

MODELLI DI DIFFUSIONE - TRASPORTO  
DI INQUINAMENTO AMBIENTALE.

Flavia Fedi

12 maggio 2009

# Indice

0.1	Formulazione del modello e soluzione analitica . . . . .	4
0.2	Soluzione analitica . . . . .	5
0.3	Soluzione numerica . . . . .	6
0.4	Generalizzazioni . . . . .	10
	<b>Bibliografia</b>	<b>15</b>

# Introduzione

Lo scopo di questa Tesi è quello di analizzare fenomeni, dinamiche ed effetti di gas tossici immessi nell'atmosfera. Nella meteorologia applicata vengono utilizzati modelli matematici per simulare la dispersione, nello spazio e nel tempo, di agenti inquinanti, affinché si possano valutare i rischi per la salute e l'ambiente. Il gas emesso da una data fonte è trasportato e disperso nell'atmosfera e l'azione di agenti atmosferici quale il vento può risultare determinante.

Per fare un esempio, se la concentrazione di un gas tossico, rappresentata dalla quantità  $Q \equiv Q(x, y, z, t)$ , sotto l'azione di un vento costante che spiri lungo la direzione  $x$ , rappresentato da  $U_x$ , si diffonde nelle direzioni  $y$  e  $z$ , l'evoluzione della nube di gas è governata dall'equazione di diffusione-trasporto

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = D_y \frac{\partial^2 Q}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 Q}{\partial z^2} - U_x \frac{\partial Q}{\partial x},$$

a cui si deve aggiungere un eventuale termine di reazione chimica. Qui  $D_y$  e  $D_z$  rappresentano i coefficienti di diffusione "turbolenta", mentre la diffusione lungo l'asse delle  $x$  si ritiene trascurabile. A questa equazione differenziale alle derivate parziali, di tipo parabolico, si possono associare diverse condizioni iniziali e al bordo, simulando così diverse possibili evoluzioni del fenomeno.

A questo proposito, si è pensato di prendere spunto da un fatto realmente accaduto, il disastro del Bhopal (India), verificatosi nel Dicembre del 1984, per poi estendere il modello modificando sia l'equazione che le condizioni al bordo, ed effettuando poi ulteriori simulazioni.

Analizzando prima le cause del disastro, si è messo a punto un modello matematico che descrive l'evoluzione nel tempo della nube tossica che causò molte centinaia o forse migliaia di vittime. Dopo la costruzione del modello assumendo parametri costanti, si è passati al calcolo della soluzione analitica. Dopo di che si è considerata una possibile discretizzazione del problema, per affrontarne la risoluzione numerica. Confrontando le due soluzioni, si è stimato un errore nella norma del massimo inferiore a  $2 \times 10^{-3}$ . Con questo

si è ritenuto validato il codice numerico, dopo che si è passati alla soluzione (solo) numerica del problema, inserendovi certi *coefficienti variabili*, quali un vento di intensità variabile col tempo.

Il modello matematico è costituito da un'equazione alle derivate parziali, di tipo parabolico, lineare, in tre dimensioni spaziali, a coefficienti costanti. Tenuto conto del tipo di dominio e di dati al contorno, si è potuto calcolare esplicitamente la soluzione analitica del problema mediante serie di Fourier e trasformate di Laplace (J M. P. Singh e S. Ghosh, 1987). La soluzione numerica è stata calcolata mediante uno schema (esplicito) alle differenze finite, la cui stabilità è stata analizzata applicando un criterio di tipo von Neumann. In letteratura, il classico criterio di von Neumann si applica a schemi alle differenze finite che si introducono per risolvere numericamente equazioni alle derivate parziali lineari a coefficienti costanti. La soluzione numerica è rappresentata nella forma particolare di un'onda piana, il che è possibile generalizzando il criterio considerando equazioni alle derivate parziali lineari a coefficienti variabili, inserendo ad esempio l'azione di un vento di intensità variabile, diciamo  $U = U(t)$ .

In ogni caso si avranno schemi numerici stabili sotto la condizione che il passo di discretizzazione temporale si mantenga al di sotto di un certo valore, determinato dai passi di discretizzazione spaziale e da  $\max |U(t)|$ . Si è fatto girare il codice sia al di sotto che al di sopra di tale valore di soglia per constatare l'effettivo comportamento stabile o rispettivamente instabile dell'algoritmo (che è esplicito).

La condizione di stabilità, come è noto, può porre seri limiti se, ad esempio, le risorse computazionali sono limitate, perché tali limiti sono più pesanti in problemi in due o tre dimensioni, rispetto al caso unidimensionale. Di conseguenza, almeno quando si è interessati alla soluzione in periodi temporali piuttosto lunghi, sarebbe più opportuno utilizzare metodo impliciti, quali ad esempio l'Alternating Direction Implicit (ADI) method.

Per implementare i vari algoritmi sono stati utilizzati due linguaggi di programmazione, uno procedurale ed uno a oggetti. Come linguaggio procedurale si è utilizzato il C, come linguaggio a oggetti il Java. Non è un mistero, nell'ambito del Calcolo Scientifico, che il C risulta molto più veloce rispetto a Java, in quanto è possibile l'accesso diretto ai vari indirizzi di memoria, ma risulta complicata la gestione delle dimensioni di matrici e/o altri "array", a differenza di Java in cui si hanno invece a disposizione oggetti che consentono una gestione dinamica delle dimensioni.

In questa Sintesi non verranno mostrati esplicitamente tutti i calcoli effettuati per ottenere le soluzioni analitiche né verranno illustrati i vari codici sorgente sviluppati per il calcolo numerico delle soluzioni.

## 0.1 Formulazione del modello e soluzione analitica

Sulla base di alcune considerazioni e osservazioni ottenute direttamente dal centro metereologico, si può costruire un modello matematico come segue. Il modello non può essere di carattere stazionario, dal momento che si devono considerare emissioni di gas inquinanti dipendenti esplicitamente dal tempo e si assume una orografia del territorio pianeggiante. La forma non stazionaria dell'equazione di trasporto-diffusione risulta essere

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - u \frac{\partial c}{\partial x},$$

dove  $c \equiv c(x, y, z, t)$  rappresenta la concentrazione dell'inquinante in corrispondenza di un punto  $(x, y, z)$  al tempo  $t$ ,  $u$  rappresenta la velocità media costante del vento lungo la direzione di propagazione della nube inquinante, che si assume orientata lungo l'asse delle  $x$ , e i coefficienti  $D_y > 0$  e  $D_z > 0$  rappresentano i coefficienti di diffusione nella direzione trasversale al vento (e orizzontale) e in quella verticale.

Per il calcolo della soluzione analitica si sono assunti  $u$ ,  $D_y$  e  $D_z$  costanti. La condizione relativa alla sorgente di emissione può essere descritta imponendo

$$c(0, y, z, t) = \frac{Q(t)}{u} \delta(z - h) \delta(y),$$

dove  $Q(t)$  è data dalla funzione

$$Q(t) := \begin{cases} Q_0 & \text{per } t \in [0, a] \\ 0 & \text{per } t > a, \end{cases}$$

essendo  $Q_0$  l'intensità di emissione,  $a > 0$  la sua durata, ed  $h$  l'altezza a cui è posta la sorgente;  $\delta$  indica la "funzione" delta di Dirac. La condizione iniziale è

$$c(x, y, z, 0) = 0,$$

assumendo che all'istante iniziale non vi sia inquinante in alcun punto del dominio, mentre quelle al bordo sono date dalla

$$D_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \quad \text{per } z = 0, \quad z = H,$$

dove  $H$  è l'altezza massima detta "di mescolamento", attraverso la quale è nullo il flusso di sostanze inquinanti, come pure si suppone avvenga al suolo, e dalle

$$c(x, \pm\infty, z, t) := \lim_{y \rightarrow \pm\infty} c(x, y, z, t) = 0,$$

ovvero la concentrazione risulta trascurabile lontano dal punto di emissione, nella direzione  $y$ . Inserendo infine l'azione di opportune reazioni chimiche con l'aria e al suolo, il modello sarà dunque dato da

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial c}{\partial t} = D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - u \frac{\partial c}{\partial x} - Rc \\ c(x, y, z, 0) = 0 \\ c(0, y, z, t) = \frac{Q(t)}{u} \delta(z - h) \delta(y) \\ D_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \quad \text{per } z = 0, H \\ c(x, \pm\infty, z, t) = 0, \end{array} \right.$$

nel dominio  $x > 0$ ,  $-\infty < y < +\infty$ ,  $0 < z < H$ .

## 0.2 Soluzione analitica

Eliminando con una opportuna trasformazione il termine non derivato, e sviluppando in serie di Fourier rispetto a  $z$  e applicando la trasformata di Laplace rispetto a  $t$ , il problema diventa

$$\left\{ \begin{array}{l} D_y \frac{\partial^2 v_n}{\partial y^2} - u \frac{\partial v_n}{\partial x} - s v_n = 0 \\ v_n(0, y) = \frac{2}{Hu} \cos\left(\frac{n\pi}{H}h\right) \delta(y) \frac{Q_0}{s} (1 - e^{-as}) \\ v_n(x, \pm\infty) = \mathcal{L}[E_n(x, \pm\infty, t)] = 0, \end{array} \right.$$

dove  $v_n$  è frutto delle trasformazioni sopra citate. L'equazione soddisfatta da  $v_n$  può essere considerata come un'equazione del calore della forma  $v_t = av_{xx} + \alpha v$ , in cui  $x$  gioca il ruolo del tempo ed  $y$  quello dello spazio. Calcolando la soluzione e tornando all'incognita originale,  $c$ , si ottiene

$$c(x, y, z, t) = \frac{Q_0}{H\sqrt{4uD_yx\pi}} \exp\left\{-\left(\frac{y^2u}{4D_yx} + \frac{Rx}{u}\right)\right\} F(t) \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos\left(\frac{n\pi}{H}h\right) \cos\left(\frac{n\pi}{H}z\right) \exp\left\{-\frac{D_z}{u} \frac{n^2\pi^2}{H^2}x\right\}\right].$$

Questo risultato può essere generalizzato considerando  $M$  sorgenti situate sul bordo  $x = 0$ , e quindi, procedendo come prima e "sovrapponendo gli effetti", in virtù della linearità del problema, si avrà

$$c(x, y, z, t) = \frac{Q_0}{H} \sum_{i=1}^M \exp\left\{-\left(\frac{(y-y_i)^2u}{4D_yx} + \frac{Rx}{u}\right)\right\} F_i(t) \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos\left(\frac{n\pi}{H}h_i\right) \cos\left(\frac{n\pi}{H}z\right) \exp\left\{-\frac{D_z}{u} \frac{n^2\pi^2}{H^2}x\right\}\right],$$

dove  $y_i$ , con  $y_i \in \mathbf{R}$ ,  $h_i$ , con  $0 < h_i < H$ ,  $i = 1, 2, \dots, M$ , sono fissati, e individuano le posizioni delle varie sorgenti sul bordo  $x = 0$  del dominio, cioè i punti  $(0, y_i, h_i)$ , mentre le funzioni  $F_i(t)$  svolgono il ruolo della  $F(t)$  nel caso di una sola sorgente.

### 0.3 Soluzione numerica

Limitandoci al caso in cui il dominio sia bidimensionale, e cioè che tutto avvenga sul piano  $(x, z)$ , il metodo numerico permette di costruire un'approssimazione  $c_N(x, z, t)$  della soluzione analitica  $c(x, z, t)$ , stimando l'errore commesso,  $\|c_N - c\|$ , in una norma opportuna, ad esempio quella del massimo. Si otterrà quindi  $c_{l,m}^n \approx c(x_l, y_m, t_n)$ , ove

$$x_l = x_{\min} + l\Delta x, \quad z_m = z_{\min} + m\Delta z, \quad t_n = t_0 + k\Delta t,$$

dove  $\Delta x$ ,  $\Delta z$ ,  $\Delta t$  sono i passi di discretizzazione spaziali e temporale. Come anticipato lo schema numerico risulta essere stabile sotto un'opportuna condizione che limita il valore di  $\Delta t$ , una volta che siano assegnati i parametri fisici del problema e si siano scelti i passi  $\Delta x$  e  $\Delta z$ . Tale condizione deriva da un'applicazione di un criterio di tipo Von Neumann. Posto

$$c_{l,m}^n = \xi^n e^{i\{l\alpha + m\beta\}},$$

dove  $\xi = \xi(\alpha, \beta) \in \mathbf{C}$ ,  $\alpha, \beta \in \mathbf{R}$ , si richiede che

$$|\xi^2| \leq 1$$

uniformemente rispetto ad  $\alpha$  e  $\beta$ . Approssimando

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &\approx \frac{c_{l,m}^{n+1} - c_{l,m}^n}{\Delta t}, \\ U^n \frac{\partial c}{\partial x} &\approx U^n \frac{c_{l,m}^n - c_{l-1,m}^n}{\Delta x}, \\ D_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} &\approx D_z \frac{c_{l,m+1}^n - c_{l,m}^n + c_{l,m-1}^n}{\Delta z^2}, \end{aligned}$$

dove  $U^n := U(t_n)$ , e posto

$$\sigma := D_z \frac{\Delta t}{\Delta z^2}, \quad \mu := \frac{\Delta t}{\Delta x},$$

si ottiene

$$c_{l,m}^{n+1} = (1 - 2\sigma - \mu U^n) c_{l,m}^n + \sigma (c_{l,m+1}^n + c_{l,m-1}^n) + \mu U^n c_{l-1,m}^n,$$

e quindi

$$\begin{aligned}\xi = & (1 - 2\sigma - U^n \mu) + 2\sigma \cos(\beta) + \\ & + \mu U^n \cos(\alpha) - i U^n \mu \sin(\alpha).\end{aligned}$$

Tralasciando i calcoli, uno schema stabile secondo von Neumann si avrà sotto la condizione

$$\Delta t \leq \frac{4D_z \Delta z^2 \Delta x}{2U_{max}^2 \Delta z^4 + D_z^2 8 \Delta x^2 + D_z \Delta z^2 \Delta x + D_z U_{max} \Delta x \Delta z^2}$$

Nella Tesi sono stati riportati dei risultati di stabilità o instabilità numerica a seconda che tale condizione sia o non sia stata rispettata.

Alcune figure riportate qui di seguito rappresentano la soluzione numerica e quella analitica. Si considera come primo caso quello “di base”, cioè quello che permette di *validare* il codice di calcolo, in quanto l’errore tra la soluzione numerica e quella analitica risulta essere minore di  $2 \times 10^{-3}$ .



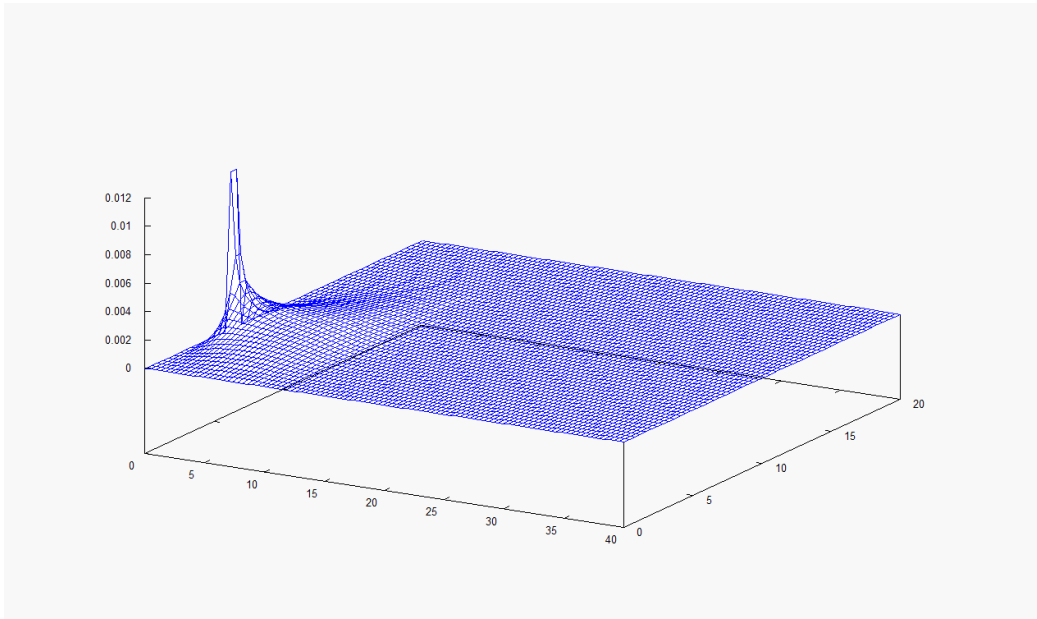


Figura 1: Soluzione numerica con vento costante  $U = 1$

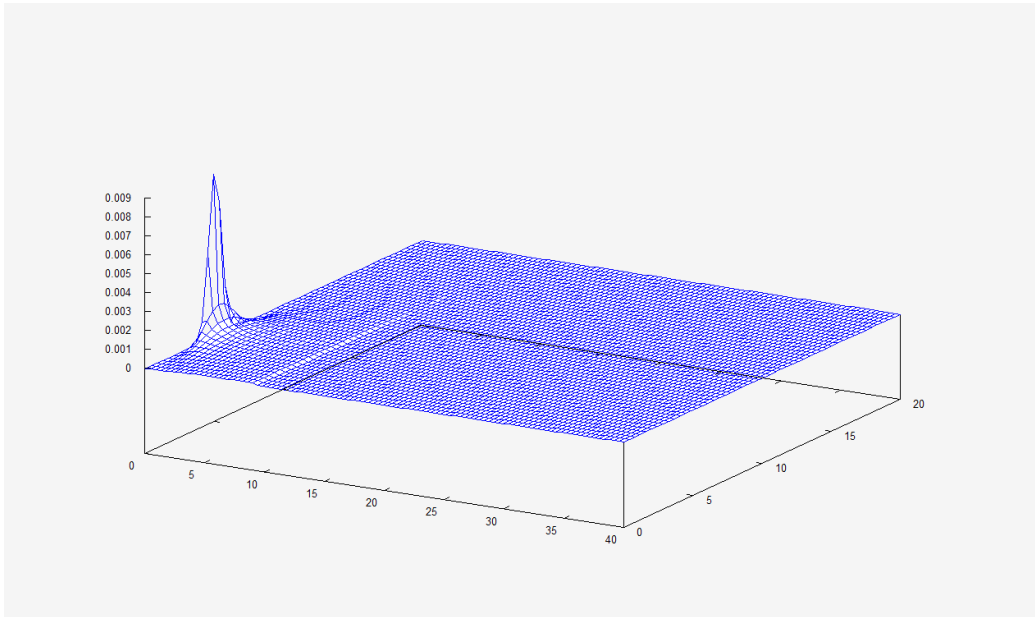


Figura 2: Soluzione Analitica

Considerando l'approccio numerico, modificando  $\Delta t$  in modo da violare la condizione di stabilità, si ottengono dei grafici che si deteriorano al crescere di  $\Delta t$ . Uno tra questi è il seguente di Fig. 3.

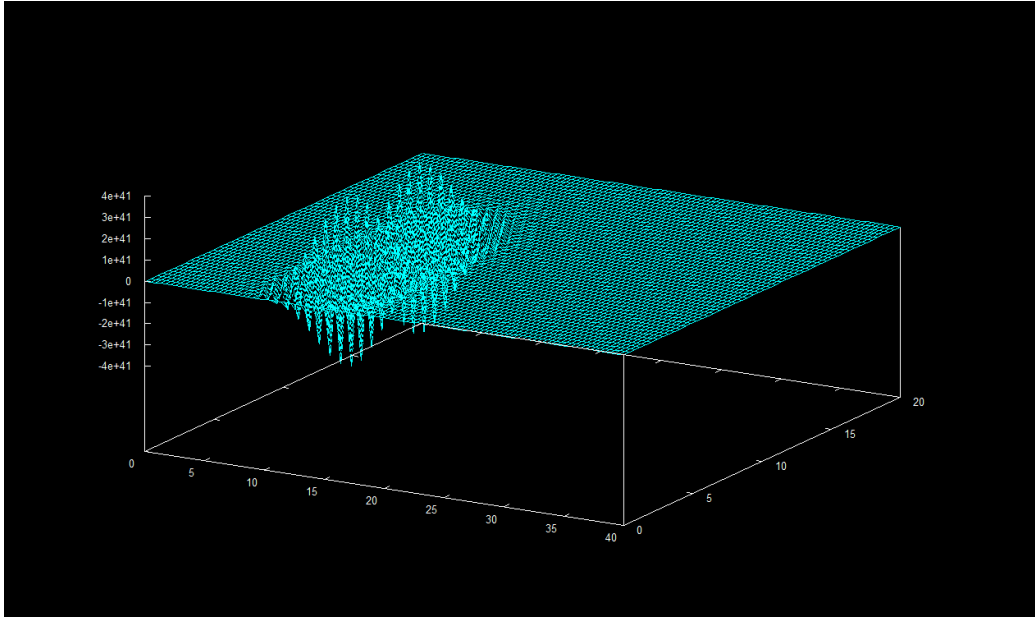


Figura 3: Caso numerico instabile ottenuto considerando un vento non costante nel tempo,  $U(t) = \cos(t) + 4$ , con  $U_{\max} = 5$

## 0.4 Generalizzazioni

Una volta validato il codice numerico, si possono considerare vari casi, ad esempio quello di

- sorgente in vari punti della frontiera del dominio;

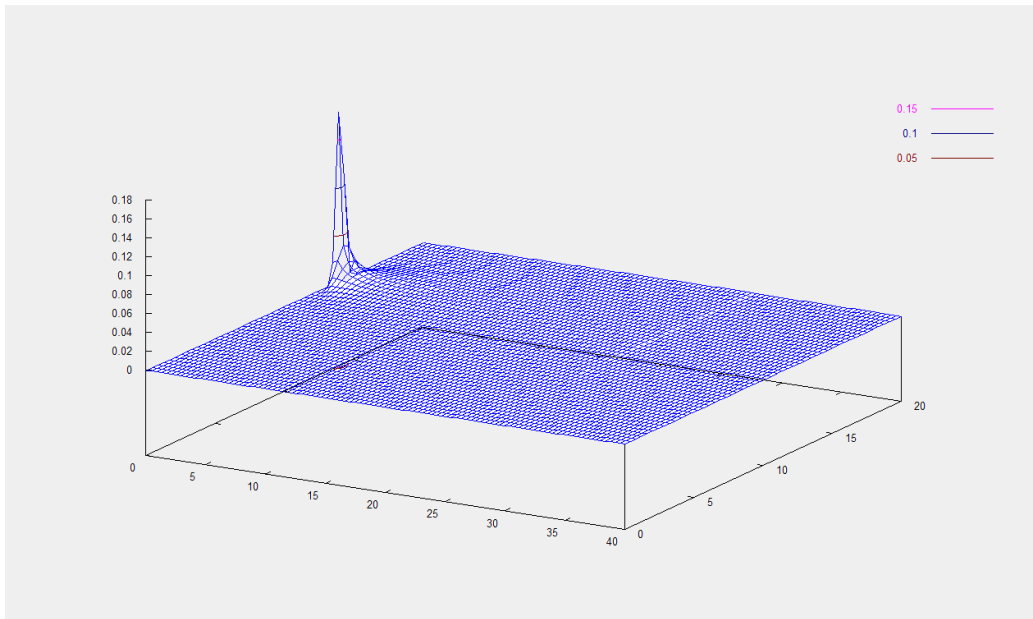


Figura 4: Grafico analitico con sorgente posta in un unto qualsiasi al bordo

- evoluzione della nube tossica sotto l'azione di un vento variabile pari a  $U(t) = \cos t + 3$  ;

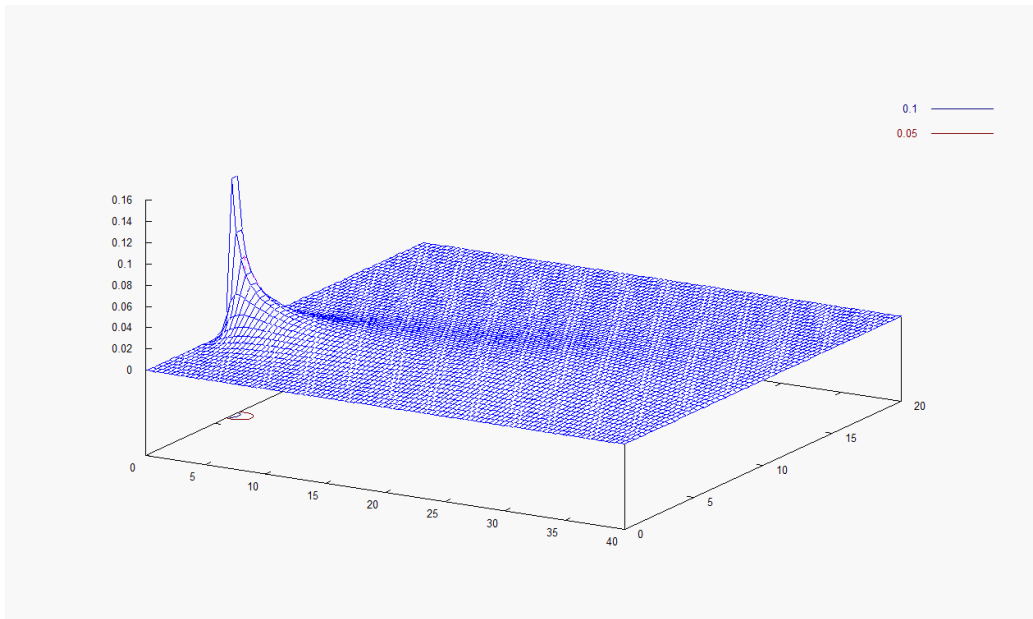


Figura 5: Grafico della soluzione numerica con vento non costante,  $U(t) = \cos(t) + 3$ .

- evoluzione della nube tossica sotto l'azione di un vento variabile e l'orografia (profilo non costante) del suolo;

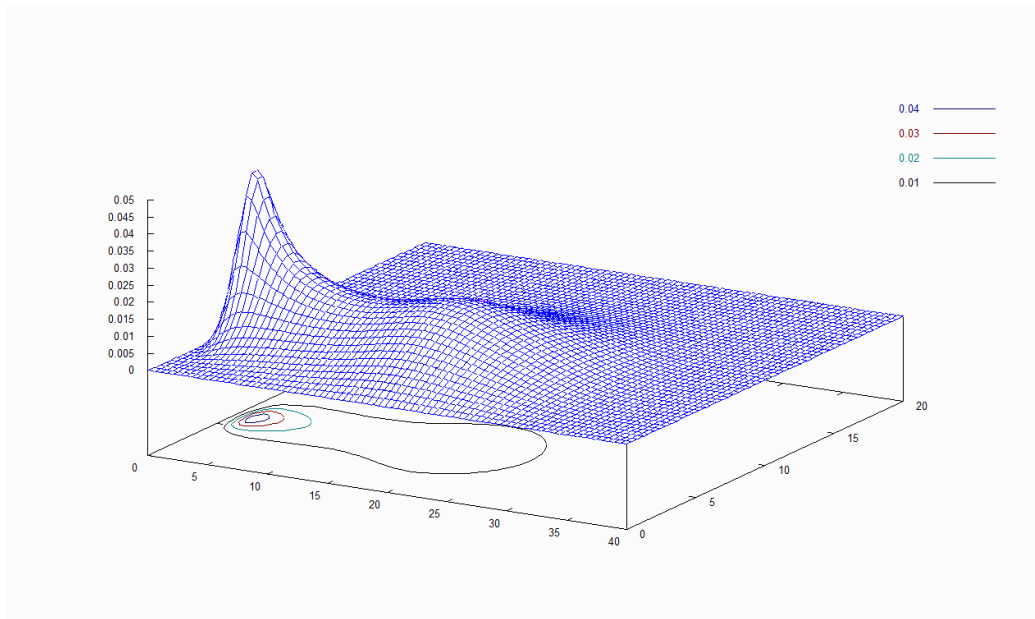


Figura 6: Soluzione numerica con orografia che tiene conto della presenza di palazzi in una zona urbana.

- sorgente interna al dominio.

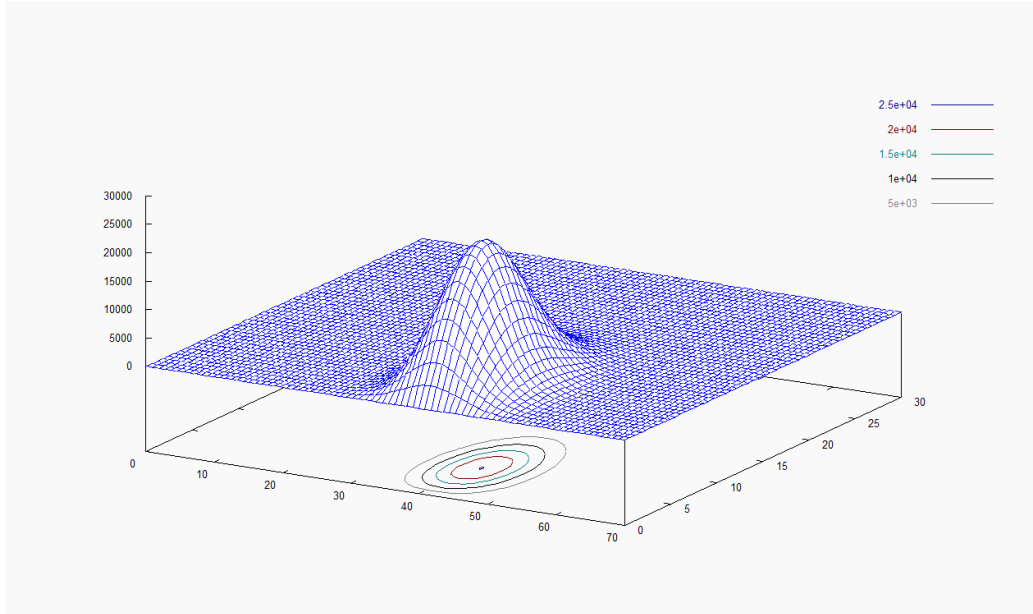


Figura 7: Sorgente interna al dominio

In tutti i casi, sono stati fissati il valore dei passi spaziali ed è stato calcolato quello temporale, in accordo con il criterio di stabilità. La soluzione analitica è stata implementata troncando opportunamente la serie. Tale troncamento è stato fatto confrontando il termine  $n$ -esimo con l' $(n+1)$ -esimo della sommatoria: la serie viene approssimata all' $n$ -esimo termine se la differenza tra essi risulta essere minore di  $10^{-20}$ .

In tutti i grafici ottenuti si osserva il picco di concentrazione iniziale che poi decresce gradualmente, in accordo con i dati reali. Nel problema a coefficienti costanti dunque, il grafico che rappresenta la soluzione numerica è stato monitorato calcolando l'errore commesso rispetto alla soluzione analitica, ottenendo delle buone stime (un errore pari a  $2 \times 10^{-3}$ ). In conclusione, avendo a disposizione tutti i dati, si possono simulare tutti i casi di sorgenti di emissione di agenti inquinanti sia interni che al bordo del dominio spaziale.

# Bibliografia

- [1] M. Bartacca, A. Guidi *Introduzione a Java*, McGraw-Hill, Milano, 2000.
- [2] Luigi Amerio *Analisi matematica 3*, UTET, Torino, 1982.
- [3] P. G. Ciarlet, J. L. Lions *Handbook of Numerical Analysis. Finite difference methods (Part 1) and Solution of Equation in  $\mathbf{R}^n$  (Part 1)*, North-Holland, 1990.
- [4] Claudio Concelli *Fluidodinamica ambientale equazioni e proprietà fondamentali*, Otto editore, Torino, 2003.
- [5] C. Concelli, M. Boffadossi, P. Salizzoni *Fluidodinamica ambientale - Turbolenza e dispersione*, Otto editore, Torino, 2006.
- [6] J. M. Dave *Proc. International Symposium on Highly Toxic Chemicals: Detection and Protection Methods, September 25-27, University of Saskatoon, 1985*.
- [7] L. Formaggia *Modeling and Scientific Computing Laboratory*, Politecnico di Milano, 1990
- [8] G. E. Forsythe, Wolfgang R. Wasow *Finite Different methods for partial differential equations*, ACM, New York, 1967.
- [9] A. Ghizzetti, A. Ossicini *Trasformate di Laplace e calcolo simbolico*, UTET, Torino, 1971.
- [10] Herbert Schildt *Java J2SE 5 La Guida Completa*, McGraw-Hill, Milano, 2005.
- [11] W. Littman and A. Friedman *Industrial Mathematics, a course in solving real-world problems*, Siam, United States, Society For Industrial and Applied Mathematics, 1994.



- [12] W. K. Morton, D.F. Mayers *Numerical Solution of Partial differential Equations, Cambridge University Press, 2005.*
- [13] G. Ooms and N.J. Duijm *Dispersion of a stack plume heavier than air scenario, Springer - Verlag, Berlin, 1983.*
- [14] A. Quarteroni, R. Sacco, F. Saleri *Matematica Numerica (2a Ed.), Springer, Milano, 2004.*
- [15] N. I. Sax *Dangerous Properties of Industrial Materials, John Wiley and Sons, United States, 2005.*
- [16] M. P. Singh and S. Ghosh. *Bhopal gas tragedy: Model simulation of the dispersion scenario, pages 1-22 1987.*
- [17] David. V. Widder *Advanced Calculus, 1947.*