Appendice - Modelli deterministici euleriani di chimica e trasporto

Un modello deterministico di chimica e trasporto è la descrizione di fenomeni fisici e chimici in atmosfera mediante algoritmi opportunamente implementati in codici di calcolo capaci di ricostruire l'evoluzione temporale delle concentrazioni degli inquinanti atmosferici. Il modello simula, all'interno di un dominio tridimensionale che racchiude i primi strati atmosferici sovrastanti la regione di interesse, i principali fenomeni chimico-fisici:

1. la dispersione orizzontale ad opera della componente orizzontale del vento
2. la dispersione verticale ad opera della componente vervicale del vento e della convezione verticale
3. la deposizione secca dipendente dal livello di turbolenza, dalle proprietà chimiche e fisiche dell'inquinante e dalla natura della superficie
4. la deposizione umida provocata principalmente dal rainout (dilavamento di inquinanti inglobati all'interno delle nubi) e dal washout (dilavamento ad opera delle precipitazioni)
5. le reazioni chimiche
6. microfisica e chimica degli aerosol

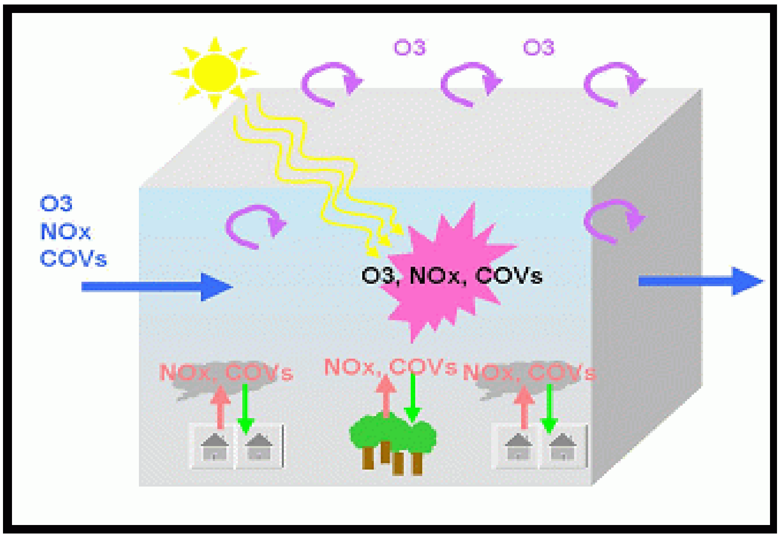

FIGURA 4: schematizzazione dei fenomeni chimici e fisici responsabili del trasporto e della trasformazione degli inqinanti in atmosfera.

In un modello euleriano i fenomeni fisico-chimici ai quali sono soggetti gli inquinanti vengono simulati all'interno di un sistema di riferimento solidale alla superficie terrestre risolvendo alcune equazioni differenziali alle derivate parziali. Ogni equazione esprime la dipendenza temporale della concentrazione media dell' i-esima specie all'interno del volume elementare come la somma dei contributi dati da tutti i processi chimici e fisici che agiscono sul volume stesso. Tale sistema si presenta nella seguente forma:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -u\frac{\partial c_i}{\partial x} - v\frac{\partial c_i}{\partial y} - w\frac{\partial c_i}{\partial z} + K_{xx}\frac{\partial^2 c_i}{\partial x^2} + K_{yy}\frac{\partial^2 c_i}{\partial y^2} + K_{zz}\frac{\partial^2 c_i}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial z}\left(K_{zz}\frac{\partial c_i}{\partial z}\right) + S_i + C_i + R_i$$

dove u, v e w sono le componenti della velocità del vento, Kxx, Kyy e Kzz le componenti diagonali del tensore diffusività, Si il termine sorgente, Ci il termine di reazione in fase gassosa e Ri il termine di rimozione dovuti ai processi di deposizione secca e umida.

L'integrazione numerica del sistema di equazioni differenziali precedente viene eseguita suddividendo la risoluzione multidimensionale in un problema monodimensionale dipendente dal tempo, risolto per uno step temporale. In accordo con tale tecnica, l'evoluzione temporale dell'i-esima specie chimica nello step temporale □t è calcolata come segue:

$$c_i(x,t+\Delta t) = L_x(\Delta t)L_y(\Delta t)L_z(\Delta t)c_i(x,t)$$

dove Lx, Ly sono gli operatori diffusivi-avvettivi lungo gli assi orizzontali, Lz è l'operatore verticale che tiene conto del trasporto, della diffusione, dell'immissione da sorgenti e dei processi di deposizione ed LC l'operatore che contiene tutti i termini di conversione chimica. Gli operatori presentano la forma:

$$L_x c_i = m^2 \frac{\partial(\frac{uc_i}{m})}{\partial x} - m\frac{\partial}{\partial x}(mK_H \frac{\partial c_i}{\partial x})$$

$$L_y c_i = m^2 \frac{\partial(\frac{vc_i}{m})}{\partial y} - m\frac{\partial}{\partial y}(mK_H \frac{\partial c_i}{\partial y})$$

$$L_z c_i = m^2 \frac{\partial(\frac{wc_i}{m})}{\partial z} - m\frac{\partial}{\partial z}(mK_H \frac{\partial c_i}{\partial z})$$

$$L_C c_i = C_i = P_i + D_i c_i$$

dove Pi e Di sono rispettivamente i termini di produzione e distruzione dovuti alle reazioni chimiche in fase gassosa e m è il fattore scala di mappa.

La risoluzione numerica delle equazioni differenziali viene effettuate in un dominio di calcolo, cioè una porzione di spazio di forma parallelepipeda avente come superficie inferiore il suolo e come superficie superiore una superficie piana posta ad una determinata quota. Per ragioni legate ai metodi di risoluzione numerica delle equazioni differenziali è conveninte sovrapporre al dominio di calcolo una griglia regolare tridimensionale che lo ripartisce in celle elementari. Poichè la superficie inferiore del dominio è raramente piana, ma è spesso caratterizzata da una particolare orografia si realizza una trasformazione di coordinate detta terrain-following in cui le coordinate orizzontali restano invariate, mentre la coordinata verticale viene traslata verticalmente in modo da seguire l'orografia.

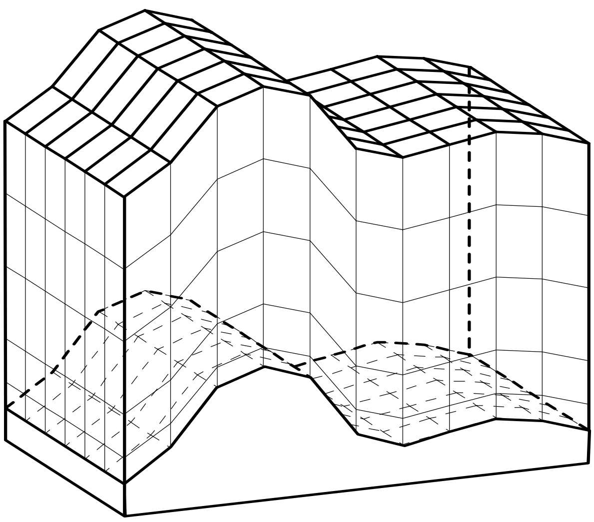

FIGURA 5: esempio di dominio di calcolo

La soluzione dell'equazione del trasporto e della diffusione richiede che venga specificato il campo iniziale delle concentrazioni di tutti gli inquinanti considerati, assegnando un valore a tutti i nodi della maglia di calcolo e le condizioni ai bordi del dominio di calcolo.