



*Guido Barone, Luigi Varriale
Dipartimento di
Scienze Chimiche
Università di Napoli
"Federico II"
baroneg@unina.it*

MODELLIZZAZIONE DELL'INQUINAMENTO ATMOSFERICO

La grande disponibilità di dati sulle emissioni territoriali degli inquinanti atmosferici, la conoscenza ormai acquisita dell'insieme di reazioni chimiche e fotochimiche che avvengono nella troposfera, la possibilità di accedere in tempi reali alle condizioni meteorologiche a scala territoriale che determinano le modalità del trasporto e trasformazione degli inquinanti gassosi e aerosol, consentono oggi di invertire il tradizionale approccio tra esperimenti e modelli interpretativi.

Vengono discussi alcuni risultati ottenuti nel corso di un Progetto della Regione Campania sviluppato nel 2010-11.

L'allarme provocato dal crescente inquinamento dell'aria urbana, dovuto alle attività industriali, al riscaldamento e al traffico, ha spinto tutti i Paesi a formulare delle legislazioni di controllo che obblighino le Autorità locali a monitorare periodicamente la qualità dell'aria e a prendere provvedimenti per limitare le emissioni nocive.

Le recenti raccomandazioni dell'Unione Europea (2008/50/CE), recepite in modo unitario dalla legislazione italiana attraverso il DL 155/2010, riguardano diverse sostanze chimiche, per le quali sono raccolti i valori limite in Tab. 1.

Per tutte le risoluzioni amministrative decise dalle autorità locali, come per le controversie giudiziarie, oltre ai valori limiti sono raccomandate specifiche procedure sperimentali per il monitoraggio della qualità dell'aria urbana.

D'altra parte l'attuale orientamento generale, sia delle istituzioni politiche, sia della comunità scientifica, è quella di integrare le osservazioni ottenute dalle Reti Regionali di stazioni automatiche di monitoraggio con le previsioni modellistiche.

Da diversi anni la Comunità Europea supporta GMES (Global Monitoring for Environment and Security) [1], il più grande progetto mai lanciato per l'osservazione della terra. Il coordinamento e la gestione del programma GMES sono garantiti dalla Commissione Europea, attraverso la creazione di una serie di servizi per tutte le aree tematiche coinvolte. Le autorità pubbliche, gli utenti principali di GMES, potranno utilizzare queste informazioni per aggiornare la legislazione e le politiche ambientali.

A breve saranno disponibili servizi sul cosiddetto "chemical weather" [2], analogamente a come oggi sono offerti servizi sulle previsioni meteorologiche, attraverso la costruzione di un portale europeo che include i collegamenti alla maggior parte dei sistemi di previsione meteorologica/chimica disponibili in Europa. In questo contributo sono riassunte le principali conoscenze della chimica atmosferica, con particolare enfasi sulle reazioni del cosiddetto "smog fotochimico" e sulla fenomenologia del particolato atmosferico. In Tab. 1 sono descritti sinteticamente i principali risultati ottenuti dall'analisi dei dati d'inquinamento e dei risultati modellistici ottenuti per la regione Campania.

Tab. 1 - Valori limiti di riferimento per la protezione della salute umana

Inquinante	Media su	Valore limite	Norm. Rif.
PM ₁₀ µg/m ³	1 anno 24 ore	40 50 ¹	D.Lgs 155/2010
PM _{2,5} µg/m ³	1 anno 1 anno	25 ² 20 ³	D.Lgs 155/2010
SO ₂ µg/m ³	1 ora 24 ore	350 ⁴ 125 ⁵	D.Lgs 155/2010
NO ₂ µg/m ³	1 ora	200 ⁶	D.Lgs 155/2010
Benzene µg/m ³	1 anno	5	D.Lgs 155/2010
CO mg/m ³	8 ore	10	D.Lgs 155/2010
O ₃ µg/m ³	1 ora	180 ⁷	D.Lgs 155/2010
		240 ⁸	

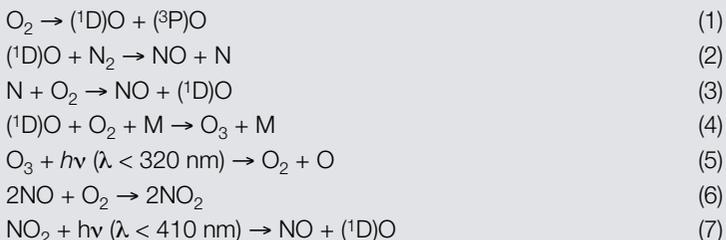
¹ Da non superare più di 35 volte per anno civile
² Valore limite da raggiungere entro il 1° gennaio 2015 (Fase I)
³ Valore limite da raggiungere entro il 1° gennaio 2020 (Fase II)
⁴ Da non superare più di 24 volte per anno civile
⁵ Da non superare più di 3 volte per anno civile
⁶ Da non superare più di 18 volte per anno civile
⁷ Soglia di informazione
⁸ Soglia di attenzione

Le fonti dei principali inquinanti atmosferici

Fino a non molto tempo fa la troposfera era considerata un mezzo essenzialmente inerte, in cui i composti più abbondantemente emessi, monossido di carbonio e metano, dovevano attendere il trasporto in stratosfera prima di essere definitivamente ossidati [3]. In realtà, a partire degli anni Settanta, si sono accumulate una serie di evidenze sperimentali che hanno dimostrato la capacità ossidativa della troposfera [4, 5] e la notevole reattività *in situ*.

Non solo le aree urbane e i distretti industriali, soggetti a fenomeni d'inquinamento fotochimico spinto [6], ma tutta la troposfera può essere considerata un grande reattore chimico a cielo aperto, in cui un ruolo fondamentale è giocato dal radicale ossidrilico: ad opera di quest'ultimo possono essere ossidati non solo i composti organici più reattivi, ma anche il monossido di carbonio e il metano.

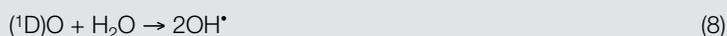
Il precursore del radicale OH* è l'ossigeno atomico attivato in stato di singoletto, che proviene da diverse fonti, secondo le equazioni (1-7):



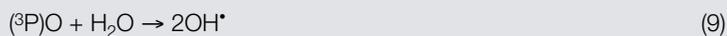
- piroschissione nei motori e caldaie che lavorano ad alte temperature (eq. 1-3) (meccanismo di Zeldovich [7]); la (1) non è reversibile per motivi quantistici: prima occorre che l'atomo eccitato decada nello stato

fondamentale [8]. Anche i radicali organici, prodotti sempre da piroschissione degli idrocarburi contenuti nelle benzine e altri combustibili, possono reagire con N₂ e O₂ [9];

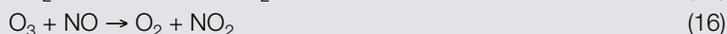
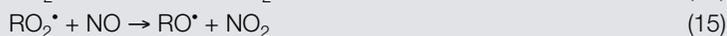
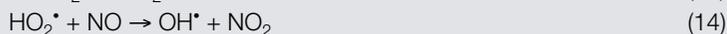
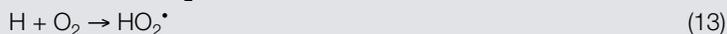
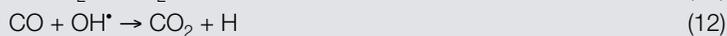
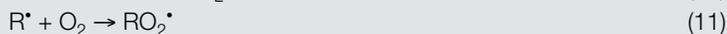
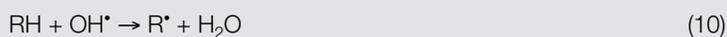
- reazione tra ossigeno atomico e molecolare seguita da fotodissociazione dell'ozono: le eq. 4 e 5 costituiscono il cosiddetto meccanismo di Chapman relativo al ciclo dell'ozono, che in realtà era stato proposto per l'ozono stratosferico [10]; nell'eq. (4) M è una molecola inerte, generalmente N₂ o O₂ o anche Ar, che assorbe parte dell'energia degli stati vibrazionalmente eccitati dei prodotti; l'elevata concentrazione di M rende questo processo molto efficiente nella bassa troposfera. In definitiva il "comburente" della capacità ossidativa dell'atmosfera è prestatato dal radicale ossidrilico, il quale, in troposfera, può formarsi grazie alla reazione del vapor acqueo con l'ozono. Si generano radicali ossidrilici secondo il processo (8):



anche l'ossigeno in stato di tripletto contribuisce alla formazione dei radicali OH* (eq. 9), ma questo processo è meno energetico ed efficace del precedente [8]:



Ma vi sono altri processi chimici che possono portare alla formazione di perossidi senza passare attraverso la fotodissociazione diretta dell'ossigeno, cosa che in troposfera non può avvenire poiché la radiazione solare ultravioletta che raggiunge la superficie non è sufficientemente energetica per espletare questo compito:



In questa serie di reazioni il simbolo R denota il residuo di un idrocarburo, le eq. 10 e 11 rappresentano l'unico meccanismo iniziale di deplezione del metano dalla atmosfera. Analogamente l'unico meccanismo di ossidazione del CO passa attraverso le eq. 12 e 13 [11, 12]. I perossidi sottoprodotti da queste reazioni, a loro volta, possono dar luogo daccapo ai radicali ossidrilici e RO* con l'ossidazione del monossido di azoto chiudendo così il ciclo (eq. 14 e 15). Infine lo stesso risultato viene promosso dall'ozono (eq. 16).

Pertanto sia l'emissione dei composti organici che la concomitanza con l'azione della radiazione ultravioletta e la presenza degli ossidi di azoto permettono all'atmosfera di svolgere il suo ruolo ossidativo e al tempo stesso, paradossalmente, di produrre composti fortemente ossidanti, come i radicali perossido e l'ozono.

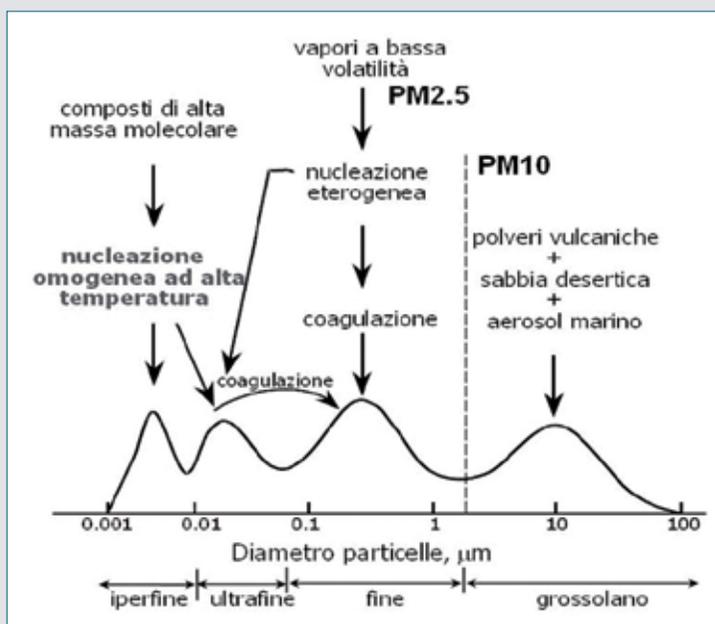


Fig. 1 - Schema di formazione fisica del particolato 1 (modificata da [13])

Il *sink* principale per l'ozono è rappresentato dalla reazione con il monossido di azoto (16). Nelle condizioni di *equilibrio fotostazionario* [13] una stima approssimata della concentrazione di ozono può essere ottenuta dall'equazione (17):

$$[O_3] = j[NO_2]/k[NO] \quad (17)$$

dove j e k sono le costanti cinetiche della reazione fotochimica (7) e della reazione chimica (16), rispettivamente. L'insieme di questi processi, in presenza di umidità elevata, provoca il fenomeno dello smog fotochimico [6].

L'ozono può essere anche prodotto naturalmente da fulmini e da grandi incendi. In condizioni naturali, in aree remote, lontane da emissioni di origine antropica e a livello del mare, la concentrazione di ozono oscilla normalmente fra i 5 e i 50 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, mentre in condizioni di forte inquinamento può superare i 400 mg/m^3 . Così pure i livelli di OH^* (valore medio 10^{-7} molecole/ cm^3 equivalente a 1 ppt) possono oscillare tra 10^{-8} molecole/ cm^3 a 10^{-4} molecole/ cm^3 o più.

Altri inquinanti sottoposti a monitoraggio continuo

SO₂: proviene dalla combustione di combustibili fossili di cattiva qualità, contenenti zolfo, o da rifiuti (incendi di copertoni dimessi), ma anche da emissioni naturali vulcaniche. Il miglioramento di dei combustibili per autotrazione, la metanizzazione del riscaldamento civile e infine la crisi della produzione industriale stanno rendendo meno drammatica, rispetto ad anni passati, la situazione nelle atmosfere urbane.

Benzene: proviene da tracce di benzine incombuste o dalla evaporazione di benzine in quanto tali o di solventi organici. È classificato dal 1982 come cancerogeno (classe I, secondo la IARC).

CO: proviene da combustioni in difetto di ossigeno o incomplete da motori vecchi o caldaie mal funzionanti o da stufe o bracieri, in particolare in ambienti chiusi o poco areati. È scarsamente reattivo in aria a temperatura ambiente.

Il particolato

La complessità della descrizione delle proprietà del particolato risiede nella difficoltà della caratterizzazione della varietà di sorgenti (combustione di combustibili fossili, emissioni da processi industriali, incendi di vegetazione o rifiuti, aerosol marino, lavori minerari e stradali, emissioni vulcaniche, erosione del suolo, ricaduta di sabbia di origine sahariana trasportata da tempeste di vento in quota, sospensione e ri-sospensione di polveri, emissioni vegetali come spore e pollini), dai processi fisici (nucleazione omogenea ed eterogenea, condensazione, evaporazione, coagulazione, trasferimento di massa da e verso l'interno della particella), infine dalla composizione chimica. Il particolato è oggi distinto in PM_{10} e $PM_{2.5}$ a seconda delle dimensioni, ma una completa caratterizzazione richiederebbe la descrizione dettagliata della distribuzione dimensionale, inoltre i metodi sperimentali per la determinazione delle taglie inferiori a 2,5 μm non sono stati ancora ad oggi standardizzati.

La Fig. 1 mostra, in forma sintetica, la fenomenologia della fisica del particolato.

Le dimensioni del particolato atmosferico coprono una vasta gamma di valori: da pochi nanometri a decine di micrometri, ma solo le particelle più piccole di 10 micron di diametro si pensa possono avere un effetto negativo sulla salute umana [14].

Le componenti più importanti includono sia sali che acidi solubili nelle goccioline di acqua sospese, come gli aerosol marini, sia composti minerali insolubili in acqua, come particelle di argilla, sabbia e materiali cristallini, mentre la componente organica ed elementare deriva dalla condensazione dei composti poco volatili e dai loro prodotti di ossidazione (POA e SOA, primary e secondary organic pollutants) e dai residui dei processi di combustione (fuliggine, carbonio elementare).

La vita media delle particelle in atmosfera dipende dalla densità o peso specifico, quindi dalla composizione chimica e dalla porosità residua al termine del processo di coagulazione. Le particelle più piccole o meno dense vengono rimosse lentamente per deposizione umida o secca, hanno un tempo di vita relativamente lungo e possono viaggiare in atmosfera su distanze molto grandi (anche di migliaia di chilometri) per diversi giorni. Le particelle grossolane hanno un tempo di permanenza piuttosto breve, in particolare quelle più grandi di 10 μm , e vengono rapidamente rimosse per deposizione gravitazionale.

Analisi puntuale e reti territoriali di monitoraggio in continuo

Lo studio dei problemi di inquinamento atmosferico è notevolmente complesso in particolare perché l'aria è una miscela complessa di gas, liquidi e solidi, la cui composizione non è sempre facilmente determinabile perché avvengono un gran numero di reazioni che ne modifi-

Tab. 2 - Ulteriori banche dati

Oltre agli inquinanti considerati dagli standard di Tab. 1, si stanno mettendo a punto standard di riferimento anche per il PM_{2,5} (vedi Fig. 1). Inoltre i Consorzi europei e quello italiano per la protezione dell'ambiente (ISPRA) hanno approntato da tempo della Banche Dati [15, 16] per i contenuti di carbonio (nerofumo) Idrocarburi Policiclici Aromatici (IPA o PAH) e per i metalli pesanti trascinati dal particolato: (cluster di atomi di Hg, Pb, Cd, Cr, Cu, Ni, Zn o di ossidi difettivi degli stessi, nonché composti di As e Se, SiO₂, ossidi e carbonati di Ca).

Altre Banche Dati già disponibili riguardano le emissioni dei POP (Persistent Organic Products) semivolatili: policlorobifenili (PCB) policlorodibenzodiossine e furani (PCDD e PCDF) e altri solventi alogenati (PCF etc.).

Banche Dati sono anche disponibili per altri inquinanti emessi da fonti naturali (fermentazione di sostanze organiche vegetali e deiezioni animali, metabolismo anaerobico di alcune specie animali e microrganismi) o anche da attività antropiche indirette: NH₃, SH₂, CH₄, VOC (Volatile Organic Compounds) e NMVOC (NonMethanicVOC).

cano la composizione nel tempo. I problemi consistono nell'estrema variabilità spazio-temporale dei parametri atmosferici. Di conseguenza misure puntuali e limitate a poche ore sono poco utili, se non inquadrare in un più ampio contesto di conoscenze sulla qualità dell'aria e sulla sua evoluzione temporale; da ciò la necessità di una rete di stazioni di monitoraggio multi-parametriche e automatiche *on line* a scala regionale e a gestione centralizzata. Nella regione Campania la rete di monitoraggio è gestita dall'Agenzia Regionale per la Protezione Ambientale, mentre a livello nazionale l'ISPRA (Istituto Superiore per la Protezione e la Ricerca Ambientale) e a livello europeo l'EEA (European Environmental Agency) e l'EMEP (European Monitoring and Evaluation Programme) mantengono e archiviano dati di interesse ambientale. Tali dati sono anche direttamente consultabili on-line attraverso una serie di banche dati [15-17] (Tab. 2).

Le metodiche analitiche si prestano alla raccolta di dati localizzati nello spazio e nel tempo e possono essere utilizzate come base per formulare politiche di *governance* del territorio.

Esse non consentono, tuttavia, di arrivare né ad una completa comprensione dei fenomeni in corso, né a prevedere facilmente gli eventi di inquinamento da nuovi insediamenti o da variazioni nel quadro energetico, dei trasporti o dovuti a nuove normative. Inoltre provvedimenti di limitazione del traffico (ticket di accesso alle ZTL, limitazione alla circolazione di auto non ecologiche, variazione nel tessuto urbano, nuovi quartieri), possono rendere obsoleta la distribuzione sul territorio delle stazioni di monitoraggio.

Per tali motivi è raccomandabile il ricorso all'uso di modelli basati su metodi numerici avanzati, esplicitamente previsto dalla legislazione europea ed italiana. Essi consentono di studiare le caratteristiche degli eventi d'inquinamento anche in aree remote e non controllate da stazioni di monitoraggio, allo scopo di comprenderne le caratteristiche e di poter prevedere, disponendo delle opportune informazioni, eventuali situazioni critiche. Sebbene l'interpretazione dei risultati dei calcoli prodotti da questi software debba essere demandato a personale esperto con conoscenze avanzate, oltre che di chimica e di fisica dell'atmosfera, anche di nozioni di programmazione scientifica ed informatica, essi sono diventati abbastanza affidabili da permettere previsioni e analisi retrospettive delle condizioni di inquinamento. Si è

quindi in grado di affermare, con ragionevole sicurezza, nonostante le difficoltà e le incertezze nelle conoscenze della fisica e della chimica dell'atmosfera, che i modelli di trasporto meteo-diffusivi sono diventati sufficientemente affidabili da riprodurre in modo efficace l'andamento delle concentrazioni dei composti atmosferici.

Inoltre, può accadere, come è capitato in Campania nel corso del 2011, che la rete di Centraline Regionali di monitoraggio possa in gran parte collassare, per problemi di manutenzione: lo sviluppo di metodi modellistici può consentire di continuare ad avere la comprensione dei fenomeni di inquinamento e a tenerli sotto controllo.

L'approccio modellistico ai problemi di inquinamento atmosferico

La grande disponibilità di dati sulle emissioni territoriali degli inquinanti atmosferici, la conoscenza ormai acquisita dell'insieme di reazioni chimiche e fotochimiche che avvengono nella troposfera, la possibilità di accedere in tempi quasi reali alle condizioni meteorologiche europee e, per mezzo di programmi certificati, di stabilire le condizioni al contorno e le variazioni climatiche quotidiane a scala territoriale che determinano le modalità del trasporto e trasformazione degli inquinanti gassosi e aerosol, consentono oggi di invertire il tradizionale approccio:

- raccolta dati sperimentali → modelli interpretativi → programmazione di nuove campagne raccolta dati, nell'altro:
- modellizzazione mediante approcci matematici numerici, basati sulla estrapolazione di dati statistici storici di emissione e sui dati meteorologici reali → programmazione di nuove campagne ad hoc di raccolta dati → validazione dei risultati della modellistica.

La catena modellistica WRF - EMEP - CHIMERE

Già nel passato si è lavorato alla modellizzazione dei processi di trasporto e reattività degli inquinanti chimici atmosferici [18-23]. L'idea, è stata quella di costruire una griglia tridimensionale, limitata per esempio al territorio regionale, in ciascun nodo della quale analizzare i processi chimico-fisici che vi avvengono.

Questa griglia richiede la definizione delle condizioni meteo-diffusive al contorno, processo che si ottiene per successivi *nesting*, partendo dalle condizioni atmosferiche ottenute per un territorio più ampio: dati meteo realistici vengono prodotti quotidianamente dal "Meteo Fields GFS" dell'US NCAR degli Stati Uniti e adattati all'orografia del territorio regionale mediante le procedure NCEP [24].

Infine essi vengono immessi nel processore meteo WRF utilizzando i corrispondenti programmi certificati che forniscono la descrizione dei campi di vento a diverse altitudini. I dati sulla circolazione atmosferica globale sono stati utilizzati con procedure iterative per definire le condizioni al contorno di un'area di circa 250x250 km includente la regione Campania. Si è quindi costruita la griglia tridimensionale virtuale con aree di base dapprima di 9x9 km e successivamente per alcuni siti di 3x3 km, con 7 livelli di altitudine decrescente fino a 1200 m, corrispondente al PBL.



Fig. 2 - Diagramma di flusso del sistema modellistico

Equazioni di continuità

Occorre calcolare nel tempo, in ciascun nodo della griglia (oltre 5.000) le seguenti equazioni di continuità relative alle concentrazioni di circa 50 inquinanti, che danno vita a oltre 150 reazioni chimiche e fotochimiche, nonché ad altri processi che definiscono il bilancio istantaneo del sistema):

$$\partial C_i / \partial t = -\nabla u C_i + \nabla (K \nabla C_i) + C_i (C_1, C_2, C_3, \dots, C_n, T, p) + S_i(x, y, t) + Q_i(x, y, t)$$

I primi due termini a destra si riferiscono al trasporto diffusivo (avvezione) e turbolento, gli altri tre rispettivamente alla reattività, all'emissione e alla deposizione secca dell'inquinante, x e y sono le coordinate del punto di emissione e ricaduta rispettivamente. K è un fattore che definisce ed è funzione della turbolenza. Dato il gran numero dei parametri e le loro variazioni nel tempo e quindi l'enorme massa di dati da trattare, è indispensabile ricorrere, mediante metodi di calcolo avanzato, alla soluzione numerica dei corrispondenti sistemi di equazioni a differenze finite, che forniscono convenzionalmente i valori medi delle concentrazioni in ogni cella del dominio.

Sono state utilizzate macchine ad architettura parallela, dotate di un insieme di 8 o 16 processori, con programmi che dedicano una parte di essi al coordinamento e alla distribuzione del lavoro. L'architettura della macchina deve essere disposta in modo da utilizzare specifici programmi e linguaggi e quindi occorre che essa sia prevalentemente dedicata all'uso di questi tipi di analisi, almeno nei periodi di utilizzo per il progetto.

Per la meteorologia si è impiegato il programma WRF. Il Processore Meteo è stato alimentato, per ogni giorno, con i dati forniti dall'Agenzia US NCAR e/o dal Centro Europeo ECMWF di Reading, a seconda se si effettuavano simulazioni attuali o ricostruzioni di scenari pregressi. In questo modo sono stati costruiti i campi di venti a diverse quote, riferite ai profili orografici ottenuti da NCEP [15-17, 24].

Per i campi emissivi si è utilizzata la nuova banca dati per le emissioni messa a punto dal Consorzio EMEP, ottenuta tramite il Consorzio ISPRA (ex ANPA). Questa banca dati raccoglieva l'andamento documentato delle emissioni italiane per Regione, per inquinante e per anno, dal 1990 al 2007. Un'altra banca dati riportava i dati disaggregati per provincia fino al 2005.

I file contenenti dati meteo e quelli emissivi sono stati utilizzati dal programma CHIMERE per produrre gli scenari di qualità dell'aria relativi alla regione Campania a seguito di una procedura di *nesting* successivi a partire dagli scenari europei e italiani. È stata utilizzata una base ampia di dati emissivi e di inquinanti secondari (sempre da EMEP), per tener conto della rete di reazioni chimiche e fotochimiche coinvolte. Lo schema del sistema modellistico è presentato in Fig. 2.

Risultati

Materiale prodotto

Sono state quindi calcolate per ciascun scenario, in ognuna delle celle della griglia, le concentrazioni relative a ciascuno dei 5 inquinanti principali (CO, NO, NO₂, O₃, PM₁₀). Ogni scenario ha avuto una durata media di 5-7 giorni di simulazione per un totale di circa 120 giorni simulati pari a oltre 2.800 ore. Il calcolo ha quindi prodotto per tutte le celle un totale di circa 10.000 valori di concentrazioni orarie. A causa delle condizioni iniziali da stabilizzare per ogni ciclo sono state scartate dalle considerazioni finali le prime 36-72 ore di ogni procedimento. Per ogni giorno sono state quindi selezionate e pubblicate in formato digitale solo le mappe a cadenza oraria (24 mappe per giorno) riferite ad una quota convenzionale di 950 mbar (corrispondente ad alcune decine di metri dal suolo) e relative a ciascuno dei 5 inquinanti principali (CO, NO, NO₂, O₃, PM₁₀) (Fig. 3 a-f).

L'analisi degli scenari mostra l'esistenza di dati di inquinamento spesso più accentuati di quelli misurati nelle città e che si presentano in particolare nelle aree della Regione dove non vi sono strumentazioni per il monitoraggio continuo dell'inquinamento. In particolare nel periodo invernale del 2010-11 sono stati stimati forti sforamenti episodici per il PM₁₀ lungo la circonvallazione esterna di Napoli. lungo il cosiddetto Asse Mediano, nei nodi autostradali tra la Caserta-Salerno all'incrocio con la Napoli-Canosa e inoltre lungo la Pompei-Salerno. La stessa situazione è stata stimata per lo stesso periodo e per quel che riguarda l'NO₂, anche lungo la via Appia (Teano-Minturno) e nell'area industriale di Avellino Est.

Nel periodo primaverile ed estivo gli eventi di sfioramento stimati e solo per il PM₁₀ sono stati più ridotti e confinati nelle prime ore del mattino di alcuni pochi giorni di aprile, di maggio e di luglio.

Eventi del tutto episodici ad esempio il 31.12.2010 e giorni seguenti (fuochi pirotecnici di Capodanno), oppure il 5.02.2011 (incendi di rifiuti urbani o di copertoni dismessi o delle verniciature dei cavi di rame trafugati) esulano ovviamente dalla possibilità di razionalizzazione e previsione dei metodi proposti.

È stato inoltre interessante notare che i valori medi calcolati per il CO

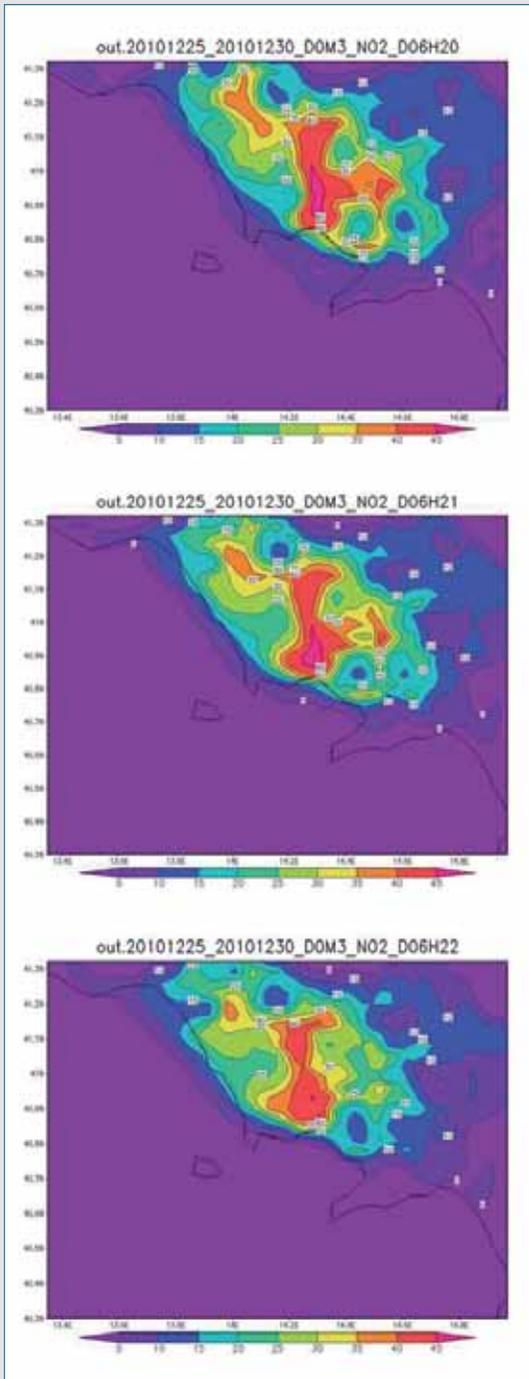


Fig. 3a-c - Esempi di mappe di inquinamento orario per l'NO₂ il 30 dicembre 2010 (ore 20-22); le mappe coprono le coordinate 40.3-41.3 N e 13.4-14.8 E, pari a circa 150x250 km

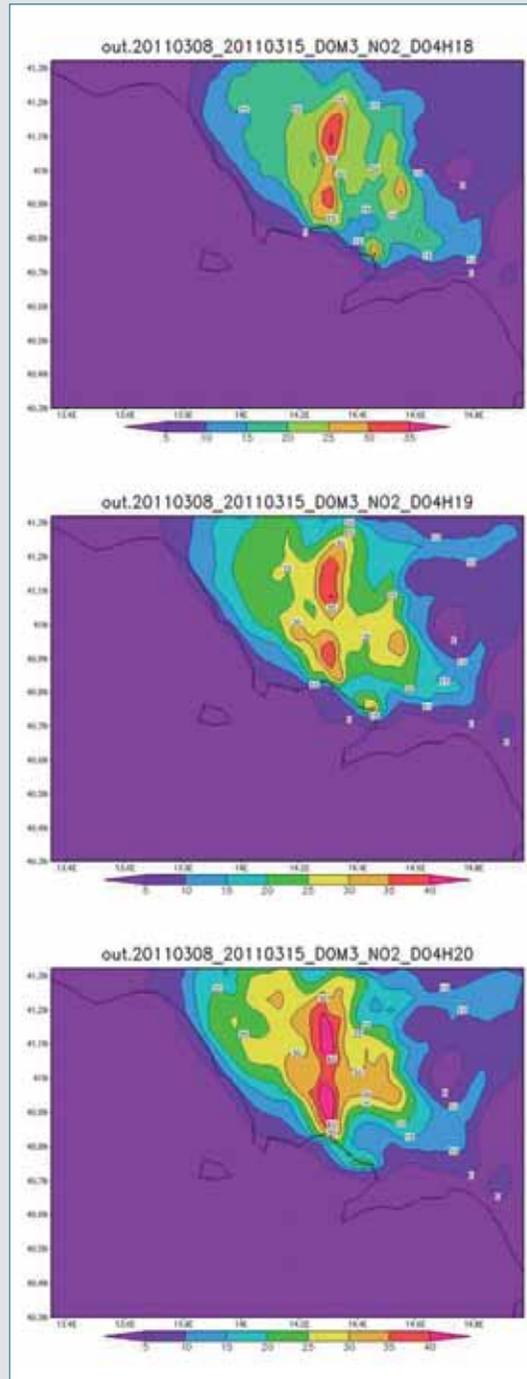


Fig. 3d-f - Esempi di mappe di inquinamento orario per l'NO₂ l'11 marzo 2011 (ore 18-20); le mappe coprono le coordinate 40.3-41.3 N e 13.4-14.8 E

nelle celle urbane della griglia risultavano mediamente più alti di quelli misurati dalle centraline fisse (fin quando hanno funzionato). Ciò è stato attribuito ad una più rapida diffusione del CO verso l'alto, rispetto ai valori misurati per gli altri inquinanti, a causa della sua minore massa molecolare e della sua più elevata concentrazione.

Sono state inoltre effettuate *simulazioni* che prevedono alterazioni degli scenari realistici: assumendo ad esempio un fattore doppio per le emissioni regionali per tutti gli inquinanti volatili e per il particolato. Queste simulazioni hanno prodotto, come era da aspettarsi, variazioni di dispersione e concentrazione *non proporzionali* per gli inquinanti gassosi a causa della rete di reazioni chimiche e fotochimiche che li le-

gano. Analoghi e opposti risultati sono stati ottenuti per una riduzione significativa (25%) di tutte le emissioni regionali. Invece le concentrazioni delle polveri sottili risultano, come era da prevedersi, praticamente proporzionali ai fattori che avevano alterato le condizioni realistiche di emissione.

Il materiale digitale relativo alle mappe prodotte è disponibile presso gli archivi del Dipartimento di Scienze Chimiche.

Validazione

Per tutto il periodo delle campagne sperimentali e delle simulazioni sono stati registrati tutti i dati medi quotidiani disponibili mensilmente dalla Rete Regionale ARPAC, fin quando sono stati accessibili. Sono state quindi organizzate delle Campagne sperimentali di supporto per misurare le polveri sottili nelle aree non coperte dalla centraline fisse della Rete Regionale.

I risultati sperimentali, sia per i dati forniti dall'ARPAC regionale, sia per quelli forniti dalle campagne sperimentali di supporto sono stati confrontati con i valori prodotti dalle procedure di calcolo numerico e sono risultati ampiamente confortanti e in grado di ritenere validate le procedure dell'approccio modellistico.

Conclusioni

Dalle analisi effettuate, si può quindi ritenere che le informazioni fornite dagli scenari sviluppati con le metodologie e i programmi presentati in questo Progetto, siano quindi del tutto coerenti con le aspettative e in accordo del tutto soddisfacente con i dati sperimentali forniti dalle centraline della Rete Regionale e/o dalle campagne sperimentali dedicate al Progetto stesso.

Gli scenari forniscono un quadro delle emissioni molto più dettagliato di quello fornito dalla Rete Regionale di centraline fisse, non solo spaziale, ma anche nella sua evoluzione oraria nel corso delle singole giornate. Gli scenari infine tengono ben conto delle condizioni meteorologiche per cui i massimi più accentuati vengono riscontrati nei periodi secchi o poco ventosi, mentre tendono ad abbassarsi, nei giorni di pioggia e nelle ore più piovose.

In generale si può prevedere che:

- l'evoluzione negli ultimi anni dei metodi modellistici è stata *impressi-
onante*. Oggi, con relativa facilità, è possibile ottenere simulazioni affidabili e realistiche delle condizioni atmosferiche, che consentono analisi retrospettive e proiezioni di scenari futuri;
- l'integrazione sempre più spinta delle azioni di monitoraggio e di previsione consentirà a breve di ottenere informazioni sulle condizioni di inquinamento atmosferico analoghe a quelle che oggi vengono quotidianamente diffuse sulle condizioni meteorologiche;

- il Progetto può essere facilmente configurato per simulare scenari di inquinamento su qualsiasi altra zona geografica;

- sarà possibile in principio non limitarsi a fare delle previsioni sull'andamento degli inquinanti locali, come è possibile già oggi, ma utilizzare gli strumenti di calcolo anche per effettuare delle previsioni realistiche a breve termine sullo stato dell'inquinamento atmosferico in differenti realtà regionali.

Ringraziamenti: Lavoro parzialmente supportato dal POR 2006 - 2013 Regione Campania, Misura 3.17 [25] approvato dalla Regione Campania e gestito da una A.T.S. fra il Dipartimento di Chimica e l'Azienda ITM (Informatica Telematica Meridionale). Il Progetto si è concluso il 18.08.2011. Si ringrazia l'Azienda ITM e il suo personale per l'utilizzo delle macchine per l'applicazione dei modelli di calcolo numerico. Un particolare ringraziamento al prof. Angelo Riccio della Università Parthenope di Napoli, per le stimolanti discussioni avute nel corso del Progetto.

Bibliografia

- [1] <http://ec.europa.eu/enterprise/policies/space/gmes/>
- [2] www.chemicalweather.eu/
- [3] R.D. Cadle, E.R. Allen, *Science*, 1970, **167**(3916), 243.
- [4] H. Levy, *Science*, 1970, **173**(3992), 141.
- [5] H. Levy, *J. of Geophys. Res.*, 1973, **78**(24), 5325.
- [6] A.J. Haagen-Smit, M.M. Fox, *J. Air Pollut. Control Assoc.*, 1954, **136**, 105.
- [7] I. Glossman, *Combustion*, 2nd Ed., Academic Press, 1987.
- [8] P.H. Krupenie, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 1972, **1**, 423, citato in R.P. Wayne, *Chemistry of atmosphere*, 2nd Ed., Oxford Science, 1991, 82-95.
- [9] I. Colbeck, A.R. Mackenzie, *Air Pollution by Photochemical Oxidants*, Chap. 3, in *Air Quality Monographs*, Vol. 1, 1994, Elsevier.
- [10] S. Chapman, *Roy. Meteor. Soc.*, 1930, **3**, 103.
- [11] A.P. Altshuller, J.J. Bufalini, *Environ. Sci. Technol.*, 1971, **5**, 39.
- [12] K.L. Demerjian, J.A. Kerr, J.G. Calvert, *Adv. Environ. Sci. Technol.*, 1974, **4**, 1.
- [13] K.T. Whitby, B. Cantrell, *Fine Particles Conference*, 1976, in J.H. Seinfeld, S.N. Pandis, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 1998, John Wiley and Sons.
- [14] C.A. Pope, D.W. Dockery, *J. Air & Waste Manag. Assoc.*, 2006, **56**, 709.
- [15] AirBase: public air quality database, www.eea.europa.eu/themes/air/airbase
- [16] Dati e Metadati di Qualità dell'aria, www.brace.sinanet.apat.it/web/struttura.html
- [17] European Monitoring and Evaluation Program, www.emep.int/
- [18] G. Barone *et al.*, *J. Environmental Health and Management*, 1999, **10**, 209.
- [19] G. Barone *et al.*, *Computing and Visualization in Science*, 1999, **2**, 1.
- [20] G. Barone, G. Giunta, A. Riccio, *Annal. N.Y. Academy of Science*, 1999, **879**, 83.
- [21] G. Barone *et al.*, *Environ. Modelling and Software*, 2000, **15**, 503.
- [22] A. Riccio, G. Barone, *J. Chemometrics*, 2001, **15**, 571.
- [23] A. Riccio *et al.*, *Atmospheric Environment*, 2006, **40**, 554.
- [24] NCEP/NCAR Reanalysis at PSD, www.esrl.noaa.gov/psd/data/reanalysis/reanalysis.html
- [25] Sistema informatico di supporto per la valutazione dell'impatto ambientale preventivo sulla qualità dell'aria regionale da parte di nuovi insediamenti produttivi o di servizio, Programma Operativo Regionale (POR) "ITM474925" della Regione Campania, Misura 3.17.

ABSTRACT

Atmospheric Pollution Modelization

The large availability of data on air pollutant emissions, the knowledge already achieved on the set of chemical and photochemical reactions in the troposphere, the ability to access real time weather conditions that determine the transport and transformations of gases and aerosols, now make it possible to obtain credible and reliable predictions, retrospective analyses and/or future scenarios. Political authorities and the scientific community are strongly committed to achieve these objectives. This work summarizes some of recent achievements and future perspectives, with a focus on results obtained for the Campania territory.