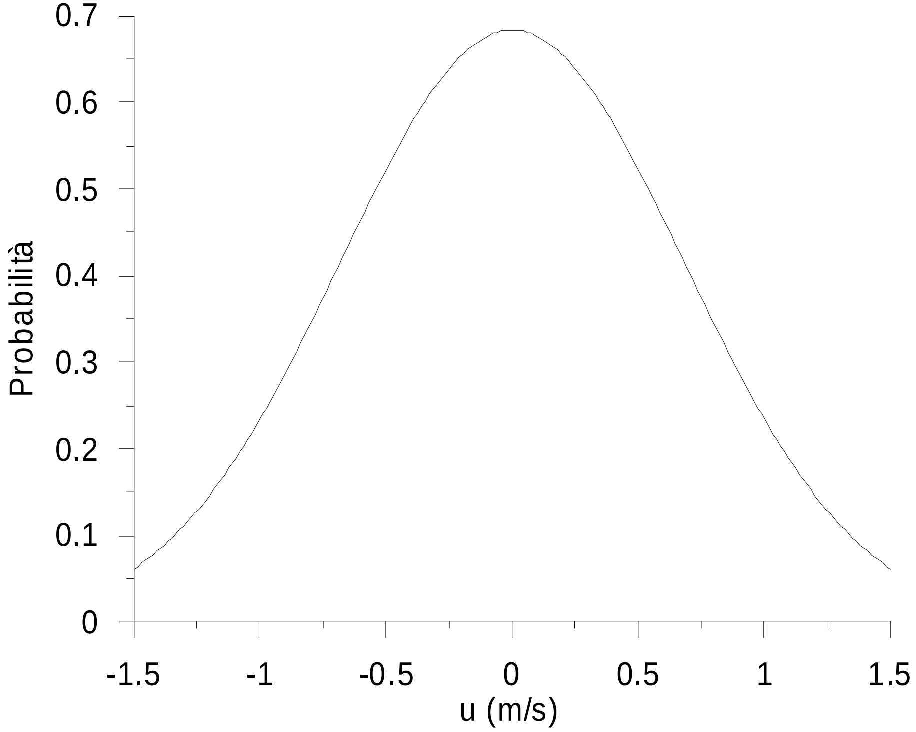
ARPALAZIO

Esempio

Componente trasversale u

$$\sigma_u^2 = 0.33 w_*^2$$

$$w_* = 1.2 (m/s)$$



ARPALAZIO

Introducendo nell'equazione di Fokker-Planck questa espressione per $P_a(z,w;t)$ e l'espressione ottenuta per b_w, si ottiene per il **coefficiente di drift a_w** la relazione seguente:

$$a_w = -\left(\frac{C_0 \varepsilon}{2\sigma_w^2}\right) \cdot w$$

Note le espressioni di a_w e b_w, l'equazione di Langevin può essere impiegata veramente per la determinazione (numerica) della traiettoria di ogni singola particella emessa.

$$w(t+dt) = w(t) + a_w dt + b_w d\xi$$

$$w(t+dt) = \left(1 - \frac{C_0 \varepsilon}{2\sigma_w^2} \cdot dt\right) \cdot w(t) + \sqrt{C_0 \varepsilon} \cdot d\xi$$

ARPALAZIO

Alcune Considerazioni

$$T_{Lw} = \frac{2\sigma_w^2}{C_0 \varepsilon}$$

Ha le dimensioni di un tempo

E' il Tempo Lagrangiano di scala T_{Lw} o meglio il <u>tempo di decorrelazione</u> di una particella.

T_{Lw} piccolo $\Rightarrow$ la particella dimentica molto rapidamente la propria w

T_{Lw} grande $\Rightarrow$ la particella ricorda a lungo la propria w

<u>Limite Logico e Applicativo</u>

$$\frac{dt}{T_{Lw}} << 1 \quad \Rightarrow \quad dt << T_{Lw}$$

Per poter seguire l'evoluzione del processo stocastico w_p, bisogna che durante l'incremento temporale *dt* la particella non risulti completamente decorreta con sé stessa, quindi *dt* non può essere superiore a T_{Lw}

ARPALAZIO

Nelle **applicazioni pratiche**, il passo temporale ***dt*** (infinitesimo) viene sostituito da un passo ***Δt*** finito ma piccolo che deve rispettare la limitazione seguente:

$$\boxed{\Delta t << T_{Lw} = \frac{2\sigma_w^2}{C_0 \varepsilon}}$$

Una **buona scelta pratica** è scegliere $\Delta t < 0.1 T_{Lw}$

Forma discreta dell'Equazione Langevin

$$\boxed{w(t+\Delta t) = \left(1 - \frac{C_0 \varepsilon}{2\sigma_w^2} \cdot \Delta t\right) \cdot w(t) + \sqrt{C_0 \varepsilon} \cdot d\xi}$$

ARPALAZIO

Nota

Dato che *dt* è un <u>infinitesimo</u>, si ha che

$$\boxed{\left(1-\frac{C_0\varepsilon}{2\sigma_w^2}\cdot dt\right)=\left(1-\frac{dt}{T_{Lw}}\right)=\exp\left(-dt/T_{Lw}\right)}$$

Funzione di Autocorrelazione

Da questa considerazione l'**Equazione di Langevin Discreta** può essere espressa come

$$\boxed{w(t+\Delta t)=\exp\left(-\Delta t/T_{Lw}\right)\cdot w(t)+\sigma_w\sqrt{\frac{2}{T_{Lw}}}\cdot d\xi}$$

purché Δt rispetti la condizione indicata.

ARPALAZIO

2. Turbolenza Gaussiana Non Omogenea e Stazionaria

In un *PBL* reale non si ha mai una Turbolenza Gaussiana Omogenea soprattutto se si considera la velocità verticale.

σ_w è funzione della quota z

Vista la piccolezza di *dt* la stazionarietà è sempre una buona approssimazione.

Prendendo come riferimento w, l'espressione di $P_a(z,w;t)$ vale:

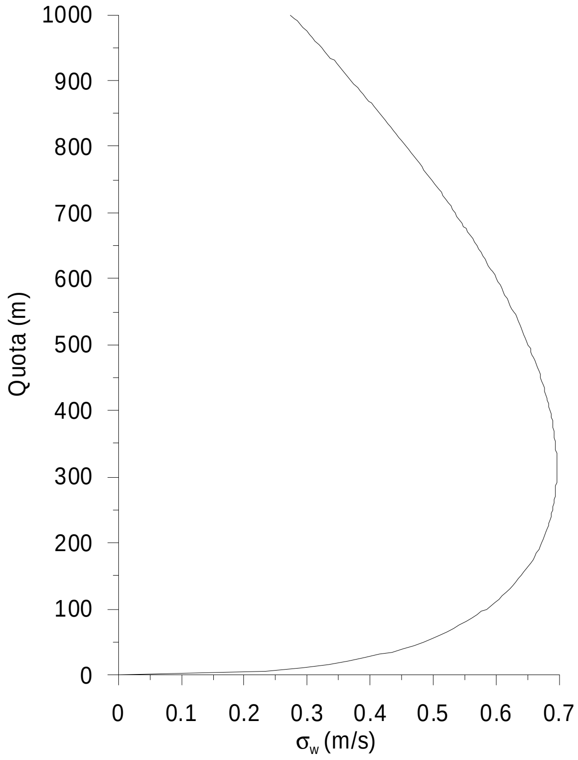
$$\boxed{P_a(z,w;t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_w(z)} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{w}{\sigma_w(z)} \right)^2 \right]}$$

La Micrometeorologia ha individuato varie Relazioni di Similarità che ben riproducono i valori sperimentali.

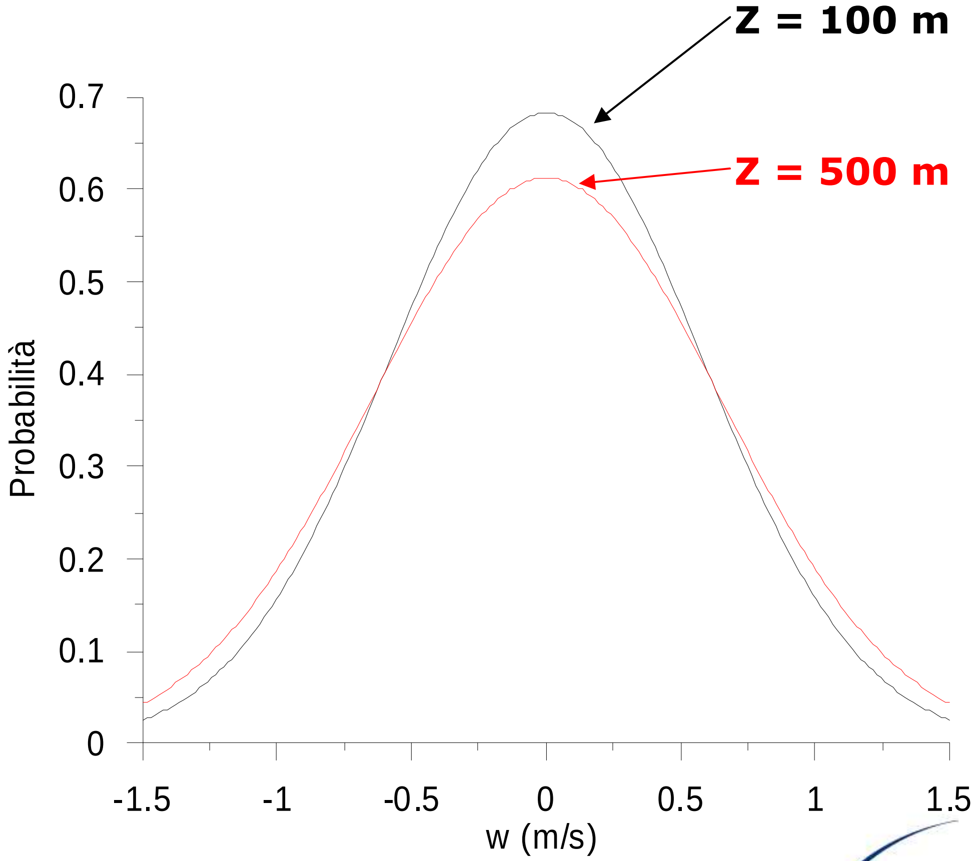
I modelli numerici di PBL sono in grado di fornire σ_w anche in casi orograficamente complessi

Esempio

$$\sigma_w^2 = 1.3 w_* \cdot \left(\frac{z}{z_1}\right)^{2/3} \left(1 - 0.8 \cdot \frac{z}{z_i}\right)$$
$$z_i = 1000m$$
$$w_* = 1.2(m/s)$$



$P_a(z,w)$



Introducendo nell'equazione di Fokker-Planck questa espressione per $P_a(z,w;t)$ e l'espressione ottenuta per b_w, si ottiene per il **coefficiente di drift a_w** la relazione seguente:

$$a_w(z,w) = -\left(\frac{C_0\varepsilon}{2\sigma_w^2(z)}\right)w + \frac{1}{2}\left[1+\left(\frac{w}{\sigma_w(z)}\right)^2\right]\cdot\frac{\partial\sigma_w^2(z)}{\partial z}$$

Note le espressioni di a_w e b_w, l'equazione di Langevin della traiettoria di ogni singola particella emessa diventa

$$w(t+dt) = w(t) + a_w dt + b_w d\xi$$

$$w(t+dt) = \left(1-\frac{C_0\varepsilon}{2\sigma_w^2}\cdot dt\right)\cdot w(t) + \underbrace{\frac{1}{2}\cdot\left[1+\left(\frac{w}{\sigma_w}\right)^2\right]\cdot\frac{\partial\sigma_w^2}{\partial z}\cdot dt}_{} + \sqrt{C_0\varepsilon}\cdot d\xi$$

Termine aggiuntivo (rispetto al caso di turbolenza gaussiana omogenea) che tiene conto della variazione di σ_w con z.

ARPALAZIO

3. Turbolenza Non Gaussiana Omogenea e Stazionaria

In un *PBL* convettivo la distribuzione della componente verticale della velocità dell'aria w può essere vista come:

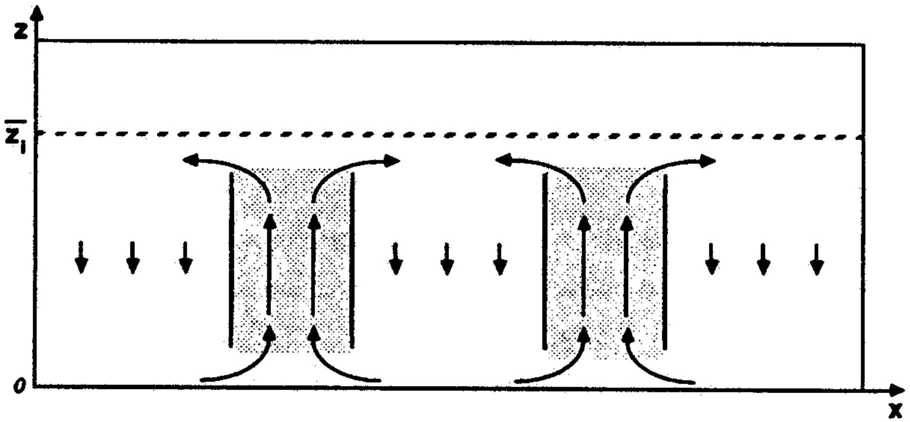
- ⇒ **Omogenea in senso verticale entro tutto il *PBL* (si trascura ciò che accade nel SL)**
- ⇒ **Stazionaria**
- ⇒ **Non gaussiana ma descritta da una <u>distribuzione asimmetrica</u>**

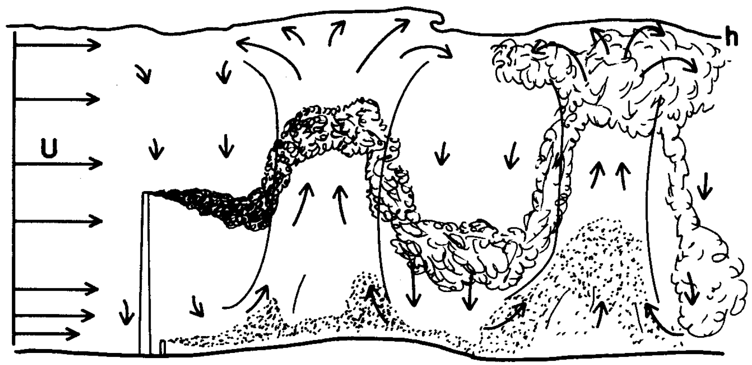
Modello di distribuzione

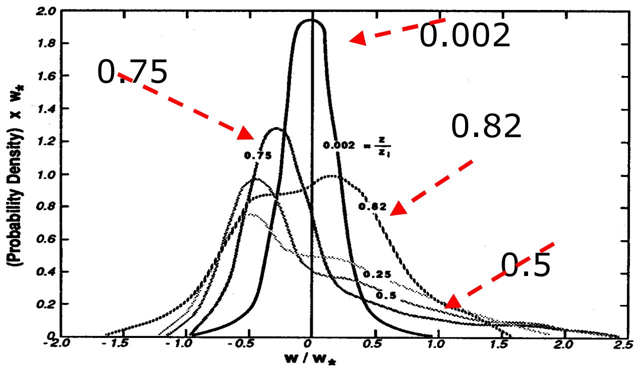
La distribuzione di w non è simmetrica per la presenza degli *updraft* e *downdraft*

1. ***somma di due distribuzioni gaussiane***
2. ***la prima (updraft) presenta un valor medio di w positivo***
3. ***la seconda (downdraft) un valor medio di w negativo***

flusso ascendente (*up-draft*)
flusso discendente (*down-draft*)







Updraft
Velocità media m_1
Standard deviation σ_1

$$P(z,w) = \frac{A_1}{\sqrt{2\pi}\sigma_1} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{w-m_1}{\sigma_1}\right)^2\right] + \frac{A_2}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{w-m_2}{\sigma_2}\right)^2\right]$$

Downdraft
Velocità media m_2
Standard deviation σ_2

$$\sigma_1 = +m_1 = \sqrt{\frac{1}{2} \cdot \sigma_w^2 \cdot \frac{(1-p)}{p}}$$

$$\sigma_2 = -m_2 = \sqrt{\frac{1}{2} \cdot \sigma_w^2 \cdot \frac{p}{(1-p)}}$$

$$p = 0.43$$

Una possibile formulazione

ARPALAZIO

Esempio

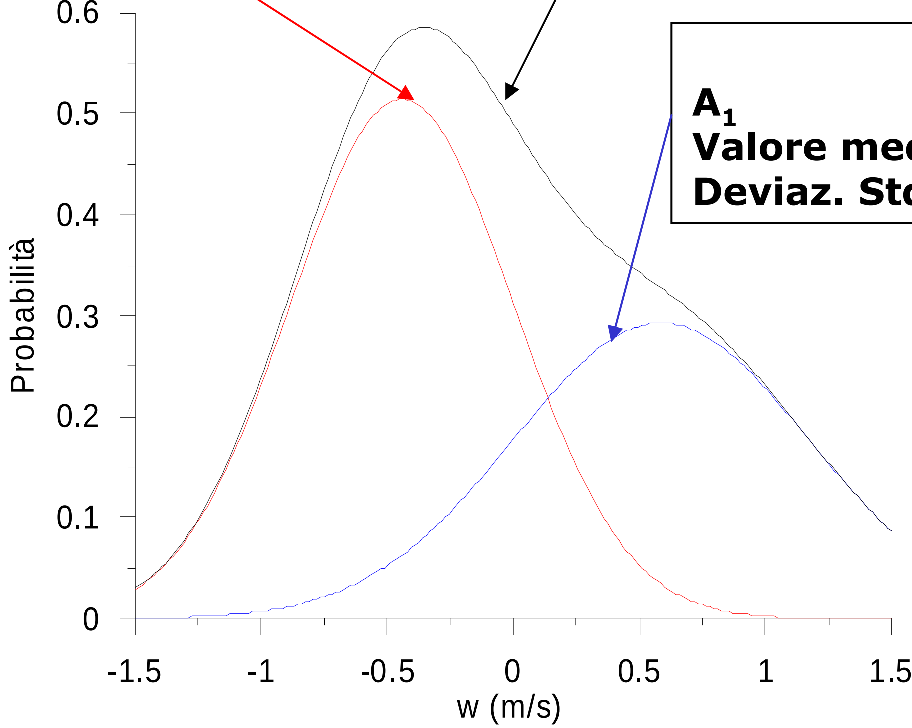
Downdraft

A_2 = 0.57
Valore medio = - 0.442 m/s
Deviaz. Std. = 0.442 m/s

Probabilità di w

Updraft

A_1 = 0.43
Valore medio = 0.586 m/s
Deviaz. Std. = 0.586 m/s



W_* = 1.2 m/s

ARPALAZIO

Inserendo questa espressione di P(z,w) nell'equazione di Fokker-Planck, si ottiene la seguente espressione per a_w

$$a_w = -\frac{C_0 \varepsilon}{2} \cdot \frac{A_1 \cdot N(m_1, \sigma_1) \cdot (w - m_1)/\sigma_1^2 + A_2 \cdot N(m_2, \sigma_2) \cdot (w - m_2)/\sigma_2^2}{A_1 \cdot N(m_1, \sigma_1) + A_2 \cdot N(m_2, \sigma_2)}$$

dove

$$N(m_{1,2}, \sigma_{1,2}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{1,2}} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{w - m_{1,2}}{\sigma_{1,2}} \right)^2 \right]$$

Anche in questo caso il coefficiente di diffusione vale:

$$b_w = \sqrt{C_0 \varepsilon}$$

ARPALAZIO

Primo Modello Utilizzabile

⇓

Modello Monodimensionale di

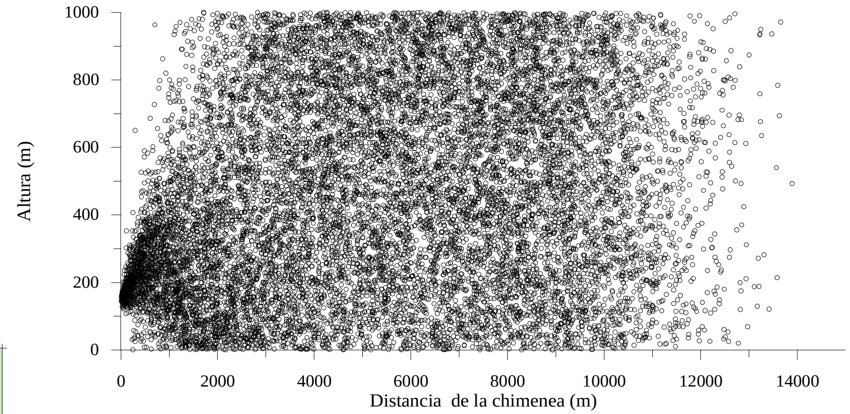
Dispersione Verticale delle particelle

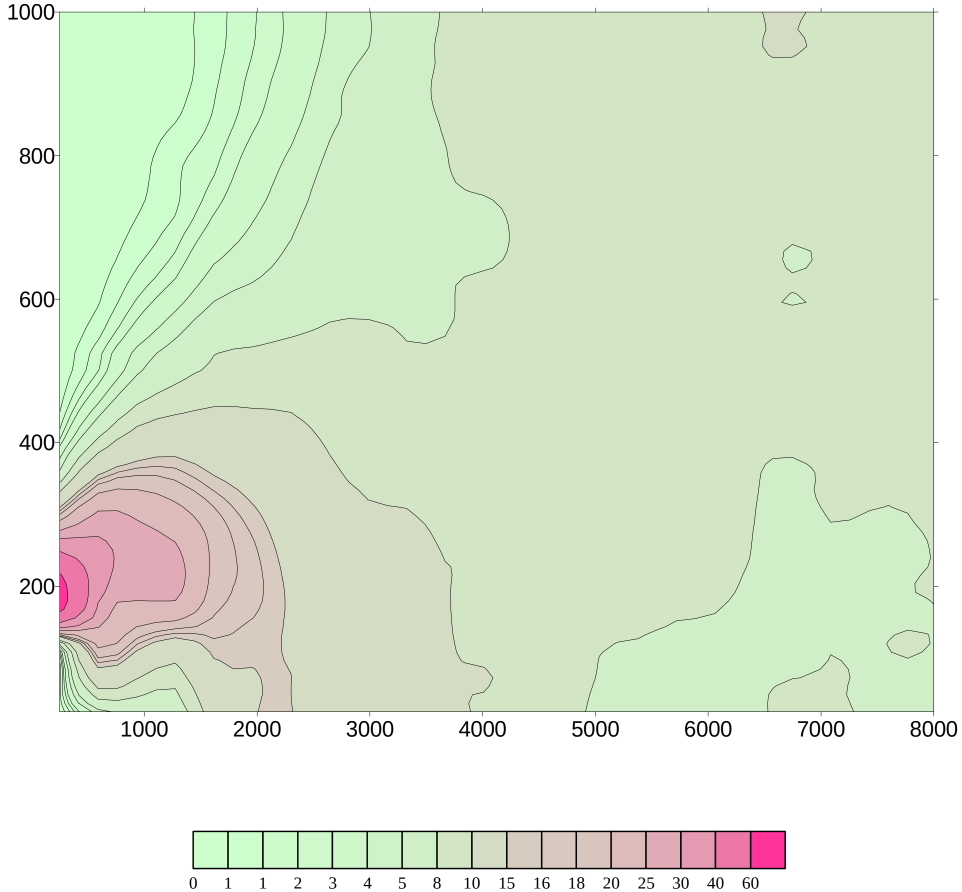
⇓

⇒ **Metodo di simulazione di tipo Monte Carlo**

⇒ **Basato sull'applicazione discreta dell'equazione di Langevin relativa alla componente verticale *w* della velocità delle particelle**

N.B. Il risultato che si ottiene da una Simulazione Monodimensionale è la distribuzione in verticale della concentrazione di un inquinante integrata nella direzione trasversale rispetto alla direzione di provenienza del vento





Un esempio di Simulazione Monodimensionale

ARPALAZIO

Modello Tridimensionale

Nella realtà → movimento di particelle nello spazio 3D

⇓

Teoria 3D ⇒ Molto complessa

In pratica, il <u>movimento di ogni particella</u> è descritto:

⇒ **Dal valore delle 3 <u>componenti medie</u> della velocità della particella (è il moto *traslazionale* della particella dovuto al campo medio del vento)**

⇒ **Dalle 3 equazioni stocastiche che ne definiscono le fluttuazioni (è la conseguenza combinata della storia pregressa della particella e dell'azione della turbolenza dell'aria incontrata nel suo cammino)**

⇒ **Dalle 3 equazioni cinematiche che definiscono lo spostamento della particella nell'intervallo temporale *dt*.**

Nel dettaglio, una particella con un moto di traslazione dovuto alla velocità $\left(\overline{u}, \overline{v}, \overline{w}\right)$

avrà fluttuazioni di velocità date dalle equazioni di Langevin

$$
\begin{aligned}
u(t+dt) &= u(t) + a_u dt + b_u d\xi \\
v(t+dt) &= v(t) + a_v dt + b_v d\xi \\
w(t+dt) &= w(t) + a_w dt + b_w d\xi
\end{aligned}
$$

e la sua posizione al tempo *t+dt* sarà data da

$$
\begin{aligned}
x(t+dt) &= x(t) + \left[\overline{u}(t+dt) + u(t+dt)\right] \cdot dt \\
y(t+dt) &= y(t) + \left[\overline{v}(t+dt) + v(t+dt)\right] \cdot dt \\
z(t+dt) &= z(t) + \left[\overline{w}(t+dt) + w(t+dt)\right] \cdot dt
\end{aligned}
$$

ARPALAZIO

Le espressioni dei vari coefficienti presenti nelle equazioni di Langevin sono molto complesse.

⇓

Semplificazione

⇓

Approssimazione Quasi-Tridimensionale

⇒ **Le fluttuazioni *u*, *v*, *w* della velocità della particella sono tra loro indipendenti;**

⇒ **Le componenti orizzontali *u* e *v* avranno coefficienti $a_{u,v}$ e $b_{u,v}$ congruenti con una turbolenza gaussiana, omogenea e stazionaria;**

⇒ **La componente verticale w avrà coefficienti a_w e b_w congruenti o con una turbolenza gaussiana non omogenea o con una turbolenza non gaussiana a seconda del grado di convettività**

Fin qui sono stati presentati gli elementi essenziali di LPM

Perché possa essere **operativo** è necessario che **nel LPM** vengano inseriti altri **meccanismi modellistici**:

⇒ **Interazione delle particelle con le frontiere**

⇒ **Trattamento delle differenti sorgenti di emissione**

⇒ **Trattamento delle emissioni con buoyancy**

⇒ **Trattamento dei fenomeni di deposizione (secca e umida)**

⇒ **Trattamento delle reazioni chimiche degli inquinanti con gli altri costituenti l'atmosfera**

1. Condizioni di frontiera

Interazione col suolo

Particella che giunge al suolo, viene da esso riflessa verso l'alto.

Se una particella viene spostata dall'equazione di Langevin ad una quota $z_p<0$ con velocità w_p, la riflessione col suolo comporta che:

$$z_p \leftarrow -z_p$$
$$w_p \leftarrow -w_p$$

Interazione col top del PBL

Particella che raggiunge la sommità z_i di un PBL convettivo viene riflessa verso il basso, mentre non vi è interazione quando si è in situazioni stabili.

Se una particella viene spostata dall'equazione di Langevin, in una situazione convettiva, ad una quota $z_p>z_i$ con velocità w_p, la riflessione con la sommità del PBL comporta che:

$$z_p \leftarrow 2z_i-z_p$$
$$w_p \leftarrow -w_p$$

2. Trattamento delle diverse sorgenti di emissione

⇒ Sorgenti Punto

Una sorgente punto schematizza l'emissione di inquinanti da una ciminiera elevata posta in posizione (x_c,y_c) ed alta z_c. Se:

1. **la ciminiera presenta un raggio interno r_0**
2. **se si intendono emettere in ogni time-step *M* particelle**
3. **se σ_u,σ_v,σ_w sono le deviazioni standard delle 3 componenti del vento a quota camino**

ogni particella verrà emessa nella posizione:

$$x_o = x_c + \alpha \cdot r_0 \cdot \cos(2\pi\beta)$$
$$y_o = y_c + \alpha \cdot r_0 \cdot \sin(2\pi\beta)$$
$$z_0 = z_c$$

α, β sono numeri casuali (0-1) da una distribuzione uniforme, con velocità:

$$u_0^{'} = \sigma_u(x_o, y_o, z_o) \cdot g_u$$
$$v_0^{'} = \sigma_v(x_o, y_o, z_o) \cdot g_v$$
$$w_0^{'} = \sigma_w(x_o, y_o, z_o) \cdot g_w$$

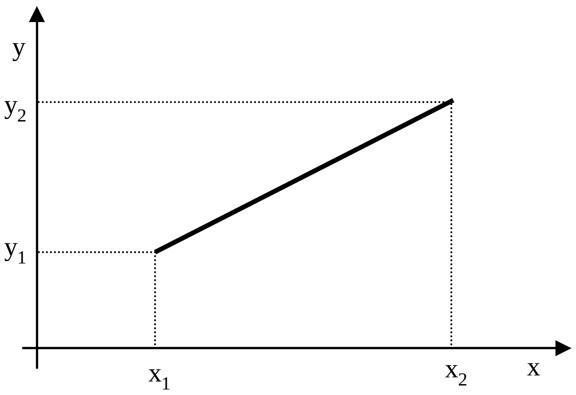
g_u, g_v, g_w →numeri casuali da distribuzioni gaussiana con deviazioni standard σ_u,σ_v,σ_w.

⇒ Sorgenti Linea

Schematizza l'emissione da strade.

<u>Modello geometrico della sorgente</u>

$$y = y_1 + \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} \cdot (x - x_1)$$



Se vengono emesse *N* particelle, estratto per ciascuna un numero casuale r_a da una distribuzione uniforme (0-1), ogni particella avrà coordinate

$$x_o = x_1 + r_\alpha (x_2 - x_1)$$

$$y_o = y_1 + \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}(x_o - x_1)$$

(si è immaginato che la sorgente linea stia al suolo).
Se *l* è l'emissione lineare (g/m/s), la massa di ogni particella sarà

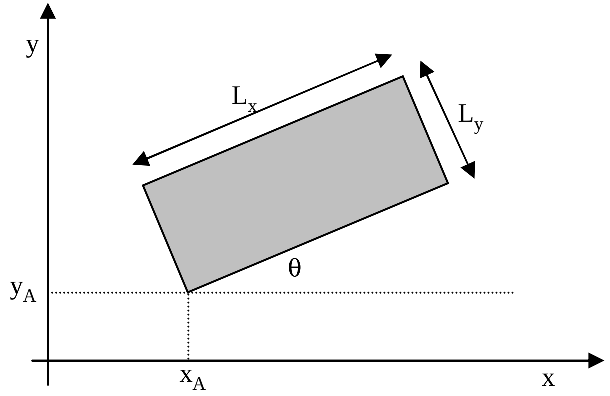
$$m_k = \left\{ \ell \cdot \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_2 - y_1)^2} \cdot \Delta t \right\} / N$$

ARPALAZIO

⇒ Sorgenti Area

Se si emettono N particelle nel time-step Δt e la sorgente ha emissione q(g/m²/s), ad ogni particella viene attribuita la massa di:

$$m_k = \left(q \cdot L_x \cdot L_y \cdot \Delta t\right) / N$$



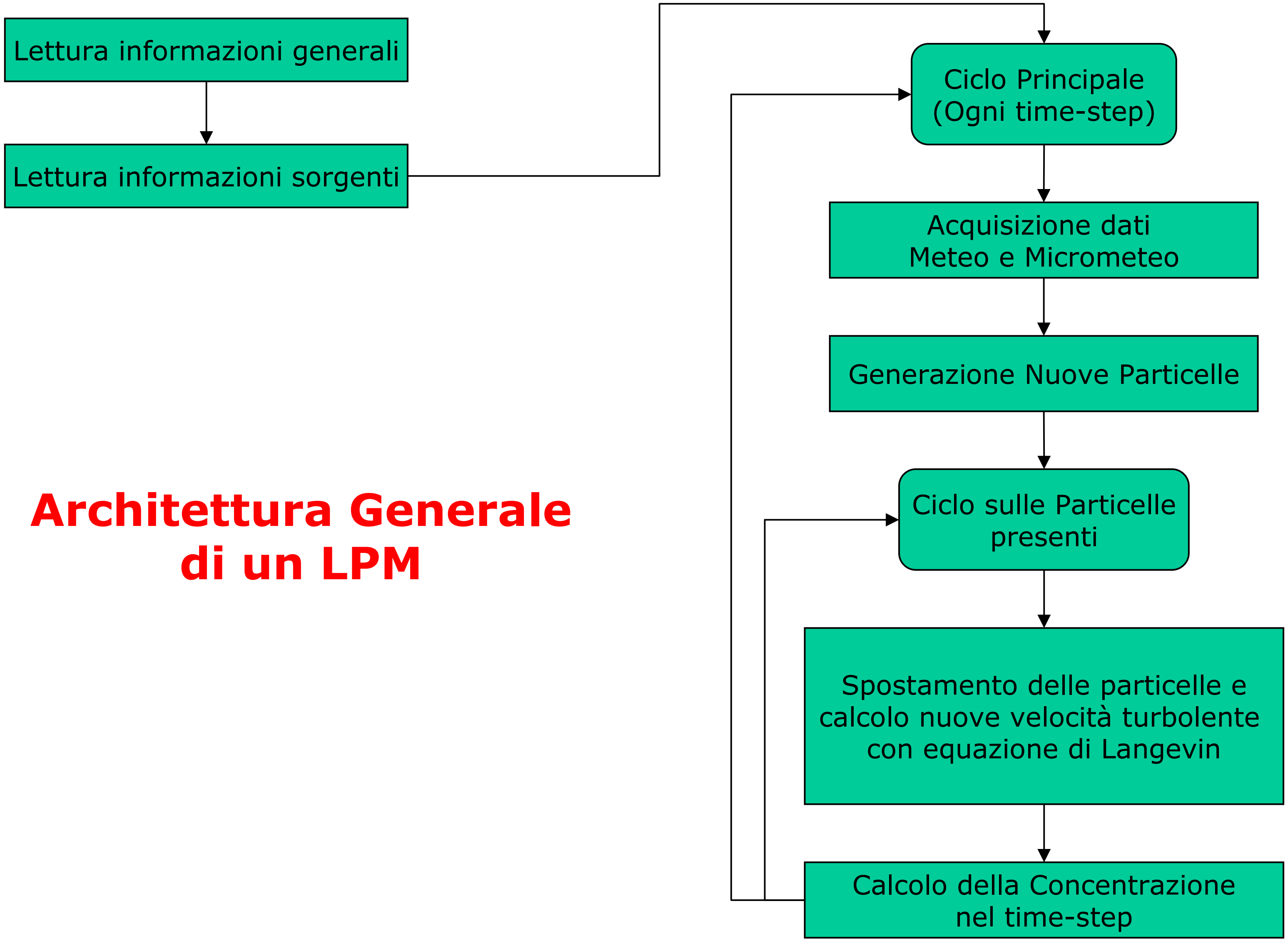
La posizione di ogni singola particella sarà (nell'ipotesi che l'area stia al suolo)

$$x_{op} = (\eta_0 - x_A)\cos\theta + (\xi_0 - y_A)\sin\theta$$
$$y_{op} = (\xi_0 - y_A)\cos\theta - (\eta_0 - x_A)\sin\theta$$

$$\eta_0 = L_x r_\alpha$$
$$\xi_0 = L_y r_\beta$$

dove, r_α e r_β sono due numeri casuali estratti da una distribuzione uniforme (0-1)

Architettura Generale di un LPM



3. Emissioni con buoyancy

Molto spesso le emissioni, soprattutto quelle delle ciminiere, sono costituite da fumi:

- caldi (es. 150°C)
- emessi con velocità elevate (es. 15 m/s)

Per modellizzzare ciò:

⇒ **all'emissione, ad ogni particella viene attribuita una velocità ascensionale $w_a(t_0)$ che si andrà a sommare a quella prevista dall'equazione di Langevin.**

⇒ **a $t>t_0$, la velocità ascensionale decrescerà simulando la perdita di galleggiamento dei fumi fino ad annullarsi.**

I dettagli sono piuttosto complessi ed è qui preferibile ometterli.

4. Altri meccanismi

Nei modelli a particelle sono stati introdotti anche i fenomeni di deposizione secca ed umida.

Ci sono esempi molto interessanti presentati nella Letteratura Scientifica di trattamento della chimica dell'atmosfera in un contesto di LPM, anche se il problema non ha ancora avuto una soluzione completamente soddisfacente.

Realisticità di una simulazione LPM

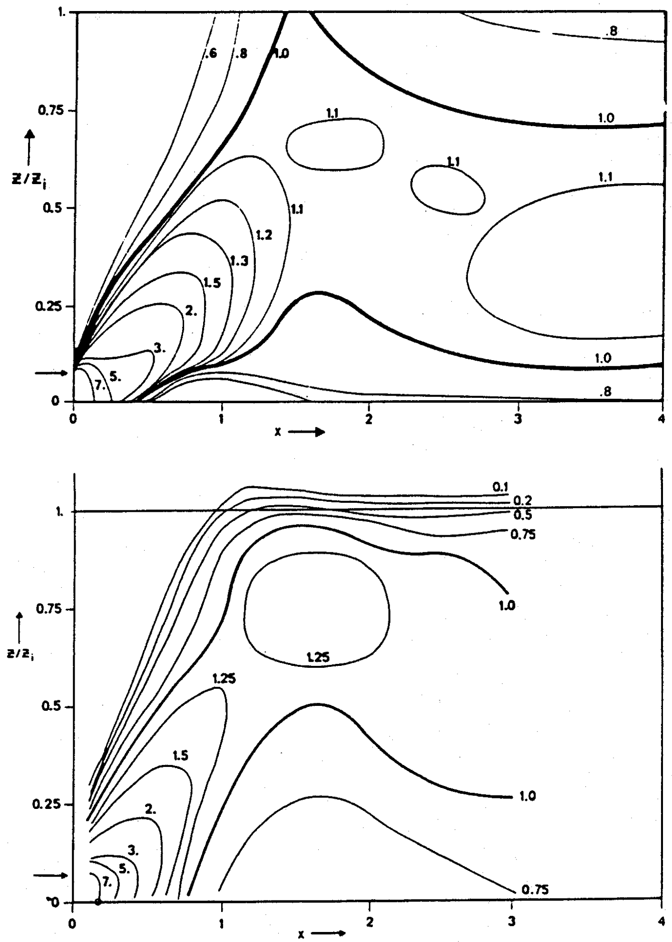
Non è mai agevole e semplice verificare l'attendibilità della simulazione operata da un modello ed in questo il Modello Lagrangiano a Particelle non fa eccezione.

Questo è dovuto principalmente alla penuria e povertà della maggior parte dei data-set sperimentali disponibili allo scopo.

Si presenta, a titolo di esempio, il confronto tra la concentrazione integrata lungo la direzione trasversale ottenuta da un tipico LPM (non dei più moderni) ed i celebri ed affidabili risultati ottenuti da Willis e Deardorff in laboratorio, tutte in condizioni convettive e relative a rilasci da una sorgente punto a varie quote.

Risultati molto buoni

Realisticità di una simulazione LPM



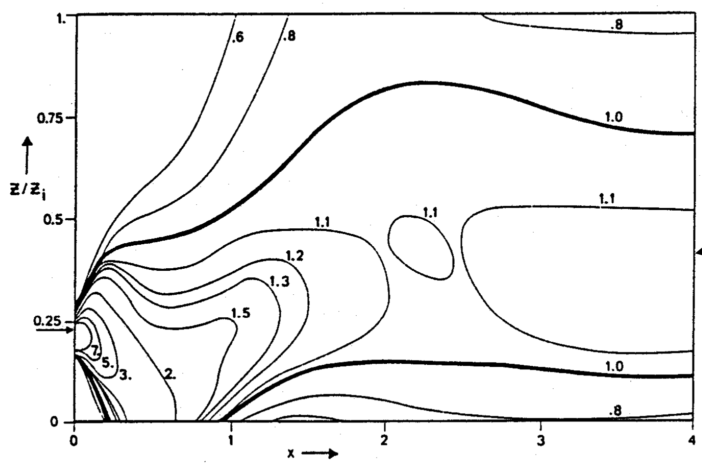
$z_c/z_i = 0.07$

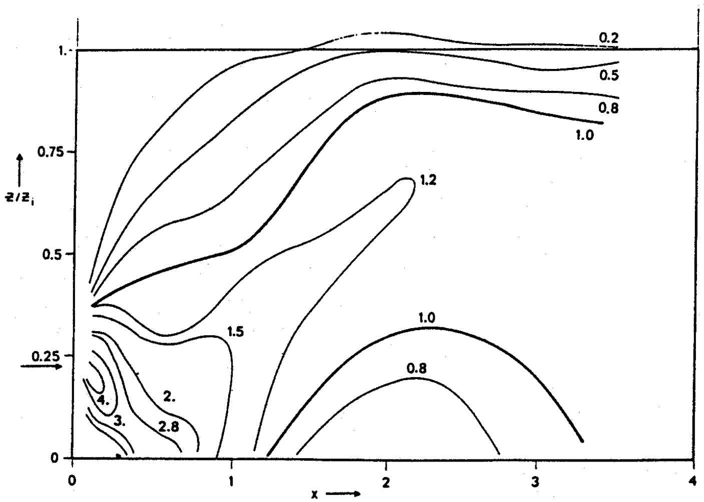
Risultati da esperimenti

Risultati LPM

ARPALAZIO

Realisticità di una simulazione LPM





z_c/z_i = 0.25

Risultati da esperimenti

Risultati LPM

ARPALAZIO

Se:

⇒ **è noto il vento medio ed i principali indicatori della turbolenza del PBL in ogni punto dello spazio e ad ogni istante di interesse (anche nelle situazioni ad orografia complessa)**

⇒ **il modello a particelle produce una descrizione realistica del fenomeno della dispersione degli inquinanti in aria.**

Questo è probabilmente l'unico modello, attualmente, in grado di rappresentare realisticamente la dispersione in condizioni fortemente convettive ed in prossimità delle emissioni.

Presenta ancora qualche difficoltà l'inserimento nel modello di reazioni chimiche e fotochimiche.

Quella qui presentata è solo un'esposizione didattica molto semplificata.

Modelli Lagrangiani a Particelle

SPRAY - Arianet

FLEXPART

GRAL -

Bibliografia Essenziale
Modelli Lagrangiani a Particelle

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

H.C. Rodean (1996): Stochastic Lagrangian Models of Turbulent Diffusion – American Meteorological Society

Approfondimenti

D.T. Gillespie: Markov Processes. An introduction for physical scientists – Academic Press

C.W. Gardiner. Handbook of Stochastic Methods for physiscs, chemistry and the natural sciences - Springer