

# **Modelli matematici per la simulazione di processi di formazione, trasporto e rimozione del particolato**



Questo documento è rilasciato sotto licenza



## ***Creative Commons “Attribuzione - Non commerciale - Non opere derivate 3.0 Unported”***

**Sei libero:**



di riprodurre, distribuire, comunicare ed esporre in pubblico quest'opera

**alle seguenti condizioni:**



*Attribuzione:* devi attribuire la paternità dell'opera indicando esplicitamente l'autore e in modo tale da non suggerire che essi avallino te o il modo in cui tu usi l'opera.



*Non commerciale:* non puoi usare quest'opera per fini commerciali.



*Non opere derivate:* non puoi alterare o trasformare quest'opera, ne' usarla per crearne un'altra.

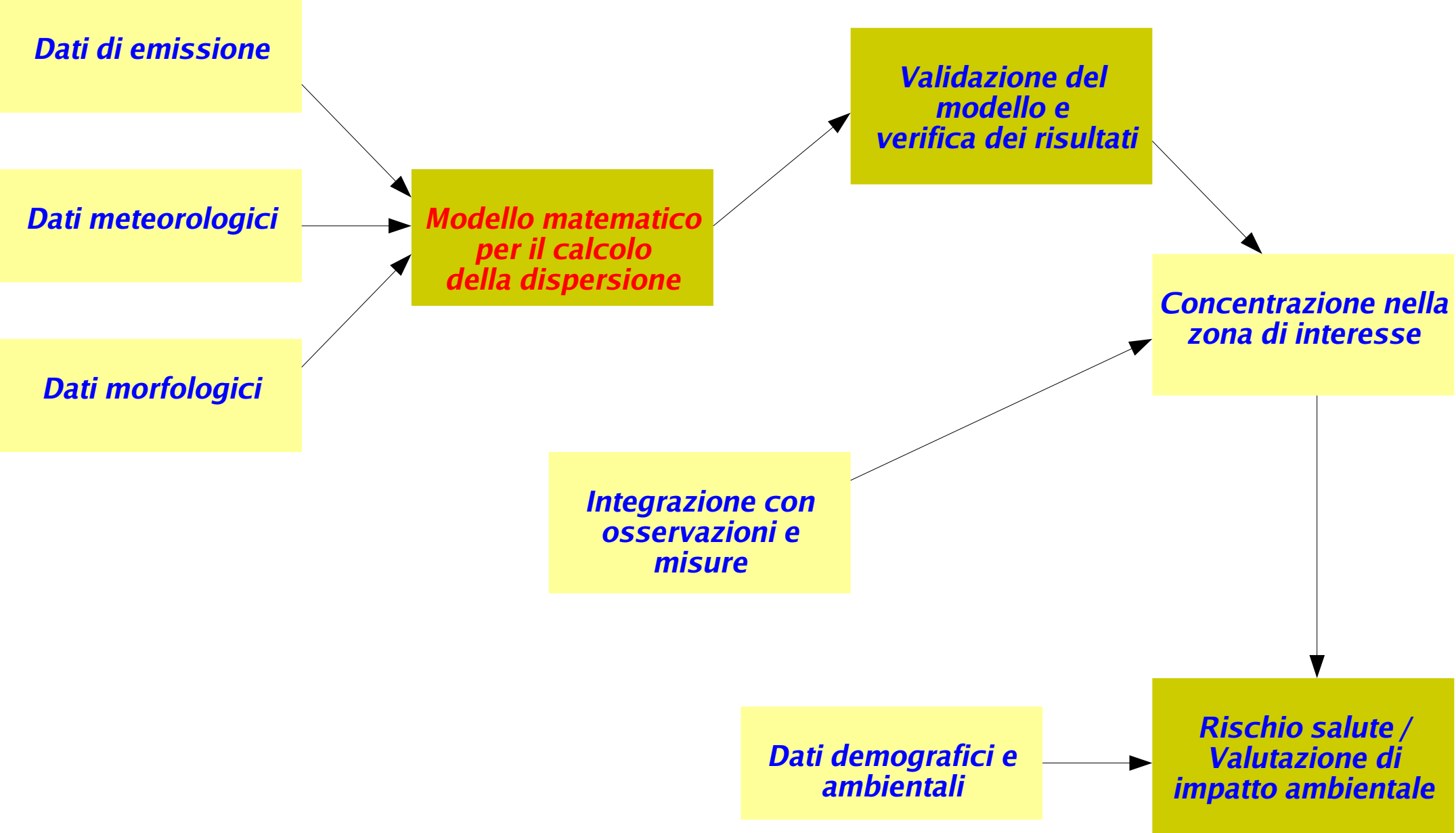
Dettagli sulla licenza utilizzata sono reperibili sul sito <http://creativecommons.org/licenses/>

## **Sommario**

- 1) Inquadramento**
- 2) Input/output dei modelli**
- 3) Fenomenologia**
- 4) Tipologia di inquinanti (in particolare ozono e polveri)**
- 5) Tipologia di sorgenti**
- 6) Tipologia di modelli**
- 7) Inquinamento in valli alpini**
- 8) Inquinamento in area urbana**
- 9) Discussione**

# Inquadramento

# Schema della 'catena modellistica'



## Riferimenti normativi per l'utilizzo di modelli di simulazione

---

- **Norma UNI 10745**: Studi di impatto ambientale - Terminologia
- **Norma UNI 10796**: Valutazione della dispersione in atmosfera di reflui aeriformi - Guida ai criteri di selezione dei modelli matematici
- **Norma UNI 10964**: Guida alla selezione dei modelli matematici per la previsione di impatto sulla qualità dell'aria
- **Norma UNI 10742**: Impatto ambientale - Finalità e requisiti di uno studio di impatto ambientale
- **DM 20/05/1991**: Criteri per la raccolta dei dati inerenti la qualità dell'aria

<http://www.epa.gov/scram001/>

software dell'EPA (Environmental Protection Agency)

<http://www.dmu.dk/AtmosphericEnvironment/harmoni.htm>

elenco di strumenti modellistici utilizzati in Europa

<http://www.etcaq.rivm.nl/databases/mds.html>

vasto database dell'EEA (European Environmental Agency) contenente documentazione, modelli e dati di qualità dell'aria

<http://www.sinanet.anpa.it/aree/Default.asp>

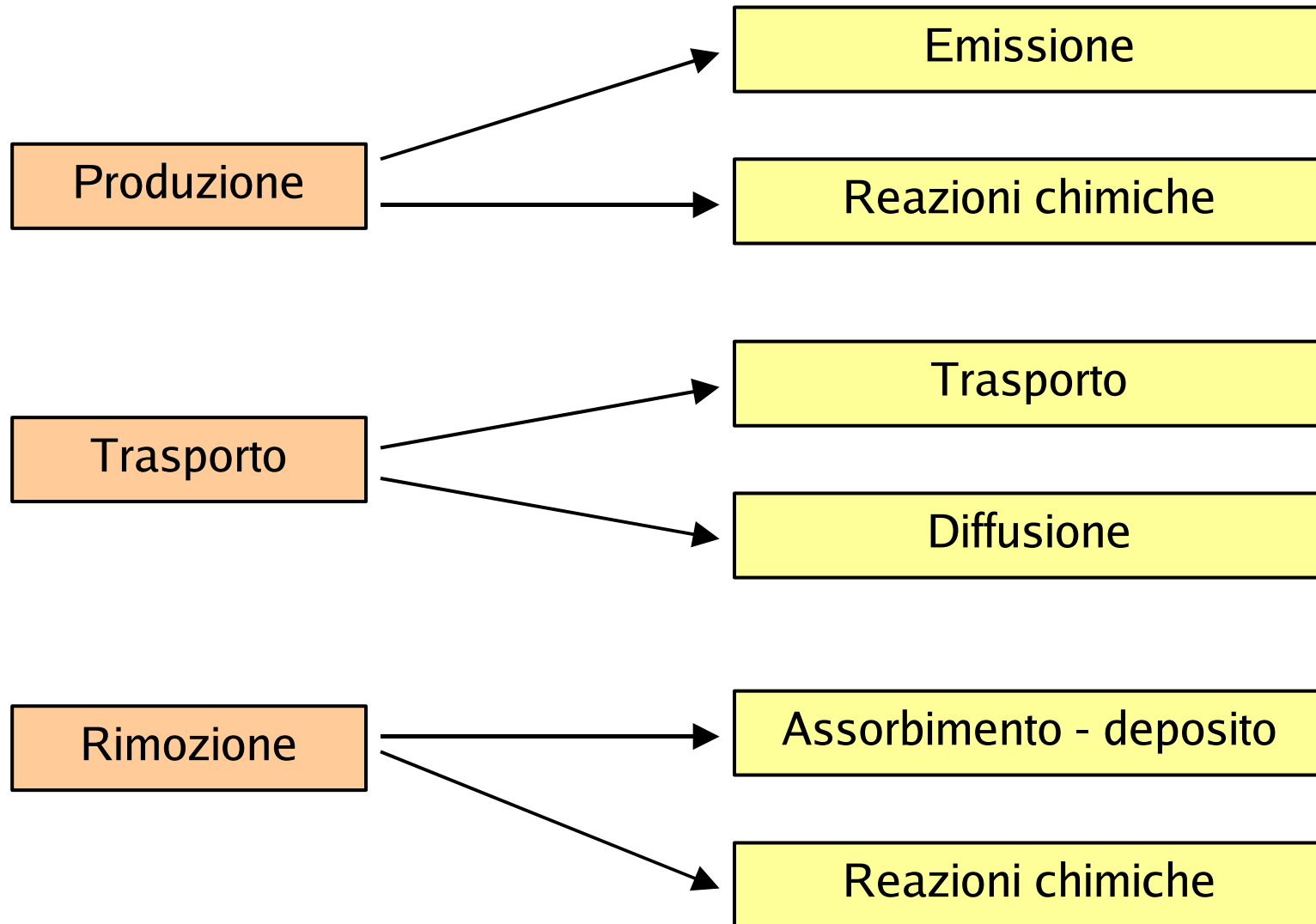
rassegna di studi sull'uso dei modelli

N.B.: molti modelli sono free-software, ma non "user-friendly", in genere disponibili come formato sorgente e comunque con interfaccia a linea di comando

- È opportuno che il lavoro di tipo **modellistico** possa appoggiarsi su informazioni derivanti da **conoscenze pregresse** sul problema specifico, nonché sui risultati di eventuali **misure sperimentali**, al fine di aumentare la certezza del risultato
- Nel caso di studi a carattere spiccatamente **applicativo** ha senso utilizzare **modelli già consolidati** e possibilmente già applicati in contesti analoghi; se si tratta al contario di attività di ricerca è assolutamente necessaria la fase di validazione del modello tramite il confronto con misure di concentrazione in campo



# Ruolo dei processi chimico-fisici



# Equazione della diffusione e convezione

Formulazione dal punto di vista matematico dell'equazione della dispersione = diffusione + convezione (o trasporto)

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + S'$$

trasporto

diffusione

sorgente

## Dati di ingresso

### Territorio:

- DTM
- uso del suolo

### Meteorologia:

- vento
- temperatura
- pressione
- umidità
- radiazione solare

### Emissioni

- portata
- concentrazione
- temperatura
- velocità di uscita

## Dati di uscita

### Inquinamento:

- concentrazioni in aria
- flussi di deposizione al suolo
- serie temporali

## Questioni di ‘principio’

---

- La massima “*Dilution is the best solution to the problem of pollution*” è ancora valida ? ...sì o no?
- Ha senso valutare l'inquinamento scala locale o a scala globale? ...dipende...
- Esiste il modello matematico “*general purpose*”? **NO! Vista la complessità dei fenomeni che governano i processi di inquinamento non esiste ad oggi un metodo generalmente valido: ogni situazione va studiata con il metodo adatto.**

# Criteri di selezione per la scelta del modello

---

La selezione del modello ottimale va fatto in base a:

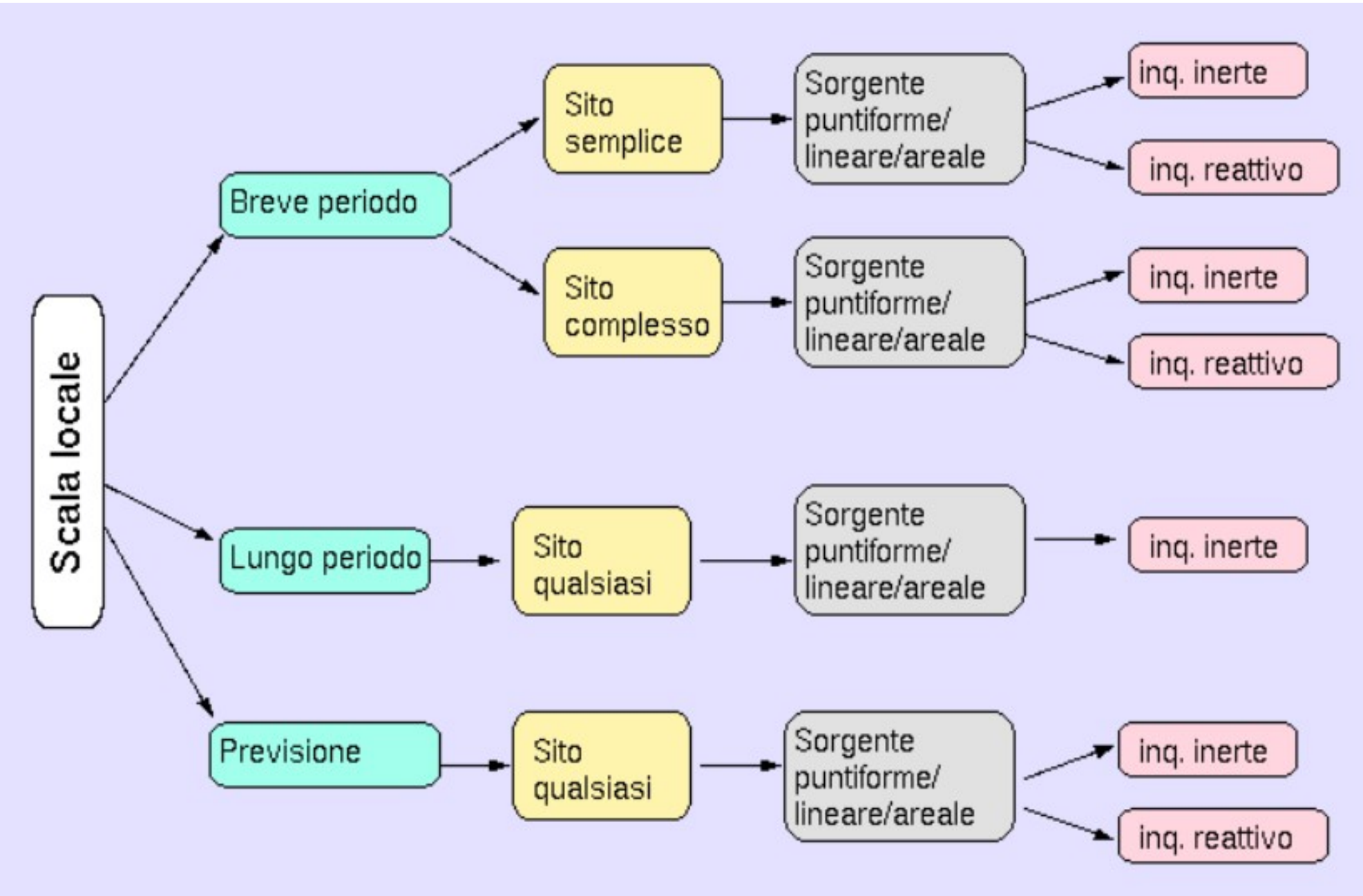
## 1) scopo dello studio

- a) **prognosi a breve termine** per situazioni di emergenza
- b) **studio a lungo termine** per la determinazione del rischio per la salute umana e la ricaduta sull'ambiente

## 2) caratteristiche dello studio

- a) **scala spaziale**: micro-scala, scala locale, scala regionale, grande scala
- b) **scala temporale**: breve periodo (ore>giorni), lungo periodo (mesi>anni), previsione
- c) **ambito territoriale**: terreno piano uniforme, terreno con orografia complessa
- d) **tipologia di sorgente**: puntuale, lineare, areale
- e) **tipologia di inquinante**: inerte, attivo (dà luogo ad inquinanti secondari)

# Scelta del modello



## Esempio: tipologia di modello (norma UNI)

<b>Scala spaziale</b> <b>Scala temporale</b> <b>Tipo di sito</b> <b>Tipo di sorgente</b> <b>Tipo di inquinante</b>	<b>Scala intermedia</b> <b>Breve periodo</b> <b>Sito complesso</b> <b>Lineare o areale</b> <b>Chimicamente inerte</b>
<b>Tipologie di modello applicabile</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Modelli euleriani 3D</li><li>• Modelli lagrangiani 3D</li></ul>
<b>Esempio</b>	<b>Dispersione di fumi emessi da un sito industriale su scala di 10 - 100 km</b>
<b>Dati di ingresso:</b> <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>meteo</b></li><li>• <b>emissione</b></li><li>• <b>territorio</b></li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Profili verticali vento (u, v, w), profilo verticale di temperatura</b></li><li>• <b>Portata di inquinante, velocità di deposizione/dilavamento</b></li><li>• <b>Scabrezza, modello digitale del terreno</b></li></ul>

## Esempio: tipologia di modello (norma UNI)

<b>Scala spaziale</b>	Microscala
<b>Scala temporale</b>	Previsione
<b>Tipo di sito</b>	Qualunque
<b>Tipo di sorgente</b>	Lineare o areale
<b>Tipo di inquinante</b>	Chimicamente inerte o reattivo
<b>Tipologie di modello applicabile</b>	Modelli stocastici
<b>Esempio</b>	Previsione delle concentrazioni medie giornaliere di inquinanti da traffico in area urbana
<b>Dati di ingresso:</b> <ul style="list-style-type: none"><li>• meteo</li><li>• emissione</li><li>• territorio</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Serie temporali di vento (vel + dir) e stabilità atmosferica</li><li>• Serie temporali di misure di inquinamento atmosferico</li><li>• Nessuno</li></ul>



## Scale spaziali

---

Nell'analizzare i dati raccolti è importante poter distinguere tra quegli effetti che sono indotti da particolari caratteristiche locali (es. tessuto urbano) rispetto ad effetti legati alle condizioni meteorologiche a scala maggiore

La complessità topografica influenza la modellazione a varie scale  
(per es orografia complessa o struttura urbana)



Strumenti concettuali simili ma a scala spaziale diversa

**Input e output**

## Dati di ingresso relativi al territorio

---

- **Orografia**: matrice delle quote altimetriche necessaria in modelli che tengono conto della tridimensionalità del campo di moto; la risoluzione spaziale varia molto a seconda della scala a cui il modello lavora (da 50 m per la microscala a 50 km per la grande scala)
- **Mappa di uso del suolo**: serve nei modelli che tengono conto della diffusione e della deposizione/adsorbimento dell'inquinante in corrispondenza del terreno
- **Cartografia**: base su cui si riportano i dati al fine di spazializzare i risultati; questo procedimento può essere automatizzato tramite l'utilizzo di sistemi GIS

## Dati di ingresso relativi alla meteorologia

---

- **Velocità e direzione del vento** al suolo ed in quota nel caso di modelli che ricostruiscono il campo di vento tridimensionale tramite preprocessori meteorologici
- **Temperatura, umidità, pressione, radiazione solare al suolo**, servono per determinare il parametro di stabilità atmosferica in maniera indiretta quando non esistano misure più sofisticate di turbolenza atmosferica
- **Gradiente termico verticale** per la determinazione della quota di inversione termica
- **Carte meteorologiche** a scala sinottica: servono nei modelli a grande scala come condizioni al contorno

Misure base (secondo le raccomandazione WMO - World Meteorological Organization):

- temperatura dell'aria
- componente orizzontale del vento
- umidità relativa
- precipitazione
- radiazione solare
- pressione atmosferica

Misure avanzate:

- profilo di velocità del vento (3 componenti)
- flusso di calore al suolo
- turbolenza atmosferica

I modelli di dispersione necessitano di parametri che non sempre è agevole misurare in quanto richiedono strumentazione sofisticata:

- innalzamento del pennacchio
- altezza dello strato di mescolamento
- lunghezza di Monin - Obukhov
- gradiente termico verticale
- radiazione incidente
- copertura nuvolosa
- energia cinetica turbolenta
- flusso di calore sensibile
- velocità di attrito

Nel caso in cui non siano disponibili le misure è necessario **ricavare** queste misure attraverso opportune **parametrizzazioni** (*non tutte sono necessarie in tutti i modelli*)

## Rappresentatività delle misure

---

- La densità di punti di rilevamento richiesta, o la risoluzione spaziale dei dati osservati, sono legate sia alla scala spazio-temporale propria del fenomeno in esame, sia ai metodi di analisi o previsione scelti.
- Un'osservazione di meteo o di qualità dell'aria può essere considerata rappresentativa di una certa area in funzione della sua applicazione.
- L'esposizione di una stazione all'inquinamento di determinate fonti più importanti per ottenere dati corretti e rappresentativi. Es. Una stazione nei pressi di un incrocio molto trafficato "vede" come dominante il contributo del traffico medesimo.

## Dati di ingresso relativi alle emissioni

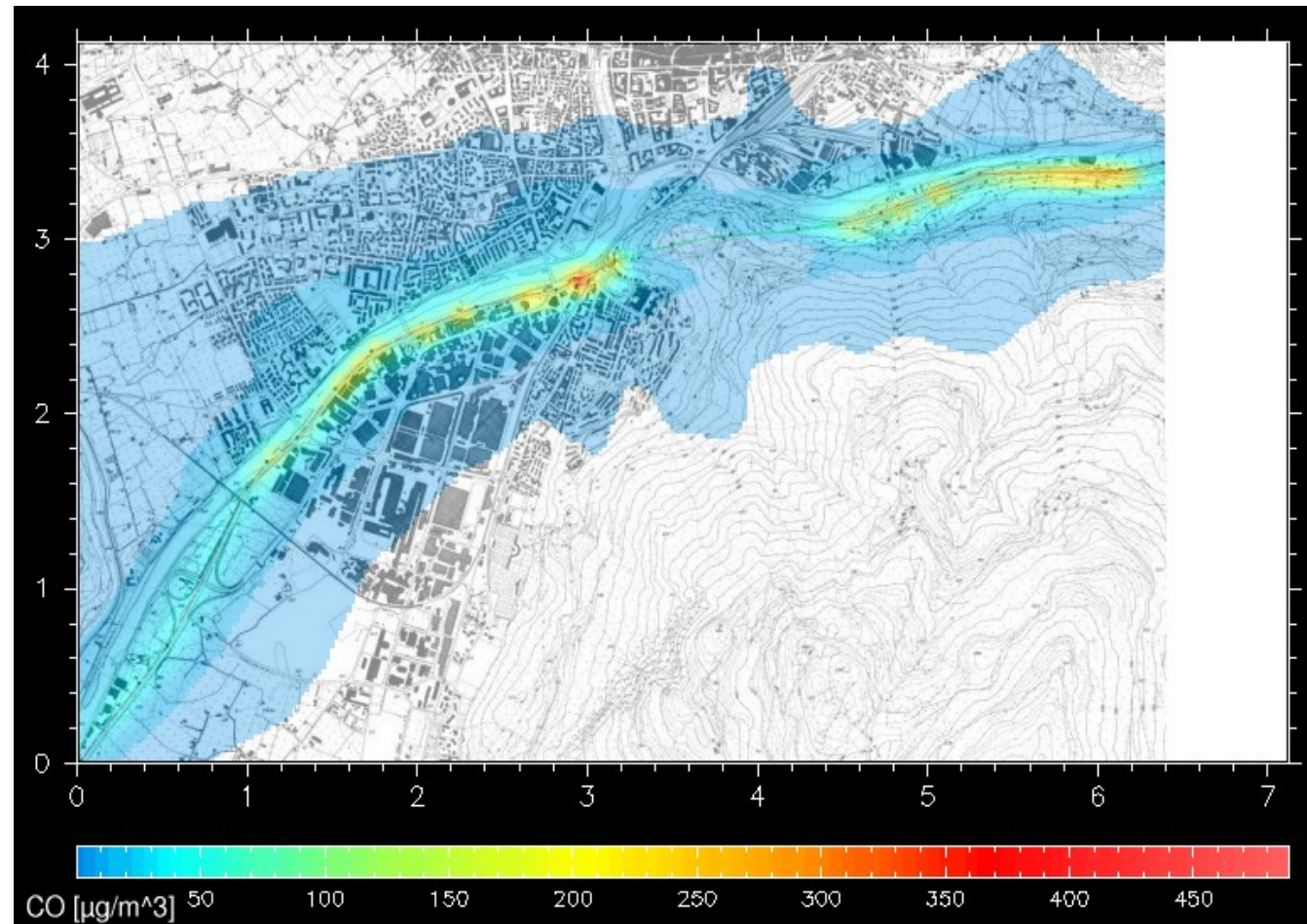
---

- **Localizzazione** della/e sorgente/i
- **Caratteristiche geometriche**: altezza e diametro in caso di sorgenti puntuali, lunghezza in caso di sorgenti lineari, area e forma in caso di sorgenti areali estese; **temperatura e velocità di rilascio** del/degli inquinante/i
- **Portata e natura chimica** dell'inquinante immesso in atmosfera: peso molecolare e stato chimico al momento del rilascio (gas, solido o vapore)
- **Velocità di decadimento** o produzione per gli inquinanti secondari



## Dati di uscita dai modelli di dispersione

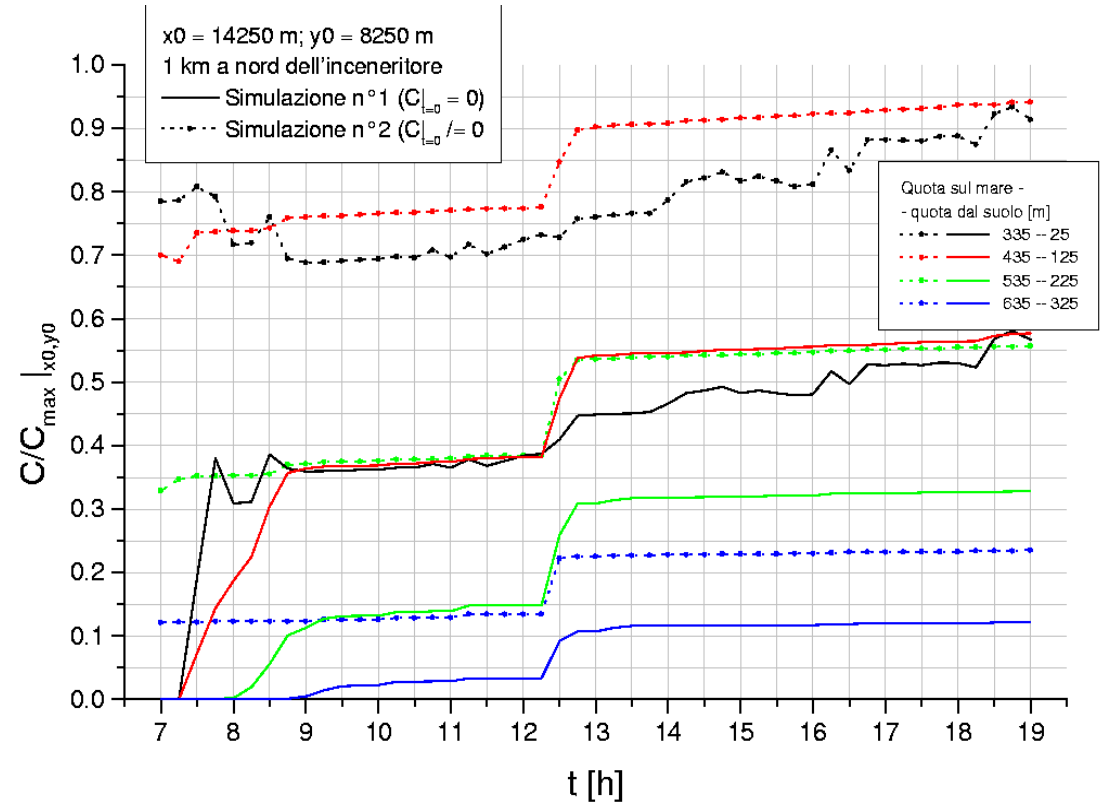
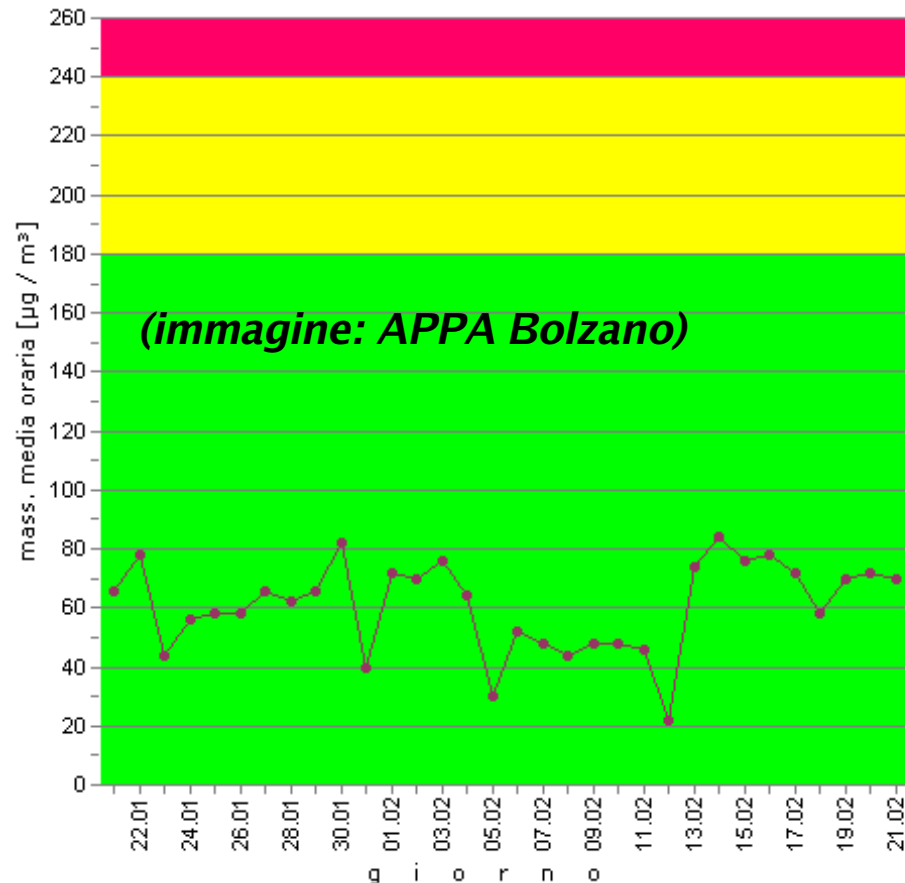
- **Mappe di concentrazione** al suolo e **deposizione** con **media oraria, giornaliera, stagionale** o **annuale** a seconda del tipo di modello e dello scopo: medie brevi per modelli previsionali, medie lunghe per il successivo calcolo del rischio per la salute



# Dati di uscita dai modelli di dispersione

Grafici dell'**evoluzione temporale** della concentrazione nel caso di modelli a breve termine (più importante nelle zone di massima concentrazione)

Andamento mensile di Ozono (O<sub>3</sub>)  
Stazione di rilevamento: Merano - Via Trogmann  
periodo dal 21.01.2005 al 21.02.2005



- Grafici di **confronto con le soglie di concentrazione** della normativa vigente (dati relativi alla media temporale utilizzata nel modello)

# Fenomenologia

## Parametrizzazioni di grandezze atmosferiche

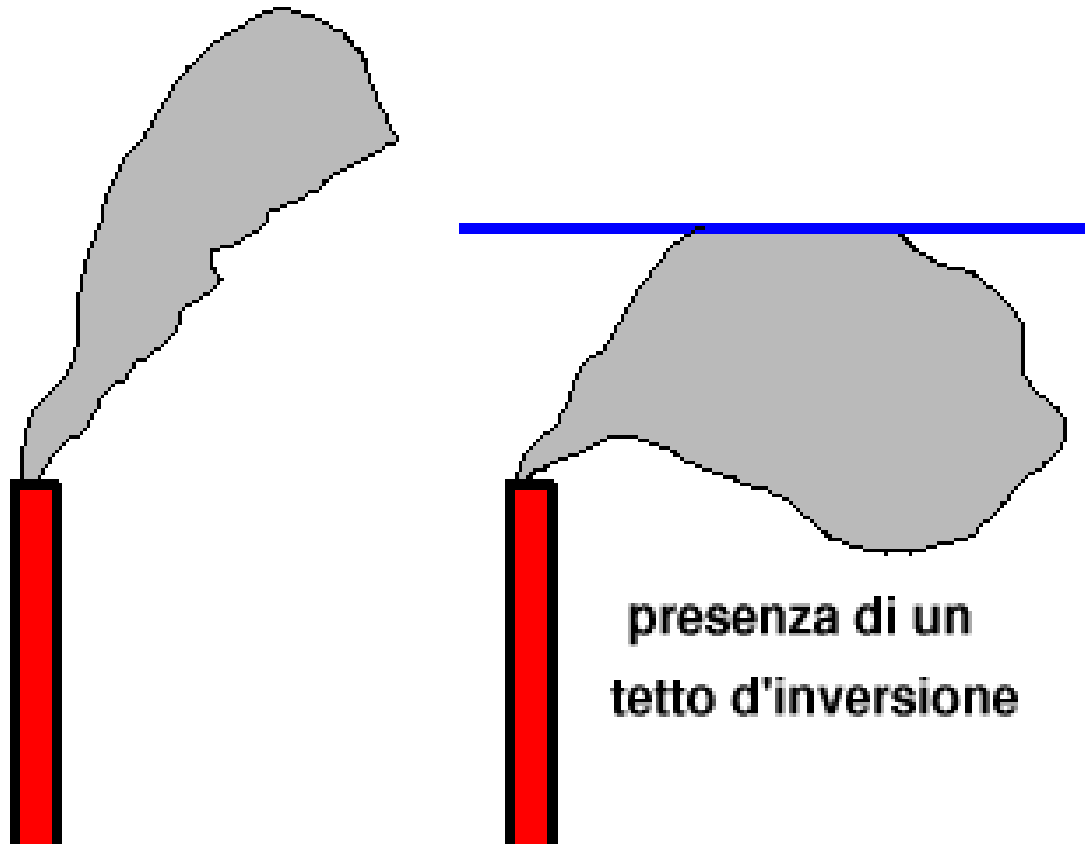
---

Nel caso di grandezze **non misurate o non misurabili** è necessario utilizzare opportune parametrizzazioni che suppliscano alla necessità di dati del modello.

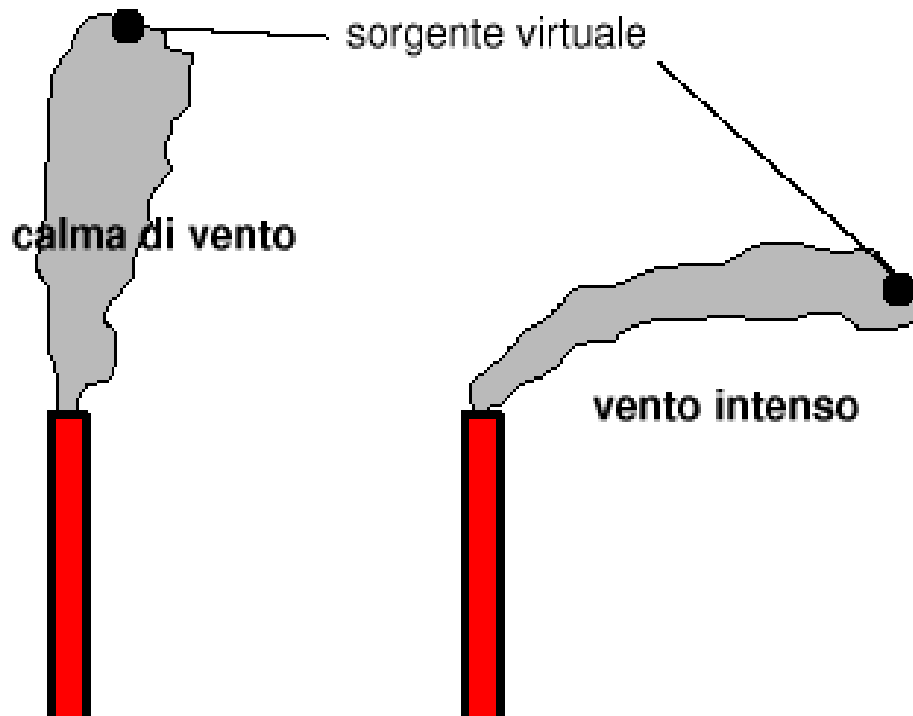
- **Stabilità atmosferica**: indica il grado di turbolenza della massa d'aria all'interno dell'area di studio. Convenzionalmente la stabilità può essere classificata facendo riferimento alle prime 6 lettere dell'alfabeto, con il seguente significato: A,B instabile; C,D neutra; E,F stabile. *Per instabile si intende turbolenza sviluppata e di conseguenza atmosfera ben miscelata. Al contrario per atmosfera stabile si intende una massa d'aria stratificata in cui i moti verticali sono molto limitati.* Alternativamente una formulazione analitica della stabilità atmosferica passa attraverso la definizione di grandezze derivate, quali il numero adimensionale di Richardson o lunghezza di Monin-Obukhov;

## Parametrizzazioni delle grandezze atmosferiche

- **Quota di inversione termica:** è la quota a cui si verifica un'inversione di segno del gradiente termico verticale e di conseguenza la formazione di un'interfaccia tra due masse d'aria, che funge, dal punto di vista della dispersione, da strato riflettente;



# Parametrizzazioni di grandezze atmosferiche



- **Scabrezza**: è il parametro che influenza il profilo di velocità del vento al di sopra del suolo; è espressa attraverso un'altezza che rappresenta la quota a cui si assume nulla la velocità orizzontale convenzionalmente;
- **Risalita del pennacchio**: si riferisce al fenomeno che si verifica in caso di fumi caldi, che, grazie alla spinta di galleggiamento dovuta alla differenza di densità fra l'effluente e l'ambiente circostante, porta l'effettiva sorgente ad una quota maggiore di quella di emissione (sorgente virtuale); le formule per la risalita del pennacchio sono di natura semiempirica e sono funzione della velocità del vento alla quota della sorgente ed alla differenza di temperatura (flusso termico). Nel caso di polveri il "pennacchio" è più curvato verso il basso a causa della deposizione gravimetrica

## Dipendenza dei risultati dai parametri

---

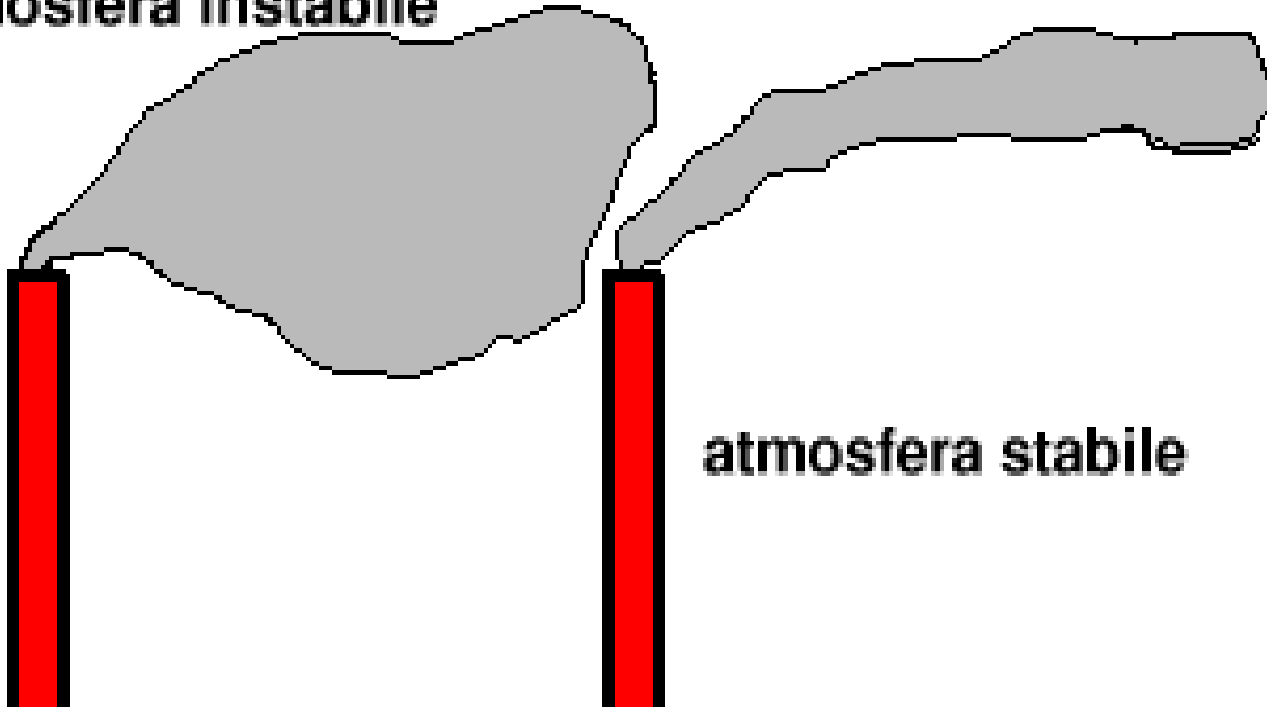
*Un aspetto significativo è la **dipendenza dei risultati dai parametri**. Sinteticamente si possono fare le seguenti osservazioni di carattere qualitativo:*

- L'**aumento della temperatura dei fumi** implica un incremento delle azioni di galleggiamento e quindi una maggiore risalita del pennacchio; la sorgente virtuale risulta localizzata più in alto e di conseguenza i valori massimi della concentrazione al livello del suolo diminuiscono e la zona di influenza risulta più estesa e più lontana dal punto sorgente;
- **Elevata velocità del vento** implica da una parte trasporto dell'inquinante a distanze maggiori, dall'altra, come effetto contrario, un abbassamento dell'asse del pennacchio e quindi un aumento della concentrazione massima al suolo, con punto di massimo localizzato più distante rispetto alla sorgente;

## Dipendenza dei risultati dai parametri

- Una **diminuzione di stabilità atmosferica** (elevata turbolenza) disperde la massa di contaminante su un'area più vasta a parità di tempo; quindi, nel caso di sorgente in quota il massimo di concentrazione si localizza più in prossimità della sorgente rispetto al caso di atmosfera stabile (turbolenza contenuta);

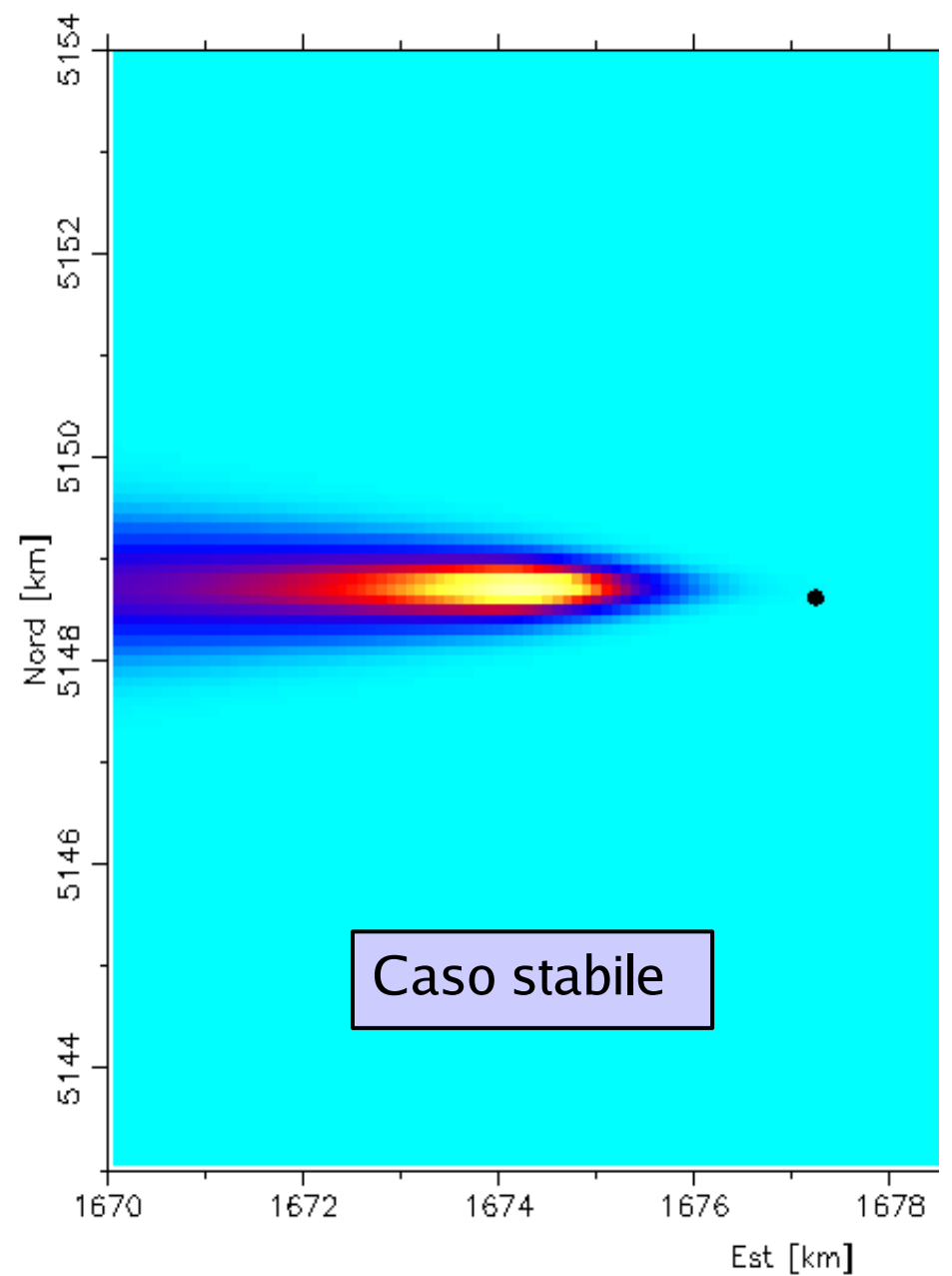
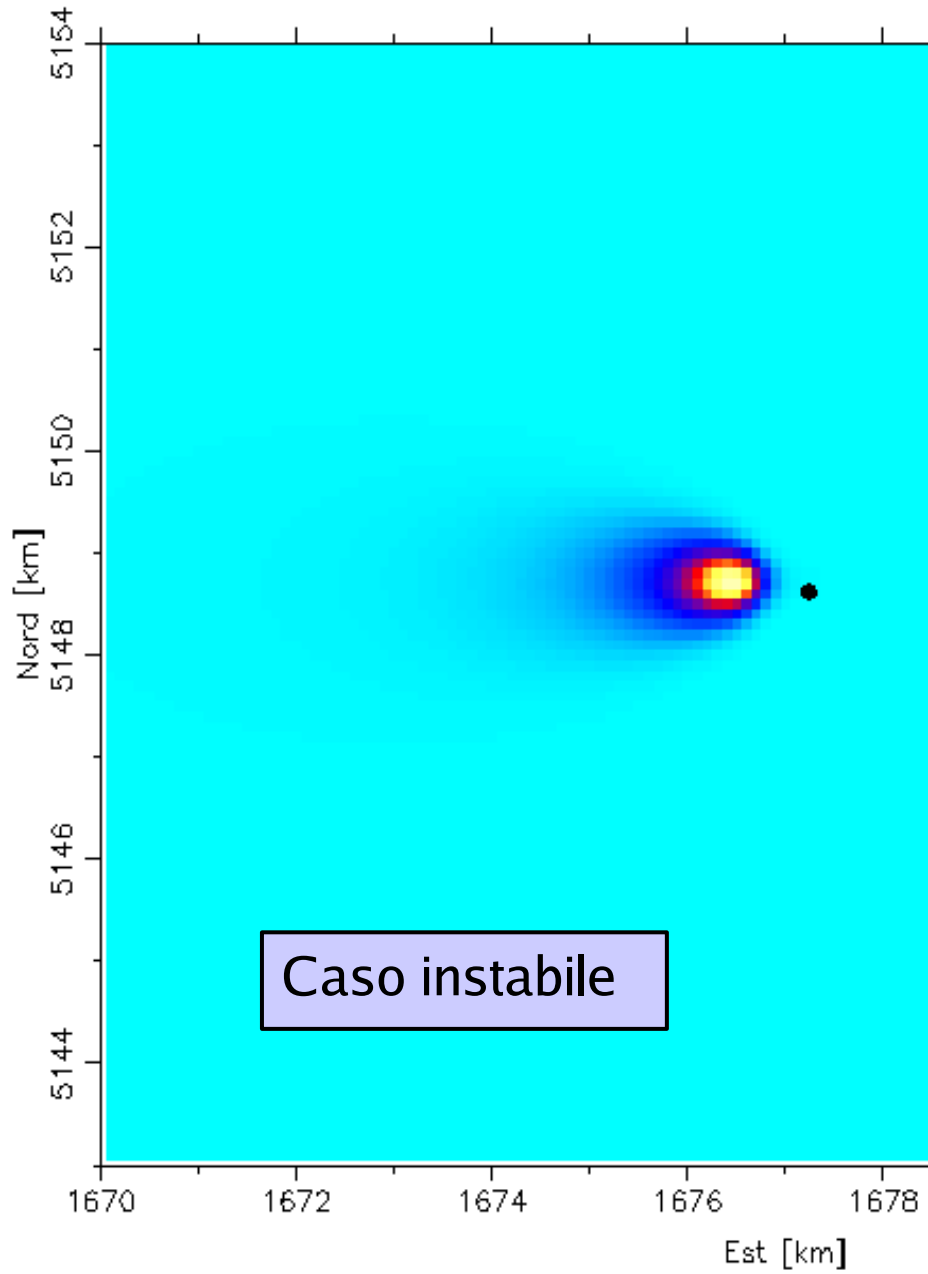
**atmosfera instabile**



**atmosfera stabile**

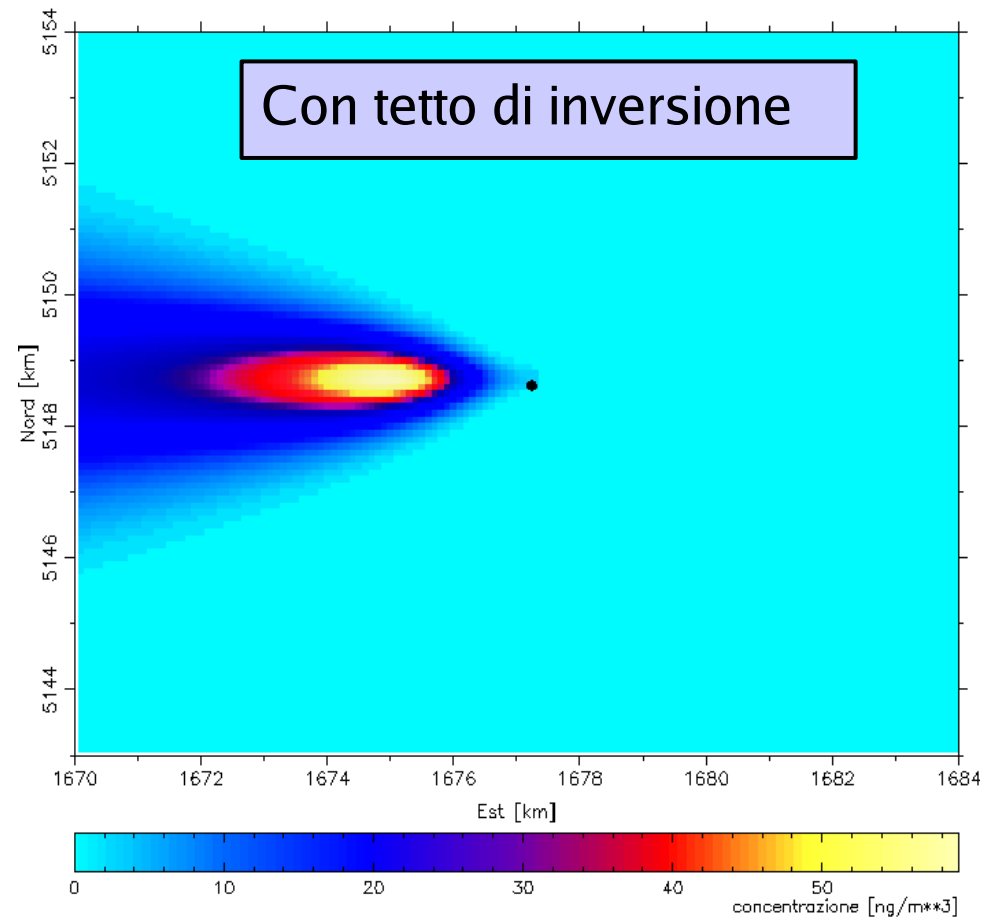
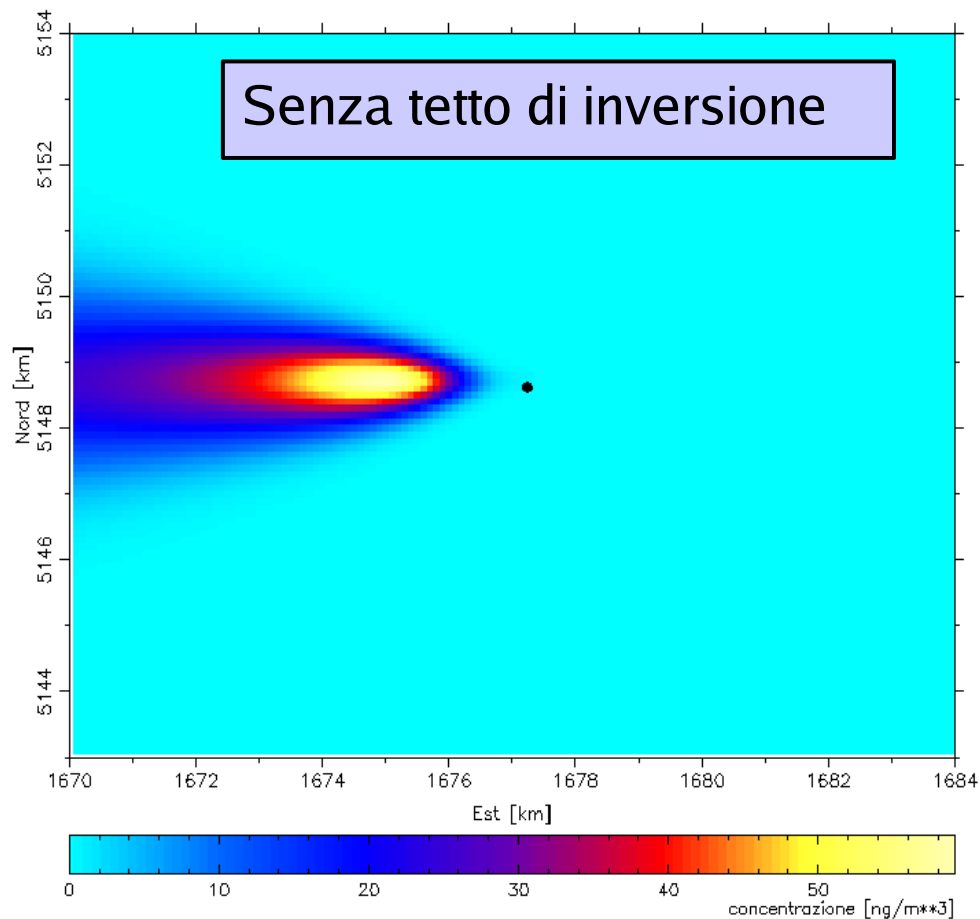


# Dipendenza dei risultati dai parametri



# Dipendenza dei risultati dai parametri

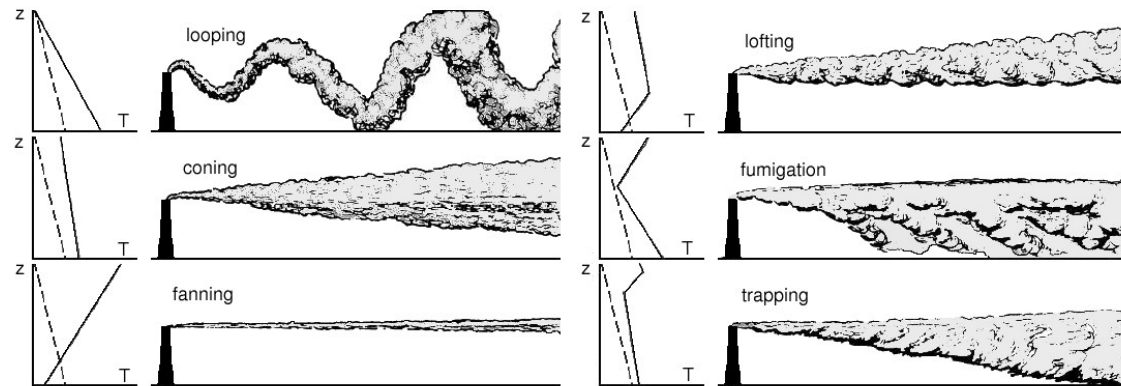
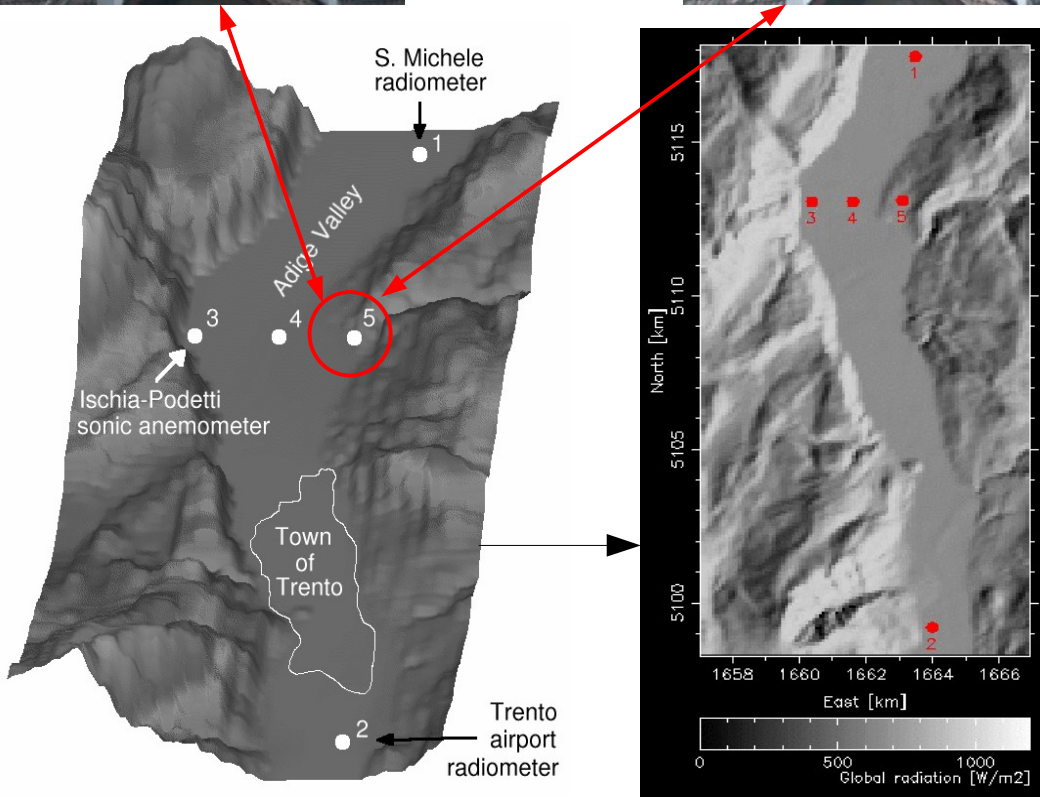
- La presenza di **inversione termica** fa da "tetto" al processo di dispersione verso l'alto; uno strato di inversione basso mantiene il contaminante confinato vicino al suolo. Questo parametro risulta importante nel caso di sorgenti in quota (fumi caldi da ciminiere), poco importante nel caso di sorgenti al suolo (assi stradali, discariche);



# Stima della diffusività

La diffusività turbolenta varia a seconda dell'insolazione e del campo di vento e dipende anche dalla forzante orografica

Differente stabilità atmosferica



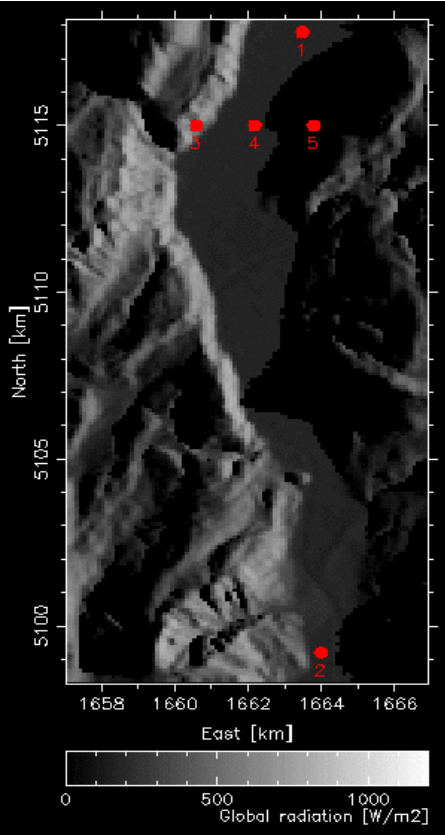
Riscaldamento differenziale -> variazione spaziale della diffusività turbolenta e quindi della diluizione di inquinanti

# Stima della diffusività

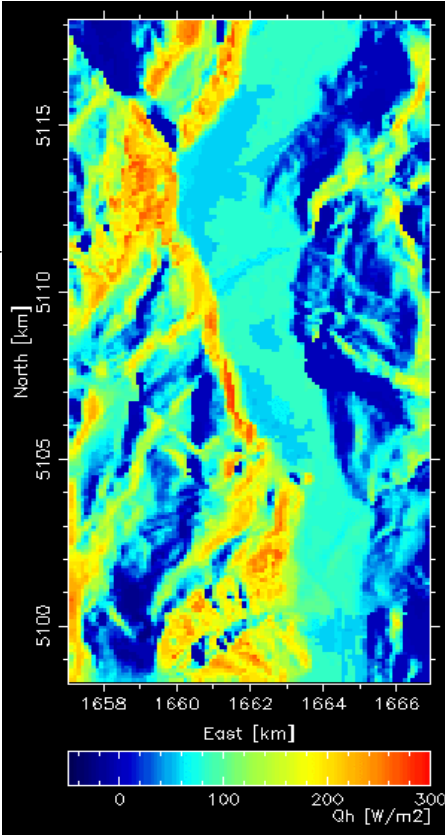
Area illuminata -> maggiore turbolenza  
Area in ombra -> minore turbolenza

Ore 07:00 22/07/2002

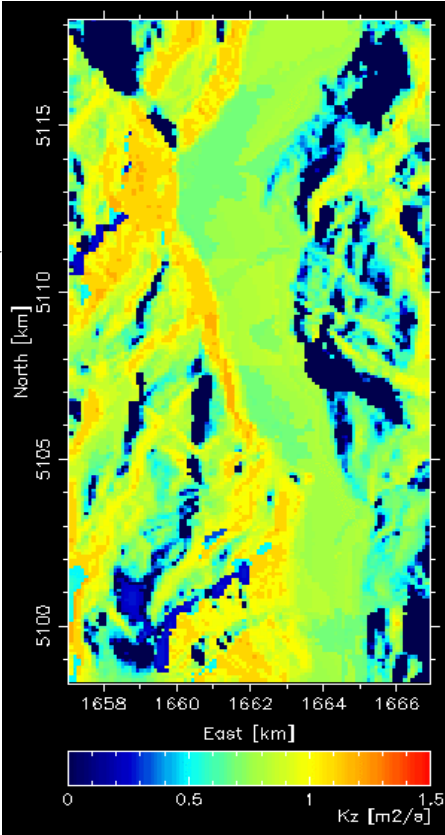
$R_g$  [W/m<sup>2</sup>]



$Q_h$  [W/m<sup>2</sup>]



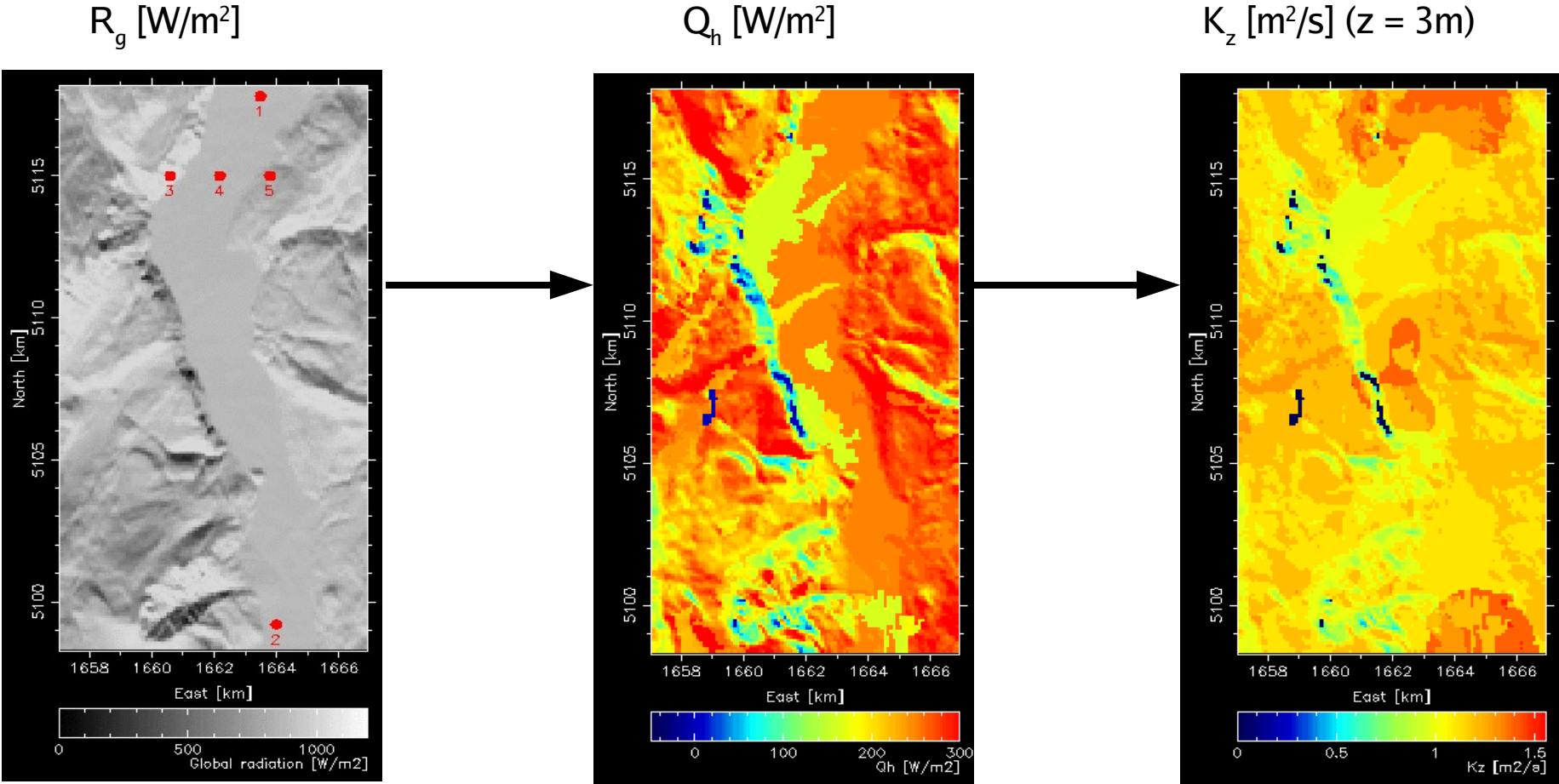
$K_z$  [m<sup>2</sup>/s] (z = 3m)



# Stima della diffusività

Area illuminata -> maggiore turbolenza  
Area in ombra -> minore turbolenza

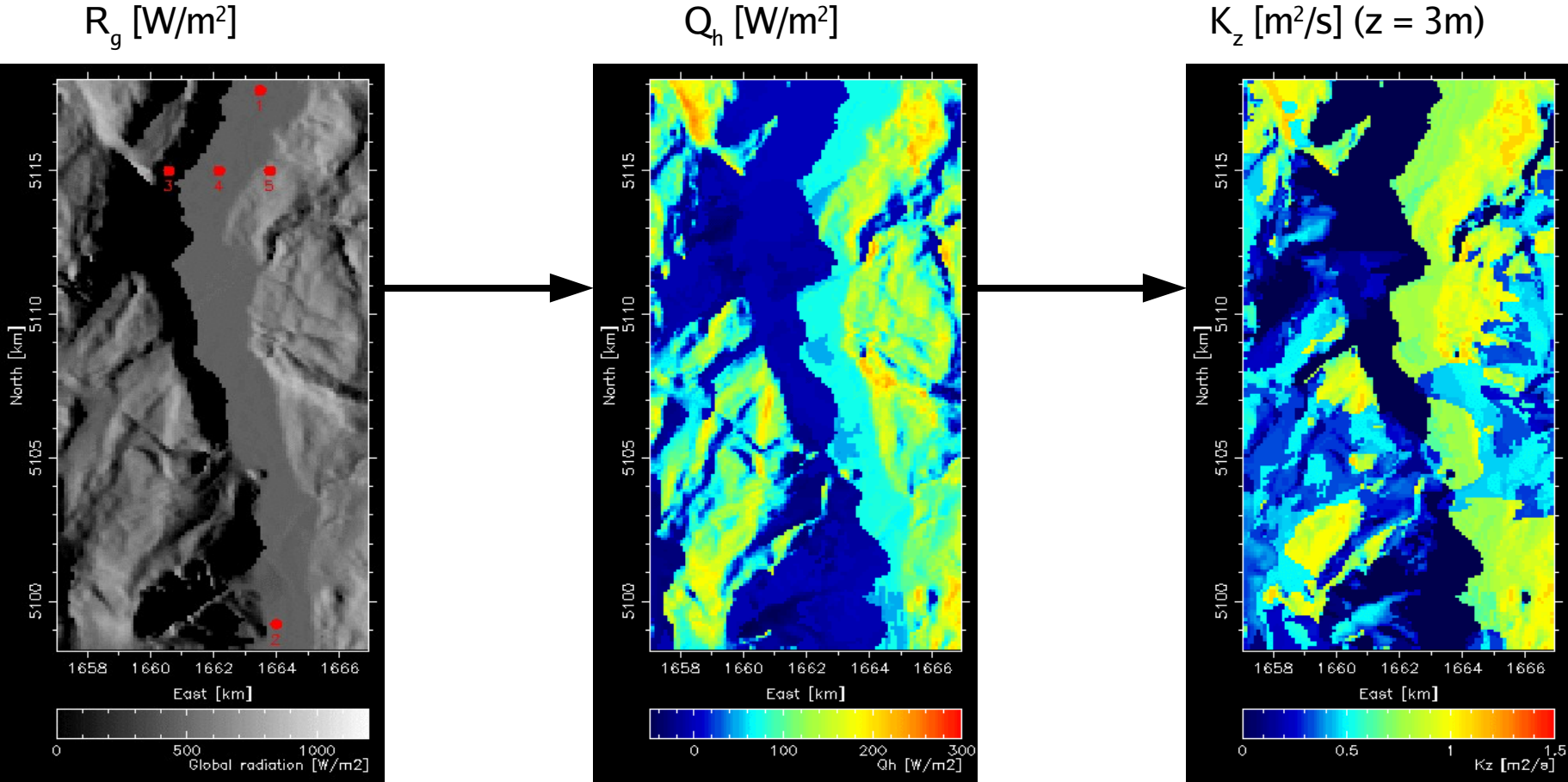
Ore 12:00 22/07/2002



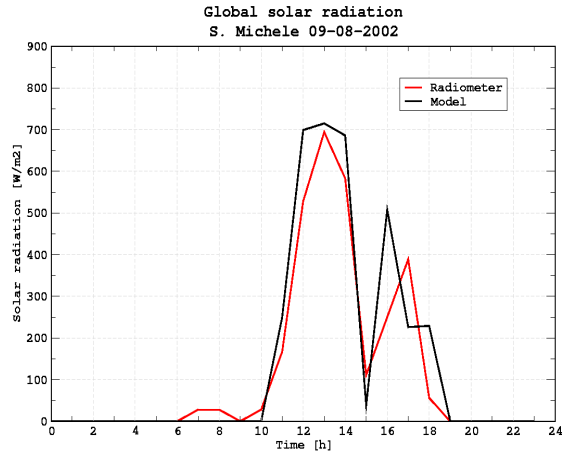
# Stima della diffusività

Area illuminata -> maggiore turbolenza  
Area in ombra -> minore turbolenza

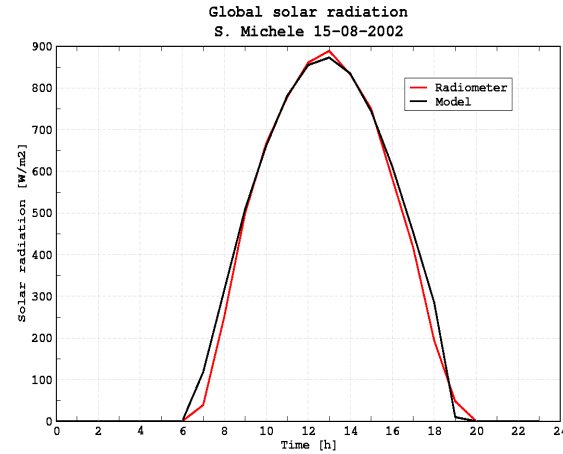
Ore 17:00 22/07/2002



## Taratura con dati misurati di Rg...

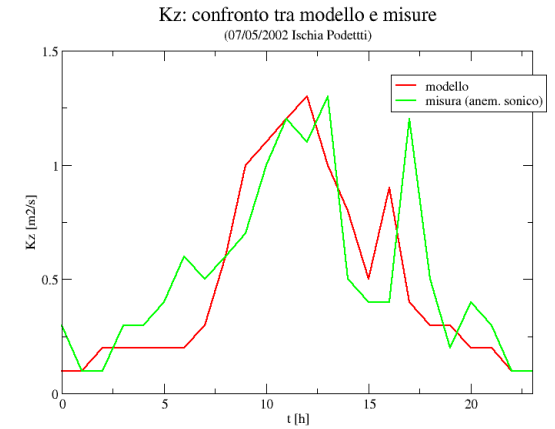


Nuvoloso

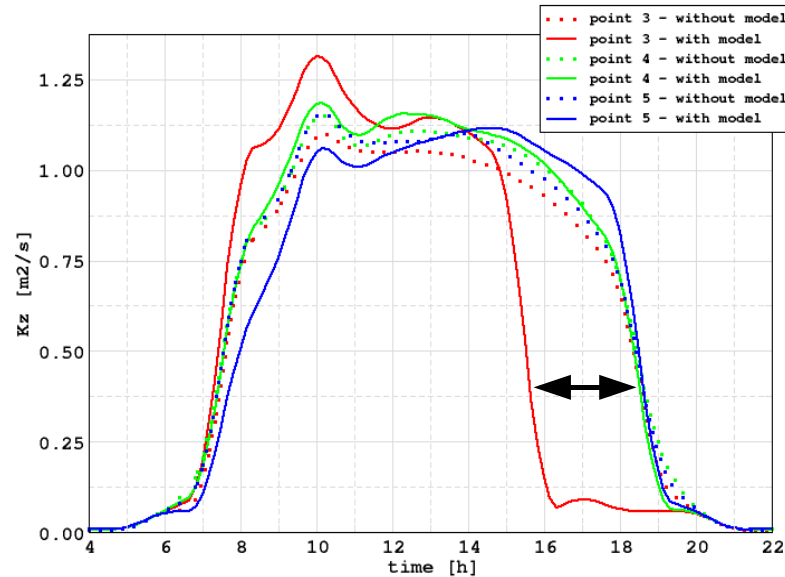


Sereno

## ...e Kz



## Daily evolution of diffusivity



Si evidenzia un ritardo nella variazione della diffusività ai due lati della valle, quindi differenza nella diluizione di contaminanti in atmosfera

- La **tipologia di sorgente** influenza in maniera significativa il risultato al suolo: sorgenti lineari come gli assi stradali hanno un'influenza relativamente limitata spazialmente, e sono meno influenzate dalle condizioni meteorologiche complessive rispetto alle sorgenti calde puntuali.

È importante ricordare che ai fini del risultato in termini di concentrazione è significativa la combinazione di tutti i parametri



Specialmente nelle simulazioni a **scala temporale e spaziale piccola**, le **condizioni locali** possono avere un'**influenza** sostanziale sul destino degli inquinanti (per es. variazione del campo di moto e/o del gradiente termico con la verticale, oppure presenza di un'inversione al suolo)

# **Tipologia di inquinanti**

- Nella normativa vigente è riportato il **concetto di qualità** dell'aria e di rischio per la salute delle persone. Poiché *il grado di pericolosità delle sostanze varia non solo in base alla concentrazione in aria* (al livello del suolo), ma anche in base alla quantità di inquinante depositata a terra, *è necessario in alcune applicazioni valutare anche l'accumulo in funzione del tempo*
- Distinzione tra **inquinanti primari** e **inquinanti secondari**: i primi sono quelli emessi dalle sorgenti, quelli secondari sono generati in un momento successivo dalle reazioni chimiche tra inquinanti primari, e possono dare problemi altrettanto rilevanti

## Tipi di inquinanti considerati

---

Gli inquinanti generalmente considerati nei modelli di dispersione sono:

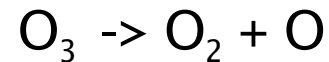
- Ossidi di carbonio (CO e CO<sub>2</sub>)
- Ossidi di azoto (NO<sub>x</sub>)
- Idrocarburi (HC)
- **Ozono (O<sub>3</sub>)**
- Ossidi di zolfo (SO<sub>x</sub>)
- Acido cloridrico (HCl)
- Acido fluoridrico (HF)
- Mercurio (Hg)
- Piombo (Pb)
- Cadmio (Cd)
- Metalli pesanti (totale)
- Diossine e furani (PCDD/F)
- **Particolato solido (TSP , PM10, PM2.5, PM1, PM0.1...)**

# Ozono

L'ozono  $O_3$  è una forma allotropica dell'ossigeno.

Ha una vita media relativamente lunga in uno strato compreso fra ca. 20 e 25 km di quota (ozonosfera), dove svolge un ruolo essenziale nello schermare la radiazione solare ultravioletta.

Nelle condizioni di temperatura e pressione che si riscontrano mediamente al suolo (ozono troposferico) è instabile e decade in

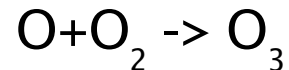


## Ozono troposferico

L'ozono troposferico può essere generato tramite un meccanismo di "smog fotochimico". In genere, le condizioni che comportano il manifestarsi dello smog fotochimico si innescano durante il traffico di prima mattina (picco di traffico) aumenta la presenza in atmosfera di idrocarburi e ossidi di azoto (NO e NO<sub>2</sub>). L'azione della luce del sole causa la fotolisi del biossido di azoto in monossido di azoto e un radicale ossigeno:



Questa reazione avviene molto più velocemente man mano che aumenta l'irraggiamento solare. Gli atomi di ossigeno che si formano nel corso di questa reazione possono poi reagire con le molecole di ossigeno presenti nell'aria per produrre l'ozono, **incrementando così i livelli di ozono a livello del suolo:**



L'ozono a sua volta può reagire con l'ossido nitrico per produrre biossido di azoto e ossigeno:



Queste tre reazioni costituiscono il cosiddetto ciclo fotostazionario dell'ozono e, di per sé, mantengono la concentrazione dell'ozono ad un livello stabile e non inquinante tramite un equilibrio dinamico. Se varia però il rapporto tra NO e NO<sub>2</sub> si sposta l'equilibrio dell'ultima reazione (di notte c'è poca NO<sub>2</sub> e quindi l'O<sub>3</sub> prodotto rimane in atmosfera)

# Ozono: andamento mensile in provincia di BZ

Andamento mensile di Ozono (O<sub>3</sub>)  
Stazione di rilevamento: Salorno - Argine dell' Adige  
periodo dal 21.01.2005 al 21.02.2005



Andamento mensile di Ozono (O<sub>3</sub>)  
Stazione di rilevamento: Merano - Via Trogmann  
periodo dal 21.01.2005 al 21.02.2005



Andamento mensile di Ozono (O<sub>3</sub>)  
Stazione di rilevamento: Renon - Corno di Renon / Grünwald  
periodo dal 21.01.2005 al 21.02.2005



(immagini: APPA Bolzano)

La produzione di ozono fotochimico è un processo non lineare controllato anche da fattori esterni:

es: aumentando il traffico cresce  $\text{NO}_x$  -> decresce  $\text{O}_3$

...e infatti i massimi di ozono si registrano spesso fuori città

## Particolato atmosferico

---

Il particolato atmosferico, detto anche “*aerosol*” o “*polveri*”, è costituito da particelle solide e/o liquide in sospensione nell'aria. Esso viene emesso da un'ampia varietà di sorgenti naturali quali erosione del suolo, pollini, eruzioni vulcaniche, polveri dei deserti, aerosol marino, o è frutto di attività umane come processi di combustione, attività estrattive, cantieri, trasporti, industrie. **La natura della sorgente influenza sia le proprietà fisiche (massa, dimensioni, superficie specifica, concentrazione massica o numerica) sia la composizione chimica della particella.**

La quasi totalità del particolato fine aerodisperso è costituito da composti organici, sali inorganici e al "black carbon". A causa della grande varietà delle forme molecolari, una caratterizzazione chimica completa è molto difficile.

Tra i più importanti componenti della frazione fine, gli ioni solfato, ammonio e nitrato, il carbonio elementare ed organico; correlazioni elevate sono state trovate tra  $PM_{2.5}$  e  $SO_4^{2-}$ ,  $NO_3^-$  e  $NH_4^+$  in tutte le condizioni meteorologiche.



## Classificazione del particolato

Le particelle vengono comunemente classificate attraverso il loro diametro aerodinamico equivalente:

<i>particolato ultrafine</i>	$d_a < 0.1 \mu\text{m}$
<i>particolato fine</i>	$0.1 \mu\text{m} < d_a < 2.5 \mu\text{m}$
<i>particolato grossolano</i>	$2.5 \mu\text{m} < d_a < 10 \mu\text{m}$
<i>particolato ultragrossolano</i>	$d_a > 10 \mu\text{m}$

*...comunemente chiamate tutte "polveri sottili"*

Nella prassi comune, ove si utilizzano i termini  $PM_{10}$ ,  $PM_{2.5}$  e  $PM_{0.1}$  per indicare tutto il particolato con diametro minore od uguale rispettivamente a 10, 2.5 e 0.1  $\mu\text{m}$ . Il particolato di dimensioni maggiori, con diametro aerodinamico fino a 50  $\mu\text{m}$ , viene indicato comunemente come particolato totale (PT), spesso aggettivato come sospeso (PTS o PST).

## Classificazione del particolato

---

In riferimento alla capacità, da parte delle particelle, di penetrare nell'apparato respiratorio, la classificazione delle particelle può essere espressa come:

*frazione inalabile* = frazione in grado di penetrare nelle vie respiratorie ~  $PM_{10}$

*frazione toracica* = frazione in grado di raggiungere i polmoni ~  $PM_{2.5}$

*frazione respirabile* = frazione in grado di raggiungere gli alveoli ~  $PM_{0.1}$

## Sorgenti del particolato

Il particolato è classificato come primario quando viene emesso direttamente in atmosfera mentre si parla di particolato secondario quando la formazione avviene in atmosfera attraverso processi di natura fotochimica che coinvolgono composti gassosi detti precursori quali biossido di zolfo ( $\text{SO}_2$ ), ossidi di azoto ( $\text{NO}_x$ ), ammoniaca ( $\text{NH}_3$ ) e composti organici volatili (VOC)

<b>SORGENTI ANTROPICHE</b>	<b>SORGENTI NATURALI</b>
Ossidazione di $\text{SO}_2$	Ossidazione di $\text{SO}_2$ e $\text{H}_2\text{S}$ emessi da incendi e vulcani
Ossidazione di $\text{NO}_x$	Ossidazione di $\text{NO}_x$ prodotto da suolo e luce
Emissione di $\text{NH}_3$ da agricoltura e allevamento	Emissione di $\text{NH}_3$ da animali selvatici
Ossidazione di idrocarburi emessi dagli autoveicoli	Ossidazione di idrocarburi emessi dalla vegetazione (terpeni)

## Particolato secondario

---

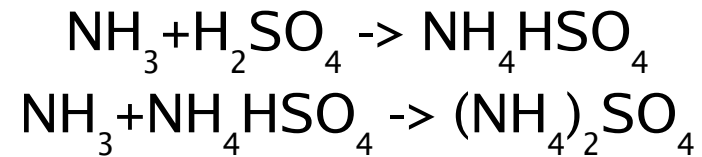
- Il particolato viene rimosso attraverso diversi processi che ne determinano il tempo medio di residenza in atmosfera.
- Il particolato di dimensioni 0.1-1  $\mu\text{m}$ , intervallo dimensionale cui appartiene in genere il particolato secondario, è composto da particelle che possono andare da alcuni giorni a settimane, per questo tali particelle possono essere trasportate per migliaia di chilometri. Tali particelle rappresentano spesso nuclei di condensazione per le nubi. Per questo motivo il tempo medio di residenza è considerato simile al tempo di residenza dell'acqua (circa 10 giorni).
- Il particolato organico presenta tempi medi di residenza più lunghi rispetto al particolato inorganico a causa della sua minore solubilità, esso infatti necessita di un periodo per l'ossidazione superficiale prima di essere rimosso per deposizione umida.

## Particolato secondario

---

- Una larga percentuale di particolato formato da nitrato di ammonio non è stabile, di conseguenza, le concentrazioni di nitrato particolato di taglia PM10 e PM2.5 sono caratterizzate da bassi livelli in estate e alti livelli in inverno.

- Reazione tipica per la formazione di particolato secondario:



## Particolato secondario

---

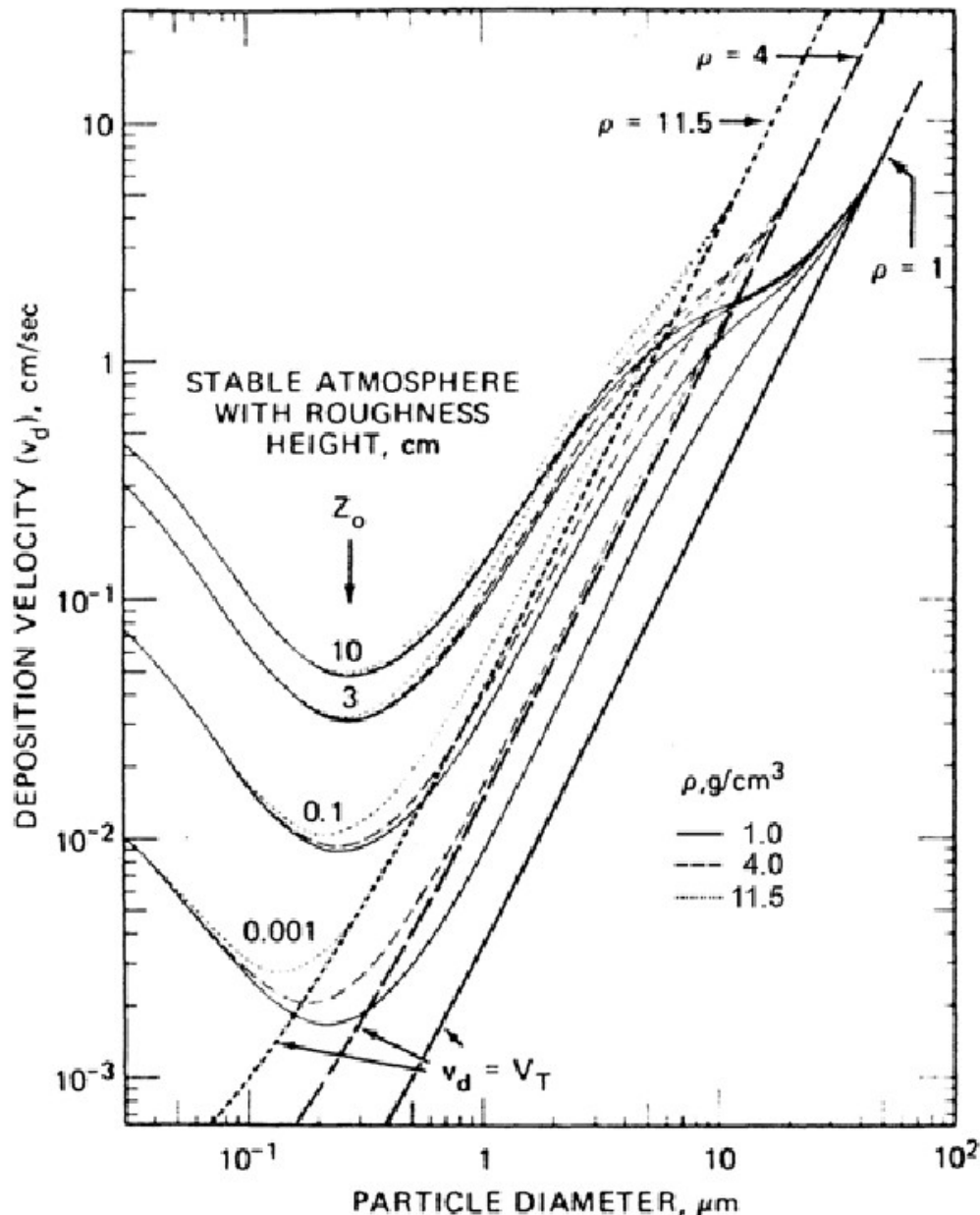
- Il particolato secondario identifica particelle caratterizzate da bassa volatilità che si formano attraverso reazioni chimiche atmosferiche a cui prendono parte emissioni gassose di inquinanti detti precursori.
- Formazione di particolato secondario in atmosfera avviene attraverso reazioni fra specie precursori quali biossido di zolfo ( $\text{SO}_2$ ), ossidi di azoto ( $\text{NO}_x$ ) e ammoniaca ( $\text{NH}_3$ ) che formano rispettivamente solfati e nitrati in forma particolata, così come *aerosol* organici vengono formati dall'ossidazione fotochimica di alcuni composti organici volatili non metanici (NMVOC).
- La frazione di inquinanti primari che viene convertita in particolato secondario è stimata come segue: 65% per  $\text{NO}_x$ , 60% per  $\text{NH}_3$ , 35% per  $\text{SO}_2$ .

## Particolato secondario

---

- Le sostanze a bassa volatilità presenti in fase gassosa si trasformano in particolato attraverso **nucleazione omogenea o eterogenea**.
- La nucleazione consiste nella formazione di nuove particelle (nuclei) attraverso la condensazione di sostanze a bassa tensione di vapore formate a seguito di vaporizzazione ad alta temperatura o di reazioni chimiche in atmosfera.
- **Nucleazione omogenea** = formazione di nuove particelle che si accrescono poi attraverso il processo di coagulazione (combinazione di due o più particelle per formare una particella più grande)
- **Nucleazione eterogenea** = specie a bassa volatilità condensano sulla superficie di particelle precedentemente esistenti sotto forma di aerosol

# Deposizione secca in funzione del diametro



(immagine: Sehmel, 1980)

- **particolato solido**: si introduce un flusso di massa, presente in tutte le celle del dominio, con direzione dall'alto verso il basso, con velocità di deposizione calcolata secondo la legge di Stokes o con formulazione empirica a seconda della dimensione del particolato

- **fase gassosa**: si utilizza una velocità di deposizione equivalente, che simula il processo di adsorbimento da parte del contorno

Velocità di sedimentazione secondo Stokes:  $v = \gamma d^2 / 18\mu$

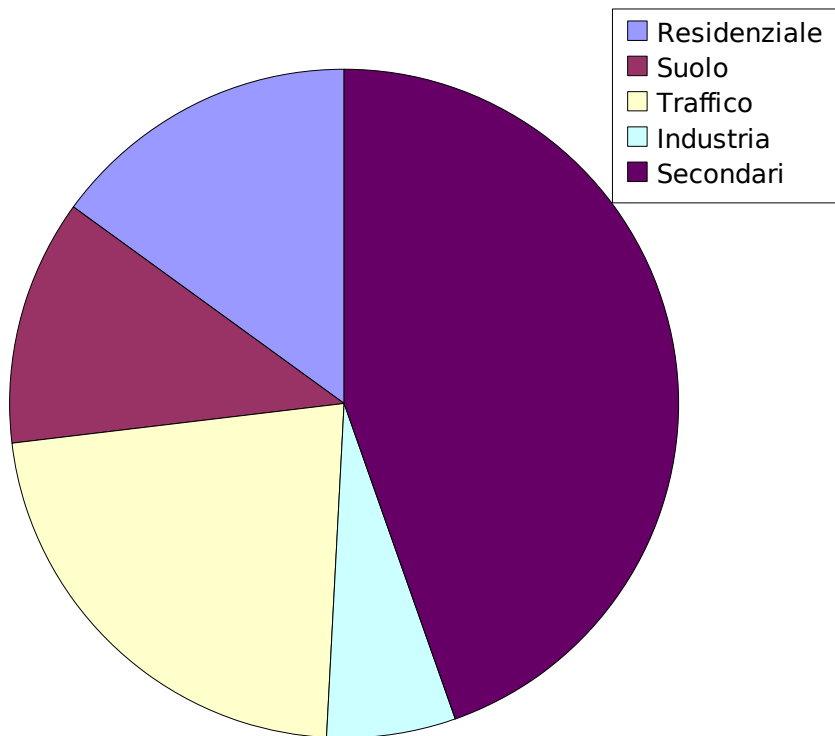


- “Wash-out” delle particelle nel caso di pioggia: le particelle fungono da nuclei di condensazione per la pioggia e inoltre vengono inglobate con processi di assorbimento superficiale
- La deposizione umida è molto efficiente per la rimozione di polveri dall'atmosfera, infatti i valori di concentrazione calano drasticamente a seguito di fenomeni di precipitazione

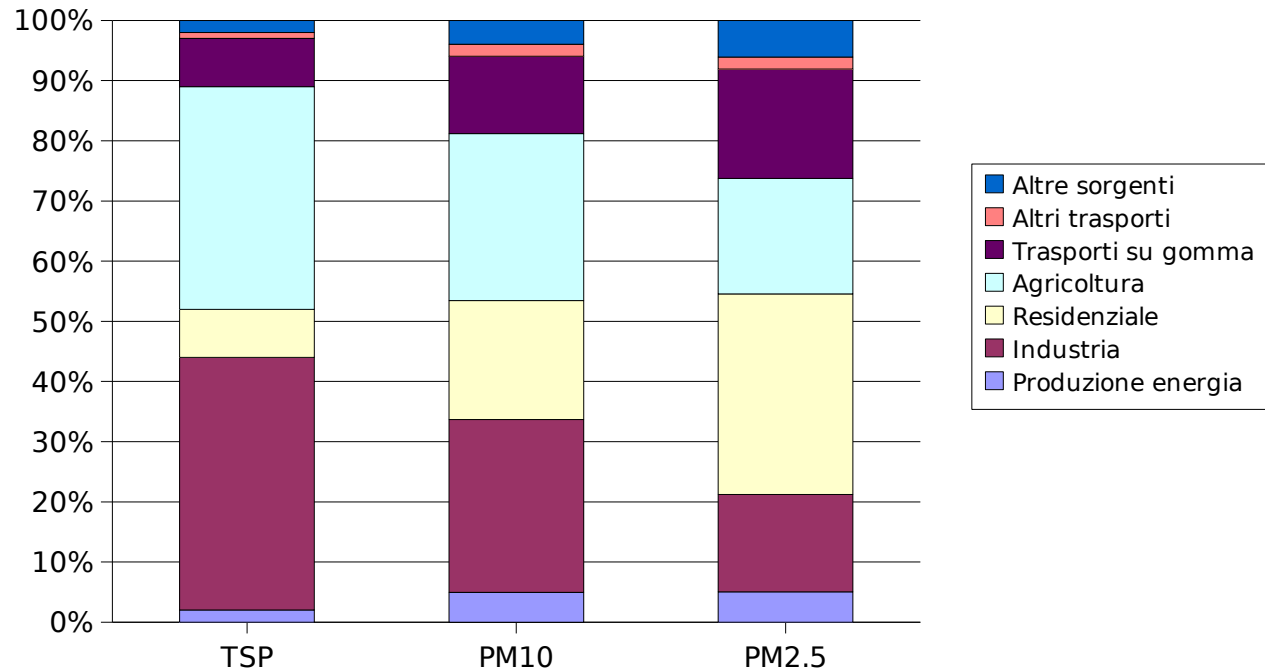
# Emissioni di PM10: confronto di dati

Residenziale	15%
Suolo	12%
Traffico	22%
Industria	6%
Secondari	45%

## Emissione PM10 Italia NW

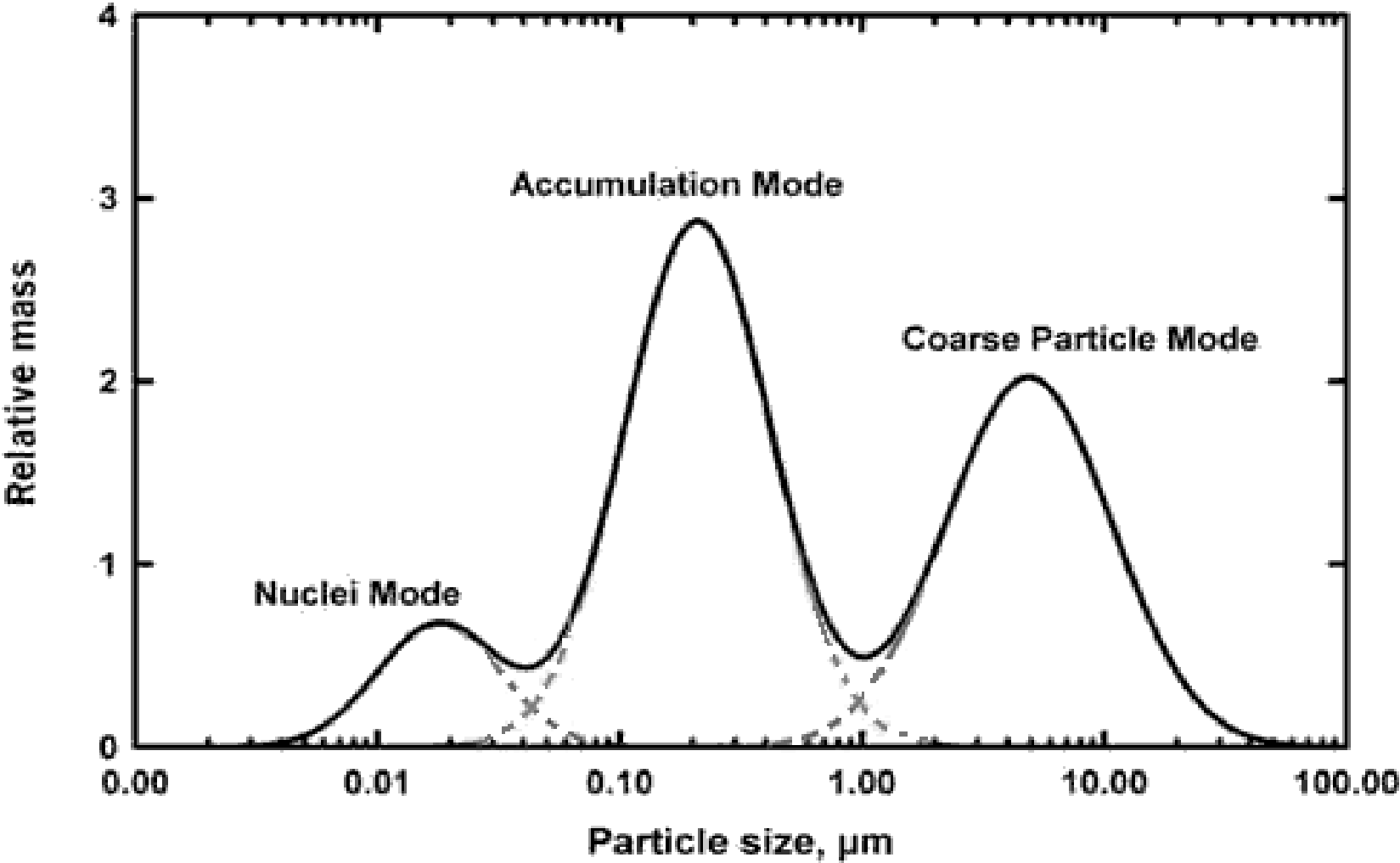


## Emissioni PM2.5, PM10 e TSP in Francia



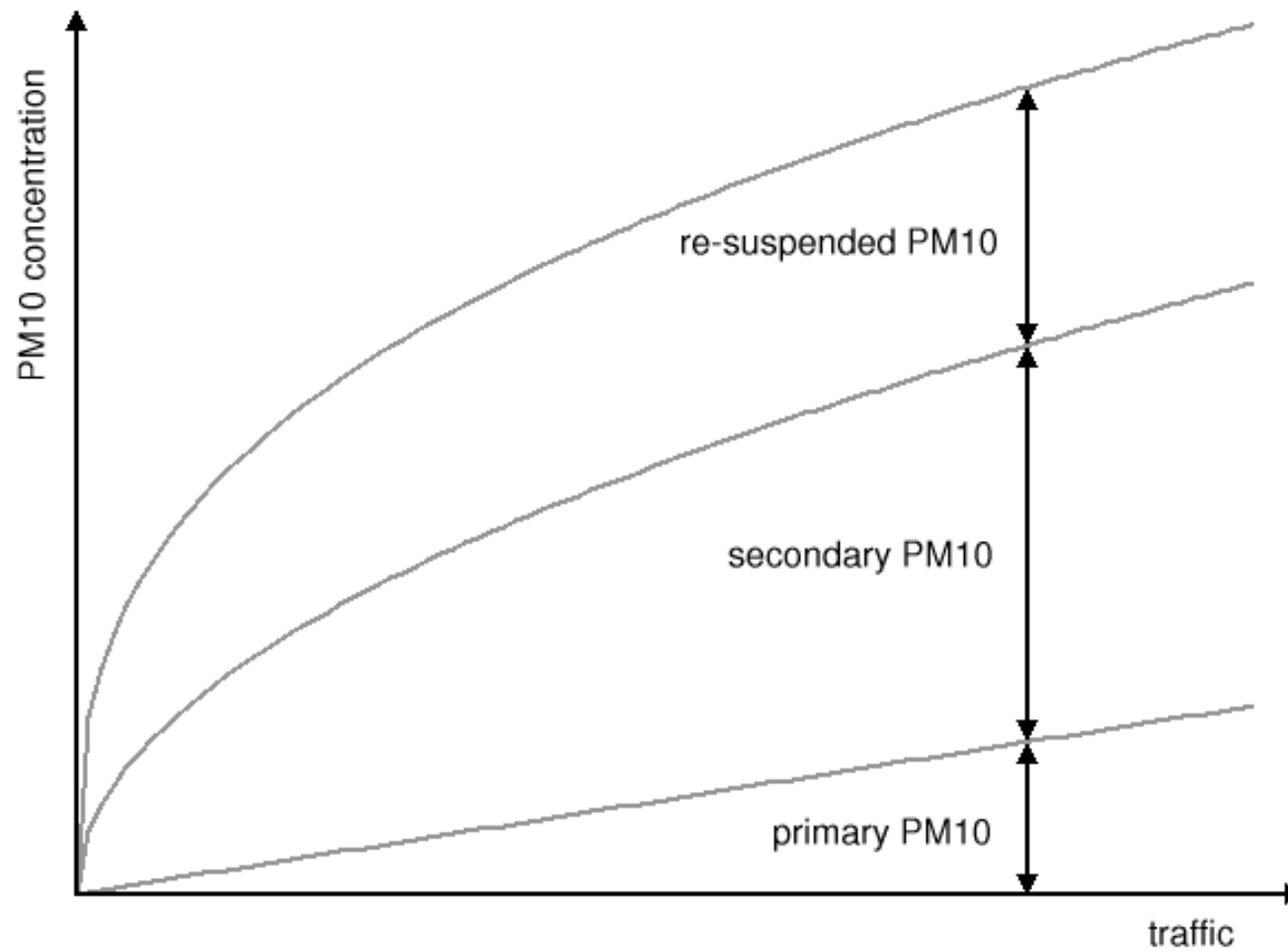
	TSP	PM10	PM2.5
Produzione energia	2%	5%	5%
Industria	42%	29%	16%
Residenziale	8%	20%	33%
Agricoltura	37%	28%	19%
gomma	8%	13%	18%
Altri trasporti	1%	2%	2%
Altre sorgenti	2%	4%	6%

## Distribuzione granulometrica del particolato

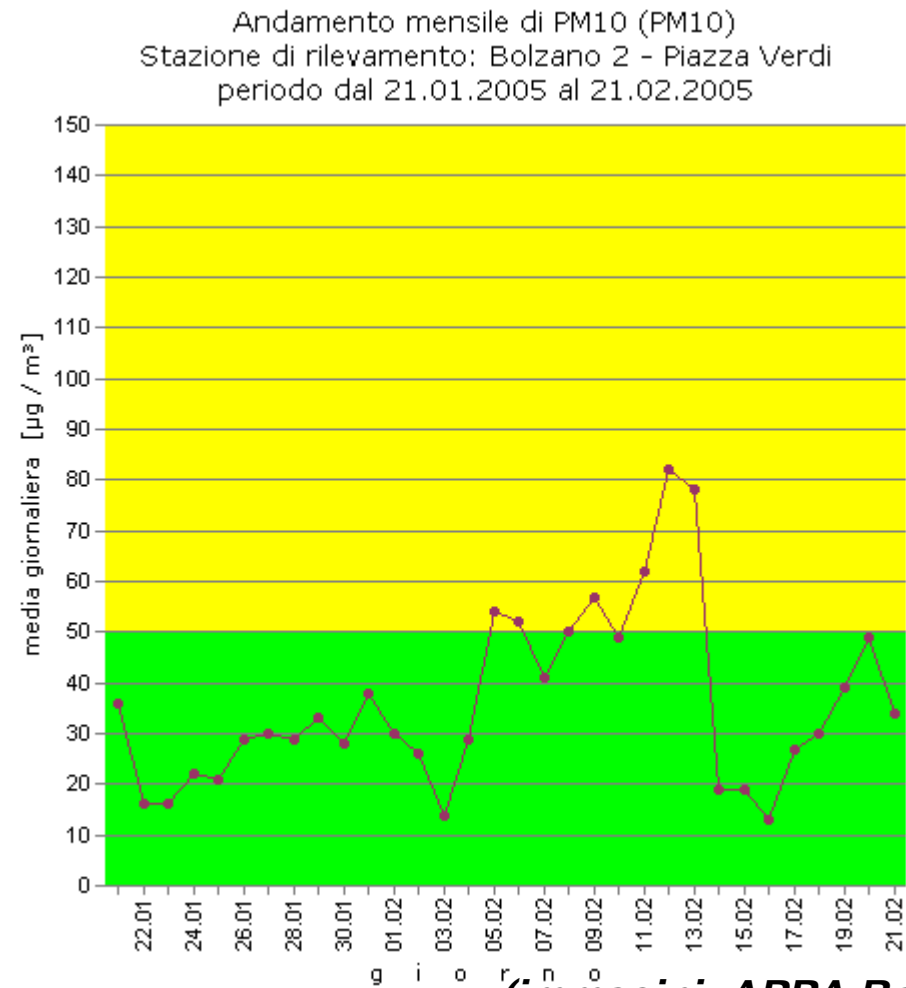
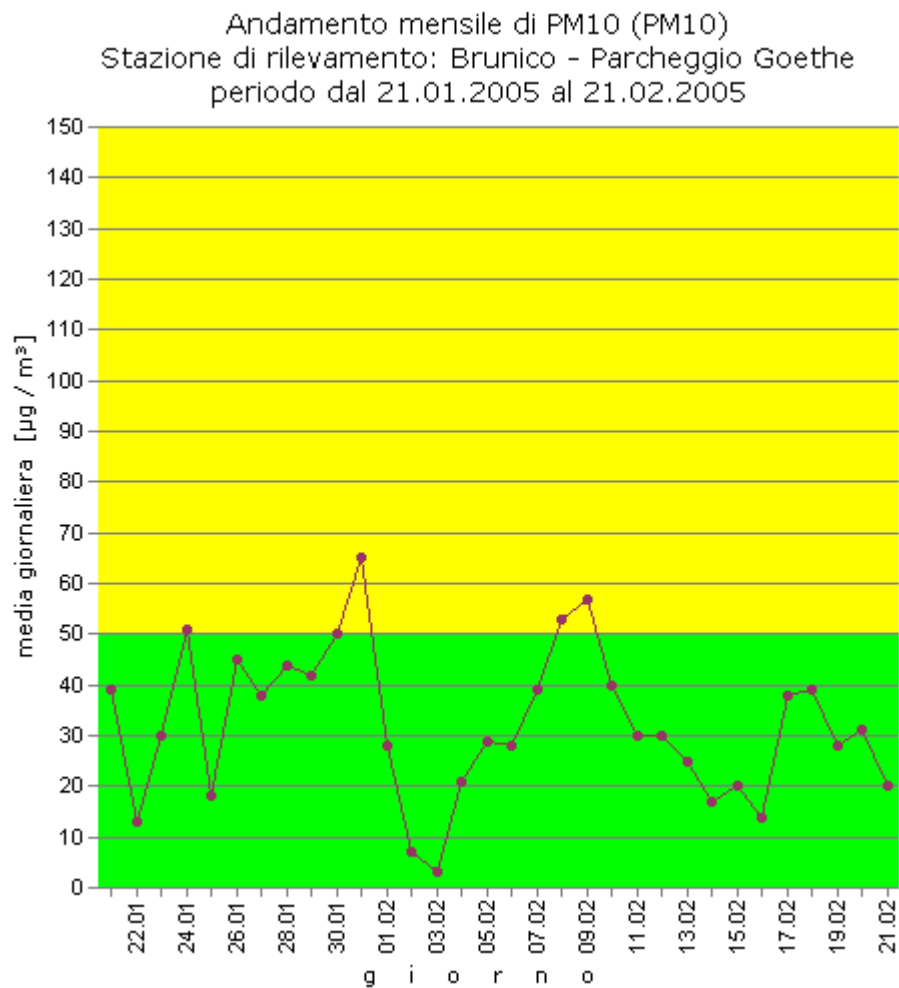


## PM10: emissione e concentrazione

Curva qualitativa relativa all'aumento di concentrazione con l'emissione



# PM10: andamento mensile in provincia di BZ

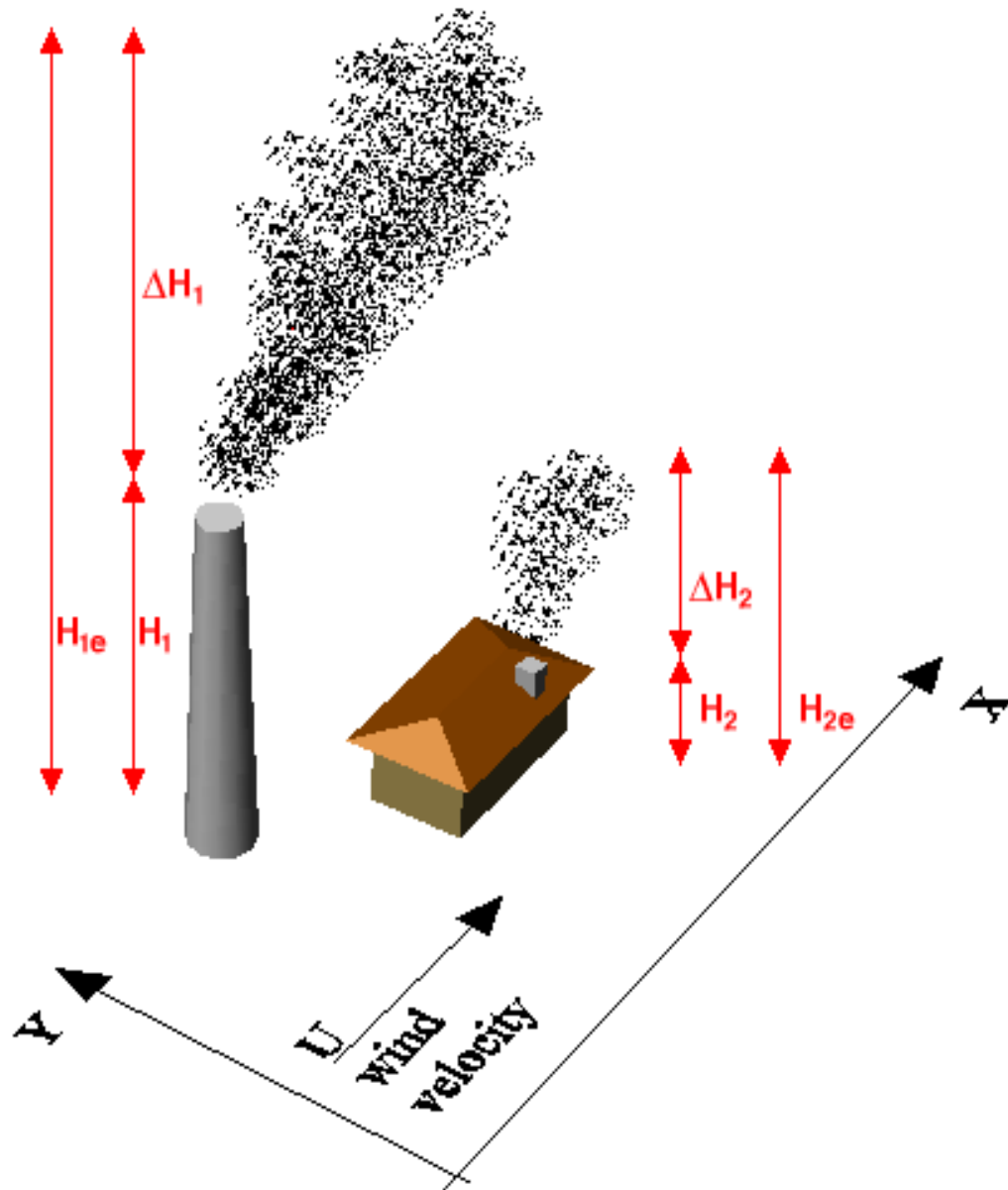


*(immagini: APPA Bolzano)*

Differenza degli andamenti a seconda delle condizioni meteorologiche, morfologiche ed emissive

# Tipologie di sorgenti

# Tipologie di sorgenti



## Sorgenti

- puntuali, lineari, areali
- al suolo ed elevate
- concentrate e diffuse

# Tipologie di modelli



## Modelli analitici gaussiani

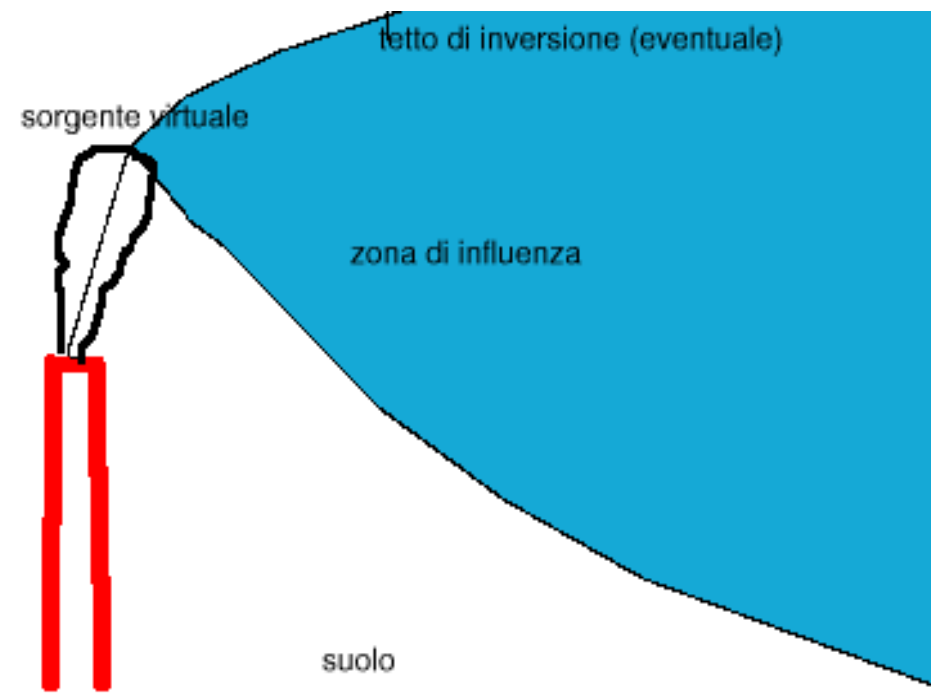
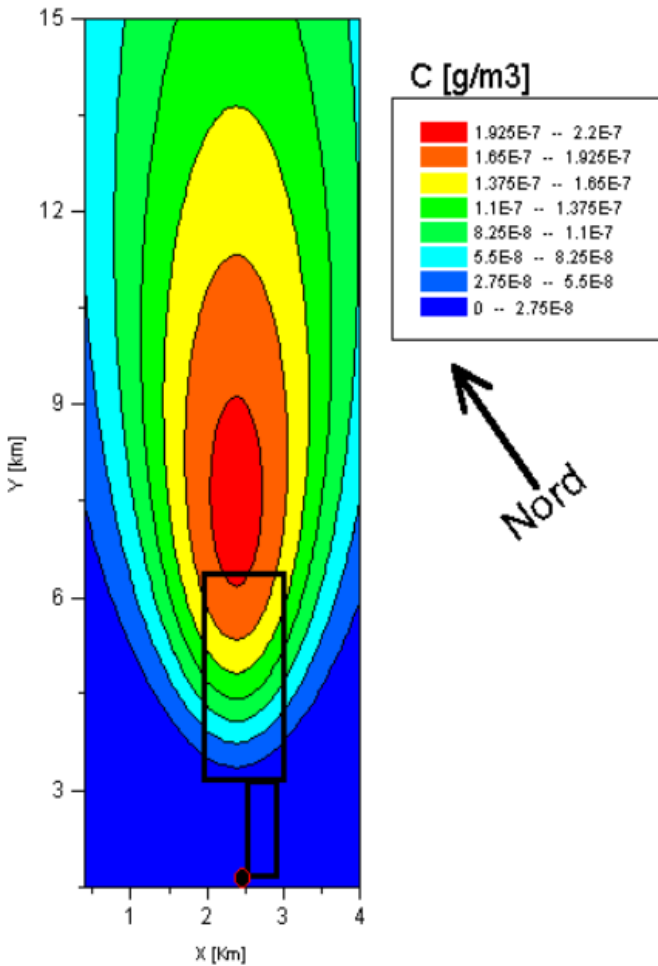
- I modelli gaussiani, a coefficienti variabili o costanti, sono modelli stazionari analitici, di semplice applicazione
- L'approssimazione di un processo evolutivo nel tempo può essere fatta solo tramite una successione di stati stazionari
- Questo tipo di modello è adatto ad un sito pianeggiante; tuttavia può essere adattato con opportune modifiche ad orografia complessa, tenendo conto che l'approssimazione determina un minore grado di accuratezza
- L'allargamento della nuvola di contaminante è funzione della stabilità atmosferica e della distanza sottovento
- Esempio di modelli gaussiani: ADMS, ISC3, CALINE ...

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2 \pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(\frac{-y^2}{2 \sigma_y^2}\right) \left[ \exp\left(-\frac{(z-H)^2}{2 \sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z+H)^2}{2 \sigma_z^2}\right) \right]$$

# Modelli analitici gaussiani

In un modello gaussiano il **vento** è, per ogni simulazione, **costante** in direzione e modulo; è tuttavia possibile introdurre l'informazione sul profilo di vento la verticale.

Questo tipo di modello risulta di semplice implementazione ed è utile nel caso di casi relativamente semplici, nonché nei casi in cui è richiesto un calcolo delle concentrazioni in termini statistici (tramite sovrapposizione di numerose mappe dello stesso tipo calcolate in differenti condizioni)



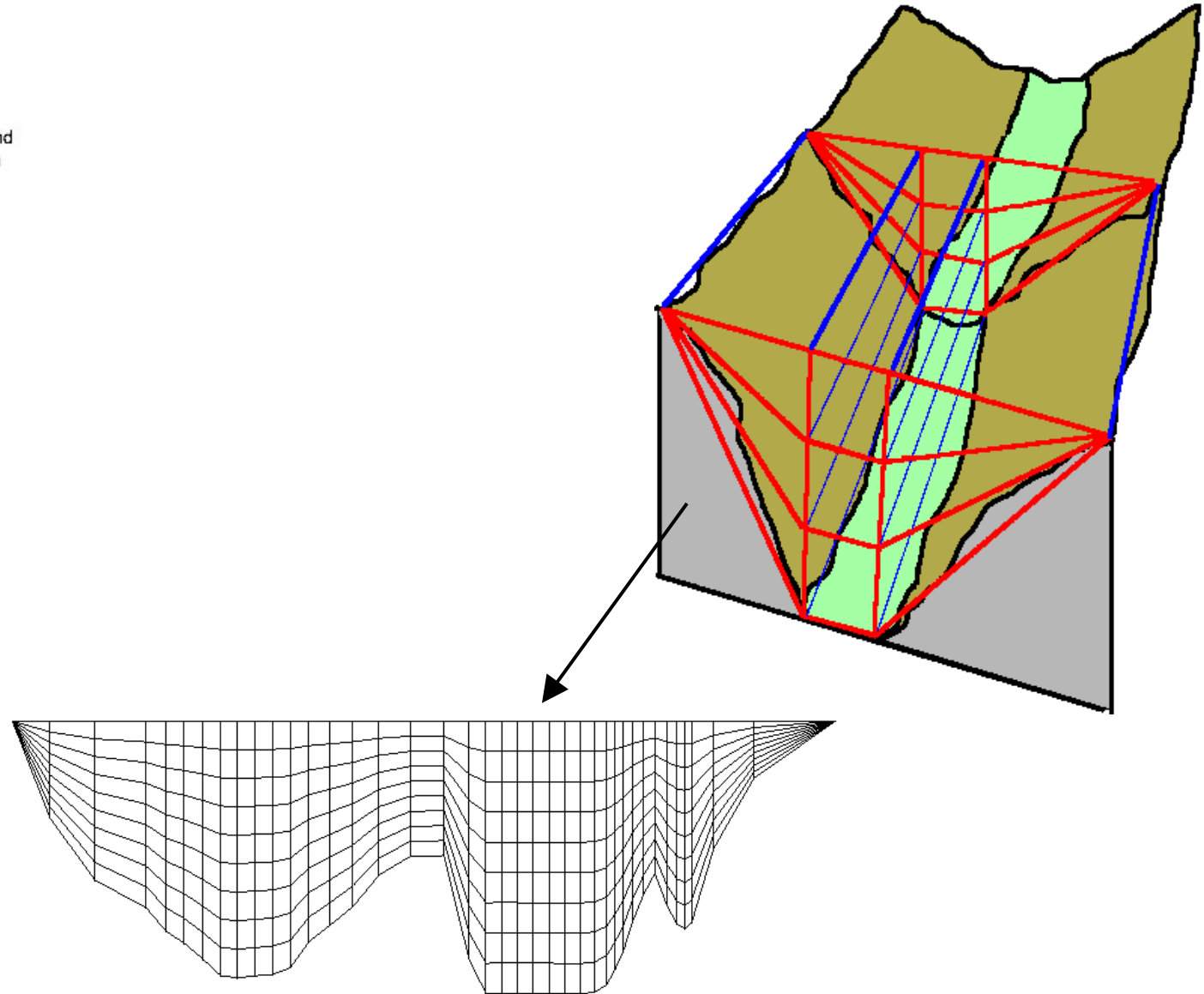
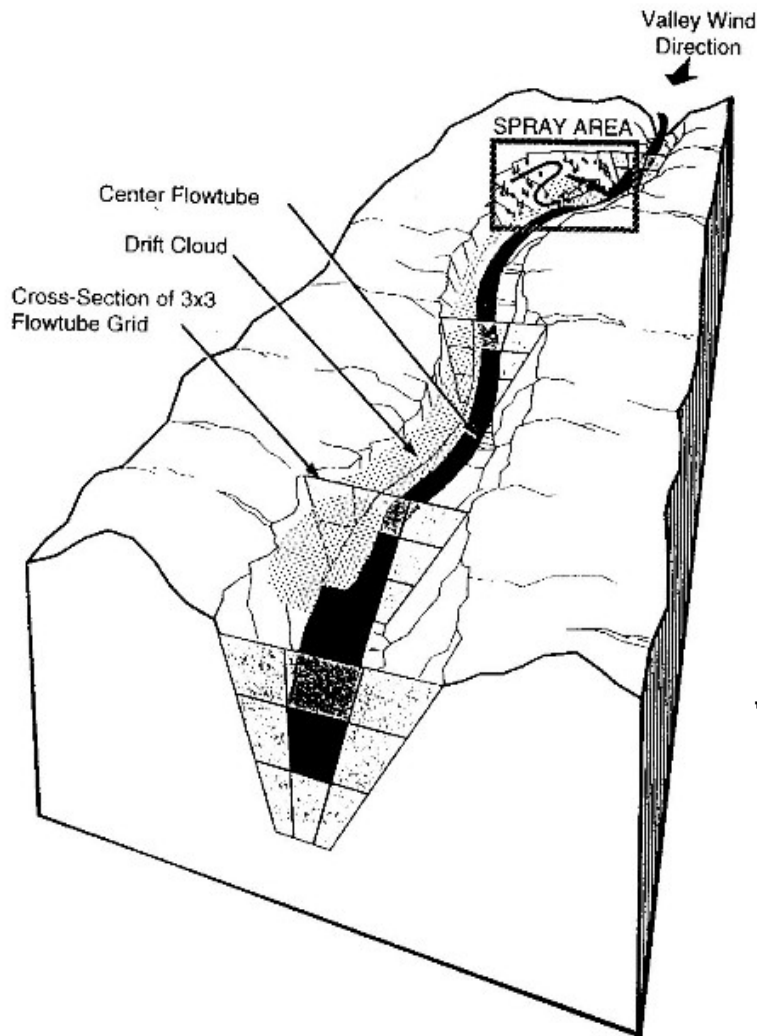
## Modelli euleriani

---

- Modelli tridimensionali non stazionari
- Richiedono generalmente elevate risorse di calcolo
- Richiedono un preprocessore meteorologico che calcola il campo di moto tridimensionale (e tutte le altre grandezze meteo necessarie)
- Risolvono l'equazione della convezione e diffusione con schemi numerici alle differenze finite o agli elementi finiti
- Il dominio deve essere schematizzato in celle la cui dimensione è funzione dell'estensione dell'area di studio e dell'accuratezza richiesta
- Permettono il trattamento di siti pianeggianti o complessi
- Esempio CALGRID, CALPUFF, VALDRIFT

# Modelli euleriani

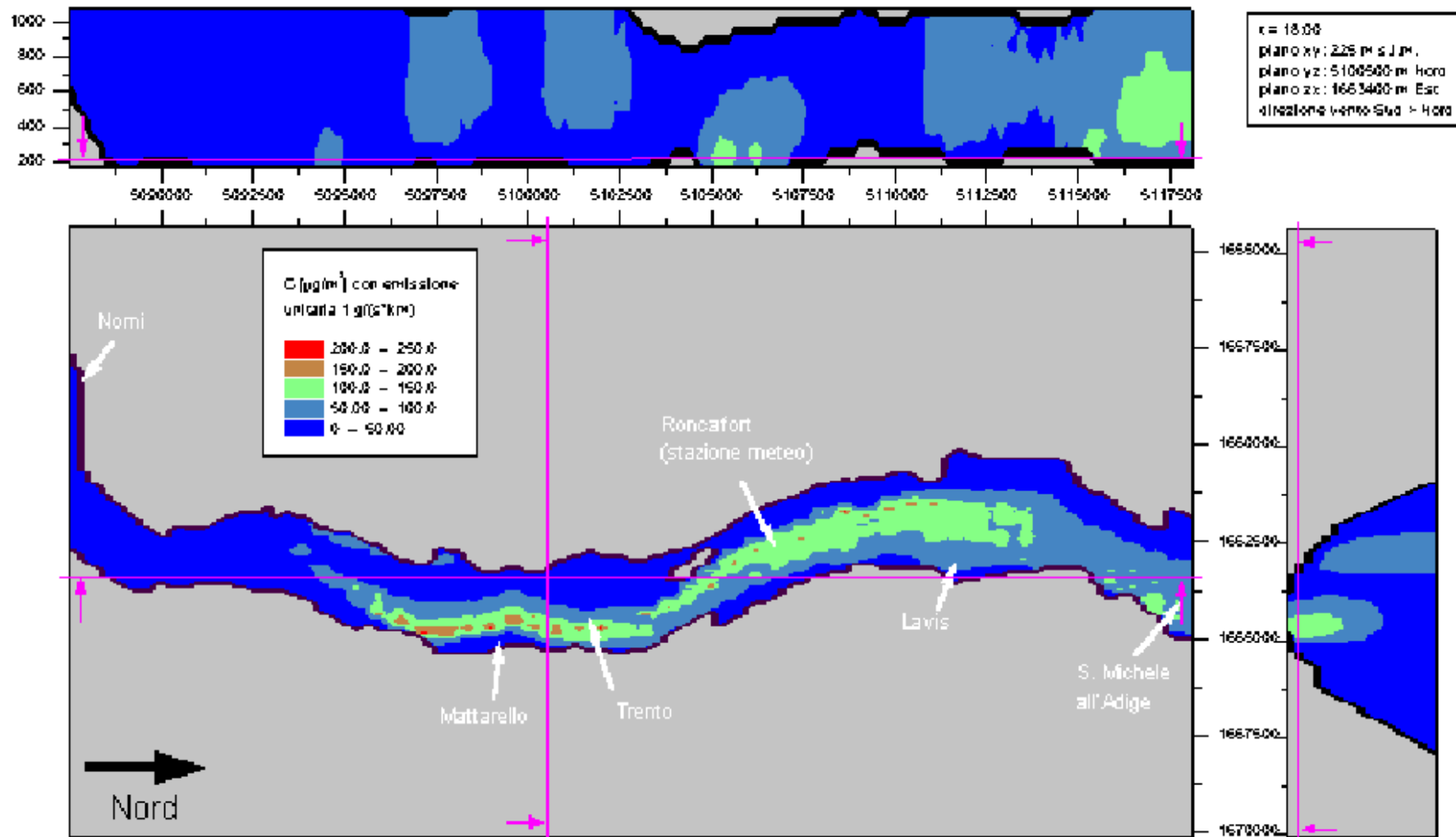
Esempio di modello euleriano nel caso di venti di valle. Il dominio è suddiviso in celle la cui forma si adatta all'orografia complessa; questo modello è specifico per il caso di vento incanalato



(immagine: Allwine, 1996)

Sezione n° 12 (x = 5500 m)  
n° celle =  $n_y \times n_z = 39 \times 9$   
scala verticale = 4 x scala orizzontale

# Esempio: modello euleriano a tubi di flusso



Modello euleriano a tubi di flusso - rilascio continuo da sorgente lineare (autostrada), simulazione a breve termine

## Modelli lagrangiani

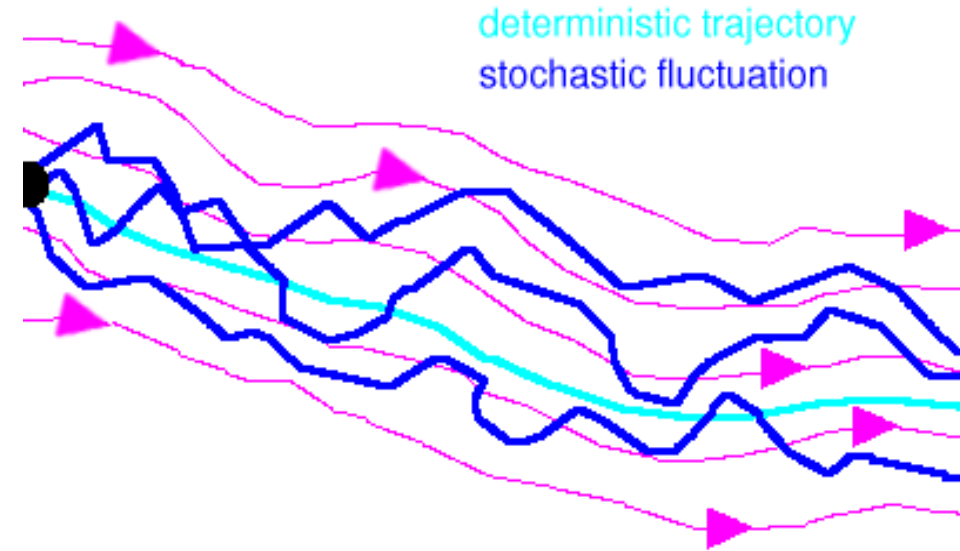
---

- Modelli tridimensionali non stazionari
- Richiedono elevate risorse di calcolo
- Richiedono un preprocessore meteorologico che calcola il campo di moto tridimensionale (e tutte le altre grandezze necessarie)
- La diffusione di inquinanti viene simulata tramite l'integrazione della traiettoria di un gran numero di particelle
- I fenomeni di assorbimento o riflessione vengono simulati rispettivamente tramite l'arresto o la riflessione "geometrica" delle particelle in corrispondenza del suolo e delle pareti
- Le particelle possono essere assoggettate ad una velocità verticale verso il basso per simulare le polveri pesanti
- Permettono il trattamento di siti pianeggianti o complessi
- Esempio di modelli lagrangiani: SPRAY, FLEXTRA, IBJparticle

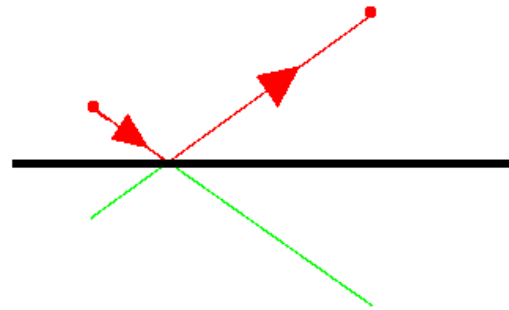
# Modelli lagrangiani

Modello lagrangiano "particle tracking"  
=integrazione della traiettoria

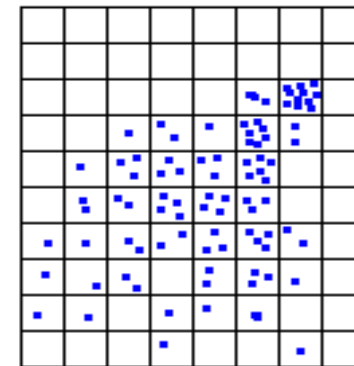
trasporto e diffusione =  
moto deterministico (=moto medio del vento) +  
non deterministico (=turbolenza)



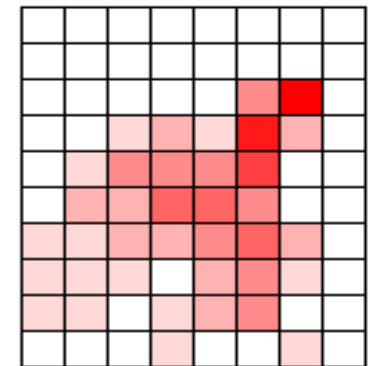
Condizioni al contorno: flusso  
nullo o assorbimento



Calcolo della concentrazione per "conta" di  
particelle all'interno di celle in cui il dominio è  
idealmente suddiviso



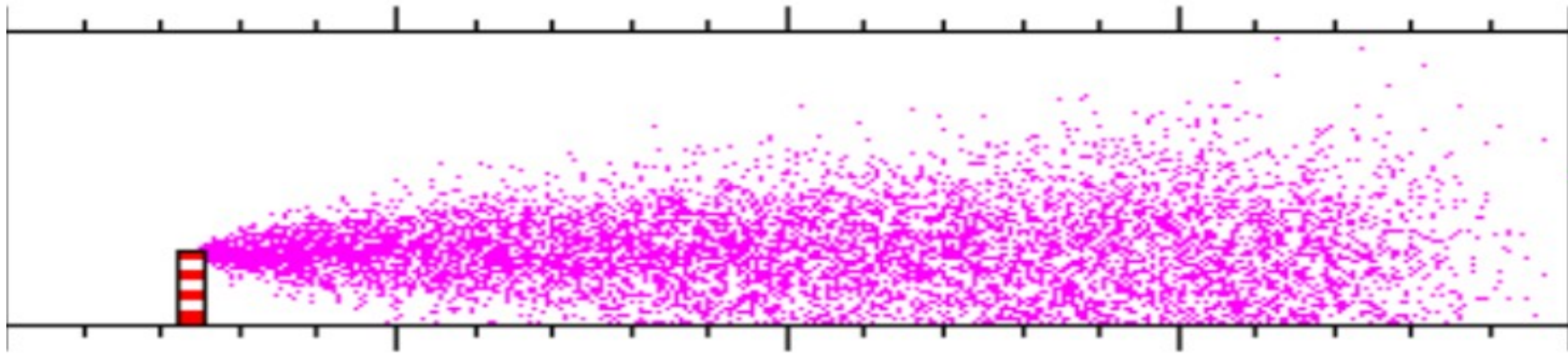
nr. of particles



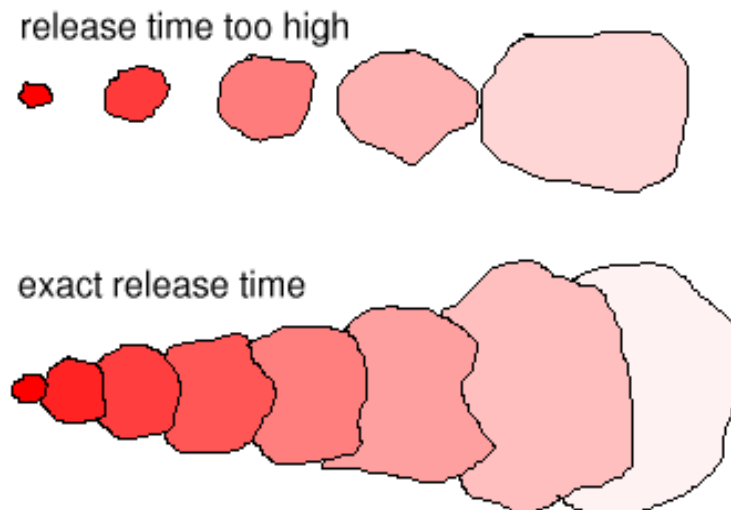
color scale

## Modelli lagrangiani

Ogni particella porta una unità di massa e viene seguita nel suo percorso determinato dal moto medio e dalle fluttuazioni turbolente

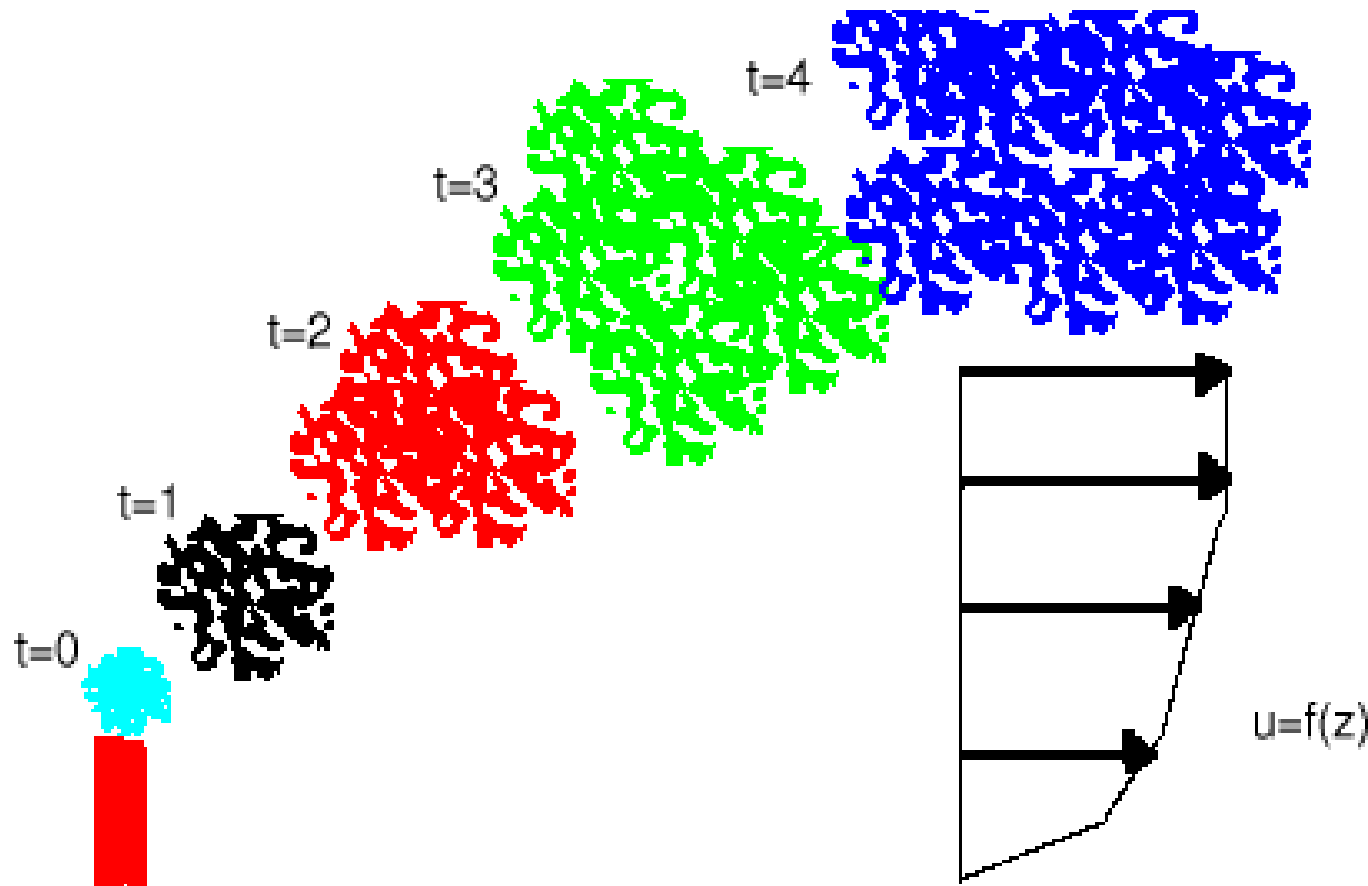


Il numero di particelle di cui viene simulata l'emissione così come il tempo di rilascio sono parametri cruciali





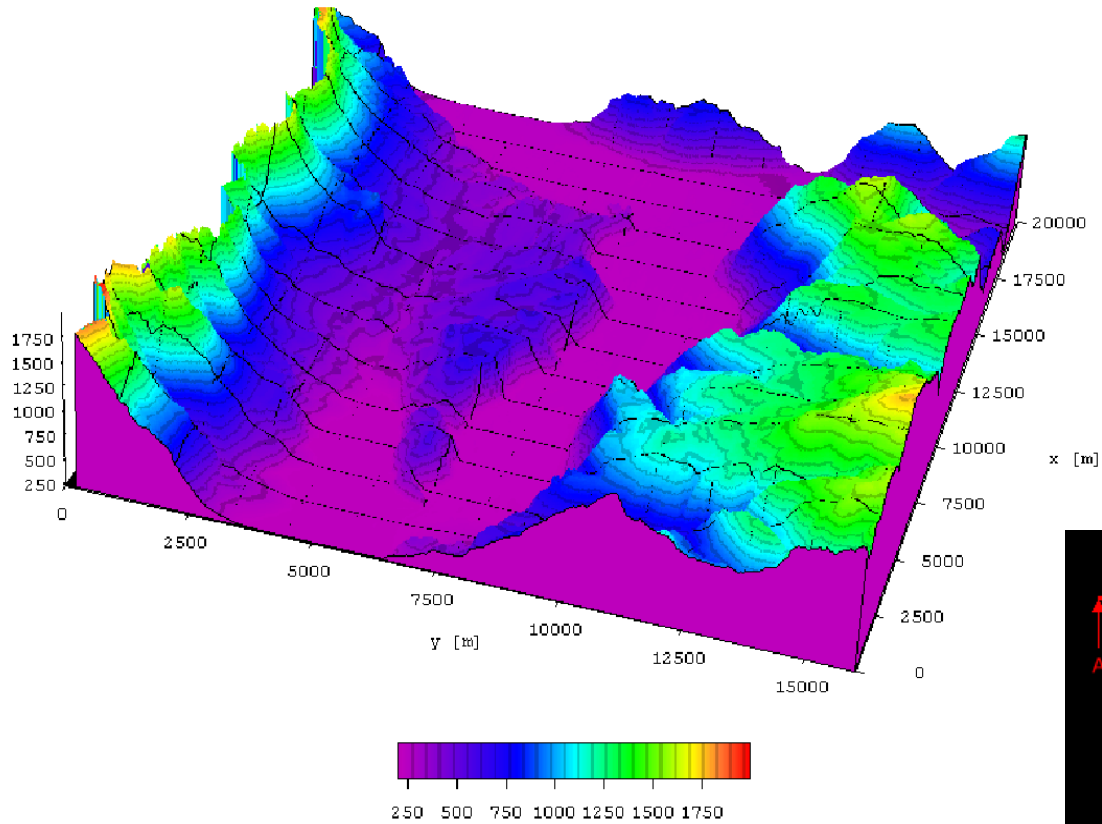
# Modelli lagrangiani



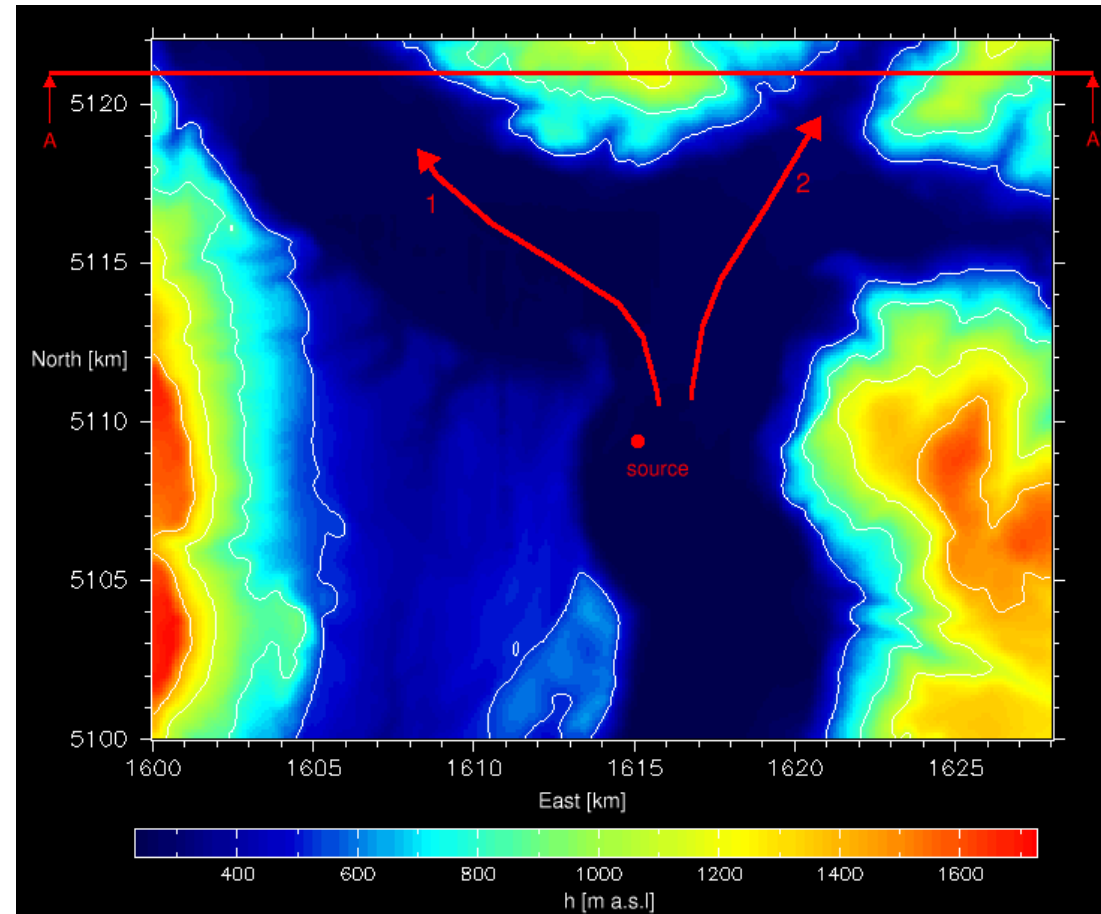
Schema concettuale di un modello lagrangiano: è consentita una simulazione di tipo evolutivo nel tempo, accurata sia per tempi brevi che per tempi lunghi. La nuvola di contaminante, schematizzata tramite un insieme di particelle rilasciate ad istanti discrete, si muove seguendo mediamente il campo di moto e contemporaneamente si espande. **Particolarmente adatto a simulazioni di polveri sottili perché si traccia il percorso di punti materiali**

# **Inquinamento in valli alpine**

# Utilizzo di orografia complessa

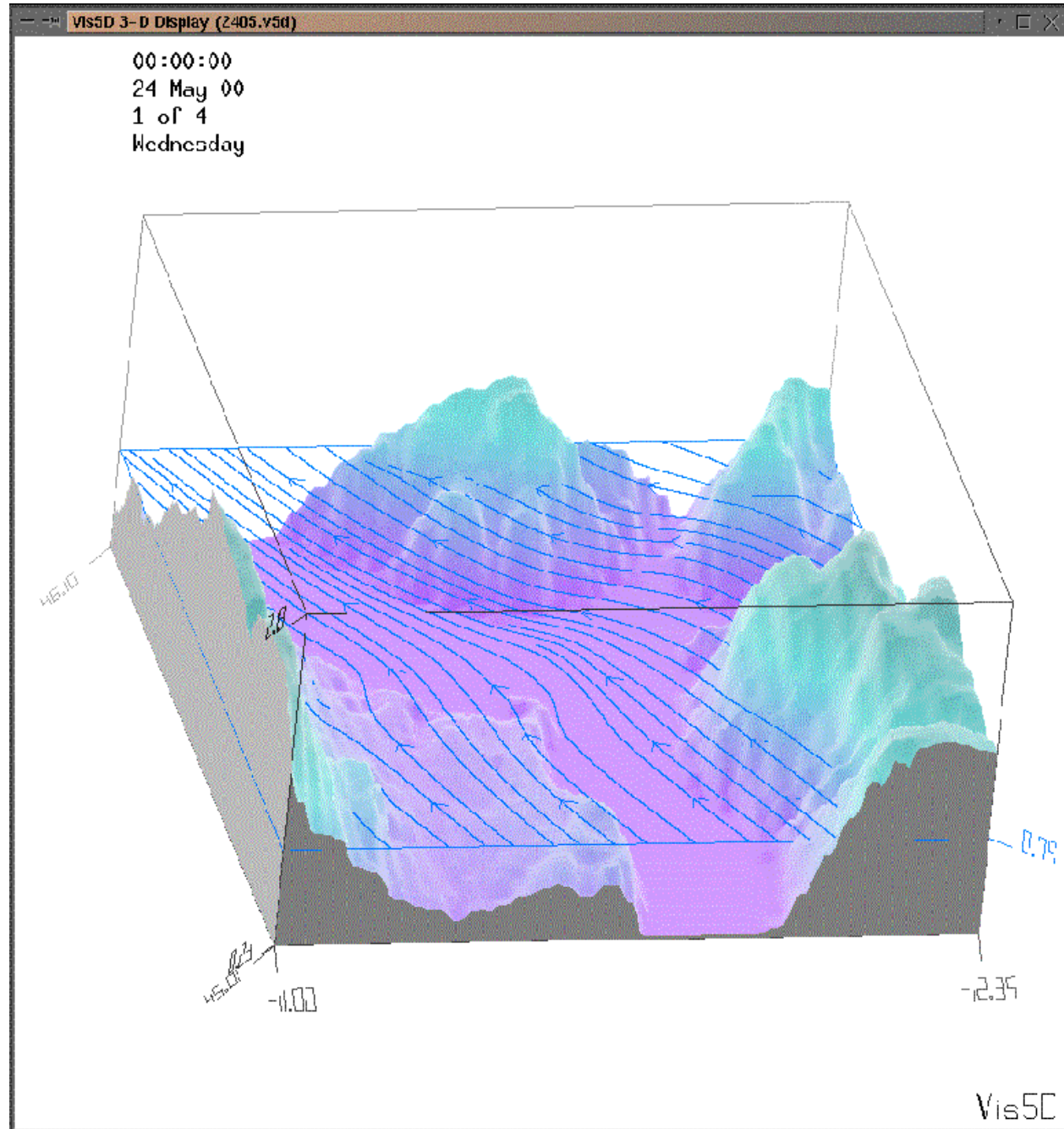


Il problema può essere studiato in maniera più accurata con l'utilizzo di una orografia complessa e di una dettagliata mappa di uso del suolo.



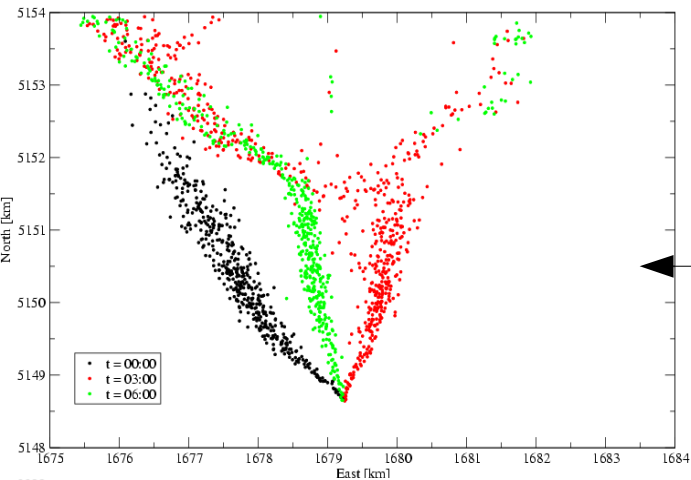
# Utilizzo di un preprocessore meteo 3D

Campo di moto tridimensionale ricostruito a partire da una serie di misure al suolo ed in quota (SODAR) mediante un programma di tipo mass-consistent o che risolve le equazioni del moto.

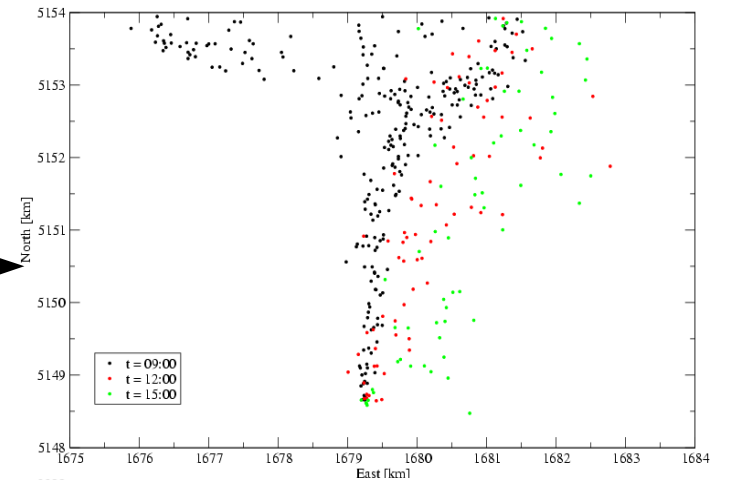


# Simulazione in orografia complessa

notte



giorno

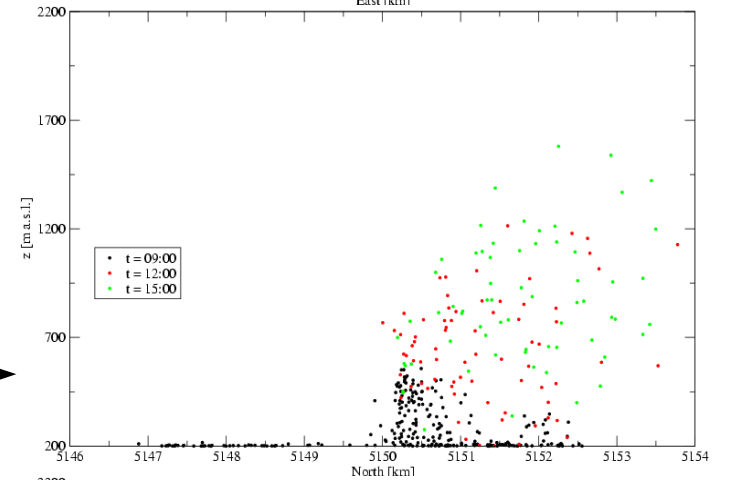
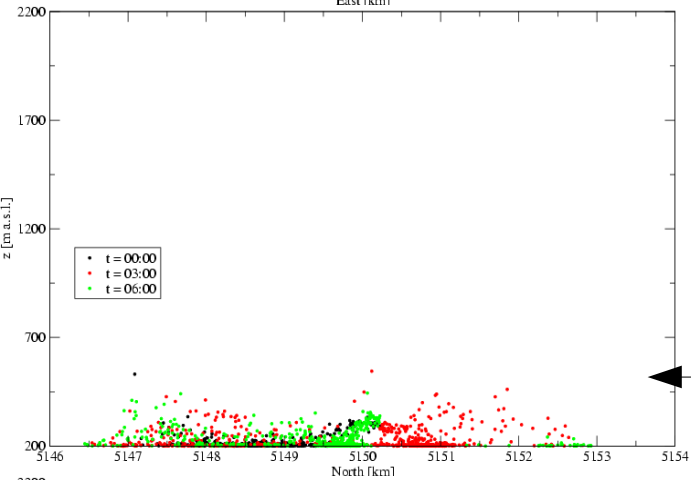


Plan view

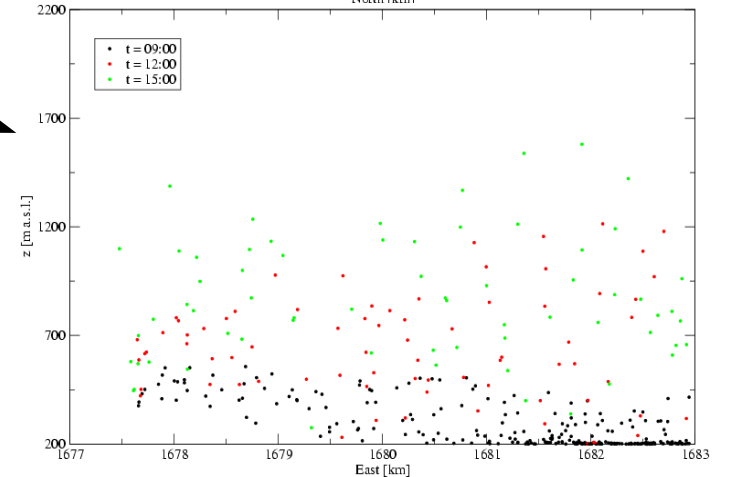
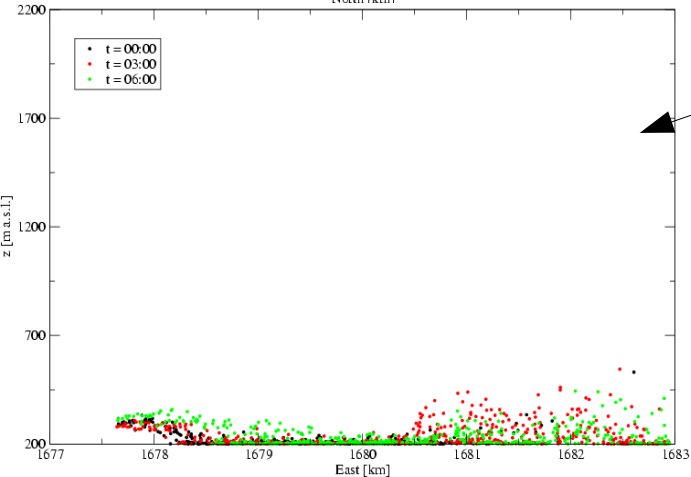
Modellazione lagrangiana  
applicazione ad una sorgente  
puntuale: differenza tra notte  
e giorno

Modello adatto alla  
simulazione della dispersione  
di particolato solido

South view

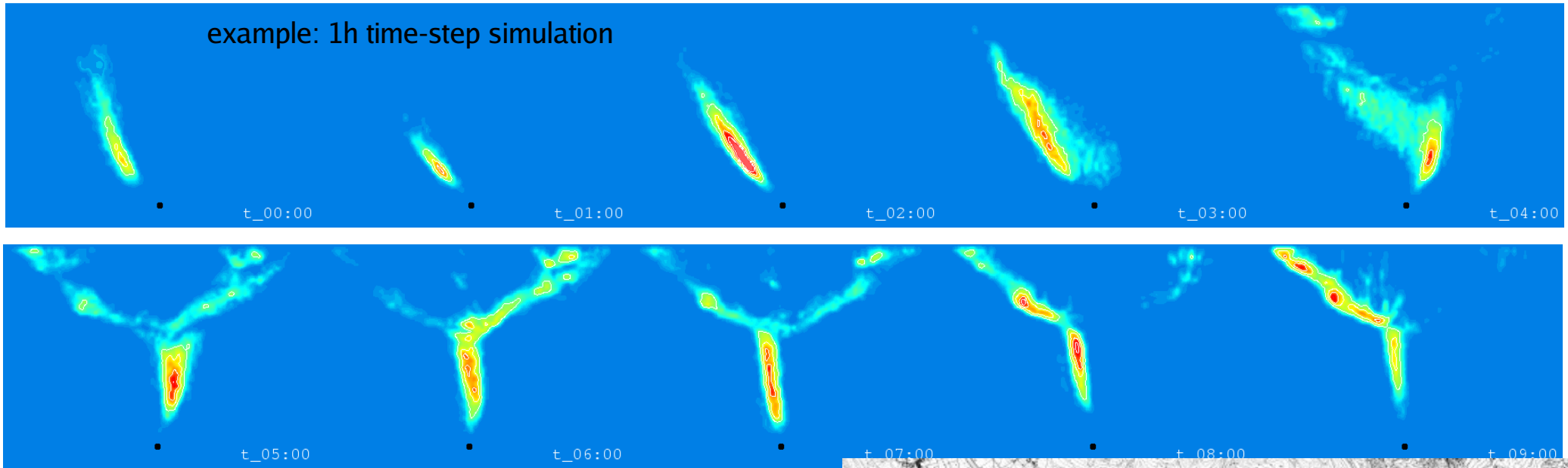


East view

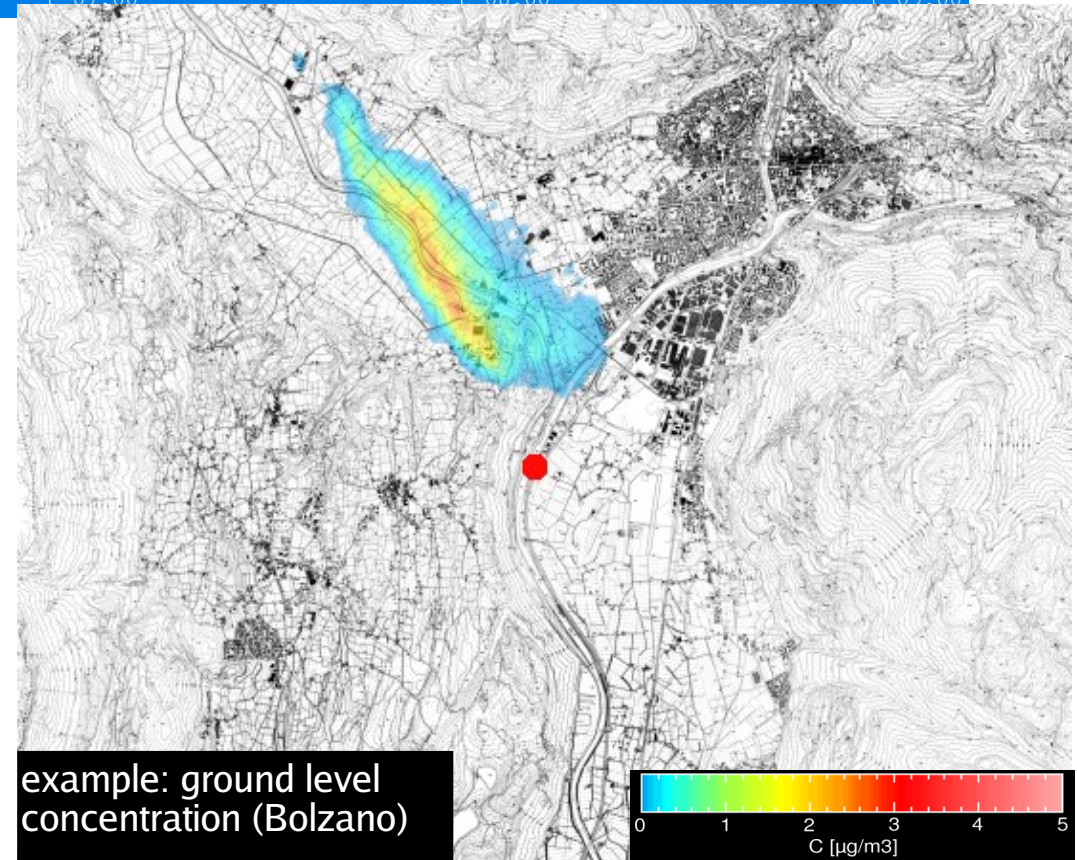


# Applicazione di un modello lagrangiano...

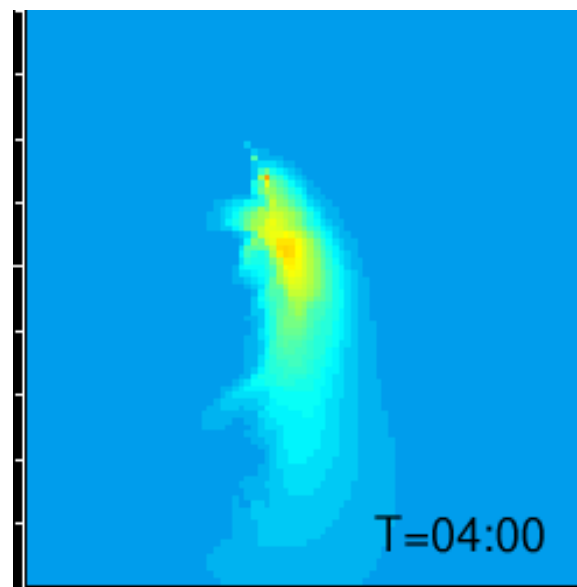
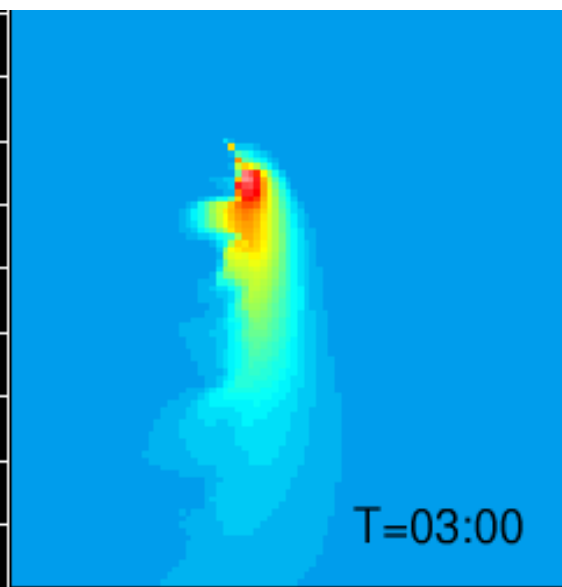
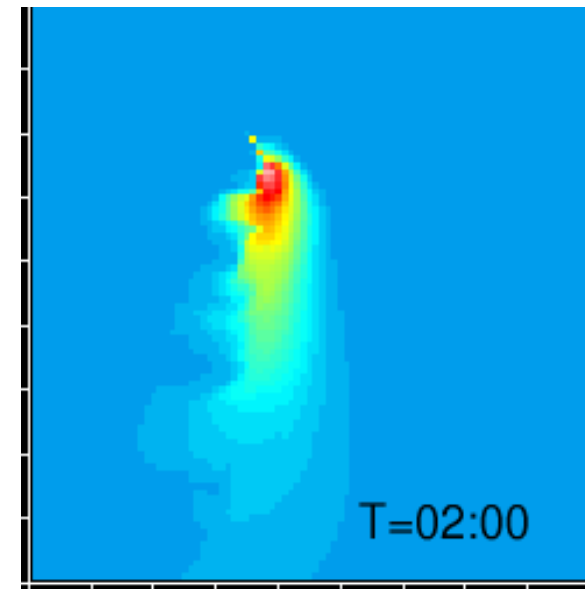
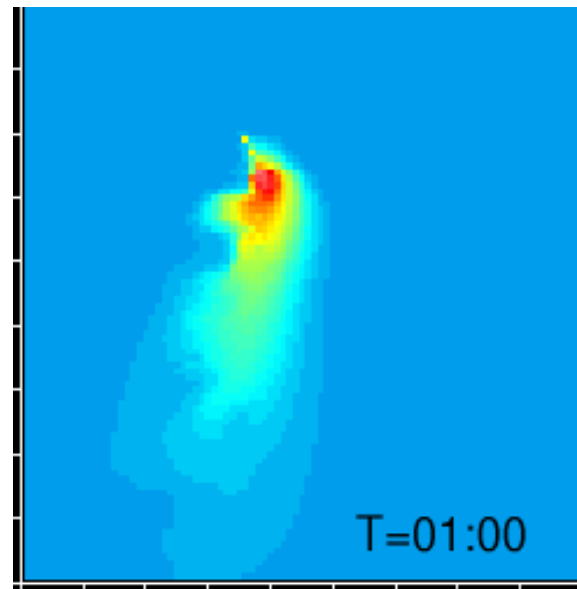
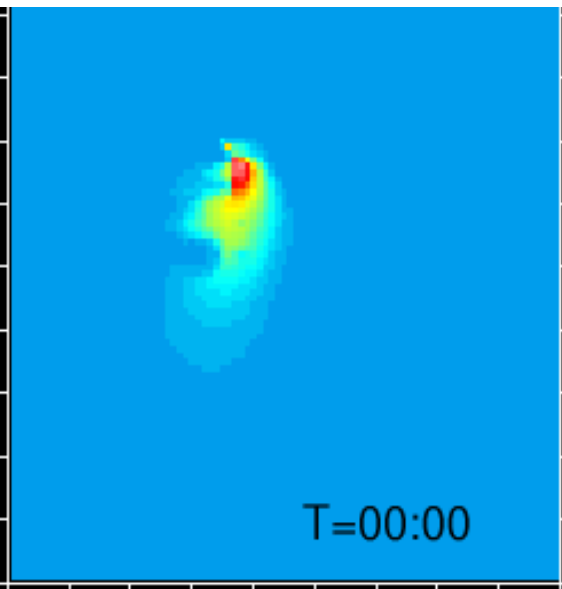
example: 1h time-step simulation



- Diffusione su scala locale (~10 km) con elevata risoluzione spaziale (~100 m)
- È necessario un DEM ad alta risoluzione ed una buona ricostruzione dei campi di vento e turbolenza



## ...e di un modello eulero-lagrangiano a puff (CALPUFF)

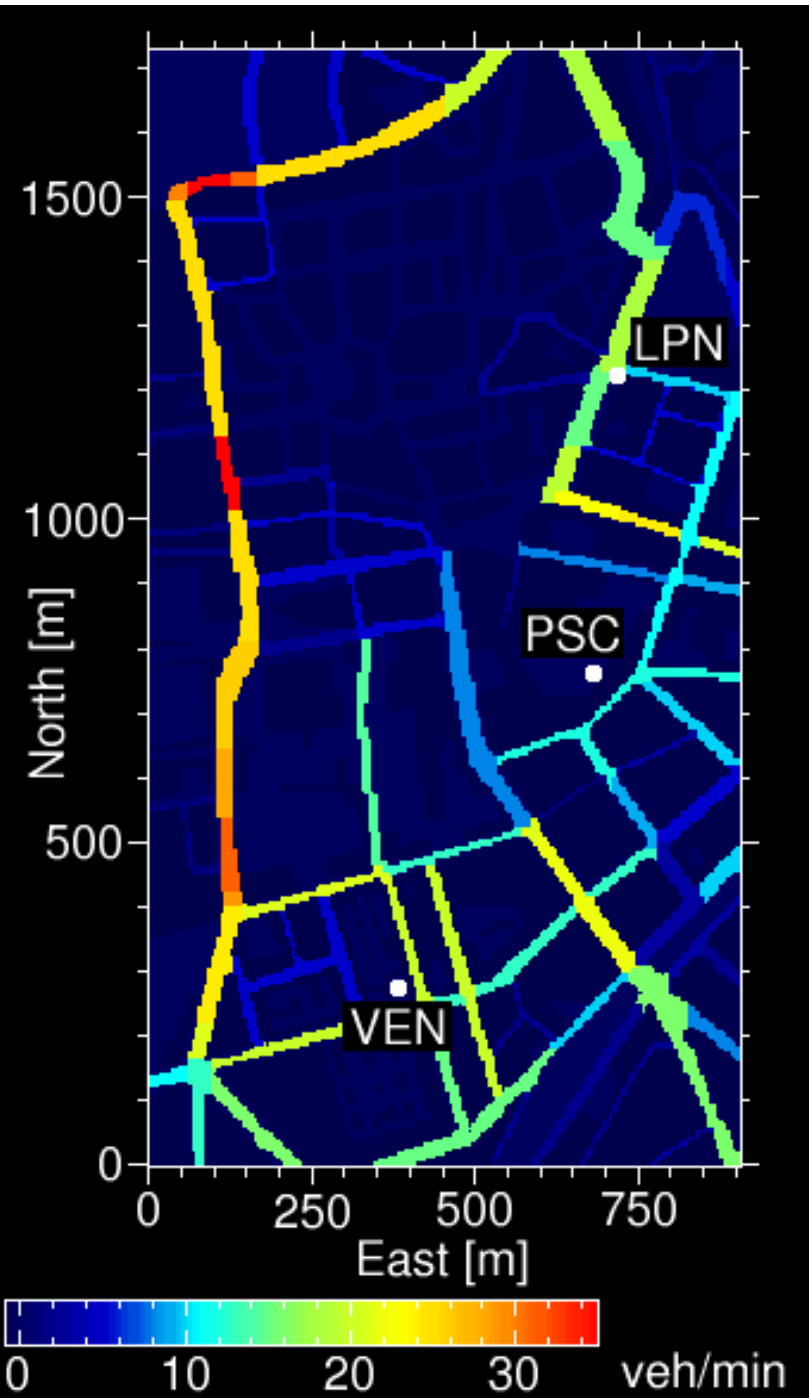


Rilascio continuo da sorgente puntuale; simulazione a breve termine su orografia complessa; l'intervallo temporale di simulazione è funzione della situazione che si vuole simulare: in caso di rapide variazioni nel corso del giorno serve, indicativamente, un intervallo non superiore all'ora

# Inquinamento urbano



# Modellazione a scala urbana



Edifici

Strade

Aree "aperte" o  
strade senza traffico



## Dispersione in area urbana: procedura

Dati meteorologici

- velocità e direzione del vento
- classe di stabilità

Dati di traffico

Dati topografici

- digital elevation map

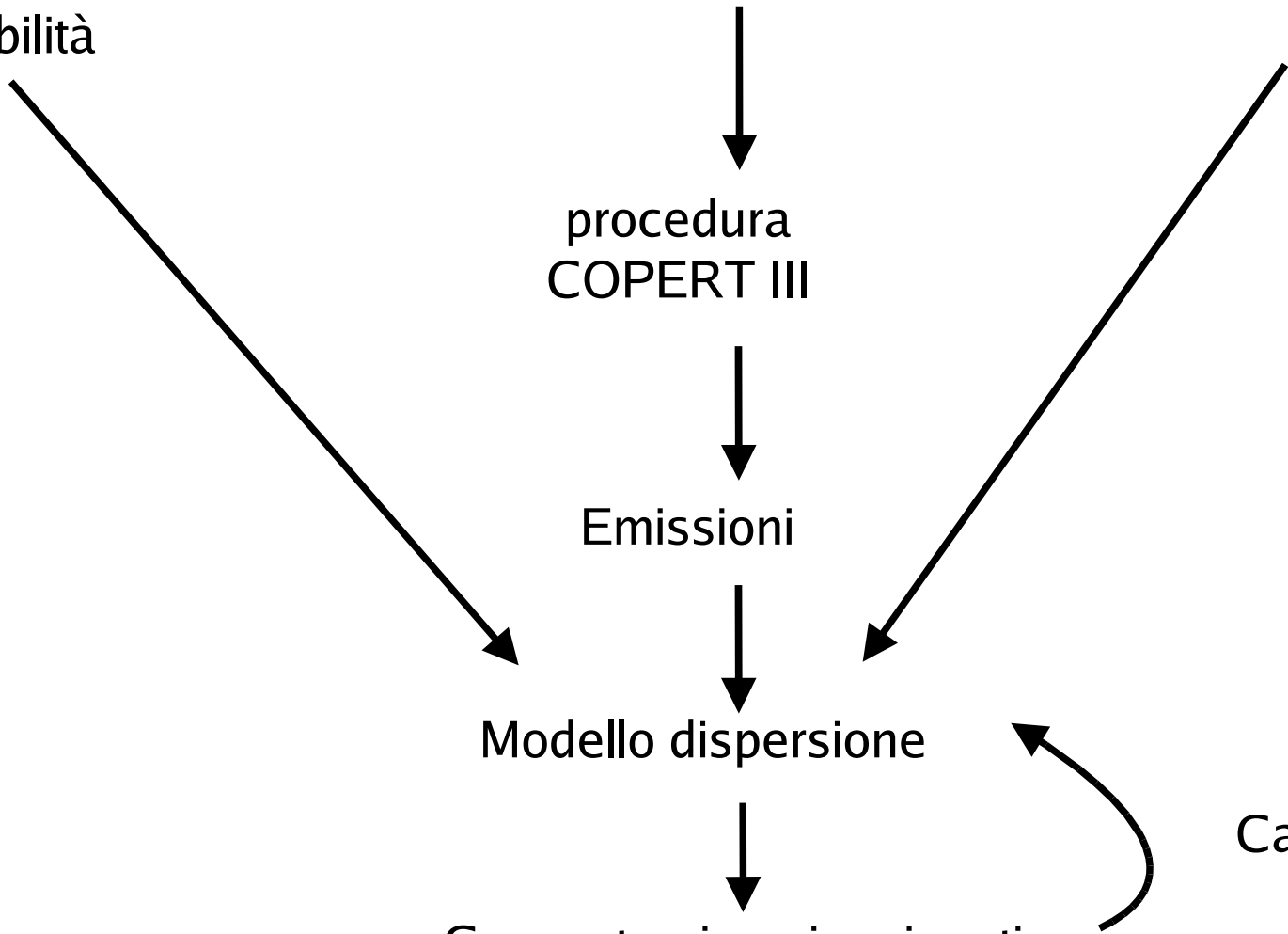
procedura  
COPERT III

Emissioni

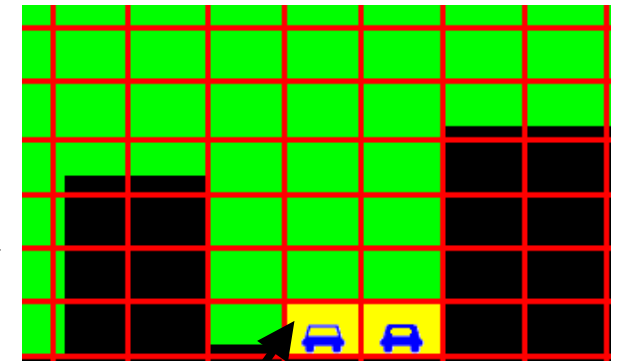
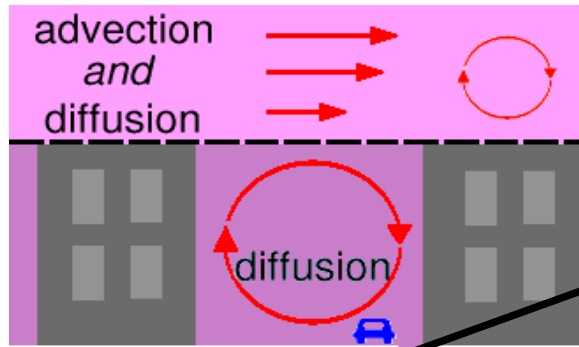
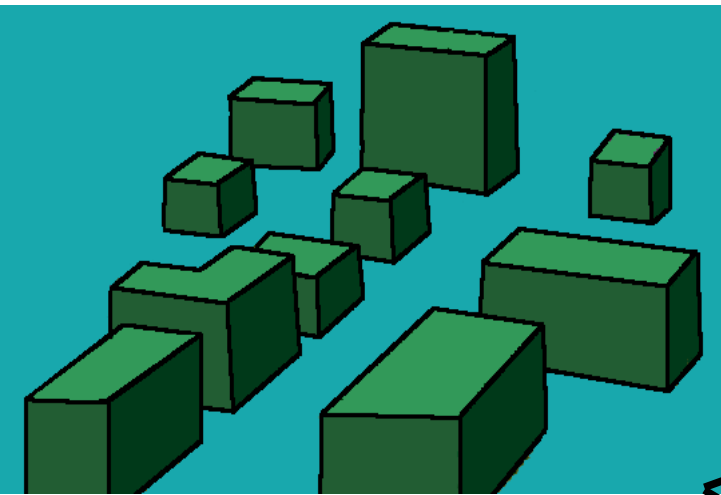
Modello dispersione

Concentrazione inquinanti

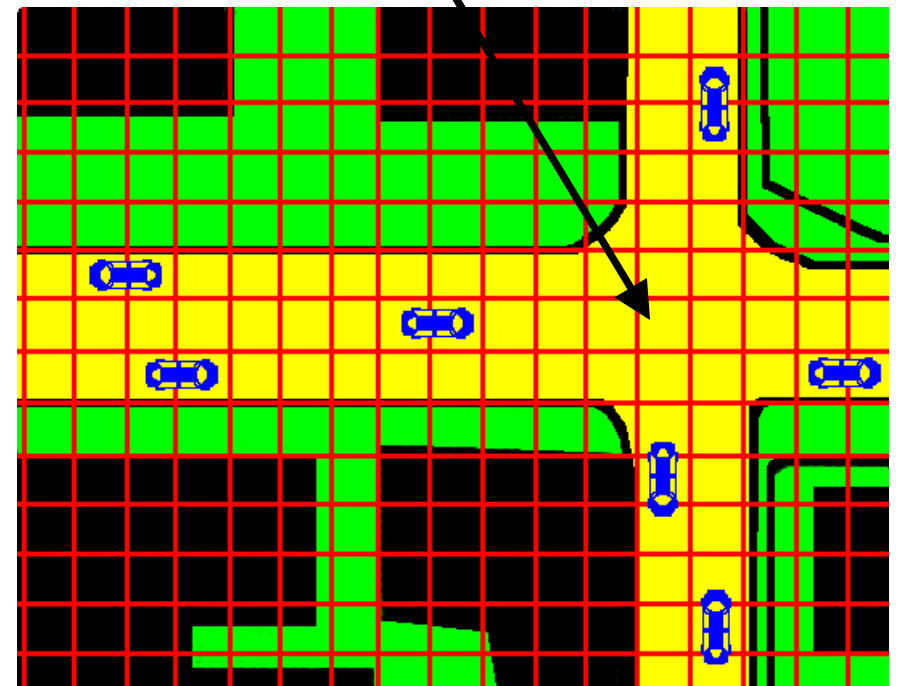
Calibrazione



# Modellazione a scala urbana



Celle di emissione



Griglia di calcolo derivata da un DEM; sono presenti 3 tipi di celle:

- Celle con termine sorgente positivo (strade)
- Celle appartenenti al dominio ma non sede di emissione (parchi, parcheggi, marciapiedi, aree escluse al traffico)
- Celle non appartenenti al dominio (edifici)

Discretizzazione: per es  $\Delta x = \Delta y = 5\text{m}$ ;  $\Delta z = 3\text{m}$

Diffusione nella sede stradale, trasporto e diffusione nello strato superiore

# Stima delle emissioni

## Fuel Variables

- consumption
- specifications per fuel type

## Activity Data

- number of vehicles per vehicle category
- distribution of vehicles into different exhaust emission legislation classes
- mileage per vehicle class
- mileage per road class

## Driving Conditions

- average speed per vehicle type
- average speed per road

## Other Variables

- climatic conditions
- mean trip distance
- evaporation distribution

Procedura COPERT III  
adottata dalla European  
Environmental Agency

## Emission Factors

- per type of emission (hot, cold, evaporation)
- per vehicle class
- per road class

## Stima delle emissioni

---

La procedura COPERT stima sulla base del consumo di carburante, le emissioni di CO, NO<sub>x</sub>, VOC, PM<sub>10</sub>, CH<sub>4</sub>, SO<sub>2</sub> per differenti categorie di veicoli: automobili, motocicli, autocarri leggeri e pesanti.

Tre tipi di emissioni:

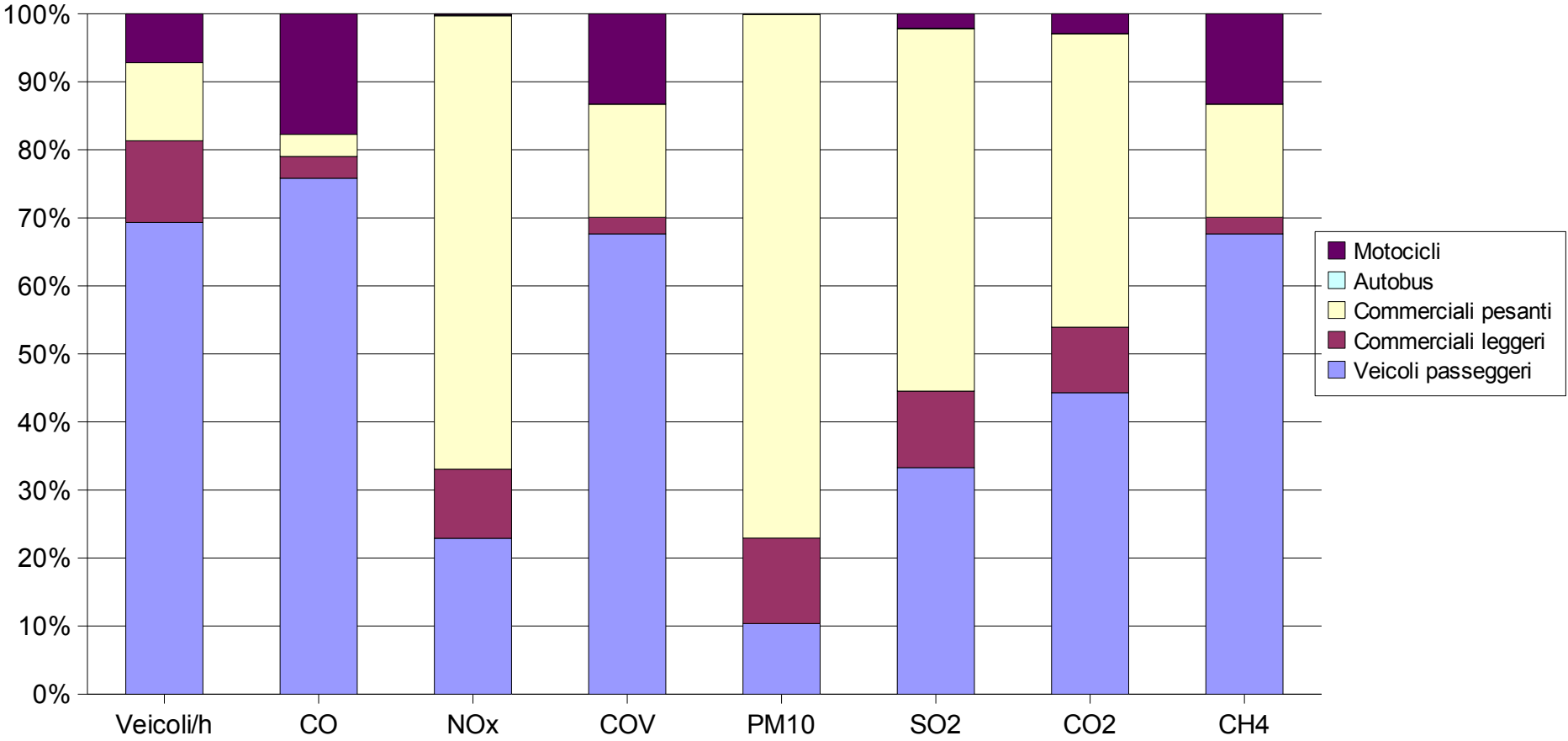
- “hot emissions”= prodotte durante il funzionamento a regime del motore
- “cold emissions”= prodotte all'avviamento (a freddo) del motore
- “evaporation”= emissioni di NMVOC per evaporazione del carburante

Le emissioni totali sono anche funzione della velocità del veicolo secondo una formulazione del tipo:

$$EF_{ij} = a_i v_{ij} + b_i v_{ij}^2 + c_i v_{ij}^3 + d_i v_{ij}^4 + e_i v_{ij}^5 + f_i \ln(g_i v_{ij})$$

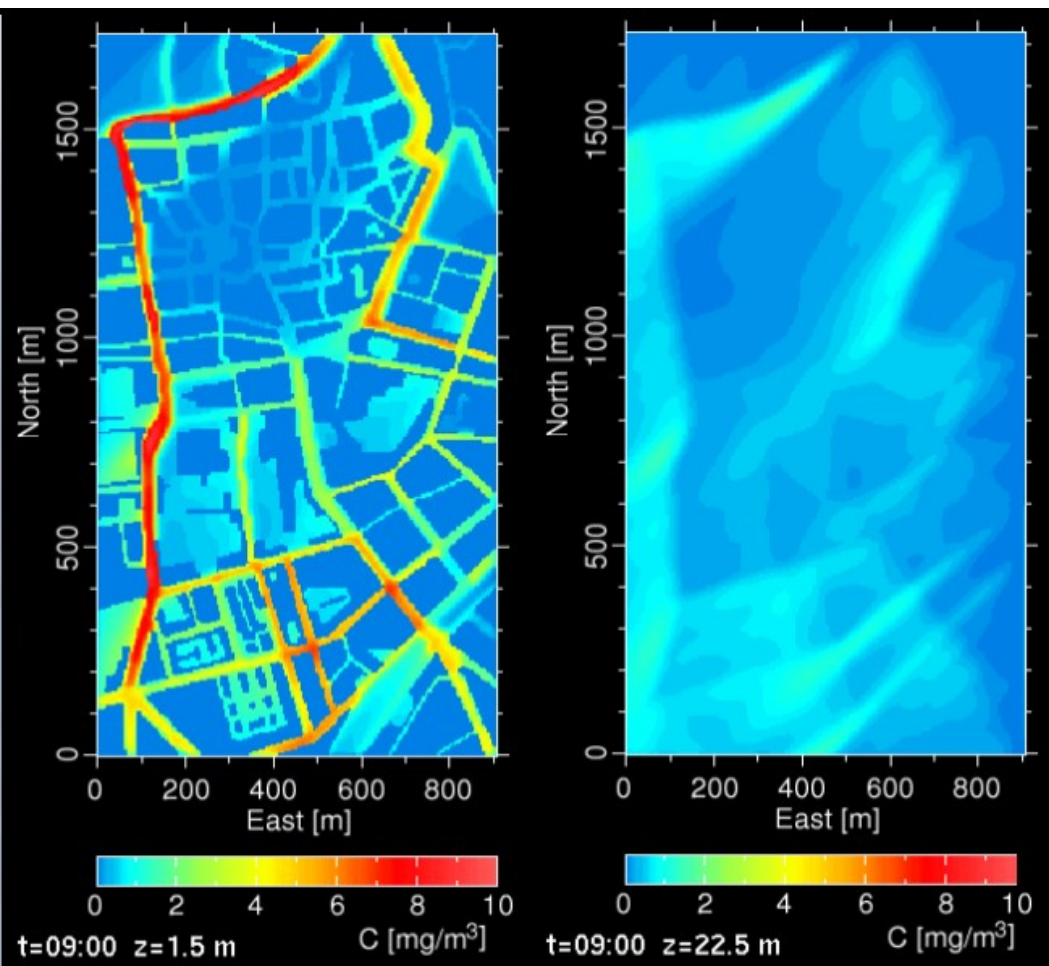
EF=fattore di emissione; i->classe di veicolo; j->tipo di strada

## Esempio composizione del traffico e fattori di emissione

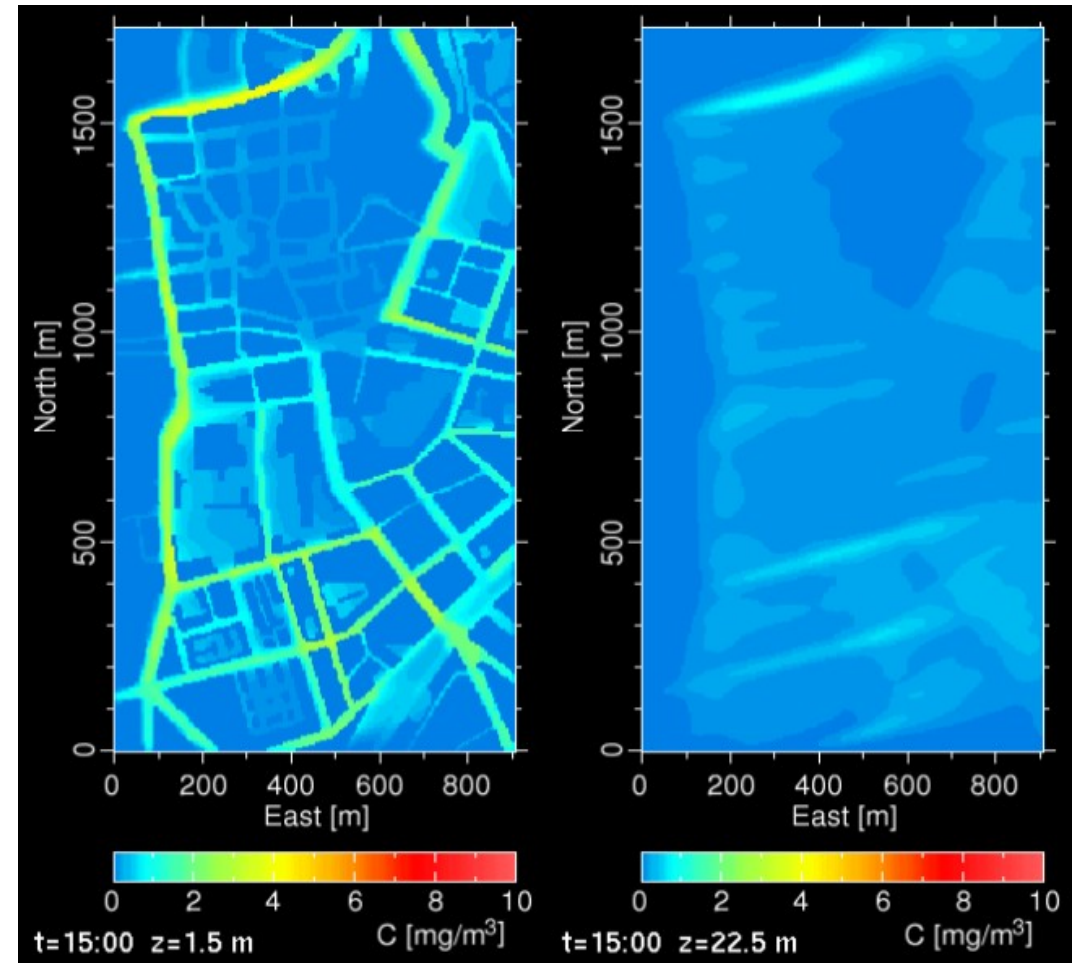


## Simulazioni in area urbana

Cosa succede al variare delle condizioni di stabilità atmosferica a parità di carico di traffico?



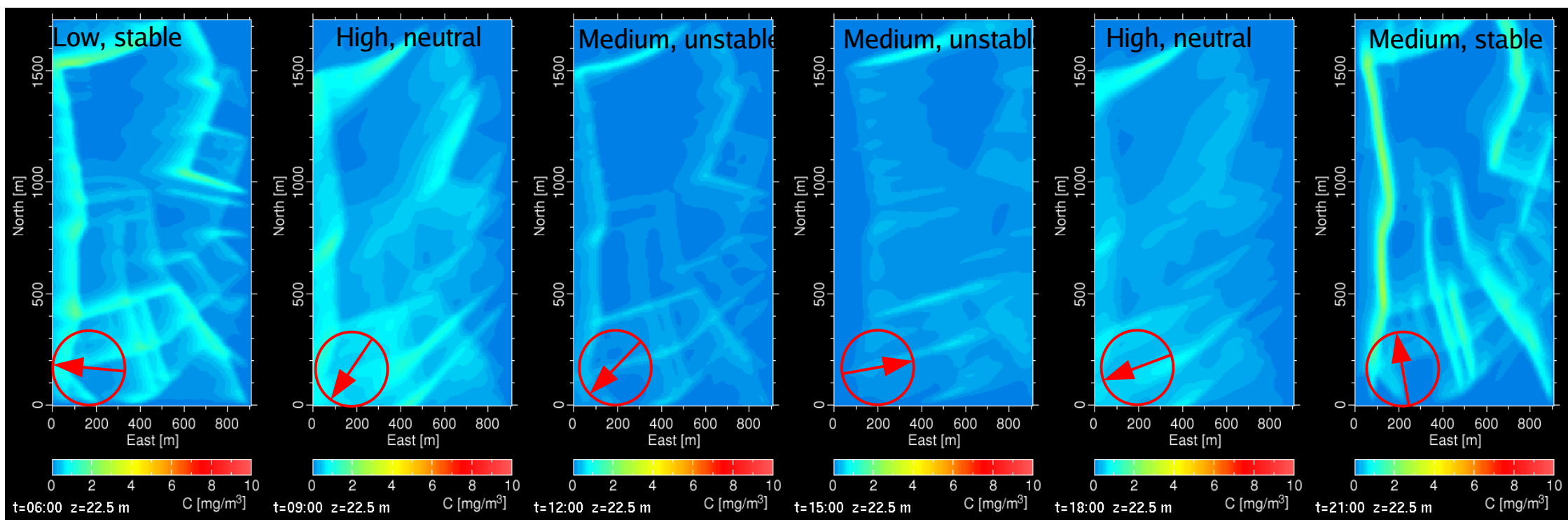
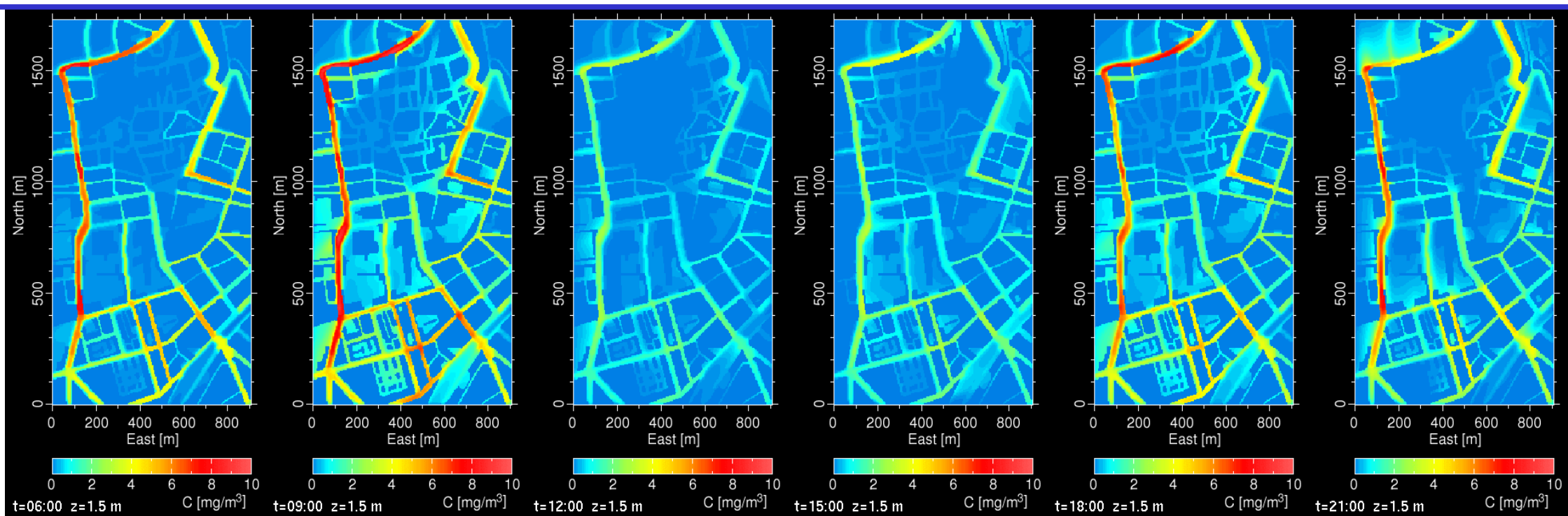
Low wind, stable atmosphere -> lower diffusion



High wind, unstable atmosphere -> stronger diffusion

Nota: è stato scelto il CO come tracciante dell'inquinamento da traffico perché il PM10 è molto difficile da tarare; meglio sarebbe il benzene ma non è misurato in continuo

# Simulazioni in area urbana (al suolo e sopra il livello degli edifici)





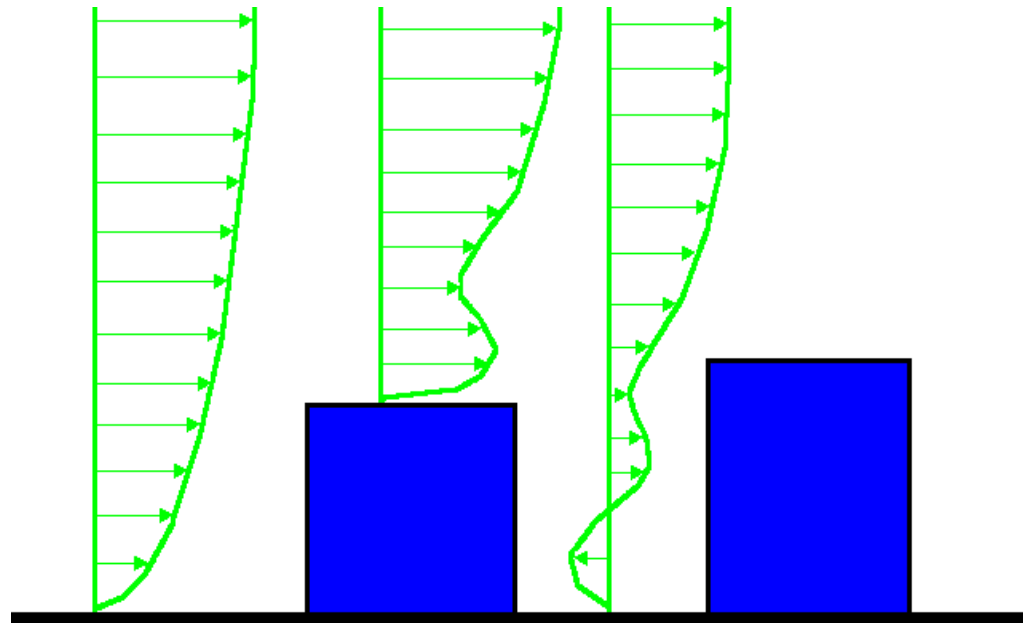
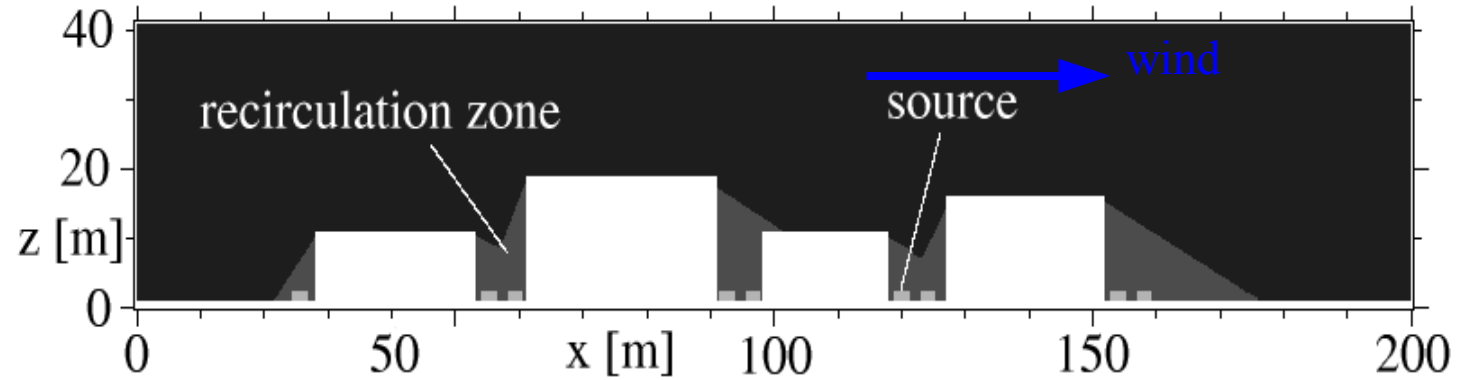
# Modellazione alla scala della strada

Vento perpendicolare all'asse della strada:

situazione più gravosa

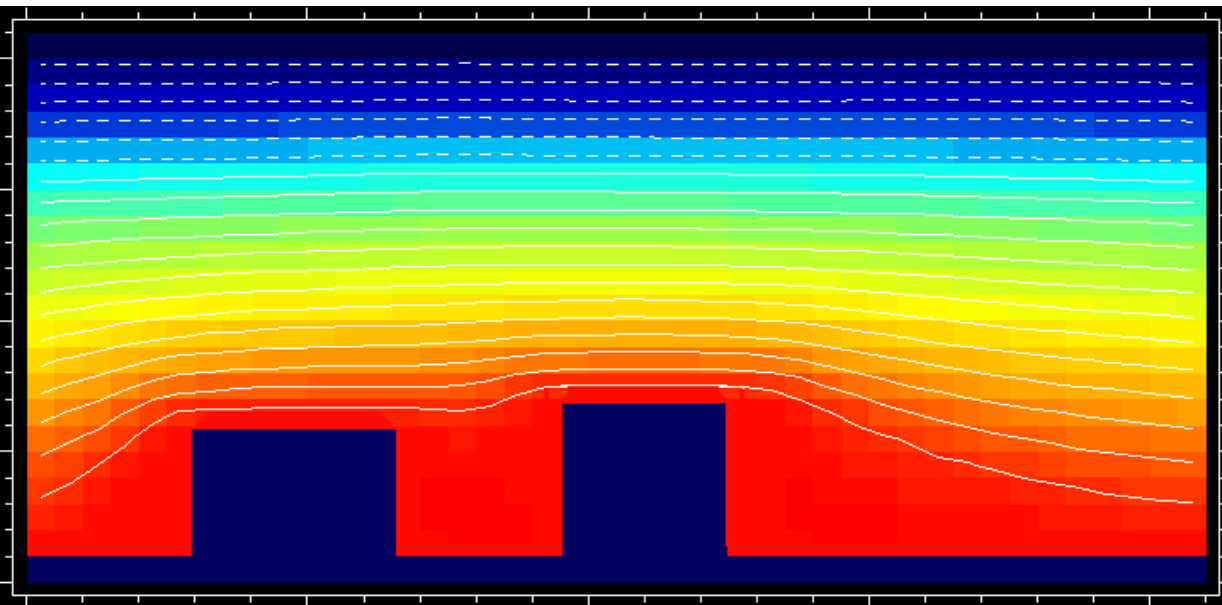
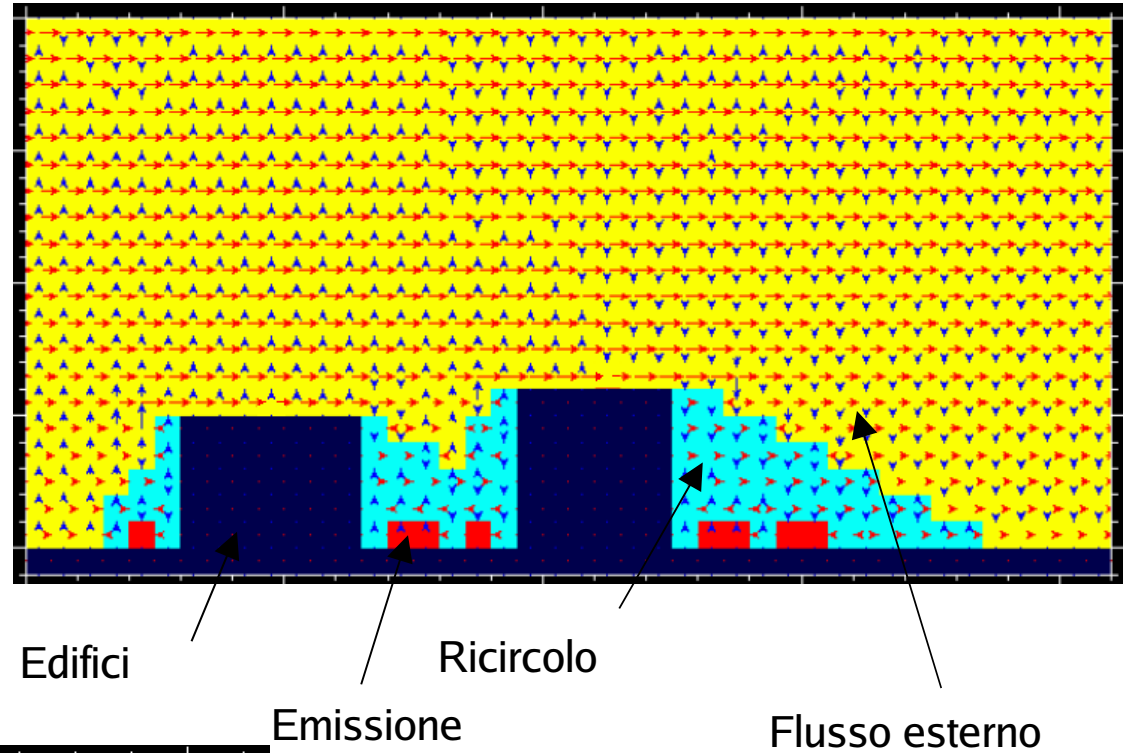
perché si hanno

effetti di "canyoning",  
riciclo e stagnazione  
di inquinanti



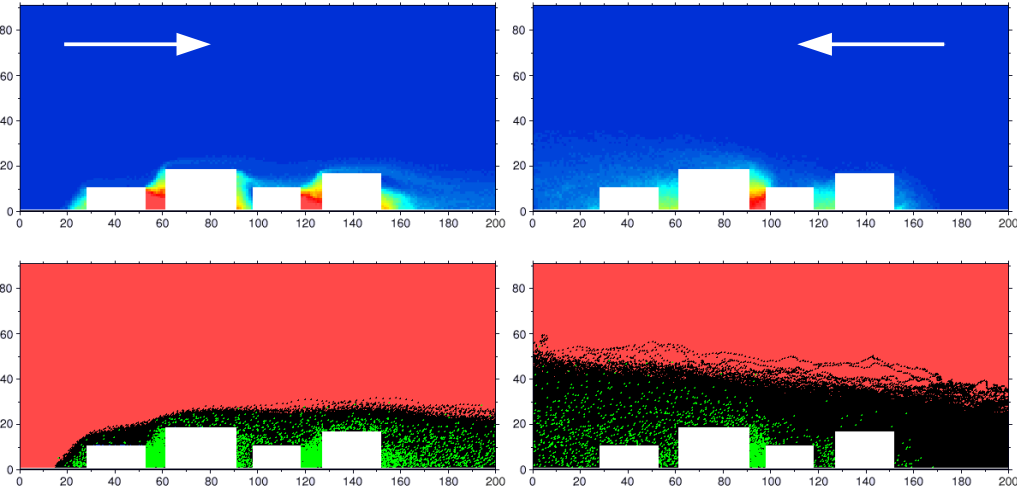
# Campo di moto in "canyon" urbano

Effetto di drag del flusso esterno sul volume interno al canyon determina una circolazione

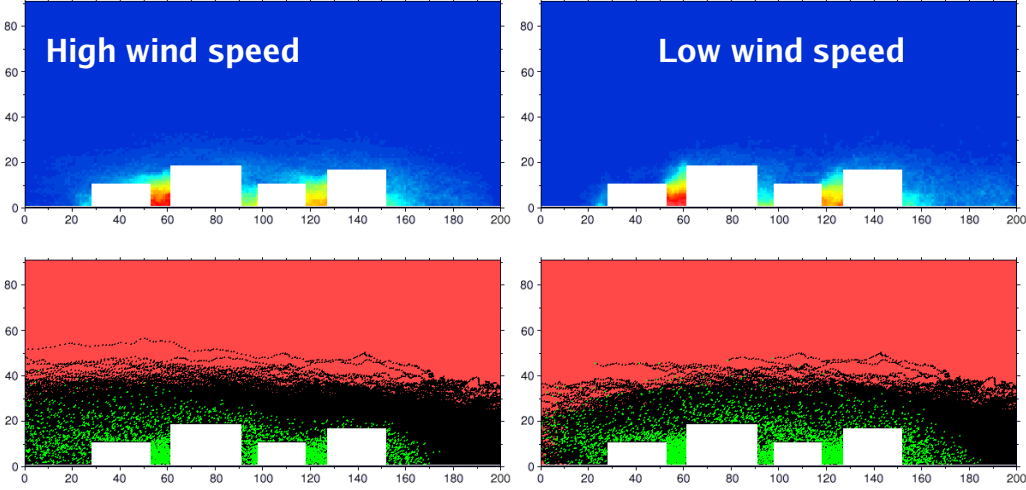


# Simulazioni in 'canyon' urbano

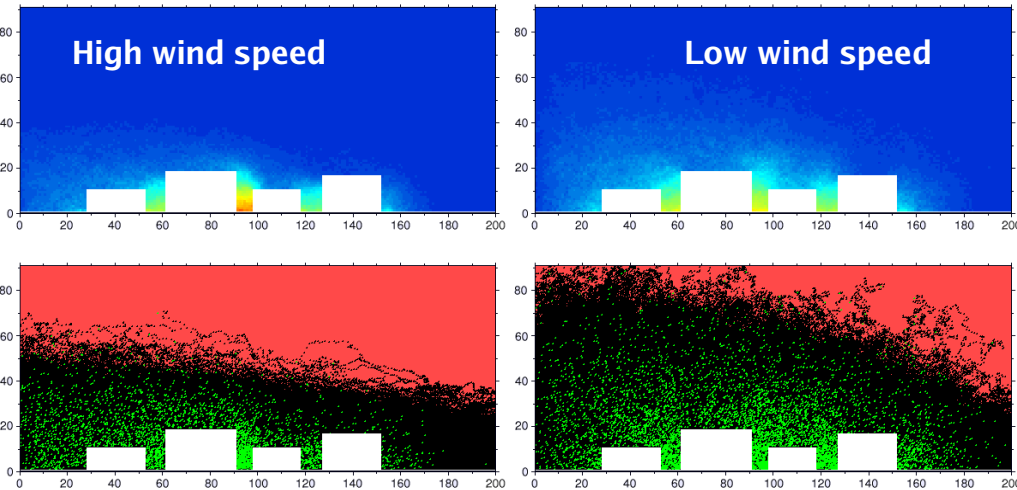
## Differente direzione del vento



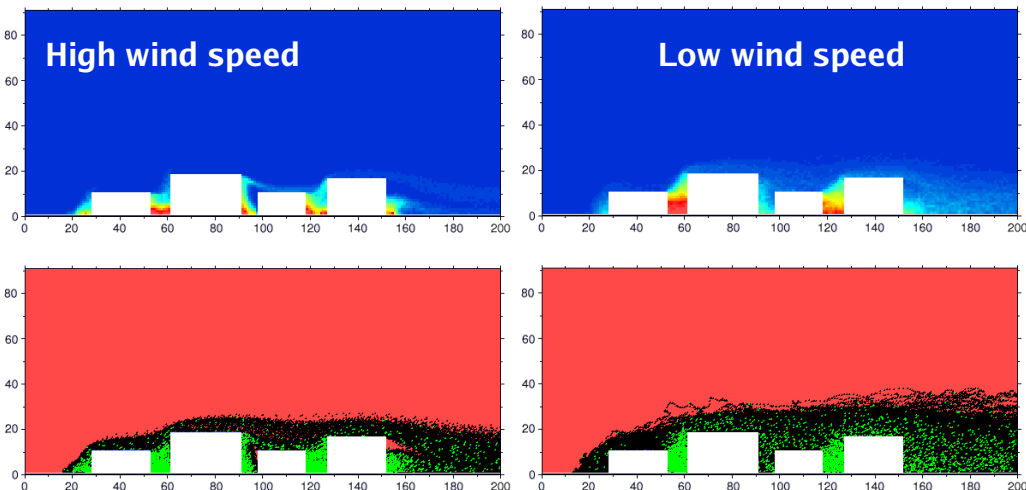
## Atmosfera neutra



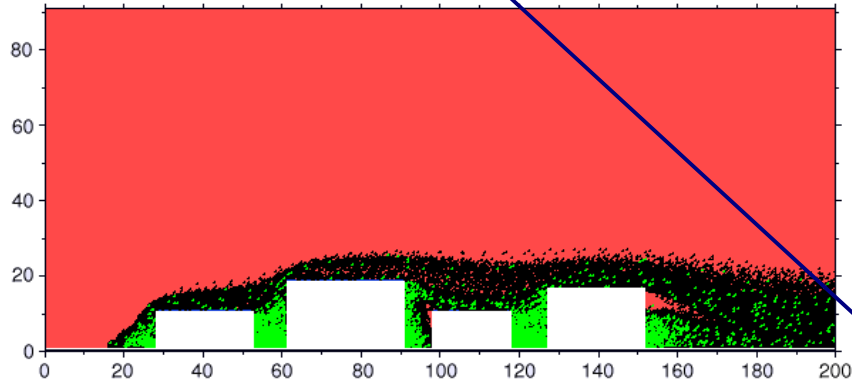
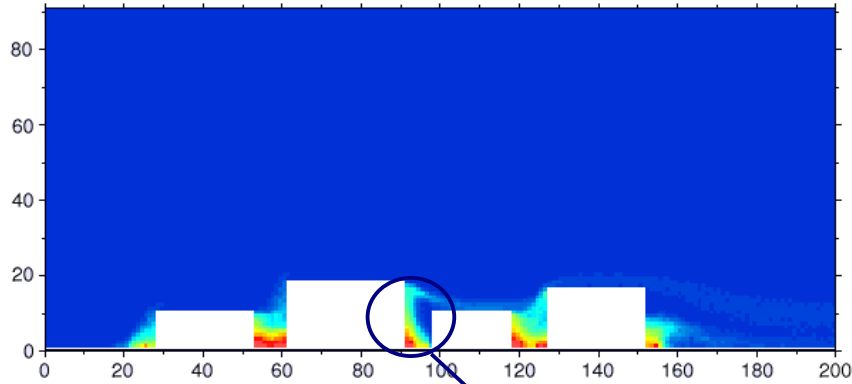
## Atmosfera instabile



## Atmosfera stabile



# Simulazioni in ‘canyon’ urbano



Effetti di ‘sheltering’ di un edificio rispetto ad uno più basso e di intrappolamento di inquinanti (specialmente polveri) all'interno della sede stradale

