



Convenzione tra Regione Toscana e DE per lo sviluppo e l'applicazione di modelli diffusionali nell'ambito dei piani di risanamento della qualità dell'aria, con particolare attenzione all'area metropolitana di Firenze – Prato – Pistoia

Progetto MoDiVaSET

- Relazione finale - scenario 0 -

- 31/12/2005 -

Ing. Matteo Carpentieri

Prof. Ing. Andrea Corti

Ing. Paolo Giambini

Dott. Silvia Maltagliati



1 Introduzione

1.1 II progetto MoDiVaSET

Lo scopo di questo lavoro consiste nello sviluppare metodologie modellistiche finalizzate a simulare la dispersione in atmosfera di PM_{10} , NO_X e SO_X nell'area metropolitana di Firenze – Prato – Pistoia. L'obiettivo ultimo del progetto risulta la valutazione di diversi scenari emissivi nell'area di riferimento.

1.2 L'area di studio

L'area di studio prescelta è quella riportata qui di seguito in figura 1.1, comprendente la zona che si estende da Incisa a Montecatini in direzione est-ovest e da Barberino del Mugello a Castelfiorentino in direzione nord-sud, per un'estensione totale di 40x49 km².



Figura 1.1: Zona di indagine prescelta

Le sorgenti emissive presenti nell'area di studio sono state caratterizzate, per lo scenario base, a partire dai dati presenti nell'Inventario Regionale delle Sorgenti Emissive (IRSE). Tali sorgenti sono state suddivise in tre tipologie: le principali sorgenti puntuali (selezionate in base ai criteri definiti nell'IRSE), le principali sorgenti lineari (le autostrade A1 ed A11), e le altre sorgenti emissive (simulate come sorgenti areali diffuse). Quest'ultima categoria comprende tutte le sorgenti minori (es. piccoli camini, riscaldamento domestico, traffico veicolare nelle altre strade, aeroporto, etc.) non considerate nelle categorie precedenti.



1.3 Sintesi dei contenuti

La relazione presenta inizialmente (capitolo 2) una breve introduzione relativa ai modelli di diffusione degli inquinanti in generale e ai codici utilizzati all'interno del presente lavoro in particolare. Nel capitolo 3 sono presentati i risultati relativi alle simulazioni effettuate in modalità "inquinante inerte" con CALINE4, SAFE AIR e ADMS-Urban. Successivamente, nel capitolo 4, si riporta il lavoro di validazione effettuato su tali modelli e sui risultati forniti dal LaMMA relativi alle simulazioni con CALPUFF e CALGRID.

Nel capitolo 5, invece, sono riportati i risultati relativi alle simulazioni in modalità "inquinante reattivo" effettuate con CAMx. Le conclusioni sono quindi riportate nel capitolo 6.



2 Modelli utilizzati

2.1 Modelli di simulazione della qualità dell'aria

Tra gli ecosistemi influenzati dalle emissioni antropiche, l'atmosfera è l'oggetto del nostro specifico interesse. In questo caso si parla di qualità dell'aria, una variabile ambientale fondamentale che determina la gestione e programmazione ambientale. L'impatto atmosferico dell'inquinamento si quantifica in base alle concentrazioni di inquinanti in aria e deposizioni massicce al suolo. Le concentrazioni e le deposizioni dipendono da:

- massa totale di inquinanti emessi nell'atmosfera e loro distribuzione spaziale e temporale
- trasporto e processi di trasformazione nell'atmosfera da inquinanti primari a secondari
- processi di deposizione secca e umida al suolo

Le strategie di riduzione delle emissioni devono considerare tutti questi tre fattori e la loro complessità richiede l'uso di modelli. Infatti, sebbene le misure siano una componente fondamentale della valutazione di qualità dell'aria, sono di rado sufficienti a descriverla completamente con la risoluzione e al contempo estensione spaziale e temporale dovuta. Le misure infatti sono sempre riferite ad un solo punto recettore e alla media relativa ad un intervallo di tempo definito e limitato. Estendere la validità di una misura ad un tempo e ad uno spazio maggiore introduce una sostanziale incertezza. I modelli sono necessari inoltre per valutare esposizioni e deposizioni, non altrimenti misurabili. Infine sono uno strumento necessario per stimare l'impatto relativo di varie sorgenti di inquinamento e/o vari scenari emissivi.

La modellistica di qualità dell'aria è la scienza che sviluppa la simulazione numerica dei processi fisici e chimici che governano il trasporto, la diffusione, la trasformazione e la deposizione degli inquinanti atmosferici. Un modello di qualità dell'aria è uno strumento matematico che valuta la concentrazione in aria e la deposizione al suolo di inquinanti primari e secondari in un dominio spaziale definito. Per questo obiettivo, tali modelli richiedono dati di ingresso relativi alle emissioni degli inquinanti considerati (numero, tipologia e localizzazione delle sorgenti, ratei emissivi degli inquinanti) e le caratteristiche dispersive dell'atmosfera (velocità e direzione del vento, turbolenza dell'aria, etc.) che, a loro volta, possono essere il risultato di modelli meteorologici. I problemi ambientali "tradizionali" sono a scala locale, ad es. relativi alle immediate vicinanze delle sorgenti isolate. Di recente comunque (ultime due-tre decadi), le problematiche ambientale (atmosferiche) si sono rivolte a problemi di scala globale (surriscaldamento del pianeta, diminuzione dell'ozono stratosferico, etc.). Altre importanti problematiche dell'ambiente atmosferico sono la crescente acidificazione, la formazione di inquinanti foto-chimici in area urbana, etc.

Questo comporta che le scale spaziali variano da micro-scala (ad es. fenomeni relativi alle emissioni di una singola strada urbana, alle zone circostanti l'emissione di un solo camino) a scala globale (che interessa parzialmente o interamente il pianeta). Le scale temporali variano dal minuto (ad esempio nella valutazione di un picco di concentrazione) fino al decennio (stima delle tendenza evolutiva della composizione dell'atmosfera terrestre).

Nella tabella 2.1 sono riassunti i principali impatti ambientali atmosferici e le corrispondenti scale dinamiche dei fenomeni di dispersione degli inquinanti:

Relazione finale 31-12-2005





Tabella 2.1: Principali impatti ambientali e relative scale coinvolte

Relativamente agli obiettivi strategici specifici dell'applicazione del modello, si possono individuare 4 principali azioni:

- 1. Finalità normative
- 2. <u>Supporto alle politiche ambientali</u>
- 3. <u>Informazione pubblica</u>
- 4. <u>Ricerca scientifica</u>

In particolare, come supporto alla politiche ambientali, si intende:

- valutare le tecniche di monitoraggio delle emissioni, in osservanza dei limiti di legge
- progettare, valutare e completare le reti di monitoraggio
- progettare la localizzazione di nuove sorgenti emissive in modo da minimizzarne l'impatto
- pianificare le strategie di controllo degli episodi di inquinamento definendo le strategie di intervento (ad es. immediato nel caso di incidenti) per evitare episodi acuti di inquinamento in una determinata zona
- valutare le responsabilità dei livelli di concentrazione degli inquinanti e attuali relazioni sorgente-recettore.

Su una base puramente formale i modelli numerici di qualità dell'aria sono divisi in:

• modelli deterministici, che partendo dalla descrizione matematica dei processi atmosferici



calcolano gli effetti (qualità dell'aria) determinati dalle cause (emissioni di inquinanti)

• modelli statistici: basati su relazioni semi-empiriche tra dati (meteorologicie d emissivi) disponibili e misure della qualità dell'aria

I modelli deterministici, se appropriatamente impiegati, forniscono una relazione univoca tra sorgente e recettore. Questa relazione univoca è effettivamente l'obbiettivo di uno studio volto a migliorare la qualità dell'aria (o, al limite, mantenerla) anche nella prospettiva dei futuri sviluppi urbani e/o industriali. In sostanza, un modello deterministico fornisce uno strumento diretto per stimare l'apporto di ciascuna sorgente su ciascun recettore (o area), definendo quindi appropriate strategie e politiche ambientali. La distinzione fisica delle tipologie di modelli è basata sul metodo di soluzione dell'equazione del trasporto, diffusione, etc. degli inquinanti. Si parla così di modelli: Gaussiani , Semi-empirici, Euleriani , Lagrangiani, a-Recettore, Stocastici e infine Chimici.

Nella tabella 2.2 riassumiamo la classificazione dei modelli in base agli obbiettivi (1,2,3,4 come riportato precedentemente), alla tipologia fisica e alla scala dinamica di riferimento.

	Scala dinamica di dispersione			
Tipologia di modello	Locale Locale-Regionale Regionale		Regionale- Continentale	Globale
Gaussiano	1,2,4	1,2		
Semi-empirico	1,2,3,4	1,2,4		
Euleriano	1,2,4	2,3,4	2,4	2,4
Lagrangiano	4	4	2,4	
Chimico	1,2,4	2,3,4	2,4	2,4
Recettore	2,4,			
Stocastico	2,4			

Tabella 2.2: Principali impatti ambientali e relative scale coinvolte

L'applicazione modellistica in ambito urbano consiste nella determinazione del probabile campo di concentrazione di diversi inquinanti derivanti da diverse tipologie di sorgenti, tipicamente emissioni da traffico veicolare. Le informazioni sul campo di concentrazione possono poi essere tradotte in una stima dell'esposizione di determinati recettori (persone, flora, fauna, edifici). Infine le stime sull'esposizione possono essere utilizzate per calcolare gli effetti, sia acuti che di lungo periodo, dell'inquinamento atmosferico sulla popolazione umana e l'ambiente, informazioni fondamentali per la gestione e la valutazione della qualità dell'aria.

La modellistica diffusionale in ambito urbano è, generalmente, di difficile applicazione, principalmente a causa della complessità delle condizioni al contorno associate con lo sviluppo tridimensionale delle città (topografia ed edifici). L'interazione dell'atmosfera con la cosiddetta "canopy" urbana genera un flusso di vento locale molto complesso e provoca un aumento della turbolenza nelle vicinanze degli edifici, dove la maggior parte delle sorgenti e dei recettori urbani sono collocati.

Come già riportato sopra ed in tabella 2.1, la dispersione atmosferica e i fenomeni ad essa correlati vengono classificati secondo la loro estensione orizzontale in tre (o quattro) categorie: macroscala, mesoscala, (scala locale), microscala. In ambito urbano, le scale appena descritte vengono spesso tradotte come descritto in tabella 2.3.

Relazione finale 31-12-2005



Scala (classificazione per aree urbane)	Scala spaziale orizzontale	Scala temporale
Microscala	0-100m	secondi
Scala di quartiere	100-2000m	minuti
Scala urbana	5-50km	ore
Scala regionale	100-1000km	giorni

Tabella 2.3: Scale utilizzate per la classificazione dei modelli urbani

A causa della complessità prima descritta, tutte queste scale risultano coinvolte nella determinazione della concentrazione di inquinanti in aree urbane. Infatti la concentrazione in un determinato recettore urbano risulta dalla somma dei contributi di varie sorgenti alcune vicine (ad es. traffico locale) alcune intermedie (ad es. riscaldamento e traffico localizzato in aree vicine), altre più lontane dal recettore (ad es. sorgenti industriali e "background" regionale).

I modelli urbani risultano generalmente applicabili per una sola (o comunque un range molto limitato) delle scale descritte, poiché i meccanismi fisici dominanti e le ipotesi applicate ad ogni scala risultano differenti. Comunque la dispersione ad ognuna delle scale considerate è strettamente legata a tutte le altre, poiché i fenomeni presenti ad una determinata scale coesistono con quelli delle altre scale, e li influenzano. Simulare la dispersione degli inquinanti ad una determinata scala è quindi una forte approssimazione e lo sviluppo di metodi di interfaccia tra le varie scale risulta un traguardo tanto desiderabile quanto difficile da raggiungere.

Nonostante la notevole confusione che si trova in letteratura sulla classificazione dei modelli diffusionali applicabili in aree urbane una prima distinzione può essere fatta secondo le seguenti tre categorie :

- *Modelli sperimentali*: Esperimenti in campo aperto (su edifici in scala reale o scala ridotta), o simulazioni in laboratorio su modelli in scala ridotta (in galleria del vento o vasche ad acqua).
- *Modelli parametrici*: Modelli matematici che esprimono la concentrazione come funzione di un set di variabili (parametri) e condizioni.
- *Modelli computazionali*: Modelli che risolvono le equazioni fondamentali di conservazione del flusso e della dispersione (o trasporto) numericamente per date condizioni al contorno, utilizzando un approccio euleriano o lagrangiano.

I principali approcci modellistici per aree urbane, divisi secondo la classificazione appena descritta, sono mostrati in tabella 4.

I vari modelli possono anche essere classificati secondo la loro scala di applicazione, utilizzando le scale definite in precedenza. Per definizione, ogni metodo modellistico è una simulazione della realtà basata su particolari assunzioni, semplificazioni ed approssimazioni, e queste determinano il grado di incertezza ed accuratezza che ogni metodologia implica. Questa è una considerazione fondamentale per la scelta del modello più adatto per una data applicazione. La scelta della metodologia più adatta in aree urbane risulta piuttosto difficoltosa. Ad esempio l'agenzia ambientale americana (EPA) ha individuato alcuni modelli da utilizzare per applicazioni regolatorie (rispetto della normativa su qualità dell'aria e valutazioni di impatto ambientale), ma esiste un solo modello completamente appropriato per applicazioni urbane (UAM, un modello fotochimico a scala urbana).

Analizzando le metodologie modellistiche sopra descritte si può affermare che, allo stato attuale



della ricerca nel campo della modellistica diffusionale, i modelli utilizzabili allo scopo dell'analisi di scenari su scala urbana vanno ricercati tra i modelli parametrici semi-empirici e i modelli euleriani a griglia. Non sembrano infatti ancora adeguati allo scopo né i modelli empirici, fortemente "case-specific", né i modelli computazionali lagrangiani e CFD perché troppo dispendiosi in termini di risorse computazionali utilizzate per applicazioni long-term e su così ampia scala territoriale e ancora problematici per quanto riguarda la validazione su morfologie particolarmente complesse. Non risultano inoltre applicabili neanche i modelli sperimentali, sia per la scarsa economicità sia per l'impossibilità di applicare i modelli in tutte le condizioni necessarie. La modellistica fisica risulta però essenziale ai fini della valutazione e validazione dei modelli utilizzati, soprattutto la sperimentazione in galleria del vento (molto più economica rispetto agli esperimenti in campo aperto anche se, per alcuni aspetti, più limitata) che risulta essere un aspetto complementare fondamentale quando si parla di applicazioni modellistiche diffusionali.

Modelli sperimentali				
	Misure in campo aperto in condizioni selezionate:			
Esperimenti in campo	 in veri e propri siti urbani 			
aperto	• su ostacoli a scala reale o ridotta di forma e disposizione			
	semplificata			
Esperimenti a scala	Esperimenti in galleria del vento			
ridotta in laboratorio	Esperimenti in vasca d'acqua			
	Modelli parametrici			
	Sperimentali: basate sull'analisi dei dati derivanti da esperimenti			
Correlazioni ampiricha	in campo o in laboratorio			
Correlazioni empiriche	Statistiche: derivate dall'analisi statistica di dati dei			
	monitoraggio della qualità dell'aria			
	Basati su una combinazione di analisi teorica e dati empirici:			
	 Semplici modelli a "box" 			
Semi-empirici	Modelli urbani a "canyon"			
_	• Modelli "urban array"			
	Modelli gaussiani			
	Modelli computazionali			
	Modelli di mesoscala a traiettoria			
Modelli lagrangiani	Modelli stocastici (a particelle)			
	• Modelli a griglia (es. EMEP, CIT, UAM)			
Modelli euleriani	Modelli CFD (Computational Fluid Dynamics)			

Tabella 2.4: Metodi applicati alla modellistica diffusionale in aree urbane

2.2 Scelta dei modelli

2.2.1 Sistemi modellistici

Dall'analisi delle problematiche precedentemente esposte risulta di notevole interesse l'utilizzo di modelli multiscala o sistemi modellistici con diversi moduli nidificati ("nested" models). Esistono essenzialmente due metodi per costruire modelli multi-scala. Il primo consiste nell'uso di un

Relazione finale 31-12-2005



singolo modello euleriano tridimensionale, con diversi livelli ognuno applicabile ad una certa scala spazio-temporale; il vantaggio principale di tale approccio consiste nell'utilizzare la stessa metodologia per tutte le scale, facilitando lo scambio di informazioni tra i vari moduli; il principale svantaggio invece risiede nell'utilizzo intensivo delle risorse computazionali. Il secondo approccio è basato sull'uso di modelli diversi per le differenti scale, scegliendo il modello più adatto per ognuna di esse. In questo modo si ottiene un procedimento efficiente, nonché veloce nell'esecuzione, con lo svantaggio che approcci diversi per ogni scala comportano un'interfaccia tra i vari moduli difficoltosa

Visti i vantaggi del secondo approccio per la modellistica di scenario, verranno presi in considerazione i sistemi modellistici sviluppati negli ultimi anni. A tutt'oggi non sono molti i sistemi modellistici in grado di prendere in considerazione le diverse scale rilevanti per il fenomeno della dispersione atmosferica in aree urbane. Una prima applicazione di tale concetto consiste nello sviluppo del modello ADMS-Urban da parte del CERC (Cambridge Environmental Research Consultants, [2.1]). Il modello prevede l'applicazione di due moduli: un modello gaussiano di nuova generazione a scala urbana ed un modello "street canyon" parametrico per le sorgenti lineari in strade a "canyon". Pur con tutte le limitazioni dovute all'applicazione di un modello gaussiano (in particolare quelle relative all'uniformità delle condizioni nel dominio di studio) il modello viene ampiamente utilizzato in Gran Bretagna e in Europa per la gestione della qualità dell'aria nelle città, ed ha dato buoni risultati anche dal punto di vista della validazione.

Un sistema modellistico comprendente un più vasto range di scale viene utilizzato in Danimarca per la previsione della qualità dell'aria nelle principali città. Il sistema è stato chiamato THOR [2.2] e comprende i seguenti elementi (v. figura 2.1): un modello di previsione meteorologica a scala contintentale (ETA) inizializzato utilizzando i dati provenienti dal modello a scala globale del National Center for Environmental Forecast americano; un modello di trasporto di lungo raggio (DEHM, Danish Eulerian Hemispheric Model) che produce previsioni di inquinamento su scala europea; un semplice modello semi-empirico per il calcolo del background urbano (BUM, Background Urban Model); un modello per "street canyon" (OSPM, Operational Street Pollution Model); due modelli per il trattamento delle sorgenti puntuali, uno di corto raggio (OML) ed uno di lungo raggio per emissioni accidentali (DREAM). I risultati del sistema modellistico sono stati confrontati in diverse applicazioni con dati provenienti dalle stazioni di monitoraggio dimostrando una più alta affidabilità ed accuratezza rispetto ai normali modelli mono-scala, con un tempo di calcolo ed un utilizzo di risorse più che accettabile.

Un altro promettente sistema modellistico sviluppato recentemente è quello del Finnish Meteorological Institute (FMI). Esso comprende un modello meteorologico (MPP-FMI) i cui risultati vengono usati come input per i due modelli gaussiani UDM-FMI, per sorgenti stazionarie (principalmente emissioni puntuali industriali) e CAR-FMI, per sorgenti da traffico veicolare; i risultati di questi modelli sono stati poi utilizzati come background in input al modello per "street canyon" OSPM per confrontare i dati derivanti dal monitoraggio e dalla sperimentazione in alcune strade di Helsinki con le simulazioni del sistema modellistico [2.3].

Uno degli approcci più promettenti sembra comunque essere quello in corso di studio presso l'Ecole Centrale de Lyon [2.4]. Il sistema (v. figura 2.2) prevede l'applicazione di un modello di previsione meteorologica e di qualità dell'aria su scala regionale (SAIMM+UAM); questo viene utilizzato come input al modello euleriano MERCURE (scala urbana) per il calcolo del background urbano; infine vengono applicati il modello a scala di quartiere SIRANE accoppiato con un semplice modello a canyon per le sorgenti lineari da traffico veicolare e il modello gaussiano ADMS-3 per le



sorgenti puntuali industriali. Tale sistema risulta particolarmente interessante anche per l'applicazione dell'unico modello a scala di quartiere in grado di prendere in considerazione emissioni da traffico veicolare su una rete stradale estesa tenendo conto sia dell'effetto canyon che dei fenomeni complessi che avvengono in prossimità delle intersezioni stradali, il tutto senza appesantire troppo il carico di lavoro dell'elaboratore, come nel caso di modelli CFD. Il sistema è stato applicato ad un intero quartiere di Lione, ottenendo risultati molto incoraggianti [2.5].



Figura 2.1: Schema del sistema modellistico THOR



Figura 2.2: Schema del sistema modellistico dell'Ecole Centrale de Lyon

Per quel che riguarda il progetto regionale in oggetto, l'idea è quella di sviluppare un sistema modellistico flessibile, in grado di essere agevolmente utilizzato per la modellistica di scenario. In questo senso il sistema modellistico sviluppato dal LaMMA (RAMS, CALMET, CALPUFF/CALGRID) risulta un ottimo punto di partenza.

Un punto labile di tale sistema risulta essere la simulazione delle sorgenti lineari. Un primo obiettivo del nostro gruppo di ricerca è stato, quindi, proprio l'implementazione di un modello per sorgenti lineari da integrare in questo sistema modellistico. Il modello scelto inizialmente è CALINE4, come visualizzato in figura 2.3 e specificato nel paragrafo 2.2.2.



Figura 2.3: Sistema modellistico iniziale

All'interno del progetto sono stati quindi applicati e confrontati altri modelli dai diversi gruppi di ricerca partecipanti. In tabella 2.5 sono elencati tutti i vari modelli applicati durante il progetto. I diversi gruppi di ricerca coinvolti sono indicati con DE1, DE2 (i due gruppi di ricerca del Dipartimento di Energetica coinvolti nel progetto) e LaMMA (CNR-IBIMET/LaMMA).

Modello	Applicazione	Eseguito da
RAMS	Meteorologia	LaMMA
CALMET	Meteorologia	LaMMA
CALPUFF	Sorgenti puntuali	LaMMA
CALINE4	Sorgenti lineari	DE1
CALGRID	Sorgenti areali	LaMMA
SAFE AIR	Sorgenti puntuali e lineari	DE1
CAMx	Sorgenti areali	DE2
ADMS-Urban	Tutte le sorgenti	DE1

Tabella 2.5: Modelli applicati durante il progetto

2.2.2 Sorgenti lineari

Per quel che riguarda la scelta del (o dei) modello/i per l'analisi della dispersione da sorgenti lineari è stata effettuata una breve analisi bibliografica per individuare i modelli potenzialmente applicabili e le metodologie utilizzabili.

Relazione finale 31-12-2005



L'approccio più utilizzato per la simulazione della dispersione di inquinanti in atmosfera da sorgenti lineari è quello deterministico. Esso si basa sulla soluzione gaussiana approssimata delle equazioni di conservazione, applicando il principio di sovrapposizione (serie infinita di sorgenti puntuali indipendenti tra loro).

L'approccio numerico risulta essere sempre di tipo deterministico e si basa sull'approssimazione numerica delle equazioni differenziali alle derivate parziali che governano il fenomeno di diffusione atmosferica. Entrambi gli approcci, lagrangiano ed euleriano, vengono usati per simulare il processo di dispersione.

Diversamente dai metodi deterministici, i modelli di tipo statistico calcolano le concentrazioni tramite relazioni statistiche empiriche a partire dai dati meteorologici e di traffico in relazione con le concentrazioni misurate nelle centraline di monitoraggio. Le tecniche più usate sono la regressione, la regressione multipla e l'analisi stocastica delle serie temporali (modelli Box-Jenkins).

Dati gli obiettivi del presente studio, solo l'approccio deterministico risulta attuabile. Data l'estensione sia del domino spaziale che temporale, infatti, non è pensabile per motivi di consumo di risorse (temporali e hardware) l'approccio numerico, ed inoltre, dato che le simulazioni devono essere estrapolate per scenari futuri ipotetici, non è applicabile l'approccio statistico.

Inizialmente l'attenzione è stata focalizzata su modelli appositamente predisposti per sorgenti lineari. Tra questi ci sono anche i modelli creati per simulare la dispersione di inquinanti in particolari condizioni topografiche (per es. street canyon), ma, visto che l'applicazione presente non richiede tale dettaglio, essi non sono stati considerati. Una breve storia dello sviluppo dei modelli deterministici per sorgenti lineari si può trovare in [2.6].

Particolarmente diffusi e universalmente utilizzati risultano essere i modelli sviluppati dall'EPA, l'ente americano per la protezione ambientale: HIWAY e CALINE.

Il "recommended model" per l'EPA nel caso di inquinanti inerti da emissioni veicolari in autostrada risulta essere CALINE3, che comunque dovrebbe essere usato nel caso di terreno pianeggiante [2.7]. In alcuni selezionati casi può essere usato CALPUFF, anche se esso è consigliato per la dispersione a lungo raggio (da circa 50 a diverse centinaia di chilometri). In particolare può essere necessario l'uso di CALPUFF in caso di vento stagnante e/o campo di vento particolarmente complesso (orografia complessa e/o variazioni temporali di vento), sempre che si disponga della quantità (e qualità) necessaria di dati richiesti.

Fra gli "alternative models", sempre dell'EPA [2.8], c'è anche HYROAD, una "suite" modellistica contenente tre modelli: un modello per le emissioni veicolari, uno per il calcolo delle previsioni meteorologiche, ed uno per la dispersione di inquinanti nei pressi degli incroci semaforici (modello a puff).

Dopo questa breve analisi bibliografica (che ha compreso anche l'analisi di altri data base modellistici, quali quello predisposto dalla European Environment Agency, il Model Documentation System [2.9], ed altri), è stato deciso l'utilizzo, almeno nelle fasi iniziali, di CALINE, in particolare nell'ultima versione disponibile, CALINE4 [2.10]. Comunque, viste le condizioni, sia meteorologiche che topografiche, caratteristiche del domino di studio, è stato deciso di valutare in una fase successiva l'utilizzo di altri modelli più complessi ed avanzati, anche se non sviluppati specificatamente per sorgenti lineari, quali ADMS-Urban e SAFE AIR, come consigliato anche dall'EPA.



2.2.3 Sorgenti puntuali

Le sorgenti puntuali risultano essere la tipologia di sorgenti meglio simulate dai modelli di diffusione attualmente disponibili. Questo è dovuto al fatto che la maggior parte dei modelli è stata sviluppata proprio per la simulazione della dispersione degli inquinanti prodotti da camini industriali.

Esistono in letteratura una quantità di modelli utilizzabili per sorgenti puntuali. Il modello raccomandato dall'EPA [2.7] è attualmente AERMOD, mentre fino al 2005 era ISC3. Tra i modelli raccomandati figura comunque anche CALPUFF, per applicazioni che coinvolgano simulazioni di trasporto a lungo raggio o terreno ad orografia complessa.

I modelli "alternativi" [2.8] per sorgenti puntuali comprendono numerosi codici di calcolo, tra i quali, ad esempio, lo stesso ISC3 e ADMS-3. Tutti i modelli citati hanno la caratteristica comune di essere modelli gaussiani (di prima generazione, come ISC3, o di seconda generazione, cioè con un trattamento avanzato della meteorologia utilizzando variabili micrometeorologiche piuttosto che le classi di stabilità, come AERMOD, ADMS-3 e CALPUFF; quest'ultimo è un modello gaussiano a puff).

A livello europeo, non esistendo un unico ente che definisca gli standard di riferimento, la quantità di modelli disponibili risulta ancora maggiore. Tra i modelli inseriti nel Model Documentation System [2.9] citiamo, ad esempio, SAFE AIR, un altro modello gaussiano di seconda generazione a puff/segmented-plume.

La scelta è stata quindi di utilizzare altri due modelli per poter confrontare i risultati ottenuti da CALPUFF, utilizzato dal gruppo di ricerca del LaMMA/CNR-IBIMET. Il primo dei modelli scelti è stato SAFE AIR, data l'esperienza pregressa di utilizzo di tale modello in numerose applicazioni di analisi di scenario [2.11] e di studi di validazione [2.12]. Altre simulazioni sono state quindi effettuate utilizzando ADMS-3, in particolare nella versione compresa nella suite modellistica ADMS-Urban. Quest'ultimo è stato scelto in particolare per la sua capacità di simulare tutte e tre le tipologie di sorgenti (puntuali, lineari, diffuse), oltre che per il fatto di essere stato sviluppato specificatamente per applicazioni in aree urbane. Simulazioni comprendenti le sorgenti puntuali sono comunque state effettuate anche con il modello euleriano CAMx (v. paragrafo successivo).

2.2.4 Sorgenti diffuse

Anche per le sorgenti areali diffuse esistono numerosi strumenti modellistici utilizzabili, anche se in misura molto minore rispetto alle sorgenti puntuali. Le applicazioni di tale tipologia di modelli sono spesso nel campo della simulazione dell'inquinamento fotochimico e, spesso, sono applicabili alle scale più grandi (in particolare la scala regionale). L'EPA cita quattro di questi modelli tra quelli utilizzabili per la modellistica dell'inquinamento fotochimico: CMAQ, CAMx, REMSAD e UAM-V [2.13].

Tali modelli sono tutti modelli euleriani a griglia; quest'ultimo è infatti l'approccio più utilizzato per tali tipologie di sorgenti. Tra questi modelli si può citare, ad esempio, anche CALGRID, modello largamente utilizzato a livello internazionale per la simulazione della diffusione da sorgenti areali diffuse.

Altri tipi di modelli matematici, come ad esempio i gaussiani, sono in grado di trattare sorgenti areali (v. AERMOD, ISC3, CALPUFF, SAFE AIR), ma i codici capaci di trattare l'elevato numero di sorgenti diffuse su tutto l'ampio dominio considerato nel presente studio sono molto rari. Tra



questi si può citare, ad esempio, proprio ADMS-Urban.

Alla luce di tale breve ricerca, i modelli selezionati per confrontare i risultati di CALGRID, utilizzato dal LaMMA/CNR-IBIMET, sono stati CAMx e, come già specificato in precedenza, ADMS-Urban.

2.3 CALINE4

2.3.1 Descrizione generale

CALINE4 è uno dei modelli di dispersione che meglio si prestano allo studio dell'inquinamento da traffico veicolare, sia in ambito urbano che autostradale [2.10]. Sviluppato dal dipartimento dei trasporti californiano ("Caltrans") a partire dagli anni '70 e attualmente approdato alla versione 4, è basato sull'equazione di diffusione gaussiana ed utilizza il concetto di "zona di rimescolamento" per descrivere la dispersione stradale. Gestisce quattro tra i principali inquinanti da traffico: CO, NO2, gas inerti e polveri.

A partire da una data sorgente lineare di traffico, noti i fattori di emissione, le condizioni meteorologiche e la geometria del sito, CALINE4 è in grado di stimare le concentrazioni inquinanti per un massimo di 20 recettori alla volta.

La filosofia di fondo del modello è quella di ridurre all'essenziale la mole di dati in ingresso richiesta all'utente, e ciò ne fa uno degli strumenti più semplici ancorché affidabili da utilizzare. Altro punto a favore di CALINE4 è la sua notevole versatilità, nel senso che si presta a gestire tutte le principali morfologie urbane che tipicamente si possono presentare, come i tratti stradali (a raso, in rilevato o in trincea), le intersezioni semaforiche, le aree di parcheggio e le strade a canyon.

CALINE4 è per definizione un modello di dispersione gaussiano per sorgenti lineari. Esso suddivide idealmente una sorgente lineare (un arco stradale) in porzioni di lunghezza diseguale, determinando quest'ultima in funzione della direzione del vento e della posizione rispetto alla strada del recettore presso il quale si vuole stimare la concentrazione. Ognuna di tali porzioni stradali viene schematizzata come una sorgente lineare fittizia di emissione, perpendicolare alla direzione del vento, e da ciascuna di esse viene quindi simulato un processo di dispersione gaussiana (figura 2.4).





Figura 2.4: Schema di scomposizione della sede stradale in sorgenti lineari fittizie per il calcolo della dispersione in CALINE4

Ogni arco stradale viene quindi simulato come una sorgente lineare finita "equivalente" posta perpendicolarmente alla direzione del vento e centrata nel punto centrale di ogni singolo elemento, assumendo un sistema di riferimento cartesiano locale orientato secondo la direzione del vento e con l'origine coincidente con tale punto centrale [2.14]. Le concentrazioni inquinanti in corrispondenza del recettore vengono ricavate sommando i contributi di ciascun elemento emissivo sopravvento; questi ultimi sono calcolati in accordo con la formula gaussiana per una sorgente lineare di lunghezza finita:

$$C(x, y, 0, H) = \frac{Q}{\pi \sigma_z u} \int_{y_1 - y}^{y_2 - y} \exp\left(\frac{-y^2}{2\sigma_y^2}\right) dy$$

dove Q è la portata emissiva della sorgente lineare; u è la velocità del vento; σ_y , σ_z sono i

coefficienti di dispersione gaussiana orizzontale e verticale; y_1, y_2 sono le coordinate lungo la y dei punti di inizio e fine della sorgente lineare finita.

Per il calcolo della σ_z , CALINE4 prende in considerazione la turbolenza termica e quella meccanica indotta dai veicoli, oltre a quella ambientale. Mentre i primi due fattori sono predominanti nella zona di mescolamento (figura 2.5), l'ultimo ha un'influenza ridotta nelle immediate vicinanze della strada, e prevale, invece, quando la distanza aumenta [2.15]. σ_y , invece è stimato a partire dalla deviazione standard della direzione del vento σ_{θ} usando il metodo sviluppato da Draxler [2.16].



Figura 2.5: Zona di rimescolamento in CALINE4

CALINE4 è in grado di trattare contemporaneamente fino a 20 archi stradali (link). Tale approccio "multilink" risulta un comodo ed intuitivo modo per risolvere situazioni stradali più complesse del semplice arco stradale o delle intersezioni a più bracci, come ad esempio gli archi stradali curvilinei (attraverso una spezzata che approssima la curvatura del tracciato stradale) o le aree di parcheggio, dove si possono prendere in esame come sorgenti lineari "equivalenti" le diverse vie di deflusso dei veicoli.

CALINE4 è un modello in grado di calcolare unicamente il contributo locale alla concentrazione dell'inquinante considerato, nel senso che non è provvisto di alcun modulo per la stima della concentrazione di fondo o di background. E' inoltre sprovvisto di un modulo per il calcolo delle emissioni, che infatti – come le stesse concentrazioni di fondo – vanno introdotte in ingresso come dato dall'utente.

Il modello CALINE4 necessita di una serie di dati di input che sono classificabili sostanzialmente in tre categorie:

- Dati meteorologici
- Caratteristiche di emissione delle sorgenti (geometria della strada, fattori di emissione)
- Parametri generali di esecuzione (dati territoriali, posizionamento dei recettori, inquinanti considerati, ecc...).

Relazione finale 31-12-2005



A seguire vengono riportati, suddivisi per classi, gli input considerati per il caso specifico di applicazione delle autostrade della piana di Firenze – Prato – Pistoia.

2.3.2 Dati meteorologici di input

CALINE4, essendo un modello di tipo stazionario, prevede la rappresentazione in simulazione matematica delle condizioni medie di campo diffusionale entro intervalli temporali e domini spaziali predefiniti, per i quali il modello prende a riferimento condizioni di avvezione monodimensionale.

Al fine di una migliore rappresentazione delle condizioni di diffusione reali mediante simulazione con modelli fisico-matematici, risulta quindi preferibile ridurre al minimo la scala temporale di riferimento e il dominio spaziale.

Nel caso specifico si è scelto, quindi, di riferirsi a misure meteorologiche elaborate su base media oraria (con un buon compromesso rispetto anche alla condizione tipica di archiviazione dei dati meteorologici impiegato dai gestori di sistemi di monitoraggio) e facenti riferimento a 24 diversi sottodomini in cui è stata suddivisa l'area d'indagine (in queste aree le condizioni meteo possono essere ritenute sostanzialmente omogenee). I 24 punti selezionati sono visualizzati in figura 2.6.



Figura 2.6: Posizione dei punti meteo scelti per le simulazioni

Per la stima delle condizioni di trasporto e diffusione di inquinanti in atmosfera, il modello CALINE4 necessita della determinazione dei seguenti parametri meteorologici:

- velocità del vento (VVP)
- direzione del vento (DVP)
- temperatura atmosferica (T)
- umidità relativa (HR)
- classe di stabilità atmosferica secondo Pasquill



• deviazione standard della direzione vento (σ_{θ}).

Classe di stabilità di Pasquill	$\sigma_{ heta}$ (°)
А	25
В	20
С	15
D	10
Е	5
F	2.5

 Tabella 2.6: Metodo dello sbandieramento

Tutti i parametri sono stati ricavati tramite elaborazioni del modello CALMET effettuate da LaMMA, ad eccezione della deviazione standard della direzione vento σ_{θ} , la quale è stata ottenuta a partire dalla classe di stabilità tramite la correlazione definita dal metodo dello sbandieramento (tabella 2.6 [2.17]).

Le elaborazioni del CALMET per i 24 punti selezionati fanno riferimento all'intero anno 2002 ed hanno fornito 8568 valori validi su 8760 ore annue, pari al 97,8%;ciò è dovuto alla mancanza di dati relativamente al periodo 1/1/02-8/1/02, che non vanno comunque ad invalidare l'adeguatezza del campione utilizzato.

Data l'inapplicabilità di CALINE4 in condizioni di vento debole (VVP < 0.5 m/s), si è ritenuto opportuno andare a valutare la percentuale di calme di vento relative a ciascun sottodominio considerato in modo da verificare la robustezza del modello.

Dalla tabella 2.7 si può notare come la percentuale relativa a ciascun sottodominio non superi mai l'8% e come quindi i risultati ottenibili tramite il modello matematico siano sufficientemente rappresentativi delle condizioni meteorologiche che si possono presentare durante l'arco dell'anno. Per verificare la sensibilità del modello rispetto alle calme di vento, si è ritenuto opportuno effettuare due diverse serie di simulazioni:

- una prima serie senza prendere in considerazione le calme di vento (run 1);
- una seconda associando alle calme di vento la velocità di 0.5 m/s, limite minimo simulabile da CALINE4 (run 2).

Relazione finale 31-12-2005



N° staz	ID	GBX[m]	GBY[m]	calme	% calme
1	590	1645569	4860489	443	5.06%
2	493	1646569	4862489	589	6.72%
3	446	1648569	4863489	551	6.29%
4	401	1652569	4864489	524	5.98%
5	454	1656569	4863489	556	6.35%
6	558	1662569	4861489	575	6.56%
7	709	1666569	4858489	572	6.53%
8	763	1671569	4857489	606	6.92%
9	962	1674569	4853489	661	7.55%
10	83	1677569	4871489	451	5.15%
11	181	1677569	4869489	437	4.99%
12	280	1678569	4867489	368	4.20%
13	377	1677569	4865489	348	3.97%
14	425	1676569	4864489	369	4.21%
15	571	1675569	4861489	436	4.98%
16	717	1674569	4858489	590	6.74%
17	1256	1674569	4847489	564	6.44%
18	1405	1676569	4844489	489	5.58%
19	1458	1680569	4843489	487	5.56%
20	1363	1683569	4845489	494	5.64%
21	1415	1686569	4844489	340	3.88%
22	1419	1690569	4844489	243	2.77%
23	1469	1691569	4843489	234	2.67%
24	1519	1692569	4842489	240	2.74%
			MEDIA	465.3	5.31%

Tabella 2.7: Percentuali di calme di vento relative alle stazioni meteorologiche virtuali di riferimento

2.3.3 Dati di input relativi alle sorgenti emissive

Per quanto riguarda le sorgenti emissive CALINE4 necessità dei seguenti input:

- geometria della strada (tipologia e coordinate dei tratti stradali, larghezza della mixing zone)
- volume di traffico (veicoli/h)
- fattore di emissione (g/mi-veicolo)

Data l'estensione dei tratti stradali considerati, i due percorsi autostradali sono stati suddivisi in un totale di 79 archi, così da approssimare le sorgenti lineari nel miglior modo possibile senza appesantire troppo le simulazioni. Per ciascun arco stradale sono state estrapolate per via cartografica le coordinate dei punti di inizio e fine ed è stata assegnata la tipologia piana (a raso), che è quella tipica dei tratti autostradali considerati e che, quindi, meglio si adatta a rappresentare le condizioni diffusive presenti nel corrente caso di studio.

La larghezza della mixing zone è stata ricavata come somma della larghezza della sede autostradale, ricavata a partire dalla normativa CNR 78-1980 (vedi tabella 2.8), più 3 metri per lato; considerando la presenza di due corsie per senso di marcia si è ottenuto un valore pari a 31 metri.

Relazione finale 31-12-2005



Larghezza della corsia di marcia	3.75 m
Larghezza della corsia d'emergenza	3 m
Larghezza minima dello spartitraffico	2.6 m
Larghezza minima della banchina destra	0.7 m

Tabella 2.8: Larghezze degli elementi costituenti la sede autostradale definiti dalla normativa CNR 78-1980

I fattori di emissione in g/(km·h) per ciascun arco stradale sono stati ricavati a partire dai valori stimati nell'inventario regionale delle sorgenti emissive; tali valori, a partire dai volumi di traffico da casello a casello, determinano le emissioni inquinanti orarie lungo tutto l'arco dell'anno dovute a automobili, autobus, mezzi leggeri (<3.5 t) e pesanti (>3.5 t). Tali stime, in particolare, sono state ottenute valutando i contributi relativi a scarichi dei veicoli, consumo dei freni e dei pneumatici, abrasione dell'asfalto. I fattori di emissione così ottenuti non tengono in considerazione i motocicli, risultano comunque affidabili in quanto la percentuale di motocicli risulta molto ridotta rispetto al totale e quindi trascurabile.

Considerando un volume medio di traffico di 5000 veicoli/h (come suggerito da analisi dei dati di traffico di Autostrade S.p.A. nella zona d'indagine [2.18]), sono stati ricavati i fattori di emissioni in termini di g/(mi·veicolo·h) relativi a ciascun tratto autostradale da casello a casello, così come richiesto dal modello.

A seguire vengono riportati i grigliati delle emissioni lineari in Mg/(km·anno) ottenuti a partire dai dati dell'inventario regionale delle sorgenti emissive relativamente ai tre differenti inquinanti considerati.



*Figura 2.7: Mappa delle emissioni totali annue di PM*₁₀ *delle autostrade A1-A11*





Figura 2.8: Mappa delle emissioni totali annue di NO_X delle autostrade A1-A11



Figura 2.9: Mappa delle emissioni totali annue di SO_X delle autostrade A1-A11

2.3.4 Altri parametri generali di esecuzione

I parametri generali di esecuzione da fornire al modello CALINE4 sono suddivisibili in 3 categorie:

- dati territoriali
- posizionamento dei recettori
- definizione degli inquinanti trattati

Per quel che riguarda i dati territoriali il modello matematico richiede per ogni sottodominio due parametri: il coefficiente di rugosità e l'altitudine. Tali dati sono stati ricavati per ciascuno dei 24 sottodomini considerati, mediando i dati rispettivamente del CORINE/LAND-COVER 2000 e del DTM dell'archivio cartografico della regione toscana con risoluzione a 100 metri.

Il posizionamento dei recettori è stato invece ottenuto a partire da un grigliato di calcolo a maglia quadrata di lato 1 km collocato a 10 m di altezza dal suolo; in questo modo si è ottenuto un reticolato di 1960 punti di rilevamento distanziati tra di loro di 1 km.

Per quanto riguarda la definizione dei differenti inquinanti analizzati, NO_x e SO_x sono stati trattati come inquinanti inerti gassosi con velocità di sedimentazione V_s e di deposizione secca V_{dep} imposte pari a 0 cm/s, come suggerito dal manuale utenti di CALINE4 [2.10]; il PM₁₀, invece è stato trattato come inquinante particolato, con valori di V_{dep} e V_s pari rispettivamente a 0.2 cm/s e 0.01 cm/s; tali valori sono stati scelti facendo riferimento ad un ampia ricerca bibliografica riportata in [2.19].

2.3.5 Pre- e post-processing dei dati

Data la notevole mole di dati da analizzare, è stato necessario integrare CALINE4 con alcuni programmi sviluppati in ambiente Matlab, ciò ha permesso di rendere più semplici ed automatiche le elaborazioni effettuate. In questo modo è stato possibile estrapolare dai numerosi dati forniti solo quei parametri effettivamente necessari per la creazione dei file di input.

Per prima cosa sono stati ricavati i parametri meteo necessari per la valutazione delle concentrazioni annuali della zona analizzata; sono stati infatti forniti 8568 valori orari per le diverse 24 stazioni meteo. Da tali dati sono stati estrapolati i valori relativi ai parametri meteorologici necessari.

Sono stati poi analizzati ed elaborati i dati di emissione degli inquinanti nelle autostrade. In particolare, i dati forniti sono relativi alle emissioni da casello a casello. Tali valori sono stati valutati, attraverso opportuni pesi, in base al mese, al giorno e all'ora dell'emissione. Per ogni tratto autostradale, grazie all'ausilio di Matlab, che ha permesso una veloce elaborazione di tutti questi valori, sono stati ricavati i fattori di emissione relativi agli inquinanti analizzati.

L'area in analisi è stata suddivisa in 24 zone, ad ognuna delle quali fanno riferimento parte dei 1960 recettori già citati sopra, posizionati ad una quota di 10 metri, ai quali ne sono stati aggiunti 17, ad una quota di 3 metri dal suolo, relativi alle stazioni di rilevamento di qualità dell'aria presenti nella zona (v. tabella 2.9).

Come è possibile notare dalla tabella 2.9 la maggior parte delle zone comprende più di 20 recettori, limite imposto per l'operatività di CALINE4. Proprio per questo è nata la necessità di suddividere ulteriormente l'area, per un totale di 48 sottozone. A questo punto sono stati creati 8568 files di input per ogni sottozona e per ogni inquinante.

Relazione finale 31-12-2005



Zona	N°recettori	Zona	N°recettori	Zona	N°recettori
1	20	9	15	17	56
2	25	10	58	18	39
3	16	11	28	19	36
4	22	12	32	20	34
5	35	13	51	21	30
6	22	14	28	22	35
7	30	15	40	23	9
8	52	16	54	24	13

Tabella 2.9: Assegnazione recettori alle varie sottozone in CALINE4

Per ricostruire i campi di concentrazione media oraria e annuale su tutto il dominio di studio si è resa necessaria l'implementazione di un ulteriore programma MATLAB.



Figura 2.10: Procedura di applicazione del modello CALINE4

Nel diagramma precedente (fig. 2.10) è mostrato lo schema a blocchi utilizzato nell'applicazione di CALINE4 al caso in esame; vi sono illustrati nel dettaglio tutte le fasi di elaborazione e formattazione dei parametri necessari alla creazione del file di input fino ad arrivare all'estrapolazione degli output desiderati, e quindi alla creazione di mappe di isoconcentrazione relative ai tre inquinanti considerati (NO_x , SO_x , PM_{10}).

2.4 SAFE AIR

2.4.1 Descrizione generale

Il modello SAFE AIR II (*Simulation of Air pollution From Emissions Above Inhomogeneous Regions, version II*) è un'evoluzione del modello AVACTA II, il quale era uno dei modelli raccomandati dall'US EPA e dal Ministero della Salute, e la versione I del modello è stata adottata ufficialmente dalla regione Liguria per la pianificazione regionale. SAFE AIR II è inoltre incluso nel Model Documenation System dell'Agenzia Ambientale Europea [2.9]. Esso si compone essenzialmente di tre parti: due pre-processori meteorologici (WINDS, *Wind-field Interpolation by Non-Divergent Schemes*; ed ABLE, *Acquisition of Boundary Layer parameters*) ed un codice di calcolo che simula i processi di dispersione e trasporto (P6, *Program Plotting Paths of Pollutant Puffs and Plumes*).

WINDS [2.20] è un modello basato sulla conservazione della massa sviluppato dal Dipartimento di Fisica dell'Università di Genova, e permette di costruire un campo di vento tridimensionale in due fasi: per cominciare viene costruito un campo di vento iniziale, attraverso una procedura di interpolazione partendo dai dati disponibili sul vento in alcuni punti dati; successivamente si ha una fase di aggiustamento per il raggiungimento di un campo di vento non divergente. Il modello permette di prendere in considerazione i seguenti fenomeni: effetti cinetici dovuti all'orografia complessa, effetti di scabrezza, variazioni nella scabrezza (strato limite rugoso), variazioni nella velocità del vento dovute alla forza di Coriolis, effetti causati dalle condizioni di stabilità dell'atmosfera, etc.

Il modello ABLE [2.21], non incluso nella versione precedente di SAFE AIR, calcola la distribuzione orizzontale di parametri micrometeorologici quali l'altezza di mescolamento, la lunghezza di Monin-Obukhov, la velocità di trascinamento, la lunghezza convettiva di scala, partendo da variabili meteorologiche di routine.

Il codice P6 [2.22] è basato sull'equazione gaussiana standard, ma consente accurate simulazioni numeriche in condizioni sia di emissioni non stazionarie che di emissioni non omogenee (ad esempio nel caso di orografia complessa).

L'emissione alla fonte è suddivisa in una serie di elementi (che possono essere trattati sia come pennacchi, nella fase di trasporto, che come puff, nella fase di dispersione) connessi tra loro, la cui dinamica è legata alle locali condizioni meteorologiche. La dinamica di un dato elemento si compone quindi delle seguenti fasi: generazione alla sorgente, innalzamento del pennacchio, trasporto avvettivo (utilizzando WINDS), diffusione turbolenta, eventuali trasformazioni chimiche che danno origine ad inquinanti secondari a partire da una data percentuale di inquinante primario, eventuale deposizione al suolo (umida o secca), eventuale ricaduta delle particelle grossolane a causa della forza di gravità.

P6 è principalmente studiato per la simulazione di sorgenti emissive multiple puntuali, anche se



possono essere ottenute anche simulazioni di sorgenti areali, lineari e volumetriche.

I principali input per P6 sono: dati altimetrici del terreno, caratteristiche delle sorgenti e dei recettori, classi di stabilità orizzontali e verticali (ad esempio quelle calcolate da ABLE), componenti tridimensionali del vento (ad esempio quelle fornite da WINDS), altezza di mescolamento, rateo di trasformazione chimica, parametri di deposizione secca ed umida, velocità di deposizione, temperatura ambiente. Inoltre P6 permette di selezionare differenti formule per il calcolo dell'innalzamento del pennacchio e dei coefficienti di dispersione, e differenti impostazioni sulla riflessione sia al suolo che al bordo dello strato di miscelamento.

Il modello si basa sulla formula gaussiana standard. Quest'ultima risulta vantaggiosa soprattutto per la sua semplicità e per la necessità di pochi dati in ingresso. Essendo, però, una formula stazionaria, essa è valida solo in condizioni di trasporto (ad esempio per U \geq 1 m/s), per situazioni all'incirca stazionarie ed omogenee. Per aggirare queste limitazioni sono stati sviluppati due differenti metodi (v. figura 2.11):

- il modello segmented-plume che, comunque, necessita ancora di condizioni di trasporto;
- il modello a puff, che funziona anche in condizioni di calma di vento o comunque vento scarso.

Entrambi i metodi prevedono la frammentazione del pennacchio in elementi (puff o segmenti) la cui dinamica è funzione delle condizioni locali (variabili nel tempo).

In particolare P6 opera una suddivisione dell'inquinante emesso in una serie di elementi, segmenti o puffs, uniti insieme, ma le cui dinamiche sono funzione delle condizioni meteorologiche locali; poiché i parametri meteorologici possono cambiare sia nello spazio che nel tempo, ciascun elemento si sviluppa in accordo alle diverse condizioni incontrate lungo la sua traiettoria. La catena di elementi risultante fornisce una migliore descrizione del processo di dispersione rispetto al pennacchio rigido, caratteristico del modello gaussiano tradizionale, principalmente in condizioni non-omogenee e non-stazionarie. P6 contiene una tecnica di suddivisione mista segmento-puff, tale da ottimizzare l'impiego dei due approcci: mentre la ripartizione in segmenti dell'inquinante emesso fornisce una rapida simulazione numerica della dispersione della sostanza vicino alla sorgente in condizioni di trasporto, la suddivisione in puffs consente una più accurata simulazione della diffusione sia lontano dalla sorgente, che in condizioni di calma di vento.





Figura 2.11: Rappresentazione a puff e a segmenti in SAFE AIR

Ai fini del presente studio i dati meteorologici sono stati pre-elaborati attraverso il modello CALMET (dal gruppo di ricerca del LaMMA), di cui, però, non avevamo i dati relativi all'intero dominio di studio. In questo modo, comunque non è risultato necessario l'utilizzo del pre-processore ABLE, in quanto i rilevanti parametri micrometeorologici erano già disponibili.

Anche in questo caso i dati di input possono essere suddivisi in tre categorie, che verranno trattate separatamente nei paragrafi successivi:

- Dati meteorologici
- Caratteristiche di emissione delle sorgenti (geometria delle sorgenti, fattori di emissione)
- Parametri generali di esecuzione (dati territoriali, posizionamento dei recettori, inquinanti considerati, ecc...).

2.4.2 Dati meteorologici di input

I dati a nostra disposizione sono stati ricavati tramite elaborazioni del modello CALMET effettuate da LaMMA e si riferivano a misure meteorologiche elaborate su base media oraria (condizione tipica di archiviazione dei dati meteorologici impiegata dai gestori dei sistemi di monitoraggio). I dati si riferiscono alle 24 stazioni meteo virtuali descritte nel paragrafo 2.3.2, ma a causa di limitazioni imposte dal codice WINDS siamo stati costretti a ridurre tale numero a 8 elementi (v. figura 2.12); effettuando però una selezione accurata delle stazioni, cercando cioè di coprire il

Università degli Studi di Firenze -Dipartimento di Energetica - Sergio Stecco

Relazione finale 31-12-2005

territorio di indagine nel modo più omogeneo possibile, questa limitazione non ha pregiudicato la attendibilità della nostra simulazione. Si è resa necessaria, comunque, la ricostruzione del campo di vento tridimensionale tramite il modello WINDS per avere una meteorologia più dettagliata nel dominio di studio.



Figura 2.12: Localizzazione delle stazioni meteo virtuali per le simulazioni con SAFE AIR

Per la stima delle condizioni di trasporto e diffusione di inquinanti in atmosfera, il modello SAFE AIR necessita della determinazione dei seguenti parametri meteorologici:

- velocità del vento
- direzione del vento
- classe di stabilità atmosferica secondo Pasquill
- altezza di mescolamento
- temperatura ambiente

Il codice WINDS utilizza soltanto i primi tre di questi parametri; gli altri vengono sfruttati dal codice P6. Tutti i parametri erano quindi disponibili nei dati originari forniti dal LaMMA o sono stati ricostruiti tramite il modello WINDS.

2.4.3 Dati di input relativi alle sorgenti emissive

Come già specificato precedentemente, con SAFE AIR si è simulata la dispersione di inquinanti da due tipologie di sorgenti: le puntuali e le lineari.

Le sorgenti puntuali individuate come tali dall'inventario regionale delle sorgenti emissive (IRSE) all'interno del dominio di studio sono 87, facenti parte di 15 diversi impianti industriali, localizzati nella mappa di figura 2.13.

Università degli Studi di Firenze -Dipartimento di Energetica - Sergio Stecco



Relazione finale 31-12-2005



Figura 2.13: Localizzazione delle sorgenti puntuali

Il codice P6 richiede le seguenti caratteristiche per ogni sorgente:

- coordinate nel sistema UTM
- altezza e diametro del camino
- fattore di emissione
- temperatura e velocità del gas in uscita

Tutti i precedenti parametri sono stati ricavati direttamente dall'Inventario Regionale delle Sorgenti Emissive (IRSE), ma fra questi il fattore di emissione ha richiesto un lavoro supplementare. Era nota infatti, per ogni sorgente, la quantità di inquinante emessa durante tutto l'arco dell'anno; è stata quindi necessaria l'elaborazione di un algoritmo in ambiente Matlab che ci ha permesso di ricavare un fattore di emissione orario diverso per ogni ora dell'anno, attribuendo pesi differenti (anch'essi forniti dall'IRSE) al variare del mese, del giorno e dell'ora.

Per quel che riguarda le sorgenti lineari, esse sono state già descritte nel paragrafo 2.3.3. Nelle simulazioni con SAFE AIR, la stessa schematizzazione (geometria analoga e suddivisione in 79 tratti lineari) è stata effettuata.

Successivamente, in accordo con i principi su cui si basa il modello, ognuno dei 79 tratti è stato assimilato ad un certo numero di sorgenti puntuali; il modello SAFE AIR, infatti, per simulare la dispersione di inquinanti in atmosfera da sorgenti lineari, applica il principio di sovrapposizione degli effetti, considera cioè una sorgente lineare come un insieme di sorgenti puntuali indipendenti tra loro. Il diametro di ogni sorgente è stato fissato in base alla larghezza della sede stradale individuata come specificato in 2.3.3 (v. anche tabella 2.8).

In prima analisi le sorgenti sono state posizionate una accanto all'altra, distanziando quindi due elementi successivi di una lunghezza pari al diametro (figura 2.14a). Utilizzando questa configurazione. però, il tracciato complessivo veniva rappresentato da quasi 3000 sorgenti e il



tempo computazionale per l'intera simulazione risultava eccessivo.

È stato deciso quindi di utilizzare la configurazione descritta dal manuale utenti di SAFE AIR, il quale, nel caso di dominio esteso, consiglia di collocare due sorgenti successive ad una distanza al massimo pari a due volte il diametro (figura 2.14b).



Figura 2.14: Schematizzazione di una sorgente lineare in SAFE AIR

La velocità di uscita del gas è stata imposta uguale a zero mentre la sua temperatura è stata imposta uguale a quella ambiente. La motivazione di questa scelta è basata sul fatto che le emissioni dovute al traffico veicolare hanno comportamenti neutri. In esse, infatti, i due contributi che causano l'innalzamento del pennacchio (spinta cinetica e spinta di galleggiamento) sono circa uguali a zero. L'altezza di emissione rispetto al terreno è stata posta uguale a zero.

I fattori di emissione per ciascuna sorgente sono stati ricavati secondo la procedura descritta in 2.3.3, risuddividendo l'emissione per ogni sorgente puntuale.

2.4.4 Altri parametri generali di esecuzione

I parametri generali di esecuzione per SAFE AIR sono divisibili in quattro categorie:

- dati territoriali
- posizionamento dei recettori
- definizione degli inquinanti trattati
- parametri di dispersione

Per quel che riguarda i dati territoriali il modello matematico richiede la distribuzione all'interno del dominio di due parametri: il coefficiente di rugosità e l'altitudine. Tali dati ci sono stati forniti dal LaMMA e fanno riferimento all'archivio dati regionale.

Il posizionamento dei recettori anche in questo caso è stato ottenuto a partire da un grigliato di calcolo a maglia quadrata di lato 1 km collocato a 10 m di altezza dal suolo; in questo modo si è ottenuto un reticolato di 1960 punti di rilevamento distanziati tra di loro di 1 km.

Per quanto riguarda la definizione dei differenti inquinanti analizzati, NO_X e SO_X sono stati trattati come inquinanti inerti gassosi con velocità di sedimentazione V_s e di deposizione secca V_{dep} imposte pari a 0 cm/s, come suggerito dal manuale utenti di SAFE AIR; il PM₁₀, invece è stato trattato come



inquinante particolato, con valori di V_{dep} e V_s pari rispettivamente a 0.2 cm/s e 0.01 cm/s; tali valori sono stati scelti facendo riferimento ad un ampia ricerca bibliografica riportata in [2.19].

I valori iniziali delle funzioni- σ (orizzontale e verticali sotto e sopra il centro dell'elemento del pennacchio) utilizzati nella simulazione sono stati calcolati mediante il valore di default suggerito per sorgenti puntuali da SAFE AIR, cioè 0,369·DS (dove DS è il diametro della sorgente) per tutti e tre i parametri. Questi però non va ad influenzare in modo determinante i valori e gli andamenti delle concentrazioni stimate con l'applicazione di SAFE AIR.

Particolare attenzione merita la scelta delle funzioni- σ , in quanto solitamente questi sono gli elementi che influenzano maggiormente la simulazione dei fenomeni di diffusione in atmosfera [2.23] essendo calcolati tramite relazioni empiriche che fanno riferimento a diverse condizioni ambientali di emissione. Fra le varie opzioni abbiamo deciso l'utilizzo delle funzioni- σ di Pasquill-Gifford-Turner preferendole a quelle di Brookhaven; le prime, infatti, sono ricavate per bassi valori di altezza della sorgente dal suolo (come si verifica nel presente caso di studio, in cui la superficie di emissione più alta si trova ad una altezza di 71 m da terra), mentre le seconde sono ricavate per sorgenti ad alta quota (maggiori di 100 m). Tale scelta appare maggiormente giustificata per le sorgenti lineari che hanno quota di emissione pari a 0.

2.4.5 Pre- e post-processing dei dati

Analogamente a quanto visto per CALINE4, anche in questo caso, data la grande mole di dati di input e di output, si è resa necessaria l'implementazione di diversi programmi elaborati in ambiente MATLAB che facessero da interfaccia per il modello. Lo schema è visualizzato in figura 2.15.

2.5 ADMS-Urban

ADMS-Urban (Atmospheric Dispersion Modelling System) è un modello sviluppato specificatamente per simulare la dispersione di inquinanti nelle aree urbane. È in grado di simulare fino a 6000 sorgenti contemporaneamente, tra le quali: più di 70000 tratti stradali (1500 sorgenti lineari con fino a 50 tratti rettilinei ciascuna), fino a 1500 sorgenti industriali (puntuali, lineari, areali o volumetriche) e una sorgente areale diffusa a griglia (fino a 3000 celle).

Il modello è basato principalmente sulla formula gaussiana classica, pur essendo un modello di seconda generazione (trattamento avanzato della meteorologia mediante parametri micrometeorologici e possibilità di simulare condizioni di orografia complessa). Inoltre include moduli per il calcolo dell'effetto canyon (microscala) ed alcuni semplici schemi chimici.

Una sola stazione meteorologica può essere utilizzata per le simulazioni. Per questo motivo è stato scelto uno dei punti virtuali derivanti dalle simulazioni con CALMET descritti nei paragrafi precedenti. Il punto è posizionato grosso modo al centro del dominio, nei pressi dell'intersezione tra A1 e A11. Il pre-processore di ADMS-Urban è comunque in grado di ricostruire il campo tridimensionale delle variabili meteorologiche di interesse.

Per quel che riguarda le sorgenti emissive (puntuali e lineari) valgono le stesse procedure di calcolo viste in precedenza per CALINE4 e SAFE AIR. I fattori di emissione delle sorgenti areali diffuse sono anch'essi derivati dall'IRSE. Purtroppo non è possibile in ADMS-Urban specificare dei profili di variazione dell'emissione diversi per ogni cella e quindi è stato necessario applicare una variazione mediata sul dominio spaziale.





Figura 2.15: Procedura di applicazione del modello SAFE AIR

Relativamente ai dati orografici, di rugosità superficiale e al posizionamento dei recettori, valgono gli stessi discorsi visti per i modelli CALINE4 e SAFE AIR. Per ciò che concerne gli inquinanti e i parametri di dispersione sono state utilizzate le impostazioni di default delle librerie interne del modello. Nessuna trasformazione chimica è stata simulata.

Essendo un modello con pre-processori e post-processori integrati ed in grado di trattare tutte le tipologie di sorgenti senza aggiustamenti particolari, nessuna interfaccia è stata sviluppata per questo modello, contrariamente alle applicazioni di CALINE4 e SAFE AIR viste in precedenza.

2.6 CAMx

2.6.1 Introduzione

CAMx (Comprensive Air quality Model with eXtensions, versione 4.10, sviluppato da ENVIRON, California, 2003) è un codice numerico che risolve l'equazione di dispersione Euleriana di



inquinanti reattivi, integrata con il modello chimico e fotochimico. La scala spaziale del modello di dispersione implementato nel codice si estende dalle dimensioni urbane a quelle super-regionale.

CAMx è stato progettato in modo da raccogliere le caratteristiche migliori dei codici di simulazione sinora sviluppati: completezza della fenomenologia trattata, efficienza computazionale, facilità di gestione della complessa struttura di dati di input, disponibilità all'utenza.

La descrizione dello schema numerico di soluzione, la scrittura del sistema di equazioni fluidodinamiche, le procedure di gestione e le proprietà di analisi del codice sono riportate nel documento di descrizione fornito dalla ENVIRON [2.24].

In questo Capitolo si descrivono brevemente le caratteristiche tecniche di CAMx e l'impostazione per le simulazioni del progetto MODIVASET.

Lo schema dei componenti del codice in termini di mode	elli e algoritmi è riportato in tabella:
--	--

Fenomenologia	Modello fisico	Metodo Numerico
Trasporto e diffusione	Equazione di continuità	Schema Bott o PPM per il trasporto,
	Euleriana, chiusura <i>K-model</i>	diffusione esplicita nelle
	per la diffusione turbolenta	componenti orizzontali, implicita
		nella componente verticale
Chimica	Carbon Bond IV ; SAPRC99	Solutore ENVIRON CMC oppure
		IEH
Deposizione secca	Modello della resistenza	La velocità di deposizione a parete
	aerodinamica differenziata gas-	è la condizione al contorno per la
	aerosols	diffusione verticale.
Deposizione umida	Modello di deposizione	Funzione del rateo di pioggia,
	differenziato gas-aerosols	contenuto acqueo delle nubi,
		solubilità e diffusività,
		granulometria del particolato.

Tabella 2.10: Schema dei fenomeni fisici, modelli e algoritmi implementati in CAMx

Il modello di dispersione si risolve su un sistema di nested-grids, ovvero su una discretizzazione spaziale del dominio che è costituita da una griglia principale, o master, e da griglie secondarie che coprono sottoinsiemi della griglia principale e presentano una risoluzione spaziale multipla di questa. La capacità di nesting si estende alle tre dimensioni.

2.6.2 Modello di dispersione implementato nel codice

La base del modello è l'equazione di dispersione, scritta secondo la formulazione euleriana:

$$\frac{\partial c_l}{\partial t} = -\nabla_H \cdot V_H c_l + \left[\frac{\partial (c_l \eta)}{\partial z} - c_l \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial h}{\partial t}\right)\right] + \nabla \cdot \rho K \nabla (c_l / \rho)$$

$$+ \frac{\partial c_l}{\partial t}\Big|_{Chemistry} + \frac{\partial c_l}{\partial t}\Big|_{Emission} + \frac{\partial c_l}{\partial t}\Big|_{Removal}$$

Relazione finale 31-12-2005



I vari termini dell'equazione rappresentano la variazione di concentrazione nel tempo di una singola specie in un punto della griglia dovuta: al trasporto orizzontale e al trasporto verticale che seguono il campo di vento (i cosiddetti termini avvettivi); alla diffusione orizzontale e verticale dovuta alla turbolenza (si ricorda che la diffusione molecolare è sempre trascurata nei problemi di inquinanti atmosferici); alle trasformazioni chimiche; all'emissione dalle sorgenti presenti ed infine alla rimozione dovuta alla deposizione secca e umida. La deposizione secca non è trattata esplicitamente come un processo separato, bensì se ne tiene conto calcolando per ogni specie una velocità di deposizione che viene posta come condizione al contorno alla parete inferiore del dominio.

Il modello calcola sia le concentrazioni istantanee (ad ogni passo d'integrazione) sia quelle medie (in un periodo definito dall'utente, in genere un'ora).

Non si vuole trattare in questa sede la metodologia di soluzione numerica e del trasporto, né della diffusione né della deposizione, che sono ampiamente trattate nella letteratura specifica. Si ritiene più significativo dare un risalto maggiore a quegli elementi del modello, in particolare della cinetica chimica dell'aerosol, che sono in relazione con gli obbiettivi specifici del progetto MoDiVaSET.

Dal punto di vista numerico, l'equazione viene risolta con il metodo cosiddetto time-marching, in cui ogni soluzione è il risultato di un processo di convergenza delle soluzioni in successione temporale fittizia. A ciascun passo temporale fittizio l'equazione è risolta separatamente nelle sue componenti la cui coerenza è garantita tramite il vincolo di uniformità e costanza della densità. Il passo temporale dello schema numerico è definito internamente e dipende dalla dimensione del dominio: 5-30 minuti per griglie con celle di 10-50 km di lato, fino a 1 minuto o meno per griglie con celle da 1-2 km. In questo modo si vede che le griglie nested richiedono un sistema di passi temporali multipli, dipendentemente dalle dimensioni delle griglie rispetto alla griglia master. Inoltre anche gli algoritmi chimici seguono lo stesso criterio di time-marching e quindi richiedono multipli passi temporali per l'integrazione delle complesse equazioni. La successione delle sorgenti emissive censite nel dominio, trasporto orizzontale, alternando la direzione x ed y ad ogni passo, trasporto verticale, diffusione turbolenta, verticale ed orizzontale, deposizione umida ed infine reazioni chimiche. Esplicitando, le equazioni risolte sono:

- 1 $\frac{\partial c_l}{\partial t}|_{emissioni} = \frac{E_l \Delta t}{\partial x \partial y \partial z}$ E_l è l'emissione locale della specie µmol/s per le specie gassose e µg/s per l'aerosol; Δt è il passo temporale.
- 2 $\frac{\partial c_l}{\partial t}|_{x trasporto} = \frac{1}{A_{yz}} \frac{\partial}{\partial x} (uA_{yz} c_l)$ *u* è la componente della velocità locale lungo l'asse *x*;

Ayz è l'area della cella proiettata sul piano yz.

- 3analogamente per la componente y
- 4 $\frac{\partial c_l}{\partial t}|_{z \text{ trasporto}} = \frac{\partial}{\partial z} (\eta c_l) c_l \frac{\partial}{\partial z} (\frac{\partial h}{\partial t})$ dove *h* è l'altezza della cella locale ed η è detto "entrainment-rate", definito come la combinazione della velocità verticale netta e della variazione temporale dell'altezza della cella $\eta = \frac{\partial h}{\partial t} - w$
- 5 $\frac{\partial c_l}{\partial t}|_{z \text{ diffusione}} = \frac{\partial}{\partial z} \left[\rho K_z \frac{\partial}{\partial z} (c_l / \rho) \right]$ Kz è il coefficiente di diffusività turbolenta

nella direzione verticale

$$6 \quad \frac{\partial c_l}{\partial t}|_{xy \, diffusione} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho K_x \frac{\partial}{\partial x} (c_l / \rho) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\rho K_y \frac{\partial}{\partial y} (c_l / \rho) \right] \qquad Kx \quad e \quad Ky \quad \text{sono} \quad i$$

coefficienti di diffusività turbolenta nelle componenti orizzontali

7 $\frac{\partial c_l}{\partial t}|_{deposizione umida} = -\Lambda_l c_l$ Λ è il rate di deposizione umida in s⁻¹.

8
$$\frac{\partial c_l}{\partial t}|_{trasformazioni chimiche} = reazioni chimiche$$

Come è evidente dal termine 4, CAMx introduce una componente verticale della velocità, che non compare di solito nei campi di vento riprodotti dai processori meteorologici comuni (MM5 o RAMS). In sostanza il codice calcola localmente una componente verticale di velocità derivata dalla soluzione locale dell'equazione di continuità (che esprime la legge di conservazione della massa) relativamente alla griglia scelta. L'equazione è risolta tramite un'integrazione in z:

$$\rho w(z) = -\int_{0}^{z} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_{H} (\rho V_{H}) \right) d\tilde{z}$$
 in cui le variabili di integrazione sono tutte note dai dati di

input meteorologici.

Per la risoluzione dei termini di trasporto, si vuole ricordare che sono stati implementati gli schemi Bott e PPM in sostituzione dell'originale ma ormai obsoleto Smolarkiewicz [2.25]. Infatti, oltre ad una maggiore velocità, questi due nuovi metodi introducono dei termini diffusivi assai più limitati rispetto allo schema Smolarkiewicz in cui la diffusione numerica è dello stesso ordine di quella turbolenta (fisica) e pertanto introduce errori rilevanti [2.26].

La trattazione dei termini diffusivi orizzontali segue la definizione dei coefficienti diffusivi introdotta da Smagorinsky [2.27] e ancora largamente efficiente nei casi di modellistica atmosferica.

Successivamente al calcolo dei termini di trasporto e diffusivi orizzontali, sono calcolati quelli verticali. Essi sono risolti con uno schema implicito e nel termine diffusivo i coefficienti di diffusività turbolenti sono introdotti direttamente come input meteorologico (almeno per la griglia master).

2.6.3 Grid nesting

Il solutore numerico risolve il sistema di equazioni sulle griglie che discretizzano il dominio: una griglia principale, master, e le griglie secondarie che "si appoggiano" alla master e di cui costituiscono un raffinamento. Sulla griglia le variabili fluidodinamiche sono organizzate e distribuite nella cosiddetta configurazione "Arakawa C". In figura 2.16 è riportata questa configurazione sul piano orizzontale:





In modo analogo sono organizzate le variabili sulla verticale (nel centro dello strato, tranne quelle variabili che descrivono il rateo di trasporto di massa attraverso le facce degli strati, quali il coefficiente di diffusività e l'entrainment rate).

La possibilità di creare un sistema di griglie nested permette di simulare il trasporto in regioni estese e focalizzare l'analisi dell'impatto a sub-regioni selezionate opportunamente sul piano orizzontale. Nella direzione verticale il nesting è possibile ma solo se esteso a tutta l'altezza della griglia master.

È importante menzionare che la possibilità di creare il nesting è flessibile durante l'intera simulazione, e può essere innestato o rimosso dall'operatore ogni volta che viene scelto di operare in "restart", ovvero le condizioni di qualità dell'aria risultanti da una simulazione vengono interpretate come condizioni iniziali per la simulazione successiva, in cui appunto si può implementare un nuovo sistema di griglie nested.

2.6.4 Chimica

I meccanismi chimici implementati in CAMx sono di tipo ridotto, nel senso che rappresentano uno schema semplificato rispetto ai meccanismi espliciti, che invece tengono conto di un gran numero di reazioni, descrivendo in maniera molto più dettagliata la chimica "reale". Tali schemi sono però raramente utilizzati, perché dal punto di vista computazionale implementarli in un modello di dispersione tridimensionale sarebbe proibitivo, in quanto richiederebbe (ancora oggi) tempi di calcolo troppo onerosi per le risorse correnti di utenti esterni ai centri di ricerca. Per questo sono stati sviluppati i meccanismi ridotti, che con un numero di reazioni non molto elevato e raggruppando le specie coinvolte in categorie (lumping), descrivono in maniera semplificata la chimica dell'atmosfera.

In CAMx sono disponibili alcuni meccanismi, differenti per capacità computazionali e specifici fenomeni trattati. Li ricordiamo brevemente, omettendo alcuni meccanismi che risultano connessi o derivati dai seguenti:



•SAPRC99 [2.28] [2.29]: 211 reazioni, 74 specie (56 gas, 18 radicali)

Le specie chimiche vengono raggruppate secondo molecola: composti appartenenti alla stessa famiglia e con reattività simile sono riunite in categorie. Ad esempio gli alcani e gli alcheni sono rappresentati dalle categorie ALK1-ALK5 e OLE1-OLE2 a seconda del peso molecolare medio. Non ne diamo una più approfondita descrizione, in quanto per le simulazioni oggetto di questo lavoro è stato impiegato il secondo meccanismo:

•CBIV-4 [2.28] [2.30] [2.31]: 100 reazioni, 46 specie (34 gas, 12 radicali)

Le specie chimiche selezionate per le reazioni sono gli inquinanti di cui tratta la normativa e quelli comunque di maggiore interesse, alcune molecole che si formano come prodotti intermedi delle reazioni e tutti gli inquinanti gassosi emessi da sorgenti antropogeniche e non, tra cui i COV trattati secondo uno specifico schema di lumping. Il raggruppamento dei COV è fatto secondo struttura: le molecole delle varie specie (organiche) vengono "scomposte", secondo i tipi di legame presenti, in sottospecie più elementari e sono queste entità ad essere considerate nel meccanismo. PAR: è la categoria che rappresenta, appunto, le paraffine (anche detti alcani), chimicamente già definite come gruppo di composti organici a legame C-C (singolo legame), quindi una grande quantità di composti, con variabile numero di atomi di Carbonio. Chiaramente la paraffina più semplice è il metano, ad un solo atomo di Carbonio. La caratteristica di questi composti, dal punto di vista a noi interessante, è la bassa reattività, dovuta appunto alla presenza del legame singolo (sigma, forte). OLE: è la categoria formata da composti organici antropogenici a legami doppi C = C, quindi caratterizzati da una reattività maggiore delle paraffine. OLE2: è esattamente la medesima categoria di OLE ma emessa da sorgenti naturali. Riguardo a questi inquinanti guinanti simulati.

Chimica gassosa

Nella tabella 2.11 riportiamo le 34 specie gassose considerate nel modello reattivo CBIV, versione 4.

Le reazioni chimiche della fase gassosa coinvolgono le sostanze sopra elencate in reazioni i cui coefficienti sono dipendenti dalle condizioni termodinamiche e fisiche dell'atmosfera nell'intervallo di simulazione (temperatura e pressione in genere, tranne che per le reazioni di fotolisi, vedi dopo). Lo schema delle reazioni e i coefficienti sono presentati e discussi nella letteratura relativa, pertanto non si ritiene necessario discuterne in questa sede. Tra le reazioni della fase gassosa sono comprese le reazioni di fotolisi (12), i cui coefficienti dipendono dalle variabili dell'interazione tra radiazione solare e atmosfera, quali la declinazione solare, lo spessore della colonna d'ozono, l'albedo superficiale e la torbidezza atmosferica. I coefficienti delle reazioni di fotolisi sono in forma tabella di lookup che viene consultata dal codice durante l'esecuzione del calcolo e nella quale sono riportati i profili verticali dei coefficienti in funzione delle ultime 3 variabili meteorologiche, che variano su intervalli ben definiti.

Ai fini della presentazione dell'applicazione del codice CAMx è importante ricordare che per il lavoro in oggetto sono stati impiegati i valori di default, sia per i rates delle reazioni chimiche che foto-chimiche della fase gassosa. Nel caso in cui l'operatore intenda modificare questo default, è possibile farlo modificando il codice per le reazioni chimiche e utilizzare il preprocessore TUV [2.32] [2.33] per le reazioni fotochimiche.

Relazione finale 31-12-2005



1	No		
1	NO	Monossido di azoto	
2	NO2	Biossido di azoto	
3	03	Ozono	
4	PAN	Perossiacetilnitrati	
5	NXOY	Altri ossidi Di azoto	
6	OLE	Legami olefinici C=C	
7	PAR	Legami paraffinici C-C	
8	TOL	Toluene e gruppi –C6H4-CH3	
9	XYL	Xileni e gruppi –C6H3-(CH3)2	
10	FORM	Formaldeide e gruppo–CO-H	
11	ALD2	Acetaldeide e Gruppo –CO-CH3	
12	ETH	Etilene	
13	CRES	Cresoli e fenoli	
14	MGLY	Metilgliossale	
15	OPEN	Frammenti di ossidazione anelli aromatici	
16	PNA	Acido perossinitrico	
17	СО	Monossido di carbonio	
18	HONO	Acido nitroso	
19	H2O2	Perossido di idrogeno	
20	HNO3	Acido nitrico	
21	ISOP	Isoprene	
22	МЕОН	Metanolo	
23	ЕТОН	Etanolo	
24	ISPD	Prodotti di Reazione Isoprene	
25	NTR	Prodotti di reazione Nitrati organici	
26	SO2	Anidride solforosa	
27	SULF	Acido solforico	
28	NH3	Ammoniaca	
29	HCL	Acido cloridrico	
30	OLE2	Terpeni e Alcheni biogenici	
31	CG1	Gas organici condensabili	
32	CG2		
33	CG3	"	
34	CG4	.،	

Tabella 2.11: Specie chimiche gassose trattate nel modulo chimico CBIV

Chimica aerosols

Per la modellazione dell'aerosol il meccanismo CBIV.4 ne risolve le reazioni in cascata alle reazioni gassose nelle quali sono state calcolate le quantità di alcuni precursori dell'aerosol.

CBIV.4 fornisce due possibilità per le distribuzioni granulometriche dell'aerosol: lo schema CF e il CMU.

1 CF suddivide le particelle in coarse e fine, secondo una suddivisione delle dimensioni che corrispondono anche, parzialmente, alla loro origine in quanto le particelle primarie sono coarse/fine e quelle secondarie solo fine.



2 CMU permette di elaborare un'evoluzione delle dimensioni delle particelle tra un certo numero di dimensioni predefinite. L'operatore definisce il numero di dimensioni e il loro valore.

Le specie chimiche di aerosol, ridistribuite e raggruppate in categorie, sono riassunte nella seguente tabella:

1	PNO3	Nitrati
2	PSO4	Solfati
3	PNH4	Ammonio
4	POA	Particolato organico primario
5	SOA1	Particolato organico secondario
6	SOA2	دد
7	SOA3	
8	SOA4	دد
9	PEC	Carbonio elementare primario
10	FPRM	Altro particolato primario < 2.5 μ m
11	FCRS	Particolato naturale fine
12	CPRM	Altro particolato primario > 2.5 μ m e < 10
		μm
13	CCRS	Particolato naturale grosso
14	NA	Sodio
15	PCL	Cloro

Tabella 2.12: Specie chimiche particellari trattate nel CB-IV.4

Ovvero:

- particolato antropogenico organico: carbonio elementare primario (PEC) e particolato organico altro dal carbonio elementare, sia primario (POA) che secondario (SOA)
- particolato antropogenico inorganico: solfati (PSO4), nitrati (PNO3), ammonio (PNH4), sodio (Na) e cloro (PCL)
- particolato antropogenico "altro": primario fine, ovvero < 2.5 μ m (FPRM), primario coarse, ovvero > 2.5 e < 10 μ m (CPRM)
- particolato biogenico: primario fine (FCRS, "fine crustal") e primario coarse (CCRS, "corse crustal")

Dallo schema chimico e fotochimico della fase gassosa, come si intuisce anche dalla tabella di cui sopra, le specie/categorie chimiche precursori dell'aerosol che vengono determinate sono:

p1) solfati, derivati dall'ossidazione di SO2 tramite la catena di reazioni innescata da OH

p2) nitrati (HNO3)

p3) composti organici volatili che subiscono poi la condensazione

Le routines dedicate al calcolo delle trasformazioni di aerosol nel CBIV.4 sono le seguenti:

- RADM-AQ per le reazioni acquose (Regional Acid Deposition Model),
- ISORROPIA che tratta la termodinamica/speciazione dei composti inorganici, [2.34].

- SOAP per la formazione, speciazione dell'aerosol organico: da alcune specie del CBIV vengono fatte derivare quattro specie fittizie "condensible organic gas" CG1-4, considerate precursori del particolato organico secondario, anch'esso suddiviso in quattro categorie (SOA1-4), secondo uno schema d'equilibrio in fase condensata detto SOAP (Secondary Organic Aerosol Partitioning).

Questi precursori sono sottoposti alle reazioni di formazione di aerosols tramite i seguenti meccanismi:

m1) formazione di solfati e nitrati acquosi (da p1 e p2) tramite la reazione con il contenuto acqueo delle nubi (meccanismo RADM-AQ). Questi solfati e nitrati acquosi sono essi stessi in parte aerosols ed in parte in fase gassosa, secondo la ripartizione tramite ISORROPIA (punto m2).

m2) ripartizione operata da ISORROPIA dei componenti dell'aerosol inorganico (solfati, nitrati, ione ammonio, sodio e cloruri) in porzione gassosa e porzione particellare. In questo caso, come è evidente, oltre al precursore p1 e p2 debbono intervenire altri precursori non derivanti necessariamente dal modulo gassoso, in particolare NH3, Na e Cl che sono provenienti direttamente come emissioni, Na e Cl eventualmente in composti che li contengono.

m3) trasformazione dei composti organici volatili cosiddetti "condensabili", p3, in aerosol secondario tramite il meccanismo SOAP.

emissioni VOC	VOC	Aerosol yield
originarie	condensabili	(ppm/ppm)
PAR	CG3	0.0024
OLE	CG3	0.0024
TOL	CG1	0.070
TOL	CG2	0.137
XYL	CG1	0.044
XYL	CG2	0.192
CRES	CG3	0.036
OLE2	CG4	0.136

Tabella 2.13: Frazione di COV primario o secondario che partecipa alle reazioni del meccanismoSOAP per la formazione dell'aerosol organico secondario

Come si vede PAR ed OLE sono poco condensabili perché infatti poco reattivi. E'interessante ricordare commentare il fatto che i COV più volatili non prendono ovviamente parte alla condensazione e quindi in ultima analisi alla formazione di aerosol organico, ma sono comunque molto legati alla dispersione dell'aerosol in quanto questo li veicola nell'atmosfera: il "caso" più tristemente famoso è il benzene, che viene adsorbito dalle particelle carboniose e per questo permane nella bassa atmosfera (inalata dagli essere viventi) più a lungo di ciò che comporterebbe la sua alta volatilità e diffusività.

2.6.5 Impostazione della simulazione

Si descrive in breve l'architettura del run del codice, riassumendo brevemente la funzione del file di controllo, CAMx.in, e il contenuto dei files di input/output.

Il file di controllo CAMx.in

Per l'esecuzione di un run di CAMx l'impostazione dei parametri e della struttura degli inputs ed



ouputs è supportata da un <u>file di controllo (CAMx.in)</u>. Nel file di controllo sono impostati i seguenti dati:

- Periodo della simulazione
- Time step del solutore numerico e average time del risultato
- Dimensioni della griglia
- Tipo e origine del sistema di coordinate
- Specie da simulare
- Moduli attivati/disattivati
- Percorso di ricerca degli input/output files

E' importante ricordare che CAMx funziona con un sistema di griglie di calcolo nested, ovvero si definisce una griglia di base che copre tutto il dominio di simulazione e su cui sono definite tutte le variabili meteorologiche e le emissioni. possono definire domini di simulazione.

Input files

Per un run completo il modello richiede i files riportati nell'elenco di cui sotto. Non tutti i files sono però obbligatori. Infatti è possibile utilizzare il modello in varie configurazioni operative, relative alla complessità del fenomeno che si vuole simulare: complessità dello scenario emissivo, meteorologia o inquinante che si vuole descrivere. Pertanto si possono disattivare i moduli di deposizione umida e secca, nonché il modulo chimico (cioè eseguire una simulazione di dispersione di inquinanti inerti). Inoltre non è necessario che siano presenti entrambe le tipologie di sorgenti emissive, puntuali ed areali. Nella lista che segue, in parentesi, è riportata la configurazione della simulazione che necessita l'input, quando non si tratti di un input necessario comunque:

Input meteorologici 3D

- Vento, componenti orizzontali
- Temperatura
- Pressione
- Diffusività Verticale
- Umidità Assoluta (chimica)
- Copertura Nuvolosa, Pioggia (deposizione umida; fotolisi)

Input emissivi (necessaria almeno un'emissione nel caso inerte)

- Sorgenti Puntuali
- Sorgenti Diffuse

Input fotochimici (opzionali, ma se è impostata la chimica sono tutti necessari)

- Chimica (meccanismo e parametri)
- Fotolisi (costanti cinetiche)
- Albedo, Torbidità Atmosferica, Colonna d'Ozono

Relazione finale 31-12-2005



Input qualità dell'aria

- Concentrazioni Iniziali (formato binario)
- Concentrazioni Laterali (formato binario)
- Concentrazioni al Limite Superiore (formato ASCII)

Input geografici

- Utilizzo del Terreno (formato binario)
- Orografia (le informazioni sull'orografia possono venire utilizzate per la definizione della griglia delle altezze)

Come si può notare CAMx necessita di molti dati in ingresso, complessi nella loro elaborazione e adattamento al caso di studio e di non facile reperimento. Per ottenerli sono necessari altri modelli che elaborano i dati reperibili sul territorio e forniscono a CAMx gli input necessari. Allo sviluppo di questi modelli, o preprocessori, è stata dedicata una cospicua parte del presente lavoro, sia per l'implementazione di processori esistenti da adattare alla presente applicazione, sia per lo sviluppo di processori ex-novo.

Output files

Una simulazione di CAMx fornisce i seguenti files:

- average : sono riportate le concentrazioni medie degli inquinanti specificati nel file di controllo, in tutte le celle o solo in quelle adiacenti al terreno, in un intervallo di tempo stabilito (in genere un'ora), lungo tutto l'arco della simulazione.
 - instantaneous : sono riportate le concentrazioni istantanee tridimensionali di tutti gli inquinanti presenti nel file chimico, al termine della simulazione. E' utilizzato da CAMx stesso come file di partenza nel caso di simulazioni successive.
- deposition : sono riportate le quantità depositate al suolo per ettaro, le velocità di deposizione (rimozione secca) e le concentrazioni in fase acquosa (rimozione umida) degli inquinanti specificati nel file di controllo, per ogni cella superficiale.
- altri files diagnostici, di errore e di bilanci di massa.

I primi tre set di dati vengono registrati in formato binario ed anch'essi, come gli input, devono essere elaborati con post-processori creati ad hoc per essere letti, elaborati e adattati a programmi di visualizzazione grafica o di animazione.

2.7 Bibliografia

- [2.1] CERC (2003). *ADMS-Urban, an urban air quality management system User guide version 2.0.* Cambridge Environmental Research Consultants Ltd., Cambridge, UK
- [2.2] Brandt J, Christensen JH, Frohn LM, Palmgren F, Berkowicz R, Zlatev Z (2001). Operational air pollution forecasts from European to local scale. *Atmospheric Environment* **35** (S1), S91-S98
- [2.3] Kukkonen J, Partanen L, Karppinen A, Walden J, Kartanstenpää R, Aarnio P,

Relazione finale	
31-12-2005	



Koskentalo T, Berkowicz R (2003). Evaluation of the OSPM model combined with an urban background model against the data measured in 1997 in Runeberg Street, Helsinki. Atmospheric Environment 37 (8), 1101-1112 [2.4]Soulhac L (2000). Modélisation de la dispersion atmosphérique à l'intérieur de la canopée urbaine. PhD thesis, École Centrale de Lyon [2.5] Soulhac L, Puel C, Duclaux O, Perkins RJ (2003). Simulations of atmospheric pollution in Greater Lyon an example of the use of nested models. Atmospheric Environment 37 (37), 5147-5156 [2.6]Nagendra SMS, Khare M (2002). Line source emission modelling, Atmospheric Environment 36 (13), 2083-2098 US EPA (2005). Guideline on air quality models. 40 CFR Ch.I, Appendix W to Part 51, [2.7] U.S. Environmental Protection Agency US EPA (2005). Summary description of alternative air quality models. Sito internet [2.8]http://www.epa.gov/scram001/models/other/altmodel.pdf [2.9] EEA (2005).Model Documentation Sito System. internet http://pandora.meng.auth.gr/mds/mds.php [2.10]Benson PE (1989). CALINE4 – A dispersion model for predicting air pollutant concentrations near roadways. FHWA/CA/TL-84/15, State of California, Dep. of Transportation, Division of New Technology and Research [2.11]Corti A, Lombardi L, Carpentieri M, Buiatti E, Bartolacci S, Bianchi F, Linzalone N, Minichilli F, Mancuso S (2006). Valutazione di impatto sanitario del Piano di Gestione dei Rifiuti Urbani della Provincia di Firenze. Ingegneria Ambientale, Quaderni, anno XXXIV, n. 41 Carpentieri M, Corti A (2004). Use of wind tunnel measurements of tracer dispersion [2.12] from a landfill for mathematical models validation. 9th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Garmisch-Partenkirchen, Germany, 1-4 June, 2004 [2.13] US EPA (2005). Support Center for Regulatory Atmospheric Modeling (SCRAM), sito internet http://www.epa.gov/scram001/photochemicalindex.htm [2.14]Tartaglia P (1999). L'inquinamento dell'aria da traffico stradale. Editoriale Bios [2.15] Benson PE (1982). Modifications to the Gaussian vertical dispersion parameter, σ_z , near roadways. Atmospheric Environment 16, 1399-1405 Draxler RR (1976). Determination of atmospheric diffusion parameters, Atmospheric [2.16]*Environment* **10**, 99-105 Finzi G, Brusasca G (1991). La qualità dell'aria: modelli previsionali e gestionali. Ed. [2.17] Masson, Milano

[2.18] Autostrade SpA (2005). Sito internet <u>http://www.autostrade.it/studi/studi_traffico.html</u>



[2.19]	Maggi U (2002). Studio metodologico per la valutazione delle ricadute di inquinanti da inceneritori di rifiuti. Tesi di laure in Ingegneria per l'Ambiente e il Territorio, Università degli Studi di Firenze.
[2.20]	Georgieva E, Canepa E, Mazzino A, Ratto CF. (2003). WINDS Release 4.2 User's Guide. Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Genova
[2.21]	Georgieva E, Canepa E. Ratto CF (2003). <i>ABLE Release 1.2 User's Guide</i> . Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Genova
[2.22]	Canepa E, Ratto CF (2003). <i>P6 Release 2.1 User's Guide</i> . Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Genova
[2.23]	Canepa E, Modesti F, Ratto CF (2000). Evaluation of the SAFE_AIR code against air pollution field and laboratory experiments. <i>Atmospheric Environment</i> 34 (28), 4805-4818
[2.24]	ENVIRON (2004). User's Guide Comprehensive Air Quality Model with Extensions (CAMx), Version 4.10s
[2.25]	Smolarkiewicz PK (1983). A Simple Positive Definite Advection Scheme with Small Implicit Diffusion. <i>Monthly Weather Review</i> 111 , 479-486
[2.26]	Yamartino R (2000). Refinement of Horizontal Diffusion in Photochemical Grid Models. Presented at the <i>American Meteorological Society 11th Joint Conference on the Applications of Air Pollution Meteorology with the Air and Waste Management Association</i> , Long Beach, CA, January 9-13
[2.27]	Smagorinsky J (1963). General Circulation Experiments with the Primitive Equations: I. The Basic Experiments. <i>Monthly Weather Review</i> 91 , 99-164.
[2.28]	ENVIRON (2005). UPDATES TO THE CARBON BOND 4 PHOTOCHEMICAL MECHANISM Final Report
[2.29]	Carter, W.P.L. 2000. Programs and Files Implementing the SAPRC-99 Mechanism and its Associates Emissions Processing Procedures for Models-3 and Other Regional Models. January 31, 2000. http://pah.cert.ucr.edu/~carter/SAPRC99.htm
[2.30]	Gery, M.W., G.Z. Whitten, J.P. Killus, and M.C. Dodge. 1989. A Photochemical Kinetics Mechanism for Urban and Regional Scale Computer Modeling. J. Geophys. Res., 94, 925-956
[2.31]	Tanaka PL, Allen DT, McDonald-Buller EC, Chang S, Kimura Y, Mullins CB, Yarwood G, Neece JD (2000). Development of a chlorine mechanism for use in the carbon bond IV chemistry model. <i>Journal of Geophysical Research.</i> 108 (D4), 4145-4155
[2.32]	Madronich, S. 1993. UV radiation in the natural and perturbed atmosphere, in Environmental Effects of UV (Ultraviolet) Radiation (M. Tevini, ed.), Lewis Publisher, Boca Raton, pp. 17-69
[2.33]	Madronich, S. 2002. The Tropospheric Visible Ultra-violet (TUV) model web page.



National Center for Atmospheric Research, Boulder, CO. http://www.acd.ucar.edu/TUV/.

[2.34] Pandis SN, Wexler AS, Seinfeld J.H (1993). Secondary organic aerosol formation and transport, II, Predicting the ambient secondary organic aerosol size distribution. *Atmospheric Environment* **27A**, 2403-2416