

**Aria  
modellistica  
OB09.1d/2001**

**Metodi per la pre - elaborazione di dati di ingresso ai modelli  
tridimensionali di dispersione atmosferica.**

*a cura di*

Marco Deserti, ARPA Emilia Romagna  
Elisabetta Angelino, ARPA Lombardia  
Giovanna Finzi, Università di Brescia  
Antonello Pasini, CNR, Istituto Inquinamento Atmosferico  
Gabriele Zanini, ENEA Bologna

*con la collaborazione di*

Enrico Minguzzi, ARPA Emilia Romagna  
Veronica Gabusi, Università di Brescia

**ANPA - CTN\_ACE**

Responsabile di progetto ANPA:  
Franco Desiato



Responsabile CTN\_ACE:  
Gianfranca Galliani

# Indice

<b>INTRODUZIONE.....</b>	<b>3</b>
1.1 INFLUENZA DELLE EMISSIONI E DELLE CONDIZIONI AL CONTORNO.....	4
1.2 L'INPUT METEOROLOGICO .....	9
<b>RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI DEL CAP.1.....</b>	<b>11</b>
<b>2 I DATI DI EMISSIONE RICHIESTI DA MODELLI TRIDIMENSIONALI.....</b>	<b>13</b>
2.1 GLI INVENTARI DI EMISSIONE: ASPETTI GENERALI .....	13
2.2 LE LINEE GUIDA PER LA PREDISPOSIZIONE DI INVENTARI LOCALI .....	15
2.3 LA DISPONIBILITÀ DI INVENTARI DI EMISSIONE IN ITALIA .....	16
2.3.1 <i>L'inventario nazionale delle emissioni in atmosfera</i> .....	16
2.3.2 <i>Lo stato dell'arte degli inventari di emissione locali</i> .....	17
2.4 PREPARAZIONE DEI DATI DI EMISSIONE PER UN MODELLO DI DISPERSIONE TRI-DIMENSIONALE .....	18
2.4.1 <i>Analisi dei dati esistenti</i> .....	18
2.4.2 <i>Reperimento dati di emissione mancanti</i> .....	19
2.4.3 <i>Applicazione di processori per predisposizione emissioni secondo tipo di informazioni e formato richiesti dal modello</i> .....	21
2.5 I PROFILI DI DISAGGREGAZIONE TEMPORALE E DI SPECIAZIONE .....	26
2.6 IL MODELLO DELLE EMISSIONI POEM PER MODELLISTICA FOTOCIMICA .....	29
<b>3 I MECCANISMI CHIMICI NEI MODELLI DI QUALITÀ DELL'ARIA .....</b>	<b>32</b>
<b>RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI DEL CAP. 3.....</b>	<b>34</b>
<b>4 PREDISPOSIZIONE DELLE CONDIZIONI INIZIALI ED AL CONTORNO.....</b>	<b>35</b>
4.1 L'UTILIZZO DI DATI SPERIMENTALI DI CONCENTRAZIONE.....	36
4.1.1 <i>la modulazione temporale</i> .....	36
4.1.2 <i>la estensione spaziale</i> .....	37
4.1.3 <i>il processamento delle specie chimiche</i> .....	38
4.2 L'UTILIZZO DI DATI DI CONCENTRAZIONE CALCOLATI DA UN MODELLO .....	38
4.2.1 <i>Sincronizzazione temporale</i> .....	38
4.2.2 <i>Interpolazione spaziale</i> .....	38
4.2.3 <i>Processamento delle specie chimiche</i> .....	39
4.2.4 <i>Conversione tra vari meccanismi chimici</i> .....	40
4.3 ESEMPI DI APPLICAZIONI IN ITALIA.....	41
<b>5 I MODELLI DI ULTIMA GENERAZIONE.....</b>	<b>41</b>
5.1 I MODELLI METEOROLOGICI PER I MODELLI DI QUALITÀ DELL'ARIA .....	42
5.2 I MODELLI OPERATIVI DI QUALITÀ DELL'ARIA .....	43
5.3 I MODELLI MULTISCALA .....	44
5.3.1 <i>Sistemi di coordinate</i> .....	44
5.3.2 <i>Tecniche di nesting</i> .....	45
5.4 I MODELLI MULTIPROCESSO .....	46
5.4.1 <i>la modellazione dell'aerosol atmosferico</i> .....	47
5.4.2 <i>Deposizione e rimozione</i> .....	52
<b>RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI DEI CAPP. 4 E 5 .....</b>	<b>54</b>
<b>ANNESSO 1 IL MODELLO PER LE EMISSIONI POEM.....</b>	<b>55</b>
<b>ANNESSO 2 I MECCANISMI CHIMICI NEI MODELLI DI QUALITÀ DELL'ARIA.....</b>	<b>55</b>
<b>ANNESSO 3 LA MODELLAZIONE DEGLI AEROSOL .....</b>	<b>55</b>

## Introduzione

Questo rapporto esamina i principali metodi per la pre-elaborazione di dati di ingresso ai modelli tridimensionali di qualità dell'aria utilizzati per la trattazione di scenari di inquinamento legati alla formazione e dispersione di inquinanti secondari.

Questo scenario di riferimento viene identificato nel rapporto RTI CTN\_ACE 4/2001 “linee guida per la selezione e l'applicazione dei modelli di dispersione atmosferica per la valutazione della qualità dell'aria” come “scenario 3” e si riferisce a quei processi di inquinamento che si manifestano su scale spaziali estese (dell'ordine delle centinaia di Km<sup>2</sup>). La complessa struttura spaziale e la natura fortemente non lineare dei processi che portano alla formazione e dispersione di inquinanti secondari, quali ozono, ossidanti fotochimici e particolato fine, rendono necessario applicare a questo scenario modelli 3D euleriani fotochimici.

I dati di ingresso principali richiesti dai modelli fotochimici tridimensionali sono i dati meteorologici, i dati di emissione e chimici, i dati territoriali e le condizioni iniziali ed al contorno.

I dati di emissione devono riprodurre le emissioni dei singoli inquinanti o gruppi di inquinanti trattati dal meccanismo chimico incluso nel modello (in genere in numero di 50 o più specie chimiche, a seconda del meccanismo chimico considerato) su ciascuna cella del grigliato prescelto. In genere le emissioni devono essere immesse su base temporale oraria.

L'inizializzazione e l'esecuzione di un modello euleriano 3D richiede inoltre che venga specificato il campo di concentrazione iniziale su tutte le celle del dominio di applicazione del modello e sulle celle di bordo. Queste informazioni sono necessarie per tutti le specie chimiche trattate. I modelli possono risultare molto sensibili a queste informazioni specialmente se il dominio prescelto risulta influenzato da processi di trasporto di prodotti e precursori provenienti dall'esterno dell'area di applicazione del modello. Questo in genere si verifica se il dominio scelto è di dimensioni troppo limitate.

Il rapporto RTI CTN\_ACE 1/2001 “osservatorio dei modelli su smog fotochimico e ozono troposferico” prodotto dalla attività del GDL CTN 1999, ha evidenziato che i principali aspetti critici delle applicazioni di modelli fotochimici finora realizzate in Italia sono proprio legate alla complessa preparazione dell'input ed in particolare la difficoltà maggiori sono:

- reperire facilmente le informazioni meteorologiche alla scala e con l'accuratezza richieste dalla applicazioni modellistiche;
- la mancanza di disponibilità di dati di emissione che coprano la scala spaziale richiesta (mesoscala) sufficientemente dettagliati nello spazio e nel tempo ed in grado di fornire tutte le specie chimiche richieste (speciazione);
- la difficoltà nel reperire le informazioni iniziali ed al contorno sotto forma di campi 3D di tutte le specie chimiche richieste;

Questo rapporto è quindi finalizzato a fornire alcune indicazioni per affrontare gli elementi critici legati alla predisposizione di dati di emissione, opportunamente disaggregati nello spazio e nel tempo, e delle concentrazioni iniziali e al contorno dei diversi componenti chimici. Questi dati, oltre a presentare le maggiori difficoltà di reperimento e di pre-elaborazione, sono determinanti sulla incertezza dei risultati finali delle simulazioni modellistiche.

L'importanza delle condizioni al contorno delle emissioni e della meteorologia viene esemplificata nel successivo **paragrafo 1.1**, mentre il **paragrafo 1.2** riporta sinteticamente alcune indicazioni per la predisposizione dell'input meteorologico, rimandando al sito WEB per esempi ed ulteriore documentazione, accessibile all'indirizzo <http://task:0701c@213.217.153.220/ob0901b/>.

Il **secondo capitolo** fornisce indicazioni sulle metodologia generale per la predisposizione dei dati di emissione in ingresso ai modelli tridimensionali di dispersione atmosferica sulla base delle informazioni normalmente disponibili in Italia, ovvero l'inventario nazionale CORINAIR ed eventuali inventari locali, predisposti sulla base delle "linee guida agli inventari locali di emissioni in atmosfera" (RTI CTN\_ACE 3/2001).

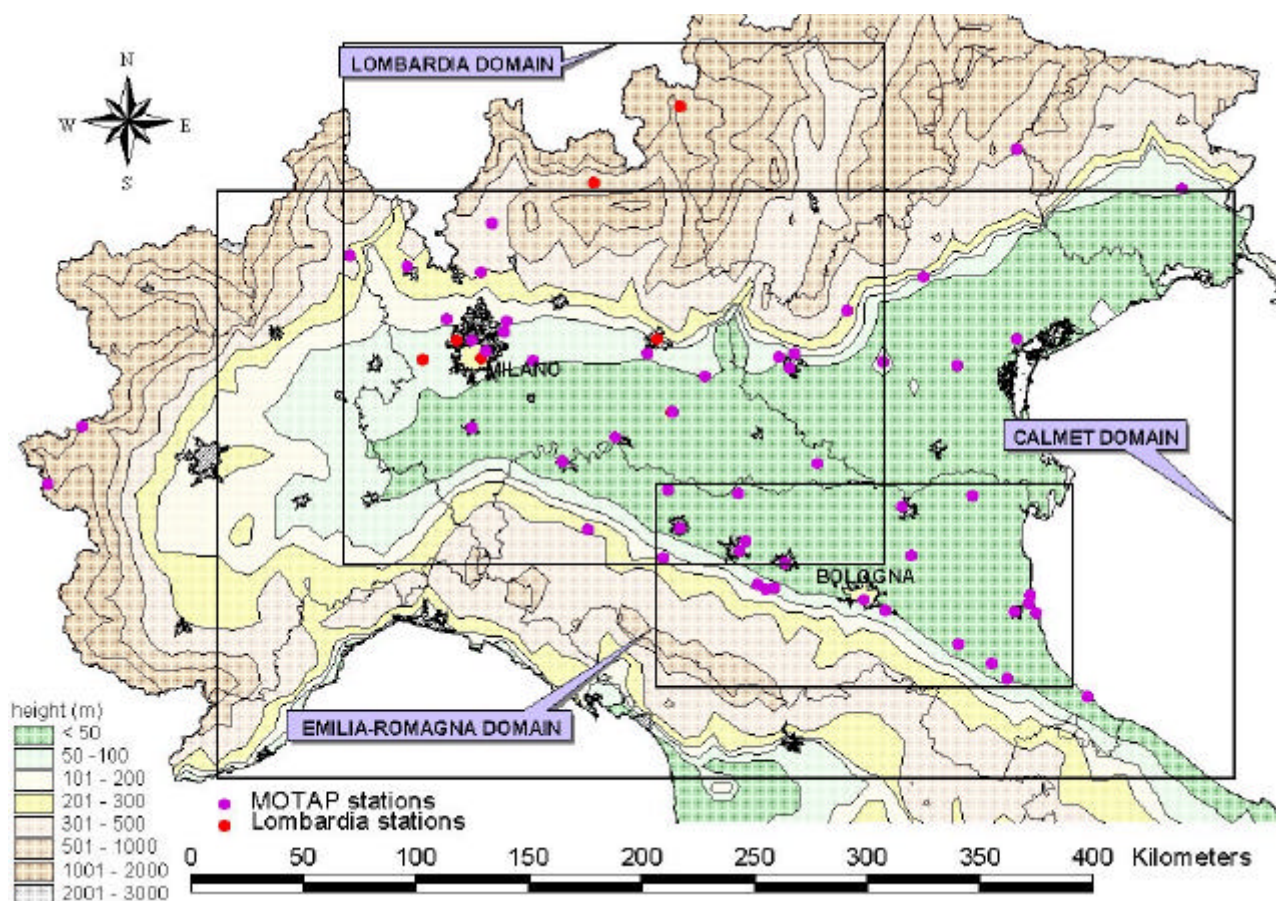
Nel **terzo capitolo** vengono approfonditi gli aspetti relativi alla disaggregazione e riaggregazione delle specie chimiche richieste dai principali meccanismi chimici attualmente maggiormente utilizzati per la simulazione dei processi fotochimici.

Nel **quarto capitolo** vengono affrontate le problematiche relative alla predisposizione delle condizioni iniziali ed al contorno necessarie alla applicazione di un modello tridimensionale a griglia.

Il **quinto capitolo** traccia infine alcune indicazioni generali relative ai modelli fotochimici di nuova generazione, con particolare riferimento alle necessità connesse al trattamento di processi atmosferici finora non compiutamente considerati dalla maggior parte dei modelli attualmente in uso, quali ad esempio i processi legati all'aerosol atmosferico.

### ***1.1 influenza delle emissioni e delle condizioni al contorno***

Per esemplificare e chiarire quale sia l'influenza di vari fattori sulle simulazioni modellistiche il gruppo di lavoro del CTN-ACE "valutazione modellistica dell'inquinamento a grande distanza" ha svolto, nel corso del 2000, un esercizio di interconfronto tra due applicazioni modellistiche dell'inquinamento fotochimico svolte nel bacino padano e selezionate tra quelle rese disponibili nella attività CTN 1999 di rassegna delle applicazioni di modelli fotochimici in Italia. Le simulazioni sono state scelte perché condotte su due domini adiacenti della Emilia – Romagna e della Lombardia, utilizzando catene modellistiche confrontabili. Sulle aree considerate nelle applicazioni risultano inoltre disponibili analisi meteorologiche a scala sufficientemente estesa da consentire una valutazione complessiva dei flussi di inquinanti mediante il calcolo di traiettorie applicato al campo di vento ricostruito con un preprocessore meteorologico. La figura 1 mostra il dominio di applicazione delle due catene modellistiche e del preprocessore meteorologico.



**Figura 1: dominio di applicazione delle due catene modellistiche (Lombardia domain ed Emilia Romagna domain) e del preprocessore meteorologico (CALMET domain). I puntini indicano le stazioni di rilevamento della qualità dell'aria utilizzate per verificare i modelli.**

Il preprocessore meteorologico CALMET (Scire et al. 1999) è stato applicato al dominio esteso di figura 1 per ricostruire i campi di vento, temperatura ed i parametri della turbolenza, sulla base di tutte le osservazioni meteorologiche disponibili (stazioni meteo al suolo e radiosondaggi). Per maggiori dettagli si rimanda a Deserti et. al, 1999.

La catena modellistica utilizzata per le simulazioni in Lombardia include il preprocessore per le emissioni POEM (Pollutant Emission Model, Volta e Finzi, 1999), due modelli meteorologici diagnostici, MINEVE (Geai, 1987) e CALMET (Scire et al. 1999) e due modelli fotochimici euleriani CALGRID (Yamartino et al., 1992) e STEM II (Carmichel et al., 1991).

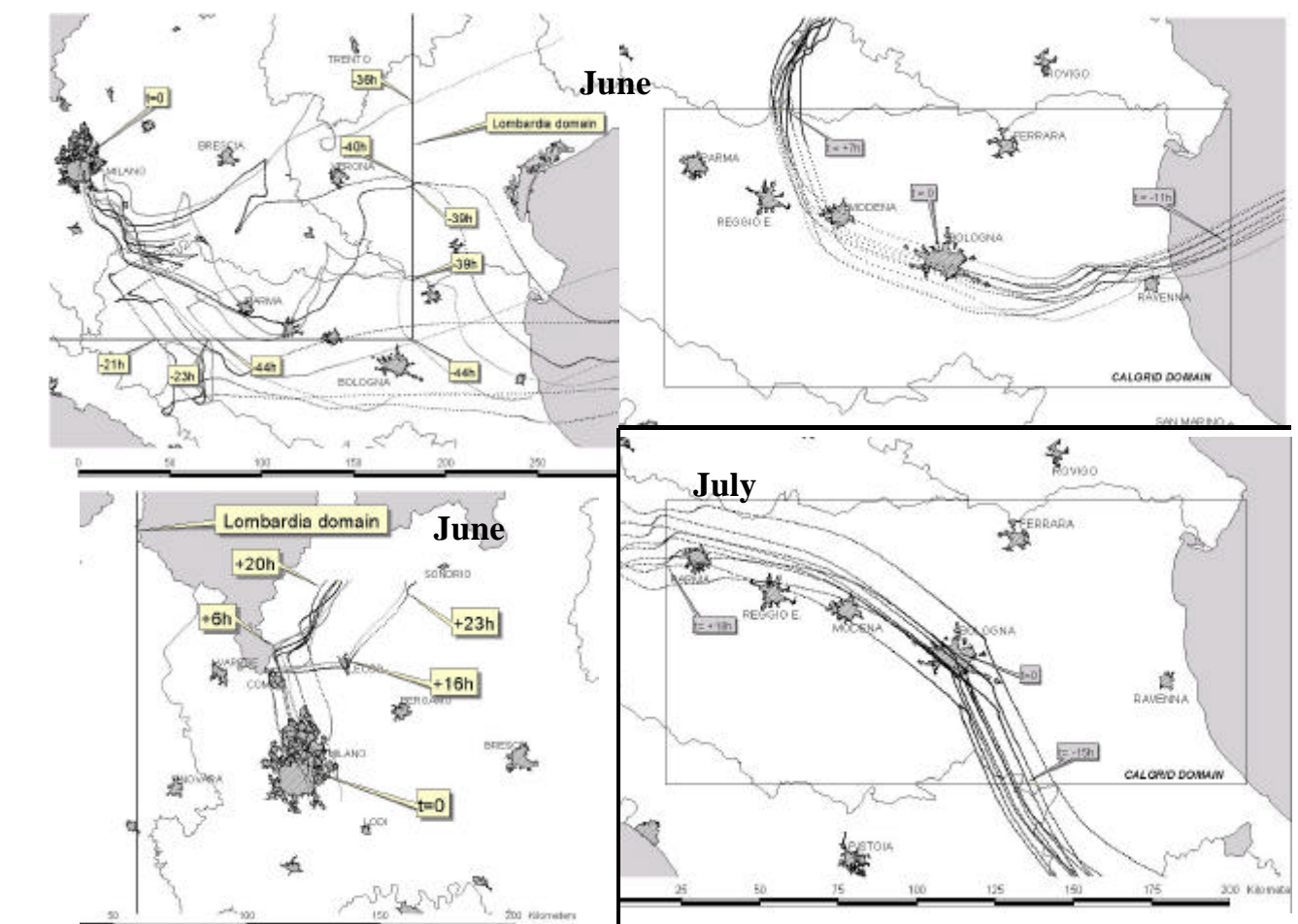
La catena modellistica utilizzata per le simulazioni in Emilia - Romagna comprende il preprocessore meteorologico CALMET (Scire et al. 1999) ed il modello fotochimico CALGRID (Yamartino et al., 1992). Le emissioni provengono dalla disaggregazione su base comunale delle emissioni del CORINAIR 90, resa disponibile dalla Regione Emilia - Romagna.

Per maggiori dettagli sulle catene modellistiche si rimanda a Deserti, Desiato, Brusasca, Silibello e Zanini; 2001.

Entrambi gli esercizi hanno permesso di simulare con sufficiente accuratezza la concentrazione di ozono durante i due episodi considerati, rispettivamente un episodio osservato dal 5 al 7 di giugno

1996, simulato in Lombardia, ed un episodio osservato dal 10 al 13 Luglio 1996, simulato in Emilia - Romagna.

Per evidenziare l'influenza dei regimi di trasporto nelle due simulazioni sono state ricostruite le traiettorie percorse da un gruppo di particelle (tracciante passivo) immesse in atmosfera in corrispondenza delle due maggiori aree urbane dei rispettivi domini di studio: Milano e Bologna. Le traiettorie sono state ricostruite in avanti e all'indietro nel tempo, fino a quando le particelle non si depositano al suolo o escono dal dominio del modello meteorologico. La figura 2 riporta le traiettorie delle particelle ed il tempo impiegato per percorrere la distanza dal bordo di applicazione di ciascun modello fotochimico al punto di rilascio.



**Figura 2: traiettorie negli episodio di inquinamento da ozono di giugno e luglio 1996 nei domini della Lombardia e dell'Emilia Romagna.**

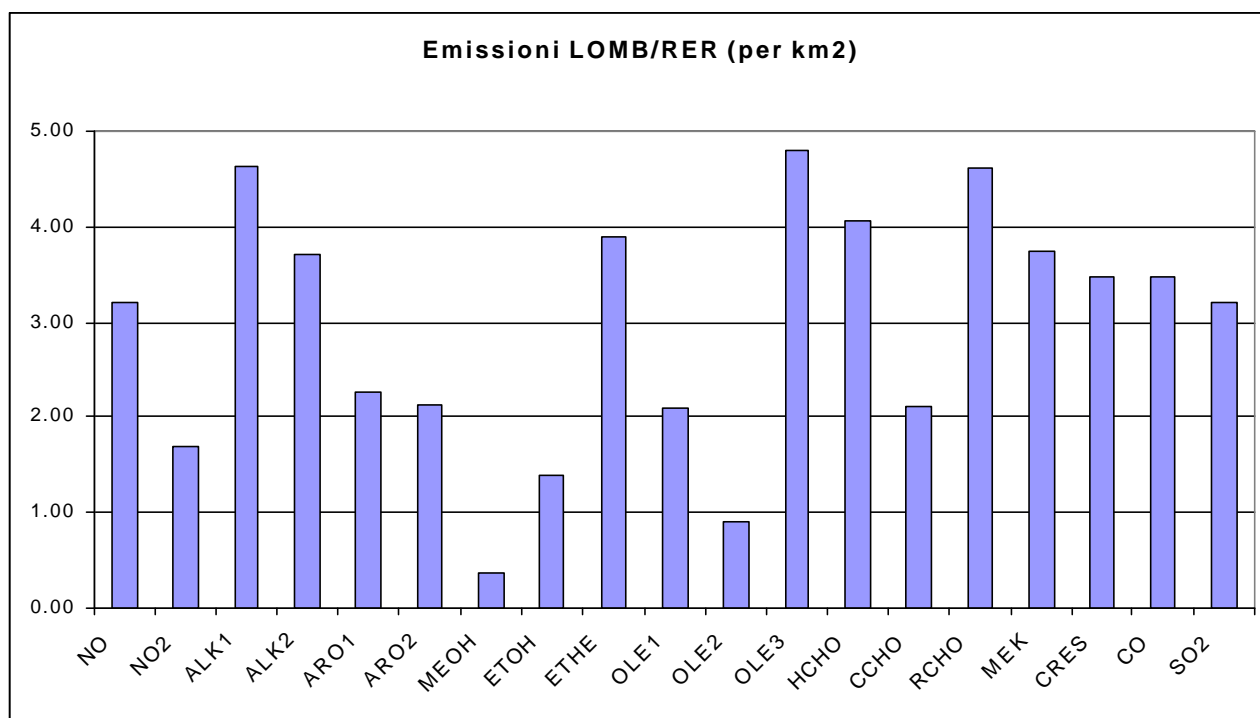
L'analisi dell'episodio di giugno rivela come gran parte delle particelle che raggiungono la città di Milano percorrono traiettorie generate all'interno del dominio di applicazione del modello fotochimico. Solo poche particelle provengono da punti posti all'esterno, con tempi di transito superiori o confrontabili con quelli di integrazione del modello fotochimico (50-60 ore) e percorrendo traiettorie contorte e disorganizzate, tipiche del regime di stagnazione. Le particelle rilasciate su Milano vengono poi trasportate in modo organizzato verso nord sotto l'influenza della circolazione di brezza. Le particelle che raggiungono la città di Bologna, al contrario seguono un



flusso organizzato da est, provenendo dal mare Adriatico e deviando poi verso nord sotto l'influenza combinata dei flussi di brezza di mare e di monte che interessano la parte orientale della pianura padana. Il fascio di particelle impiega circa 18 ore ad attraversare interamente il dominio di applicazione del modello fotochimico all'Emilia Romagna.

I risultati dell'analisi delle traiettorie evidenziano come l'episodio di luglio, simulato sul dominio orientale (Emilia Romagna), sia fortemente influenzato dal trasporto di ozono e di precursori dell'ozono attraverso i bordi del dominio di applicazione del modello. L'analisi dell'episodio di giugno presenta invece condizioni tipiche di stagnazione sul dominio della Lombardia mentre, anche in questo caso, la parte orientale della pianura padana in generale ed il dominio dell'Emilia – Romagna in particolare, risulta sensibile al trasporto associato alla circolazione costiera. In tali condizioni è attesa una maggiore sensibilità delle simulazioni condotte in Lombardia alle emissioni di precursori all'interno del dominio, mentre le simulazioni condotte in Emilia Romagna tendono a presentare una elevata sensibilità alle condizioni al contorno.

Per verificare il peso delle emissioni sulle due simulazioni, sono state poste a confronto le quantità di inquinanti immesse per  $\text{km}^2$  nei due domini di integrazione. La figura 3 mostra il rapporto tra la quantità media per  $\text{km}^2$  di ciascuna specie inquinante fornita in ingresso nella simulazione della Lombardia, rispetto alla simulazione dell'Emilia-Romagna.



**Figura 3: rapporto tra le emissioni medie per  $\text{km}^2$  delle principali specie inquinanti in Lombardia ed Emilia - Romagna**

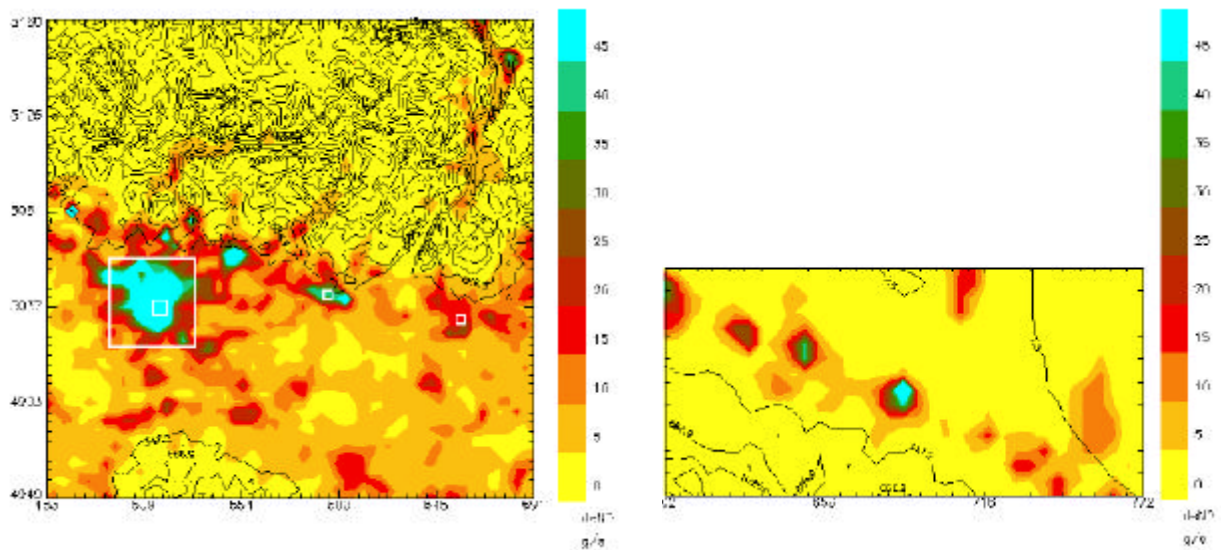
Si nota come le emissioni considerate in Lombardia siano per la maggior parte delle specie circa il doppio di quelle considerate in Emilia - Romagna. In particolare le emissioni associate alle attività rurali e di origine biogenica risultano fino a quattro volte superiori, portando a ritenere che l'inventario utilizzato in Emilia - Romagna contenga una probabile sottostima delle emissioni in generale e di quelle rurali e biogeniche in particolare, rispetto alla Lombardia.

Anche la distribuzione nello spazio conferma questa ipotesi, mettendo in evidenza emissioni concentrate quasi esclusivamente negli agglomerati urbani ed industriali in Emilia - Romagna, rispetto ad emissioni più diffuse in Lombardia. Un esempio relativo alle emissioni di ossido di azoto è mostrato in figura 4.

## ***NO emissions***

Lombardia, 7-6-96 h.16

Emilia - Romagna, 11-7-96 h.16



**Figura 4: distribuzione nello spazio delle emissioni di ossido di azoto nei due domini.**

In conclusione il confronto tra le due simulazioni evidenzia la elevata sensibilità delle simulazioni modellistiche all'inventario delle emissioni ed alla meteorologia.

Come conseguenza della forte influenza del trasporto di ozono e precursori dell'ozono in alcune condizioni meteorologiche particolari emerge l'esigenza di ampliare la scala delle applicazioni eseguite nella pianura padana, questo richiede la disponibilità di inventari di emissioni su un'area estesa e di campi meteorologici accurati e calcolati specificamente per le applicazioni modellistiche.

Come conseguenza della sensibilità alle emissioni locali in condizioni meteorologiche di stagnazione (come è stato dimostrato dalle simulazioni del caso di giugno 96 in Lombardia) vi è la necessità di disporre di inventari delle emissioni accuratamente verificati.

In particolare questo studio preliminare ha evidenziato la necessità di:

- ampliare il dominio delle simulazioni, utilizzando modelli a più ampia scala per fornire appropriate condizioni al contorno,
- procedere ad una accurata verifica degli inventari delle emissioni ed alla loro estensione ad un dominio più esteso,
- disporre di una accurata ricostruzione dei campi meteorologici forniti in ingresso ai modelli.



Questo rapporto approfondisce quindi gli aspetti legati alla predisposizione dei dati di ingresso nelle simulazioni modellistiche che, per poter essere utilizzate per la valutazione di strategie di controllo delle emissioni, devono essere sufficientemente accurate.

## 1.2 *L'input meteorologico*

La applicazione di modelli fotochimici euleriani a griglia per la simulazione di inquinanti chimicamente attivi richiede la predisposizione di dati meteorologici in ingresso sotto forma di campi tridimensionali che coprono l'intero dominio di applicazione del modello ed in grado di trattare adeguatamente i processi meteorologici che avvengono nello **strato limite planetario**. I risultati della simulazione modellistica sono infatti molto sensibili all'input meteorologico. Per ottenere queste informazioni si rende necessaria la applicazione di preprocessori meteorologici tridimensionali o di modelli meteorologici completi (LAM non idrostatici) in dipendenza dalle dimensioni dal dominio di applicazione del modello fotochimico e dalla capacità dello stesso di considerare i vari processi.

Un preprocessore meteorologico è uno strumento SW che rielabora informazioni meteorologiche (dati osservati o grandezze prodotte da sistemi di analisi e modelli numerici) in modo da produrre l'input necessario alla esecuzione di un modello di QA.

**I preprocessori tridimensionali:** integrano tutte le osservazioni disponibili (anche di tipo diverso), per produrre un'analisi su un grigliato tridimensionale di tutti i parametri atmosferici all'interno del dominio richiesto. Possono includere un modulo di interpolazione (più o meno sofisticato), un modulo per includere gli effetti dei dettagli orografici sul campo di vento (modulo mass-consistent), un modulo micrometeorologico per stimare le grandezze relative alla turbolenza.

**I modelli meteorologici completi** (LAM non idrostatici): integrano le equazioni della fluidodinamica su un grigliato tridimensionale, riproducendo, in modo esplicito o tramite specifiche parametrizzazioni, tutti i fenomeni atmosferici nell'area d'interesse. Sono notevolmente più complicati dei preprocessori 3D, e richiedono in input (per esempio da un altro modello) un insieme di condizioni al contorno che descrivono il moto dell'atmosfera alle scale più ampie. I modelli fotochimici di nuova generazione (capitolo 5) richiedono in genere l'utilizzo di modelli meteorologici completi.

Lo **strato limite planetario** (Planetary Boundary Layer, PBL) è la parte dell'atmosfera che risente più fortemente dell'interazione con la superficie. La caratteristica fondamentale dello strato limite è la turbolenza. Due sono le cause del trasporto turbolento: la prima è la viscosità, che impone l'annullarsi della velocità del vento alla superficie, con la conseguenza che un vento anche debole induce la formazione di vortici; la seconda è il riscaldamento radiativo della superficie, che provoca moti convettivi. Lo spessore dello strato limite planetario può variare da meno di 30 m in condizioni di forte stabilità statica fino a più di 3 km in presenza d'intensi moti convettivi (Holton, 1992).

Sopra la superficie terrestre, in condizioni di alta pressione, lo strato limite assume una tipica struttura che evolve con ciclicità diurna, se sono presenti moti convettivi (generalmente di giorno) si parla di strato limite instabile, mentre in loro assenza (normalmente di notte) si parla di strato limite stabile. I tre elementi principali di tale struttura sono strato rimescolato, strato residuo, e strato limite notturno. Inoltre si distingue lo strato superficiale, definito come la parte più vicina alla superficie (10% dello spessore dello strato limite), caratterizzata da un forte gradiente della velocità del vento.

Nello strato rimescolato (mixed layer) la turbolenza è prevalentemente convettiva, provocata dal calore trasferito dal suolo all'aria e dal raffreddamento radiativo delle nubi. Normalmente, in giornate serene, lo strato rimescolato comincia a svilupparsi e ad ispessirsi circa mezz'ora dopo

l'alba, per raggiungere nella tarda mattinata lo spessore massimo. La nuvolosità può ridurre l'intensità delle correnti ascensionali e dunque rallentare la crescita dello strato di rimescolamento o addirittura, se le nubi sono abbastanza spesse, inibirne la turbolenza (Stull, 1988).

L'elevata rugosità della superficie urbana genera vicino al suolo un substrato (roughness sublayer) dove le fluttuazioni della componente verticale del flusso non sono affatto trascurabili. Il suo limite superiore  $d$  (displacement distance) dipende dall'altezza media  $h$  e dalla densità degli edifici, e normalmente è pari a circa il doppio di  $h$  (Rotach et al. 2000). Sopra il roughness sublayer si trova il substrato inerziale, per il quale è applicabile la teoria di similarità di Monin-Obukhov (valida, in ambiente rurale, in tutto lo strato superficiale, dalla superficie fino a circa un decimo dell'altezza del PBL).

Le grandezze meteorologiche usate per descrivere lo strato limite planetario, utilizzate dai modelli di diffusione si possono suddividere in due categorie:

Da un lato le **grandezze primarie** (temperatura, vento, umidità, copertura nuvolosa, radiazione), che sono misurabili direttamente con strumenti relativamente semplici e sono generalmente comprese nelle ordinarie reti meteorologiche.

Dall'altro i **parametri che descrivono la turbolenza** del PBL: sono difficili da misurare direttamente e spesso è necessario stimarli con metodi semi-empirici, ma il loro valore ha un impatto decisivo sulle proprietà diffusive dell'atmosfera; la loro conoscenza è quindi indispensabile per utilizzare correttamente i modelli di dispersione.

Nel seguito, vengono descritte in modo sintetico le più utilizzate tra queste grandezze, con particolare attenzione a quelle che descrivono la turbolenza; l'elenco non è certamente completo, ma si è cercato di dare un'idea del significato fisico e dell'utilizzo pratico delle grandezze più comuni, senza pretendere di essere assolutamente rigorosi.

Velocità verticale ( $w$ ): Componente verticale del vento, positiva se diretta verso l'alto

Intensità dell'inversione: Quando nello stesso punto sono disponibili (almeno) due misure di temperatura ad altezze diverse, la loro differenza può dare un'indicazione di massima sulla stabilità atmosferica.

Altezza di rimescolamento ( $z_i$ ): Corrisponde all'altezza dello strato rimescolato ed è forse il parametro più utilizzato per valutare la diffusione degli inquinanti in condizioni di PBL instabile. Per definirla occorre individuare fino a quale quota sia verificata una condizione, scelta come caratteristica peculiare dello strato rimescolato; sono state proposte ad esempio: forte turbolenza, forte rimescolamento dell'aria, rapida diffusione degli inquinanti, presenza di forti flussi verticali di calore e momento (Seibert 1988). La scelta della particolare definizione può portare a valori anche sensibilmente diversi di  $z_i$ .

Classe di stabilità: E' un indicatore qualitativo dell'intensità della turbolenza atmosferica. Esistono diversi schemi di classificazione, che prevedono un diverso numero di classi e si basano sul valore di una (o più) grandezze meteorologiche collegate alla turbolenza: gradiente verticale di temperatura (classi di Pasquill-Gifford), deviazione standard della direzione del vento, rugosità e lunghezza di Monin-Obukhov..

Flusso di calore sensibile: Flusso di calore scambiato per conduzione molecolare; in genere si considera quello superficiale, che misura gli scambi di calore tra suolo e atmosfera. I valori sono positivi se il flusso è diretto verso l'alto.

Flusso di calore latente: Proporzionale al flusso di vapore acqueo; in genere si considera il flusso superficiale, che corrisponde alla quantità di acqua che evapora dal suolo nell'unità di tempo. I valori sono positivi se il flusso è diretto verso l'alto.

Flusso di momento: In genere si considera il flusso verticale della componente orizzontale del momento, diviso per la densità dell'aria (flusso di momento cinematico). Il suo valore alla superficie esprime l'effetto di freno che l'attrito al suolo ha sul flusso d'aria, ed è quindi sempre negativo.

Friction Velocity ( $u^*$ ): E' una grandezza di scala che dà indicazioni sull'entità della turbolenza generata da fattori meccanici vicino alla superficie (principalmente l'aumento della velocità del vento con la quota nello strato superficiale)

Lunghezza di Monin Obukhov (L): E' un parametro di scala utile nello strato superficiale, e corrisponde al rapporto tra l'intensità della turbolenza prodotta da fattori meccanici (shear del vento) e quella di origine convettiva (termiche). In condizioni di PBL instabile (giorno) L è positiva, e  $L/2$  è circa uguale all'altezza in cui le due sorgenti di turbolenza sono uguali. In condizioni di PBL stabile (notte) L è negativa, perché la stratificazione stabile dell'atmosfera inibisce la convezione e il termine di produzione convettiva diventa negativo (Stull, 1988).

Convective velocity scale ( $w^*$ ): E' una grandezza di scala utile in condizioni di PBL instabile, tanto più grande quanto maggiori sono l'altezza di rimescolamento e i flussi di calore dalla superficie. Dà un'indicazione sulle velocità verticali che possono essere generate dai moti convettivi del PBL.

Rugosità del terreno ( $z_0$ ): Indica fino a quale altezza sul terreno l'effetto degli ostacoli (alberi, edifici, ecc.) è dominante: al di sotto di tale quota il vento medio è sostanzialmente nullo. Dipende da altezza, forma e densità degli ostacoli, ma è sempre minore della loro altezza effettiva. Il suo valore determina il profilo dell'intensità del vento nello strato superficiale.

Displacement distance (d): Su un terreno con ostacoli alti e fitti (un bosco, una città...), è possibile definire una superficie al di sopra della quale il profilo del vento ricalca quello che si avrebbe nello strato superficiale su un suolo senza ostacoli. Tale superficie, che corrisponde grosso modo all'involuppo degli ostacoli, agisce sul flusso atmosferico come un suolo "spostato"; d è la sua altezza rispetto al suolo reale.

## Riferimenti bibliografici del cap.1

Carmichael G.R., Peters L.K., Saylor R.D. (1991) The STEM-II Regional Scale Acid Deposition and Photochemical Oxidant Model-I. An Overview of Model Development and Applications. Atmospheric Environment 25A:2077-2090.

Deserti, Cacciamani, Golinelli, Kerschbaumer, Leoncini, Savoia, Selvini, Paccagnella, Tibaldi 1999: Operational meteorological pre-processing at Emilia Romagna ARPA Meteorological Service as a part of a decision support system for air quality management. Proceedings of 6th International Conference on Harmonisation within atmospheric dispersion modelling for regulatory purposes.

Deserti, M. Cacciamani, C. Golinelli, M. Kerschbaumer, A. Leoncini, G. Savoia, E., Selvini, A. Paccagnella, T. and Tibaldi, S. (2000): Operational meteorological pre-processing at Emilia-Romagna ARPA Meteorological Service as a part of a decision support system for Air Quality Management, IJEP, approved for publication.

Deserti, M., Cattani, S., Poluzzi, V., (1998), Il progetto di monitoraggio dell'ozono troposferico MOTER – MOTAP dell'Agenzia Regionale per la Prevenzione e l'Ambiente dell'Emilia –

Romagna in Ozono e Smog Fotochimico, Maggioli editore, Rimini, 131–167 (Available from ARPA Emilia Romagna Environmental Protection Agency).

Deserti, Desiato, Brusasca, Silibello e Zanini, 2001, "Photochemical models application in Po Valley (Italy): critical review and intercomparison" in "Proceedings of seventh international conference on harmonization within atmospheric dispersion modeling for regulatory purposes", Belgirate 28-31 maggio 2001.

Finzi, Pirovano, Volta, 2001: Gestione della qualità dell'aria. McGraw-Hill

Geai P. (1987) Methode d'interpolation et de reconstitution tridimensionnelle d'un champ de vent: le code d'analyse objective MINERVE. Rep. DER/HE/34-87.03., Electricité de France, Chatou (France).

Holton, 1992: An introduction to dynamic meteorology. Academic Press

Kumar N., Lurmann F.W., Carter W.P.L. (1995) Development of the Flexible Chemical Mechanism Version of the Urban Airshed Model" Final Report STI-94470-1508-FR, California Air Resources Board.

Rotach, 2000: The siting, choice and operation of surface instrumentation in urban areas. Included in COST Action 715 - Final report, European Commission, in publication.

Scire J.S., Robe F.R., Fernau M.E., Yamartino R.J. (1999) A User's Guide for the CALMET Meteorological Model. Earth Tech, Internal Report.

Seibert, Beyrich, Gryning, Joffre, Rasmussen, Tercier, 1998: Mixing height determination for dispersion modelling. Included in COST Action 710 - Final report, European Commission

Stull, R.B., 1988: An introduction to boundary layer meteorology. Kluwer Academic Publishers

Volta M. and Finzi G (1999) Evaluation of EU road traffic emission abatement strategies in Northern Italy. EUROTRAC Newsletter 21/99, pp 29-34.

Yamartino R.J., Scire J.S., Carmichael G.R., Chang Y.S. (1992) The CALGRID mesoscale photochemical grid model - I. Model formulation. Atmospheric Environment 26A:1493-1512.

## 2 I dati di emissione richiesti da modelli tridimensionali

Come illustrato nei capitoli precedenti un insieme di informazioni richieste dai modelli di dispersione riguarda le emissioni di inquinanti presenti nel territorio di indagine. Principali fonti di questo tipo di dati sono gli inventari di emissione che vengono predisposti sia a scala nazionale, ad opera dell'ANPA, sia su scala locale (regionale, provinciale etc.) dagli enti di competenza.

Il capitolo si apre con un breve richiamo ad alcuni aspetti generali (metodologia CORINAIR, tipologia di fonti etc.) ritenuti utili per la comprensione dei paragrafi successivi. Per ulteriori informazioni sugli inventari si rimanda alle Linee Guida agli inventari di emissione predisposte nell'ambito del CTN-ACE, qui descritte in sintesi. Viene quindi fornita una panoramica sulla disponibilità degli inventari di emissione in Italia. Nei paragrafi successivi si entra poi nello specifico, con l'analisi delle procedure che concorrono alla predisposizione dei dati di emissione per un modello di dispersione tri-dimensionale. Un esempio dettagliato di preprocessore per le emissioni, il preprocessore POEM è documentato nell'annesso 3.

### 2.1 Gli inventari di emissione: aspetti generali

Gli inventari di emissione vengono definiti dal D.P.C.M. del 20 Maggio 1991 come “una serie organizzata di dati relativi alla quantità di inquinanti introdotti in atmosfera da sorgenti naturali e/o da attività antropiche”. L'inventario rappresenta quindi la struttura all'interno della quale i dati e le informazioni che descrivono sia le sorgenti che le emissioni sono immagazzinati, ordinati ed elaborati, permettendone la consultazione e l'utilizzo a vari livelli di disaggregazione fino al dettaglio per attività economica, unità territoriale e temporale. La predisposizione di un inventario non si riduce al riempimento di un semplice archivio informatico ma richiede conoscenza specialistica nell'utilizzo delle metodologie di calcolo, nel trattamento dei dati provenienti da fonti di informazioni multidisciplinari e disomogenee e, non ultimo, delle caratteristiche delle emissioni presenti sul territorio.

Gli inventari di emissione si distinguono in base a diversi parametri: scala territoriale, tipologia di fonti di emissione e attività emissive considerate, specie inquinanti trattate, approccio metodologico (top-down e bottom up) etc (Cirillo, 1996)

Le **scale territoriali** sono variabili possono andare da quella subcomunale a quella nazionale. Generalmente si considerano come “locali” inventari riferite a territori inferiore o uguale a quella regionale. Anche il dettaglio, l'entità più piccola per la quale sono fornite le emissioni, è variabile. Gli inventari provinciali e regionali, come verrà illustrato più avanti, forniscono stime con dettaglio comunale.

Le **fonti di emissione** possono essere classificate sulla base di più criteri:

- ✓ la modalità di funzionamento (distinguibili a loro volta in continue e discontinue);
- ✓ la dislocazione spaziale sul territorio (distinguibili a loro volta in fisse e mobili);
- ✓ la loro forma per una trattazione a fini modellistici.

Un'ulteriore classificazione delle sorgenti, che risulta essere quella più utilizzata nella pratica, comporta l'individuazione di opportuni valori di soglia, ossia valori delle emissioni in base ai quali differenziare tra fonti che devono essere considerate a se stanti – nel caso le emissioni superino la soglia stabilita – oppure possono essere raggruppate ad altre, simili per tipologia di inquinante e processo.

Sulla base di queste considerazioni le sorgenti vengono quindi ripartite tra:

- ✓ puntuali, sorgenti da considerare singolarmente costituite da singoli impianti che emettono quantità di inquinanti superiori a determinate soglie;
- ✓ lineari, tipicamente arterie stradali
- ✓ diffuse

Rientrano tra le diffuse tutte quelle sorgenti che non è possibile localizzare e che si considerano distribuite sul territorio (es. impianti di riscaldamento residenziali, piccole-medie industrie, utilizzo di prodotti domestici, superfici agricole e boscate). Generalmente fanno parte di questo gruppo tutte le sorgenti che emettono in misura inferiore alle soglie stabilite per la definizione di sorgente puntuale e quelle sorgenti che, pur avendo caratteristiche tali da poter essere considerate puntuali o lineari, risultano non identificabili come tali per mancanza di informazioni sulla localizzazione, sulle caratteristiche emissive etc.

L'esistenza di numerose e differenti fonti di emissione in atmosfera e in altri comparti (suolo/acque etc.) ha reso necessario individuare delle codifiche comuni e univocamente definite mediante le quali classificare le attività emissive nella predisposizione degli inventari riferite alle diverse scale territoriali, nei diversi paesi europei, per i vari comparti. Per questa ragione, anche nell'ambito del progetto europeo Corinair si è scelto di adottare una **nomenclatura unica per classificare le attività emissive** detta SNAP (Selected Nomenclature for Air Pollution), giunta alla sua ultima revisione nel 1997 e pertanto denominata SNAP97, riportata nell'Appendice B delle Linee Guida agli inventari locali. Tale classificazione si basa sulla ripartizione delle attività antropiche e naturali in una struttura fortemente gerarchizzata che comprende nella versione '97 11 macrosettori, 56 settori e 260 categorie. I macrosettori sono i seguenti:

- Macrosettore 1: Combustione - Energia e industria di trasformazione
- Macrosettore 2: Combustione - Non industriale.
- Macrosettore 3: Combustione – Industria.
- Macrosettore 4: Processi Produttivi
- Macrosettore 5: Estrazione, distribuzione combustibili fossili / geotermico
- Macrosettore 6: Uso di solventi
- Macrosettore 7: Trasporti Stradali.
- Macrosettore 8: Altre Sorgenti Mobili
- Macrosettore 9: Trattamento e Smaltimento Rifiuti
- Macrosettore 10: Agricoltura
- Macrosettore 11: Altre sorgenti di Emissione ed Assorbimenti

Per quanto riguarda **i metodi di stima** le emissioni delle *sorgenti puntuali* singoli impianti o camini caratterizzati da emissioni significative di inquinanti (es. centrali di potenza, grande industrie, inceneritori e discariche), vengono ricavate a partire dalle dichiarazioni delle singole aziende a fini autorizzativi o delle misurazioni effettuate. Nel caso di mancanza di dati in riferimento ad uno



specifico inquinante è possibile fare delle stime sulla base di un fattore di emissione opportuno e dei parametri specifici della sorgente.

Le emissioni da sorgenti diffuse vengono stimate, in linea generale, mediante il seguente prodotto:

$$E_i = A \times FE_i$$

dove:

$E_i$  rappresenta l'emissione dell'inquinante  $i$

$A$  è un opportuno indicatore dell'attività correlato con le quantità emesse (es. consumi di combustibile per gli impianti di riscaldamento) le cui fonti di informazione possono essere: i censimenti ISTAT, le Associazioni di categoria, vari enti pubblici e privati

$FE_i$  è il *fattore di emissione* per l'inquinante  $i$  e l'attività espressa da  $A$ , ovvero la massa dell'inquinante emessa per una quantità unitaria dell'indicatore. Può essere espresso come semplice valore numerico o come funzione di differenti parametri costruttivi e/o operativi di impianti e processi.

Il calcolo delle emissioni lineari avviene sostanzialmente secondo l'approccio statistico delle sorgenti diffuse. Nel caso delle emissioni da traffico autoveicolare vengono applicati specifici metodi di calcolo che considerano la dipendenza delle emissioni da numerosi parametri (tipologia di veicolo, cilindrata, tipologia di carburante, tipologia di percorso, velocità di percorrenza, etc). (Ahlvik 1997).

La fonte principale per il reperimento dei fattori di emissione è costituita dalla "the EMEP/CORINAIR Atmospheric Emission Inventory Guidebook" (EEA, 1999) realizzata e aggiornata da una Task Force costituita da esperti da tutta l'Europa che operano nell'ambito di gruppi di lavoro (Expert panel) su alcune tematiche principali: (combustione ed attività industriali, trasporti, agricoltura ed allevamento, natura etc.) . Questa Task Force emana periodicamente il manuale di riferimento, la *Guidebook*, che, per la maggioranza delle attività previste dalla nomenclatura SNAP97, fornisce due possibili metodologie di calcolo (*metodologia semplificata e dettagliata*) in relazione al grado di dettaglio delle informazioni disponibili sull'attività e, conseguentemente, diversi valori dei fattori di emissione. La guida integra inoltre altri contributi sviluppati nell'ambito di progetti affini e gruppi di lavoro internazionali, provenienti ad esempio dall'IPCC (Intergovernmental Panel on Climate Change), dall'Agenzia per la Protezione Ambientale degli Stati Uniti (US EPA) etc (.

Gli indicatori di attività costituiscono a loro volta un elemento di grande criticità, nelle Linee Guida vengono riportate, macrosettore per macrosettore, alcune indicazioni utili alla raccolta ed al calcolo degli indicatori di attività, mentre informazioni più precise su enti ed associazioni di categoria a cui rivolgersi sono riportati nella Appendice D delle stesse.

## **2.2 Le Linee Guida per la predisposizione di inventari locali**

La necessità di rendere confrontabili gli inventari locali attraverso un'armonizzazione delle metodologie di stima e delle banche dati utilizzati e dall'altro l'esigenza di agevolare le attività di predisposizione degli inventari locali, al fine di favorire una sempre maggiore disponibilità di inventari sul territorio nazionale, hanno stimolato la preparazione e pubblicazione dal CTN\_ACE dell'ANPA delle "Linee Guida per la predisposizione di inventari locali" (CTN\_ACE 3/2001).

Il documento è strutturato in tre parti:

- aspetti generali (tipologia di fonti, gli inquinanti, la nomenclatura, gli approcci bottom-up e top-down etc.);
- la preparazione e l'utilizzo di un inventario
- qualità dei dati e incertezza

Nella parte centrale del documento vengono trattate in dettaglio le fasi di pianificazione delle attività, raccolta ed elaborazione dei dati, con riferimento alle metodologie di calcolo per i vari macrosettori. A conclusione una lista di documentazione specifica di riferimento.

Al testo vengono poi allegate appendici contenenti informazioni utili e pratiche per chi si accinge a predisporre un inventario, tra cui la classificazione delle attività secondo la nomenclatura SNAP, indicazioni per il reperimento degli indicatori di attività, indicatori e variabili necessarie per la disaggregazione spaziale a livello urbano, descrizione dettagliata della metodologia di calcolo per le emissioni da traffico e biogeniche .

### 2.3 *La disponibilità di inventari di emissione in Italia*

In Italia è possibile ottenere informazioni sulle emissioni sulla base dell'inventario nazionale e/o degli inventari locali. Esaminiamo le principali caratteristiche di entrambi questi inventari.

#### 2.3.1 L'inventario nazionale delle emissioni in atmosfera

L'**inventario nazionale** delle emissioni in atmosfera rientra nei compiti istituzionali dell'ANPA e fa parte integrante del Sistema Informativo Nazionale Ambientale (SINA). Tra le finalità dell'inventario rientra la trasmissione dei dati nazionali di emissione all'Agenzia Europea per l'Ambiente ed il reporting delle emissioni nazionali secondo i formati richiesti dalle diverse convenzioni internazionali (IPCC per il clima globale, Ginevra sull'inquinamento atmosferico transfrontaliero) e dall'Unione Europea.

Presso l'ANPA, nell'ambito del sistema SINAnet e' disponibile la [Banca Dati](#) delle emissioni atmosferiche con accesso guidato all'inventario Corinair 1985 e 1990. Vi sono riportati i valori delle emissioni di gas inquinanti o a effetto serra espresse in tonnellate/anno, suddivise - al massimo livello di disaggregazione - per provincia e per tipologia di attività (secondo la classificazione Corinair: macrosettore, settore e attività). L'interfaccia permette la selezione delle province a partire da una mappa semplificata del territorio nazionale o del dato totale nazionale. La selezione delle attività (circa 250), dell'inquinante (8 specie), dell'anno di riferimento (1985 e 1990) e della tipologia di fonte (diffusa o puntuale) e di combustibile, può essere effettuata tramite pulsanti e menù a tendina contenenti la lista delle variabili. Attualmente è in corso la realizzazione dell'inventario 1995 a livello provinciale. Sono inoltre disponibili le [emissioni regionali](#) di SO<sub>x</sub>, NO<sub>x</sub>, CO<sub>2</sub> relative al 1999. E' inoltre disponibile la [serie storica](#) delle emissioni dei principali inquinanti atmosferici dal 1980 al 1999 con i [grafici](#) per settore e per inquinante. Sono disponibili le tabelle dei [gas serra](#) comunicate ufficialmente alla Convenzione sui cambiamenti climatici (UNFCCC), relative agli anni 1990-1999.

Per ulteriori informazioni si consiglia di consultare il sito dell'ANPA dal quale è stato estratto il testo di questo paragrafo, e presso il quale sono disponibili numerosi rapporti tecnici (ANPA 2000) e banche dati.

### 2.3.2 Lo stato dell'arte degli inventari di emissione locali

Una recente indagine del CTN\_ACE ha fornito un quadro sufficientemente dettagliato dell'attuale stato dell'arte degli inventari delle emissioni regionali e provinciali su tutto il territorio nazionale.

L'indagine è stata condotta mediante l'elaborazione di questionari compilati dalle amministrazioni competenti, composti da un primo livello conoscitivo e da un secondo riguardante le caratteristiche dettagliate dell'inventario. Poichè veniva richiesto alle regioni la trasmissione del questionario anche alle province, in alcuni casi le risposte sono state fornite anche a livello provinciale.

In particolare sono stati investigati i seguenti aspetti:

- ✓ realtà territoriali esaminate
- ✓ inquinanti
- ✓ fonti di emissione
- ✓ risoluzione spazio/temporale
- ✓ anni di riferimento
- ✓ periodicità di aggiornamento
- ✓ metodologie adottate

Per un commento dettagliato dei risultati della rassegna si rimanda al rapporto del CTN-ACE (CTN\_ACE 1/2000). Si riportano in sintesi alcune considerazioni:

- buona parte delle regioni ha predisposto un inventario, tuttavia gli inventari sono ancora in alcune regioni inesistenti e in altre sono al momento costituiti dal censimento delle sorgenti puntiformi ottenuto mediante una raccolta informatizzata delle domande di autorizzazione di sensi del DPR 203/88;
- gli inventari esistenti sono abbastanza disomogenei tra loro per anno di riferimento, periodicità di aggiornamento, tipologia di informazioni contenute (inquinanti e attività emissive);
- i settori indagati sono soprattutto quello industriale e in alcuni casi quello dei trasporti e dell'agricoltura;- la base temporale di riferimento è generalmente l'anno, anche se in diversi casi è già disponibile il dettaglio mensile, giornaliero, orario;
- l'area di riferimento è quella regionale con dettaglio in diversi casi comunale;
- non è stata prevista una specifica domanda sull'esistenza o meno di una speciazione e ripartizione granulometrica delle emissioni, tuttavia tra gli inquinanti considerati dagli inventari vengono generalmente indicati gli inquinanti tradizionali (SOX, NOX, NH3, NMVOC, CO, PTS), con esclusione in alcuni casi del NH3 e NMVOC, nella quali totalità dei casi sono assenti stime di PM10.

In conclusione la disponibilità di inventari locali in Italia è ancora disomogenea per copertura del territorio, anno di riferimento, metodologie utilizzate, specie chimiche ed attività emissive prese in considerazione. Quindi attualmente, nella situazione più frequente, l'inventario esistente non soddisfa pienamente le esigenze del modellista e vanno ancora previste non trascurabili risorse per supplire alle informazioni mancanti. Tuttavia la situazione è in graduale miglioramento, pertanto è ragionevole pensare che da un lato la realizzazione degli inventari locali via via crescente e dall'altro un maggiore sforzo di concordare su metodi e trattamento dei dati di base omogenei,

metteranno a disposizione per le applicazioni modellistiche stime sempre più dettagliate e raffrontabili (rif. Report CTN-ACE).

## **2.4 Preparazione dei dati di emissione per un modello di dispersione tri-dimensionale**

La preparazione dei dati di emissione per un modello di dispersione avviene attraverso tre fasi:

1. analisi della adeguatezza dei dati esistenti rispetto alle caratteristiche del modello utilizzato e allo scenario di applicazione;
2. reperimento dei dati esistenti e stima dati di emissione mancanti;
3. applicazione di processori per predisposizione emissioni secondo tipo di informazioni e formato richiesti dal modello.

Le risorse da spendere nelle prime due fasi dipendono direttamente dalla qualità e quantità dei dati di emissione già disponibili sull'area, nonché dalla loro più o meno immediata fruibilità (se sono informatizzati, organizzati etc.). Per ciò che concerne la fase di predisposizione dei dati per un loro utilizzo modellistico può essere di complessità variabile a seconda del modello che si intende applicare. Il caso di modello tri-dimensionale per inquinanti reattivi rappresenta indubbiamente quello più complesso dal momento che esso richiede le emissioni specificate per ogni cella del grigliato, per ogni ora di simulazione, per ogni specie chimica trattata singolarmente o accorpata. Nel seguito si cercherà di descrivere in modo sintetico e sistematico le tre diverse fasi.

### **2.4.1 Analisi dei dati esistenti**

L'adeguatezza dei dati di emissione esistenti deve essere valutata sulla base di:

- caratteristiche dello scenario di studio;
- modello di dispersione che si deve applicare.

In particolare tra le caratteristiche dello scenario di studio occorre prendere in esame:

- area di studio (in relazione in particolare ai confini territoriali e amministrativi);
- caratteristiche del grigliato di simulazione (numero di celle lungo x, y e dimensioni delle celle, numero di strati verticali ed estensione di ciascun strato)
- periodo di simulazione;
- passo temporale della simulazione;
- fonte di emissione di particolare interesse (traffico, riscaldamento, fonte/i industriale/i puntuale/i e/o diffusa/e);
- specie inquinanti di interesse (PM10, precursori dell'ozono, sostanze maleodoranti etc.),

Dal modello di dispersione in uso (restringendo la scelta, date le finalità di questo rapporto, a quelli tri-dimensionali numerici) può dipendere invece il tipo di meccanismo chimico considerato, la tipologia di raggruppamento delle specie chimiche, il dettaglio (nel caso del particolato) in classi granulometriche, nonché il formato specifico in cui devono essere predisposti i dati.

L'analisi dell'inventario di emissioni esistente deve pertanto concentrarsi sui seguenti aspetti:

- disponibilità dei dati (cartaceo/informatico);
- ambiti territoriali o amministrativi coperti;

- risoluzione spaziale (entità amministrativa o territoriale più piccola a cui si riferiscono le stime di emissioni);
- disponibilità delle stime su celle di un grigliato (in caso affermativo occorre conoscere le caratteristiche del grigliato);
- anno di riferimento;
- risoluzione temporale;
- fonti emissione/attività prese in esame;
- specie inquinanti trattate (ed eventuale codifica utilizzata, es. in classi SAROAD);
- eventuale disponibilità di speciazione e ripartizione granulometrica delle specie emesse.

Una volta raccolti questi elementi si è in grado di fare un confronto tra le informazioni disponibili e quelle necessarie, e quindi di individuare quelle mancanti.

#### 2.4.2 Reperimento dati di emissione mancanti

Differenti sono gli approcci metodologici che si possono adottare per fare fronte alla mancanza o alla non completa rispondenza delle informazioni richieste: la scelta di quali adottare dipende oltre che dal tipo di dato mancante dagli obiettivi dell'applicazione e soprattutto dalle risorse e tempi che possono essere spesi.

E' evidente che la situazione ottimale è quella di disporre di un inventario predisposto esattamente sul proprio dominio e per il periodo di simulazione. Questo raramente accade pertanto solitamente o lo si ricava da inventari esistenti, adattandolo alle esigenze specifiche, oppure lo si realizza ex-novo. Questa seconda via è sicuramente quella più onerosa dal momento che la predisposizione di un inventario richiede personale esperto, una notevole mole di dati, software dedicato. Inoltre, poiché la predisposizione anche degli altri dati richiesti da un modello tridimensionale è altrettanto onerosa e non è solitamente possibile dedicare tutte le risorse al calcolo delle emissioni (che generalmente assorbe comunque una buona parte delle energie) si seguono delle soluzioni di compromesso, vale a dire si può pensare di applicare metodologie più dettagliate nella stima delle emissioni per le fonti o le specie inquinanti di maggiore interesse ai fini degli obiettivi della simulazione. Esempio nell'analisi modellistica di un episodio di smog fotochimico risulta determinante la conoscenza dei carichi emissivi di COV e NOx e delle rispettive fonti di emissione prevalenti nell'area di studio.

Si è visto dalla panoramica sugli inventari locali che la situazione è alquanto eterogenea pertanto non è possibile descrivere una condizione standard e un univoco e rigido modo di procedere. Le situazioni più frequenti sono:

- ❑ applicazione del metodo top-down su inventari esistenti contenenti emissioni annuali e su entità territoriale più ampia (nazionale, regionale) rispetto al dettaglio spaziale di interesse;
- ❑ applicazione del metodo bottom-up per tutti le fonti;
- ❑ metodo misto, applicazione del metodo bottom-up per le fonti rilevanti ai fini dello studio o rispetto alle caratteristiche emissive dell'area e top-down per le restanti fonti.

L'applicazione del metodo top-down si utilizza quando si desidera ricavare dalle stime di emissioni su entità territoriale più ampia (nazionale, regionale, provinciale) le emissioni sull'entità territoriale di interesse (generalmente comunale). Tale operazione viene eseguita mediante l'utilizzo di

“variabili surrogato” o “variabili proxy”, fortemente correlate all’attività delle sorgenti emissive e note a dettaglio territoriale di interesse. Alla base vi è l’ipotesi che la quantità inquinante emessa sull’intera area abbia la stessa distribuzione spaziale della variabile surrogato e che pertanto il valore assunto da tale variabile sull’entità territoriale di interesse possa essere considerata come fattore peso nella disaggregazione spaziale delle emissioni sull’entità territoriale desiderata. Per rendere più chiaro quanto detto si consideri a titolo di esempio di voler ottenere le emissioni da riscaldamento su base comunale a partire dalle stesse calcolate su scala regionale. Questo può essere ottenuto utilizzando come variabile surrogato il consumo di combustibile che deve essere ovviamente disponibile per ciascun comune dell’area. Il valore di emissione comunale da riscaldamento sarà dato quindi dal prodotto delle emissioni regionali per il rapporto tra il consumo del combustibile del comune in oggetto rispetto al consumo complessivo regionale. Se le emissioni sono ripartite per tipo di combustibile (liquido, solido, gas) si devono utilizzare come variabile surrogato rispettivamente i consumi per i tre tipi di combustibile.

Nel caso dell’approccio top-down occorre raccogliere le seguenti informazioni:

- emissioni da disaggregare;
- variabili surrogato per la disaggregazione spaziale delle emissioni.

I domini di applicazione dei modelli tri-dimensionali sono aree a mesoscala, dell’ordine tipicamente centinaia di chilometri, che generalmente comprendono interamente una regione nonché porzioni delle regioni confinanti.

Le emissioni di partenza da disaggregare possono essere rappresentate dalle emissioni su scala nazionale o quelle regionali o provinciali provenienti da eventuali inventari locali già disponibili per il dominio di studio (ma senza il dettaglio comunale di interesse, altrimenti non si presenterebbe l’esigenza di applicare un’ulteriore disaggregazione). In assenza di inventari locali, si suggerisce, se l’anno è quello di interesse, di utilizzare le stime su base regionale che l’ANPA stessa mette a disposizione ottenute dalla disaggregazione delle emissioni nazionali. Tale attività innanzitutto viene svolta da personale esperto, ma soprattutto garantisce un’omogeneità di applicazione di procedure di disaggregazione per tutto il territorio nazionale e di conseguenza che le variabili surrogato applicate per la disaggregazione siano coerenti o coincidenti con le variabili eventualmente utilizzate dall’ANPA per aggregare dati sugli indicatori di attività disponibili su scala territoriale inferiore a quella nazionale (regionale per esempio) al fine di ottenere l’indicatore su base nazionale.

Per il reperimento delle variabili surrogato le fonti da cui si attinge sono molto diversificate ed eterogenee tra loro; in particolare, si sfruttano dati provenienti dalle elaborazioni statistiche dell’ISTAT (per es. Censimento generale dell’industria e dei servizi, Censimento generale della Popolazione e delle abitazioni, Censimento generale dell’agricoltura etc.), del Ministero dell’Industria, dell’ENEL, dell’ACI e della Società Autostrade, dalle mappe di uso del suolo (*land use*) CORINAIR e delle Regioni.. Nell’appendice E delle Linee Guida nella predisposizione di inventari locali sono riportati alcuni esempi di variabili surrogato da utilizzare per la disaggregazione spaziale a livello urbano.

Data l’eterogeneità delle fonti (ACI, ISTAT etc.) è fondamentale stabilire delle corrispondenze tra le classificazioni con cui vengono codificate le informazioni nei vari archivi (ACI, ISTAT etc.) e quella SNAP, secondo la quale vengono forniti fattori di emissione e metodologie di calcolo per le emissioni. In molti casi per esempio la variabile surrogato utilizzata è costituita dal numero di addetti, generalmente fornita per categorie produttive secondo la nomenclatura ISTAT. Nell’utilizzo di tali informazioni è fondamentale, perciò, determinare il legame che intercorre tra la classificazione SNAP e quella delle attività economiche ISTAT.



Per la compilazione di un inventario di emissioni con approccio bottom-up sono necessari i seguenti gruppi di informazioni:

- fattori di emissione;
- indicatori di attività;
- informazioni dettagliate sulle fonti localizzate;

Noi ci si dilunga in questa sede sulla stima delle emissioni con approccio bottom-up e sul reperimento delle informazioni richieste dal momento che entrambi vengono ampiamente discussi nelle Linee Guida a cui si rimanda per i dettagli.

Nel metodo misto vengono applicati entrambi gli approcci, nel caso più frequente si segue un approccio bottom-up per il traffico autoveicolare, il riscaldamento, le fonti biogeniche (se il dominio comprende aree particolarmente ricche di vegetazione) e l'approccio top-down per tutte le altre fonti.

#### 2.4.3 Applicazione di processori per predisposizione emissioni secondo tipo di informazioni e formato richiesti dal modello.

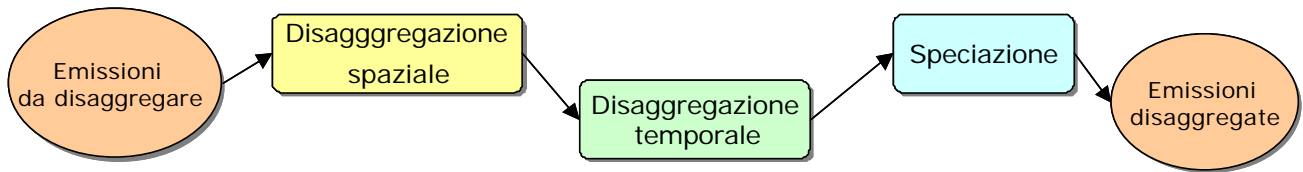
I processori per la predisposizione delle emissioni per i modelli tridimensionali hanno il compito di elaborare le emissioni provenienti dagli inventari secondo la tipologia di informazioni e formato richiesti dal modello.

Si è visto che in generale gli inventari di emissione contengono, laddove esistenti, emissioni su scala comunale (se su scala regionale si vedano le procedure di disaggregazione spaziale discusse nel paragrafo precedente per passare al dettaglio comunale) e riferite all'anno. Nella maggior parte dei casi, i composti organici volatili vengono trattati nel loro complesso o al più distinti in metano e non metanici. I modelli fotochimici richiedono valori orari di emissione specificati per ciascuna cella del grigliato, e per una ventina di specie contenenti o specie chimiche singole o specie-gruppo, cioè trattano come un'unica specie chimica gruppi di composti simili per struttura e reattività. Stesso discorso vale per il particolato che viene trattato negli inventari come totale, senza distinguere per classi granulometriche (di particolare interesse la conoscenza delle particelle più fini) e per composizione chimica come invece richiesto dai modelli proposti alla simulazione del particolato.

Un processore per la predisposizione delle emissioni per modelli tri-dimensionali deve quindi consentire di effettuare :

- ❑ l'allocazione spaziale per permettere il passaggio dal dettaglio comunale alla cella;
- ❑ la disaggregazione temporale per permettere di ricondurre le stime da base annuale a oraria;
- ❑ la speciazione per trasformare le informazioni complessive di COV e PTS in specie-gruppo richieste dal modello

la ripartizione granulometrica per ricavare le stime di PTS in classi granulometriche secondo le richieste dal modello. Questo vale ovviamente in via del tutto generale, ciò non esclude che, in alcuni casi, l'emissioni disponibili possano già coprire in modo esaustivo uno o tutti e quattro i dettagli desiderati (spaziale e/o temporale e/o chimico-fisico delle specie inquinanti) e quindi l'utilizzo del processore sia limitato alla fornitura del dettaglio mancante o alla lettura/scrittura delle emissioni nel formato informatico richiesto. Va detto inoltre che alcuni sistemi consentono congiuntamente la determinazione delle emissioni e la loro predisposizione ad uso dei modelli. In tal caso per esempio la disaggregazione top-down invece che su scala comunale (o in aggiunta) su cella può avvenire esattamente con lo stesso criterio contemporaneamente (Simoni, 1998a).



#### 2.4.3.1 L'allocazione spaziale

Generalmente un inventario è riferito a delle entità territoriali o amministrative (regione, provincia, comune). Al contrario il dominio di applicazione di un modello tridimensionale deve essere necessariamente un grigliato tridimensionale a base rettangolare o quadrata, scelta in modo tale da contenere l'area di studio ed eventualmente una fascia di celle perimetrali per limitare possibili effetti al bordo, e con un numero variabile di strati verticali (generalmente all'interno dei primi 5000 metri). Quindi i lati del dominio di calcolo evidentemente non coincidono mai con i confini amministrativi o territoriali dell'area coperta dall'inventario né quelli delle celle con quelli dell'entità territoriale più piccola per la quale si dispone delle emissioni (generalmente il comune).

Nel caso sia necessario ripartire su un grigliato le emissioni comunali o, più in generale, riferite ad una qualsiasi entità poligonale, bisogna associare ad ogni attività una opportuna variabile surrogata e la stima del valore di tale variabile su ogni maglia del reticolo. La frazione delle emissioni comunali da attribuire ad una maglia è data dal rapporto fra il valore assunto dalla proxy sulla maglia stessa e il valore assunto sull'intero comune. L'emissione complessiva di una maglia di reticolo dovuta all'attività in esame è naturalmente la somma dei contributi di tutti i comuni che sono compresi interamente o in parte nella maglia stessa.

Nel caso più semplice si può utilizzare come variabile surrogato la superficie del comune, quindi ricavare le emissioni relative alla maglia  $i$ -esima dalla somma dei prodotti delle emissioni dei comuni compresi in parte o completamente nella maglia per la frazione di superficie

Tipiche variabili surrogate da usare per la disaggregazione su reticolo sono le superfici delle diverse tipologie di uso del suolo. Un esempio è la cartografia vettoriale a scala nominale 1:250.000 CORINE Land cover che classifica tutto il territorio italiano in diversi tipi di uso del suolo. Un'altra fonte è la cartografia tematica regionale su supporto cartaceo o digitale (raster o vettoriale).

Occorre sottolineare che queste procedure di disaggregazione vanno effettuate con molta cautela ed essere consapevoli che nelle operazioni di "ritaglio" l'informazione originaria viene più o meno pesantemente rielaborata. Il risultato finale può dipendere sensibilmente per esempio dal rapporto tra il lato medio dei poligoni (comuni per es.) e il passo del grigliato.

Nel caso delle sorgenti lineari, per ciascun arco di sorgente intersecante una maglia di reticolo si deve calcolare la frazione delle emissioni da attribuire alla maglia stessa. Dato che l'arco è l'unità elementare di sorgente lineare su cui si dispongono informazioni, in quanto si può considerare omogeneo, la frazione delle sue emissioni da attribuire alla maglia va necessariamente calcolata come rapporto fra la lunghezza dell'intersezione tra arco e maglia e lunghezza dell'arco stesso.

La somma dei contributi provenienti da tutti gli archi intersecanti la maglia in oggetto darà le emissioni totali della maglia prodotte da sorgenti lineari.

Le sorgenti puntuali sono invece caratterizzate in fase di censimento anche dalla posizione geografica e quindi non necessitano di alcuna disaggregazione in quanto ricadono univocamente in una singola maglia alla quale vanno interamente attribuite le emissioni.

L'emissione complessiva di una maglia di reticolo risulta infine dalla somma estesa a tutte le sorgenti diffuse, lineari e puntuali che interessano la maglia.

Per quanto concerne la componente verticale del dominio, alcuni modelli richiedono un'assegnazione delle emissioni in quota ai corrispondenti strati verticali. Questo può essere fatto per esempio per le fonti puntuali con camini elevati, che possono essere assegnati agli strati verticali corrispondenti sulla base dell'altezza effettiva di fuori uscita dei fumi .

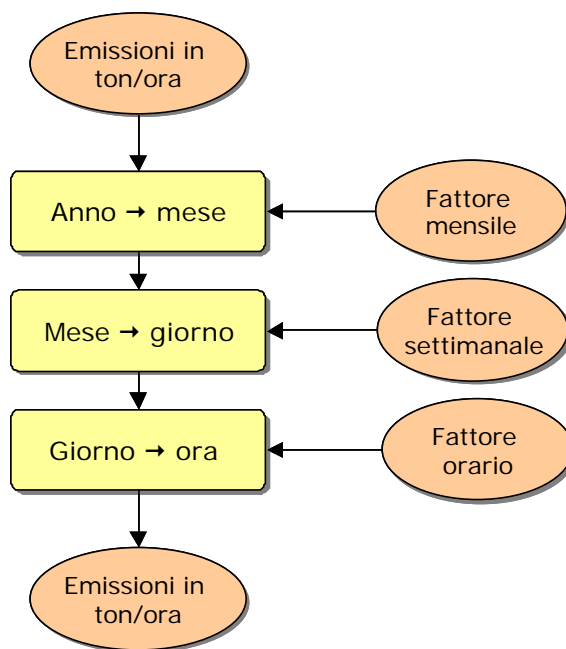
#### 2.4.3.2 La disaggregazione temporale

Analogo discorso vale per il dettaglio temporale, dal momento che i modelli tri-dimensionali richiedono generalmente le emissioni per ogni ora del periodo di simulazione mentre le emissioni contenute negli inventari sono solitamente riferite all'anno.

Le procedure di disaggregazione temporale vengono applicate per ripartire emissioni aggregate (dal punto di vista temporale) rispetto al dettaglio temporale utile. Nel caso più frequente, per passare da emissioni annuali a orarie, si utilizzano tre profili di modulazione:

- mensile, che tiene conto di come si distribuiscono le emissioni di un anno sui dodici mesi;
- settimanale, che tiene conto del tipo di giorno distinto in feriale, sabato e domenica o lunedì , martedì etc.;
- orario, che tiene conto della distribuzione delle emissioni generalmente per un giorno tipo medio settimanale, oppure per un giorno tipo feriale, sabato e domenica.

Questi profili vengono introdotti sotto forma di matrici contenenti dei fattori peso percentuali che consentono di calcolare le emissioni per una certa fonte di emissione ad una certa ora di un giorno qualsiasi dell'anno, moltiplicando il valore medio annuale per il fattore peso di quel mese rispetto all'anno, del tipo di giorno di studio (feriale, sabato, domenica) rispetto al giorno medio settimanale e di quell'ora rispetto al valore giornaliero. Schematicamente i passaggi da effettuare vengono rappresentati nel diagramma che segue.



I profili temporali devono consentire di riprodurre il più fedelmente possibile l'andamento temporale delle emissioni che in realtà possono dipendere dal modificarsi nel tempo sia dell'indicatore di attività che del fattore di emissione. Per esempio nel caso del traffico le emissioni vengono a dipendere sia dal numero di veicoli transitanti alle varie ore sia dal fattore di emissione (massa di inquinante per unità di veicoli) che a sua volta può variare nel tempo in funzione della temperatura in modo più o meno sensibile a seconda degli inquinanti (basse temperature influenzano notevolmente le "emissioni a freddo" di CO, mentre elevate temperature determinano un maggior contributo delle "emissioni evaporative" di COV). Data l'evidente difficoltà nel trovare un profilo unico che tenga conto di entrambi le variazioni, si considera solitamente l'andamento temporale di uno delle due variabili, quella che si ritiene che incida in modo più significativo nel modulare le emissioni. Per esempio nel caso delle emissioni da traffico il profilo temporale si valuta sulla base dell'andamento dei flussi di traffico, cioè numero di veicoli transitanti nell'ora, giorno, mese, nel caso delle emissioni biogeniche si utilizza la variazione temporale della radiazione e/o la temperatura, nel caso delle emissioni da riscaldamento la variazione del fabbisogno energetico etc.

Va detto infine che l'utilizzo dei profili temporali si pone nel caso di emissioni fornite aggregate nel tempo oppure nel caso di calcolo delle emissioni mediante l'applicazione dell'approccio top-down. Nel caso invece di approccio bottom-up si utilizzano solitamente modelli di emissione che forniscono già il dato orario dal momento che richiedono l'indicatore di attività su base oraria (esempio i modelli di emissione da traffico calcolano le emissioni a partire da velocità dei veicoli e flussi di traffico orari e fattori di emissione che di ora in ora vengono aggiornati sulla base della temperatura, analogo discorso vale per le emissioni biogeniche che vengono ricavati nei modelli di emissione sulla base della superficie coperta da una certa coltura e del fattore di emissione aggiornato sulla base della radiazione e temperatura oraria).

#### 2.4.3.3 La speciazione

Terminata la predisposizione dei profili temporali, occorre introdurre la speciazione dei COV nelle specie-gruppo considerate dal modello in uso. Per far questo è necessario operare per fasi: definire un profilo di speciazione (contenente le percentuali in massa con cui sono presenti le singole specie COV sui COV totali) per ciascuna delle fonti emissive a cui si riferiscono le emissioni da disaggregare, riferire tali informazioni dalle singole specie alle specie-gruppo ed infine costruire il file di emissione come richiesto dal modello.

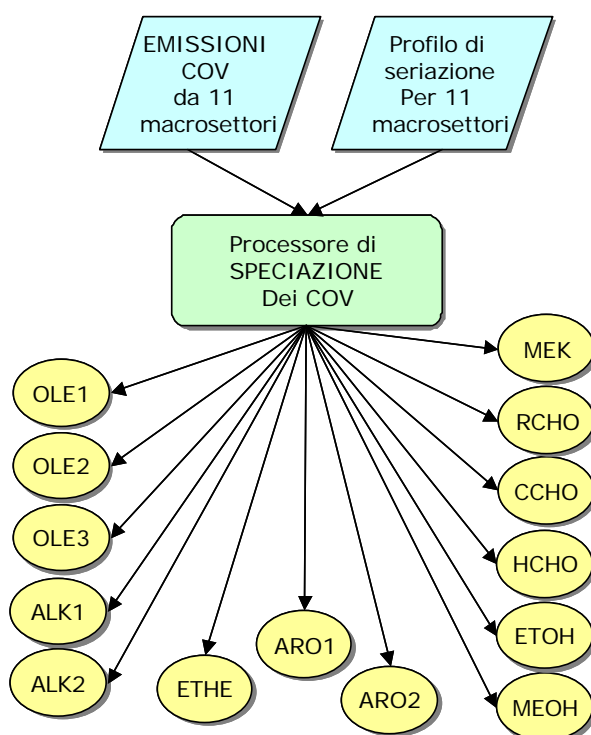
Per la prima fase si utilizzano programmi appositi generalmente forniti con il modello fotochimica. Ad esempio, nel caso del modello fotochimico CALGRID il processore che si utilizza si chiama PREPEMIT, che richiede in ingresso un profilo tipico di emissione rappresentativo per l'intera area di studio e per tutto il periodo di simulazione. Alla predisposizione dei profili di speciazione viene dedicato il paragrafo che segue.

Per ogni profilo di emissione relativo a ciascuna fonte emissiva viene quindi applicato il programma PREPEMIT che fornisce in uscita, oltre ad altri parametri, il numero di moli emesse relative alle sostanze organiche emesse. Da qui si ottiene il fattore peso relativo alla specie CALGRID e al settore produttivo considerato. Il programma di disaggregazione temporale e speciazione dei COV necessita quindi in ingresso degli 11 file ".rxp", output di PREPEMIT, dai quali estrarre il numero di moli e il peso molecolare di ciascuna specie organica per costruire così la matrice dei fattori peso. Necessita inoltre delle tre matrici di disaggregazione temporale di cui si è parlato precedentemente (Carter, 1997).

Tale programma fornisce in uscita 14 file, uno per ciascuna specie COV considerata da CALGRID come specie emessa. Ciascuno dei file contiene le matrici orarie di emissione che non distinguono più i contributi dei vari settori, infatti, dopo la speciazione, per ciascuna specie vengono sommate le emissioni da tutti le 11 fonti (:

La fase finale prevede la costruzione del file *arem.dat*, contenente le emissioni orarie areali, per ogni inquinante CALGRID, relativi alle celle dell'area di studio.

Una esemplificazione dettagliata viene fornita nell'annesso 1.



## 2.5 *I profili di disaggregazione temporale e di speciazione*

L'individuazione dei profili è generalmente compito non semplice, dal momento che i profili sia temporale che di speciazione andrebbero specificati per ciascuna fonte di cui si dispone la stima di emissione da disaggregare. Gli inventari possono includere il contributo anche di centinaia di fonti emissive, tuttavia solitamente si utilizza un numero più limitato di profili dal momento che molte attività possono avere in comune lo stesso profilo. Alle volte le emissioni sono fornite per gli 11 macrosettori CORINAIR. Questo se da un lato semplifica il compito, dato il numero più limitato di profili da raccogliere, dall'altro presenta comunque alcune difficoltà nell'assegnare un unico profilo medio alle emissioni di un macrosettore nelle quali confluiscono contributi da attività estremamente differenti tra loro. Infatti, non disponendo del contributo quantitativo derivante dalle singole attività incluse in un macrosettore, non è semplice determinare un profilo risultante a partire da quelli relativi ad ogni attività componente (scegliendo quello dell'attività prevalente oppure considerando una media pesata degli stessi). Per esempio nel macrosettore "processi industriali" vengono a confluire i contributi di attività con regimi di lavoro molto differenziati (alcune con cessazione del funzionamento degli impianti nelle ore notturne nella pausa di fine settimana, altre con funzionamento in continuo, mediante turnazione del personale etc) e quindi con conseguenti profili temporali di attività molto diversi. Altro problema frequente è recuperare informazioni riferite alla situazione italiana.

Compatibilmente con queste difficoltà, nel corso delle diverse applicazioni di modelli fotochimica sono stati utilizzati diversi set di profili che sono riportati in bibliografia (CTN\_ACE 1/2001, CISE 1996, Maffeis 1999, Gabusi 2000).

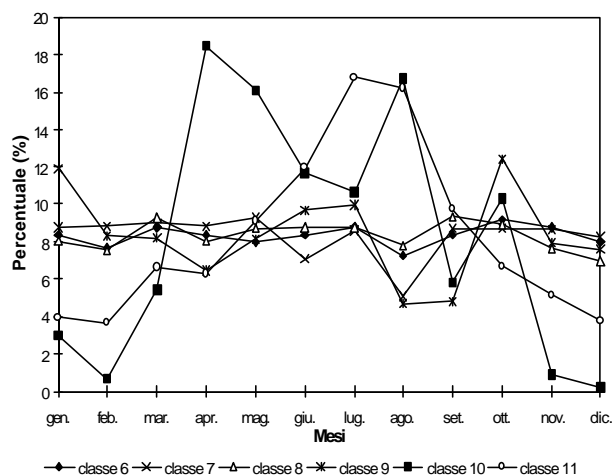
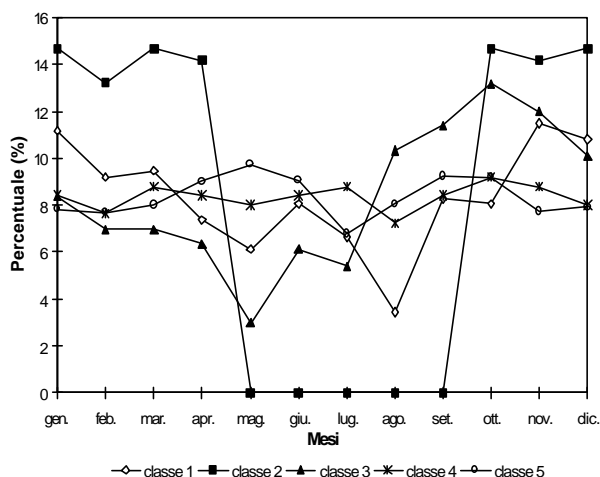
Per la determinazione dei profiliriporati nei grafici che seguono si sono consultate fonti svariate a seconda del ciclo produttivo e del periodo temporale a cui il profilo si doveva riferire (Simoni, 1998a, Simoni 1998 b). Per esempio nel caso del traffico on road e del riscaldamento sono stati ricavati dall'andamento di emissioni calcolate nell'ambito di studi precedenti effettuati sull'area milanese (Gualdi et al., 1992), oppure per la classe traffico off road a partire dalle variazioni medie annuali, settimanali e giornaliere del numero di voli degli aerei. Le emissioni biogeniche, classe "natura", sono dovute a più fonti di cui la prevalente è rappresentata dalla vegetazione. Per il calcolo di queste ultime è stato utilizzato l'algoritmo di Tingey-Pierce (Pierce et al., 1990) che consente di stimare le emissioni (isoprene, alfa-pinene, monoterpene etc.) in funzione, tra gli altri, di parametri ambientali quali la radiazione solare e la temperatura.

Per le classi "solventi", "processi produttivi" e "combustione eccetto industrie" (impianti residenziali e terziario), si è supposto che l'andamento delle emissioni mensili in un anno dipendesse rispettivamente per le prime due dal numero di giorni lavorativi contenuti in ogni mese e per la terza dal numero di giorni di funzionamento degli impianti. Per il calcolo dei rapporti tra emissioni dei giorni feriali, prefestivi e festivi rispetto al giorno medio settimanale si sono assunte le seguenti ipotesi in prima approssimazione: per l'agricoltura si è supposta un'attività pressoché continua con pausa parziale solo alla domenica (per tenere conto mediamente che una parte delle attività viene condotta sicuramente a regime continuo); per la classe "natura" si sono considerati uguali le emissioni di tutti i giorni della settimana; per le industrie (cicli produttivi) e per l'uso di solventi si è considerata la pausa lavorativa per il fine settimana: per combustione eccetto industria (centrali termoelettriche) e combustione nell'industria, per raffinerie, per trattamento di rifiuti si è assunto un funzionamento uguale per tutti i giorni della settimana con limitata riduzione nel sabato e domenica. Si è considerato infatti che i grossi impianti di combustione difficilmente vengono spenti nel fine settimana, nel corso del quale eventualmente funzionano a regime ridotto.

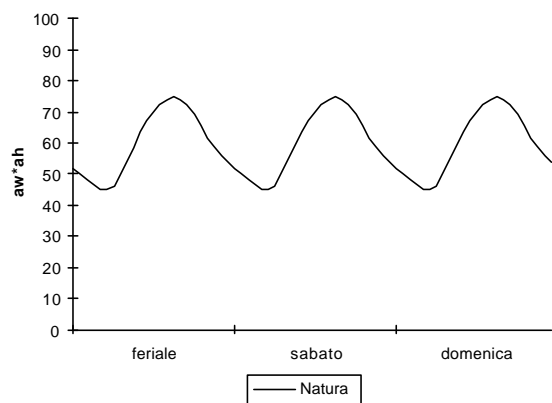
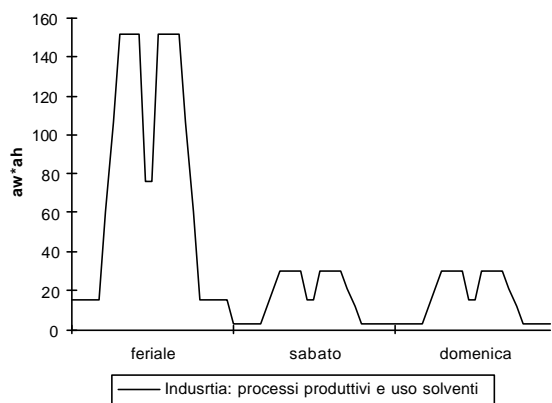
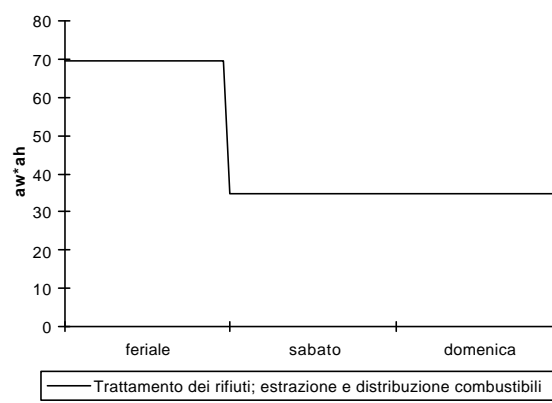
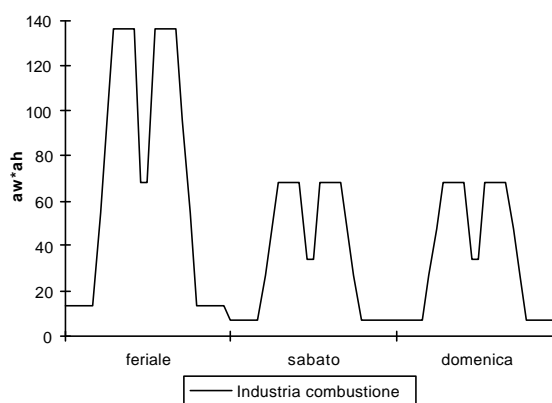
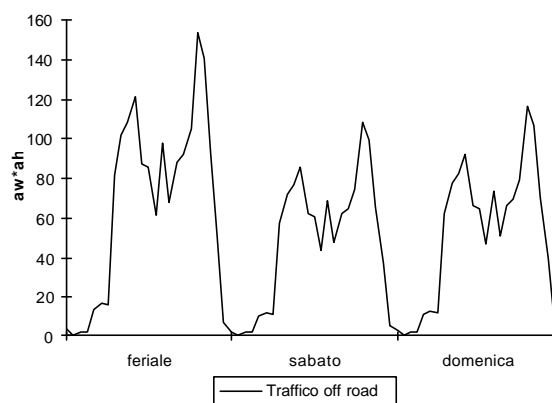
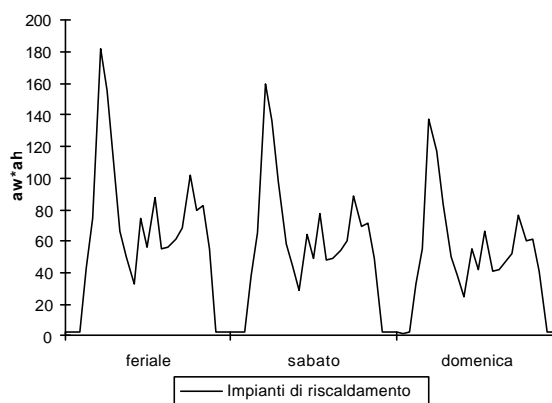
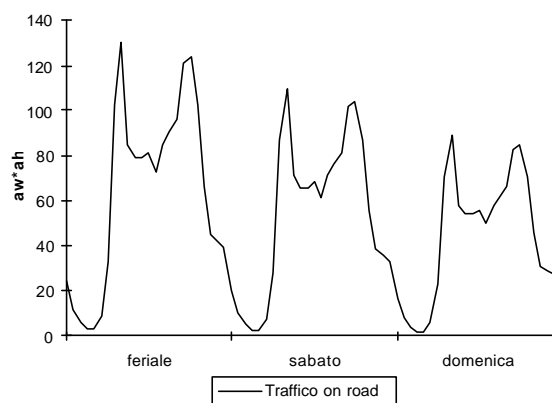
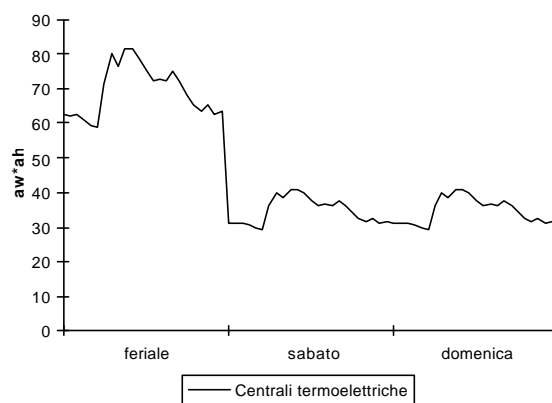
Altrettanto complesso è il reperimento di profili di speciazione, tuttavia l'identificazione delle specie di VOC è una informazione necessaria per la modellizzazione dei fenomeni di smog fotochimico. Il dato aggregato dei VOC è specificato attraverso la determinazione del profilo tipico di emissione di ciascuna tipologia di sorgente. L'analisi dello spettro emissivo è elaborata tramite



l'impiego di dati di letteratura; da anni, infatti, progetti europei e statunitensi sono finalizzati alla definizione di profili di speciazione per i diversi comparti emissivi. Gli archivi del database SPECIATE dell'US-EPA (Environmental Protection Agency) e CORINAIR raccolgono centinaia di profili relativi a sorgenti industriali e non, raggruppati in 31 categorie. D'altra parte è opportuno ricordare che, dal momento che le classi di composti organici sono generate in funzione dei parametri specifici che caratterizzano la sorgente, i margini di incertezza connessi all'utilizzo di profili standard sono piuttosto elevati (Finzi, 2001).



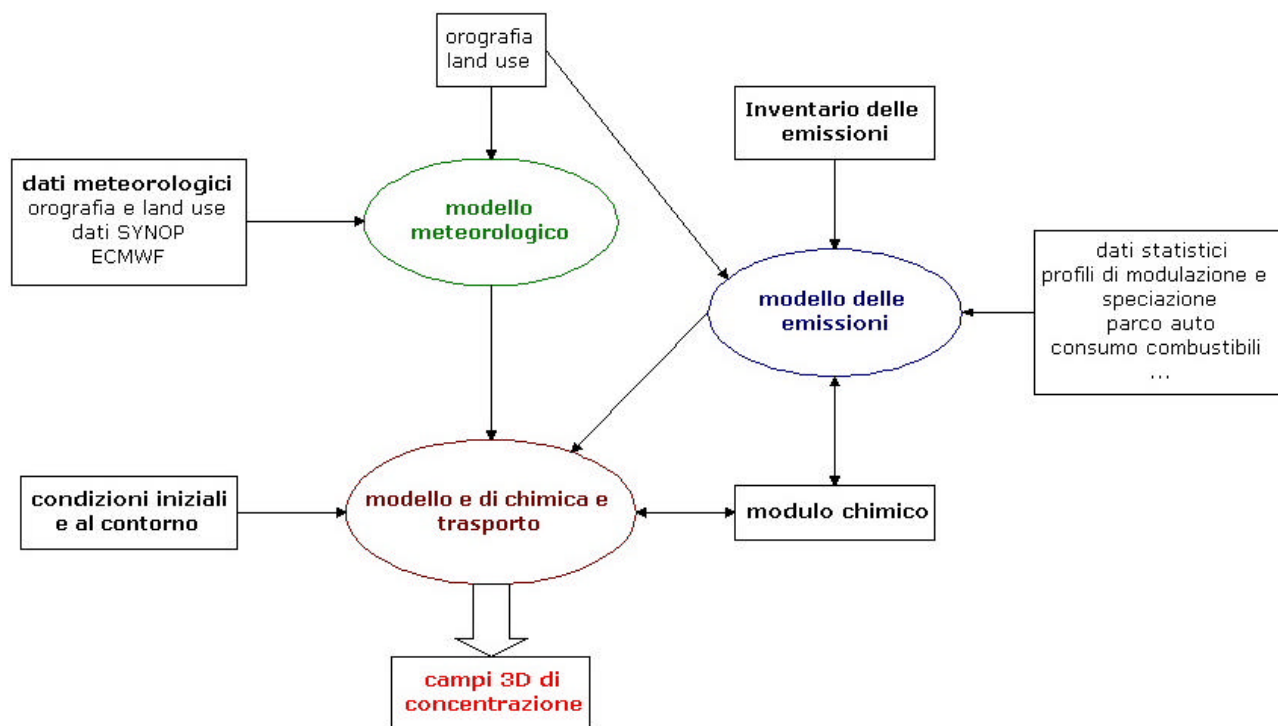
### Profili di disaggregazione mensili relativi alle 11 classi CORINAIR.



**Profili di disaggregazione per tipo di giorno e oraria.**

## 2.6 Il modello delle emissioni POEM per modellistica fotochimica

In figura 6 è riportato uno schema tipico dei componenti di un sistema modellistico fotochimico e del flusso di informazioni tra i diversi componenti del sistema. I componenti sono: il sistema meteorologico, emissivo, chimico e di trasporto. Un modello delle emissioni è uno strumento metodologico e informatico che consente di descrivere lo stato delle emissioni o di ipotizzare scenari alternativi; fornisce informazioni strutturate sulle sorgenti emissive e i flussi di emissione nella porzione di territorio in esame.



**Figura 3 Schema di flusso di un sistema modellistico dinamico**

Un esempio è il modello POEM (Pollutant Emission Model), sviluppato in Italia dalla università di Brescia. Questo modello è illustrato in dettaglio nell'annesso 1.

POEM elabora e predispone i campi emissivi in input ad un modello fotochimico euleriano a griglia. Per soddisfare i requisiti richiesti dai modelli di trasporto, il dato in uscita a questo processore delle emissioni, elaborato dal dato grezzo di partenza acquisito dall'inventario nazionale, deve presentare una risoluzione spaziale conforme alla griglia del modello fotochimico e un notevole dettaglio temporale; inoltre, le informazioni concernenti i composti organici volatili devono essere dettagliate, specificando la composizione dei singoli composti, tramite l'operazione di speciazione.

### Riferimenti bibliografici del cap. 2

Finzi G., Pirovano G., Volta M. Gestione della qualità dell'aria. Modelli di simulazione e previsione. McGraw-Hill, 2001.

Cirillo M., De Lauretis R., Del Ciello R. Review Study on European Urban Emissions Inventories – Topic Report 30/96 ETC/AE. Technical report, EEA (European Environment Agency), 1996.

US EPA (United States Environmental Protection Agency). Handbook for Criteria for Pollutant Inventory Development: A Beginner's Guide for Point and Area Sources. Technical report, US EPA, 1990.

Gabusi V. Un modello per la stima delle emissioni finalizzato alla valutazione di scenari di inquinamento fotochimico in Lombardia. Tesi di Laurea, Università degli Studi di Brescia, 1998.

EEA. EMEP/CORINAIR Atmospheric Emission Inventory Guidebook (Second eddition). Technical report, EEA (European Environment Agency), 1999.

Ahlvik P., Eggleston S., Goriben N., Hassel D., Hickman A.J., Joumard R., Ntziachristos L., Rijkeboer R., Samaras Z., Zieroc K.H. Copert III, Computer Programme to Calculate Emission from Road Transport. Technical report, EEA, 1997.

Carter W.P.L. Documentation for the SAPRC atmospheric photochemical mechanism preparation and emissions processing programs for implementation in airshed models. Technical report, California Air Resources Board, 1988.

ANPA, 2000. "Le emissioni in atmosfera da trasporto stradale", Serie Stato dell'Ambiente 12/2000

CTN-ACE, 2000. "Inventari locali di emissioni in atmosfera: prima indagine conoscitiva", RTI CTN-ACE 1/2000

CISE, 1996. Disaggregazione spaziale, temporale e dei COV dell'Inventario delle emissioni CORINAIR 1990: applicazione alla Regione Lombardia – CISE-SAA-96-89 Rapporto finale, Milano, 1996

CTN-ACE 2001. "Osservatorio dei modelli su smog fotochimico e ozono troposferico". RTI CTN-ACE 1/2001.

Simoni P., Angelino E., Bedogni M., Gualdi R. Modello fotochimico applicato ad un bacino esteso. Valutazione modellistica di un episodio di smog fotochimico nel bacino aerologico esteso di Milano. Monografia Provincia di Milano, gennaio 1998.

Simoni P., Angelino E. La predisposizione degli inventari di emissione per lo studio dell'inquinamento fotochimico, Ingegneria Ambientale, Vol.27, N.1-2 pp.16-23, Gennaio-Febbraio 1998.

Di seguito sono riportati i siti web di maggiore interesse.

European Environment Agency : <http://www.eea.eu.int/>

European Topic Centre on Air Emissions: <http://etc-ae.eionet.eu.int/etc-ae/index.htm>

EMEP/CORINAIR Atmospheric Emission Inventory Guidebook (First edition)  
<http://eionet.eea.eu.int/aegb/default.htm>

EMEP/CORINAIR Atmospheric Emission Inventory Guidebook (Second edition):  
<http://reports.eea.eu.int/EMEPCORINAIR/>

COPERT III: <http://vergina.eng.auth.gr/mech/lat/copert/copert.htm>

CORINAIR European Emissions Data:

<http://www.aeat.co.uk/netcen/corinair/testnewlayout/corin.html>

US EPA U.S. Environmental Protection Agency: <http://www.epa.gov/>

Clearinghouse for Inventories and Emissions Factors: <http://www.epa.gov/ttn/chief/>

Handbook for Criteria for Pollutant Inventory Development: A Beginner's Guide for Point and Area Sources : <http://www.epa.gov/ttn/chief/eidocs/beginner.pdf>

SPECIATE: <http://www.epa.gov/ttn/chief/software/speciate/index.html>

Home page di W.P.L. Carter: <http://pah.cert.ucr.edu/~carter/>

### 3 I meccanismi chimici nei modelli di qualità dell'aria

Un modulo fondamentale di un modello fotochimico è rappresentato dal meccanismo chimico. Il meccanismo chimico utilizzato varia da modello a modello. La formulazione del meccanismo chimico e le relative modalità di utilizzazione influenzano molto i risultati forniti dal modello. Grande rilievo hanno le approssimazioni, a volte forzatamente drastiche, che caratterizzano i meccanismi chimici attualmente utilizzati per trattare la chimica in fase gassosa.

La necessità di utilizzare meccanismi chimici non dettagliati (o condensati) deriva dal dover rimanere in tempi di calcolo accettabili, se non proprio operativi, e sono pertanto inevitabili allo stato attuale. D'altro lato, però, anche all'interno dei meccanismi "condensati" oggi in uso vi sono alcune differenze. Nei meccanismi chimici condensati viene eseguito il lumping (raggruppamento, accorpamento) delle specie organiche. La procedura di lumping può essere eseguita essenzialmente con due approcci: quello basato sulla struttura degli organici coinvolti (lumped structure approach) e quello basato sulle specie coinvolte (lumped species approach).

Nel lumped structure approach le specie organiche sono suddivise in elementi reattivi più piccoli in funzione del tipo di legami carbonio presenti all'interno di ciascuna specie. Un meccanismo chimico di questo tipo è il CB-IV (Gery et al., 1990). Al suo interno una specie chimica come il propene ( $C-C=C$ ) viene rappresentata come un gruppo paraffinico (1 PAR) più un gruppo olefinico (1 OLE). Invece una specie come il pentano ( $C-C-C-C-C$ ) viene rappresentata come 5 gruppi paraffinici (5 PAR). È quindi evidente che questo tipo di lumping perde le informazioni sulla lunghezza originale della catena carboniosa nella specie organica di interesse.

Nel lumped species approach una specie organica o una specie generalizzata viene utilizzata per rappresentare molecole organiche simili. La similitudine viene spesso determinata dal fatto di reagire in modo analogo con il gruppo ossidrilico OH. Esempi di meccanismi chimici di questo tipo sono SAPRC (Carter 2000). Le specie lumped hanno nomi del tipo OLE1, OLE2, ARO1, ALK1, ... e rappresentano, ad esempio, olefine con diversa reattività nei confronti del radicale ossidrilico, aromatici, alcani, ecc.

Una analisi dettagliata di tali meccanismi, eseguita sulla base della conoscenza della fotochimica atmosferica tipica delle varie zone del nostro Paese, viene presentata in dettaglio nell'annesso 2.

In particolare nell'annesso 2 capitolo 2 vengono descritte le caratteristiche principali dei meccanismi chimici maggiormente in uso. Nel capitolo 3 dell'annesso 2 vengono invece analizzate le carenze (molte delle quali comuni a tutti loro) riscontrate e che riguardano le applicazioni all'environment tipico italiano.

Riassumendo e schematizzando al massimo i risultati dell'analisi condotta nella duplice ottica della possibile scelta di un modello esistente e dell'attenzione che va prestata allo sviluppo futuro di modelli che colmino le carenze evidenziate nelle applicazioni sul territorio italiano, possiamo dire quanto segue:

- nelle applicazioni effettuate in Italia (Deserti et al., 2001), il modello fotochimico di gran lunga più conosciuto e più usato risulta CALGRID, il meccanismo chimico più utilizzato nelle applicazioni italiane di CALGRID è SAPRC. Alcune applicazioni hanno utilizzato il meccanismo Carbon Bond IV relativo al modello UAM (Urban Airshed Model) dell'EPA. Attualmente sono inoltre frequentemente utilizzati i risultati del modello EMEP per fornire condizioni iniziali ed al contorno a modelli fotochimici a piccola scala. EMEP utilizza un proprio meccanismo chimico MSC-W.



- questi meccanismi chimici risultano elaborati e ottimizzati su situazioni tipiche del continente americano (SAPRC, CB-IV) o del nord Europa (EMEP MSC-W). Ovviamente, tali situazioni differiscono da quelle tipiche mediterranee per più di un aspetto, non soltanto nella chimica che si deve ritenere fondamentale, ma anche nelle situazioni fisico - meteorologiche dei bassi strati, che solitamente modulano e talvolta dominano il comportamento degli inquinanti fotochimici.
- Mentre per quanto riguarda la chimica inorganica, essa viene espressa in maniera esplicita nei modelli fotochimici, la trattazione della chimica organica richiede l'aggregazione di vari composti in cosiddette specie-gruppo.
- I meccanismi chimici oggi in uso nei modelli fotochimici si differenziano quindi soprattutto per i diversi approcci con cui affrontano il problema dell'aggregazione, sostanzialmente in termini di meccanismi lumped molecule (SAPRC e in parte EMEP MSC-W) o lumped structure (CB IV).
- Tutti i moduli considerati non includono la chimica delle fasi acquosa ed eterogenea.
- Il meccanismo SAPRC si caratterizza per una notevole flessibilità nella fase di aggregazione (all'interno dell'approccio lumped molecule), che in buona parte può essere decisa dall'utente/sperimentatore.
- Il meccanismo CB IV adotta l'approccio lumped structure e tratta esplicitamente l'isoprene come biogenico importante; tuttavia la struttura delle aggregazioni è quasi completamente fissata. Adotta un radicale perossido universale.
- Il meccanismo EMEP MSC-W adotta in parte l'approccio lumped molecule ed è inserito in un modello a larga scala che ne limita l'applicabilità a studi di eventi di smog fotochimico a scala più ridotta. Il fatto che il modello sia lagrangiano conduce a difficoltà nella rappresentazione per scambi boundary layer - libera troposfera. Tale modello è ottimizzato per studiare eventi di trasporto transfrontaliero e deposizioni acide. Solo negli ultimi anni si è sviluppata una versione euleriana del modello.
- La mancanza delle fasi liquida ed eterogenea nei moduli chimici dei suddetti modelli rappresenta un fattore fortemente negativo, soprattutto sulle nostre regioni, a causa delle loro condizioni climatiche.
- Ciò porta a trascurare reazioni chimiche fondamentali, non tanto per la formazione di acido nitrico e composti dello zolfo, che rappresentano comunque prodotti terminali, quanto per il processo di formazione di acido nitroso e il conseguente innesco radicalico ai processi fotochimici ad esso dovuto nelle prime ore del mattino. Anche questo effetto risulta particolarmente cruciale in Italia a causa della radiazione notevole (che innesca la fotolisi) rispetto a nord America e nord Europa e per la conseguente dinamica del boundary layer.
- Potrebbero essere necessari modelli con più "fisica" che consentano una descrizione migliore della dinamica, specialmente dei bassi strati.
- Le emissioni biogeniche presentano peculiarità nel bacino del Mediterraneo: esse portano a ridimensionare il ruolo dell'isoprene e a dover valutare attentamente l'importanza dei terpeni.
- L'approccio lumped structure rappresenta una via razionale per accorpare varie specie in base a criteri oggettivi (soprattutto in mancanza di dati su costanti cinetiche, velocità di reazione e inventari delle emissioni), tuttavia l'approccio lumped molecule appare più consistente dal punto di vista dello "sviluppo reattivo" (si fanno reagire insieme specie con simili velocità di reazione).

- Il problema dell'aggregazione non può essere risolto a priori, ma va considerato di volta in volta in base alle caratteristiche degli specifici run dei modelli (ad esempio sulle nostre zone andrebbero aggregati con estremo dettaglio i terpeni).

In conclusione quindi:

Per quanto riguarda i meccanismi chimici SAPRC e CBIV analizzati, non è possibile a priori ritenere uno dei due più accurato e prestante dell'altro. Come spesso accade, la scelta del meccanismo migliore dipende dalla realtà che ci si trova ad analizzare, soprattutto in termini di conoscenza che si ha del sistema. Laddove non si disponesse di dati accurati rispetto alla chimica (soprattutto organica) in termini di costanti cinetiche, velocità di reazione e inventario delle emissioni, il meccanismo CB IV fornirebbe comunque un metodo razionale per aggregare le specie chimiche. Laddove, invece, si avessero a disposizione in maniera dettagliata tutte queste informazioni, l'approccio lumped molecule del SAPRC dovrebbe garantire una maggiore affidabilità nell'aggregazione. A ciò si può aggiungere la maggiore flessibilità di quest'ultimo meccanismo, che consente aggregazioni che tengano conto delle specie importanti per la zona in esame, come nel caso dei terpeni per il bacino del Mediterraneo.

La formulazione dinamica del modello EMEP, orientata al trasporto transfrontaliero e alle deposizioni acide, non presenta caratteristiche particolarmente interessanti dal punto di vista dell'analisi locale o regionale di episodi più o meno acuti di inquinamento fotochimico. Sarebbe interessante inserire il modulo chimico MSC-W del modello EMEP, in schemi dinamici più prestanti o più ad alta risoluzione.

Per quanto riguarda lo sviluppo futuro vanno poste all'attenzione della comunità scientifica italiana e del sud Europa tre priorità essenziali:

La prima riguarda lo sviluppo di una chimica in fase acquosa ed eterogenea, indispensabile per la trattazione di quei canali ossidativi, come nel caso in cui è coinvolto l'acido nitroso, che portano ad un innesco dei fenomeni fotochimici nel primo mattino e che i modelli attuali ovviamente non apprezzano. Abbiamo visto come questa situazione sia comune a tutte le zone del globo, ma come assuma una particolare importanza alle nostre latitudini, dove l'intensità di radiazione solare è maggiore rispetto ad altre regioni e la dinamica del boundary layer particolarmente attiva.

La seconda priorità riguarda lo sviluppo di modelli che, appunto, trattino in maniera più accurata (pienamente prognostica) l'evoluzione dinamica dell'atmosfera, in particolar modo dei suoi bassi strati.

Infine, una speciale attenzione dovrà essere richiesta nello stilare inventari delle emissioni realistici, sia nelle emissioni antropiche che in quelle biogeniche della vegetazione mediterranea, al fine di avere uno strumento ovviamente indispensabile per inizializzare i modelli, ma anche un ausilio importante nell'attività di aggregazione.

### **Riferimenti bibliografici del cap. 3**

Carter W.P.L., 1990, Atmospheric Environment, 24A, pp. 481-518.

Deserti M., Spagli L., Bini G., Poluzzi V., Minach L., de Maria R., Zanini G., Vialetto G., Brusasca G., Angelino E., Liguori F., 2001, Osservatorio dei modelli su smog fotochimico e ozono troposferico, RTI CTN\_ACE 1/2001.

Gery M.W., Whitten G.Z., Killus J.P., Dodge M.C., 1989, Journal of Geophysical Research 94, 12925-12956.

Stockwell et al., 1990

Stockwell et al., 1997

#### 4 Predisposizione delle condizioni iniziali ed al contorno

Nei modelli euleriani fotochimici i processi chimico – fisici sono descritti attraverso equazioni differenziali alle derivate parziali. La soluzione delle equazioni differenziali contenute in un modello richiede che vengano specificate sia le concentrazioni iniziali che le condizioni al contorno. Come si è detto, queste informazioni vengono richieste come dati di ingresso sotto forma di un campo di concentrazione iniziale su tutte le celle del dominio e sulle celle di bordo. Queste informazioni sono richieste per tutti gli inquinanti trattati.

I modelli possono risultare molto sensibili a queste informazioni specialmente se il dominio prescelto risulta molto influenzato da processi di trasporto di prodotti e precursori dall'esterno del dominio( si vedano ad esempio i risultati descritti nel paragrafo 1.1).

Nell'utilizzo pratico di modelli euleriani vengono applicati diversi metodi per stimare le condizioni iniziali ed al contorno, in dipendenza dalle informazioni disponibili e della accuratezza richiesta per la particolare simulazione. Questi metodi possono essere raggruppati in due categorie principali: i **metodi che utilizzano dati sperimentali di concentrazione** (o metodi empirici) ed i **metodi che utilizzano dati di concentrazione calcolati da un modello** a scala più ampia (o metodi di nesting).

Esistono diverse varianti, più o meno complesse del metodo empirico. Nel caso più semplice, che viene in genere applicato quando non si dispone di alcuna informazione di dettaglio, le concentrazioni iniziali ed al contorno per le varie specie chimiche vengono considerate costanti nello spazio e stazionarie nel tempo. I valori di concentrazione vengono attribuiti in base a stime o dati di letteratura. Nel caso più complesso vengono utilizzati profili verticali, differenti per ogni specie chimica considerata, e che variano nel tempo secondo una evoluzione diurna legata alla dinamica meteorologica dello strato limite atmosferico. Il ricorso a dati sperimentali risulta spesso notevolmente approssimato dato l'elevato numero di specie chimiche delle quali occorre conoscere la concentrazione, sia al suolo che in quota. La soluzione adottata deve quindi essere attentamente valutata da personale esperto e tenendo in considerazione le specificità dello scenario simulato.

Anche nel caso delle tecniche basate su dati di concentrazione calcolati da un modello vi sono diverse varianti. Un metodo spesso utilizzato è basato sull'impiego dell'output di un modello a grande scala (CTN 2000) adattato per fornire l'input al modello impiegato a scala inferiore. I modelli a grande scala spesso differiscono dai modelli utilizzati per gli studi a piccola scala sia per il meccanismo chimico utilizzato che per i processi meteorologici considerati. I modelli a grande scala operano infatti su base continentale utilizzando, per necessità di calcolo, schemi chimici semplificati. D'altra parte i modelli impiegati per gli studi di scenario a scala regionale o inferiore utilizzano in genere schemi chimici il più possibile completi. Vi è quindi la necessità di dedurre tutte le specie chimiche utilizzate dallo schema più complesso a partire dal limitato numero di specie chimiche contenute nell'output del modello a grande scala.

I modelli fotochimici di nuova generazione consentono di operare su scale spaziali diverse (multiscala) con passi di griglia a risoluzione crescente. La predisposizione delle condizioni al contorno utilizzando modelli multiscala (autonesting) presenta il vantaggio di utilizzare lo stesso schema chimico, riducendo le approssimazioni legate al passaggio da un schema chimico all'altro.

#### 4.1 *L'utilizzo di dati sperimentali di concentrazione*

I dati sperimentali di concentrazione possono provenire sia da una rete di monitoraggio della qualità dell'aria che da campagne sperimentali appositamente condotte.

I dati sperimentali provenienti da una rete di monitoraggio della qualità dell'aria sono in genere disponibili come serie temporali continue di valori medi su un prefissato intervallo di tempo di mediazione (1 ora, 8 ore, 24 ore) in un punto di misura posto, in genere al suolo. Gli inquinanti rilevati sono limitati agli inquinanti prescritti dalle norme di riferimento e si riferiscono solo a poche delle specie coinvolte nei processi fotochimici (ozono, ossidi di azoto, monossido di carbonio, biossido di zolfo, benzene, ed in alcuni casi  $PM_{10}$  e  $PM_{2.5}$ , idrocarburi totali escluso il metano).

I dati sperimentali provenienti da campagne di misura assumono forme molto variabili e dipendono dagli scopi per i quali la campagna viene realizzata (si veda ad es. RTI CTN\_ACE 1/2001 appendice 4, disponibile sul sito WEB di ANPA). Nella migliore delle ipotesi una campagna sperimentale intensiva potrà consentire di raccogliere dati sperimentali per un periodo di tempo limitato ad alcune settimane e relativo ad un certo numero di specie chimiche, scelte tra i traccianti dei processi fotochimici (ad esempio oltre agli ossidi di azoto ed ozono, formaldeide ed aldeidi superiori, PAN, acido nitrico e acido nitroso, perossido di idrogeno, isoprene ed idrocarburi specati, radicali perossi OH e  $NO_3$ , alcuni composti carbonilici). Va infatti sottolineato come non tutte le specie chimiche considerate dai meccanismi chimici implementati siano misurabili sperimentalmente. In alcuni casi inoltre questi dati possono essere forniti sotto forma di profili verticali, qualora i rilevatori vengano montati su piattaforme aeree, oppure vengano utilizzati strumenti di telerilevamento (quali DOAS o LIDAR). Alcuni strumenti di telerilevamento forniscono dati che assumono il significato più generale di concentrazione media nello spazio, anziché di semplici valori puntuali.

Si tenga comunque presente che i dati sperimentali rappresentano la indispensabile base conoscitiva sulla quale impostare e verificare una simulazione modellistica. Raramente però le misure sperimentali consentono di ottenere informazioni sufficientemente complete e dettagliate da poter essere direttamente utilizzate per fornire le condizioni iniziali ed al contorno ad un modello fotochimico. Sia i dati sperimentali provenienti dalle reti di rilevamento che da campagne di misura devono quindi essere opportunamente processati per essere adattati a fornire le condizioni iniziali ed al contorno richieste dal modello che si vuole impiegare. In generale le operazioni che occorre compiere, sotto ipotesi più o meno stringenti, sono: **la modulazione temporale, la estensione spaziale, il processamento delle specie chimiche.**

##### 4.1.1 la modulazione temporale

L'operazione di modulazione temporale serve a ricondurre i dati sperimentali dal passo temporale proprio delle osservazioni al passo temporale proprio del modello. Ad esempio se il passo temporale del modello è orario sarà necessario modulare nel tempo alcuni inquinanti per i quali l'intervallo di tempo di mediazione sperimentale è maggiore, ad esempio 24 ore. In altri casi potrebbe essere necessario ricostruire dati mancanti per un certo periodo, ad esempio per alcune ore di una giornata, a causa di guasti alla strumentazione.

La modulazione temporale può essere eseguita applicando opportuni profili di variazione temporale che pesano la concentrazione media rilevata su intervalli di tempo superiori all'ora in modo diverso nelle varie ore della giornata, tenendo conto della variabilità temporale tipica di un determinato inquinante (ad esempio in base al giorno tipo stagionale).

#### 4.1.2 la estensione spaziale

L'operazione di estensione spaziale dei dati serve ad estendere i dati provenienti da osservazioni puntuali all'intero dominio di applicazione del modello, sia in orizzontale che in verticale.

Una precauzione di fondamentale importanza, che deve essere sempre considerata nell'utilizzare i valori puntuali per ottenere informazioni su un dominio esteso è la rappresentatività spaziale della misura che, in generale, può variare da pochi metri quadrati (per esempio per una stazione situata in un canyon urbano) ad alcuni chilometri quadrati (per esempio per una stazione rurale lontana da fonti di emissione specifiche) e può risultare diversa a seconda del tipo di inquinante considerato. In terreno complesso inoltre, o in ambiente urbano, l'alta variabilità spaziale delle concentrazioni fa sì che un'interpolazione, ancorché sofisticata, possa portare facilmente a considerazioni erranee.

estensione orizzontale: qualora si disponga di stazioni sufficientemente rappresentative dell'inquinamento medio (stazioni di fondo), queste potranno essere utilizzate per stimare le condizioni al contorno ed iniziali scegliendo una stazione di riferimento che si considera rappresentativa di tutta l'area, o utilizzando tecniche geostatistiche di interpolazione spaziale, nel caso si considerino più stazioni di riferimento. Le condizioni iniziali verranno stimate a partire dalle concentrazioni misurate l'ora precedente l'inizio del periodo di studio.

Si deve sottolineare come non sia possibile indicare un metodo generale per l'attribuzione della rappresentatività spaziale ad una stazione di misura e quindi l'utilizzo di dati provenienti dalle stazioni di rilevamento deve essere attentamente valutato caso per caso.

#### estensione verticale

Varie campagne sperimentali finalizzate a ricostruire il profilo verticale degli inquinanti fotochimici hanno mostrato la presenza in quota di uno strato di riserva di inquinanti secondari, fenomeno che assume rilevanza soprattutto nei periodi in cui si hanno le condizioni ottimali per la produzione di ozono, in quanto l'intrappolamento notturno di ozono, al di sopra dello strato stabile, non consentendone la distruzione da parte degli ossidi d'azoto, permette quell'accumulo costante che porta ad episodi di superamento delle soglie. Per estendere verticalmente i risultati è stato suggerito un metodo per simulare questo effetto (Tamponi e Toscani, 1999).

Secondo questo metodo le concentrazioni in quota degli inquinanti fotochimici vengono stimate in base alla variazione dell'altezza di rimescolamento. L'ipotesi di fondo è che all'interno dello strato rimescolato la concentrazione degli inquinanti risulti pressoché costante con la quota, mentre al di sopra si assume una decrescita esponenziale del tipo:

$$C = A + Be^{\left(\frac{-z}{L}\right)}$$

dove A è il valore della concentrazione dell'inquinante considerato in libera atmosfera, L è una costante di smorzamento dell'inquinante e B viene calcolato a partire dal dato di concentrazione al top dello strato rimescolato. Al momento che lo strato rimescolato comincia a decadere si considera che l'inquinante rimanga intrappolato nello strato superiore e lì permanga, a meno di un fattore di perdita. Si delineano in tal modo per gli inquinanti di tipo secondario tre zone: lo strato più vicino al terreno, rimescolato, che ha una concentrazione simile a quella misurata, uno intermedio con concentrazione costante, che costituisce una sorta di riserva, e uno superiore dove avremo una decrescita di tipo esponenziale con la quota (tra i diversi strati viene effettuata un'opportuna interpolazione per evitare il verificarsi di forti discontinuità). Tale struttura si rafforza durante la notte e nel primo mattino per poi essere rivoluzionata nella giornata seguente. Gli inquinanti primari nelle stazioni di fondo, lontane perciò da fonti dirette di inquinamento nelle ore centrali della giornata, a causa della dispersione, presentano invece hanno concentrazioni trascurabili.

Per simulare la struttura verticale delle condizioni iniziali si farà riferimento all'andamento dell'altezza di rimescolamento e delle concentrazioni il giorno precedente l'inizio del periodo di studio.

#### 4.1.3 il processamento delle specie chimiche

L'operazione di processamento delle specie chimiche serve ad ottenere le informazioni relative a tutte le specie chimiche richieste in ingresso dal modello, a partire dalle specie misurate sperimentalmente. Questa operazione, eseguita a partire da dati sperimentali necessariamente incompleti, presenta il massimo grado di approssimazione e viene in genere eseguita sotto ipotesi molto forti.

### 4.2 *L'utilizzo di dati di concentrazione calcolati da un modello*

I dati provenienti da un modello sono rappresentati da una matrice di concentrazioni a quattro dimensioni ( $C_{x,y,z,t}$ ) per ognuno degli inquinanti trattati. In generale la matrice prodotta da ciascuna esecuzione di un modello può presentare una diversa risoluzione spaziale e temporale, oltre a contenere specie chimiche diverse. Per essere utilizzati come input ad un altro modello o per l'esecuzione in successione dello stesso modello, questi dati devono venire processati per essere adattati a fornire le condizioni iniziali ed al contorno al modello che si vuole impiegare. In generale le operazioni che occorre compiere sono la **sincronizzazione temporale**, la **interpolazione spaziale**, il **processamento delle specie chimiche** e l'**eventuale conversione delle specie chimiche**.

#### 4.2.1 Sincronizzazione temporale

L'operazione di sincronizzazione temporale serve a ricondurre i dati di concentrazione utilizzati come condizioni iniziali ed al contorno al periodo ed al passo temporale utilizzato per la simulazione.

Le condizioni iniziali sono necessarie solamente per iniziare l'esecuzione del modello e quindi la simulazione viene avviata al passo temporale al quale si conclude la simulazione del modello a scala più ampia.

Le condizioni al contorno sono richieste ad ogni passo temporale della simulazione e quindi è necessario che il modello a scala più ampia produca dati per lo stesso periodo e con lo stesso passo temporale col quale si vuole eseguire la simulazione. Supponendo ad esempio di voler eseguire una simulazione di 24 ore con un passo di 1 ora, il file di input dovrà fornire la concentrazione delle varie specie per 25 passi orari, uno iniziale e 24 al contorno. Gli istanti iniziale e finale delle simulazioni dovranno coincidere.

Nel caso il modello a scala più ampia utilizzi un passo temporale diverso, ad esempio 6 h anziché 1 ora, sarà necessario sincronizzare i dati di concentrazione forniti al contorno applicando una interpolazione temporale od un profilo orario di modulazione temporale. Le problematiche di preprocessamento risultano più semplici nel caso venga eseguita una simulazione in autonesting. In questo caso infatti il file di concentrazione proveniente dal run precedente può essere utilizzato direttamente come file di condizione iniziale ed il passo temporale può essere fissato uguale per le due simulazioni..

#### 4.2.2 Interpolazione spaziale

L'operazione di interpolazione spaziale serve a ricondurre i dati di concentrazione utilizzati come condizioni iniziali ed al contorno al dominio ed al passo di griglia utilizzato per la simulazione.

I modelli di qualità dell'aria possono utilizzare diversi tipi di sistemi di coordinate orizzontali (ad es. geografiche, UTM, stereografica polare, lambert, ecc.) e verticale (ad es. sigma-p, sigma-z, pressione, oppure l'altezza dal livello del suolo), in molti casi è quindi necessario realizzare trasformazioni da un sistema di coordinate all'altro. Per realizzare tali trasformazioni è necessario che siano completamente specificate tutte le informazioni relative al sistema di coordinate ed alla struttura verticale ed orizzontale della griglia di lavoro di entrambi i modelli.

Interpolazione orizzontale. Una interpolazione orizzontale si rende necessaria sia quando il sistema di coordinate orizzontali del file di input risulta diverso da quello richiesto dal file di output, sia quando i due files presentano diversa risoluzione spaziale. Tipicamente questa situazione si verifica quando le condizioni iniziali ed al contorno vengono generate per un dominio di lavoro ad alta risoluzione innestato all'interno di un dominio esterno a bassa risoluzione.

Un metodo per trattare le diverse strutture delle griglie orizzontali è quello di mappare ogni colonna verticale delle celle di output ad una corrispondente colonna delle celle di input. I profili verticali di concentrazione corrispondenti alla cella di input vengono quindi assegnati come profili verticali per la corrispondente colonna della cella di output. La mappatura orizzontale può essere realizzata ad esempio utilizzando un criterio di prossimità delle celle. Questo criterio consiste nel calcolare le coordinate superficiali del centro della cella di base di ogni colonna verticale sia per il dominio di input che per il dominio di output. Le coordinate dei centri vengono quindi confrontate per stabilire quale colonna del dominio di input sia più vicina alle colonne richieste in output.

Interpolazione verticale. Se il sistema di coordinate verticali del modello utilizzato per generare le condizioni iniziali ed al contorno è diverso da quello utilizzato dal modello impiegato per la simulazione, è necessario procedere ad una interpolazione verticale trasformando le coordinate verticali espresse nel sistema di input (per es. sigma-p) nel sistema di coordinate richieste dal file di output (per esempio altezza dal livello del suolo). Nel caso frequente nel quale la risoluzione verticale risulti diversa sarà necessario procedere ad una interpolazione verticale.

Nel caso più semplice, nel quale i due sistemi di coordinate verticali siano dello stesso tipo ma con diversa risoluzione si può utilizzare un metodo di interpolazione lineare per stabilire una corrispondenza tra i files di input ed output.

Nel caso, più complesso, nel quale i due sistemi di coordinate risultano diversi occorre procedere prima alla trasformazione di coordinate e quindi procedere alla interpolazione per stabilire una corrispondenza tra i files di input ed output.

#### 4.2.3 Processamento delle specie chimiche

L'operazione di processamento delle specie chimiche serve a ricondurre i dati di concentrazione di ciascuna specie chimica fornita dal modello a larga scala alle corrispondenti specie chimiche richieste dal modello utilizzato per la simulazione a scala inferiore.

Le specie chimiche presenti nel file di input dipendono dal meccanismo chimico utilizzato e dalle specie selezionate nella impostazione della esecuzione del modello a scala più ampia. Il caso più complesso in cui i due modelli utilizzano meccanismi chimici diversi viene trattato successivamente, ora consideriamo il caso nel quale venga utilizzato lo stesso meccanismo chimico. In questo caso possono verificarsi due situazioni: le specie sono identificate con lo stesso nome surrogato (si veda il cap. 4) oppure non sono identificate con lo stesso nome surrogato.

Nel caso le specie contenute nel file di input abbiano lo stesso nome surrogato è possibile procedere ad una semplice assegnazione delle specie contenute nel file di input alle specie richieste dal file di output. Nel caso invece in cui i nomi surrogati delle specie siano diversi è necessario procedere alla

assegnazione di una corrispondenza tra i due elenchi di specie. Ad esempio nel caso della formaldeide questa viene identificata col nome surrogato HCHO nel meccanismo chimico SAPRAC e con il nome surrogato FORM nel meccanismo chimico CB IV (al proposito si veda l'annesso 2).

#### 4.2.4 Conversione tra vari meccanismi chimici

Il problema diviene più complesso nel caso sia necessario convertire le specie gruppo da un meccanismo chimico ad un altro. In questo caso non sempre esiste una corrispondenza definita in modo univoco tra le specie gruppo considerate nei vari meccanismi chimici. In pratica è quindi sempre necessario fare alcune assunzioni arbitrarie per eseguire una conversione tra un meccanismo chimico e l'altro. (capitolo 3). Per i meccanismi chimici in fase gassosa per esempio questo aspetto risulta particolarmente critico per le specie organiche che vengono usualmente definite in modo diverso nei vari meccanismi. In questi casi è necessario stabilire delle regole di conversione che devono essere attentamente valutate caso per caso. Un esempio di regole di conversione tra alcune delle specie considerate dal meccanismo chimico del modello continentale EMEP e dal meccanismo chimico SAPRAC 90, utilizzato dal modello fotochimico CALGRID, è riportato nella tabella 1.

Va infine sottolineato come, allo stato attuale, questo tipo di conversioni sia disponibile, pur con le dovute attenzioni, solamente per le specie chimiche in fase gassosa, mentre non vi sono regole analoghe per gli aerosol.

**Tabella 1: Assegnazione delle specie prodotte del modello a larga scala EMEP alle classi SAPRC90.**

EMEP	Formula chimica	SAPRC 90 CESI	SAPRC90 ISAO	Definizione
1 NO	NO	NO	NO	Nitric Oxide
2 NO <sub>2</sub>	NO <sub>2</sub>	NO <sub>2</sub>	NO <sub>2</sub>	Nitric dioxide
3 SO <sub>2</sub>	SO <sub>2</sub>	SO <sub>2</sub>	SO <sub>2</sub>	Sulfur dioxide
4 CO	CO	CO	CO	Carbon monoxide
5 CH <sub>4</sub>	CH <sub>4</sub>	CH <sub>4</sub>	#1	Methane
6 C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	ALK1	ALK1	Ethane
7 NC <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	nC <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	ALK1	ALK1	n-butane
8 C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	ETHE	ETHE	Ethene
9 C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	OLE1	OLE1	Propene
10 OXYL	o-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> (CH <sub>3</sub> )CH <sub>3</sub>	ARO2	ARO2	o-xylene
11 HCHO	HCHO	HCHO	HCHO	Formaldehyde
Continua fino a 70 specie				



### 4.3 Esempi di applicazioni in Italia

Dati sperimentali di concentrazione e dati provenienti da modelli sono stati utilizzati per fornire le condizioni iniziali ed al contorno in varie applicazioni di modelli fotochimici in Italia. La maggior parte di queste applicazioni hanno utilizzato dati provenienti da un modello a scala continentale, che utilizza un meccanismo chimico semplificato, per fornire dati in ingresso a modelli fotochimici impiegati per simulazioni a scala regionale. Alcune di queste applicazioni sono state descritte nei precedenti rapporti CTN (osservatorio modelli 1999 e specifiche tecniche modelli inquinamento a grande distanza 2000), ne riprendiamo qui gli aspetti specifici, rimandando ai riferimenti per gli approfondimenti.

L'Appendice 2 del rapporto RTI CTN-ACE 1/2001 "osservatorio dei modelli su smog fotochimico e ozono" riporta un esempio applicativo di modellazione fotochimica in Lombardia. L'esperienza descritta è stata svolta per il primo IOP (Intensive Observation Period) – 11,12 e 13 maggio 1998) della campagna di misura PIPAPO (Pianura PADana Produzione Ozono) svoltasi tra aprile e giugno 1998 nell'area compresa tra Milano e le Alpi nell'ambito del sub-project LOOP (Limitation Of Oxidant Production) del progetto EUROTRAC-2 (The Transport and Chemical Trasformation of Environmentally Relevant Trace Constituents in the Troposphere over Europe) del programma europeo EUREKA (Neftel, 1999; Cadenazzi et al., 1999; Borrell, 1999). In questa esperienza le condizioni iniziali e al contorno sono state determinate partendo dalle misure sperimentali effettuate presso le stazioni della Rete di Rilevamento della Qualità dell'Aria della Regione Lombardia, utilizzando il sistema informativo ambientale NEBULA LTK (Quaranta, 1999), e presso le stazioni di misura attive dei diversi gruppi che hanno partecipato alla campagna PIPAPO (LOOP Database, 1999). Sono state, inoltre, utilizzate informazioni di letteratura (Saylor et al., 1999; Andersson-Skold, 1999; Jenkin et al., 1999; Kuhn et al. 1998) ed è stato utilizzato un semplice algoritmo basato sullo sviluppo giornaliero dell'altezza dello strato di rimescolamento. Sono state fatte anche delle simulazioni utilizzando le condizioni iniziali e al contorno fornite dal modello a scala regionale EURAD (Kuhn et al., 1998).

Nella esperienza di simulazione fotochimica svolta in Emilia –Romagna e descritta nel rapporto CTN-ACE 2000 "OB09.02b Valutazione modellistica dell'inquinamento a grande distanza, Parte II: La valutazione modellistica dell'ozono" è stato utilizzato il medesimo algoritmo semiempirico della precedente applicazione basato sui dati sperimentali rilevati durante la campagna di monitoraggio MOTAP (Deserti ed. al.; 2001). In questa esperienza sono state anche eseguite simulazioni utilizzando dati provenienti dai modelli fotochimici a scala continentale EMEP-MSCW e CHIMERE (descritti in precedenza.).

Nello stesso rapporto CTN-ACE 2000 viene descritta una applicazione svolta in Lombardia dove sono stati utilizzati i codici CALGRID (Yamartino et al., 1992) e STEM-FCM per simulare il trasporto e le trasformazioni chimico-fisiche degli inquinanti presenti all'interno del dominio di calcolo. L'interfaccia FCM (Flexible Chemical Mechanism) (Kumar et al., 1995), messa a punto da CRB, è stata utilizzata per implementare nel modello STEM diversi meccanismi chimici. Le condizioni al contorno sono state ottenute dal modello a scala continentale EMEP-MSCW.

## 5 I modelli di ultima generazione

Una caratteristica fondamentale dell'atmosfera è la continua interazione tra le diverse scale dinamiche e tra vari processi di inquinamento. Per consentire di trattare adeguatamente queste interazioni è stato formulato il paradigma della "atmosfera unica" (Byun, 1999). Secondo questo paradigma per simulare realisticamente i fenomeni meteorologici e di inquinamento è necessario un

approccio basato su una descrizione complessiva del sistema atmosfera, formulata in base ai "principi primi". Per esempio la descrizione dei processi di produzione degli ossidanti fotochimici, della deposizione di sostanze acidificanti e nutrienti e della produzione e crescita dell'aerosol atmosferico non possono essere affrontati separatamente. Una trattazione appropriata di questi processi di inquinamento richiede che venga trattato l'intero spettro di scale spaziali e temporali e che vengano considerate simultaneamente le interazioni tra i vari inquinanti. Un altro aspetto basilare nella prospettiva dell'atmosfera unica è rappresentato dalla descrizione dinamica dell'atmosfera. Nei modelli di nuova generazione si è quindi giunti ad una formulazione che presenta un forte accoppiamento tra modelli meteorologici e modelli chimici di trasporto e diffusione, in grado di trattare simultaneamente diverse scale (modelli multi - scala) e diversi processi di inquinamento (modelli multi - inquinante).

Si può quindi dire che si passa da un modello per ogni processo (modelli specializzati) a modelli generalizzati (multi - inquinante) che trattano in modo consistente l'insieme dei processi atmosferici tra loro correlati.

Nei modelli generalizzati la modellazione della qualità dell'aria viene vista come parte integrante della modellazione dell'atmosfera, formulando le equazioni fondamentali e gli algoritmi di calcolo in modo consistente e compatibile. Molti modelli atmosferici di vecchia generazione sono stati formulati sulla base di alcune approssimazioni sulla dinamica dell'atmosfera. Per semplificare il modello e snellire i calcoli le equazioni fondamentali vengono semplificate in modo da trattare in modo appropriato il problema specifico per il quale è stato sviluppato il modello. Vengono quindi implementati algoritmi di calcolo approssimati, meno esigenti in termini di risorse di calcolo. È questo ad esempio il caso della assunzione idrostatica nei modelli meteorologici o la scelta di un sistema di coordinate geometrico, adatto a trattare la piccola scala (dove la curvatura terrestre può essere trascurata), ma non la grande scala. Queste approssimazioni sulla dinamica e sul sistema di coordinate diventano però incompatibili con alcuni processi atmosferici e devono perciò essere attentamente verificate quando vengono utilizzate per trattare problemi generali. La formulazione dei modelli di nuova generazione viene quindi basata su un set di equazioni completo, compressibile (o non idrostatico) e riferito ad un sistema di coordinate generale, garantendo una completa consistenza tra il modello meteorologico ed il modello chimico di trasporto e diffusione.

Ricapitolando le caratteristiche fondamentali dei modelli di nuova generazione possono essere così formulate:

- consistenti con i modelli meteorologici (paragrafo 5.1)
- operativi e con capacità di assimilazione dati (paragrafo 5.2)
- Multiscala (paragrafo 5.3)
- Multiinquinante - multiprocesso (inquinanti fotochimici, aerosol, deposizioni) (paragrafo 5.4)

Nel seguito vengono approfonditi alcuni aspetti relativi a queste caratteristiche.

### ***5.1 I modelli meteorologici per i modelli di qualità dell'aria***

La consistenza tra il modello meteorologico ed il modello chimico di trasporto e diffusione si rende necessaria data la forte dipendenza della qualità delle simulazioni di inquinamento dalla qualità delle informazioni meteorologiche. Queste informazioni meteorologiche possono essere fornite sia attraverso **modelli meteorologici diagnostici**, che analizzano le osservazioni superficiali ed i radiosondaggi, o attraverso **modelli dinamici prognostici** con o senza una assimilazione quadridimensionale dei dati. Per le simulazioni a larga scala (continentale) vengono utilizzati

modelli meteorologici idrostatici, di solito completi di assimilazione quadridimensionale dei dati. Per le simulazioni a scala inferiore (regionale), dove gli effetti topografici sono importanti, vengono utilizzati modelli meteorologici non idrostatici. L'utilizzo di una formulazione idrostatica o non idrostatica ha una forte ripercussione sulle simulazioni di qualità dell'aria. Si veda il paragrafo 1.2 per una descrizione delle grandezze meteorologiche necessarie ad un modello di qualità dell'aria. Per maggiori dettagli si veda Byun, 1999, paragrafo 5.3.

## 5.2 I modelli operativi di qualità dell'aria

Attualmente i modelli di qualità dell'aria vengono normalmente utilizzati per comprendere gli effetti delle strategie di controllo delle emissioni eseguendo un'**analisi di scenario**. In questo tipo di analisi un modello viene eseguito molte volte utilizzando gli stessi dati meteorologici e variando i dati di emissione. L'analisi di scenario può utilizzare dati meteorologici provenienti da un modello meteorologico diagnostico o da un modello meteorologico prognostico. In entrambi i casi i dati meteorologici possono essere forniti utilizzando un modello meteorologico non accoppiato. Questo approccio viene definito **non operativo** (off-line) [Byun, 1999]. Nell'approccio non operativo l'unica attenzione che deve essere posta è che i parametri meteorologici fondamentali forniti nell'input al modello di qualità dell'aria siano tra loro consistenti. Per esempio per garantire la conservazione della massa delle specie presenti in tracce, la densità e le componenti della velocità dovrebbero soddisfare con buona accuratezza l'equazione di continuità.

Nella futura valutazione e gestione della qualità dell'aria il campo di concentrazione degli inquinanti deve essere ricostruito quotidianamente sulla base dei campi meteorologici, delle emissioni e dei dati osservati (assimilazione dei dati). Il campo di concentrazione deve anche essere previsto, sulla base delle previsioni meteorologiche. Questo approccio, nel quale i modelli di qualità dell'aria vengono eseguiti quotidianamente, sia in diagnosi che in previsione, viene definito **operativo**. Nell'approccio operativo il modello di qualità dell'aria deve essere eseguito in modo accoppiato al modello meteorologico prognostico. L'accoppiamento può essere realizzato **in cascata**, integrando in modo indipendente il modello meteorologico e fornendo poi i campi meteorologici in ingresso al modello di qualità dell'aria, o **in linea**, integrando simultaneamente il modello meteorologico e di qualità dell'aria. Nell'approccio in cascata i campi meteorologici vengono resi consistenti con il modello di qualità dell'aria con l'eventuale ausilio di un preprocessore meteorologico.

Nell'approccio **prognostico in linea** (on-line) [Byun, 1999] le equazioni chimiche e di trasporto e diffusione vengono risolte come parte del modello meteorologico dinamico. Nell'approccio prognostico in linea il problema della consistenza dei dati meteorologici risulta meno critico. In tal caso la formulazione dinamica e termodinamica delle equazioni del modello prognostico dovrebbe essere autoconsistente ed i parametri meteorologici utilizzati dalle equazioni chimiche e di trasporto e diffusione risultano disponibili durante l'integrazione numerica del modello ad ogni passo temporale. D'altra parte questo approccio presenta lo svantaggio di incrementare notevolmente le risorse di calcolo necessarie. La gestione operativa, nell'uso routinario per la qualità dell'aria, presenta inoltre molte difficoltà aggiuntive legate al mantenimento di un sistema completo meteorologico/chimico/emissivo.

Lo sviluppo dell'approccio prognostico in linea implica una riformulazione della modellistica dell'atmosfera, sviluppando un completo accoppiamento dei modelli chimici di trasporto e diffusione con i modelli meteorologici, secondo il paradigma dell'atmosfera unica.

A partire dalla fine degli anni 90 è stato intrapreso un notevole sforzo da parte della comunità scientifica per lo sviluppo dell'approccio operativo. Questo approccio è stato dapprima limitato ad applicazioni di ricerca. Recentemente il concetto di atmosfera unica è stato adottato da EPA [EPA, 1999-Models3/CMAQ,] nello sviluppo di un modello regolatore di qualità dell'aria di possibile

implementazione, in accoppiamento al modello meteorologico MM5, come modello operativo in linea

L'approccio operativo in cascata presenta ormai diversi esempi di applicazione in Europa ed è ormai sistematicamente introdotto in applicazioni di routine che coprono l'intero continente. In alcuni casi i modelli operativi vengono applicati in modalità multiscala, con dettaglio su alcune regioni particolarmente sensibili. Questi modelli di qualità dell'aria sono accoppiati ai rispettivi modelli meteorologici operativi dei servizi meteorologici europei.

Il prototipo di modello CHIMERE, sviluppato dal CNRS [server <http://euler.polytechnique.fr/pioneer>] fornisce mappe di **ozono**, analizzate e previste, a scala europea su celle di 50 km<sup>2</sup>, con dettaglio su alcune regioni. Una versione del modello utilizza una tecnica di assimilazione dei dati sperimentali e viene verificato quotidianamente sulla base delle osservazioni. Il modello è accoppiato in cascata al modello meteorologico idrostatico del centro europeo (ECMWF).

Il modello MOCAGE sviluppato da METEO-FRANCE ed attualmente in test (consultabile sullo stesso sito di chimere), produce simulazioni di ozono multiscala, dalla scala globale alla scala regionale in modo accoppiato con il modello meteorologico ALADIN di Meteo France.

Il sistema modellistico EURAD di previsione in tempo reale di inquinanti atmosferici, dell'Università di Colonia, viene eseguito quotidianamente per eseguire previsioni a 48 ore per tutto il continente europeo, sull'Europa centrale e per alcune regioni tedesche (Northrhine-Westfalia). Vengono fornite analisi e previsioni di **ozono**, **NO<sub>2</sub>**, **SO<sub>2</sub>**, **CO** ed in particolare di **PM<sub>10</sub>**, sotto forma di mappe animate dei massimi giornalieri, medie 8 ore e 24 ore, chemiogrammi, ecc. (risultati sul sito <http://www.eurad.uni-koeln.de>). Il modello è accoppiato al modello meteorologico idrostatico MM5.

Il modello di previsione dell'**ozono** REM 3 (Libera Università di Berlino <http://trumf.fu-berlin.de..http://130.133.7.173/data/analyzer>). Produce una previsione deterministica a scala continentale e previsioni statistiche locali. Le informazioni meteorologiche utilizzate provengono dal modello meteorologico del DWD.

### 5.3 I modelli multiscala

La capacità di operare su diverse scale spaziali è necessario per fornire le simulazioni ad alta risoluzione necessarie in molte applicazioni. Molte parametrizzazioni dei processi fisici dipendono dalla scala, ad esempio il trattamento delle nubi. La capacità di operare su un ampio spettro di scale spaziali e temporali richiede quindi una opportuna formulazione degli schemi parametrici utilizzati nella formulazione chimico - fisica del modello.

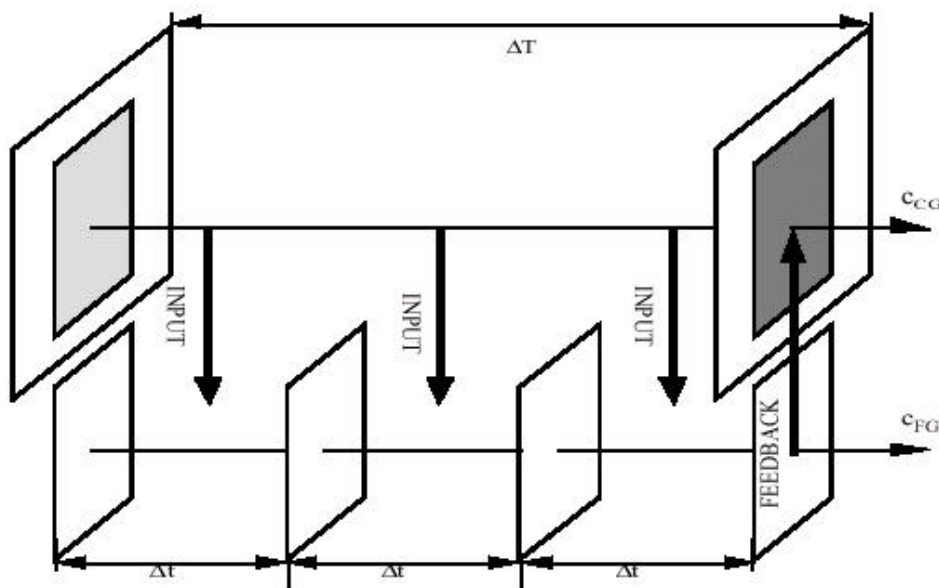
#### 5.3.1 Sistemi di coordinate

Nella formulazione dei modelli meteorologici vengono utilizzati molti diversi tipi di sistemi di coordinate. Per esempio l'altezza geometrica viene spesso utilizzata per studiare i fenomeni nello strato limite atmosferico in quanto offre ovvi vantaggi nel porre in relazione le misure superficiali con i risultati del modello. L'utilizzo della pressione come sistema di coordinate verticali risulta la scelta naturale per molti studi atmosferici in quanto le misure nell'alta atmosfera vengono riferite a livelli di pressione. Analogamente molti diversi sistemi di coordinate verticali possono essere utilizzati nella formulazione dei modelli di qualità dell'aria. Dato il forte accoppiamento tra un modello di qualità dell'aria di nuova generazione ed il modello meteorologico corrispondente, la scelta del sistema di coordinate verticali può influenzare le caratteristiche delle simulazioni di qualità dell'aria tanto quanto le assunzioni sulla dinamica dell'atmosfera.

### 5.3.2 Tecniche di nesting

L'utilizzo di griglie innestate risulta necessario per raggiungere la necessaria risoluzione spaziale, consentendo di trattare le varie scale coinvolte nei processi di qualità dell'aria.

Nella tecnica di innesto statico le griglie sono fissate a priori e restano fisse durante la simulazione. L'innesto deve garantire la conservazione della massa e delle caratteristiche del trasporto all'interfaccia. La figura mostra lo schema di corrispondenza tra le celle della griglia ad alta risoluzione (FC) e le celle della griglia bassa risoluzione (CG).



**Figura 4:**

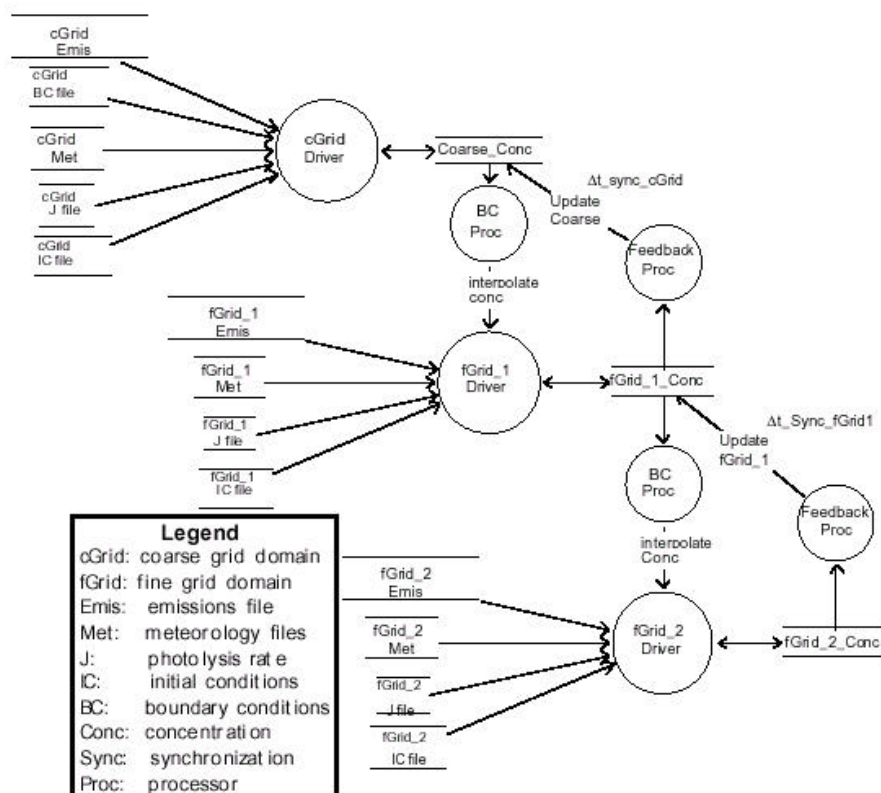
Nella tecnica di innesto dinamico il dominio viene ridefinito durante la simulazione.

Entrambe le tecniche, statica e dinamica, permettono uno scambio unidirezionale (one way) o bidirezionale (two way nesting) tra le due griglie.

Nel nesting unidirezionale la precauzione fondamentale riguarda la conservazione della massa all'interfaccia tra la griglia a maglia larga (Coarser Grid) e la griglia a maglia fine (Finest Grid). Risulta inoltre necessari tenere conto della variazione del flusso durante un time step della maglia larga.

Il nesting bidirezionale si differenzia dal nesting unidirezionale in quanto la concentrazione di ciascuna specie chimica nella griglia a maglia larga viene aggiornata con il risultato della simulazioni nella griglia a maglia fine attraverso un processo di retroazione. L'aggiornamento della concentrazione avviene in ogni cella della griglia a maglia larga eseguendo la media della concentrazione calcolata in tutte le celle della griglia a maglia fine che si sovrappongono alla cella a maglia larga. Particolare attenzione deve essere posta per assicurare la conservazione della massa all'interfaccia tra le due griglie.

Il nesting multilivello è una naturale generalizzazione del nesting singola. Nel nesting multilivello più griglie di risoluzione crescente sono innestate l'una nell'altra. La figura 8 mostra un esempio di schema di calcolo per un nesting a tre livelli.



**Figura 5**

#### 5.4 I modelli multiprocesso

La capacità di trattare diversi processi atmosferici, che danno origine a inquinanti diversi, è una caratteristica fondamentale dei modelli di nuova generazione. La necessità di trattare simultaneamente diversi inquinanti deriva, oltre che dalla natura stessa dei processi atmosferici, che sono tra loro collegati (paradigma dell'atmosfera unica) anche dalla necessità di soddisfare, attraverso un unico strumento operativo, diverse esigenze legate alla valutazione e gestione della qualità dell'aria. Seguendo la distinzione propria delle norme e dei protocolli internazionali, **i processi di inquinamento che devono essere trattati** e per i quali sono stati stabiliti indici ed indicatori di riferimento, **sono, oltre al trasporto e diffusione degli inquinanti primari immessi in atmosfera, la fotochimica, la deposizione ed i processi legati all'aerosol atmosferico.**

I processi fotochimici sono stati diffusamente trattati nel capitolo 3, approfondendo le caratteristiche dei principali meccanismi chimici utilizzati negli attuali modelli di qualità dell'aria. Uno dei limiti della formulazione di gran parte dei modelli di qualità dell'aria, anche avanzati, già evidenziata nel rapporto "osservatorio modelli", è rappresentato dalla assenza della trattazione dei processi nella fase umida ed eterogenea. Tali processi risultano di fondamentale importanza nel determinare la deposizione di inquinanti e nella descrizione complessiva dell'aerosol atmosferico. Si è quindi approfondito in modo specifico questo tema.

#### 5.4.1 la modellazione dell'aerosol atmosferico

Con il termine aerosol atmosferico o particolato atmosferico si definisce genericamente un'ampia classe di sostanze con diverse proprietà chimiche e fisiche presenti in atmosfera sotto forma di particelle liquide (con esclusione dell'acqua pura) o solide. L'aerosol atmosferico è dunque sinonimo di eterogeneità chimica.

Le emissioni di PM originano dalla natura (suolo, aerosol marino, incendi, pollini, eruzioni vulcaniche) e dalle attività dell'uomo, in particolare dal settore dei trasporti su gomma; possono essere emesse direttamente dalla sorgente o formarsi in atmosfera per trasformazione di emissioni gassose di ossidi di zolfo (SOx), ossidi di azoto (NOx) e Composti Organici Volatili (COV).

La quantità di polveri totale, senza discriminare la dimensione, viene indicata col termine Particolato Totale Sospeso (PTS)

Con PM<sub>10</sub> si indica la frazione del particolato con diametro inferiore a 10 µm (PM<sub>10</sub>), mentre con PM<sub>2.5</sub> si indica la frazione di particolato con diametro inferiore a 2.5 µm.

In letteratura sono proposti diversi valori per il rapporto PM<sub>10</sub>/PTS: quello su cui converge il maggior numero di studi e che è stato verificato da alcune campagne sperimentali nel nostro Paese si attesta a 0.7 –0.8. In altre parole il 70-80% del particolato totale sospeso sarebbe con diametro inferiore a 10 µm.

Uno dei parametri più importanti per la definizione delle proprietà dell'aerosol è la sua dimensione. Infatti essa influisce sugli effetti di rimozione dall'atmosfera, sugli effetti sulla salute umana e sulla visibilità attraverso il fenomeno di scattering della radiazione. Le dimensioni lineari del particolato misurato in atmosfera variano di un fattore 1000, esse vanno infatti dai nm ( $10^{-9}$  m) ai µm ( $10^{-6}$  m). La variazione indicata nelle dimensioni lineari si traduce in una differenza di un fattore 10<sup>9</sup> nel volume delle particelle tra i due estremi dello spettro.

La dimensione del particolato viene espressa attraverso il diametro aerodinamico equivalente (Seinfeld and Pandis, 1998) definito come il diametro di una particella avente velocità di deposizione uguale a quella di una particella sferica con densità unitaria. Tale definizione è necessaria poiché, mentre le particelle liquide possono essere considerate con buona approssimazione sferiche, le particelle solide sono di forma irregolare.

Una prima distinzione dell'aerosol atmosferico in funzione delle sue dimensioni è quella in fine mode (particelle fini) e coarse mode (particelle grandi). La soglia che separa i due tipi di particelle non è ben definita, ma è compresa tra 1 e 3 µm.

Particelle di diverse dimensioni, oltre ad avere diversa composizione fisica, sono caratterizzate da diverso comportamento fisico, diverse sorgenti, diversi meccanismi di formazione e diversi effetti sulla salute umana.

Le particelle fini sono composte essenzialmente da solfati, acidi, nitrati, carbonio elementare, carbonio organico e metalli.

Il particolato di dimensioni maggiori può derivare da particolari attività industriali (operazioni di demolizione e costruzione, lavori di estrazione, ...), da processi di erosione della crosta terrestre o avere origini biogeniche.

I composti, presenti nella crosta terrestre, che si trovano principalmente nel particolato grezzo sono Si, Al, Fe, Mg e K. In ambiente urbano essi possono venire risospesi dal traffico autoveicolare dopo

che sono stati portati al suolo da processi di rimozione quali ad esempio la deposizione secca o umida.

La frazione carbonacea del particolato atmosferico è composta da carbonio elementare (EC) e da carbonio organico (OC). Il carbonio elementare è emesso direttamente in atmosfera prevalentemente dai processi di combustione. Il carbonio organico può avere sia origine primaria che secondaria per mezzo della condensazione di prodotti poco volatili del processo di fotoossidazione degli idrocarburi. La componente secondaria degli OC è una frazione notevole degli OC totali ed ha un peso almeno paragonabile alla componente primaria (Pandis et al., 1993).

Il particolato fine ha tempi medi di residenza in atmosfera dell'ordine di giorni o settimane e, durante questo tempo, è in grado di percorrere trasportato dal vento distanze dell'ordine delle centinaia di km. Il particolato grezzo invece ha tempi medi di residenza in atmosfera dell'ordine di minuti o ore, e le distanze tipiche di percorrenza sono tipicamente inferiori alla decina di km.

Per la modellazione dell'aerosol atmosferico le proprietà caratteristiche devono essere espresse attraverso relazioni numeriche. Le relazioni numeriche utilizzate descrivono le **proprietà della singola particella** e la **distribuzione in numero, superficie e volume (o massa)** di una popolazione di particelle. Nel seguito descriveremo brevemente l'approccio utilizzato per trattare numericamente le proprietà dell'aerosol e modellare i principali processi fisico chimici nei quali è coinvolto l'aerosol atmosferico, rimandando all'annesso 3 per una descrizione più accurata.

#### 5.4.1.1 Descrizione della distribuzione in numero

La formulazione matematica della **distribuzione in numero, superficie e volume (o massa)** del particolato atmosferico è descritta per esempio in Seinfeld (1986) o Seinfeld and Pandis (1998).. Queste relazioni, data la notevole variabilità nella dimensione dell'aerosol atmosferico, sono convenientemente espressa in termini del logaritmo del diametro. La quantità

$$n(\ln D_p) d \ln D_p$$

rappresenta, se  $n$  è la distribuzione in numero dell'aerosol, il numero di particelle per unità di volume comprese nell'intervallo dimensionale che va da  $\ln D_p$  a  $\ln D_p + d \ln D_p$ .

Tipicamente la distribuzione in numero delle particelle atmosferiche ha una distribuzione unimodale che esibisce un massimo per valori del DAE pari a circa  $0.01 \mu\text{m}$ . La distribuzione della superficie delle particelle può essere unimodale o bimodale, con un primo massimo localizzato approssimativamente attorno a un valore di DAE pari a  $0.2 \mu\text{m}$ . Infine la distribuzione in massa o volume è caratterizzata da due mode, una posta nell'intorno di  $0.3 \mu\text{m}$  e un'altra posta nell'intorno di  $10 \mu\text{m}$ . In taluni casi questa distribuzione può mostrare anche una terza moda per valori del DAE prossimi a  $0.01 \mu\text{m}$ . Queste distribuzioni variano inoltre a seconda della provenienza del particolato (zona urbana molto inquinata, zona rurale, libera troposfera, ...).

#### 5.4.1.2 Descrizione della singola particella

Esistono essenzialmente due ipotesi per la descrizione della singola particella: internally mixed (IM) e externally mixed (EM)

La maggior parte dei modelli sviluppati (e.g. Wexler et al., 1994) assume che gli aerosol siano IM: tutte le particelle di una stessa dimensione hanno la stessa composizione chimica (o equivalentemente: la composizione chimica degli aerosol è esclusivamente funzione della loro dimensione). Pochi sono invece i modelli (e.g. Kleeman et al., 1997) che assumono l'aerosol come EM: particelle della stessa dimensione possono avere diversa composizione chimica.



Un metodo ibrido è quello presentato da Jacobson et al. (1994): le particelle sono considerate EM al momento dell'emissione, quando poi interagiscono tra loro per effetto di processi fisici quali la coagulazione viene a crearsi una particella "finale" che è IM.

#### 5.4.1.3 Descrizione della distribuzione granulometrica

La distribuzione di massa, numero o volume del particolato atmosferico all'interno dei modelli di qualità dell'aria può essere rappresentata utilizzando almeno tre diversi approcci:

- la rappresentazione continua,
- la rappresentazione discreta
- la rappresentazione modale.

La rappresentazione continua risolve le equazioni di dinamica degli aerosol per mezzo del metodo degli elementi finiti. Essa è la più accurata tra le rappresentazioni possibili, ma i tempi di calcolo richiesti rendono attualmente impossibile la sua implementazione all'interno di modelli 3D di qualità dell'aria.

La rappresentazione discreta ricostruisce la distribuzione del particolato atmosferico per mezzo di un numero finito di intervalli dimensionali (Gelbard and Seinfeld, 1980). Tale discretizzazione può essere condotta in base alla caratteristica di interesse del particolato (e.g. numero, massa, area, ...). Solitamente nei modelli di qualità dell'aria la caratteristica di interesse è la massa, quindi la discretizzazione verrà effettuata in base a questa variabile.

Questo tipo di rappresentazione è utilizzato in modelli quali CIT, GATOR, SAQM-AERO, UAM-AERO e UAM-AIM.

La rappresentazione modale ricostruisce la distribuzione delle particelle per mezzo di funzioni analitiche che rappresentano le mode della popolazione di particelle. Questa metodologia è utilizzata ad esempio in Models-3 EPA (Binkowski and Shankar, 1985), in cui vengono utilizzate tre distribuzioni lognormali sovrapposte per rappresentare la moda dei nuclei di Aitken, la moda di accumulazione e la moda grezza. Nella formulazione originale di questa rappresentazione, sia la media geometrica dei diametri delle particelle che la deviazione standard possono cambiare in funzione del tempo. Nella formulazione Models-3 invece, per risparmiare tempo di calcolo, le deviazioni standard vengono mantenute costanti; ciò però influisce negativamente sulla capacità di ricostruire alcuni fenomeni di interesse (ad esempio la formazione di mode molto strette a seguito di processi di condensazione).

#### 5.4.1.4 Nucleazione

La nucleazione è il processo attraverso il quale, tramite l'agglomerazione di molecole di vapore supersaturate, si formano nuove particelle in atmosfera. Si parla di nucleazione omomolecolare quando il processo interessa una singola specie, e di nucleazione eteromolecolare quando il processo interessa più specie chimiche. Inoltre si parla di nucleazione omogenea quando il processo avviene in assenza di superfici o materiale esterno estraneo, viceversa si parla di nucleazione eterogenea (Seinfeld, 1986).

#### 5.4.1.5 Condensazione

I processi di crescita del particolato atmosferico (condensazione e dissoluzione) sono caratterizzati da una prima fase di instaurazione dell'equilibrio tra la fase gassosa e quella aerosol. In questa fase, ipotizzando il processo di condensazione, si ha la diffusione delle molecole gassose verso la superficie della particella. Nella seconda fase la molecola viene catturata dalla superficie della particella che accresce così il suo volume. Se la superficie della particella è rivestita da una pellicola

acquosa e se il gas si discioglie in acqua, si parla di dissoluzione. Se invece la superficie della particella è secca si parla di condensazione.

#### 5.4.1.6 Trasferimento di massa gas-particella

il processo di condensazione/evaporazione può essere modellato pensando ad una prima fase di trasferimento di molecole dalla fase vapore alla fase aerosol o viceversa. Esistono diversi metodi per simulare il trasferimento di massa; alcuni di essi vengono brevemente illustrati.

**Approccio cinetico:** L'approccio simula esplicitamente il trasferimento di massa assumendo che la fase vapore non sia in equilibrio con la fase aerosol (cioè la pressione di vapore di una sostanza in fase aerosol non è uguale alla pressione parziale della sostanza in fase vapore).

**Approccio di equilibrio** Questo approccio assume che il trasferimento di massa del vapore tra la fase bulk e la superficie della particella sia istantaneo. L'ipotesi di equilibrio istantaneo non è valida per particelle di grosse dimensioni in ambiente freddo e poco inquinato (Seinfeld et al., 1998). È stato dimostrato ad esempio (Dassios and Pandis, 1999) che per  $\text{NH}_4\text{NO}_3$  le scale temporali per il raggiungimento dell'equilibrio sono di qualche secondo per particelle piccole (decine di nm), di decine di minuti per particelle di diametro attorno a  $1\text{ }\mu\text{m}$  e ore per particelle più grosse.

**Approccio ibrido** Nell'approccio ibrido (Pandis et al., 1994; Lurmann et al., 1997) si assume che vi sia equilibrio tra la concentrazione del vapore in bulk ( $C_g$ ) e l'intera fase aerosol, senza riferimento ad intervalli dimensionali particolari.

#### 5.4.1.7 Contenuto d'acqua del particolato

Il vapore acqueo è presente in atmosfera con concentrazioni molto variabili in funzione della temperatura. È anche presente acqua liquida nelle nubi, nelle nebbie o nelle goccioline della pioggia. La maggior parte del particolato atmosferico è in grado di catturare o cedere vapore acqueo dall'atmosfera a seconda che esso si muova, anche in senso temporale, verso zone con maggiore o minore concentrazione di vapore. Ciò provoca modifiche dimensionali alle particelle che sono molto importanti poiché a loro volta influiscono sulle velocità di deposizione, sulla visibilità e sulla salute umana.

L'acqua può esistere all'interno del particolato come acqua legata (o di idratazione) e come acqua non legata. L'acqua legata è quella chimicamente legata al sale inorganico nel cristallo solido, quindi dipende solo dalla specie di interesse. L'unica specie presente negli aerosol atmosferici contenente acqua legata è  $\text{Na}_2\text{SO}_4$  (solfato di sodio), quindi il contributo dell'acqua di idratazione al contenuto totale d'acqua del particolato atmosferico è trascurabile (Pilinis et al., 1989).

L'acqua non legata è invece quella che condensa sull'aerosol quando l'umidità relativa (RH) atmosferica aumenta. Ogni sale inorganico è caratterizzato da una proprietà chiamata umidità relativa di deliquescenza (DRH – deliquescence relative humidity) che rappresenta il valore di umidità relativa atmosferica oltre il quale il sale assorbe acqua per formare una soluzione acquosa saturata. Quando l'umidità relativa atmosferica assume valori inferiori a DRH il sale rimane nella fase solida. Oltrepasato DRH, se l'umidità relativa continua ad aumentare, sempre più acqua condensa sulla particella per mantenere l'equilibrio termodinamico. Il processo di cattura delle molecole d'acqua da parte dell'aerosol all'aumentare dell'umidità relativa si chiama deliquescenza.

Se invece, dopo aver oltrepasato il valore DRH del sale inorganico, l'umidità relativa diminuisce, l'acqua non legata inizia ad evaporare. Quando si raggiunge (in discesa) il punto DRH la soluzione rimane supersaturata e di conseguenza non si osserva la ricristallizzazione del sale. Tale cristallizzazione avviene nuovamente quando l'umidità relativa raggiunge valori inferiori a DRH, dando così origine ad un ciclo di isteresi (Pilinis et al., 1989).

#### 5.4.1.8 Sostanze inorganiche

Il processo di condensazione delle specie organiche in fase gassosa può portare alla formazione di aerosol (sali) secondari, non sempre emessi anche direttamente in atmosfera. Tali sostanze all'interno degli aerosol vengono spesso indicate con un acronimo derivante dalla terminologia inglese: SIA, secondary inorganic aerosol.

Sono stati sviluppati diversi modelli per la previsione della formazione degli aerosol inorganici e della loro fase. Un confronto tra alcuni di questi modelli è stato recentemente mostrato in Zhang et al. (2000).

Le specie che vengono prese generalmente in considerazione da questi modelli, pur con differenze tra un modello e l'altro, sono tipicamente:

- fase gassosa:  $\text{NH}_3$ ,  $\text{HCl}$ ,  $\text{HNO}_3$ ,  $\text{H}_2\text{O}$
- fase liquida:  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NH}_4^+$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{H}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{HSO}_4^-$ ,  $\text{H}_2\text{SO}_4$
- fase solida:  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{NaHSO}_4$ ,  $\text{NaCl}$ ,  $\text{NaNO}_3$ ,  $\text{NH}_4\text{Cl}$ ,  $\text{NH}_4\text{NO}_3$ ,  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ ,  $\text{NH}_4\text{HSO}_4$ ,  $(\text{NH}_4)_3\text{H}(\text{SO}_4)_2$

Tutti i modelli individuano un sistema (composto da specie in fase liquida e solida e, non sempre, anche in fase gassosa) di cui viene calcolato l'equilibrio minimizzando l'energia libera di Gibbs. Questa viene calcolata in funzione dei potenziali chimici e dell'attività delle singole specie. Il calcolo dell'attività delle specie disciolte in acqua richiede la determinazione dei coefficienti di attività (che correggono per il comportamento non ideale della soluzione quando la forza ionica aumenta) in una soluzione multicomponente molto concentrata. I metodi con cui tale determinazione viene effettuata sono un altro elemento di distinzione tra i diversi modelli.

Nell'annesso 3 vengono descritti alcuni dei modelli di equilibrio più noti.

#### 5.4.1.9 Sostanze organiche

Gli aerosol organici secondari (SOA, secondary organic aerosol) si formano a seguito delle reazioni che coinvolgono gas organici reattivi (ROG o VOC) presenti in atmosfera e specie ossidanti. Le specie ossidanti maggiormente attive in ambiente urbano sono  $\text{O}_3$ , attivo giorno e notte, OH, attivo solo di giorno, e  $\text{NO}_3$ , attivo solo di notte poiché di giorno si fotolizza in  $\text{NO}_2$  in tempi dell'ordine di 10 s (Jacob 2000). Le reazioni di ossidazione che portano alla produzione di SOA sono molto complesse e ancora non totalmente comprese.

Nell'annesso 3 vengono descritti alcuni dei modelli che trattano sostanze organiche quali il modello di Pandis et al. (1992 ed i modelli di partizione gas – particella.

#### 5.4.1.10 Coagulazione

Le particelle sospese in atmosfera possono venire a contatto tra loro a causa di moto Browniano, turbolenza, velocità di deposizione o altre forze, ad esempio le forze di van der Waals o di Coulomb (Seinfeld, 1986). Quando le particelle che vengono a contatto aderiscono tra loro si parla di coagulazione. La coagulazione è quindi un processo che riassume i processi di collisione ed adesione. Attraverso la coagulazione le particelle accrescono la loro dimensione e diminuiscono di numero. La simulazione del processo di coagulazione richiede quindi in principio il calcolo dei ratei di collisione e di coalescenza e della loro variazione temporale, oltre che i ratei di variazione della dimensione e della composizione chimica delle particelle.

#### 5.4.1.11 Chimica in fase gassosa

I meccanismi chimici utilizzati dalla maggior parte dei modelli attuali sono stati discussi nel capitolo 3 e sono illustrati con maggior dettaglio nell'annesso 2. Il meccanismo chimico deve essere opportunamente ampliato se viene introdotto un modello per la formazione di aerosol. Ad esempio, quasi tutti i meccanismi chimici utilizzano le stesse specie inorganiche, esse sono tipicamente (Dodge, 2000): NO, NO<sub>2</sub>, NO<sub>3</sub>, N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, O<sub>3</sub>, O(<sup>1</sup>D), O(<sup>3</sup>P), OH, HO<sub>2</sub>, HONO, HNO<sub>3</sub>, HNO<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> e CO. A tali specie devono essere obbligatoriamente aggiunti ammoniaca e biossido di zolfo quando il meccanismo chimico in fase gassosa viene introdotto in un modello per la formazione di aerosol. Inoltre, per quanto riguarda le specie organiche, un aspetto importante del meccanismo chimico in fase gassosa, quando lo si voglia introdurre in un modello per aerosol, è la modalità di *lumping*. Questo aspetto infatti assume notevole importanza nella produzione di aerosol organici secondari (SOA).

#### 5.4.1.12 Chimica in fase acquosa

L'acqua in fase liquida è in grado di catturare gas, soprattutto quelli molto solubili come l'acido nitrico, e particelle già formate. Le sostanze catturate possono reagire chimicamente in fase acquosa e cedere all'atmosfera specie totalmente diverse quando l'acqua evapora. Molte delle reazioni che avvengono in fase liquida e che coinvolgono inquinanti atmosferici sono state definite teoricamente (e.g. Seinfeld and Pandis, 1998). Esse risultano molto complesse e la loro soluzione in un modello 3D per la qualità dell'aria richiede tempi di calcolo considerevoli.

La concentrazione di una specie in fase acquosa dipende dall'equilibrio di questa con la sua fase gassosa. Tale equilibrio è dato dalla legge di Henry che stabilisce una proporzionalità tra la pressione parziale della specie in fase gassosa e la concentrazione della specie in fase acquosa. Il coefficiente di proporzionalità è appunto la "costante" di Henry che è generalmente una funzione decrescente della temperatura, indicando una maggiore solubilità dei gas al diminuire della temperatura. Una volta disciolte in fase acquosa molte sostanze si dissociano in ioni la cui concentrazione dipende dal loro equilibrio termodinamico. Una volta in fase acquosa alcune specie agiscono come ossidanti di altre specie presenti; tra i maggiori ossidanti vi sono, ad esempio, ozono, perossido di idrogeno e alcuni perossidi organici.

#### 5.4.2 Deposizione e rimozione

La deposizione degli inquinanti presenti in atmosfera si distingue in deposizione umida, mediata cioè da particelle di pioggia o di nebbia o di nuvole al livello del suolo, e in deposizione secca che avviene senza il tramite di tali condensazioni acquose. L'importanza relativa di uno dei due tipi di deposizione dipende da diversi fattori (Seinfeld and Pandis, 1998) tra cui la fase, vapore o aerosol, dell'inquinante in atmosfera, la sua solubilità in acqua, la quantità di precipitazioni e il tipo di suolo o di vegetazione.

I modelli euleriani fotochimici descrivono in genere la deposizione (secca, ed in alcuni casi umida) degli inquinanti gassosi con sufficiente accuratezza (Seinfeld, 1986; Smith et al., 2000; Wesley, 1989; Walmsley and Wesley, 1996; Padro, 1996; Padro, 1991; Brook et al., 1999).

I processi di deposizione devono essere trattati in modo più ampio nel caso della modellazione dell'aerosol.

La deposizione secca dell'aerosol viene trattata introducendo un tasso di deposizione, eventualmente diversificato per ogni modo della distribuzione dimensionale del particolato. Il principale mezzo di deposizione umida è tuttavia la raccolta di particelle in sospensione da parte di gocce di pioggia in caduta e nei processi che avvengono in nube.

In un modello completo di qualità dell'aria devono essere trattate quindi modellate sia la deposizione umida del particolato atmosferico durante le precipitazioni, sia l'interazione tra la dinamica delle nubi e la chimica.

#### 5.4.2.1 Precipitazioni (deposizione umida)

La raccolta di particelle in sospensione da parte di gocce di pioggia in caduta si può esprimere in termini di particelle per intervallo granulometrico. La perdita di particelle a causa della deposizione viene quindi espressa come (Seinfeld e Pandis, 1998):

$$\frac{dn(D_p)}{dt} = -\Omega(D_p)n(D_p)$$

Dove  $\Omega$  rappresenta il coefficiente di scavenging a sua volta dato da:

$$\Omega(D_p) = \int_0^{\infty} \frac{\pi}{4} D^2 V(D) E(D_p, D) N(D) dD$$

in cui  $D$  rappresenta il diametro delle particelle di pioggia,  $N(D)$  la loro distribuzione in numero,  $V(D)$  la loro velocità di caduta ed  $E(D_p, D)$  rappresenta l'efficienza delle particelle di pioggia nel raccogliere il particolato atmosferico presente nel volume spazzato durante la caduta.

Effetti fluidodinamici non banali rendono complessa l'espressione di questa efficienza che in generale dipende dai numeri di Schmidt, Reynolds e Stokes oltre che dai diametri di collettore e particolato raccolto ma qualitativamente, si può affermare che si ha efficienza unitaria (o superiore) per particolato di diametro superiore ai 10 micron, un minimo di efficienza di  $10^{-3}$  -  $10^{-4}$  per particelle di diametro attorno al micron e un valore di efficienza di  $10^{-1}$  -  $10^{-2}$  per particelle dell'ordine del nanometro.

#### 5.4.2.2 Nubi (rimozione umida)

Le nubi giocano un ruolo importante sia nella meteorologia dello strato limite atmosferico sia nella qualità dell'aria. Le nubi convettive trasportano verticalmente gli inquinanti, permettendo lo scambio dell'aria tra lo strato limite e l'atmosfera libera. Le gocce di nube formate dalla nucleazione eterogenea degli aerosol crescono formando gocce di pioggia attraverso processi di condensazione, collisione e coalescenza. Le nubi e le precipitazioni rimuovono quindi gli inquinanti dall'atmosfera. Una volta disciolti nell'acqua nelle nubi o della pioggia, alcuni composti si dissociano in ioni e/o reagiscono con altri composti attraverso processi chimici in fase acquosa (ad es. la chimica in nube risulta uno dei processi più importanti nella ossidazione dello zolfo in solfati). Un altro importante ruolo delle nubi é la rimozione degli inquinanti intrappolati nelle gocce di pioggia e depositate al suolo. Le nubi influenzano la chimica della fase gassosa attenuando la radiazione solare e modificando quindi la velocità delle reazioni fotolitiche.

**Riferimenti bibliografici dei capp. 4 e 5**

- Binkowski F.S. and Shankar U. (1995) *The regional particulate matter model. 1: Model description and preliminary results*. J. Geophysical Res., 100, D12, 26191-26209.
- Byun D.W. (1999) *Fundamentals of one-atmosphere dynamics for multiscale air quality modeling*. In Science algorithms of the EPA Models-3 community multiscale air quality (CMAQ) Modeling System.
- Dodge M.C. (2000) *Chemical oxidant mechanisms for air quality modeling: critical review*. Atmospheric Environment, Vol. 34, N. 12-14, 2103-2130
- EPA 1999, Science algorithms of the EPA Models-3 community multiscale air quality (CMAQ) Modeling System.
- Gelbard F. and Seinfeld J.H. (1980) *Simulation of multicomponent aerosol dynamics*. J. Colloid Interface Sci., 78, 485-501
- Jacob D.J. (2000) *Heterogeneous chemistry and tropospheric ozone*. Atmospheric Environment, Vol. 34, N. 12-14, 2131-2159
- Jacobson M.Z. (1994) *Developing, coupling, and applying a gas, aerosol, transport, and radiation model to study urban and regional air pollution*. PhD Thesis, University of California, Los Angeles
- Kleeman M.J., Cass G.R. and Eldering A. (1997) *Modeling the airborne particles as a complex source oriented external mixture*. Journal of Geophysical Research, 102, 21355-21372.
- Pandis S.N., Wexler A.S. and Seinfeld J.H. (1993) *Secondary organic aerosol formation and transport – II. Predicting the ambient secondary organic aerosol size distribution*. Atmospheric Environment, 27A, 2403-2416
- Pilinis C. and Seinfeld J.H. (1987) *Continued development of a general equilibrium model for inorganic multicomponent atmospheric aerosols*. Atmospheric Environment, Vol. 21, N. 11, 2453-2466.
- Seinfeld J.H. (1986) *Air Pollution: Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution*, John Wiley & Sons
- Seinfeld J.H. and Pandis S.N. (1998) *Atmospheric chemistry and physics. From air pollution to climate change*, John Wiley & Sons
- Smith R.I., Fowler D., Sutton M.A., Flechard C. and Coyle M. (2000) *Regional estimation of pollutant gas dry deposition in the UK: model description, sensitivity analysis and outputs*. Atmospheric Environment, Vol. 34, N. 22, 3757-3777.
- Wesely, M.L. *Parameterization of Surface Resistances to Gaseous Dry Deposition in Regional-Scale Numerical Models.*, Atmos. Env. Vol. 23, No. 6, pp. 1293-1304, 1989
- Wexler, A.S., Lurmann, F.W. and Seinfeld, J.H. (1994) *Modelling urban and regional aerosols - I. Model development*. Atmos Env. V. 28, N. 3, pp.531-546

### **ANNESSO 1 Il modello per le emissioni POEM**

A cura di Giovanna Finzi, Veronica Gabusi, Marialuisa Volta Università degli studi di Brescia

### **ANNESSO 2 I meccanismi chimici nei modelli di qualità dell'aria**

A cura di Antonello Pasini CNR- IIA

### **ANNESSO 3 La modellazione degli aerosol**

A cura di Gabriele Zanini, ENEA Bologna .