

*LA DISPERSIONE DI INQUINANTI IN  
ATMOSFERA*

**CAPITOLO 6**

ENRICO FERRERO

31 marzo 2009

# 1 Modelli di dispersione

Simulare il comportamento di un inquinante, rilasciato in atmosfera, significa determinare il campo di concentrazione da esso prodotto in qualunque punto dello spazio e in qualunque istante successivo all'emissione. Esistono sostanzialmente due modi per simulare la dispersione di inquinanti in atmosfera. Il primo, e' il punto di vista Euleriano, nel quale si utilizzano coordinate fisse nello spazio. In questa maniera si determinano i valori di concentrazione in punti fissi, riferiti al sistema scelto, utilizzando l'equazione di conservazione della massa della sostanza rilasciata. Il secondo utilizza coordinate che si muovono con le particelle e viene detto Lagrangiano. Questo vuol dire che le particelle di inquinanti possono essere trattate, da un punto di vista dinamico, come particelle d'aria, quindi soggette alle stesse forze, dotate della stessa densità e caratterizzate nel loro moto dagli stessi fenomeni che caratterizzano il moto di particelle d'aria (trasporto, turbolenza ecc..). Esistono vari modelli di questo tipo i quali, nella maggioranza dei casi usano per descrivere il moto di particelle in un campo turbolento l'equazione di Langevin, già vista nel precedente capitolo. Il più diffuso di questi modelli è quello sviluppato da Thomson nel 1987.

## 1.1 I modelli Lagrangiani Stocastici a particelle

Nei modelli stocastici a particelle si usa l'equazione di Langevin per descrivere l'evoluzione temporale delle velocità delle particelle di inquinanti rilasciate in atmosfera, in condizioni turbolente. Perché questo possa essere fatto in maniera corretta è necessario, per quanto visto nel capitolo precedente, poter considerare le velocità come un processo stocastico Markoviano. Ciò è vero, se si considerano velocità separate temporalmente da un  $\Delta t$  maggiore di  $\tau_\eta$ , *tempo di scala di Kolmogorov* circa uguale al tempo di correlazione delle accelerazioni ( $10^{-2}s$ ), e minore del tempo Lagrangiano di scala,  $T_L$ , delle velocità (da pochi secondi a qualche decinaia), allora il processo che lega queste velocità è, in ottima approssimazione, **un processo Markoviano**. In una dimensione l'equazione di Langevin per le velocità turbolente può essere scritta come segue:

$$du(t) = a(u, x)dt + b(u, x)dW \quad (1)$$

e sarà accoppiata all'equazione per lo spostamento

$$dx(t) = u(t)dt \quad (2)$$

dove  $dW$  rappresenta un processo di rumore bianco ( $W(t)$  è un *processo di Wiener*), con media zero e varianza  $dt$ , già introdotto in precedenza:

$$\langle dW(t) \rangle = 0 \quad (3)$$

$$\langle dW(t)dW(t') \rangle = \delta(t - t') dt dt' \quad (4)$$

$b(x,u)$  può essere derivata dalla *teoria di Kolmogorov* sull'isotropia locale nell'intervallo inerziale. Essa si basa su relazioni di similarità determinate in un particolare intervallo (*subrange*) dello spettro della turbolenza. Come già descritto, l'energia meccanica si trasferisce dai vortici più grandi a quelli più piccoli, fino ad arrivare ai vortici a piccolissima scala della turbolenza atmosferica nel PBL che vengono dissipati in calore a causa della viscosità. All'interno di questa cascata energetica c'è una parte di spettro dove i vortici sono sufficientemente piccoli da non risentire degli effetti di anisotropia indotti dai vortici più grandi e sufficientemente grandi da non essere dissipati in calore. Questa parte di spettro è chiamata, appunto, intervallo inerziale. Questo intervallo coincide con l'intervallo di scale temporali definito in precedenza per la condizione di markovianità. Definendo la funzione di struttura delle velocità Lagrangiane, in una dimensione, come:

$$D = \langle [u(t) - u(t + \Delta t)]^2 \rangle$$

se la frequenza  $1/\Delta t$  cade nell'intervallo inerziale cioè  $\tau_\eta < \Delta t < T_L$  allora si ha:

$$D = C_0 \epsilon \Delta t$$

dove  $\epsilon$  è il rateo di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta e  $C_0$  una costante, ricavata empiricamente, di solito posta uguale a 2. Applicando questo risultato all'equazione di Langevin mediando e considerando soli i termini dell'ordine di  $dt$  trascurando quelli di ordine maggiore, otteniamo:

$$D = \langle du^2 \rangle = b^2 \langle dW^2 \rangle = b^2 dt = C_0 \epsilon dt$$

da cui:

$$b = \sqrt{C_0 \epsilon}$$

Definendo  $b(x,u)$  in questo modo possiamo ricavare  $a(x,u)$  tramite la condizione di *well mixed condition*. Quest'ultima implica che la PDF delle particelle di inquinanti dopo un certo periodo di tempo, raggiunta una condizione stazionaria, sia uguale a quella delle particelle d'aria. Sotto questa condizione e sotto le condizioni di markovianità e continuità a cui obbediscono le velocità delle particelle d'aria si può, come visto nel capitolo precedente, ricavare  $a(x,u)$  a partire dall'equazione di Fokker-Planck:

$$\frac{\partial p(x,u,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [u(x,t)P(x,u,t)] = -\frac{\partial}{\partial u} [a(x,t)P(x,u,t)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial u^2} [b^2(x)P(x,u,t)]$$

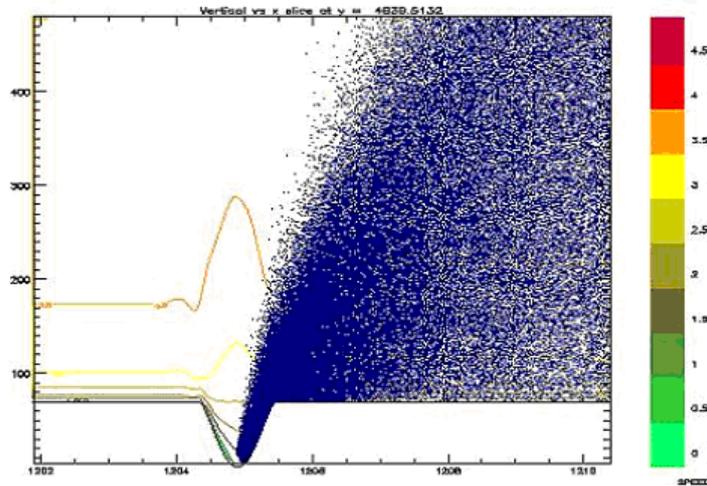


Figura 1: Dispersione di un pennacchio con il modello a particelle

dove la *well mixed condition* impone che la  $P(x, u, t)$  delle particelle sia uguale (abbia uguali momenti) a quella dell'aria. Nel caso stazionario la  $P(x, u, t)$  non dipende esplicitamente dal tempo e quindi possiamo riscrivere questa equazione come:

$$\frac{\partial}{\partial x} [u(x)P(x, u)] = -\frac{\partial}{\partial u} [a(x)P(x, u)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial u^2} [b^2(x)P(x, u)] \quad (5)$$

Dalla risoluzione dell'equazione di Fokker-Planck, noto  $b(x, u)$  e, soprattutto, nota la PDF, è possibile ricavare  $a(x, u)$  come:

$$a(x, u) = \frac{1}{P(x, u)} \left( B_0 \frac{\partial P(x, u)}{\partial u} + \phi(x, u) \right) \quad (6)$$

dove  $B_0 = \frac{1}{2}b^2 = \frac{C_0}{2}\epsilon$  o anche (Rodean, 1994; Luhar e Britter, 1989; Weil, 1990)  $B_0 = \frac{\sigma^2}{T_L}$  e dove

$$\phi(x, u) = -\frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^u u' P(x, u') du' \quad (7)$$

con la condizione

$$\phi \rightarrow 0 \text{ per } |u| \rightarrow \infty$$

Nei modelli a particelle vengono simulate le traiettorie di un gran numero di particelle (alcune migliaia: figura 1) utilizzando l'equazione di Langevin e quindi se ne calcola il valor medio. Nella pratica la concentrazione dell'inquinante, emesso da una certa sorgente, in un dato punto del dominio

è dato dal numero di particelle contenute in un volumetto intorno al punto considerato, moltiplicato per la massa di sostanza trasportata da ciascuna particella, diviso per il volume stesso.

Di fondamentale importanza in questo modello la definizione della PDF in quanto  $a(x, u)$  dipende esplicitamente da questa scelta. In particolare nel caso generale in cui tale distribuzione sia *non-Gaussiana* (e quindi si fa riferimento principalmente alla PDF delle velocità verticali), bisogna costruire degli algoritmi in grado di generare distribuzioni con un numero di momenti non nulli superiore a 2. Qui di seguito sono presentati il metodo della **distribuzione bi-Gaussiana** e quello della **distribuzione di Gram-Charlier**.

### 1.1.1 PDF bi-Gaussiana

La prima distribuzione è ottenuta a partire da una combinazione lineare, nella variabile  $w$ , di due distribuzioni Gaussiane associate ai flussi d'aria ascendenti (*updrafts*) e discendenti (*downdrafts*) rispettivamente:

$$P(z, w) = AP_A(\sigma_A, w_A) + BP_B(\sigma_B, w_B)$$

Queste due distribuzioni Gaussiane sono caratterizzate dall'aver un valore medio che rappresenta il valore medio delle velocità negli updrafts ( $w_A$ ) e nei downdrafts ( $w_B$ ) rispettivamente, e caratterizzate da particolari e, in generale, diversi valori di varianza ( $\sigma_A, \sigma_B$ ). I coefficienti  $A$  e  $B$  tengono conto del fatto che i downdrafts hanno in genere estensione spaziale orizzontale maggiore degli updrafts mentre in generale quest'ultimi hanno velocità medie superiore rispetto ai primi. Si noti che la distribuzione bi-Gaussiana può essere pensata semplicemente come un'artificio matematico per poter introdurre valori dei momenti superiori al secondo, senza alcuna analogia con le strutture del pbl convettivo. La corrispondenza fisica con la distribuzione reale è assicurata unicamente dalla coincidenza dei valori assunti da tali momenti. Possiamo scrivere questa PDF quindi come:

$$P(w, z) = \frac{B}{\sqrt{2\pi}\sigma_A} e^{-\frac{1}{2}\frac{(w-w_A)^2}{\sigma_A^2}} + \frac{B}{\sqrt{2\pi}\sigma_B} e^{-\frac{1}{2}\frac{(w-w_B)^2}{\sigma_B^2}}$$

Si devono quindi determinare  $w_A, w_B, A, B, \sigma_A$  e  $\sigma_B$  in modo tale che la  $P(w, z)$  soddisfi le  $n$  equazioni per la definizione degli  $n$  momenti della distribuzione:

$$A \int w_A^n P_A(\sigma_A, w_A) + B \int w_B^n P_B(\sigma_B, w_B) = \overline{w^n}$$

dove  $\overline{w^n}$  sono i momenti misurati delle PDF atmosferiche. In particolare per i primi quattro momenti si ottengono le seguenti relazioni:

$$\begin{aligned}
A + B &= 1 \\
Aw_A + Bw_B &= 0 \\
A(w_A^2 + \sigma_A^2) + B(w_B^2 + \sigma_B^2) &= \overline{w^2} \\
A(w_A^3 + 3w_A\sigma_A^2) + B(w_B^3 + 3w_B\sigma_B^2) &= \overline{w^3} \\
A(w_A^4 + 6w_A^2\sigma_A^2 + 3\sigma_A^4) + B(w_B^4 + 6w_B^2\sigma_B^2 + 3\sigma_B^4) &= \overline{w^4}
\end{aligned}$$

Risolvendo questo sistema si determinano i valori di A, B,  $w_A$ ,  $w_B$ ,  $\sigma_A$ ,  $\sigma_B$ , noti ovviamente i 4 momenti della PDF. Come si può vedere il sistema è formato da 5 equazioni in cui compaiono 6 incognite. Per essere risolto univocamente occorre fissare una condizione supplementare che ci permetta di legare una delle incognite alle altre o ad una parte delle altre. E' da notare che la conoscenza del quinto momento della distribuzione permetterebbe di ottenere una soluzione esatta senza dover ricorrere a nessuna condizione supplementare. Nella realtà, però, non esistono stime attendibili e quindi parametrizzazioni per il quinto momento, e, effettivamente, anche il quarto momento è spesso inutilizzato in quanto non si sono ancora trovate parametrizzazioni veramente attendibili per questa quantità. Per ovviare a questi problemi sono stati proposti diversi schemi di chiusura del sistema tra i quali riportiamo il seguente, valido nel caso in cui si conoscano o si utilizzino solo i primi 3 momenti. Luhar and Britter (1985), utilizzando solo le prime 4 equazioni del sistema, proposero come condizioni di chiusura le seguenti relazioni:

$$\sigma_A = |w_A| ; \sigma_B = |w_B|$$

ottenendo:

$$\begin{aligned}
w_B &= \frac{\overline{w^3} - \sqrt{\overline{w^2}^3 + 8\overline{w^3}^2}}{4\overline{w^2}} \\
w_A &= \frac{1}{2} \frac{\overline{w^3}}{\overline{w^2}} - w_B \\
A &= \frac{w_B}{w_B - w_A} \\
B &= 1 - A
\end{aligned}$$

Sostituendo questa distribuzione nelle equazioni 6 e 7 si ricava il termine  $a(z, w)$  dell'equazione di Langevin. In linea di principio, conoscendo i momenti di ordine superiore la distribuzione bi-Gaussiana può essere troncata, anziché al terzo, al quarto, al quinto momento ecc.

### 1.1.2 PDF di Gram-Charlier

Il secondo tipo di PDF si basa su uno sviluppo in serie di derivate della funzione Gaussiana standardizzata:

$$\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

ponendo  $D^r = \frac{d^r}{dx^r}$  abbiamo

$$-D^r \alpha(x) = H_r(x) \alpha(x)$$

con  $H_r(x)$  polinomio di Hermite di grado  $r$ . Scriviamo quindi la PDF come:

$$P(x) = \sum_{j=0}^{\infty} C_j H_j(x) \alpha(x)$$

dove moltiplicando per  $H_r(x)$  e integrando si ottiene, tenendo conto delle condizioni di ortogonalità tra polinomi di Hermite:

$$C_r = \frac{1}{r!} \int_{-\infty}^{\infty} P(x) H_r(x) dx$$

Sostituendo gli espliciti valori di  $H_r(x)$  e considerando i momenti della distribuzione riferiti al valor medio otteniamo che i coefficienti  $C_r$  sono definiti come:

$$\begin{aligned} C_0 &= 1 \\ C_1 &= 0 \\ C_2 &= \frac{1}{2}(\mu_2 - 1) \\ C_3 &= \frac{1}{6}\mu_3 \\ C_4 &= \frac{1}{24}(\mu_4 - 6\mu_2 + 3) \end{aligned}$$

dove con  $\mu_r$  si sono indicati i vari momenti della distribuzione. Otteniamo infine che la PDF nella forma standardizzata è uguale a:

$$\begin{aligned} P(x) &= \alpha(x) [C_0 H_0(x) + C_1 H_1(x) + C_2 H_2(x) + C_3 H_3(x) + C_4 H_4(x) + \dots] = \\ &= \alpha(x) [C_0 H_0(x) + C_3 H_3(x) + C_4 H_4(x) + \dots] = \\ &= \alpha(x) \left[ 1 + \frac{1}{6}\mu_3 H_3(x) + \frac{1}{24}(\mu_4 - 3)H_4(x) + \dots \right] \end{aligned}$$

dove con la standardizzazione si è sostituito a  $x$  il valore  $\frac{x}{\sqrt{\mu_2}}$  da cui deriva  $C_0 = 1$ ,  $C_1 = 0$ ,  $C_2 = 0$  (in quanto nella forma standardizzata  $\mu_2 = \mu_2/\sigma_2 = 1$ ). I particolari valori di  $\mu_3$ ,  $\mu_4$  così standardizzati sono chiamati rispettivamente **Skewness** e **Kurtosis**. Questa particolare espressione della PDF è chiamata espansione in *serie di Gram-Charlier tipo A*. In particolare per la componente verticale della velocità del vento, possiamo riscriverla, considerando solo momenti fino al terzo, come:

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x^2} [1 + C_3 H_3(x)]$$

dove  $x = \frac{w}{\sqrt{w^2}}$ , e:

$$H_3 = x^3 - 3x$$

$$C_3 = \frac{1}{6}\mu_3 = \frac{1}{6} \frac{\overline{w^3}}{(\overline{w^2})^{\frac{3}{2}}}$$

$$C_4 = \frac{1}{24}(\mu_4 - 6\mu_2 + 3)$$

Sostituendo questa distribuzione nelle equazioni 6 e 7 si ricava il termine  $a(z, w)$  dell'equazione di Langevin.

In linea di principio, conoscendo i momenti di ordine superiore la distribuzione di Gram-Charlier può essere troncata, anziché al terzo, al quarto, al quinto momento ecc.

## 1.2 Modelli Euleriani

Risolvono direttamente l'equazione di avvezione-diffusione per la concentrazione  $c$  di inquinante, su un grigliato tridimensionale (figura 2) che ne definisce il dominio di calcolo:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_i \frac{\partial c}{\partial x_i} = \nu \frac{\partial^2 c}{\partial x_i^2} + S$$

dove  $\nu$  è la diffusività molecolare, in genere trascurabile rispetto alla dispersione turbolenta,  $S$  è il termine di sorgente ed  $u_i$  la componente della velocità ( $i = 1, 2, 3$  e somma sugli indici ripetuti).

Ponendo

$$u_i = \overline{u_i} + u'_i \quad e \quad c = \overline{c} + c'$$

dove  $\overline{u_i}$  e  $\overline{c}$  sono i valori medi e  $u'_i$ ,  $c'$  le fluttuazioni. Trascurando il termine molecolare, sostituendo e mediando si ottiene:

$$\frac{\partial \overline{c}}{\partial t} + \overline{u_i} \frac{\partial \overline{c}}{\partial x_i} = - \frac{\partial \overline{c' u'_i}}{\partial x_i} + S$$

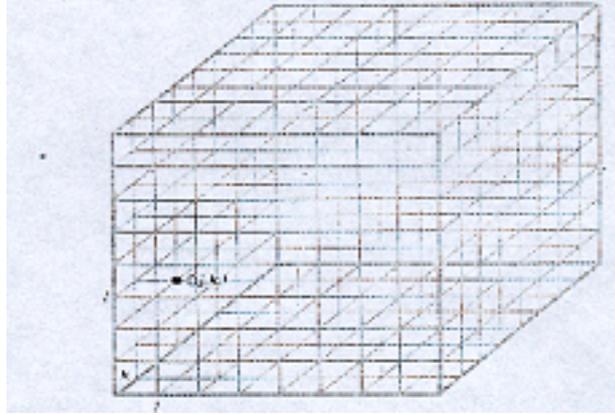


Figura 2: Grigliato tridimensionale di calcolo

dove  $\overline{u_i}$  si ricava dalle misure o da modelli meteorologici, mentre il termine  $\overline{c'u_i}$  è da determinare tramite una 'chiusura', si deve cioè esprimere questa quantità in funzione delle variabili medie.

### 1.2.1 Modello K

Se come ipotesi di chiusura si assume la relazione flusso-gradiente:

$$\overline{c'u_i} = -K_{ii} \frac{\partial \overline{c}}{\partial x_i} \quad (8)$$

con  $K_{ii}$  costante di proporzionalità detta *coefficiente di diffusione*. Supponendo *condizioni stazionarie* (derivata rispetto al tempo nulla) e ponendosi lontano dalla sorgente ( $S = 0$ ) si ottiene la seguente equazione, nota come **Modello K**:

$$\overline{u_i} \frac{\partial \overline{c}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} K_{ii} \frac{\partial \overline{c}}{\partial x_i}$$

Si noti che la precedente ipotesi (eq. 8) mette in relazione i termini di cross-correlazione delle fluttuazioni della concentrazione e della componente del vento con il gradiente, lungo la direzione relativa a tale componente, della concentrazione media, chiudendo l'equazione di avvezione diffusione. Si possono avere soluzioni analitiche con  $K$  e  $\overline{u_i}$  costanti (**modello Gaussiano**), o con  $K$  e  $\overline{u_i}$  funzioni di potenza di  $z$  oppure *soluzioni numeriche*.

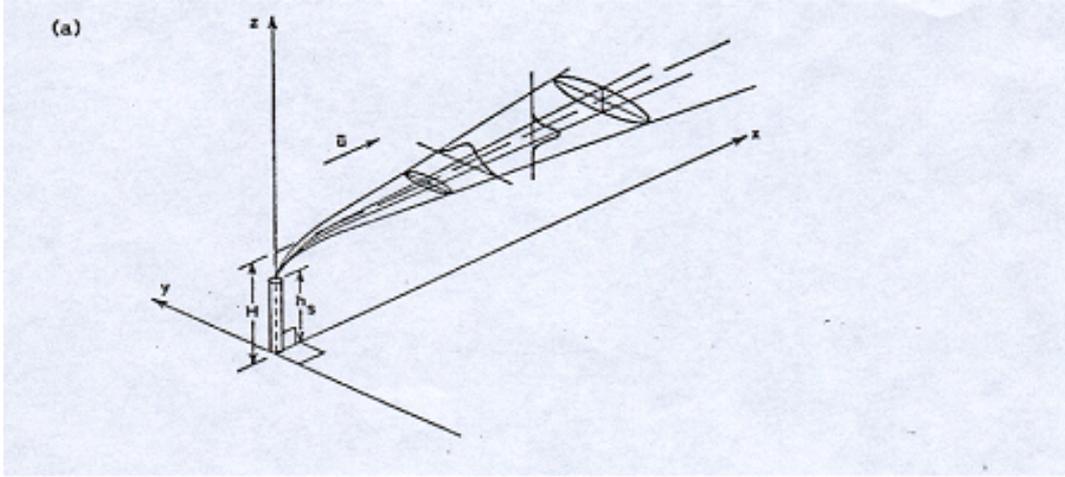


Figura 3: Schema di un pennacchio gaussiano

### 1.2.2 Modello Gaussiano

La più semplice soluzione analitica dell'equazione di diffusione è data dalla **formula Gaussiana**:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_z\bar{u}} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} \left[ e^{-\frac{(z-H_e)^2}{2\sigma_z^2}} + e^{-\frac{(z+H_e)^2}{2\sigma_z^2}} \right] \quad (9)$$

dove la concentrazione  $C$  nel punto di coordinate  $x, y, z$  è funzione della quantità  $Q$  di inquinante emesso per unità di tempo, del vento medio  $\bar{u}$ , dell'altezza effettiva dell'emissione  $H_e$  (dovuta al sovrainnalzamento causato dalla differenza di temperatura con l'aria ambiente), dalla velocità di emissione e dai parametri di larghezza delle Guassiane  $\sigma_y$  e  $\sigma_z$ . Le deviazioni standard nella direzione trasversale al vento medio  $\sigma_y$  e nella direzione verticale  $\sigma_z$  sono funzioni della distanza sottovento dalla sorgente e della stabilità. Per determinarle si possono, ad esempio, utilizzare le espressioni proposte da Pasquill e Gifford:

$$\sigma_y(x) = \frac{k_1 x}{\left(1 + \frac{x}{k_2}\right)^{k_3}}$$

$$\sigma_z(x) = \frac{k_4 x}{\left(1 + \frac{x}{k_2}\right)^{k_5}}$$

I coefficienti  $k_1, \dots, k_5$  di queste relazioni dipendono dalla classe di stabilità secondo la tabella 5. Le deviazioni standard della Gaussiana seguono andamenti del tipo di quelli mostrati nelle figure 6 e 7, ricavate da Pasquill.

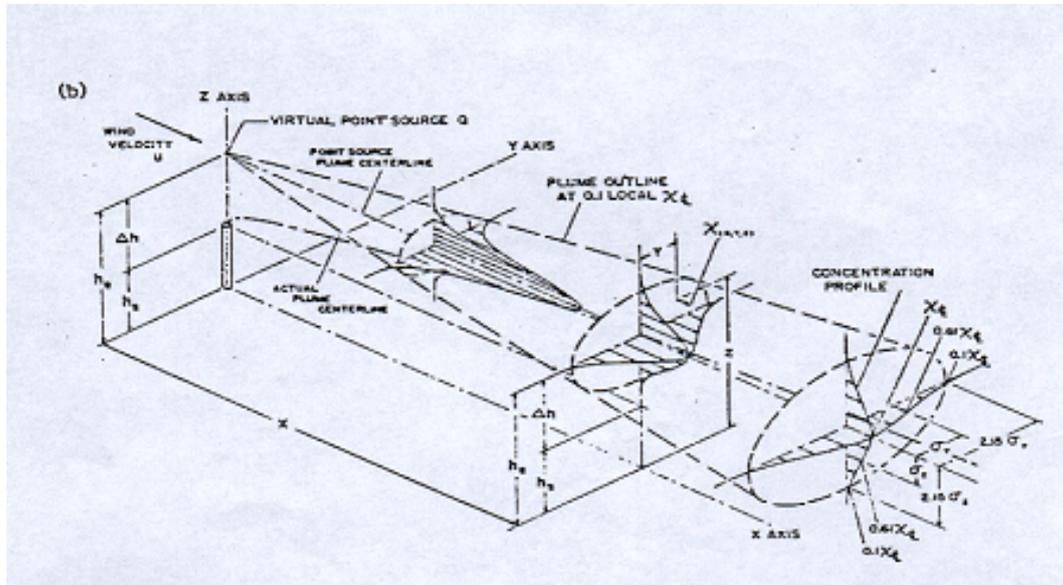


Figura 4: Distribuzione gaussiana verticale e orizzontale della concentrazione a diverse distanze dalla sorgente

Stability Class	$k_1$	$k_2$	$k_3$	$k_4$	$k_5$
A	0.250	927	0.189	0.1020	-1.918
B	0.202	370	0.162	0.0962	-0.101
C	0.134	283	0.134	0.0722	0.102
D	0.0787	707	0.135	0.0475	0.465
E	0.0566	1,070	0.137	0.0335	0.624
F	0.0370	1,170	0.134	0.0220	0.700

Figura 5: Coefficienti dei parametri di larghezza di Pasquill-Gifford secondo la condizione di stabilità

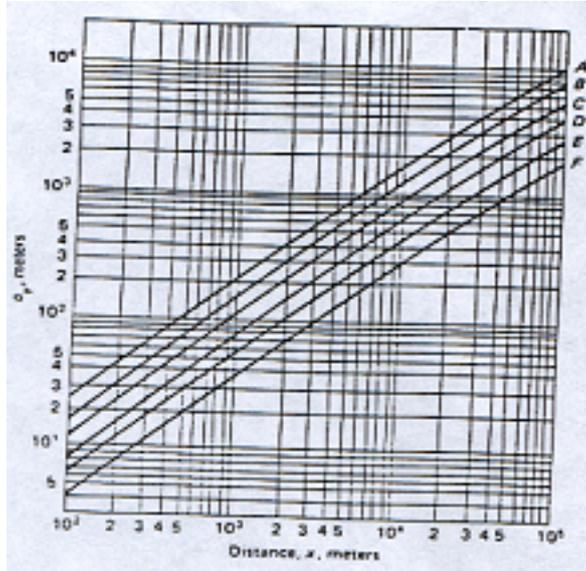


Figura 6: Andamento del parametro di larghezza orizzontale in funzione della distanza. Le diverse curve corrispondono a differenti classi di stabilità

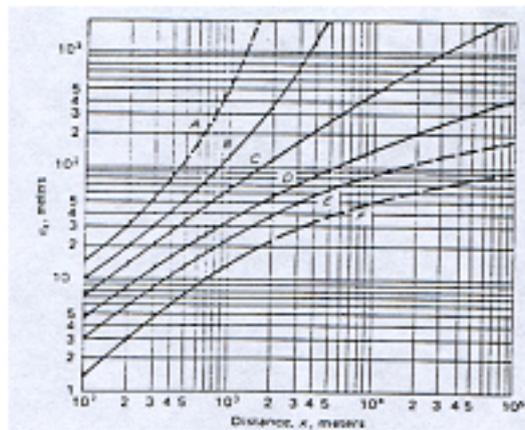


Figura 7: Andamento del parametro di larghezza verticale in funzione della distanza. Le diverse curve corrispondono a differenti classi di stabilità

Classe di stabilità di Pasquill	$\sigma_y$ (m)	$\sigma_z$ (m)
<b>Aree aperte (campagna)</b>		
A	$0.22d (1 + 0.0001d)^{-1/2}$	0.20d
B	$0.16d (1 + 0.0001d)^{-1/2}$	0.12d
C	$0.11d (1 + 0.0001d)^{-1/2}$	$0.07d (1 + 0.0002d)^{-1/2}$
D	$0.08d (1 + 0.0001d)^{-1/2}$	$0.06d (1 + 0.0015d)^{-1/2}$
E	$0.06d (1 + 0.0001d)^{-1/2}$	$0.03d (1 + 0.0003d)^{-1}$
F	$0.04d (1 + 0.0001d)^{-1/2}$	$0.016d (1 + 0.0003d)^{-1}$
<b>Aree Urbane</b>		
A - B	$0.32d (1 + 0.0004d)^{-1/2}$	$0.24 (1 + 0.001d)^{-1/2}$
C	$0.22d (1 + 0.0004d)^{-1/2}$	0.20d
D	$0.16d (1 + 0.0004d)^{-1/2}$	$0.14d (1 + 0.0003d)^{-1/2}$
E - F	$0.11d (1 + 0.0004d)^{-1/2}$	$0.08d (1 + 0.00015d)^{-1/2}$

*d = Distanza dalla sorgente al bersaglio (m).*

Figura 8: Parametri di larghezza verticale e orizzontale in funzione della distanza e delle diverse classi di stabilità secondo la parametrizzazione di Briggs

Altre curve largamente utilizzate sono quelle ricavate da Briggs riportate in tabella (Figura) 8.

Si noti che nella formula Gaussiana compare un doppio termine per la coordinata verticale che si differenzia per il segno, in un termine la quota della sorgente viene sottratta mentre nell'altro viene sommata. In questo modo si tiene conto della riflessione al suolo del pennacchio e del conseguente aumento nelle concentrazioni al suolo (si veda la figura 9).

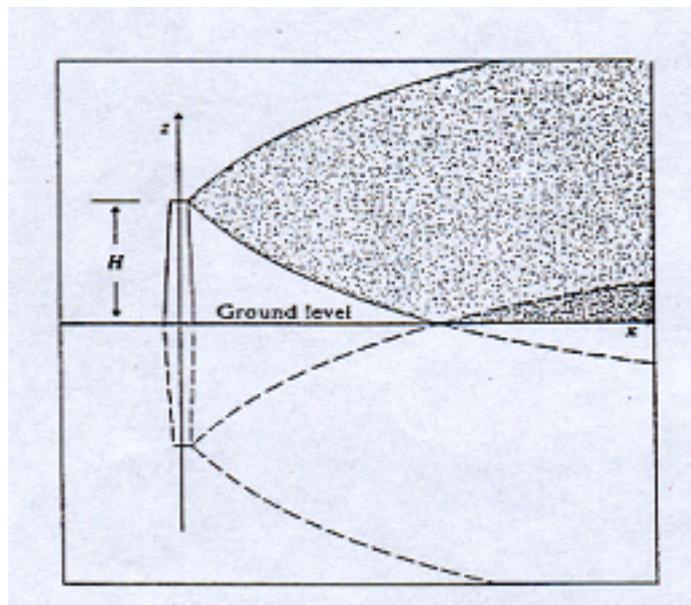


Figura 9: Riflessione del pennacchio al suolo descritto dalla seconda Gaussiana per la direzione verticale, eq. 9