



Scenari emissivi e di concentrazione in Umbria Applicazione modello Chimere

Relazione tecnica

Novembre 2009

arpa umbria

Indice

1	/ 1	INTRODUZIONE
1	/ 1.1	Generalità
2	/ 1.2	Tipologia di modelli e relativo uso
5	/ 1.3	Il modello Chimere
7	/ 2	IMPLEMENTAZIONE DEL MODELLO
7	/ 2.1	La suite Chimere
14	/ 2.2	Implementazione
16	/ 2.3	Verifiche delle interfacce e test computazionali
22	/ 3	SCENARIO BASE
22	/ 3.1	Emissioni
36	/ 3.2	Input meteo
39	/ 3.3	Condizioni al contorno
42	/ 4	VALUTAZIONE DEL MODELLO
42	/ 4.1	Indici statistici per il confronto
49	/ 4.2	Confronto ozono
60	/ 4.3	Confronto biossido di azoto
73	/ 4.4	Confronto particolato PM ₁₀
79	/ 4.5	Ozono extraregionale
84	/ 5	RISULTATI SCENARIO BASE
84	/ 5.1	Risultati per ozono
88	/ 5.2	Risultati per biossido di azoto
89	/ 5.3	Risultati per particolato PM ₁₀ e PM _{2,5}
92	/ 6	CONCLUSIONI

Si ringraziano i colleghi di Arpa Emilia Romagna ed ENEA per i contributi forniti

Gruppo di Lavoro

Redazione

Monica Angelucci
 Francesca Pianigiani
 Marco Vecchiocattivi

Versione

Rev. 2

Visto

Giancarlo Marchetti
 Angiolo Martinelli

1. Introduzione

1.1 Generalità

La tutela dell'ambiente nel suo complesso e in particolare la conoscenza del livello di qualità dell'aria ambiente sono argomenti che coinvolgono sempre più l'opinione pubblica, le autorità competenti e gli operatori industriali. La corretta gestione di tali problemi ha richiesto la predisposizione di adeguati strumenti di intervento in diversi settori e, quindi, la generazione di una specifica normativa tecnica in merito.

La normativa nazionale e la recente normativa internazionale, ovvero la Direttiva 2008/50/CE relativa alla valutazione della qualità dell'aria, individuano le valutazioni modellistiche come uno degli strumenti da adottare insieme alle misurazioni in siti fissi, questo anche per avere strumenti per stimare la distribuzione geografica della concentrazione e per costituire una base per il calcolo dell'esposizione collettiva della popolazione nella zona interessata.

Seguendo le indicazioni della legge (D. Lgs. 351/1999), la valutazione della qualità dell'aria ambiente è un processo dinamico che, applicato la prima volta (valutazione preliminare), conduce all'individuazione di zone del territorio nazionale alle quali, in funzione dei livelli di inquinamento, si applica un certo regime di controllo che si esplica, di volta in volta, attraverso il monitoraggio in continuo, oppure attraverso campagne periodiche di misura, oppure mediante l'utilizzo di modelli di simulazione. In particolare, i modelli possono essere impiegati a integrazione delle misure o in sostituzione delle stesse, qualora i livelli di concentrazione siano al di sotto della soglia di valutazione inferiore.

Alla legge quadro seguono le leggi "figlie", ciascuna riguardante uno specifico inquinante o gruppi di inquinanti. Queste leggi definiscono per ciascun inquinante i valori limite e le soglie di allerta, prescrivono i criteri di misura e di localizzazione dei punti di misura. È demandato inoltre a tali leggi il compito di fissare i criteri riguardanti l'impiego di altre tecniche di valutazione, fra le quali i modelli di dispersione.

Altresì, la nuova direttiva europea relativa alla qualità dell'aria (2008/50/CE) stabilisce, al fine di una corretta e specifica conoscenza della qualità dell'aria ambiente, un ulteriore grado di approfondimento dell'argomento. Infatti, insieme alla valutazione o misura delle concentrazioni al suolo degli inquinanti, essa prevede anche il ricorso alla previsione delle concentrazioni stesse per il giorno in corso o per il seguente; questo è possibile solo attraverso gli strumenti legati a tecniche modellistiche.

La valutazione della qualità dell'aria ambiente, secondo i requisiti indicati dalla normativa, determina la necessità di:

- estendere le azioni di valutazione dell'inquinamento a tutto il territorio degli stati membri;

- combinare varie tecniche di valutazione che includono la misurazione diretta in stazioni fisse e tramite laboratori mobili (secondo un metodo di riferimento definito), nonché l'impiego di altre metodiche quali i campionatori passivi e il biomonitoraggio;
- predisporre inventari delle emissioni fisse e mobili aggiornati in continuo e ad alta risoluzione spaziale e temporale;
- applicare modelli di dispersione e trasformazione chimica degli inquinanti.

La combinazione di queste tecniche, misure e modelli, costituisce l'approccio ottimale al problema della valutazione e gestione della qualità dell'aria e la modellistica rappresenta lo strumento principale di sintesi del processo conoscitivo, nonché di quello previsionale; essa infatti, essendo uno strumento matematico/informatico, cerca di ricostruire, il più fedelmente possibile, lo stato della concentrazione dei vari inquinanti in un dominio di calcolo spazio-temporale di interesse, inglobando tutti i principali aspetti del fenomeno e fornendo informazioni sulle relazioni fra emissioni e concentrazione o deposizione degli inquinanti primari o secondari, tenuto conto dei processi di dispersione, trasporto, trasformazione chimica e rimozione.

In particolare, i modelli di dispersione sono un utile strumento per:

- valutare (misurare, calcolare, prevedere) campi di concentrazione anche in porzioni di territorio ove non esistano punti di misura o estendere la rappresentatività spaziale delle misure stesse;
- ottenere informazioni sulle relazioni tra emissioni e immissioni (matrici sorgenti – recettori) discriminando quindi fra i contributi delle diverse sorgenti;
- valutare l'impatto di inquinanti non misurati dalla rete di monitoraggio;
- studiare scenari ipotetici di emissioni alternativi rispetto al quadro attuale o passato.

Il risultato della simulazione modellistica è, ovviamente, connotato da un certo grado di incertezza che risulta dalla composizione dell'incertezza intrinseca al modello (dovuta alla incapacità di descrivere perfettamente i fenomeni fisici) e di quella associata ai dati di ingresso, in particolare alle emissioni e ai parametri meteorologici.

1.2 Tipologia di modelli e relativo uso

La scelta del modello o dei modelli da applicare deve essere effettuata rispondendo, in successione, ad alcune domande di carattere generale. Dapprima, deve essere correttamente definito lo scenario di applicazione, cioè l'insieme degli elementi caratteristici del problema che consentono di individuare la categoria di modelli appropriata: scala spaziale e temporale, complessità territoriale, orografica e meteorologica dell'area, tipologia delle sorgenti di emissione, sostanze inquinanti da considerare (in particolare, se soggette a reazioni chimiche o no). In seconda battuta, si devono verificare, in dettaglio, i requisiti delle uscite che si desiderano dal modello e la disponibilità di tutti i dati di ingresso necessari e delle risorse hardware e software, e procedere quindi alla selezione del modello più opportuno.

I modelli utilizzati a questo scopo appartengono a due grandi famiglie, distinte in base all'approccio analitico di base utilizzato, e sono:

- modelli statistici;
- modelli deterministici.

I modelli statistici (o stocastici), utilizzati prevalentemente per la descrizione e la gestione dei dati misurati dalle centraline di monitoraggio della qualità dell'aria, si basano su serie storiche di dati misurati il cui studio consente di stabilire relazioni tra grandezze relative sia agli inquinanti presenti sul territorio che alla meteorologia. Essi non prevedono la concentrazione di inquinanti sulla base di relazioni fisiche di causa-effetto, ma sulla base dei dati misurati dalla rete del passato.

La seconda famiglia è composta da un gran numero di modelli differenti, tutti accumulati dal fatto di avere alla base delle relazioni di causa-effetto tra le emissioni delle sorgenti e la meteorologia da un lato (cause) e le concentrazioni degli inquinanti nel dominio di calcolo (effetti).

Il primo elemento che consente di discriminare tra i vari modelli deterministici è il metodo con cui si descrive l'evoluzione nel tempo del fenomeno dell'inquinamento. Da questo punto di vista i modelli possono essere stazionari o dinamici; nei primi l'evoluzione temporale è trattata come una sequenza di stati quasi-stazionari, i secondi, invece, trattano il fenomeno in modo dinamico.

Un altro importante elemento di distinzione dei modelli è costituito dalla *scala spaziale*, ovvero dalla distanza dalla sorgente entro cui il modello è in grado di descrivere il fenomeno. In relazione a questo parametro si distinguono le seguenti classi di modelli:

- *a scala locale (short range)*, modelli, cioè, che descrivono la dispersione degli inquinanti fino a distanze dell'ordine della decina di chilometri;
- *a mesoscala*, modelli che trattano domini spaziali dell'ordine dei cento chilometri;
- *a grande distanza o sinottici (long range)*, che descrivono fenomeni che possono interessare aree molto vaste fino a migliaia di chilometri dalla sorgente.

I modelli possono essere anche distinti in funzione del loro livello di complessità o, in altri termini, del numero di fenomeni di cui tengono conto nel determinare il campo di concentrazioni. In genere la tipologie sono:

- modelli complessi;
- modelli di media complessità;
- modelli semplici.

Scendendo nel dettaglio è possibile distinguere per i vari modelli alcuni elementi, tra cui:

- l'algoritmo matematico impiegato per valutare un determinato fenomeno (differenze finite, metodo Montecarlo, metodo gaussiano, ecc.);
- la modalità di descrizione spaziale del fenomeno (Euleriano, Lagrangiano, bidimensionale, tridimensionale, ecc.);
- la trattazione di aspetti di particolare importanza (orografia, chimica, fotochimica, ecc.).

Sostanzialmente, intersecando classi e tipologie di modelli, quelli da prendere in considerazione sono i seguenti:

- modelli analitici “a pennacchio”: codici molto semplici che richiedono pochi, essenziali dati meteorologici di ingresso e limitate risorse di calcolo; per la loro praticità sono stati e sono tuttora molto utilizzati. Questi modelli sono adatti a simulare situazioni stazionarie nello spazio e nel tempo. Esistono formulazioni tradizionali (modelli gaussiani), in cui la dispersione turbolenta viene parametrizzata con coefficienti empirici ricavati da campagne sperimentali (curve di Pasquill-Gifford o di Briggs), e più avanzate (modelli “ibridi”), in cui la dispersione verticale viene parametrizzata direttamente in funzione dei dati meteorologici che forniscono informazioni struttura termica e meccanica dei bassi strati dell’atmosfera;
- modelli tridimensionali a “puff”: formulazione gaussiana per la dispersione ma con possibilità di variare la direzione di trasporto nello spazio e nel tempo;
- modelli tridimensionali lagrangiani a “particelle”: simulazione della dispersione di un inquinante attraverso pseudo-particelle la cui dinamica all’interno del dominio di calcolo viene determinata dal campo di vento e delle condizioni di turbolenza locali dell’atmosfera;
- modelli tridimensionali euleriani a “griglia”: si basano sull’integrazione numerica dell’equazione differenziale di conservazione della massa per ogni inquinante.

A parte i modelli analitici a “pennacchio”, tutte le altre tipologie di modelli necessitano di campi di vento tridimensionali, che si possono ottenere con modelli a conservazione di massa che ricostruiscono il flusso sull’orografia del dominio, oppure con modelli meteorologici che risolvono l’intero set di equazioni fluidodinamiche (equazioni di Navier-Stokes).

In generale, la scelta tra modelli analitici e tridimensionali dipende dal livello di complessità dello scenario. In condizioni di terreno piatto e presenza di vento, può essere utilizzato un modello analitico a “pennacchio”; diversamente, è opportuno l’uso di modelli tridimensionali.

I modelli analitici a “pennacchio” possono utilizzare alternativamente come dati di ingresso le *joint frequency functions*, cioè i dati statistici sulla occorrenza di condizioni meteorodiffusive definite da classe di stabilità, intensità e settore di provenienza del vento, oppure le serie temporali di dati meteorologici (almeno un anno completo con risoluzione oraria o trioraria). La seconda modalità è preferibile perché consente di considerare sorgenti con emissioni variabili nel tempo e di stimare i parametri di qualità dell’aria per diversi tempi di media. Le condizioni più critiche per l’utilizzo di questi modelli sono rappresentate dalla calma di vento e dalla presenza di orografia complessa: in questi casi i risultati forniti dai modelli tridimensionali sono sicuramente più affidabili in quanto in essi si tiene conto della variabilità spaziale dei parametri atmosferici.

I modelli “a puff” possono essere considerati una categoria intermedia tra i modelli analitici tradizionali e i modelli tridimensionali completi. Essi possono essere considerati validi finché una singola traiettoria rappresenta il trasporto degli inquinanti. In condizioni di forte disomogeneità questa approssimazione comporta una sensibile riduzione dell’accuratezza dei risultati finali. Una traiettoria che rappresenta il movimento del centroide di un puff non rappresenta adeguatamente il trasporto della nube inquinante poiché l’intensità e la direzione del vento variano generalmente con

la quota; naturalmente in condizioni più complesse, come ad esempio nelle situazioni di brezza, un'unica traiettoria non è sufficiente a riprodurre correttamente quanto accade in atmosfera.

I modelli lagrangiani “a particelle” e quelli euleriani “a griglia” sono gli strumenti più avanzati per la simulazione della dispersione in atmosfera. Essi possono tenere conto compiutamente di tutte le misure meteorologiche disponibili e delle loro variazioni spaziali e temporali; i limiti sono costituiti attualmente nell'incompleta conoscenza dei meccanismi della turbolenza e dell'eccessivo tempo di calcolo che richiedono le simulazioni più complesse. Simulazioni complete della durata di un anno sono onerose, pertanto questi modelli vanno utilizzati prevalentemente per valutare le situazioni che si presumono più critiche. È possibile comunque ricostruire gli andamenti medi stagionali anche con limitati mezzi di calcolo: si simulano alcune decine di giorni tipici nell'arco dell'anno (suddivisi equamente tra le stagioni invernale ed estiva) e successivamente, pesando le diverse situazioni meteorologiche in base alla loro frequenza, si possono ricavare le mappe di concentrazione medie stagionali ed annuali.

I modelli “a particelle” sono preferibili alla scala locale per il maggior dettaglio vicino alla sorgente, poiché i modelli a “griglia” diluiscono immediatamente il termine di sorgente sul volume di una cella che, per esigenze computazionali, non può essere di dimensioni troppo piccole. Inoltre, nel caso di diverse sorgenti, al fine di attribuire il “peso” che ha ciascuna di esse nella determinazione delle concentrazioni in aria (matrici sorgenti-recettori), occorre ripetere le simulazioni per poter calcolare il contributo di ogni sorgente; nel caso dei modelli a “particelle” si può invece “colorare” diversamente le particelle in funzione delle diverse sorgenti e dei diversi inquinanti e calcolare con una sola simulazione i diversi contributi.

L'utilizzo dei modelli a “griglia” è invece indispensabile per le simulazioni in cui entrano in gioco le reazioni chimiche. Infine, l'utilizzo di modelli tridimensionali, lagrangiani o euleriani, è praticamente indispensabile nel caso di simulazioni a scala più grande (mesoscala), in quanto occorre tenere conto della circolazione atmosferica a scala sinottica e delle sue variazioni spaziale e temporale.

1.3 Il modello Chimere

L'implementazione di codici computazionali basati su modelli deterministici è sempre più riconosciuta come necessaria per la predisposizione di una programmazione di studi ed interventi long-term sia regionali che di più vaste aree nazionali e/o internazionali. Infatti, tali codici hanno la capacità di integrare le equazioni di fluidodinamica che tengono conto del trasporto delle masse gassose, dell'immissione e della dispersione degli inquinanti all'interno di esse, dei processi di trasformazioni molecolari indotti dalla luce e dalle collisioni ai vincoli dovuti all'orografia e del clima dei siti; tale capacità consente a questa tipologia di modelli di poter valutare e confrontare il comportamento degli inquinanti in atmosfera sia per i dati pregressi ma anche per scenari futuri di breve e lungo periodo. Inoltre, l'aumentata capacità computazionale delle attuali piattaforme distribuite consente oggi una maggiore efficienza dei calcoli di fluidodinamica e una migliore

modellizzazione dei processi chimici che avvengono in fase gassosa (inclusi quelli gas superficie e gas aerosol).

Codici di modellistica computazionale di questo tipo sono stati realizzati e validati da importanti laboratori di ricerca internazionali e le relative suite di programmi sono oggi disponibili per una loro implementazione ed utilizzo su appropriate piattaforme computazionali. Tra le realizzazioni già implementate o in corso di implementazione in Italia è opportuno citare CAMx (Comprehensive Air quality Model with extensions <http://www.camx.com>) un prodotto basato sul modello fotochimica euleriano di dispersione di inquinanti gassosi e di particolato (da scala regionale a scala continentale). Tale programma disponibile pubblicamente è utilizzato da ARPAV (Agenzia Regionale per la Prevenzione e Protezione Ambientale del Veneto), che utilizza anche Chimere. Le ARPA Valle d'Aosta, Piemonte e Lombardia adottano, invece, per gli studi di modellistica e di dispersione degli inquinanti in atmosfera il programma ARIA Regional che utilizza il modello chimico FARM; ARPA Emilia Romagna utilizza il sistema NINFA che si basa sul modello chimico di trasporto e dispersione Chimere, che è anche il codice di calcolo utilizzato da ARPA Umbria, in collaborazione con il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Perugia ed in particolare con il Laboratorio "Computational Dynamics and Kinetics".

Chimere è il codice computazionale di modellistica dell'aria ritenuto tra i più idonei ai fini dell'implementazione, della ricerca e dello sviluppo di nuovi algoritmi. Il software è basato su un modello euleriano chimico e di trasporto a griglia, applicabile a scala regionale, per la simulazione della qualità dell'aria ed è stato sviluppato dall'Istituto Pierre Simon Laplace e il Lisa del CNRS e dall'INERIS francese. Chimere è stato progettato per svolgere previsioni quotidiane di O₃, PM e numerosi altri inquinanti in aria ed anche per realizzare simulazioni di medio periodo su scala locale (risoluzioni di ~ 1-2 km) o continentali. Il programma modella gran parte dei fenomeni chimico-fisici subiti dagli inquinanti atmosferici, inclusi la diffusione, il trasporto, la deposizione e le reazioni chimiche e fotochimiche. Esso è anche in grado di trattare i processi subiti dagli aerosol (cioè il particolato, i nitrati, i solfati, l'acqua e le specie organiche secondarie) e le reazioni in fase eterogenea.

2. Implementazione del modello

2.1 La suite Chimere

Il codice Chimere è in realtà una complessa suite di codici che vengono lanciati in una determinata sequenza con il compito di eseguire varie pre-elaborazioni su ciascuno dei dati forniti in input (meteo, emissivo, condizioni al contorno, dominio) e di risolvere le equazioni di diffusione e trasformazione chimico-fisica per fornire, come output, le concentrazioni in aria di vari inquinanti.

Questo codice è nato dalla collaborazione di vari istituti di ricerca francesi, l'Institut Pierre-Simon Laplace e LISA, entrambi facenti parte del C.N.R.S., e dall'INERIS; è un software "open source" distribuito con licenza GNU/GPL, come codice sorgente ed è aperto alla collaborazione e ai contributi di tutta la comunità internazionale di utilizzatori e sviluppatori dello stesso.

In ARPA Umbria è stato adottata la versione V200606A del programma: questa è in grado di simulare gran parte dei fenomeni chimico-fisici subiti dagli inquinanti atmosferici, inclusa la diffusione, il trasporto, la deposizione e le reazioni chimiche e fotochimiche. Essa è anche in grado di trattare i processi subiti dagli aerosol (cioè il particolato, i nitrati, i solfati, l'acqua e le specie organiche secondarie) e le reazioni in fase eterogenea.

Tale programma, sviluppato prima in fortran 77 e poi convertito in fortran 90, è stato implementato per funzionare in un ambiente di calcolo parallelo basato sullo standard MPI-1, come quello fornite dalle librerie LAM/MPI o MPICH1.

Nella figura 2.1 è mostrato uno schema a blocchi del funzionamento dei vari codici che fanno parte della suite di calcolo e che possono essere così classificati nei seguenti gruppi in base alla rispettiva funzionalità:

1. Preparazione dei dati sul dominio
2. Preparazione del file meteo
3. Elaborazione delle emissioni biogeniche
4. Preparazione delle condizioni al contorno.
5. Preparazione delle emissioni antropogeniche
6. Nucleo principale di calcolo.

Di seguito sono descritti questi gruppi funzionali di codici di calcolo insieme ai dati che sono stati utilizzati.

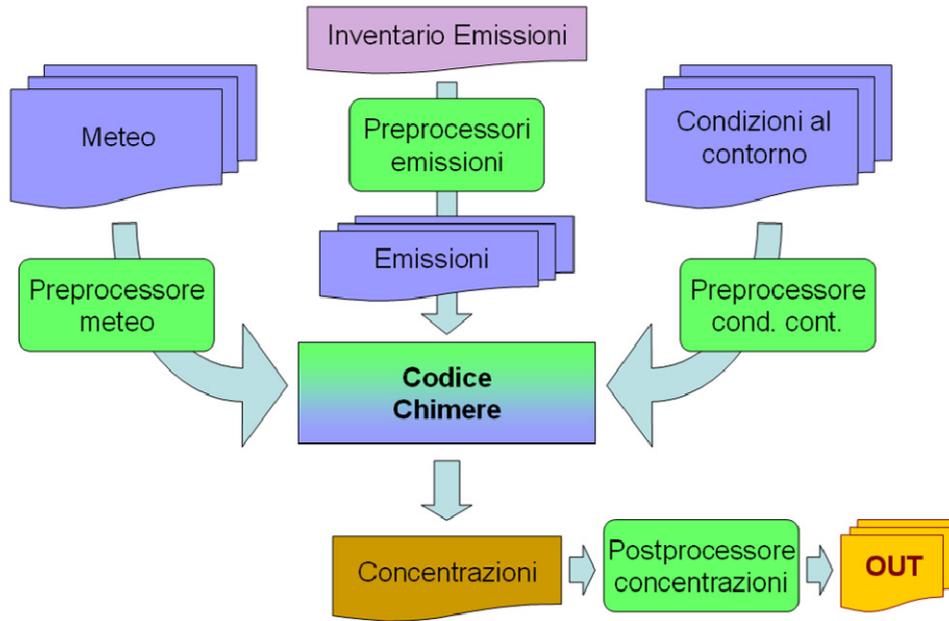


Figura 2.1: Schema a blocchi del funzionamento di Chimere

Preparazione dei dominio di calcolo

Per eseguire una qualunque simulazione e per preparare i dati in input, occorre definire il dominio di calcolo: questo si traduce nello scegliere le coordinate degli estremi dell'area simulata, il numero di celle nel quale quest'area è divisa, il numero di livelli verticali e la pressione relativa all'ultimo livello.

Nel nostro caso, il dominio copre un rettangolo di 400x500 km, è composto da 80x100 celle da 5x5 km e ha 8 livelli verticali che arrivano ad una pressione di 500 mbar. Nella figura 2.2 è riportata l'estensione orizzontale di tale dominio.

Relativamente a questo dominio, vanno elaborati alcuni dati legati all'uso del suolo e il tipo di vegetazione presente in ciascuna delle celle. Per far questo, sono stati utilizzati l'insieme di codici contenuti nel pacchetto *prepdomains-200310.tar.gz* fornito insieme a Chimere.

Con questi, a partire dal database di uso del suolo interno a tale pacchetto che è basato essenzialmente sui dati del Global Land Cover Facility (GLCF)¹, sono stati creati i file *LANDUSE_CITA* e *BIOFACT_CITA* che contengono rispettivamente le frazioni di uso del suolo per ciascuna cella e i potenziali di emissione biogenici.

Questo passaggio viene effettuato una sola volta all'atto della definizione del dominio di calcolo.

Preparazione del file meteo

Il secondo gruppo di codici ha il compito di elaborare i dati meteorologici forniti in input che sono, a loro volta, l'output di un modello di simulazione meteorologico.

¹ <http://glcf.umiacs.umd.edu/data/landcover>

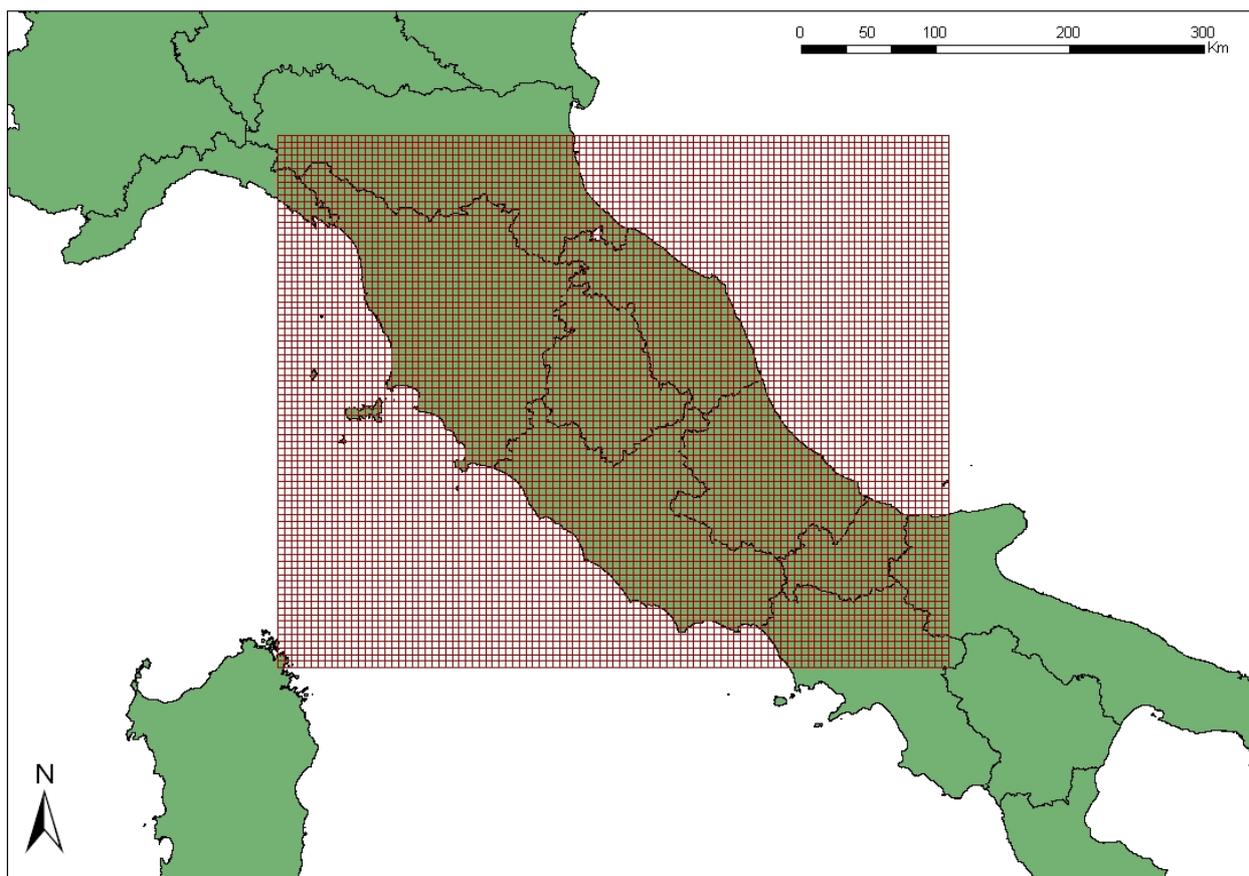


Figura 2.2: Estensione orizzontale delle celle del dominio di calcolo.

Questo passaggio è molto delicato perché, oltre a trasformare tali dati dal formato originario del modello meteo con il quale sono stati prodotti al formato che poi verrà usato da Chimere, vengono anche calcolati alcuni parametri, principalmente di tipo micro-meteorologico, necessari al funzionamento del cuore di calcolo di Chimere sia per la parte relativa alla dispersione degli inquinanti che per quella di trasformazione chimico-fisica.

Nella suite di Chimere viene fornita un'interfaccia verso il modello meteorologico MM5 e il primo passaggio da effettuare, realizzato dal programma *prepm5.e*, è quello di leggere i file di output di MM5 con i dati meteorologici, derivare i parametri meteo richiesti ma non presenti nel file di partenza ed effettuare un'interpolazione sul piano orizzontale per salvare i valori di tutte le variabili meteo in corrispondenza dei punti di griglia del dominio scelto per Chimere. L'output di questo passaggio è il file temporaneo chiamato *exdomout.nc*.

Partendo dai dati meteorologici presenti in quest'ultimo file, viene lanciato il codice *diagmet.e*. Questo ha il compito di interpolare secondo la verticale le variabili meteo 3d richieste da Chimere ed elaborare, tramite una formulazione meteorologica diagnostica, le variabili micrometeorologiche richieste da Chimere, salvando il tutto nel file *METEO.nc*.

Nella nostra implementazione, questo passaggio è stato fatto dall'ARPA Emilia Romagna la quale, a partire dai dati del loro modello meteorologico di analisi LAMA, ha realizzato e utilizzato una versione modificata dell'interfaccia presente in Chimere al fine di leggere in input i file prodotti con

il loro modello meteorologico, e salvarli nel formato richiesto dalla versione di Chimere in uso da loro.

Così, ci è stato fornito direttamente il file METEO analogo a quello richiesto da Chimere anche se nel formato binario che viene usato da una versione di Chimere precedente rispetto a quella adottata da noi e, pertanto, il file così prodotto non è ancora in un formato utilizzabile.

Quindi, è stato necessario scrivere un pre-processore che leggesse questo file e lo trasformasse nel formato netcdf richiesto dalla versione V200606A.

Elaborazione delle emissioni biogeniche

Insieme al codice diagmet.e, Chimere prevede il lancio di un altro processore, chiamato diagbio.e, il quale ha il compito di creare il file BEMISSIONS.nc contenente le emissioni biogeniche per tutte le celle del dominio e tutte le ore di simulazione. A questo scopo, diagmet.e utilizza i dati meteo contenuti nel file exdomout.nc e i potenziali di emissione biogenici presenti in BIOFACT_CITA.

Essendo questo passaggio strettamente legato alla elaborazione dei dati meteorologici, è stato anch'esso eseguito dall'ARPA Emilia Romagna la quale, utilizzando il file BIOFACT_CITA generato da noi e fornito loro, ci ha restituito anche il file BEMISSIONS già elaborato ma nel vecchio formato binario.

Pertanto, è stato scritto un altro pre-processore, analogo a quello fatto per il file METEO.nc, per trasformare il file nel formato richiesto.

Preparazione delle condizioni al contorno

Per funzionare, Chimere richiede anche i valori di concentrazione degli inquinanti ai bordi del dominio 3D, ovvero lungo le facce laterali e la faccia superiore. Questi valori di concentrazione possono essere forniti sia attraverso l'output di altri modelli su scala sinottica, sia tramite un altro output dello stesso modello Chimere elaborato per un dominio più grande di quello preparato per la simulazione. In particolare, quest'ultima possibilità permette di effettuare una simulazione a scala ristretta innestata in una simulazione a scala più grande.

Nella suite vengono fornite interfacce sia verso i principali modelli di trasporto e trasformazione chimica a scala sinottica (come MOZART II, INCA, GOCART), sia verso un altro output di Chimere. Queste interfacce, chiamate per esempio *preptop_Chimere.e* e *preplat_Chimere.e*, generano rispettivamente le condizioni al contorno per la faccia superiore del dominio e le condizioni al contorno per le facce laterali.

Nel nostro run sono stati reperiti i file di output del modello Chimere che viene fatto girare quotidianamente dall'istituto francese INERIS nell'ambito del servizio Prev'Air di previsione quotidiana degli inquinanti. Anche questi file erano nel formato binario richiesto dalla versione di Chimere antecedente alla nostra e, pertanto, è stato necessario scrivere un pre-processore che le trasformasse nella giusta versione.

Inoltre, in questi dati era mancante il campo denominato *airm* che contiene i valori della densità dell'aria per tutte le celle del dominio che è, invece, richiesto da Chimere. Pertanto, per ovviare a questa mancanza, il preprocessore setta tale variabile nel file generato ad un valore standard di $2.5 \cdot 10^{19}$ mol/cm³.

Inoltre, per ovviare ad un bug presente nel nucleo di calcolo principale (descritto in seguito), tutti i valori pari a 0 presenti nel campo *sphu* (umidità specifica) vengono impostati a $1 \cdot 10^{-7}$.

Preparazione delle emissioni antropogeniche

Le emissioni antropogeniche sono l'ultimo degli input necessari al modello. Per la preparazione di quest'input viene lanciato il codice *prepemis_std.e* il quale richiede in ingresso un database delle emissioni in un formato ascii e genera il file *AEMISSIONS.nc* che a sua volta contiene, per tutte le ore e tutte le celle, le emissioni orarie di tutti gli inquinanti richiesti come input dal modello Chimere.

Tale database è un insieme di 12 file di testo (ASCII), uno per ogni mese dell'anno, che contengono tante righe quanti sono gli inquinanti richiesti (nella versione utilizzata, sono 20 inquinanti, elencati nel file *data/ANTHROPIC.MELCHIOR2*), le tre giornate tipo (lavorativa, prefestiva e festiva) e tutte le celle del dominio. Ciascuna di queste righe contiene 24 valori di emissione in molecole/(s·cm²), separati da uno o più spazi, corrispondenti alle 24 ore del giorno e, se previste le emissioni su due livelli, sono di seguito presenti altri 24 valori corrispondenti alle emissioni orarie per il secondo livello d'emissione.

In fortran, queste sarebbero le istruzioni per la lettura del file:

```
do ni=1,ninquinante
  do ng=1,ngiornate
    do nc=1,ncella
      read(iunit,*)((emis(ni,ng,nc,ih,nl),ih=1,24),nl=1,nlivelli)
    enddo
  enddo
enddo
```

Dove *ninquinante* è il numero di inquinanti (nel nostro caso pari a 20 e corrispondenti all'ordine presente nel file *data/ANTHROPIC.MELCHIOR2*), *ngiornate* è sempre pari a tre e corrispondono, nell'ordine, alle giornate lavorative, pre-festive e festive, *ncella* è il numero della cella così come appare nel file COORD di descrizione del dominio e, quindi, con le celle ordinate da ovest a est e poi da sud a nord, *ih* è l'ora della giornata e, infine, *nlivelli* sono i livelli verticali di emissione presenti nel database.

Nella catena di esecuzione di Chimere viene lanciato un programma, chiamato *prepemis_std.e*, che elabora il database ASCII con le emissioni e crea il *AEMISSIONS.nc* contenente le emissioni orarie per tutto il periodo simulato e per tutte le celle e gli inquinanti.

Per la creazione del database delle emissioni, con Chimere è presente un pacchetto, denominato *emiEMEP-200601.tar.gz*, nel quale sono presenti sia i dati emissivi europei del 2006, provenienti dal modello europeo EMEP e, quindi, con una scala di circa 50x50 km, e alcune utility che, a partire dai dati EMEP, scrivono i 12 file ASCII con le emissioni.

Nel nostro caso, la scelta è stata quella di partire dai dati dell'Inventario Nazionale delle Emissioni del 2003 disaggregato su un grigliato di 5x5 km e dall'Inventario Regionale delle Emissioni 2004 disaggregato su un grigliato di 1x1 km.

La creazione del database ASCII a partire da questi file è il punto più delicato e meno standard di tutte le procedure per la preparazione dei dati di input e, per far questo, sono stati creati alcuni programmi appositi, scritti nel linguaggio Perl.

Il primo di questi parte dalle emissioni nazionali su reticolo, che contengono le emissioni per ciascuna cella e per gli 11 macrosettori emissivi (rispetto la classificazione SNAP'97 usata per gli inventari delle emissioni) di NO_x, SO_x, PM₁₀, CO, NH₃ e COVNM, e, seguendo la stessa procedura seguita dalle utility presenti in *emiEMEP-200601.tar.gz*, effettua le seguenti operazioni:

- una disaggregazione temporale di tutti i composti
- una speciazione dei composti organici con una successiva aggregazione nelle 10 classi chimiche dei composti organici richiesti da Chimere
- una ripartizione granulometrica delle polveri a partire dalle PM₁₀
- una speciazione degli NO_x in NO, NO₂, HONO
- compilazione delle emissioni totali per i 20 inquinanti per ciascuna cella ripartiti nei 12 mesi, nei tre giorni tipo e nelle 24 ore
- trasformazione delle emissioni da tonnellate anno a molecole/(s·cm²)

Il database ASCII così creato, contiene le emissioni per un solo livello ed è composto da 12 file con ciascuno 20x3x8000 righe con i 24 valori d'emissione a partire dai dati dell'Inventario Nazionale del 2003.

Per poter utilizzare anche i dati dell'Inventario Regionale delle Emissioni del 2004, è stato creato un ulteriore programma che, partendo direttamente dall'estrazioni del software di gestione di questo inventario, innesta le emissioni regionali con un grigliato 1x1 km nel grigliato 5x5 km delle emissioni nazionali utilizzando nelle celle di bordo l'ipotesi di valori d'emissione proporzionali all'area. Lo stesso programma di innesto può scalare tale emissioni rispetto ad un fattore predefinito, procedura che può essere usata per la realizzazione di diversi scenari emissivi.

Oltre alla realizzazione di questi due programmi di interfacciamento dei dati in input, ci si è accorti di un malfunzionamento del programma *prepemis_std.e* il quale, nella creazione del file AEMISSIONS.nc a partire dal database ASCII delle emissioni, non teneva conto dell'eventuale cambio di mese che sarebbe potuto esserci nel periodo di tempo della simulazione. Pertanto, è stato anche modificato tale programma (e il relativo script di lancio).

Nucleo principale di calcolo

Questo è il principale componente della suite di Chimere il quale, a partire dai file contenenti le emissioni, i parametri meteo e le condizioni al contorno su base orarie elaborate dagli altri programmi appena descritti, simula i fenomeni di trasporto, dispersione, trasformazione chimico-fisica e deposizione al suolo di tutti gli inquinanti considerati.

Rispetto a tutta la suite di Chimere, questa è la parte di codice che viene eseguita in parallelo, ovvero dividendo il carico di elaborazione tra diversi nodi di calcolo, seguendo uno schema SPMD (Single Process, Multiple Data) e sfruttando una libreria MPI (Message Parsing Interface). Quindi, una volta lanciato il processo principale, denominato *Chimere.e*, questo si comporta da “master” e, dopo aver fatto lanciare altrettanti processi “worker” su ciascun nodo, ad ogni step di calcolo distribuisce i carichi d’elaborazione tra i worker e riceve e compone da questi i risultati.

In figura 2.3 è schematizzato il funzionamento parallelo appena descritto.

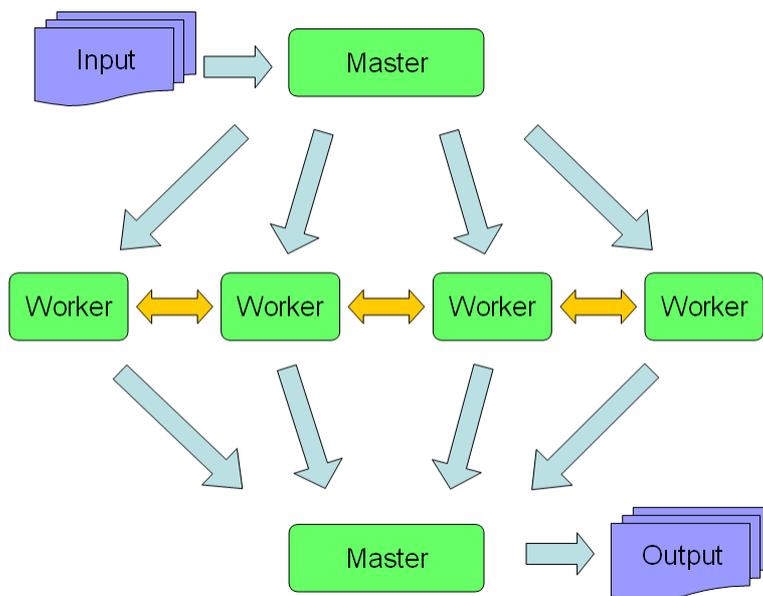


Figura 2.3: Schema a blocchi della distribuzione del lavoro tra master e worker

Il lavoro svolto dal nucleo principale di calcolo è essenzialmente quello dell’integrazione di tutte le equazioni dei fenomeni chimici e fisici e si basa su uno schema temporale con tre cicli temporali innestati secondo il seguente schema:

- dopo una prima inzializzazione di tutte le variabili interne e dei file di input, viene lanciato un ciclo principale che esegue un passo per ciascuna ora di cui è composta la simulazione.
- In questo primo ciclo sulle ore, il processo master legge dai file di input tutte le variabili richieste relative all’ora in considerazione e alla successiva, le divide rispetto ai sottodomini e invia ai processi worker i propri dati.
- Questi ultimi ricevono i dati ed effettuano un secondo ciclo temporale grossolano nel quale sono interpolati linearmente tutti i valori dei dati in input e sono calcolate alcune grandezze fisiche come le costanti di diffusione, di deposizione e le costanti chimiche dipendenti da grandezze ambientali quali l’irraggiamento o la temperatura. A questo punto viene lanciato un terzo ciclo più raffinato.
- In questo terzo ciclo le grandezze in input interpolate e quelle fisiche calcolate precedentemente vengono mantenute costanti mentre vengono risolte varie volte tutte le equazioni differenziali relative ai vari fenomeni chimico-fisici che determinano la

produzione o la distruzione dei vari inquinanti ad opera di meccanismi quali il trasporto, trasformazioni chimiche, le emissioni, le deposizioni e i vari tipi di accrescimenti dell'aerosol. La metodologia di risoluzione numerica è di tipo TwoStep che si basa sull'applicazione di uno schema iterativo di tipo Gauss-Siedel.

- Alla fine di ciascun passo di questo terzo ciclo, i processi worker che lavorano su sotto-domini adiacenti si scambiano tra loro le informazioni relative alle concentrazioni di alcune celle vicino ai bordi dei propri sotto-domini.
- Alla fine di ciascun passo del ciclo grossolano, i processi worker inviano al master le concentrazioni risultanti, il master le riceve e provvede a salvarle nel file di output.

Nel file di configurazione di Chimere, il numero di passi grossolani o fisici, dato che in questi vengono principalmente aggiornati i valori di variabili fisiche, è definito dal parametro chiamato “*phys*” ed è generalmente impostato pari a 6; il numero di passi fini del terzo ciclo, che serve ad avere una buona risoluzione temporale per descrivere adeguatamente tutti i tipi di trasformazioni degli inquinanti, è definito dal parametro “*step*” ed è stato impostato inizialmente pari a 6 e poi pari a 4 in modo da avere in passo temporale fine di 100 o 150 secondi.

Infine, il numero di iterazioni Gauss-Siedel del risolutore numerico è definito dal parametro “*ngs*” ed è impostato normalmente a 2 per simulazioni o a 1 per simulazioni di test o di sviluppo.

Durante l'implementazione del sistema, sono stati trovati alcuni bug nel codice di *Chimere.e*.

Il primo si trova nella parte di codice relativa all'inizializzazione dei valori al contorno (file “*src/initio/iniboun.f90*”) in due istruzioni di controllo di un loop (alle righe 63 e 97): questo è stato corretto direttamente in quanto si riscontra all'interno di un passaggio necessario per far funzionare l'intero codice di calcolo.

Il secondo si trova all'interno della routine che calcola alcuni parametri relativi all'enucleazione del particolato (file *src/model/nucleation.f90*). Qui viene calcolato un logaritmo di una variabile derivata dal parametro *sphu* presente nel file di input meteo *METEO.nc*: nei file METEO che ci sono stati forniti, il campo *sphu* assume talvolta un valore pari a 0 azzerando anche la variabile nella subroutine nucleation e determinando un valore indeterminato (NaN = Not a number) dovuto ad una formulazione che coinvolge un logaritmo di zero. Per ovviare a questo bug, è stata modificata l'interfaccia per la creazione del file METEO.nc al fine di sostituire tutti i valori pari a zero nel campo *sphu* con un valore pari a $1 \cdot 10^{-7}$.

Questi bug, grazie alla libera disponibilità del codice sorgente, sono stati tutti individuati, isolati e risolti o aggirati.

2.2 Implementazione

Tutta la suite è stata installata e testata in ambienti estremamente diversi sia come hardware che come compilatore e librerie utilizzate:

- *Sun Station*: 2 processori UltraSPARC-IIIi (RISC), sistema operativo Sun Solaris 9, compilatore Fortran Sun Studio 11 e ambiente parallelo Sun HPC5.0.
- *Cluster Linux* (Dip. Mat.): 8 nodi con Intel Xeon 3 GHz, sistema operativo basato su RedHat 8.0, compilatore Intel Ifort 3.1.036, ambiente parallelo MPICH1.
- *Cluster Linux* (ARPA): 8 nodi + 1 con Intel Xeon 3 GHz, sistema operativo Ubuntu Server 8.04 a 64bit, compilatore G95 0.91, ambiente parallelo LAM-MPI.

Tra tutte, l'installazione più onerosa è stata quella effettuata sulle macchine Sun in quanto è un sistema molto diverso da quello basato su Linux utilizzato dagli sviluppatori e dalla maggior parte degli utenti di Chimere. Questa differenziazione ha comunque permesso di evidenziare alcuni dei limiti dell'attuale implementazione di Chimere e la non ottima armonizzazione di alcune delle sue componenti e, in particolare l'uso dell'ambiente di sviluppo computazionale di alto livello della piattaforma Sun ha permesso di evidenziare alcuni degli errori di programmazione (*bug*) che con gli altri sistemi non sarebbero stati facilmente individuati.

Su tutte le piattaforme l'implementazione è stata effettuata in due fasi: nella prima è stato riprodotto un run di benchmark che fa uso dei dati di input relativi all'ondata di caldo eccezionale che si verificò in Europa dal 30 luglio al 3 agosto 2003 e scaricabili dal sito degli sviluppatori al fine di verificare la corretta implementazione della suite.

In seguito sono stati rivisti e stati profondamente modificati tutti i gli script di setup e lancio dell'esecuzione in modo da adattarsi al diverso formato dei dati in input e per ottimizzare alcune fasi, come la ricompilazione di tutto il codice (oltre 62000 righe) o la creazione dei file AEMISSION.nc delle emissioni antropogeniche, TOP_CONCS.nc e LAT_CONCS.nc delle condizioni al contorno, che originariamente venivano eseguite ad ogni run di Chimere, facendo perdere molto tempo di calcolo in fasi che producevano sempre risultati identici.

Quindi, è stato impostato un primo scenario relativo ai 4 mesi estivi dell'anno 2004 a partire da tutti i dati di input descritti nel paragrafo 2.1. Questo è stato fatto girare solamente nei due cluster con ambiente Linux presenti nel Dipartimento di Matematica e in ARPA Umbria e ha avuto varie finalità:

1. verificare l'implementazione e la correttezza di tutti i pre-processor sviluppati per interfacciare i dati di input con Chimere;
2. inter-confrontare le due diverse implementazioni del modello nei cluster del Dipartimento di Matematica e di ARPA Umbria;
3. ottenere dei primi risultati di una simulazione confrontabili con i valori misurati dalla rete di monitoraggio e fare una prima verifica della performance di simulare situazioni reali.

Utilizzando questo scenario, oltre a ottimizzare tutti gli script di lancio, è stato possibile effettuare alcuni test relativi alla potenzialità di calcolo del codice Chimere.

Alla fine della fase d'implementazione, la piattaforma usata per elaborare lo scenario descritto nei capitoli seguenti è quella presente in ARPA Umbria. Nella tabella 2.1 è dettagliato l'hardware e il software impiegato in tale sistema.

Tabella 2.1: Descrizione dettagliata dell'hardware e del software utilizzato nel Cluster Linux presente in ARPA Umbria

	Front End	Nodo di calcolo
Macchina	HP Proliant DL160G5	
Numero processori	1	2
Processore	Intel Xeon E5405	Intel Xeon E5472
Cache del processore	12 MB	
Numero di core	4	
Frequenza di clock	2.0 GHz	3.0 GHz
Frequenza FSB	1.333 GHz	1.600 GHz
RAM	4 GB PC2-5300 DDR2	16 GB PC2-5300 DDR2
Capacità totale dischi	3 TB (1.5 TB in RAID1)	320 GB (160 GB in RAID1)
Interfaccia dischi	SATA1 1.5GB/s	
Scheda di rete	Gigabit Ethernet PICE NC320i integrata	
S.O.	Ubuntu 8.04 64bit server edition	
Chimere	V200606A	
Compilatore G95	0.91 basato su GCC 4.0.3	
Libreria LAM-MPI	7.1.2	
Libreria Netcdf	Netcdf 4 - 3.6.2	

2.3 Verifiche delle interfacce e test computazionali

Le interfacce realizzate sono di due tipi: il primo è un'interfaccia di conversione del formato di memorizzazione dei dati di input meteo, di condizioni al contorno e di emissioni biogeniche, mentre il secondo tipo è una vera e propria elaborazione dei dati emissivi attraverso disaggregazioni temporali, speciazioni di vari composti e ri-aggregazione dei composti organici in classi omogenee in base alla reattività chimica.

Le prime interfacce sono state verificate utilizzando i dati di benchmark per le due versioni differenti di Chimere, una che utilizza il formato binario come quello a nostra disposizione e un'altra che genera file netcdf. I file binari generati a partire dai dati di benchmark sono stati convertiti attraverso le interfacce da verificare e sono stati comparati i valori nel file netcdf così ottenuto con quelli contenuti nel file generato dall'altra versione di Chimere.

Per verificare l'interfaccia relativa alle emissioni antropogeniche, è stato seguito un percorso diverso. Oltre all'interfaccia vera e propria, realizzata dal Dipartimento di Chimica, in ARPA Umbria è stato scritto un altro programma di calcolo che, prescindendo dalla disaggregazione temporale e spaziale, effettua lo stesso tipo di elaborazioni numeriche sui dati, ovvero le varie speciazioni, le eventuali aggregazioni in composti chimici omogenei e la trasformazione dall'unità di misura originaria a quella richiesta da Chimere.

Con questo sono stati elaborati, a partire dalle emissioni totali per tutto il dominio, le emissioni totali per i 20 composti richiesti da Chimere. Queste sono state confrontate con gli analoghi totali

ottenuti con un'operazione di aggregazione spaziale e temporale a partire dall'output dell'interfaccia sottoposta a verifica.

Tutti i test hanno confermato la bontà delle interfacce realizzate.

In seguito, con i dati pre-processati con le interfacce così verificate, è stato creato uno scenario base relativo ai 4 mesi estivi del 2004 che ha permesso, innanzitutto, di validare l'installazione della suite, effettuata originariamente nelle macchine presenti nel Dipartimento di Matematica, nel cluster presente in ARPA Umbria.

Per effettuare questa verifica, è stata fatto girare l'intero scenario dei 4 mesi estivi e sono state calcolate le differenze di concentrazione tra questa simulazione e quella effettuata al Dipartimento di Matematica; a partire da queste differenze, calcolate per tutte le celle del dominio 3D e per tutte le ore di calcolo, sono stati calcolati i valori medi, massimi, minimi e quadratici medi, su tutto il dominio e per tutte le ore. In tabella 2.2 sono riportati tali valori.

Tabella 2.2: Valori medi (AVG), massimi (MAX), minimi (MIN) e quadratici medi (RMS) delle differenze sul dominio 3D e sul tempo tra le concentrazioni ottenute al Dipartimento di Matematica e in ARPA Umbria

	AVG	MAX	MIN	RMS
O₃ (ppb)	1,1E-05	4,9E-01	-5,5E-01	6,3E-04
NO₂ (ppb)	-1,7E-07	4,8E-01	-4,4E-01	3,8E-04
NO (ppb)	-1,0E-07	8,2E-02	-1,7E-01	6,8E-05
SO₂ (ppb)	-3,8E-08	4,5E-01	-5,7E-01	3,0E-04
CO (ppb)	-2,1E-06	3,7E-02	-7,5E-02	1,1E-04
PM₁₀ (µg/m³)	2,3E-06	1,6E+01	-1,4E+01	1,0E-02
PM_{2,5} (µg/m³)	-4,2E-06	1,1E+01	-1,6E+01	1,0E-02

Le differenze quadratiche medie dell'ordine di 10^{-4} per i vari inquinanti e di 10^{-2} per le polveri fini sono dovute alle differenti architetture e al differente compilatore usato. Inoltre, i valori più alti presenti negli aerosol sono dovuti sia alla maggiore complessità dell'algoritmo di calcolo usato e al fatto che tali inquinanti derivano dalla somma di varie componenti chimiche e varie classi granulometriche, aumentandone così l'incertezza associata: per esempio, i valori di PM₁₀ derivano dalla somma di 6 componenti per 5 classi granulometriche, il PM_{2,5} contiene 6 componenti per 4 classi granulometriche.

Tali incertezze vanno considerate come quelle intrinseche dovute alle approssimazioni del calcolo matematico e, pertanto, sono dei limiti inferiori nel considerare l'accuratezza del calcolo quando si andrà ad analizzare la sensibilità degli algoritmi rispetto alle diverse impostazioni.

Dato che le incertezze per i vari inquinanti sembrano essere dello stesso ordine di grandezza (o derivate da questo, come nel caso del PM₁₀), nei successivi confronti verrà mostrata solamente la differenza quadratica media per l'O₃ al fine di comparare le accuratèzze di differenti simulazioni.

Una volta implementata la suite sul cluster Linux presente in ARPA Umbria, sono stati effettuati alcuni test per verificare le performance del nucleo principale di calcolo di Chimere orientati a

verificare aspetti del codice quali la scalabilità, la velocità di calcolo e la precisione al variare di alcune impostazioni.

In tabella 2.3, per ciascun numero di processori messi a disposizione e, quindi, per ciascuna diversa divisione del dominio in sotto-domini di calcolo, sono riportati i tempi per realizzare una simulazione dei primi 100 giorni dello scenario dei 4 mesi estivi del 2004, l'indice di velocità del calcolo v , ovvero il numero di ore simulate ogni ora, e l'indice di velocità di calcolo normalizzato per numero di processore v^* . Nella figura 2.4 è mostrato l'andamento della velocità di calcolo.

Tabella 2.3: Prove per verificare la scalabilità del codice rispetto al numero di processori coinvolti nel calcolo.

N. proc.	Divisione dominio	Tempo	v (h sim/h)	v^* (h sim/h·proc)
8	4 x 2	148m 05s	41,3	5,16
6	3 x 2	197m 50s	30,3	5,05
4	2 x 2	284m 43s	21,1	5,27
2	1 x 2	561m 09s	10,7	5,35

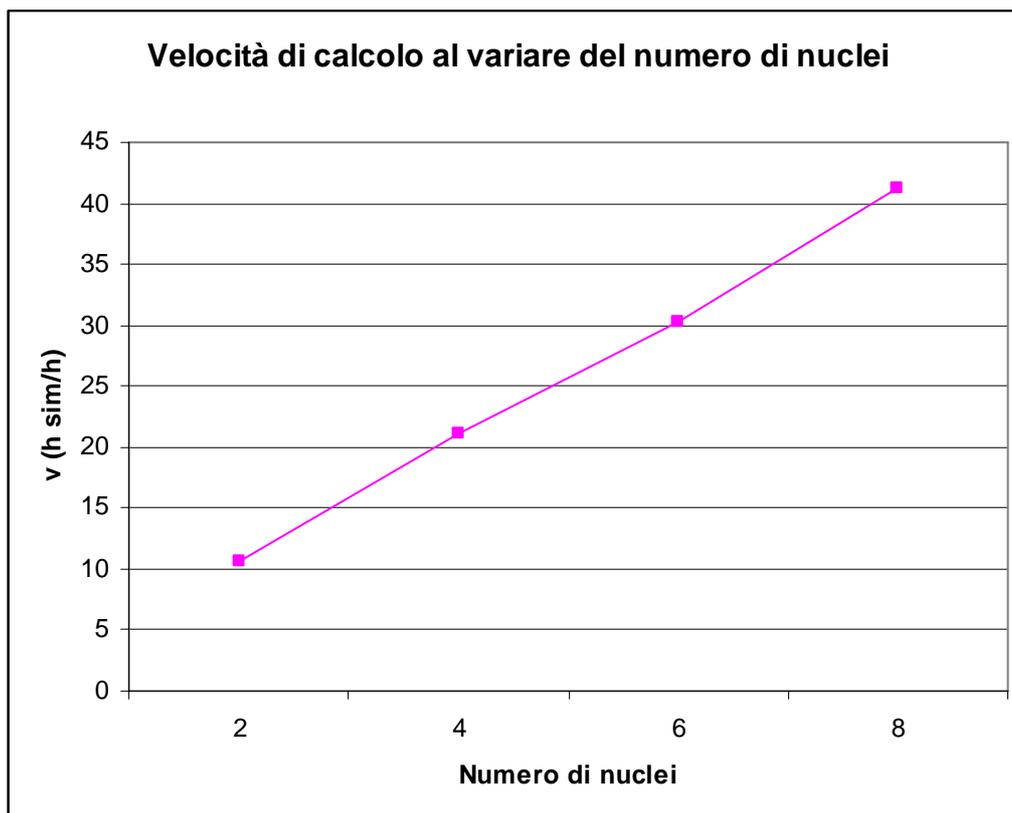


Figura 2.4: Velocità di calcolo in funzione del numero di nuclei

Da quest'ultima figura si nota come la velocità di calcolo sia quasi proporzionale rispetto al numero di processori utilizzati; analogamente, si nota come v^* non abbia diminuzioni significative. La diminuzione di v^* dipende dall'aumento dei tempi richiesti di comunicazione tra i processi worker rispetto ai tempi stessi di calcolo in questi sottodomini; la diminuzione di v^* aumento con la riduzione delle dimensioni dei sottodomini di calcolo e tende ad annullare il guadagno nel tempo totale di calcolo rispetto all'aumentare del numero di processori. Nel nostro caso, essendo ancora

vicini alla linearità tra velocità di calcolo e numero di processori, sembrerebbe che questa situazione limitante sia ancora lontana e, quindi, c'è ancora possibilità per future espansioni del sistema con l'aggiunta di ulteriori nodi di calcolo.

I valori di concentrazioni ottenuti nelle simulazioni riportati nella tabella 2.3 sono identici per tutti e tre i casi. Questo dipende da come è impostato l'algoritmo di divisione del lavoro tra i worker che lavorano su domini adiacenti (come specificato nel manuale di Chimere): dato che i calcoli per i domini lungo la stessa linea orizzontale sono collegati e, dato che il numero di domini per le tre simulazioni è lo stesso, i risultati delle simulazioni coincidono. Come ulteriore verifica di questo, sono state realizzate ulteriori simulazioni impostando una diversa divisione dei domini. Nella tabella 2.4 sono riportati i tempi richiesti da altre tre simulazioni di cui una identica alla precedente simulazione con 8 processori.

Tabella 2.4: Prove per verificare la dipendenza degli algoritmi di calcolo rispetto a diverse divisioni del dominio.

N. proc	Divisione dominio	Tempo	v (h sim/h)	v* (h sim/h·proc)	RMS di O ₃ (µg/m ³)
8	4 x 2	149m 57s	40,0	5,00	-
8	2 x 4	145m 19s	40,5	5,06	8,05E-03
2	2 x 1	568m 42s	10,6	5,28	4,99E-03

Il confronto tra la prima e la seconda simulazione, entrambe con 8 nuclei di calcolo, mostrano uno scarto temporale molto simile, ovvero dell'ordine del 1%, mentre i valori calcolati hanno un scarto quadratico medio dell'ordine di 10^{-3} µg/m³. Il confronto fra la terza simulazione della tabella 2.4 e la quarta simulazione della precedente tabella 2.3, entrambe con soli due nuclei di calcolo, mostra uno scarto temporale analogo. Questo fatto supporta l'ipotesi che l'impiego di 8 o meno processori per la simulazione di un dominio delle nostre dimensioni (100x80 celle) determina tempi di puro calcolo che sono preponderanti rispetto ai tempi di comunicazione tra workers e, pertanto, ci troviamo ancora in un regime di dipendenza lineare tra la velocità di calcolo e il numero di processori impiegati. Inoltre, confrontando la prima simulazione della tabella 2.3 con la prima simulazione della tabella 2.4, ovvero due simulazioni uguali, si nota come anche fra due situazioni identiche i tempi di calcolo siano leggermente diversi: questo dipende dal fatto che comunque la macchina ha nel tempo comportamenti non riproducibili dipendenti dai vari processi di gestione del sistema operativo e determina un'incertezza intrinseca nel tempo di calcolo per uno stesso scenario. Per verificare meglio questa incertezza, sono state realizzate altre simulazioni identiche a queste due e confrontati tutti i tempi di calcolo di queste e delle identiche simulazioni già effettuate.

Alla luce dei valori medi e di deviazione standard ottenuti da queste simulazioni, e mostrate in tabella 2.5, i confronti già effettuati tra simulazioni con sotto-domini differenti confermano ancora una volta l'ipotesi di essere molto vicini al regime di linearità tra velocità di calcolo e numero di processori impiegati.

Per completezza, sono state fatte altre simulazioni nelle quali i processi sono stati fatti girare nella stessa macchina del nodo di calcolo in modo da verificare anche l'incidenza dei tempi di trasferimento via ethernet dei dati tra il master e i worker: tale test, i cui risultati sono mostrati in

tabella 2.6, non ha evidenziato alcuna differenza significativa di tempo mostrando che il collegamento gigabit-ethernet non è un attualmente un collo di bottiglia.

Tabella 2.5: Variazioni casuali nel tempo di calcolo della stessa simulazione

Tempo	v (h sim/h)	v* (h sim/h·proc)
148m 05s	41,3	5,16
149m 57s	40,0	5,00
146m 33s	40,9	5,11
147m 20s	40,7	5,09
146m 29s	41,0	5,13
148m 23s	40,4	5,05
145m 54s	41,1	5,14
<i>media</i>	40,8	5,10
<i>dev.std.</i>	0,4	0,06

Tabella 2.6: Confronto delle prestazioni tra una simulazione con il master e i worker che girano sulla stessa macchina al fine di verificare la presenza di un collo di bottiglia nella comunicazione su rete

Processo master	Divisione dominio	Tempo	v (h sim/h)	v* (h sim/h·proc)
front-end	3 x 2	197m 50s	30,3	5,05
nodo di calcolo	3 x 2	191m 39s	31,3	5,22

Un altro test effettuato, è quello relativo alla variazione di alcuni dei parametri di impostazione della simulazione. In particolare, è stato esplorato il comportamento del codice al variare del parametro *ngs* e del parametro *step*.

Il primo parametro imposta il numero di iterazioni Gauss-Seidel nel risolutore TwoStep e, nel manuale di Chimere, viene suggerito di impostarlo a 1 nei run di test o sviluppo e a 2 nei run finali di produzione. Il parametro *step*, invece, è il numero di step di calcolo nei quali viene diviso l'intervallo di tempo fisico (vedi la descrizione del nucleo principale di calcolo) e, sempre nel manuale, viene suggerito di impostare a 1 per simulazioni a scala continentale, fino a 4 per griglie da 10-5 km di lato e a 6 per griglie con un lato inferiore a 5 km.

Nelle tabelle 2.7 e 2.8 sono mostrati i tempi di calcolo e gli scarti massimi e quadratici medi per le simulazioni con i diversi parametri *ngs* e *step*. Per quanto riguarda il parametro *ngs*, sembrerebbe che lo scarto quadratico medio per l'O₃ non sia così elevato anche quando impostato a 1 per un run di test o di sviluppo e comunque si ha un 25% di incremento della velocità. Per quanto riguarda il parametro *step*, sembrerebbe che fino a un valore di 3 non ci sia una differenza sostanziale negli scarti quadratici medi a fronte di un notevole incremento nella velocità di calcolo.

In base a quanto rilevato, e visto quanto riportato nel manuale di Chimere come suggerimento, sono state prese alcune decisioni circa i settaggi usati per le prossime simulazioni. In particolare, è stato deciso di lasciare il parametri *ngs* pari a 2 (per un run di produzione) e il parametro *step* pari a 4, suggerito per griglie da 10 a 5 km.

Tabella 2.7: Confronto tra simulazioni con differenti impostazioni del parametro "ngs"

Parametro "ngs"	Tempo	v (h sim/h)	v* (h sim/h·proc)	Max O ₃ (µg/m ³)	RMS O ₃ (µg/m ³)
1	110m 02s	54,5	6,82	10,6	0,032
2	146m 32s	40,9	5,12	(base)	(base)

Tabella 2.8: Confronto tra simulazioni con differenti impostazioni del parametro "step"

Parametro "step"	Tempo	v (h sim/h)	v* (h sim/h·proc)	Max O ₃ (µg/m ³)	RMS O ₃ (µg/m ³)
1	32m 15s	186,1	23,26	23,0	0,456
2	55m 05s	108,9	13,62	5,2	0,161
3	77m 15s	77,7	9,71	2,1	0,083
4	99m 58s	60,0	7,50	1,0	0,043
5	123m 44s	48,5	6,06	2,0	0,018
6	145m 54s	41,1	5,14	(base)	(base)

L'ultimo test effettuato è stata la verifica dell'assenza di effetti di propagazione e amplificazione degli errori per una simulazione con il parametro *step* impostato a 4. Per questo è stata realizzata una simulazione per tutti i 4 mesi estivi con il valore di *step* uguale a 4; successivamente, sono stati calcolati gli scarti quadratici medi su tutto il dominio 3D tra questa simulazione e l'analoga ottenuta con un valore di *step* pari a 6, per ciascuna ora del periodo simulato. Nella figura 2.5 si mostra come questi scarti, sebbene con un andamento quasi periodico, non tendano a divergere nel tempo.

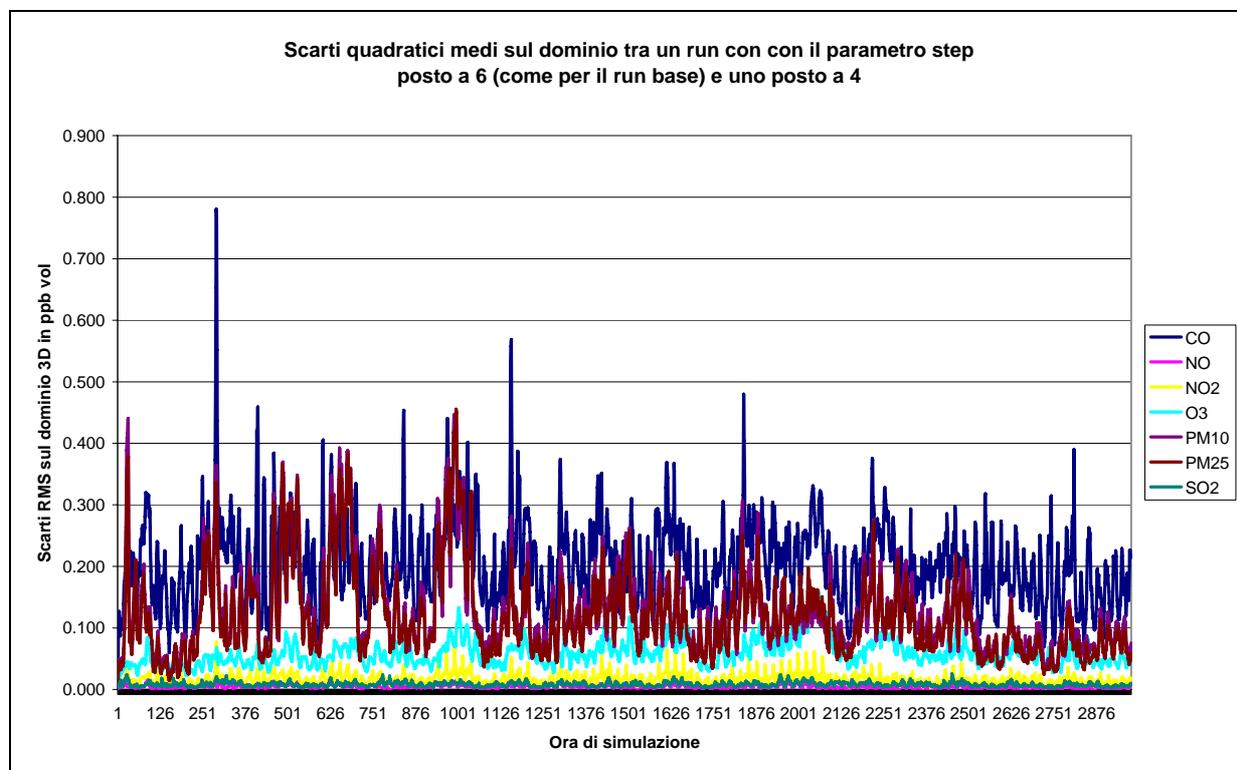


Figura 2.5: Andamento temporale dello scarto quadratico mediato sull'intero dominio tra un run con il parametro *step* posto a 6 e uno posto a 4.

3. Scenario base

La simulazione di riferimento è stata realizzata con i dati che corrispondono, dove possibile, con l'anno 2004 in quanto anno di riferimento anche per l'Inventario Regionale delle Emissioni.

Tale simulazione si basa, quindi, su uno scenario emissivo base con i dati dell'Inventario Regionale del 2004 per l'Umbria e i dati dell'Inventario Nazionale 2003 disaggregato su grigliato 5x5 km per il resto del territorio, sullo scenario meteo e sulle condizioni al contorno anch'essi riferiti al 2004.

Di seguito viene presentato sia lo scenario emissivo base che quello meteo e di condizioni al contorno.

3.1 Emissioni

3.1.1 Emissioni originali

Le emissioni usate per la realizzazione dello scenario base del 2004 sono quelle dell'Inventario Regionale del 2004, per quanto riguarda le celle che ricadono nel territorio umbro, e le emissioni dell'Inventario Nazionale 2003 disaggregato su celle 5x5 km per tutte le altre celle.

Nelle tabella 3.1 sono riportati i totali emissivi per l'Umbria, tratti dall'Inventario Regionale del 2004, i totali emissivi dell'Inventario Nazionale 2003 per l'intero dominio di calcolo e i totali usati dallo scenario base che corrispondono alle emissioni regionali innestate in quelle nazionali.

Tabella 3.1: Totali emissivi in tonnellate/anno per gli inquinanti utilizzati dalle interfacce per l'elaborazione dell'input emissivo.

	Inv. Naz. 2003	Inv. Reg. 2004	Inv. Naz. 2003	Scenario Base
Ambito:	Regione Umbria	Regione Umbria	Intero dominio	Intero dominio
CO (t/a)	63.853	132.800	1.284.691	1.353.595
SO_x (t/a)	9.226	9.195	100.927	100.850
NO_x (t/a)	21.687	78.720	361.621	418.559
PM₁₀ (t/a)	3.641	8.278	46.866	51.485
NH₃ (t/a)	6.627	8.568	77.637	79.577
COVNM (t/a)	18.046	38.174	404.424	424.296

I dati relativi all'Inventario Regionale sono originariamente disaggregati su un grigliato di 1x1 km e sono stati elaborati al fine di aggregarli e innestarli nello stesso grigliato 5x5 km usato come base per le emissioni nazionali, oltre che per lo stesso dominio di calcolo, basandosi su un'ipotesi di emissioni estensive, ovvero proporzionali all'area della cella alla quale appartengono.

Nelle figure da 3.1 a 3.15 sono mostrate le mappe delle emissioni orarie medie per il 2004 di PM₁₀, NO, SO₂ e NH₃ sia relativi allo scenario emissivo base (con i dati dell'Inventario Regionale innestato in quello Nazionale) che a quello con il solo Inventario Nazionale.

Dalla tabella 3.1 e queste ultime figure si evince chiaramente che l'operazione di innesto, oltre ad un leggero aumento dei totali emessi per quasi tutti gli inquinanti dovuto essenzialmente alle diverse procedure di stima adottate nei due inventari (top-down per il nazionale e bottom-up per il regionale quindi con più sorgenti puntuali considerate), porta anche a una distribuzione spaziale delle emissioni che tende a concentrare queste maggiormente verso le principali aree urbane. Quest'ultimo fatto dipende dalla diversa area di partenza per l'operazione di disaggregazione su reticolo che per l'Inventario Nazionale è la provincia mentre per l'Inventario Regionale è il comune.

3.1.2 Disaggregazione temporale

Al fine di preparare lo scenario emissivo, oltre a innestare i dati dell'Inventario Regionale in quello Nazionale, occorre effettuare un'operazione di disaggregazione delle emissioni al fine di ottenere, tramite l'uso di profili di emissione medi orari, settimanali e mensili, le emissioni orarie per ciascuna cella del dominio.

A tal fine sono stati utilizzati i profili di emissione messi a punto dal Centro Tematico Nazionale Aria Clima e Emissioni (CTN-ACE), composto dalle Agenzie Regionali e Provinciali di Protezione Ambientale e dall'Istituto Superiore per la Protezione e la Ricerca Ambientale (ISPRA ex APAT), per la creazione del dataset emissivo relativo alla Pianura Padana per la realizzazione delle simulazioni usate nell'ambito del progetto di interconfronto fra modelli di simulazione Chimica e di Trasporto degli inquinanti in atmosfera. Questi profili temporali variano anche per inquinante e macrosettore emissivo.

A titolo d'esempio, nelle figure da 3.16 a 3.18 sono mostrati i profili di disaggregazione temporali di emissione di PM₁₀ per ciascun macrosettore con emissioni antropogeniche (ovvero, dal 01 al 10).

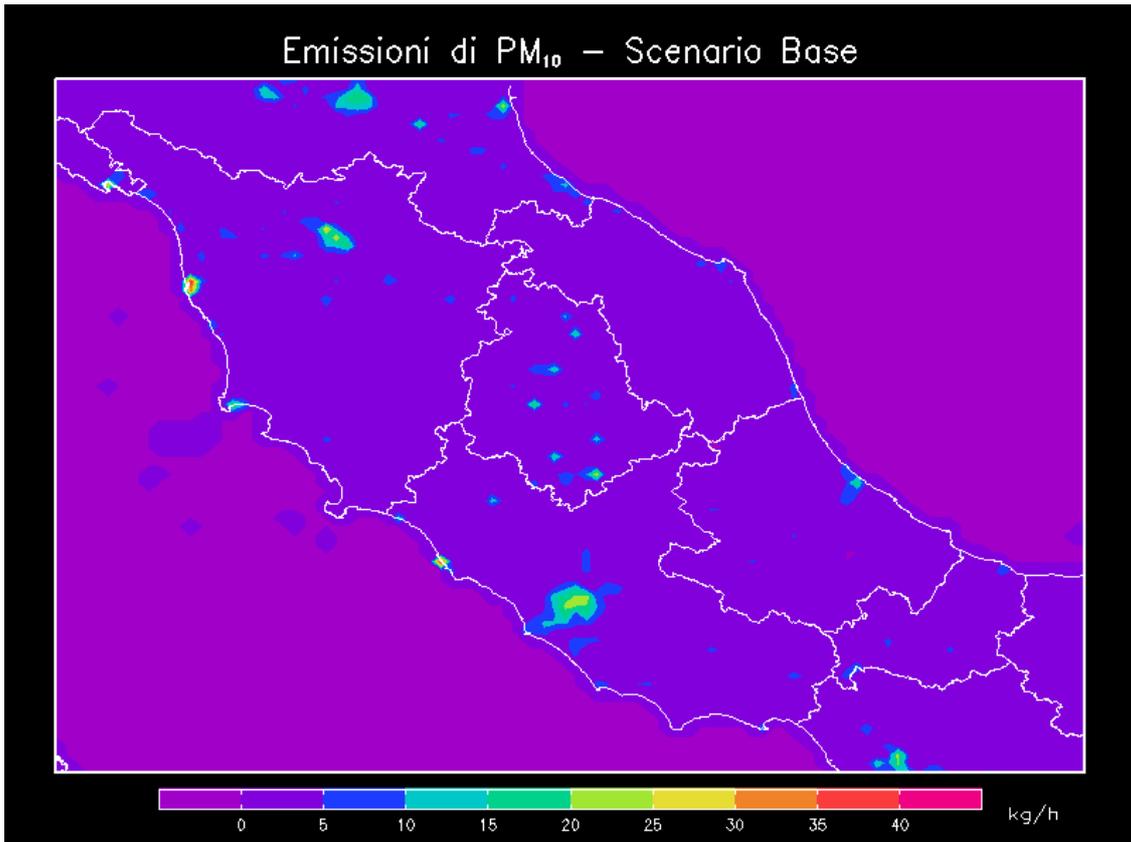


Figura 3.1: Emissioni di PM₁₀ Italia centrale – scenario base

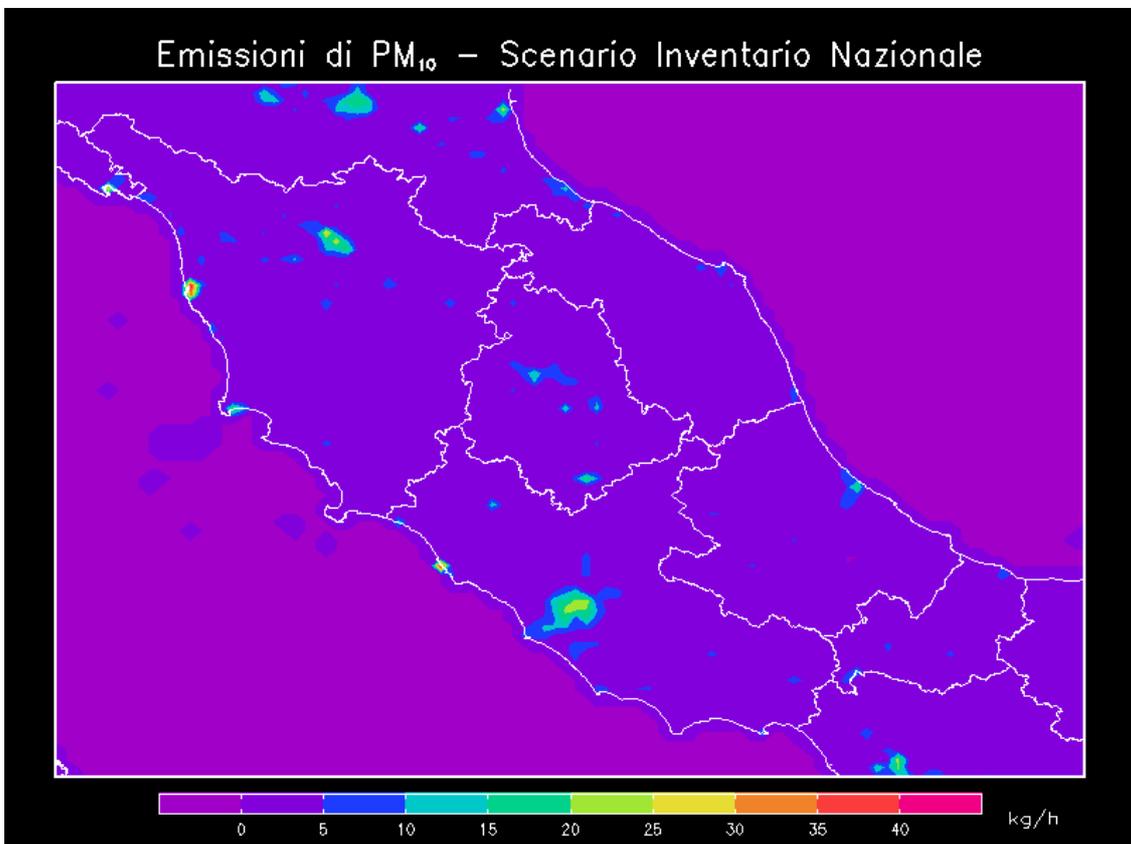


Figura 3.2: Emissioni di PM₁₀ Italia centrale – scenario inventario nazionale

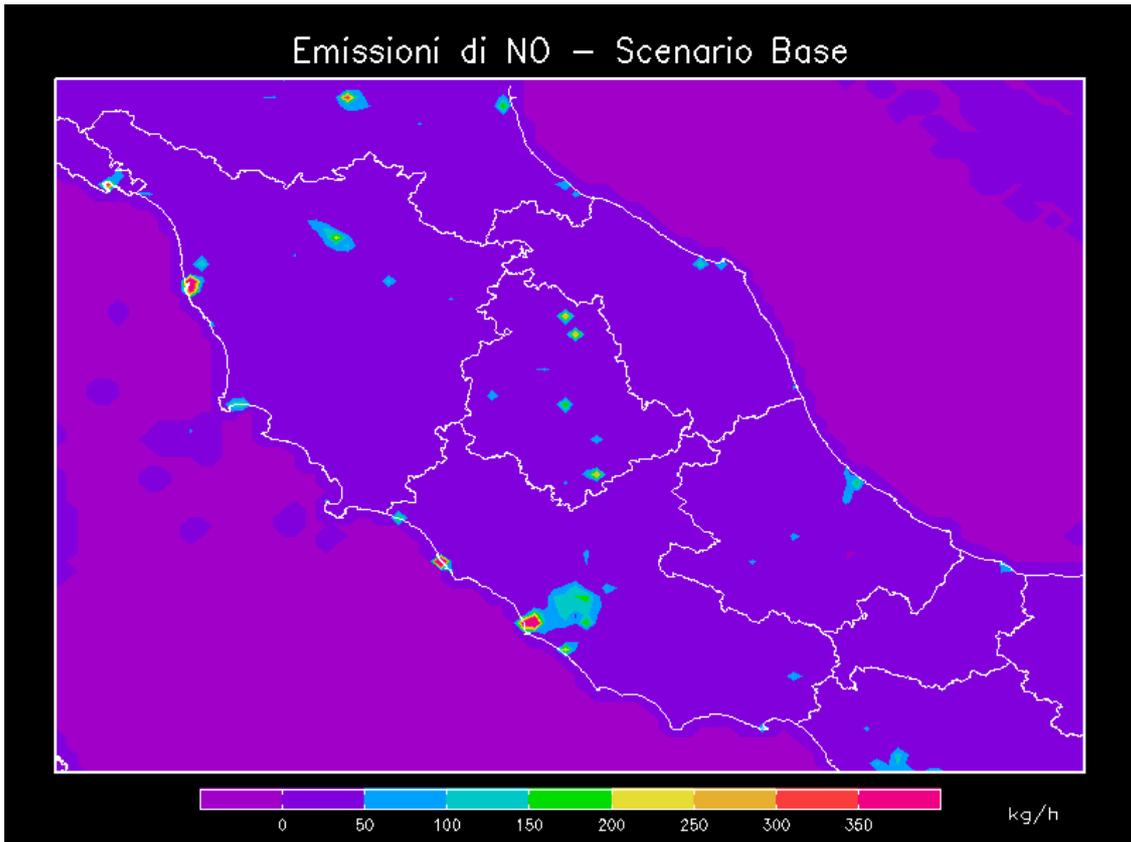


Figura 3.3: Emissioni di NO Italia centrale – scenario base

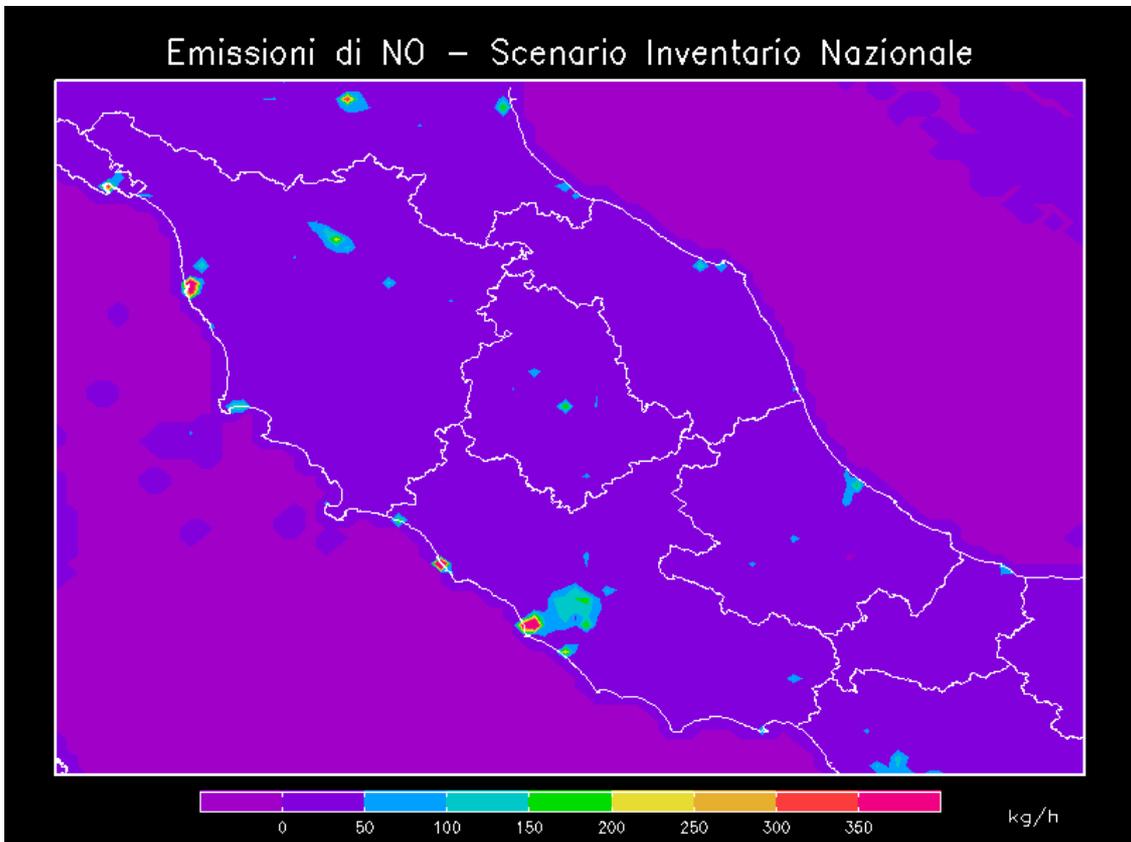


Figura 3.4: Emissioni di NO Italia centrale – scenario inventario nazionale

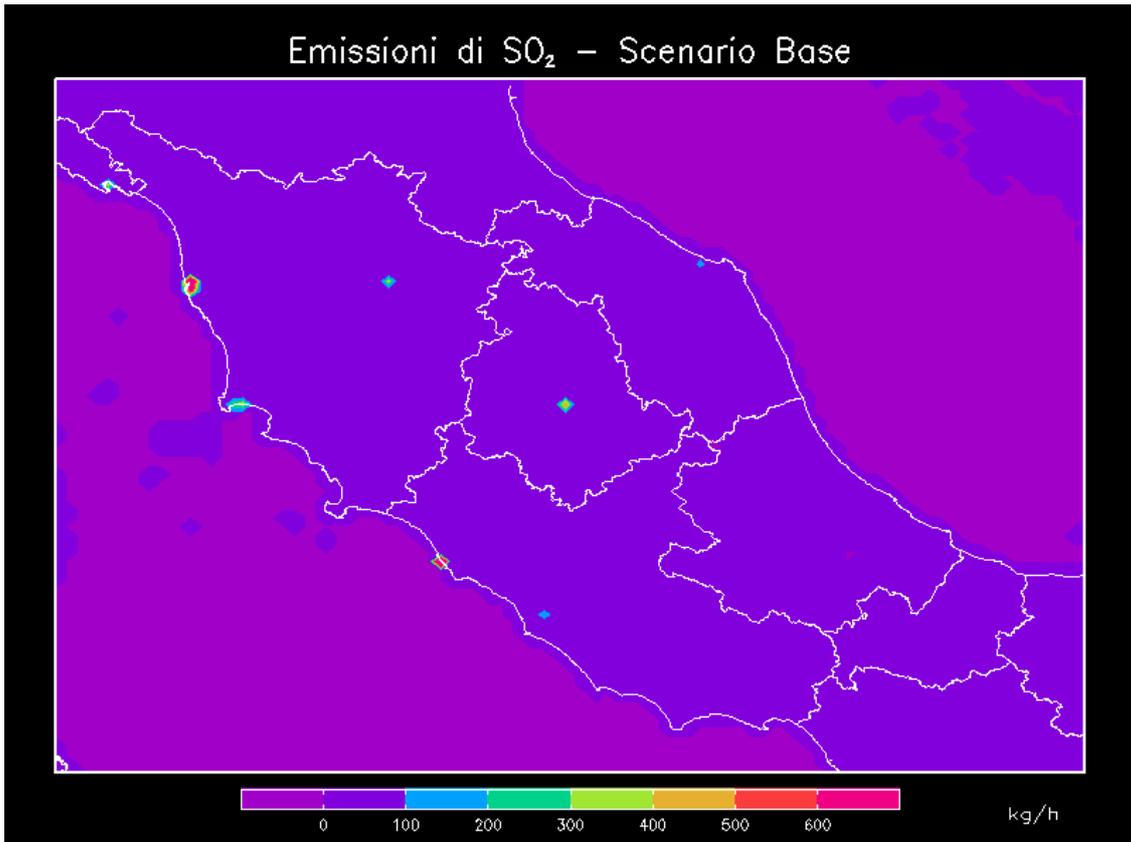


Figura 3.4: Emissioni di SO₂ Italia centrale – scenario base

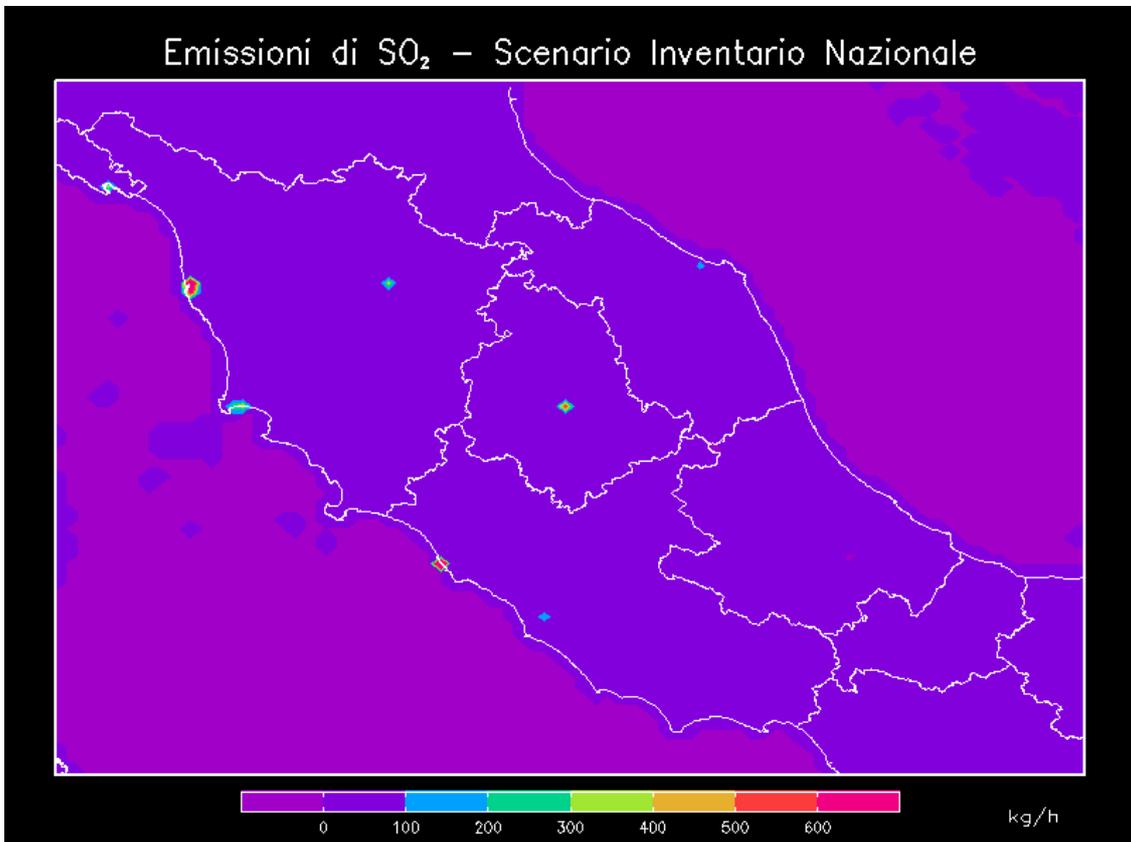


Figura 3.5: Emissioni di SO₂ Italia centrale – scenario inventario nazionale

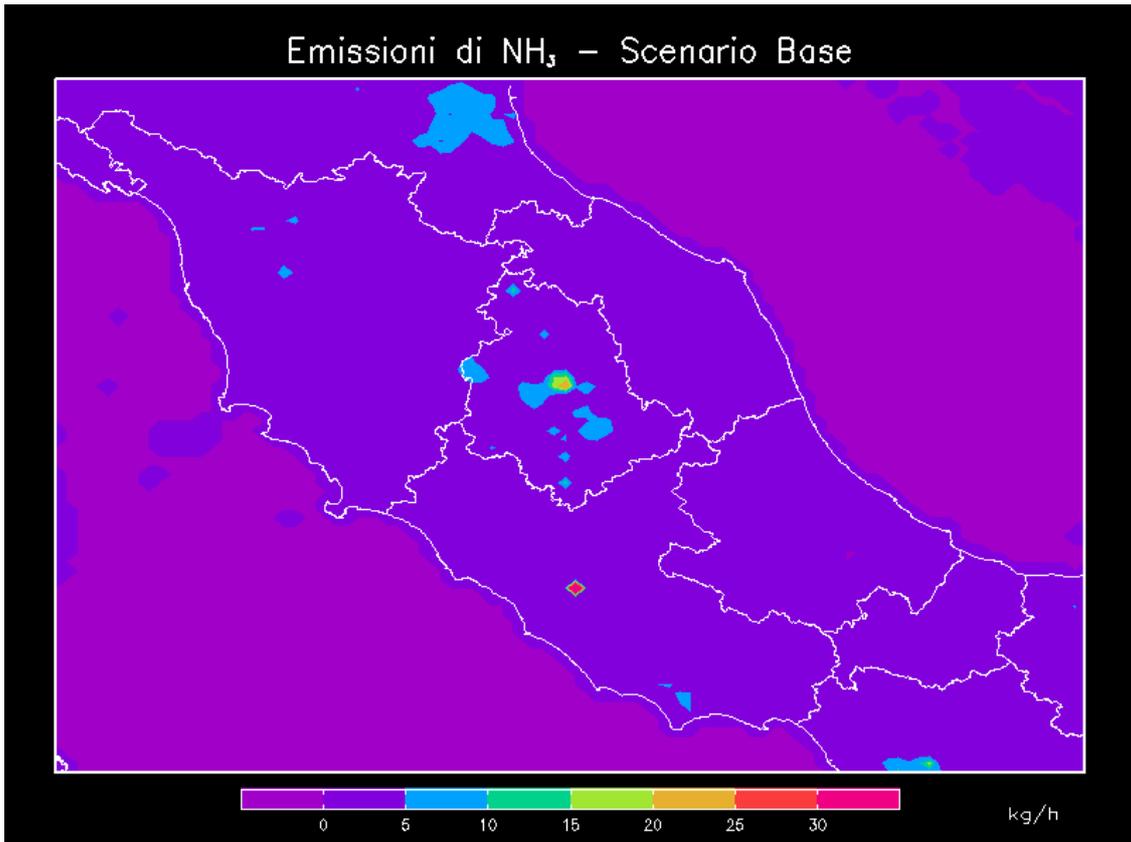


Figura 3.6: Emissioni di NH₃ Italia centrale – scenario base

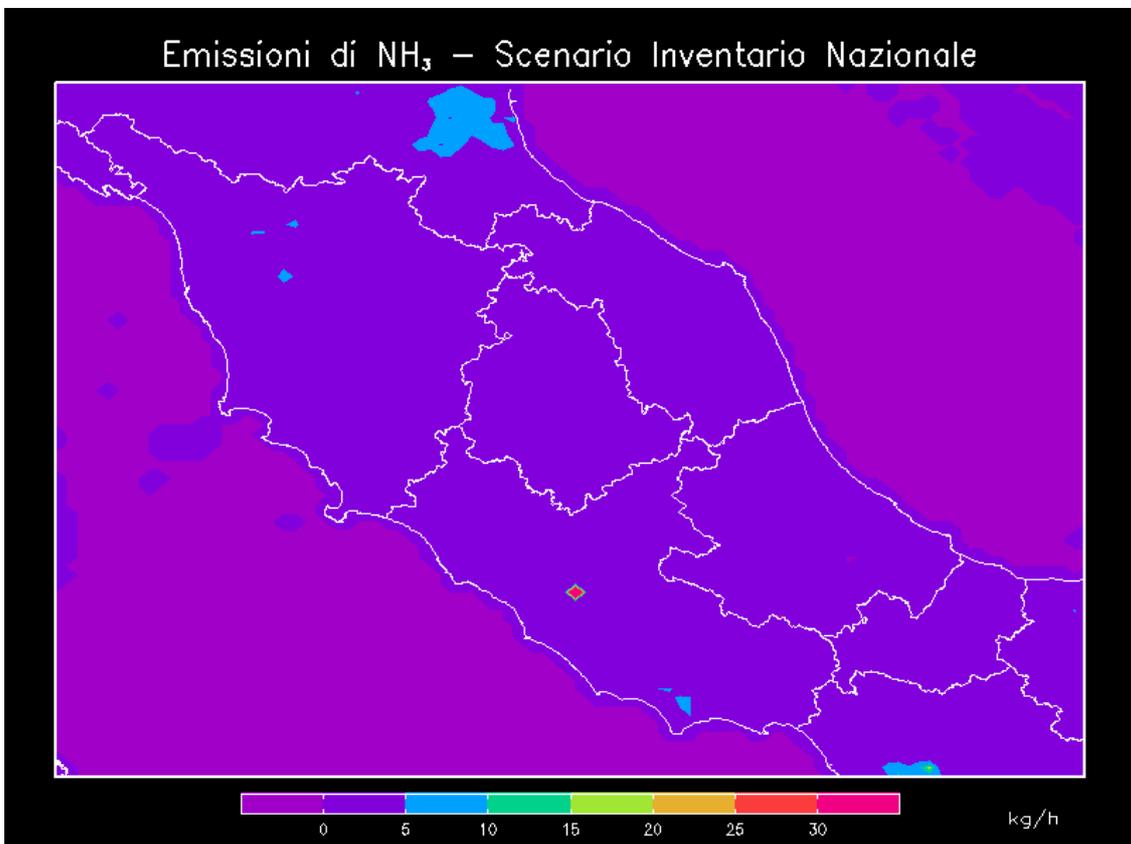


Figura 3.7: Emissioni di NH₃ Italia centrale – scenario inventario nazionale

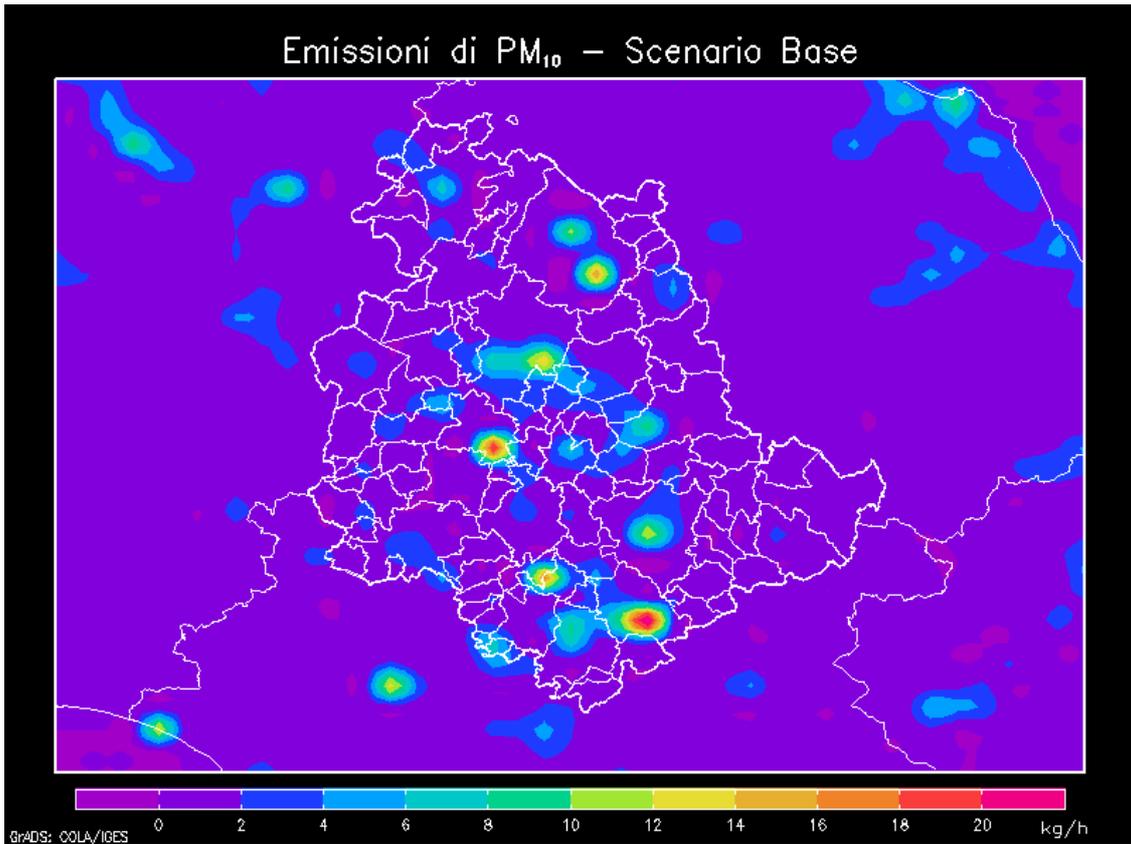


Figura 3.8: Emissioni di PM_{10} Umbria – scenario base

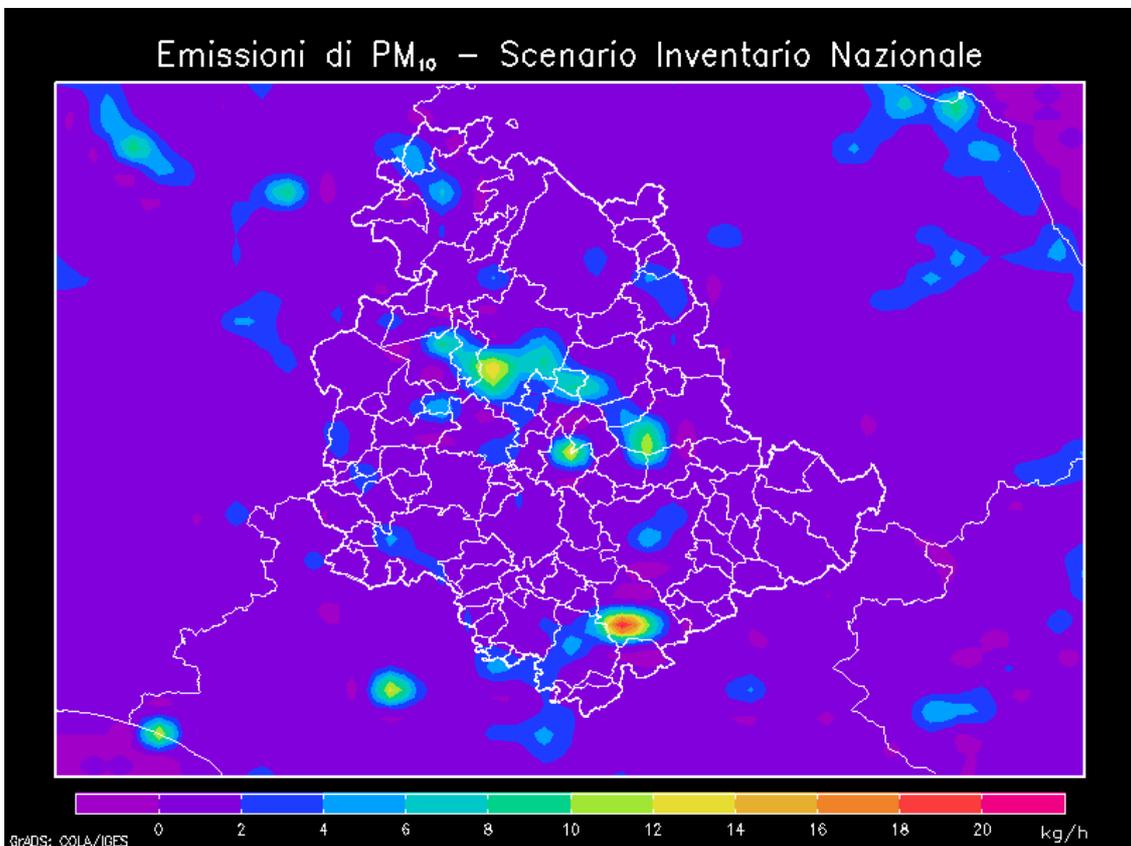


Figura 3.9: Emissioni di PM_{10} Umbria – scenario inventario nazionale

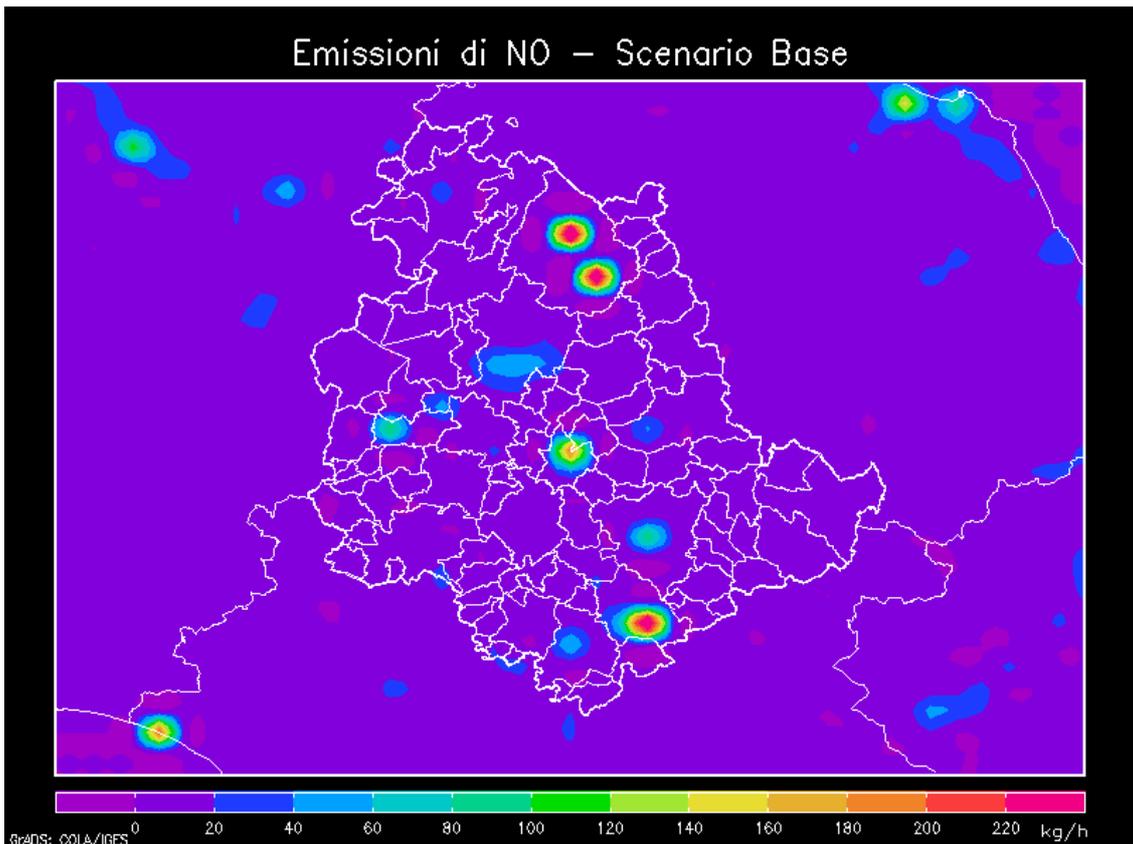


Figura 3.10: Emissioni di NO Umbria – scenario base

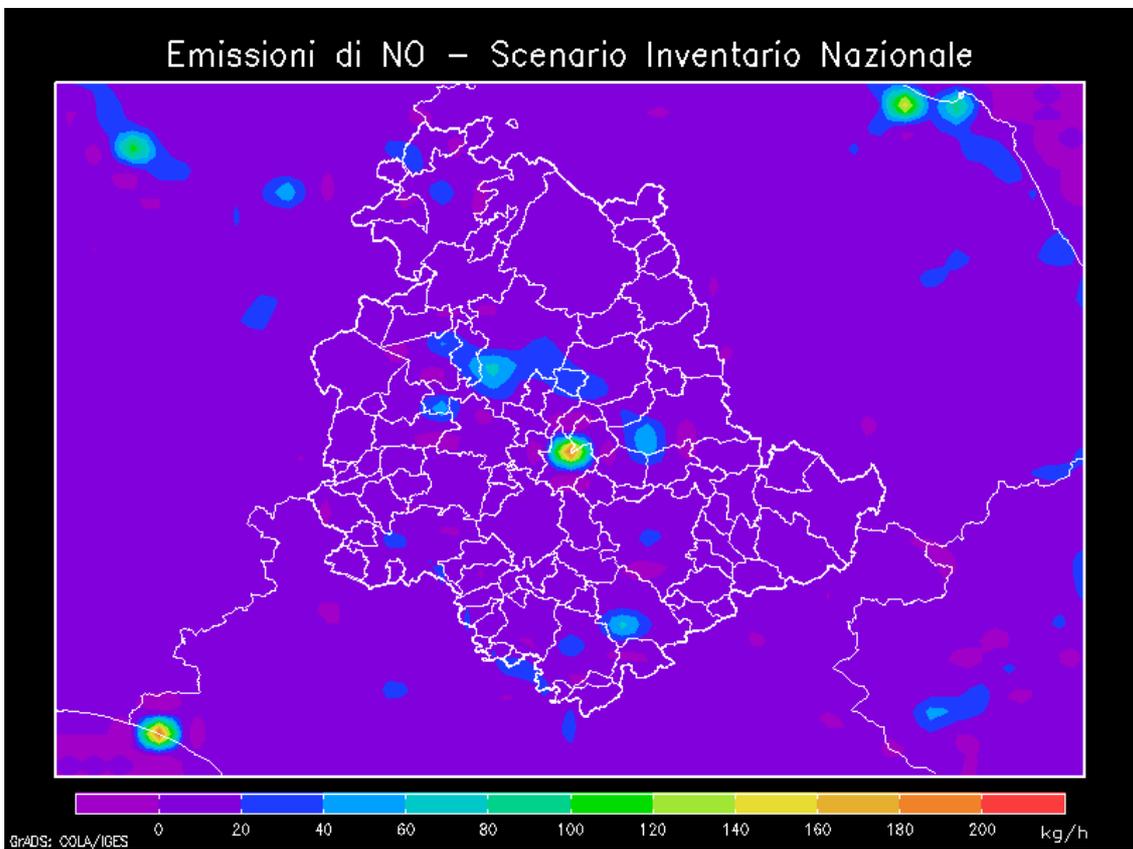


Figura 3.11: Emissioni di NO Umbria – scenario inventario nazionale

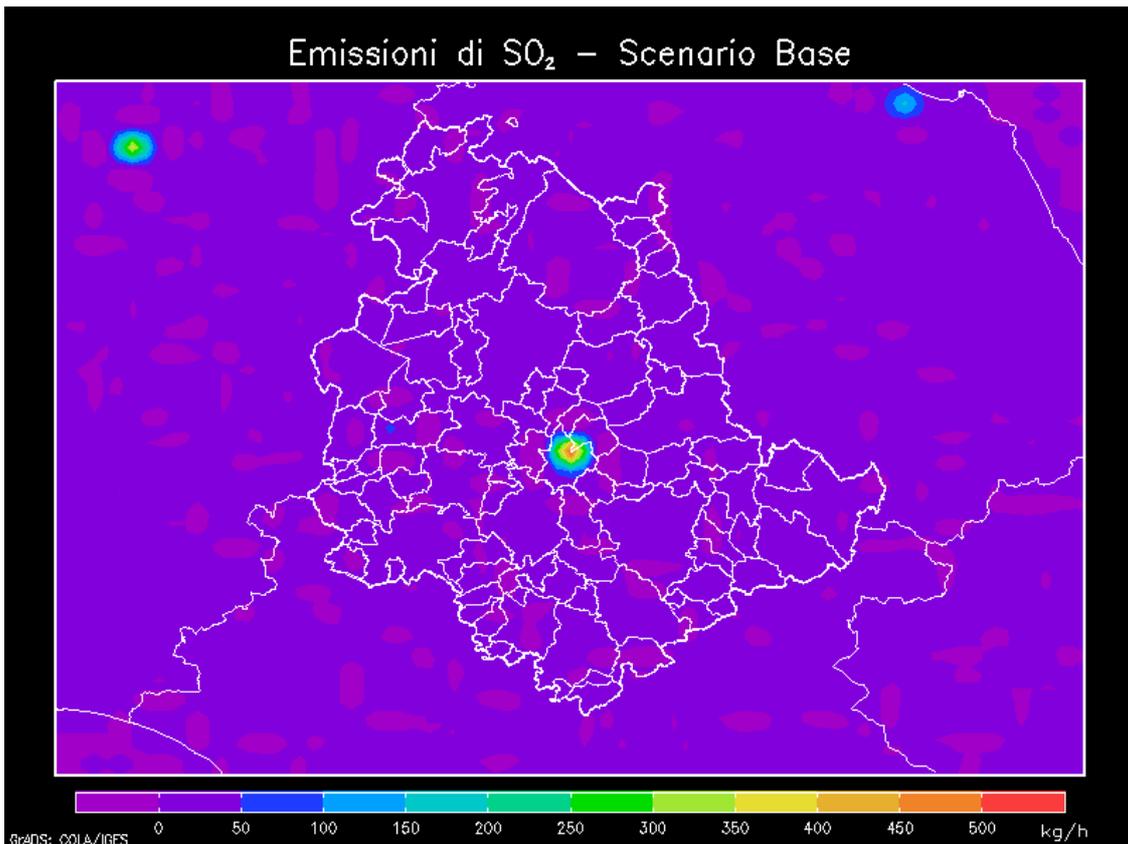


Figura 3.12: Emissioni di SO₂ Umbria – scenario base

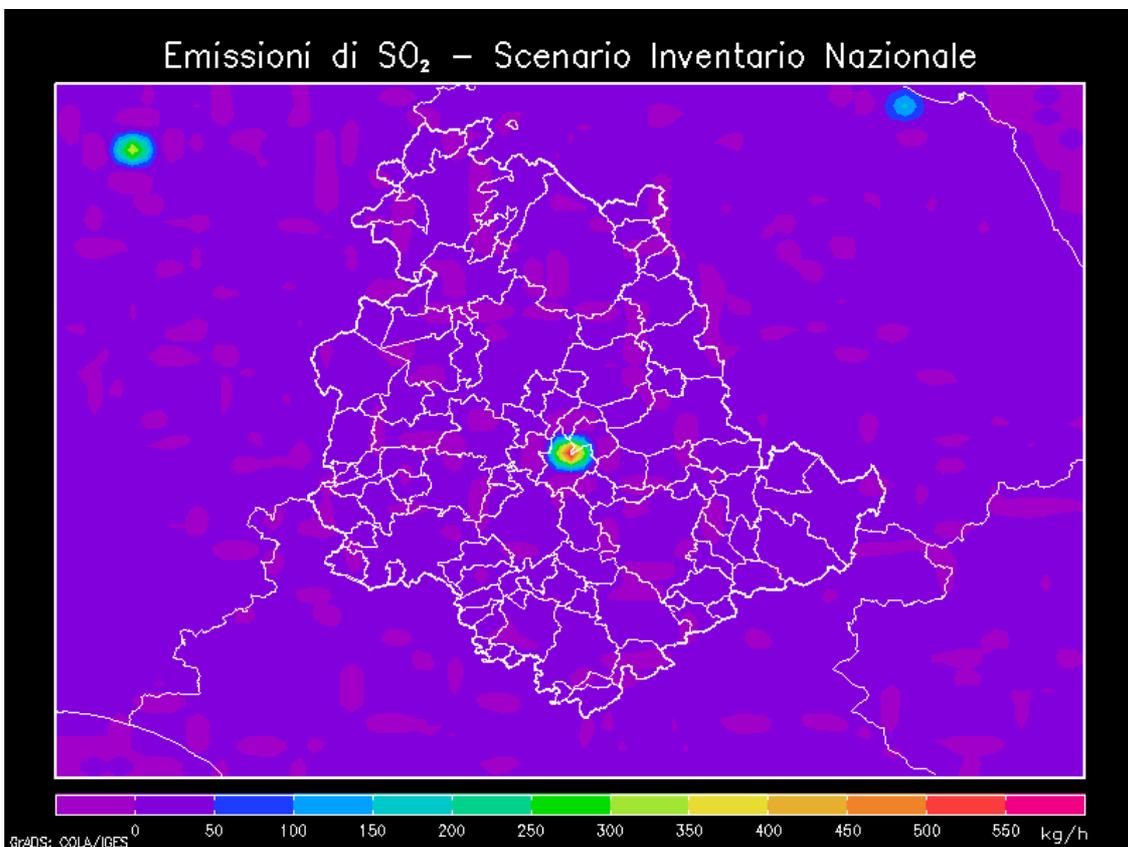


Figura 3.13: Emissioni di SO₂ Umbria – scenario inventario nazionale

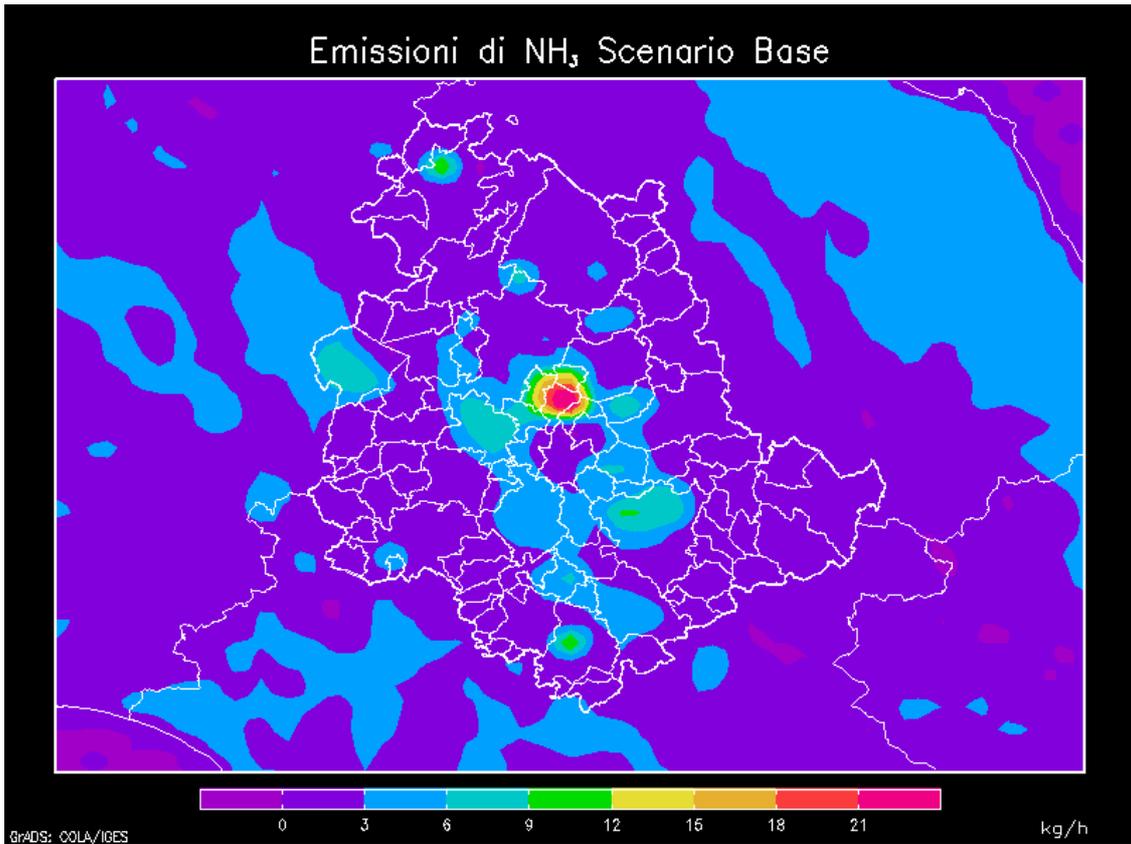


Figura 3.14: Emissioni di NH₃ Umbria – scenario base

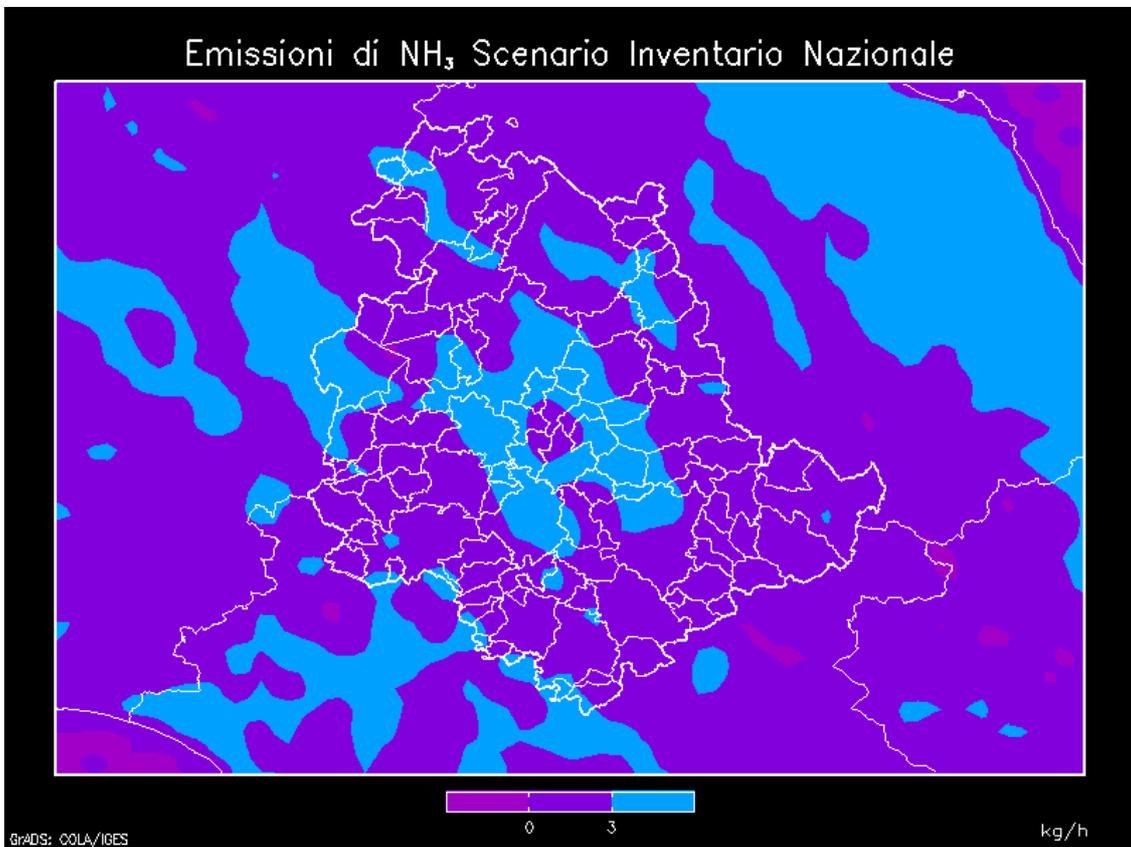


Figura 3.15: Emissioni di NH₃ Umbria – scenario inventario nazionale

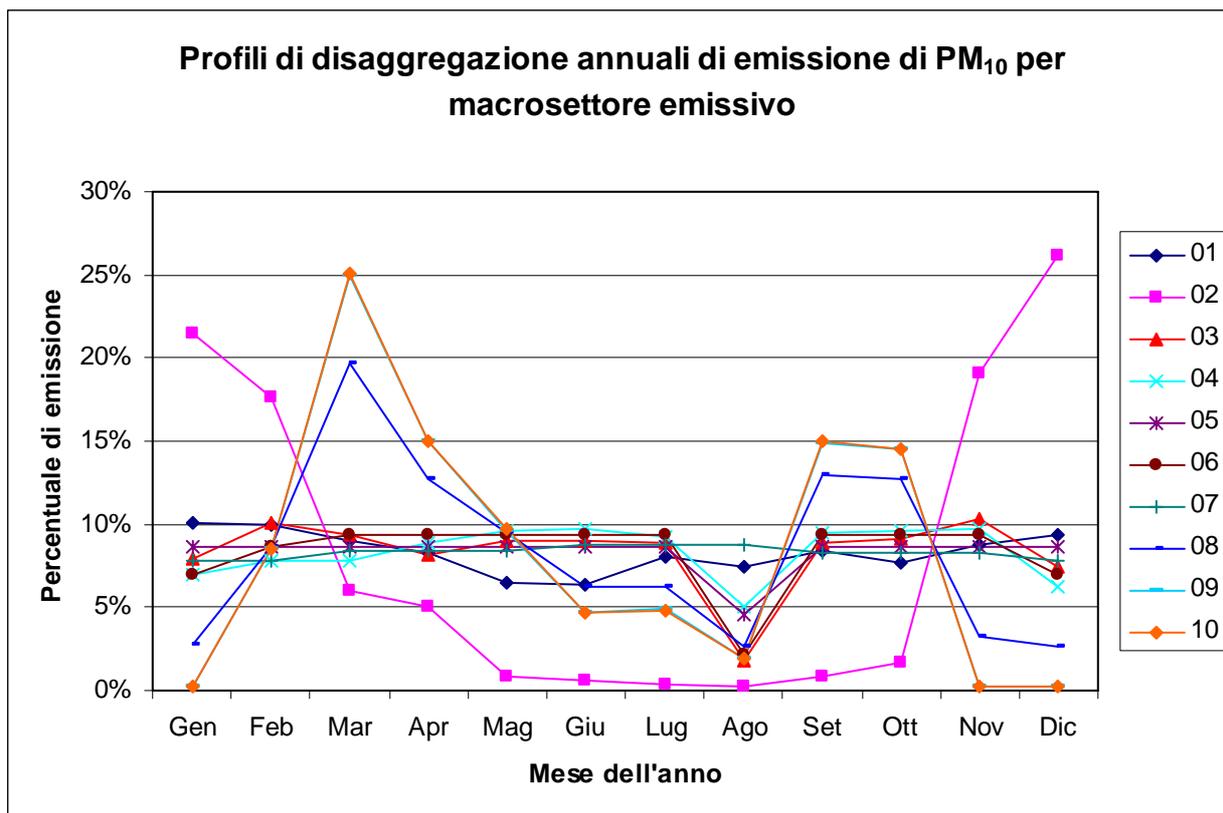


Figura 3.16: Profili di disaggregazione annuali di emissione di PM₁₀ per macrosettore emissivo

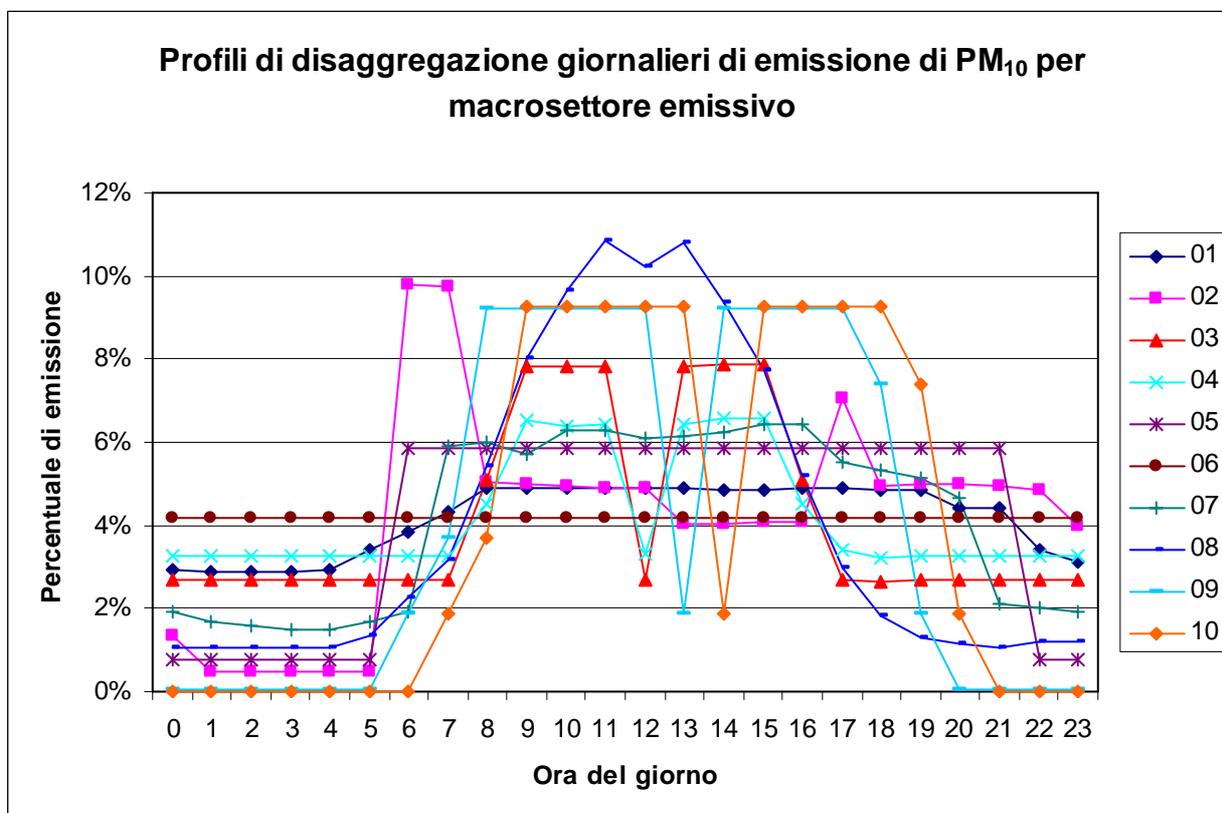


Figura 3.17: Profili di disaggregazione settimanali di emissione di PM₁₀ per macrosettore emissivo

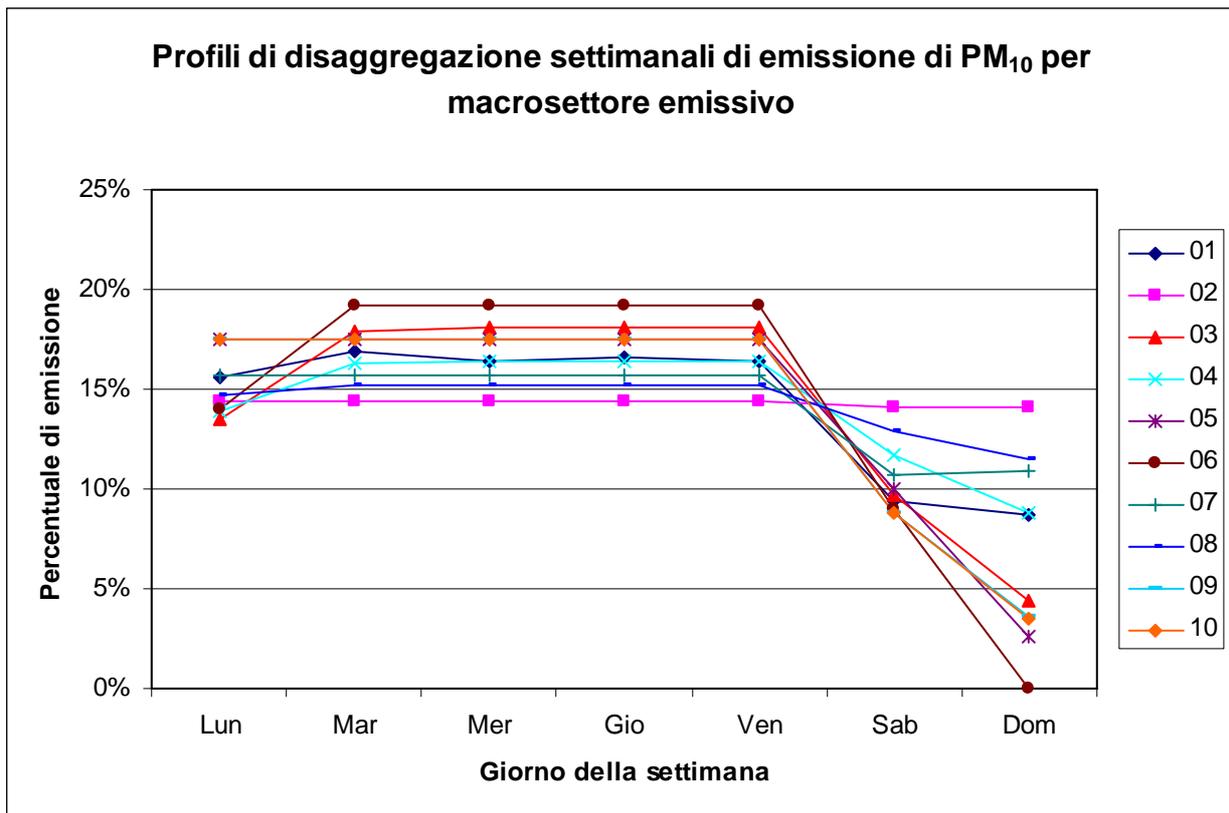


Figura 3.18: Profili di disaggregazione giornalieri di emissione di PM₁₀ per macrosettore emmissivo

3.1.3 Speciazione delle emissioni

A seguito dell'operazione di disaggregazione temporale, si ottengono le emissioni orarie per ciascuna cella del dominio per i sei inquinanti di partenza (NO_x , SO_x , PM_{10} , NH_3 , COVNM, CO) e per macrosettore emissivo.

A questo punto, occorre ottenere, partendo da questi, i corrispondenti valori d'emissione per i 20 inquinanti richiesti in input da Chimere.

Nella figura 3.19 sono mostrate le operazioni effettuate sugli inquinanti di partenza per ottenere quelli di input al modello.

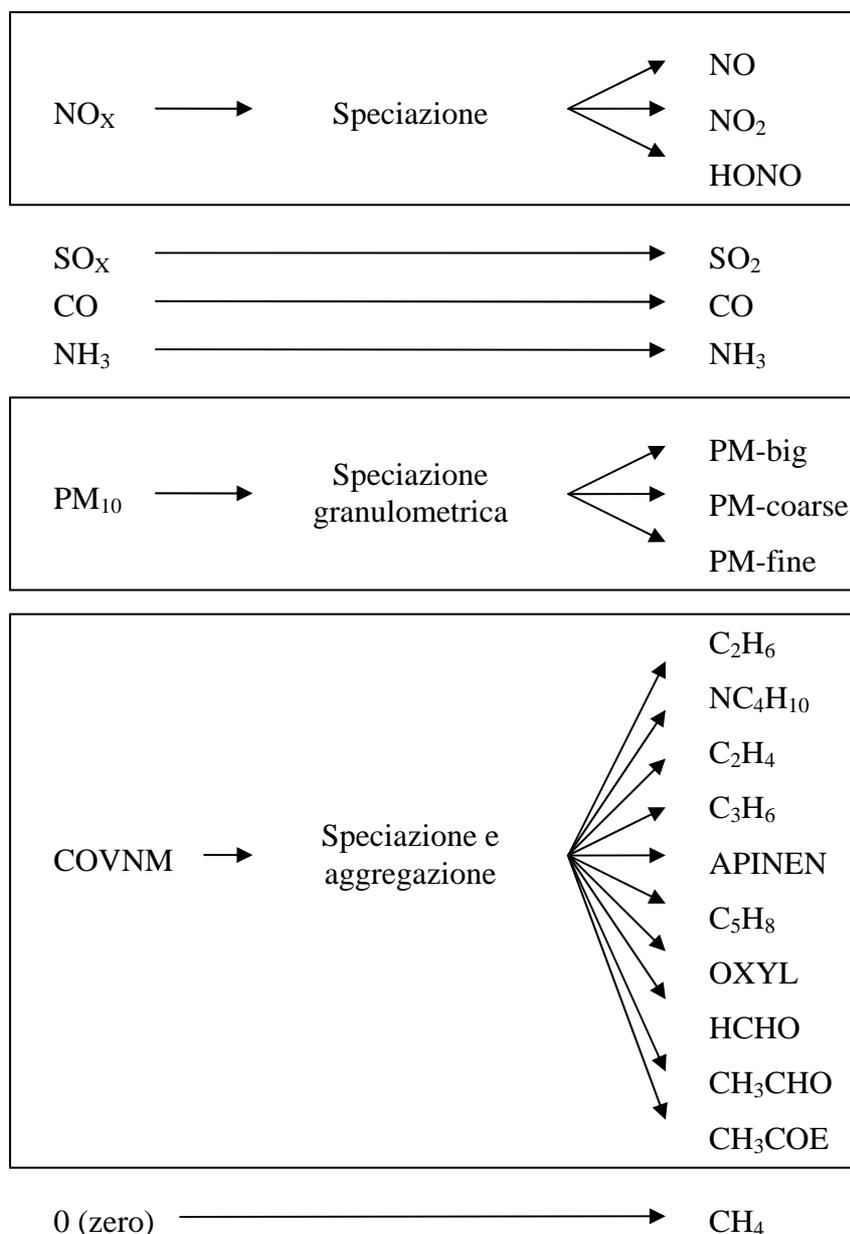


Figura 3.19: Operazioni fondamentali per passare dagli inquinanti di partenza a quelli in input al modello Chimere.

Tutte le procedure e le tabelle con i profili di assegnazione o elaborazione delle emissioni sono state tratte dai relativi algoritmi implementati nel preprocessore *emiEMEP-200601*, fornito insieme a Chimere, che opera sul database EMEP delle emissioni continentali.

Gli inquinanti SO₂, CO e NH₃ hanno una corrispondenza biunivoca con le emissioni di partenza; il metano, attualmente, non viene richiesto in input dal modello.

La speciazione di NO_x avviene secondo le proporzioni riportate nella tabella 3.2.

Tabella 3.2: Percentuali di speciazione delle emissioni di NO_x.

NO	NO ₂	HONO
90,0 %	9,2 %	0,8 %

Per quanto riguarda il particolato, il modello richiede le emissioni divise in tre diverse classi granulometriche:

1. classe *big*: $d > 10 \mu\text{m}$
2. classe *coarse*: $10 \mu\text{m} > d > 2,5 \mu\text{m}$
3. classe *fine*: $d < 2,5 \mu\text{m}$

Le emissioni originarie di PM₁₀ corrispondono alla somma delle componenti *coarse* e *fine*.

Nella figura 3.20 sono mostrati i profili di speciazione utilizzati per assegnare le emissioni di PM₁₀ alle tre classi granulometriche di input.

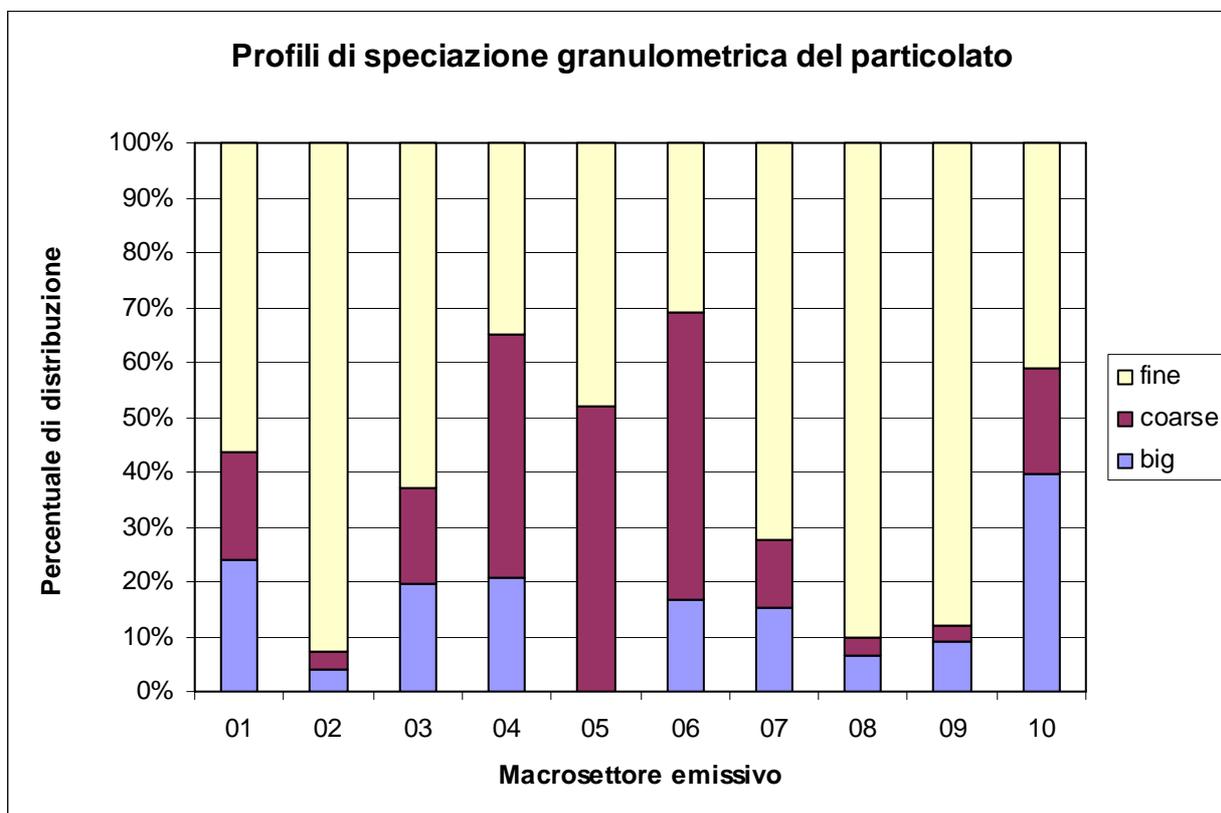


Figura 3.20: Profili di speciazione granulometrica per il particolato atmosferico.

La metodologia per l'assegnazione delle emissioni dei composti organici è leggermente più complicata: anziché utilizzare tutti gli innumerevoli composti chimici ottenibili con l'uso di una speciazione chimica dei COVNM, il modello Chimere richiede in ingresso un numero ristretto di inquinanti i quali contengono una somma di più composti chimici pesata rispetto ad un fattore di reattività chimica. Queste classi di inquinanti sono poi utilizzate, come somma di composti equivalenti, direttamente nel modello che li fa partecipare alle reazioni foto-chimiche in maniera aggregata.

Per ottenere le emissioni per queste classi di inquinanti si procede per due passaggi successivi: una speciazione e poi un'aggregazione.

La speciazione assegna le emissioni totali di COVNM per ciascun macrosettore ad una rosa di 221 composti organici diversi. Sempre secondo la procedura contenuta nel processore *emiEMEP-200601*, una volta ottenute le emissioni distribuite su questi 221 composti per ciascun macrosettore emissivo, si procede ad aggregare le emissioni di questi composti nelle 10 classi di input tramite la seguente formulazione:

$$E_j = \sum_i e_i \cdot A_{i,j} \cdot \frac{1 - e^{-r_i}}{1 - e^{-R_j}}$$

con j che va da 1 a 10 e rappresenta le classi di inquinanti, i che va da 1 a 221 e corrisponde ai composti chimici speciati, E_j sono le emissioni finali, e_i sono le emissioni dei composti speciati, $A_{i,j}$ è la matrice di aggregazione che assegna le emissioni di un composto ad una o, in pochi casi, le divide tra più classi di inquinanti, r_i è un coefficiente che rappresenta la reattività dei composti speciati e R_j è l'analogo coefficiente che rappresenta la reattività delle classi di composti.

La frazione che compare dopo la matrice di aggregazione è proprio il fattore di reattività chimica.

3.2 Input meteo

I dati meteo utilizzati sono stati forniti dal Servizio Idro Meteo Clima dell'ARPA Emilia Romagna e derivano dall'archivio meteorologico LAMA. Come già descritto nel precedente capitolo, tali dati sono stati già pre-elaborati dall'ARPA Emilia Romagna al fine di ottenere un dataset già pronto, salvo trasformazioni del formato, per l'uso con Chimere.

I dati si riferiscono all'anno 2004 e all'intero dominio di calcolo: sono quindi forniti su un grigliato 5x5 km e per gli 8 livelli verticali usati nella nostra impostazione della simulazione.

Nella tabella 3.3 sono riportati i campi di vento presenti nel dataset meteo utilizzato.

Nelle figure da 3.21 a 3.23 sono riportati degli esempi di campi meteorologici riferiti alle 13 del 5 luglio 2004 e, nel caso di campi 3D, per il livello verticale più basso.

Tabella 3.3: Tipo e numeri di livelli verticali dei parametri meteo contenuti nel dataset utilizzato per la simulazione.

Parametro	Unità di misura	Descrizione	Livelli
Alti	m	Altezza del livello	3D
Winz	m/s	Vento zonale	3D
Winm	m/s	Vento meridiano	3D
Temp	K	Temperatura	3D
Arim	molec/cm ³	Densità dell'aria	3D
Kzzz	m ² /s ²	Coefficiente di diffusione verticale al bordo superiore del livello	3D
Clwc	kg/kg	Contenuto d'acqua delle nuvole	3D
Sphu	kg/kg	Umidità specifica	3D
tem2	K	Temperatura a 2m	2m
Atte	coef. adimens.	Attenuazione dovuta alle nubi della radiazione incidente	suolo
Hght	m	Altezza del PBL	suolo
Usta	m/s	Velocità di attrito	suolo
Aerr	s/m	Resistenza aerodinamica	suolo
Obuk	m	lunghezza di Monin-Obukov	suolo
Wsta	m/s	Velocità convettiva di scala	suolo
Sreh	coef. adimens.	Umidità relativa al suolo	suolo
Topc	km/m ²	Precipitazione totale	suolo

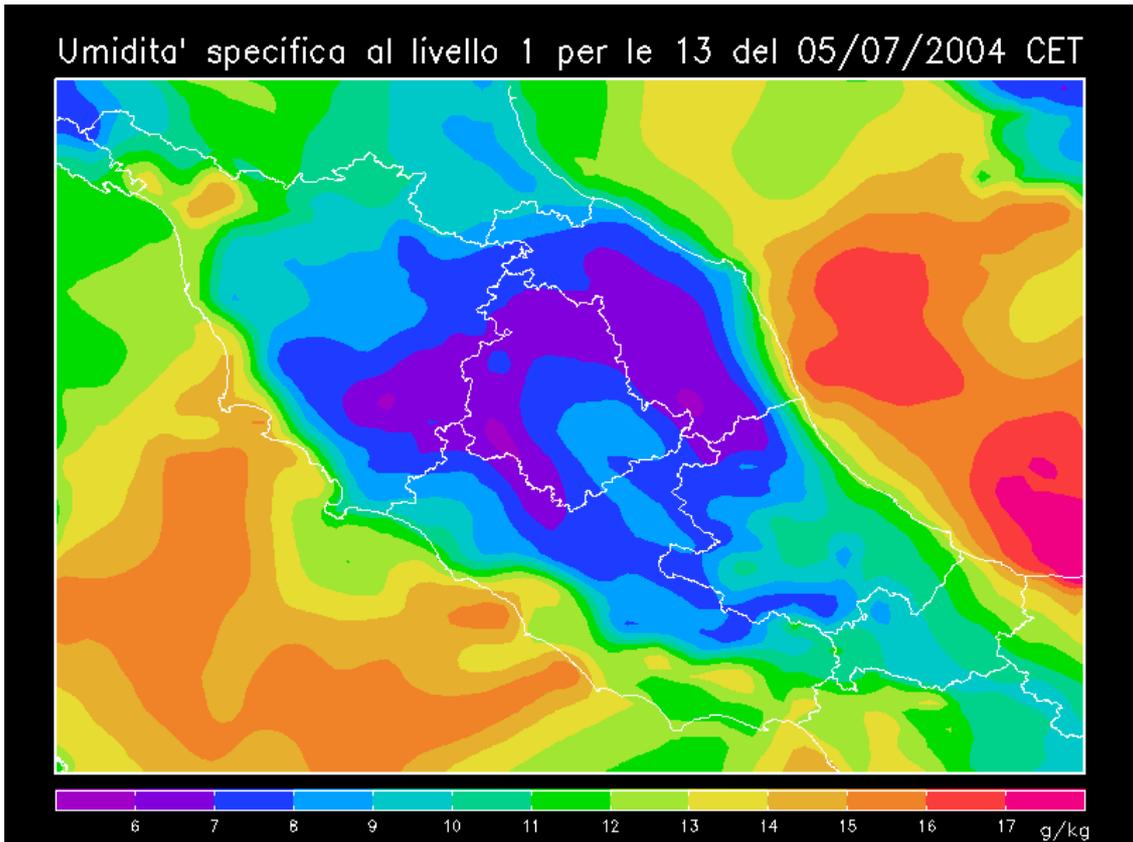


Figura 3.21: Umidità specifica al livello 1 per le ore 13 del giorno 05/07/2004

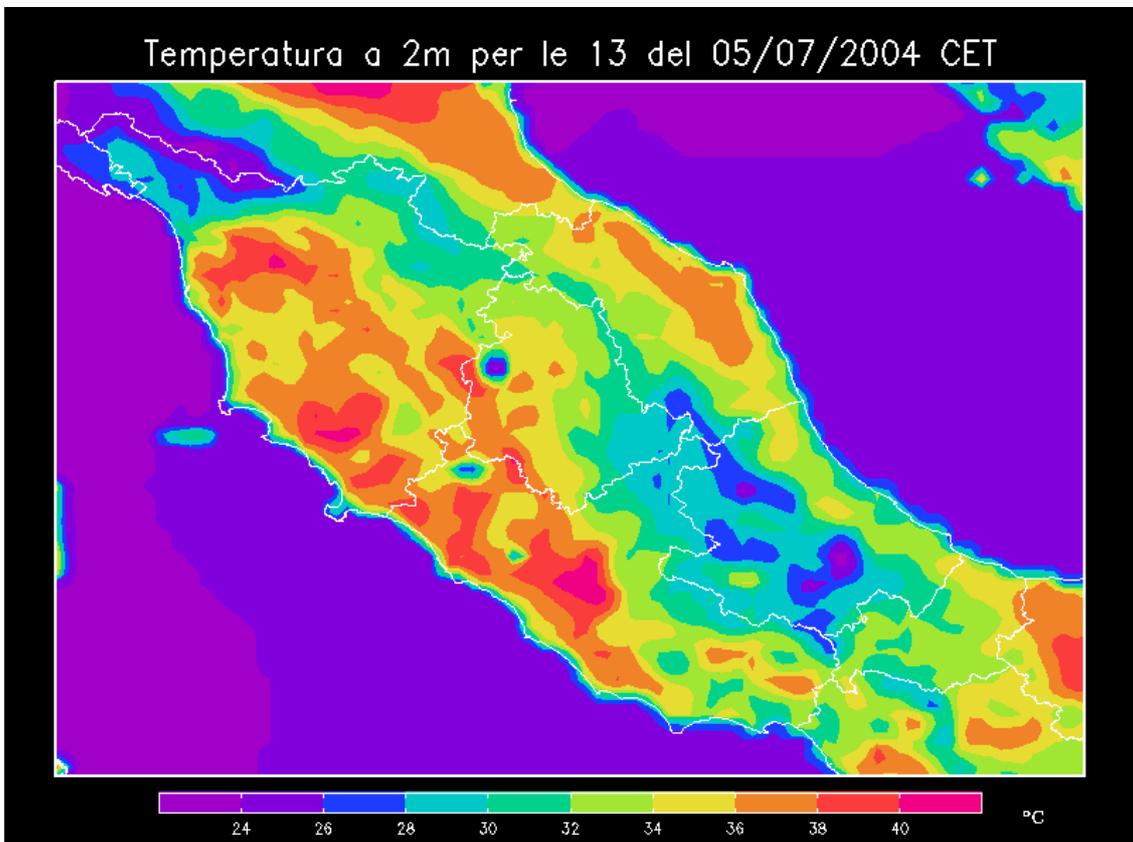


Figura 3.22: Temperatura a 2 m per le ore 13 del giorno 05/07/2004

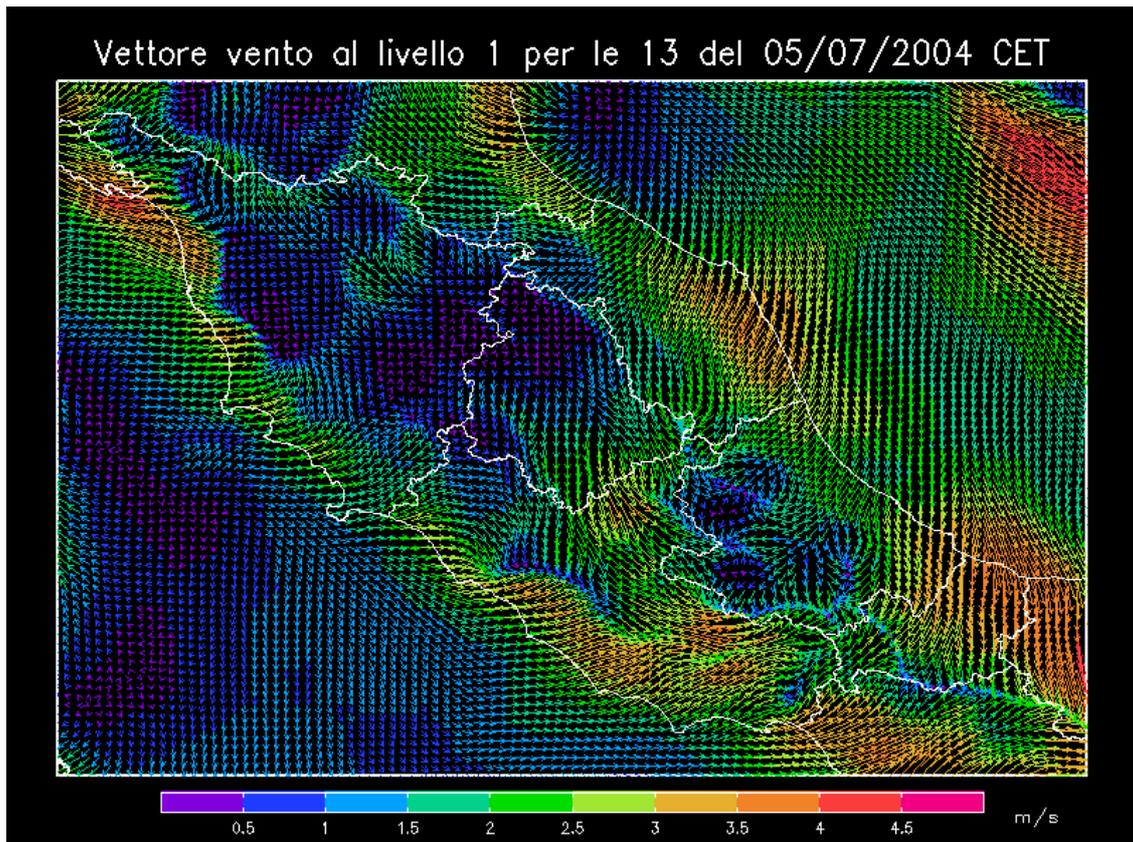


Figura 3.23: Vettore del vento al livello 1 per le ore 13 del giorno 05/07/2004

3.3 Condizioni al contorno

L'ultimo input richiesto dal modello e utilizzato per la definizione dello scenario base sono le concentrazioni degli inquinanti lungo i bordi del dominio.

Questi sono stati acquistati dal servizio francese Prev'Air e derivano dalle simulazioni quotidiane dello stesso modello Chimere adattato per un dominio di scala continentale con una risoluzione di mezzo grado.

Nella figura 3.24 è mostrato in rosso il nostro dominio di calcolo e in blu le celle del reticolo implementato da Prev'Air che sono stati acquistati come condizioni al contorno. Tali dati contengono le concentrazioni dei 76 inquinanti utilizzati internamente dal modello chimico di Chimere. A partire da questi valori, i due preprocessore delle condizioni al contorno di Chimere (ovvero, *preptop_Chimere.e* e *preplat_Chimere.e*) estraggono i valori di concentrazioni sui bordi richiesti in input.

Nelle figure 3.25 e 3.26 sono riportati degli esempi di concentrazioni di O₃ e di PM₁₀ per le ore 13 del 5 luglio 2004.

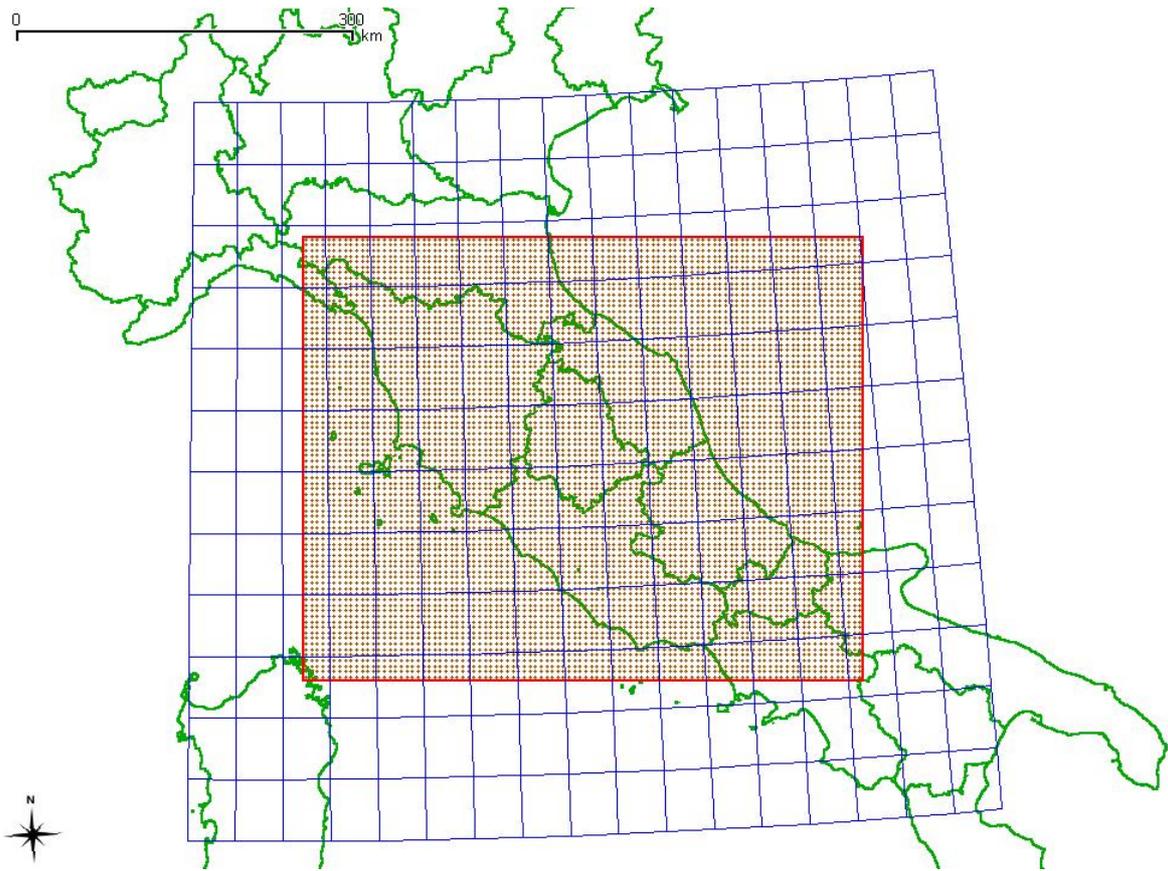


Figura 3.24: Dominio di calcolo sovrapposto al grigliato dei dati con le condizioni al contorno.

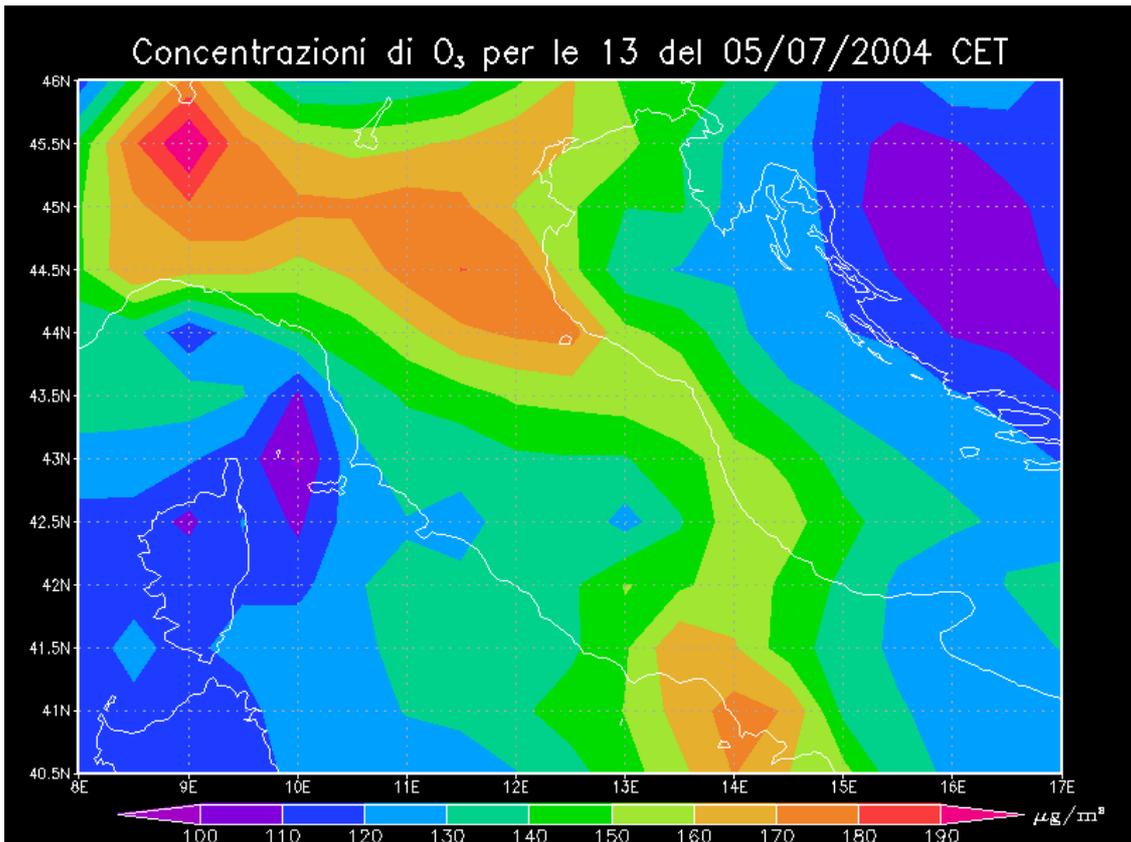


Figura 3.25: Concentrazione di O₃ per le ore 13 del giorno 05/07/2004.

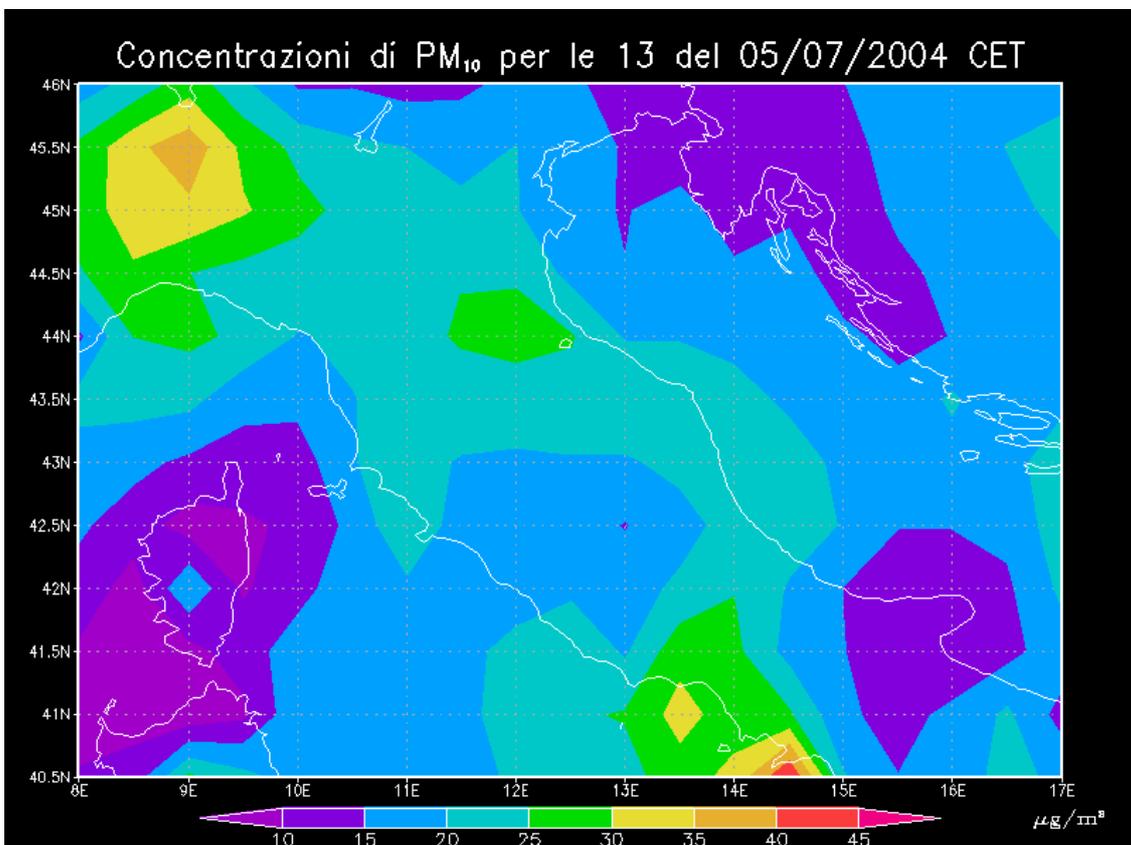


Figura 3.26: Concentrazione di PM₁₀ per le ore 13 del giorno 05/07/2004.

4. Valutazione del modello

Per poter impiegare il modello di diffusione e trasformazione chimico-fisica realizzato in ARPA Umbria per la valutazione e la gestione della qualità dell'aria, occorre prima analizzare l'affidabilità dei risultati.

Per far ciò, sono state confrontate le concentrazioni orarie di inquinanti misurati da alcune stazioni fisse della Rete Regionale di Monitoraggio della qualità dell'aria e le corrispondenti concentrazioni orarie stimate del modello. Per rendere quantitativo tale confronto, si sono utilizzati alcuni indici statistici di performance applicati ai risultati della simulazione dello scenario base, ovvero con i dati del 2004 e considerando per l'Umbria le emissioni contenute nell'Inventario Regionale.

Oltre a questi, sono stati calcolati altri indicatori descrittivi delle serie di dati simulati, come la media matematica, la mediana e alcuni valori percentili in quanto tali indicatori sono presenti nella normativa tecnica anche se solo per alcuni inquinanti.

4.1 Indici statistici per il confronto

La valutazione del modello si basa sul calcolo di indici statistici di performance che hanno lo scopo di mostrare e quantificare l'accordo che esiste tra i dati reali misurati da centraline di misura della qualità dell'aria e i dati ottenuti dalla simulazione.

I risultati del modello sono le concentrazioni degli inquinanti per ogni cella 5x5 km del grigliato. Dato che non tutte le centraline di qualità dell'aria sono posizionate vicino al centro di una cella, i valori estratti dal modello per effettuare i confronti sono stati interpolati bilinearmente rispetto al punto ove è posizionata la stazione di misura. I dati orari così ottenuti sono stati confrontati con le misure disponibili delle stazioni fisse¹.

Va sottolineato che comunque, il modello fornisce valori di concentrazione degli inquinanti che sono omogenei e in equilibrio chimico all'interno di ciascuna cella la quale, orizzontalmente, ha un'area di 25 km²; pertanto, il modello non è in grado di riprodurre dettagli di scala inferiori come le dinamiche degli *street canyon* o i gradienti marcati tra concentrazioni registrate a bordo strada e concentrazioni registrate nei parchi urbani. Questo, come descritto di seguito, rende meno confrontabili i dati simulati da quelli misurati in quelle stazioni fisse che sono posizionate in un canyon urbano o sono molto prossime alle sorgenti e, quindi, poco rappresentative di aree più vaste.

Le analisi ed i confronti effettuati sono stati realizzati tramite il calcolo di alcuni indici statistici descrittivi delle due serie di dati (media, mediana, percentili) e di confronto e valutazione delle

¹ Al fine di confrontare valori temporalmente corrispondenti, è stato necessario effettuare uno shift orario dei dati registrati dalle centraline. Le centraline della Provincia di Perugia assegnano la misura di un'ora all'istante finale e, quindi, all'ora successiva. Inoltre, l'orario nel 2004 era comprensivo dell'ora legale (quindi un'ora avanti al CET). Alla fine dei conti, per ritornare all'UTC, occorre sottrarre 3 ore. Per le centraline della Provincia di Terni, invece, lo shift utilizzato è pari ad un'ora.

performance (BIAS, FB, NMBF, ecc), al fine di comparare l'andamento temporale e spaziale medio e quello dei picchi massimi e minimi delle distribuzioni per ottenere una valutazione più esaustiva possibile.

Inoltre, sono stati realizzati dei grafici con insieme i valori simulati e misurati di due settimane per l'ozono ed il biossido di azoto e di due mesi per il PM₁₀: questo, al fine di ottenere un confronto visivo dell'andamento delle due distribuzioni in esame sia nel periodo estivo che in quello invernale. Graficare una sola settimana facilita il confronto che, se si fosse utilizzato un intero anno, sarebbe risultato graficamente più confuso e con differenze tra i dati misurati e simulati più complicate da apprezzare. La settimana estiva è la prima di luglio (05/07/2004 – 11/07/2004), mentre quella invernale è la prima di febbraio (02/02/2004 – 08/02/2004). Entrambe le settimane vanno dal lunedì alla domenica, comprendendo, quindi, un'intera settimana lavorativa. Per quanto riguarda il PM₁₀ i mesi sono quelli di luglio e febbraio.

Le stazioni fisse utilizzate nel confronto sono quelle della Rete Regionale della Qualità dell'Aria che, nel 2004, erano presenti e funzionanti e misuravano gli inquinanti richiesti. Nella tabella 4.1 sono riportate in modo sintetico le caratteristiche delle stazioni scelte e in figura 4.1 viene riportata una carta geografica della Regione Umbria con l'indicazione del reticolo del dominio del modello di calcolo e l'ubicazione delle stazioni di misura considerate.

Benché la simulazione riguardi tutto il territorio regionale, il confronto è possibile solo nelle aree dove sono presenti stazioni fisse. Le zone considerate sono due, una nel territorio del comune di Perugia, denominata area metropolitana di Perugia, e l'altra nel territorio dei comuni di Terni e Narni, Conca Ternana.

Nell'area metropolitana di Perugia sono presenti le stazioni di Cortonese (COR), Fontivegge (FON) e Ponte San Giovanni (PSG). Le prime due ricadono nella stessa cella del dominio, sono entrambe in zona urbana ma hanno una diversa classificazione rispetto all'area che rappresentano: la stazione Cortonese è di tipo suburbano mentre Fontivegge è una stazione di tipo urbano da traffico. Nella stessa area metropolitana, ma in un'altra cella del dominio di calcolo si trova la stazione di Ponte San Giovanni: è presente già a partire dal 1998 è collocata in località Ponte San Giovanni, in zona suburbana ed è di tipo urbana da traffico. Tale classificazione è, ovviamente, legata alla sua collocazione in una zona non nelle immediate vicinanze delle sorgenti di emissioni (in particolare del traffico), ma in una zona comunque interessata dalla presenza di strade ad alta percorrenza come ad esempio il raccordo della E45. Pertanto, il posizionamento della stazione di Ponte San Giovanni è tale da essere meglio confrontabile con quanto stimato dal modello rispetto alla stazione di Fontivegge, ma peggiore rispetto alla stazione Cortonese, le cui caratteristiche di collocamento sono quelle che meglio si avvicinano alle caratteristiche utilizzate dal modello.

Nell'area della Conca Ternana, ovvero nei Comuni di Terni e Narni, nel 2004 erano presenti cinque stazioni fisse di misura della qualità dell'aria.

Queste stazioni sono tutte situate in area urbana con un grosso comparto industriale e, pertanto, sono influenzate principalmente da sorgenti emissive come il traffico e l'industria. La stazione di Narni (NAR) è posizionata a Narni Scalo vicino alla stazione ferroviaria e a impianti industriali,

ovvero in un'area urbana con presenza di traffico veicolare e di emissioni da insediamenti industriali; la stazione di Borgo Rivo (BOR) si trova a Terni nel cortile di una scuola ed è interessata dalle emissioni del Polo industriale di Maratta. Sempre a Terni, è situata la stazione Carrara (CAR) situata in prossimità di un ponte stradale in zona urbana con alta presenza di traffico; la stazione Verga (VER) è collocata all'interno del cortile di una scuola di Terni, in zona urbana e non è influenzata direttamente dal traffico, né da sorgenti rilevanti. Infine, la stazione di Le Grazie (GRA) è situata all'interno dello spazio verde di una scuola sempre della città di Terni e non è influenzata direttamente dal traffico, né da altre sorgenti rilevanti.

Tabella 4.1: Descrizione delle stazioni fisse considerate nel confronto con i dati stimati

Comune	Nome Stazione - Abbreviazione	Indirizzo	Tipo Stazione	Tipo Zona	Descrizione del sito
Perugia	CORTONESE - COR	Parco Cortonese	Fondo	Urbana	Stazione collocata all'interno di un parco cittadino, a distanza di circa 500 metri da strade e abitazioni.
Perugia	FONTIVEGGE - FON	Via Mario Angeloni	Traffico	Urbana	Stazione collocata davanti alla stazione ferroviaria di Perugia in zona altamente trafficata nelle immediate vicinanze di una strada a alta percorrenza
Perugia	P.S.GIOVANNI - PSG	Via Della Scuola	Traffico	Suburbana	Stazione collocata all'interno di un cortile in zona urbana non influenzata direttamente dal traffico, né da sorgenti rilevanti ma in una zona comunque interessata dalla presenza di strade ad alta percorrenza come ad esempio il raccordo della E45
Terni	CARRARA - CARR	Ponte Carrara	Traffico	Urbana	Stazione collocata in prossimità di un ponte stradale in zona urbana con alta presenza di traffico
Narni	NARNI SCALO - NAR	Via Tuderte	Industriale	Suburbana	Stazione collocata vicina alla stazione ferroviaria e ad impianti industriali, ovvero in un'area urbana con presenza di traffico veicolare e delle emissioni degli insediamenti industriali
Terni	VIA VERGA - VER	Via Verga	Traffico	Urbana	Stazione collocata all'interno del cortile di una scuola in zona urbana non influenzata direttamente dal traffico, né da sorgenti rilevanti
Terni	BORGO RIVO - BOR	Via dell'Aquila	Industriale	Suburbana	Stazione collocata nel cortile di una scuola è interessata dalle emissioni del Polo industriale di Maratta
Terni	LE GRAZIE - GRA	Via Benedetto Croce	Traffico	Urbana	Stazione collocata all'interno dello spazio verde di una scuola non influenzata direttamente dal traffico, né da sorgenti rilevanti

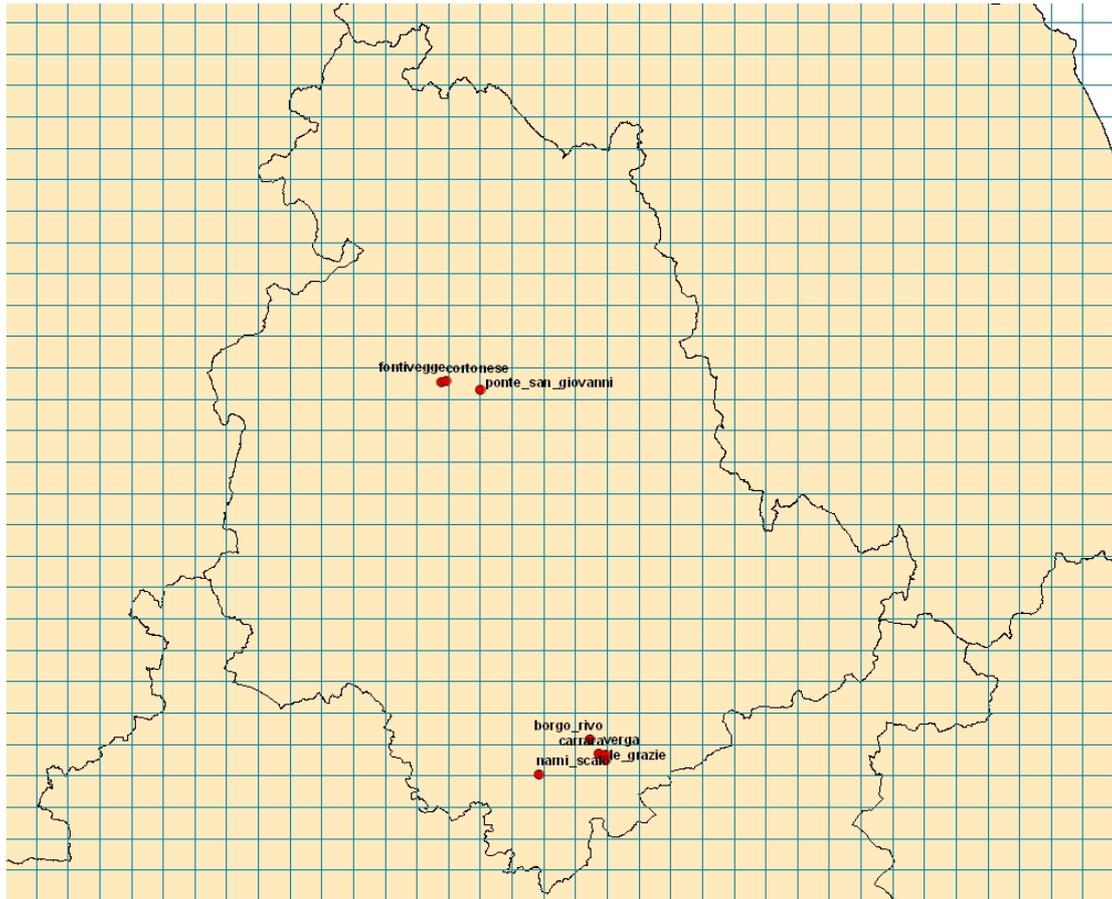


Figura 4.1: Carta geografica della Regione Umbria con le celle del dominio di simulazione e il posizionamento delle stazioni fisse

Gli indici utilizzati per confrontare i risultati e valutarne le performance sono alcuni dei principali indici statistici solitamente utilizzati a questo scopo.

Di seguito viene descritto il loro significato e la formulazione utilizzata:

- **BIAS**: è la differenza tra il valore atteso e quello della quantità oggetto di stima; in questo caso è la differenza tra i valori medi misurati e stimati con il modello. L'indice è dimensionale ed è espresso in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ e la formula per il calcolo è mostrata di seguito:

$$BIAS = m_{simulazione} - m_{centralina}$$

dove:

- $m_{simulazione}$ valore medio della distribuzione dei dati di concentrazione dell'inquinante derivanti dalla simulazione, espresso in $\mu\text{g}/\text{m}^3$;
 - $m_{centralina}$ valore medio della distribuzione dei dati di concentrazione dell'inquinante misurati dalla stazione fissa, espresso in $\mu\text{g}/\text{m}^3$.
- **Fractional Bias (FB)**: indica la tendenza in media del modello alla sottostima o alla sovrastima; è un indice simmetrico (pesa allo stesso modo la sovrastima e la sottostima), adimensionale e assume valori compresi tra $[-2,2]$ con valore ottimale zero. Esso si calcola attraverso la seguente formula:

$$FB = \frac{2 \cdot BIAS}{m_{simulazione} + m_{centralina}}$$

- Normalised Mean Bias Factor (NMBF): nel FB la quantità simulata è confrontata non solo con l'osservazione ma con la media tra quantità osservate e simulate e questo può generare difficoltà interpretative, superabili con l'introduzione di NMBF, che è la misura del fattore di sottostima o sovrastima del modello rispetto alle osservazioni; questo è un indice simmetrico, adimensionale e con valore ottimale zero. Il calcolo del valore dell'indice NMBF si effettua in dipendenza dello scarto tra i valori medi delle distribuzioni considerate nel seguente modo:

$$NMBF = \begin{cases} \frac{BIAS}{m_{simulazione}}; & se(m_{simulazione} - m_{centralina}) < 0 \\ \frac{BIAS}{m_{centralina}}; & se(m_{simulazione} - m_{centralina}) > 0 \end{cases}$$

- Root Mean Square Error (RMSE): fornisce una misura delle dimensioni degli errori prodotti dal modello. È asimmetrico, non negativo, dimensionale (espresso in $\mu\text{g}/\text{m}^3$) e con valore ottimale zero. Il calcolo si effettua computando i singoli valori delle distribuzioni nel seguente modo:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_{i,simulazione} - x_{i,centralina})^2}{n}}$$

dove:

- $x_{i,simulazione}$ valore (orario o giornaliero) della distribuzione dei dati di concentrazione di inquinante derivanti dalla simulazione attraverso il codice di calcolo, espresso in $\mu\text{g}/\text{m}^3$;
 - $x_{i,centralina}$ valore (orario o giornaliero) della distribuzione dei dati di concentrazione di inquinante derivanti dalla registrazione della stazione fissa, espresso in $\mu\text{g}/\text{m}^3$;
 - n numero di dati (orari o giornalieri) della distribuzione.
- NMSE: stima gli scarti complessivi tra i valori osservati e quelli simulati. Esso è definito come:

$$NMSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{(x_{i,simulazione} - x_{i,centralina})^2}{m_{simulazione} \cdot m_{centralina}}$$

Contrariamente al BIAS, nell'indice NMSE vengono sommati gli scarti (in valore assoluto) invece delle differenze. Per questo motivo, l'indice NMSE generalmente mostra le differenze singolari tra i modelli. Se il modello ha un basso valore dell'indice NMSE, allora esso ha una buona performance sia spaziale che temporale. D'altra parte, alti valori di NMSE non

significano necessariamente che il modello sia completamente sbagliato ma possono dipendere da uno shift temporale e/o spaziale.

Inoltre, deve essere puntualizzato che le differenze nei valori di picco hanno un peso maggiore per l'indice NMSE che le differenze degli altri valori.

Questo indice è adimensionale e ha come valore ottimale zero.

- Index Of Agreement (IOA): è la misura della capacità del modello di simulare la variazione intorno alla media osservata. È non negativo, adimensionale, con valore ottimale 1 e con valori superiori a 0,5 considerati buoni. Il calcolo si effettua come mostrato di seguito:

$$IOA = 1 - \frac{n \cdot RMSE^2}{\sum_{i=1}^n \left(|x_{i,simulazione} - m_{centralina}| + |x_{i,centralina} - m_{centralina}| \right)^2}$$

- Coefficiente di correlazione (R): misura il grado e il segno di correlazione lineare tra osservato e simulato; assume valori compresi tra [-1, 1], il valore zero indica assenza di correlazione lineare tra le due variabili.

$$R = \frac{\sigma_{simulazione / centralina}}{\sigma_{simulazione} \cdot \sigma_{centralina}}$$

dove:

- $\sigma_{simulazione}$ deviazione standard della distribuzione dei dati di concentrazione di inquinante derivanti dalla simulazione attraverso il codice di calcolo, espresso in $\mu\text{g}/\text{m}^3$;
 - $\sigma_{centralina}$ deviazione standard della distribuzione dei dati di concentrazione di inquinante derivanti dalla registrazione della stazione fissa, espresso in $\mu\text{g}/\text{m}^3$;
 - $\sigma_{simulazione / centralina}$ covarianza tra la distribuzione dei dati derivanti dalla simulazione e quelli direttamente registrati dalla stazione fissa, espresso in $\mu\text{g}/\text{m}^3$.
- SKILL-VAR: è il rapporto tra le deviazioni standard simulate e misurate, fornisce informazioni sulla capacità del modello di riprodurre la variabilità delle osservazioni; è un indice adimensionale, sempre positivo con valore ottimale uno.

$$SKILL - VAR = \frac{\sigma_{simulazione}}{\sigma_{centralina}}$$

- MG: insieme all'indice FB è la misura del bias relativo medio e indica solo gli errori sistematici, quindi quelli dovuti presumibilmente al modello. Tale indice varia tra 0 e infinito, con valore

ottimale pari a 1. I valori minori di 1 indicano una sovrastima del modello, viceversa, i valori maggiori a 1 indicano una sottostima:

$$MG = \exp(\ln m_{centralina} - \ln m_{simulazione})$$

- VG: insieme all'indice NMSE la dispersione relativa media, riflettendo sia gli errori sistematici, che quelli non sistematici (dovuti a errori casuali e ad errori sulle condizioni iniziali). Esso è la varianza di MG, è sempre positivo, con valore ideale pari ad 1.

$$VG = \exp\left[(\ln m_{centralina} - \ln m_{simulazione})^2\right]$$

Non tutti gli indici statistici presentati sono stati utilizzati per i medesimi inquinanti nella valutazione del modello presentata nei paragrafi successivi. L'analisi, infatti, è stata svolta distintamente per ogni inquinante considerato e, quindi, gli indici impiegati sono diversi per ogni confronto e tali da adattarsi a spiegare, nel miglior modo possibile, il comportamento che ogni inquinante ha in atmosfera, legato alla differente natura fisico chimica dell'inquinante stesso.

4.2 Confronto ozono

La normativa nazionale sull'ozono troposferico, in particolare il D.Lgs. 183/02, individua come informazioni da utilizzare nelle valutazioni, oltre agli indici di legge, anche la media annua, il 99.9° percentile, il 98° percentile e il 50° percentile. Pertanto, per il confronto tra dati misurati e dati stimati sono stati inoltre utilizzati questi indici e la media annua.

Inoltre, sono stati riportati alcuni grafici di confronto dei dati simulati e misurati per una settimana tipo scelta nel mese di luglio.

Di seguito sono riportate le analisi per le stazioni fisse attive nell'area metropolitana di Perugia e nella Conca Ternana in cui nel 2004 erano presenti analizzatori di ozono.

Area metropolitana di Perugia

Nel 2004, nell'area metropolitana di Perugia, erano installate tre stazioni con un sistema di misura dell'ozono troposferico, ovvero le stazioni di Perugia Cortonese (COR), Fontivegge (FON) e Ponte San Giovanni (PSG).

Nella tabella 4.2 sono riportati, per ciascuna stazione, i risultati degli indici statistici. Analizzando tali dati si nota che il coefficiente di correlazione lineare (R) è molto vicino al valore ottimale: infatti, i valori sono compresi tra 0,79 e 0,64. Pertanto, è possibile affermare che valori stimati e misurati sono correlati linearmente tra loro.

Le stazioni di Cortonese e Ponte San Giovanni risultano meglio correlate di quella di Fontivegge. Questo è quanto ci si poteva aspettare vista la differente tipologia delle stazioni: infatti, la stazione FON, al contrario delle altre due, si trova proprio a ridosso della strada e, quindi, le grandi emissioni di NO_x nei pressi di questa tendono a ridurre localmente le concentrazioni in aria di ozono. Perciò, i valori misurati di O₃ sono rappresentativi solo dell'area dove è situata la centralina e non certo di una paragonabile all'estensione della cella del dominio di calcolo. Questo fenomeno è confermato anche dalla media annua dei valori misurati nelle tre stazioni e riportata nella tabella 4.3. Ciononostante, anche la correlazione tra i dati per la centralina FON è buona.

L'utilizzo dell'inventario nazionale o regionale, infine, evidenzia poche differenze e questo può essere imputabile alle dinamiche a larga scala dell'ozono in quanto inquinante secondario.

Tabella 4.2: Indicatori statistici valori stimati con il modello Chimere per O₃ nell'area metropolitana di Perugia

Indici	Unità di misura	Valore ottimale indice	Inventario nazionale	Inventario regionale
Stazione Cortonese				
R	adimensionale	1	0,76	0,74
FB	adimensionale	0	0,06	0,10
NMBF	adimensionale	0	0,07	0,11
SKILL-VAR	adimensionale	1	0,91	0,86
NMSE	adimensionale	0	0,18	0,19
Stazione Fontivegge				
R	adimensionale	1	0,64	0,64
FB	adimensionale	0	0,57	0,59
NMBF	adimensionale	0	0,80	0,83
SKILL-VAR	adimensionale	1	1,28	1,23
NMSE	adimensionale	0	0,70	0,70
Stazione Ponte San Giovanni				
R	adimensionale	1	0,79	0,76
FB	adimensionale	0	0,36	0,36
NMBF	adimensionale	0	0,44	0,44
SKILL-VAR	adimensionale	1	1,05	1,02
NMSE	adimensionale	0	0,33	0,34

Analizzando gli altri indici della tabella 4.2, si osserva che :

- FB e NMBF, i coefficienti che descrivono la sovrastima o la sottostima del modello, emerge una generale sovrastima. I valori riferiti a Cortonese indicano una leggerissima sovrastima con valori degli indici molto prossimi allo zero sia per il confronto con i dati dell'inventario nazionale che per quello regionale. Per Ponte San Giovanni e Fontivegge, invece, la sovrastima è più significativa, di circa un ordine di grandezza nel caso dell'utilizzo dell'inventario nazionale e leggermente più contenuta nell'utilizzo di quello regionale, mantenendo valori migliori per la stazione di PSG. Questo è sempre imputabile alla differente collocazione delle stazioni una, COR, in zona verde lontana da sorgenti dirette di emissioni; l'altra, FON, in zona altamente trafficata nelle immediate vicinanze di una strada a alta percorrenza la terza, PSG, all'interno di un cortile.
- SKILL-VAR: questo coefficiente è in linea con l'andamento degli altri. La simulazione applicata a Cortonese e Ponte San Giovanni riportano valori migliori rispetto a Fontivegge anche se tutti risultano molto vicini al valore ottimale del coefficiente sia per l'implementazione effettuata con l'inventario nazionale che con quello regionale. La buona capacità da parte del modello di riprodurre l'andamento temporale dell'inquinante rispetto al dato misurato è confermata anche dal confronto dei dati orari riportati nelle figure 4.2, 4.3 e 4.4.
- NMSE: per tutte le stazioni l'indice è buono con la stazione Cortonese che ha il migliore accordo. Il modello sembrerebbe avere una buona performance sia spaziale che temporale.

Se confrontiamo il BIAS calcolato per media e percentili (tabella 4.3) si osserva subito che lo scarto tra i valori stimati e misurati è paragonabile. Per la stazione Cortonese le differenze sono tutte inferiori al 11 % ed addirittura pari allo 0% se confrontiamo il 98° percentile.

Tabella 4.3: Valori orari di O₃ mediati nell'anno confronto tra misure e stime nell'area metropolitana di Perugia

Indici	Unità di misura	Stazione	Inventario nazionale	Inventario regionale
Stazione Cortonese				
Media	µg/m ³	57,9	61,7	64,1
BIAS	µg/m ³		3,8	6,2
99° Percentile	µg/m ³	157,4	172,2	171,3
BIAS	µg/m ³		14,8	13,9
98° Percentile	µg/m ³	133,4	133,4	133,5
BIAS	µg/m ³		0	0,1
50° Percentile	µg/m ³	57,9	62,5	63,6
BIAS	µg/m ³		4,6	5,7
Stazione Fontivegge				
Media	µg/m ³	32,8	59	60
BIAS	µg/m ³		26,2	27,2
99° Percentile	µg/m ³	119,6	164,1	164,2
BIAS	µg/m ³		44,5	44,6
98° Percentile	µg/m ³	93,4	130,2	129,7
BIAS	µg/m ³		36,8	36,3
50° Percentile	µg/m ³	28,4	59,9	59,6
BIAS	µg/m ³		31,5	31,2
Stazione Ponte San Giovanni				
Media	µg/m ³	40,4	58,2	58,1
BIAS	µg/m ³		17,8	17,7
99° Percentile	µg/m ³	125,8	173	171,6
BIAS	µg/m ³		47,2	45,8
98° Percentile	µg/m ³	108,7	132,9	132,1
BIAS	µg/m ³		24,2	23,4
50° Percentile	µg/m ³	36	57,2	56,7
BIAS	µg/m ³		21,2	20,7

Questo può essere interpretato come una ottima concordanza dei dati in media nel corso dell'anno anche se i singoli dati orari possono presentare delle differenze più consistenti. Questo è anche confermato dal confronto grafico tra i dati orari misurati e stimati (figura 4.2). Va inoltre sottolineato che il confronto rimane praticamente invariato sia se si usa l'inventario nazionale che quello regionale.

Per la stazione Fontivegge si conferma quanto già visto con i precedenti indici, ovvero una peggiore concordanza tra i valori misurati e quelli stimati per entrambe le stime. Infatti la sovrastima, evidente anche nel grafico di figura 4.3, fa sentire il suo peso sia quando si confrontano i singoli dati orari che quando si confrontano dati mediati in particolar modo nel 50° percentile (o mediana) in cui si ha una differenza di oltre il 100%.

Anche per la stazione di Ponte San Giovanni, quanto evidenziato dagli indici statistici di cui sopra è confermato dalle medie e percentili e i relativi BIAS riportati in tabella 4.3. Infatti, si osserva subito che lo scarto tra i valori stimati e misurati è paragonabile, le differenze sono tra il 20 % e il 60 %. Questo può essere interpretato come una buona concordanza dei dati in media nel corso dell'anno anche se i singoli dati orari possono presentare delle differenze più consistenti soprattutto i massimi ed i minimi (figura 4.4).

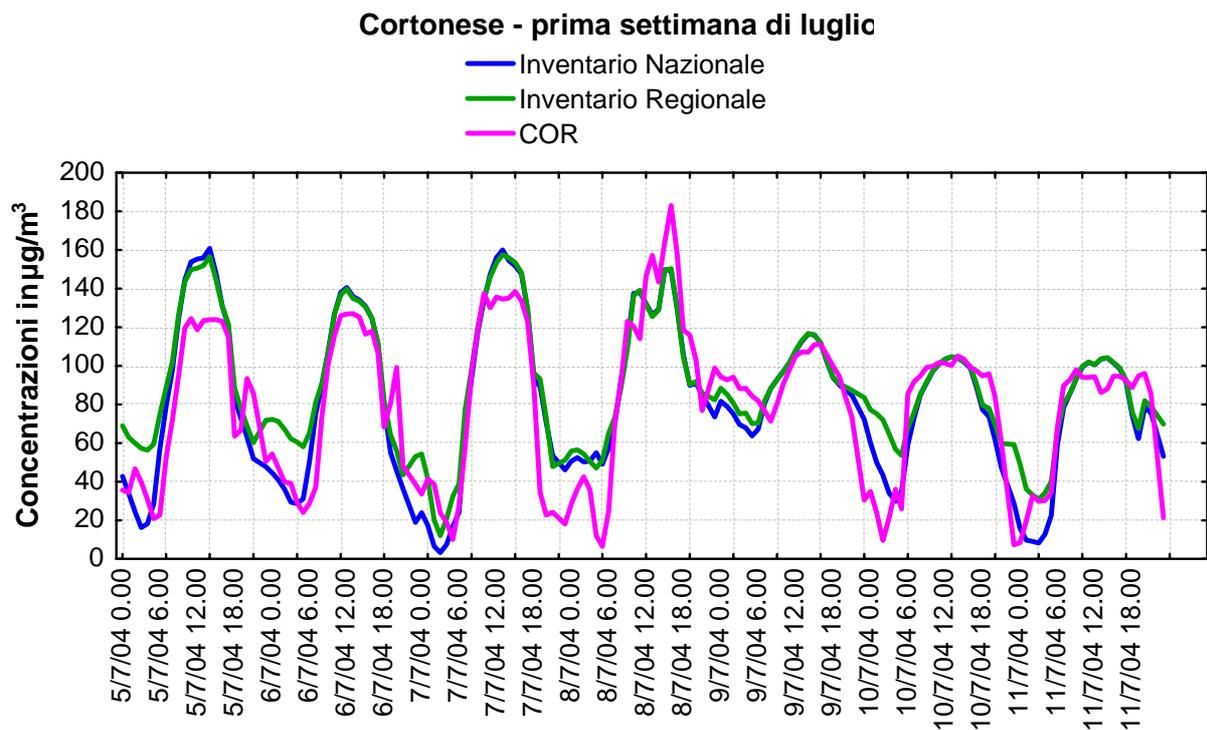


Figura 4.2: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di O₃

Fontivegge - prima settimana di luglio

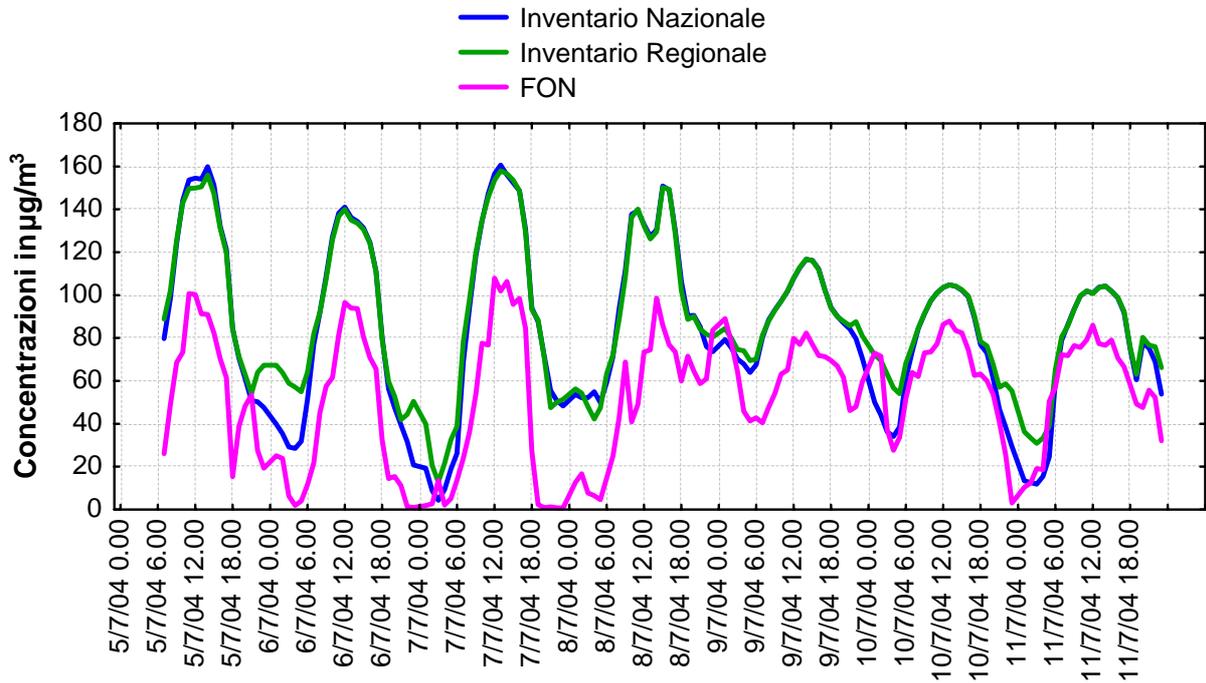


Figura 4.3: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di O_3

Ponte San Giovanni - prima settimana di luglio

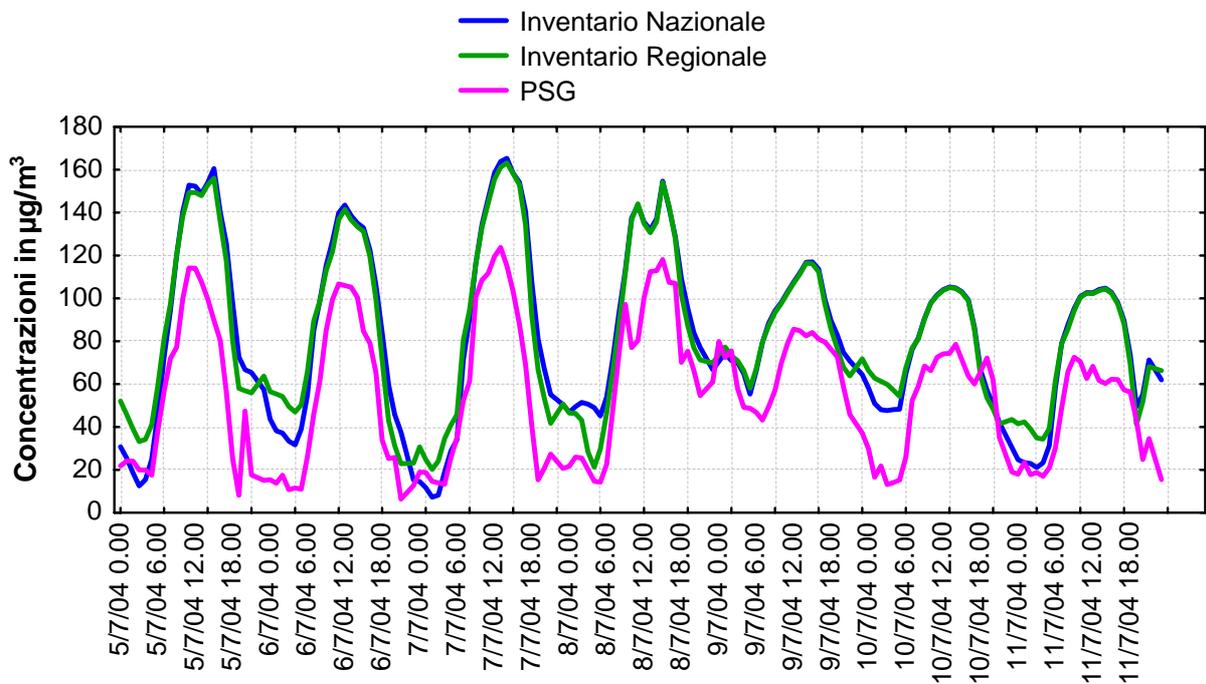


Figura 4.4: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di O_3

Area della Conca Ternana

La zona comprende i comuni di Terni e Narni, nel 2004 erano presenti cinque stazioni in cui veniva misurato l'ozono tutte situate in area urbana e influenzate prevalentemente da sorgenti come traffico e industria.

Nella tabella 4.4 sono riportati, per ciascuna stazione, i risultati degli indici statistici. Il coefficiente di correlazione lineare (R) è molto vicino al valore ottimale, con valori compresi tra 0,80 e 0,64, sia utilizzando l'inventario nazionale che quello regionale. In questo caso, R ha valori molto vicini tra loro. Solamente la stazione BOR mostra una correlazione peggiore.

Analizzando gli altri indici si può osservare che:

- FB e NMBF: da questi emerge una generale sovrastima con valori degli indici prossimi allo zero sia per il confronto con i dati dell'inventario nazionale che per quello regionale; fa eccezione la stazione GRA in cui si ha una leggera sottostima (valori negativi ma prossimi allo zero). La stazione CAR, infine, mostra una maggiore sovrastima rispetto alle altre nel caso dell'inventario nazionale.
- SKILL-VAR: questo presenta valori molto buoni. Infatti, per tutte le stazioni si è vicini al valore ideale. Il valore peggiore è quello riferito a GRA. La buona capacità da parte del modello di riprodurre l'andamento temporale dell'inquinante rispetto al dato misurato è confermato dal confronto dei dati orari riportati nelle figure da 4.5 a 4.9.
- NMSE: per tutte le stazioni e i casi, si hanno valori buoni che indicano una buona prestazione spaziale e temporale del modello che peggiora nella stazione CAR con l'inventario nazionale.

L'andamento più omogeneo dei valori degli indici tra le varie centraline della conca ternana rispetto il territorio di Perugia è attribuibile alle caratteristiche morfologiche dell'area. Infatti, il comune di Terni e la zona di Narni Scalo si trovano posizionati all'interno di una conca: questo, insieme alle specifiche condizioni meteorologiche, crea una condizione di omogeneità in tutta l'area.

Tabella 4.4: Indicatori statistici valori stimati di O₃ con il modello Chimere nell'area della Conca Ternana

Indici	Unità di misura	Valore ottimale indice	Inventario nazionale	Inventario regionale
Stazione Narni Scalo				
R	adimensionale	1	0,77	0,80
FB	adimensionale	0	0,26	0,12
NMBF	adimensionale	0	0,29	0,13
SKILL-VAR	adimensionale	1	0,63	0,77
NMSE	adimensionale	0	0,26	0,21
Stazione Borgo Rivo				
R	adimensionale	1	0,65	0,64
FB	adimensionale	0	0,41	0,24
NMBF	adimensionale	0	0,52	0,27
SKILL-VAR	adimensionale	1	0,75	0,99
NMSE	adimensionale	0	0,38	0,34

Stazione Carrara				
R	adimensionale	1	0,75	0,73
FB	adimensionale	0	0,72	0,31
NMBF	adimensionale	0	1,12	0,36
SKILL-VAR	adimensionale	1	0,89	1,20
NMSE	adimensionale	0	0,75	0,47
Stazione Verga				
R	adimensionale	1	0,74	0,73
FB	adimensionale	0	0,44	0,10
NMBF	adimensionale	0	0,56	0,10
SKILL-VAR	adimensionale	1	0,85	1,09
NMSE	adimensionale	0	0,37	0,31
Stazione Le Grazie				
R	adimensionale	1	0,77	0,76
FB	adimensionale	0	0,18	-0,33
NMBF	adimensionale	0	0,20	-0,39
SKILL-VAR	adimensionale	1	0,61	0,82
NMSE	adimensionale	0	0,26	0,49

Se confrontiamo il BIAS calcolato per media e percentili si osserva subito che la differenza tra i valori stimati e misurati è sufficientemente simile (tabella 4.5). Per tutte le stazioni, le differenze sono generalmente inferiori al 50%. Se confrontiamo il 99° e il 98° percentili, le differenze si riducono al di sotto del 20%. La stazione di Carrara è quella che più si discosta dalle altre, con valori di BIAS più alti. Questo è in parte attribuibile anche al suo posizionamento, ovvero a ridosso di una strada con alta densità di traffico.

Questi risultati possono essere interpretati come una buona concordanza della distribuzione media dei dati nel corso dell'anno anche se i corrispondenti dati orari possono presentare delle differenze più consistenti. Anche in questo caso, ciò è confermato dal confronto grafico tra i dati orari misurati e stimati (figure da 4.5 a 4.9), dove si osserva che le differenze maggiori si hanno nei valori massimi e soprattutto nei minimi.

Tabella 4.5: Valori orari mediati nell'anno confronto tra misure e stime di O₃ nell'area della Conca Ternana

Indici	Unità di misura	Centralina	Inventario nazionale	Inventario regionale
Stazione Narni Scalo				
Media	µg/m ³	54,81	70,96	62,06
BIAS	µg/m ³		16,16	7,26
99° Percentile	µg/m ³	181,22	175,94	175,51
BIAS	µg/m ³		-5,28	-5,71
98° Percentile	µg/m ³	146,85	136,08	136,18
BIAS	µg/m ³		-10,76	-10,67
50° Percentile	µg/m ³	48,50	68,06	60,52
BIAS	µg/m ³		19,56	12,02
Stazione Borgo Rivo				
Media	µg/m ³	46,43	70,58	58,80
BIAS	µg/m ³		24,15	12,38
99° Percentile	µg/m ³	148,88	168,02	169,45
BIAS	µg/m ³		19,14	20,57
98° Percentile	µg/m ³	121,93	132,50	132,95
BIAS	µg/m ³		10,57	11,02
50° Percentile	µg/m ³	40,80	59,90	59,60
BIAS	µg/m ³		19,10	18,80
Stazione Carrara				
Media	µg/m ³	32,78	69,40	44,63
BIAS	µg/m ³		17,80	17,70
99° Percentile	µg/m ³	133,50	166,62	161,67
BIAS	µg/m ³		33,12	28,17
98° Percentile	µg/m ³	106,80	131,63	125,32
BIAS	µg/m ³		24,83	18,52
50° Percentile	µg/m ³	25,25	67,14	36,90
BIAS	µg/m ³		41,89	11,65
Stazione Verga				
Media	µg/m ³	42,73	66,54	47,06
BIAS	µg/m ³		17,80	17,70
99° Percentile	µg/m ³	141,79	166,40	164,12
BIAS	µg/m ³		24,61	22,33
98° Percentile	µg/m ³	115,23	131,93	128,90
BIAS	µg/m ³		16,70	13,67
50° Percentile	µg/m ³	36,40	64,15	40,56
BIAS	µg/m ³		27,75	4,16
Stazione Le Grazie				
Media	µg/m ³	59,61	71,63	42,82
BIAS	µg/m ³		17,80	17,70
99° Percentile	µg/m ³	198,14	170,56	165,05
BIAS	µg/m ³		-27,58	-33,09
98° Percentile	µg/m ³	161,73	138,59	130,53
BIAS	µg/m ³		-23,14	-31,20
50° Percentile	µg/m ³	50,70	68,12	31,90
BIAS	µg/m ³		17,42	-18,80

Quest'ultimo fatto è imputabile alla tendenza generale del modello implementato di sovrastimare i valori notturni.

A parte un leggero miglioramento nel caso si utilizzi l'Inventario Regionale e una altrettanto piccola sovrastima nel caso del solo inventario Nazionale, non si evidenziano altre differenze sostanziali. Questa leggera differenza può, comunque, essere attribuibile alla diversa valutazione delle emissioni considerate nei due inventari: l'inventario nazionale, per ovvi motivi di pesantezza dei dati, effettua una raccolta più semplificata dei dati soprattutto per gli impianti industriali e distribuisce le emissioni sul grigliato a partire dal dato aggregato a livello provinciale anziché comunale. Queste differenze portano sia a far mancare alcune emissioni industriali di medie dimensioni sia, nel caso dell'Inventario Nazionale, a diluire di più le emissioni sul territorio con minori emissioni presenti nelle aree metropolitane.

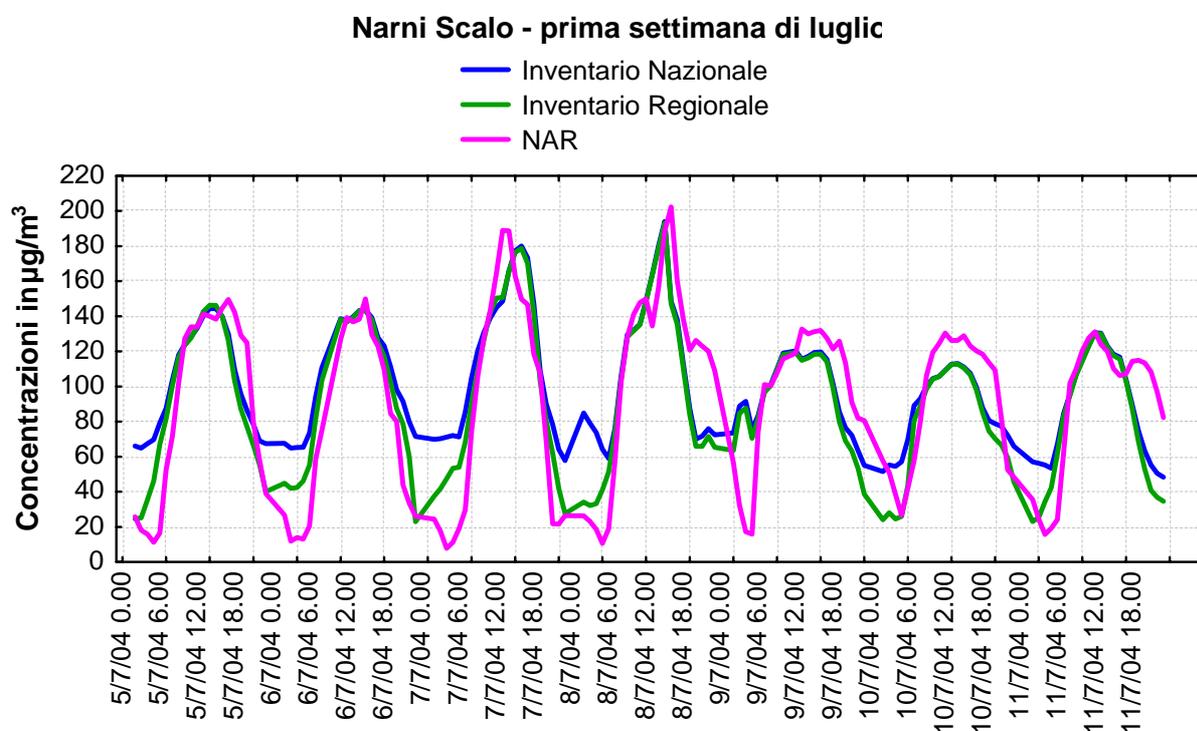


Figura 4.5: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di O₃

Borgo Rivo - prima settimana di luglio

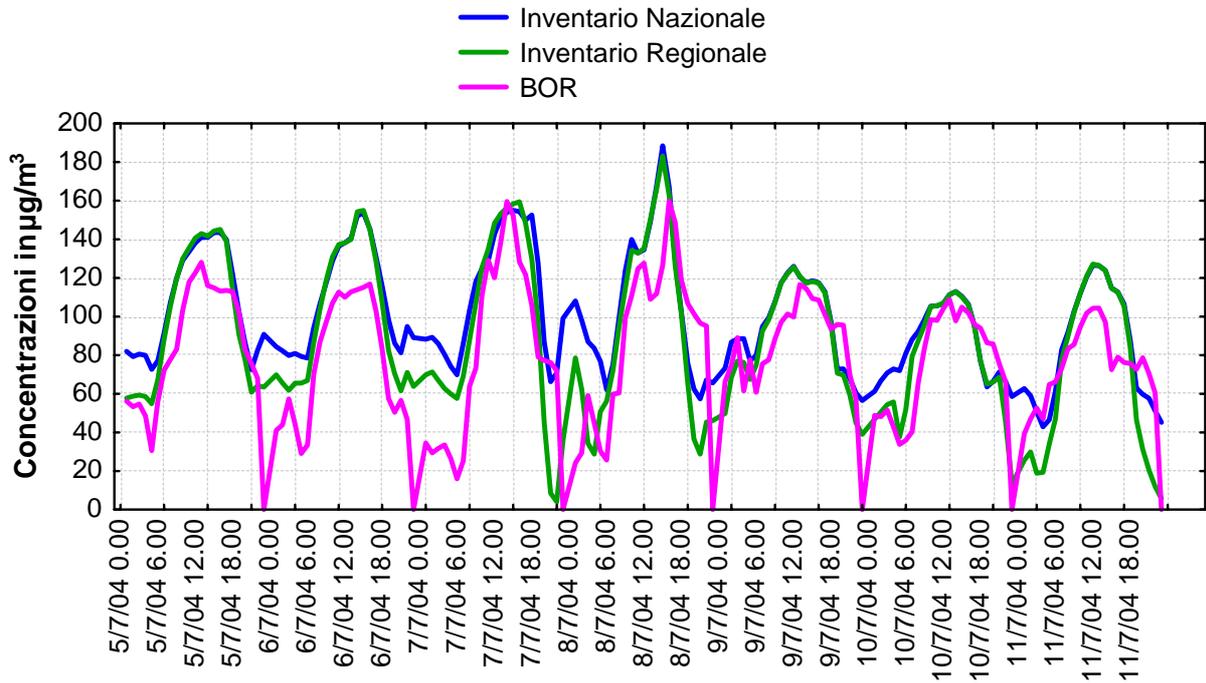


Figura 4.6: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di O_3

Carrara - prima settimana di luglio

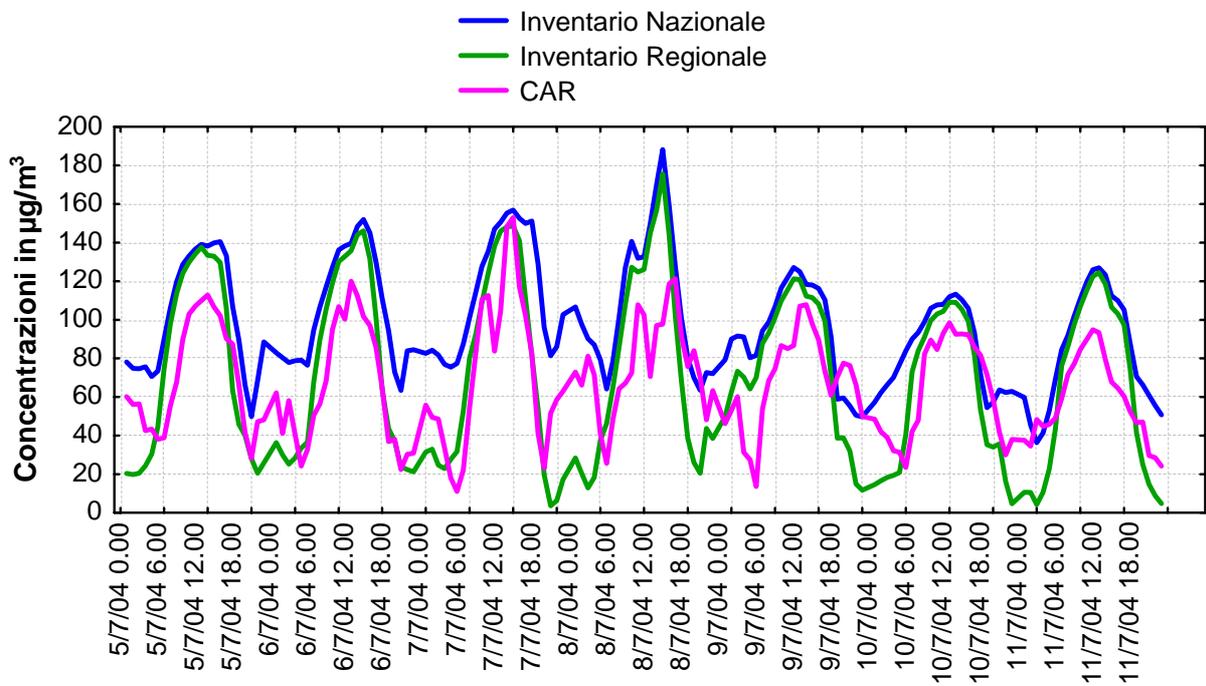


Figura 4.7: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di O_3

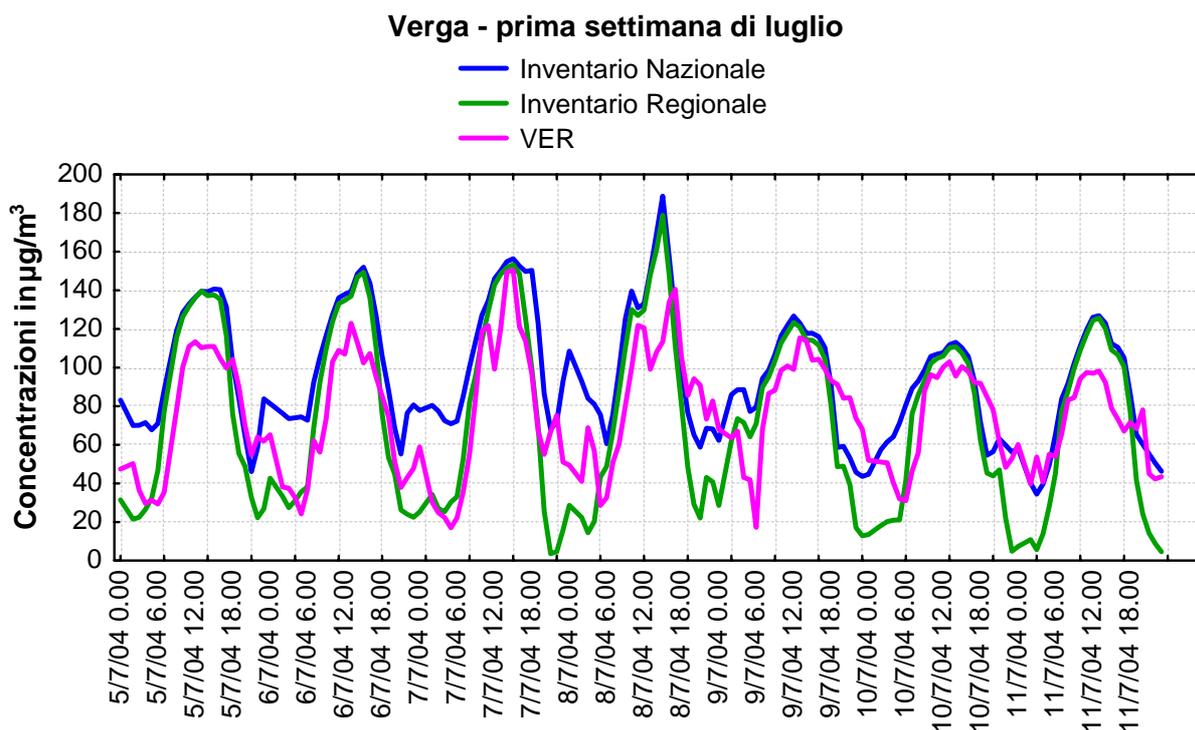


Figura 4.8: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di O₃

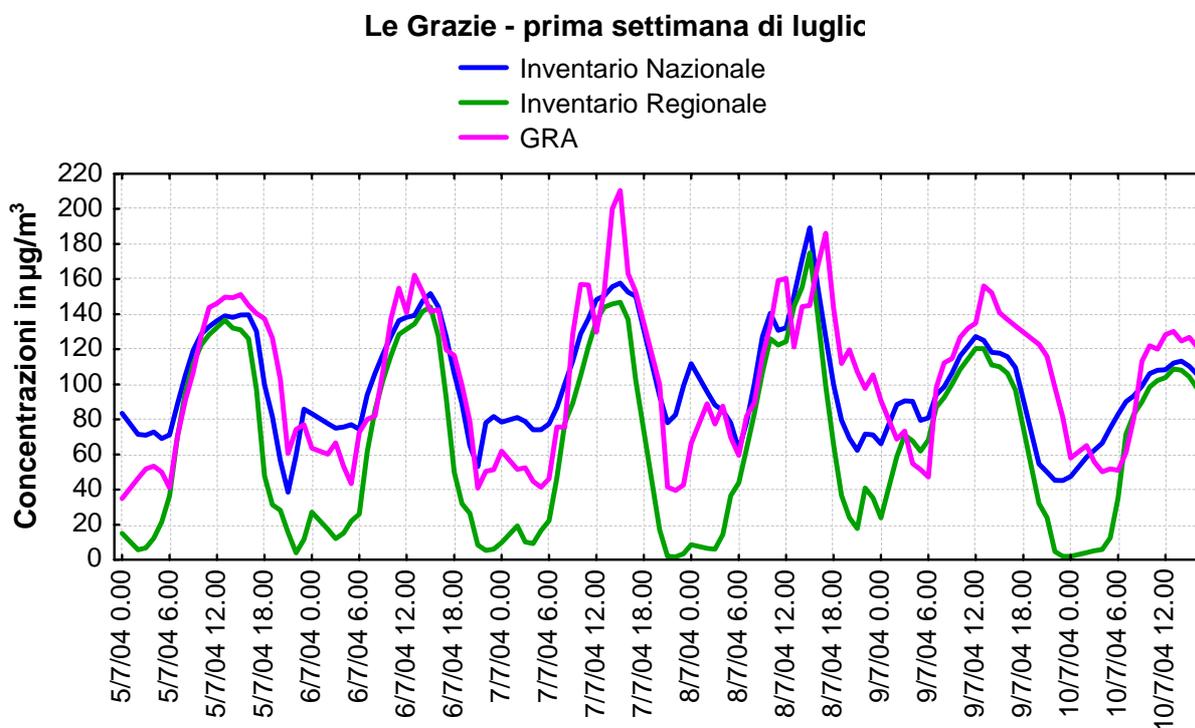


Figura 4.9: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di O₃

4.3 Confronto biossido di azoto

La normativa nazionale sul biossido di azoto (DM 60 02/04/2002) individua, negli allegati, come indice di comparazione la media annua. Pertanto, il confronto tra dati misurati e dati stimati è stata utilizzata quest'informazione, congiuntamente alla mediana annua e al 98° percentile. Questi ultimi due valori sono stati scelti al fine di rendere il più esaustivo possibile il confronto e, soprattutto, il valore del 98° percentile, non prescritto in alcuna sezione della normativa per il biossido di azoto, è stato selezionato similmente al valore, prescritto dalla norma, dei percentili di altri inquinanti affini (si veda ad esempio i valori percentili relativi all'ozono). Oltre ai confronti sugli indici vengono riportati anche i confronti grafici dei dati orari misurati e stimati in due differenti periodi temporali dell'anno 2004.

Le analisi riportate riguardano le stazioni fisse in cui era presente nel 2004 l'analizzatore di biossido di azoto.

Area metropolitana di Perugia

Nell'area metropolitana di Perugia, nel 2004, erano attive tre stazioni per la misura del biossido di azoto: la stazione di Cortonese (COR), la stazione di Fontivegge (FON) e la stazione di Ponte San Giovanni (PSG).

Nella tabella 4.6 vengono riportate le grandezze caratterizzanti le distribuzioni esaminate. Sia per i dati simulati che per quelli misurati sono stati calcolati i valori di media, mediana (50° percentile), 98° percentile e deviazione standard.

Tabella 4.6: Grandezze statistiche caratterizzanti le distribuzioni di NO₂ nell'area metropolitana di Perugia

Indici	Unità di misura	Centralina	Inventario nazionale	Inventario regionale
Stazione Cortonese				
Media	µg/m ³	21,72	31,90	28,87
50° Percentile	µg/m ³	20,10	23,31	22,51
98° Percentile	µg/m ³	82,12	87,29	53,45
Deviazione Standard	µg/m ³	12,84	25,96	22,26
Stazione Fontivegge				
Media	µg/m ³	59,87	31,98	30,67
50° Percentile	µg/m ³	56,77	24,77	25,12
98° Percentile	µg/m ³	82,05	84,60	148,93
Deviazione Standard	µg/m ³	33,26	25,12	22,67
Stazione Ponte San Giovanni				
Media	µg/m ³	29,88	29,46	29,75
50° Percentile	µg/m ³	26,72	23,37	23,82
98° Percentile	µg/m ³	78,08	81,46	77,89
Deviazione Standard	µg/m ³	18,12	23,32	22,01

Da una prima analisi si evince che la simulazione nella stazione PSG è quella migliore, infatti la differenza tra il valore medio stimato e quello misurato è minore di 1% ed anche gli altri parametri

caratteristici delle distribuzioni non si discostano molto. Invece, per la altre due stazioni si hanno due comportamenti differenti: la stazione COR mostra una tendenziale sovrastima del modello, mentre la stazione FON una sottostima.

Per poter confrontare con maggior dettaglio le distribuzioni sono stati calcolati, anche per il biossido di azoto, gli indici di performance, riportati nella tabella 4.7.

Tabella 4.7: Indicatori statistici valori stimati con il modello Chimere di NO₂ nell'area metropolitana di Perugia

Indici	Unità di misura	Valore ottimale indice	Inventario nazionale	Inventario regionale
Stazione Cortonese				
R	adimensionale	1	0,05	0,16
FB	adimensionale	0	0,38	0,28
NMBF	adimensionale	0	0,47	0,33
SKILL-VAR	adimensionale	1	2,02	1,73
NMSE	adimensionale	0	1,31	1,07
IOA	adimensionale	1	0,38	0,43
Stazione Fontivegge				
R	adimensionale	1	0,09	0,28
FB	adimensionale	0	-0,61	-0,65
NMBF	adimensionale	0	-0,87	-0,95
SKILL-VAR	adimensionale	1	0,76	0,68
NMSE	adimensionale	0	1,23	1,22
IOA	adimensionale	1	0,60	0,61
Stazione Ponte San Giovanni				
R	adimensionale	1	0,31	0,46
FB	adimensionale	0	-0,01	0,00
NMBF	adimensionale	0	-0,01	0,00
SKILL-VAR	adimensionale	1	1,29	1,21
NMSE	adimensionale	0	0,69	0,58
IOA	adimensionale	1	0,53	0,58

La prima considerazione da fare, analizzando la tabella riportata sopra, è che gli indici di performance hanno risultati migliori nel caso del confronto con la simulazione implementata attraverso l'inventario regionale. Come già riportato nel commento della tabella 4.6 il miglior riscontro tra misurazione e simulazione è dato dalla stazione PSG, infatti il coefficiente di correlazione è il migliore e, nel caso dell'implementazione con l'inventario regionale, è pari a 0,46, ciò indica una media correlazione tra modello di calcolo e misure.

Gli indici di performance, che indicano la sovra o sottostima del modello, tendono al valore ottimale nel caso di PSG, quindi il modello riproduce ottimamente le misure della centralina mentre indicano una sottostima per FON ed una sovrastima per COR. Ciò indica che le due stazioni sopracitate si trovano in particolari configurazioni spaziali per quest'inquinante tali che la simulazione non riesce a ben riprodurre. Per esempio, nel caso della stazione di Fontivegge è sicuramente presente una configurazione di *street canyon*.

Analoga analisi può essere effettuata con gli altri indicatori di performance; l'indice NMSE, che misura la performance di riproduzione della variabilità spazio – temporale (quindi l'errore compiuto nella simulazione), si avvicina al valore ottimale nel caso della simulazione effettuata a PSG così come il valore dell'indice SKILL-VAR, che esplicita la capacità di simulazione della variabilità delle osservazioni tende ad uno (valore ottimale).

Nei casi della simulazioni implementate nelle stazioni COR e FON, i valori dell'indice NMSE mostrano un errore maggiore della distribuzioni simulate; la variabilità rispetto ai dati osservati (indice SKILL-VAR) è comunque buona. Ciò è descritto anche dai valori assunti dall'indice IOA, che è stato calcolato per quest'inquinante al fine di migliorare l'interpretazione dei risultati. Esso indica la capacità di riproduzione della variazione del modello intorno alla media osservata, il suo valore ottimale è pari ad uno, ma da 0,5 ogni valore è considerato buono. Il calcolo di tale indice per le stazioni dell'area metropolitana di Perugia denota una buona performance del modello sia per PSG, per cui IOA vale 0,53 con l'inventario nazionale e 0,58 con l'inventario regionale, sia per le altre (per esempio l'indice IOA vale 0,61 con l'inventario regionale a FON).

Riassumendo, è possibile affermare che una buona corrispondenza è osservabile per i dati della stazione di Cortonese molto buona per quelli della stazione collocata a Ponte San Giovanni; infatti, il modello di calcolo riesce a computare, quindi a riprodurre, le condizioni che si manifestano fornendo un output molto fedele alla realtà. Per quanto concerne le distribuzioni della stazione di Fontivegge il confronto tra le misurazioni e le simulazioni appare non ottimale; è necessario sottolineare che questa è classificata come da traffico urbana, è ubicata in una posizione tale da risentire di un particolare effetto dato dalla presenza di palazzi con un'altezza notevole (effetto canyon). Tali caratteristiche sono lontane da quelle considerate dalla catena modellistica di Chimere, che è consona a trattare situazioni spaziali globali e non riesce a computare ottimamente delle singolarità, come, ad esempio, l'effetto canyon cittadino.

Quanto sopra è anche avvalorato dall'osservazione dei grafici delle figure 4.10 - 4.11 - 4.12 - 4.13 - 4.14 - 4.15 che riportano l'andamento della concentrazione di NO₂ in µg/m³ delle varie distribuzioni considerate: dati misurati, simulazione con inventario nazionale, simulazione con inventario regionale, in due diversi periodi temporali dell'anno 2004, inverno ed estate.

Anche dall'analisi delle figure, emerge una buona corrispondenza tra i dati osservati e quelli misurati nel caso di applicazione del codice di calcolo per PSG. Infatti, l'andamento generale della distribuzione dei dati simulati segue quello dei dati misurati soprattutto nel periodo estivo. Di contro, è necessario sottolineare che non esiste una perfetta corrispondenza dei massimi e dei minimi tra i dati della stazione fissa e quelli derivanti dalle implementazioni.

Anche nel caso di COR e FON, le osservazioni fatte ai valori degli indici vengono avvalorate dall'analisi dei dati orari. La peggior corrispondenza tra dati misurati e simulati si ha nel caso di implementazione del codice per FON durante il periodo invernale. La figura 4.12 mostra una discordanza nel confronto tra i dati sia nell'andamento generale delle distribuzioni, sia nei picchi massimi e minimi; questa discordanza conferma l'analisi fatta sui coefficienti e sui valori medi riportata precedentemente.

Cortonese - prima settimana di febbraio

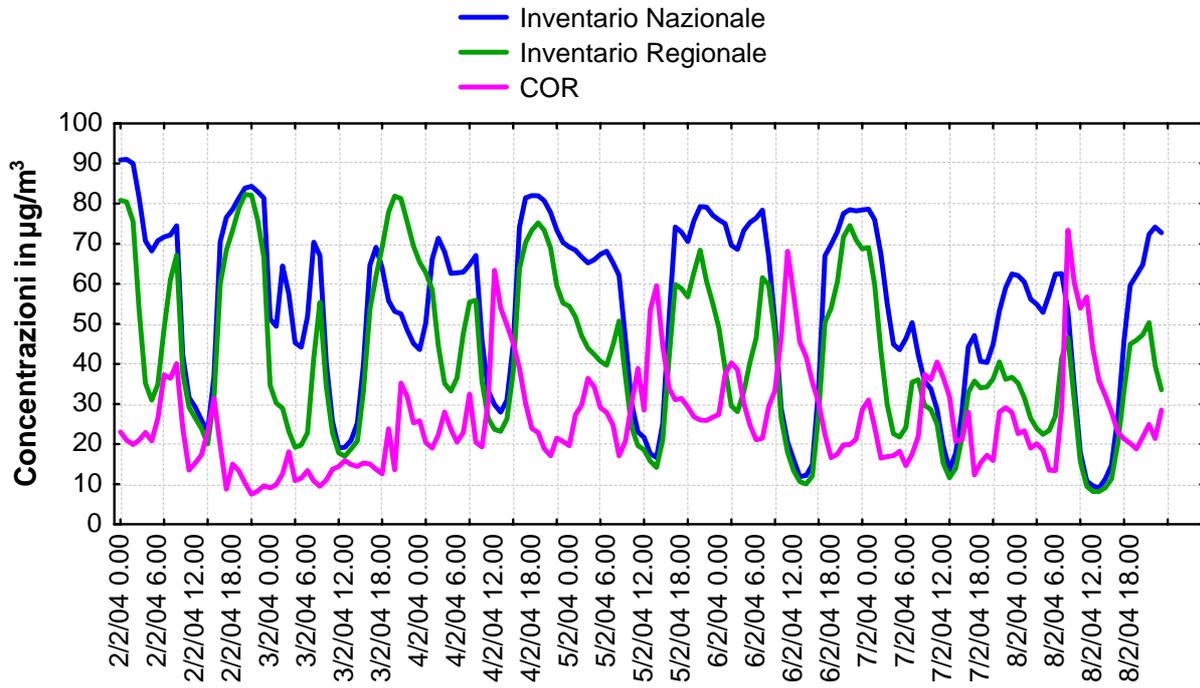


Figura 4.10: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di NO₂

Cortonese - prima settimana di luglio

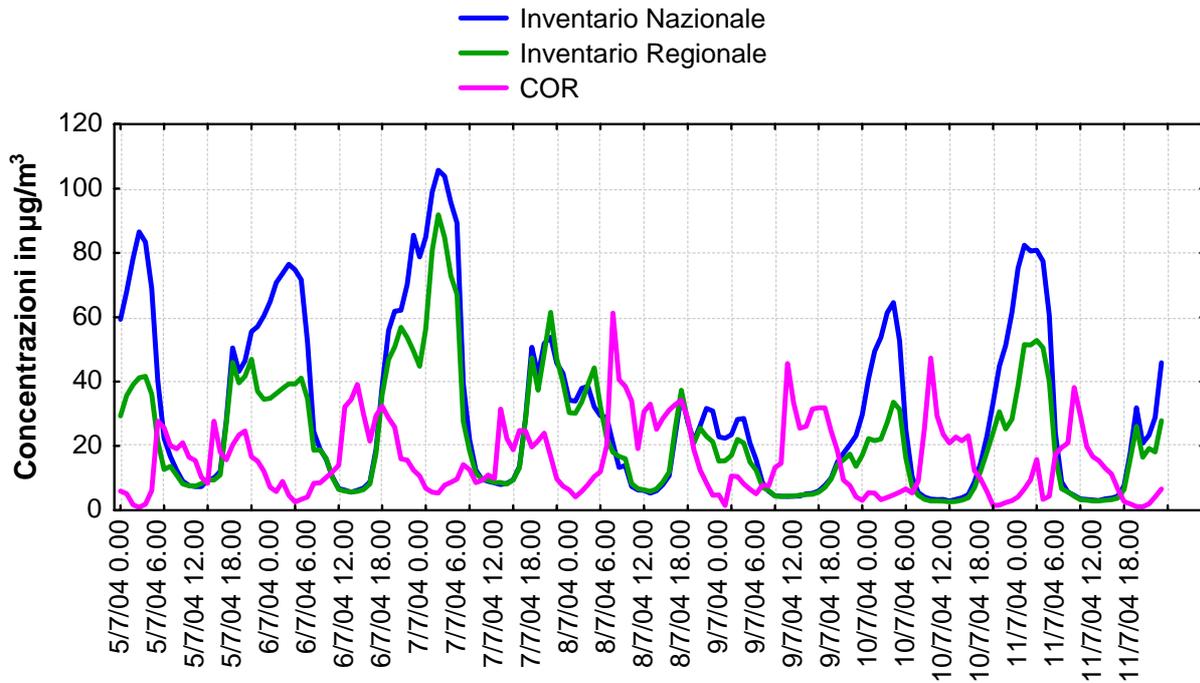


Figura 4.11: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di NO₂

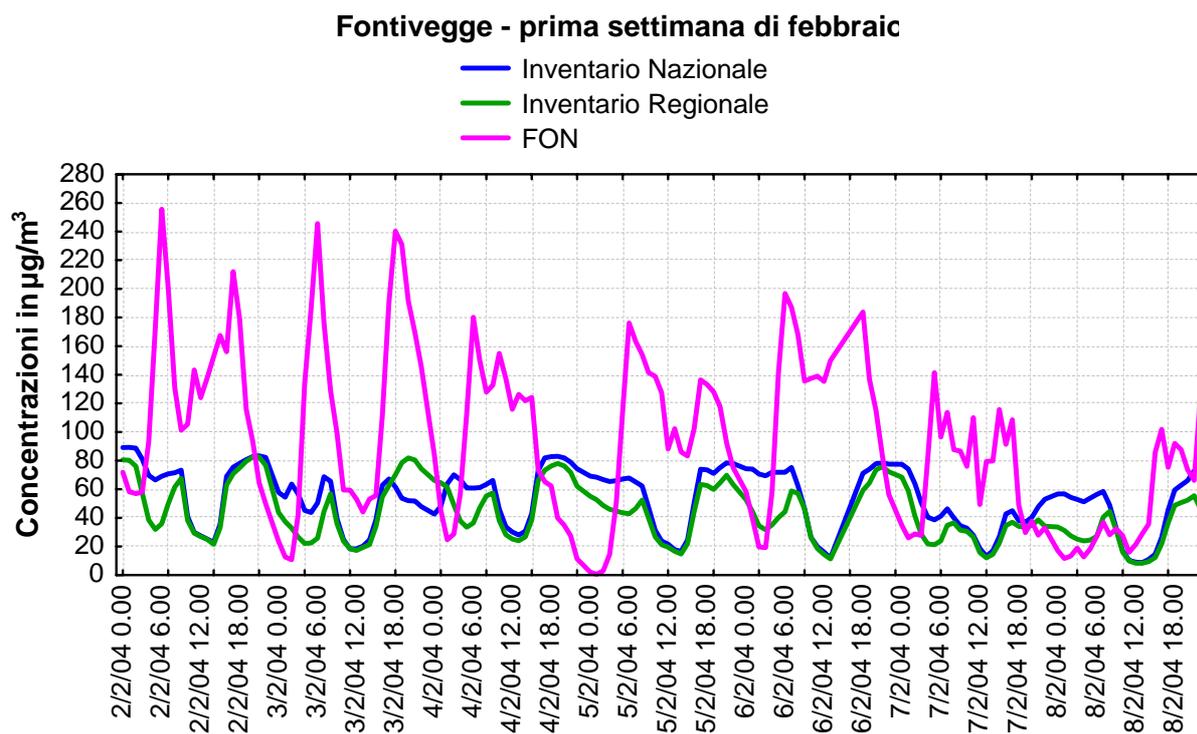


Figura 4.12: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di NO_2

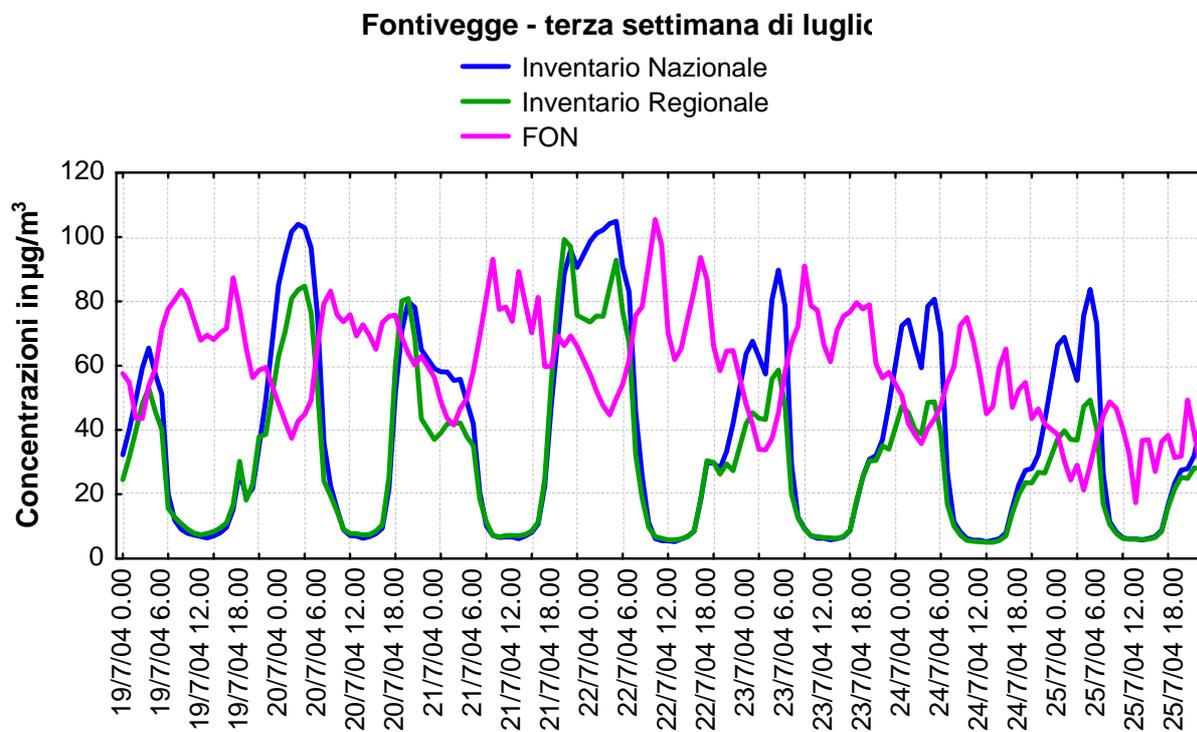


Figura 4.11: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di NO_2

Ponte San Giovanni - prima settimana di febbraio

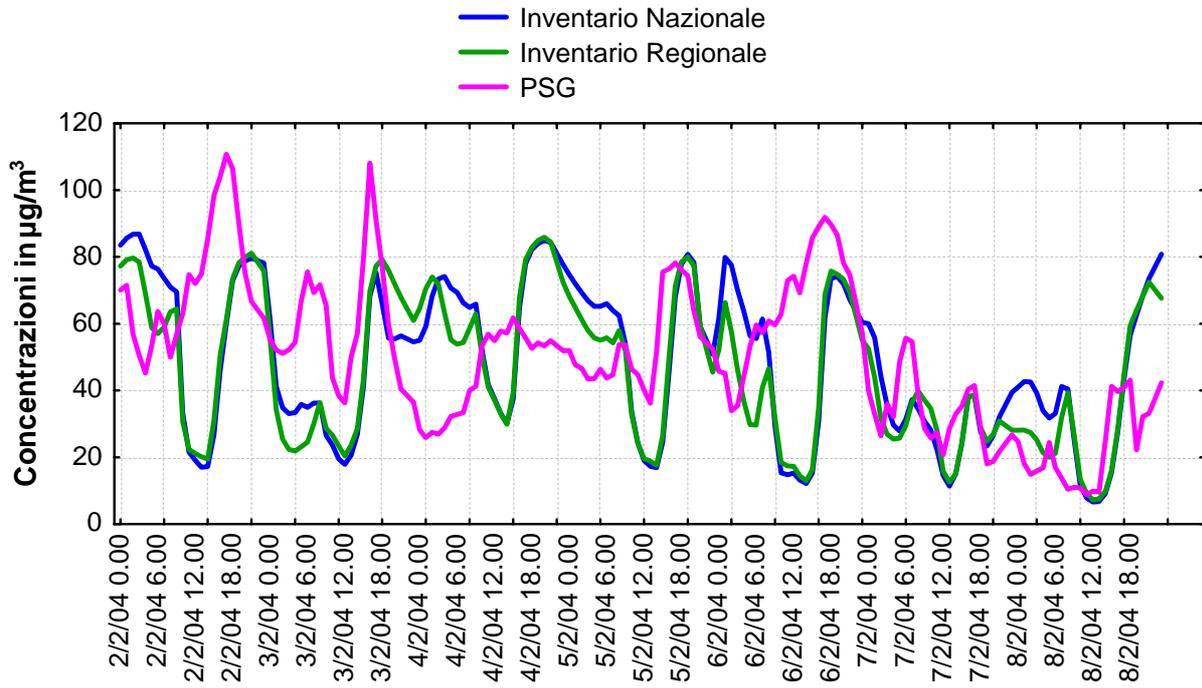


Figura 4.14: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di NO_2

Ponte San Giovanni - prima settimana di luglio

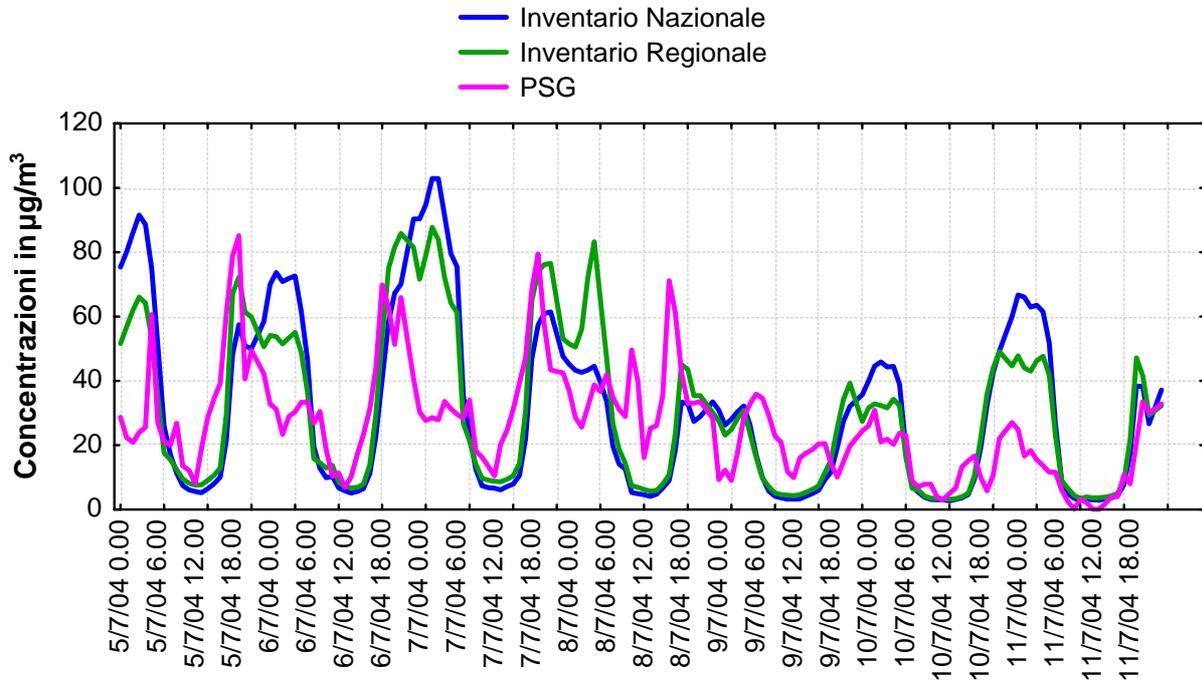


Figura 4.15: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di NO_2

Area della Conca Ternana

Nell'area della Conca Ternana, nel 2004, erano attive quattro stazioni per la misura del biossido di azoto: la stazione di Narni Scalo (NAR), la stazione di Borgo Rivo (BOR), la stazione di Carrara (CAR) e la stazione di Verga (VER).

Le grandezze caratterizzanti le distribuzioni esaminate sono mostrate in tabella 4.8. Sia per i dati simulati che per quelli misurati sono stati calcolati i valori di media, mediana (50° percentile), 98° percentile e deviazione standard.

Tabella 4.8: Grandezze statistiche caratterizzanti le distribuzioni di NO₂ per l'area della Conca Ternana

Indici	Unità di misura	Centralina	Inventario nazionale	Inventario regionale
Stazione Narni Scalo				
Media	µg/m ³	21,66	17,43	28,52
50° Percentile	µg/m ³	20,10	14,09	22,44
98° Percentile	µg/m ³	50,93	53,41	83,45
Deviazione Standard	µg/m ³	13,66	12,87	23,01
Stazione Borgo Rivo				
Media	µg/m ³	30,48	18,53	33,08
50° Percentile	µg/m ³	26,90	14,91	27,40
98° Percentile	µg/m ³	71,00	61,35	99,65
Deviazione Standard	µg/m ³	15,81	14,80	26,84
Stazione Carrara				
Media	µg/m ³	49,56	20,75	51,32
50° Percentile	µg/m ³	48,85	17,61	51,46
98° Percentile	µg/m ³	85,50	59,80	114,34
Deviazione Standard	µg/m ³	17,12	14,97	30,38
Stazione Verga				
Media	µg/m ³	25,33	24,12	48,53
50° Percentile	µg/m ³	22,60	20,60	47,99
98° Percentile	µg/m ³	64,19	67,06	110,02
Deviazione Standard	µg/m ³	15,67	17,20	30,54

La tabella 4.8 mostra la descrizione, mediante i parametri statistici più rilevanti, delle distribuzioni di valori orari esaminate. Da un'analisi preliminare è possibile affermare che la simulazione implementata attraverso l'inventario regionale tende a sottostimare i valori, mentre quella implementata con l'inventario nazionale li sovrastima.

I risultati del confronto mediante gli indici di performance (tabella 4.9) in generale confermano quanto evidenziato da media e percentili. Gli indici FB e NMBF mostrano la tendenza alla sottostima nel caso dell'implementazione effettuata mediante l'inventario nazionale e, viceversa, una sovrastima con l'inventario regionale. La principale causa di questa differenza è imputabile ai dati di emissione in input alla catena modellistica. Infatti, inventario nazionale e regionale, come già accennato, hanno un differente modo di selezionare le emissioni puntuali ovvero nel caso specifico industriali. Essendo il territorio ternano a carattere industriale il peso delle emissioni industriali risulta più significativo che nella zona del perugino e questo può essere attribuito al differente raccordo tra i dati simulati nell'area metropolitana di Perugia e la conca ternana con i due diversi

inventari. Inoltre, il comportamento di sottostima della concentrazione al suolo di dell'biossido di azoto con l'inventario nazionale è coerente con la sovrastima che si per l'ozono.

Tabella 4.9: Indicatori statistici valori stimati con il modello Chimere di NO₂ per l'area della Conca Ternana

Indici	Unità di misura	Valore ottimale indice	Inventario nazionale	Inventario regionale
Stazione Narni Scalo				
R	adimensionale	1	0,42	0,41
FB	adimensionale	0	-0,22	0,27
NMBF	adimensionale	0	-0,24	0,32
SKILL-VAR	adimensionale	1	1,06	1,79
NMSE	adimensionale	0	0,59	0,81
IOA	adimensionale	1	0,62	0,52
Stazione Borgo Rivo				
R	adimensionale	1	0,32	0,26
FB	adimensionale	0	-0,49	0,08
NMBF	adimensionale	0	-0,65	0,09
SKILL-VAR	adimensionale	1	0,94	1,70
NMSE	adimensionale	0	0,82	0,75
IOA	adimensionale	1	0,50	0,49
Stazione Carrara				
R	adimensionale	1	0,05	-0,02
FB	adimensionale	0	-0,82	0,03
NMBF	adimensionale	0	-1,39	0,04
SKILL-VAR	adimensionale	1	0,87	1,77
NMSE	adimensionale	0	1,28	0,49
IOA	adimensionale	1	0,32	0,31
Stazione Verga				
R	adimensionale	1	0,43	0,36
FB	adimensionale	0	-0,05	0,63
NMBF	adimensionale	0	-0,05	0,92
SKILL-VAR	adimensionale	1	1,10	1,95
NMSE	adimensionale	0	0,51	1,12
IOA	adimensionale	1	0,63	0,58

Il coefficiente R mostra una scarsa correlazione tra i dati stimati e quelli misurati anche se in generale il valore del coefficiente risulta accettabile per tutti i punti tranne che per CAR stazione in cui i risultati sono non correlati. I valori dell'indice SKILL-VAR ruotano attorno a quello ottimale per tutti i punti di confronto, ciò indica una buona capacità del modello nel riprodurre la variabilità delle osservazioni, avvalorata anche dell'andamento dell'indice IOA, che assume ovunque valori intorno a 0,5 - 0,6.

La peggiore coerenza tra i dati misurati e quelli stimati nell'area della Conca Ternana rispetto all'area metropolitana di Perugia è in parte attribuibile all'assenza di stazioni di misura di NO₂ dette di fondo. Ogni centralina sopraccitata è influenzata dalle industrie presenti nelle sue vicinanze e/o

dal traffico veicolare e, come già citato, il modello di calcolo fatica a riprodurre situazioni singolari ma, al contrario, tende a mediare nello spazio le concentrazioni.

Questo differente comportamento del dato misurato rispetto a quello stimato è anche confermato dagli andamenti orari delle concentrazioni di NO_2 misurati dalle quattro stazioni e stimati dal modello Chimere. Nelle figure dalla 4.16 alla 4.23 sono riportati gli andamenti orari delle quattro stazioni confrontati con i dati stimati utilizzando l'inventario nazionale e quello regionale in una settimana invernale ed in una estiva.

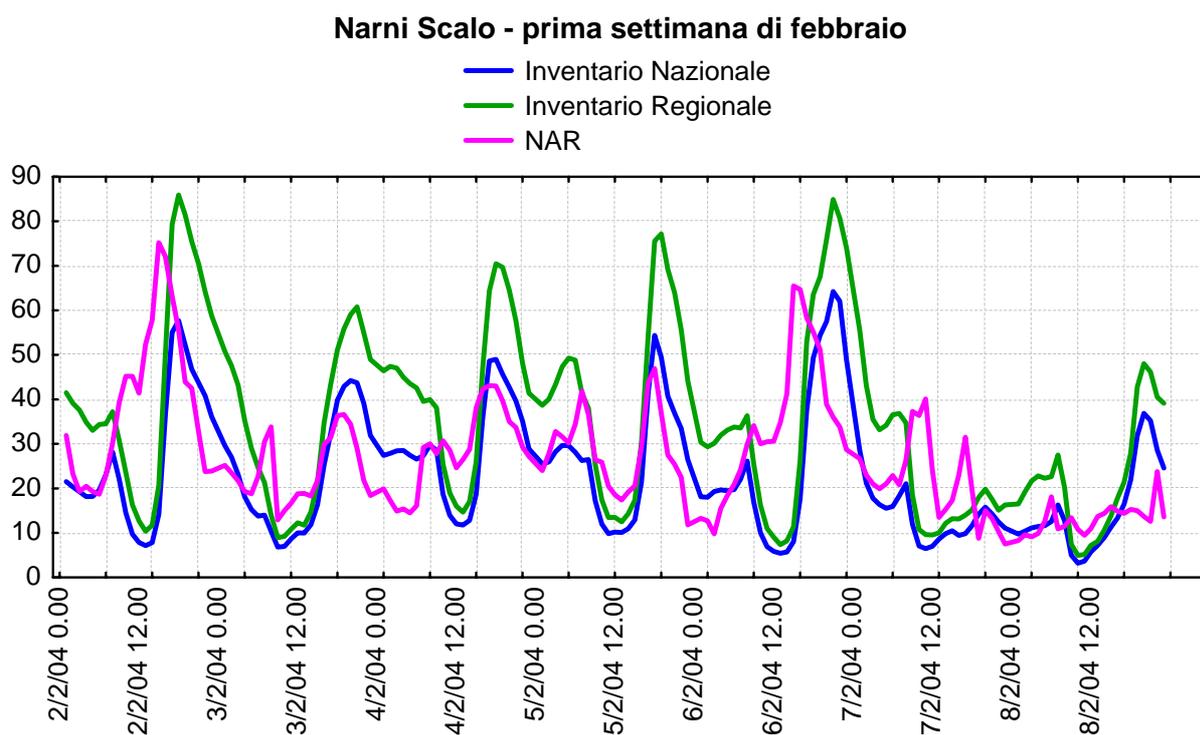


Figura 4.16: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di NO_2

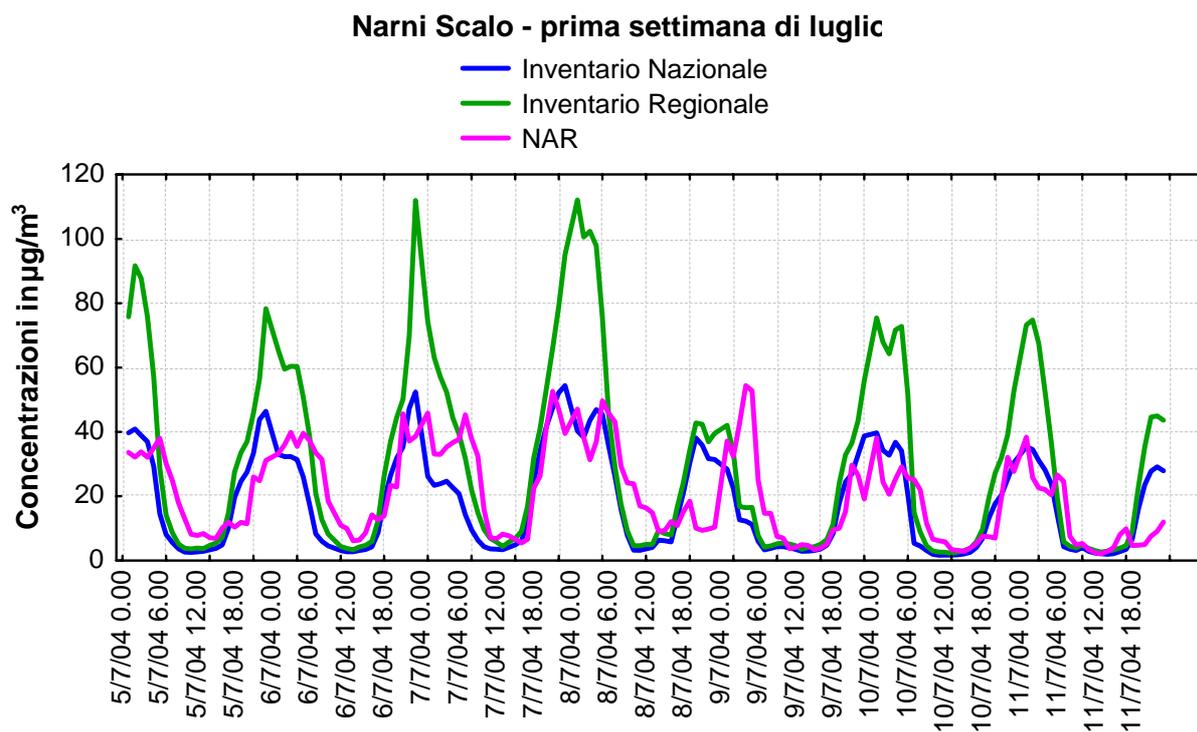


Figura 4.17: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di NO_2

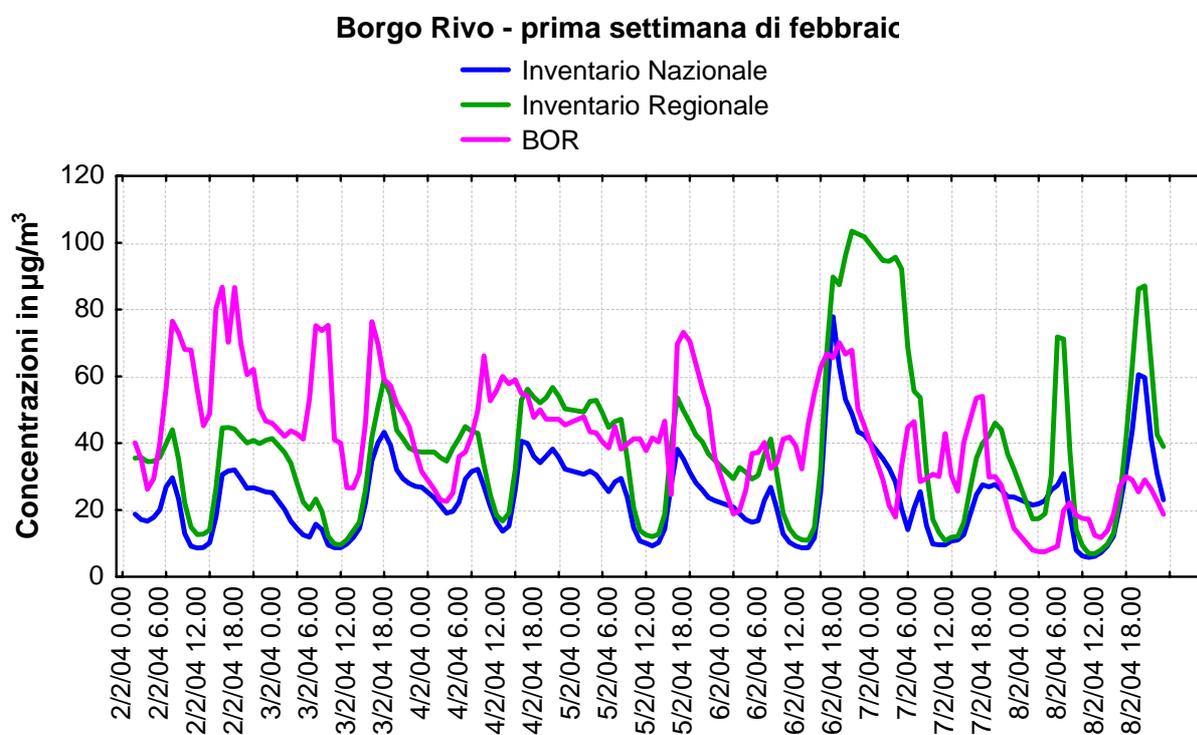


Figura 4.18: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di NO_2

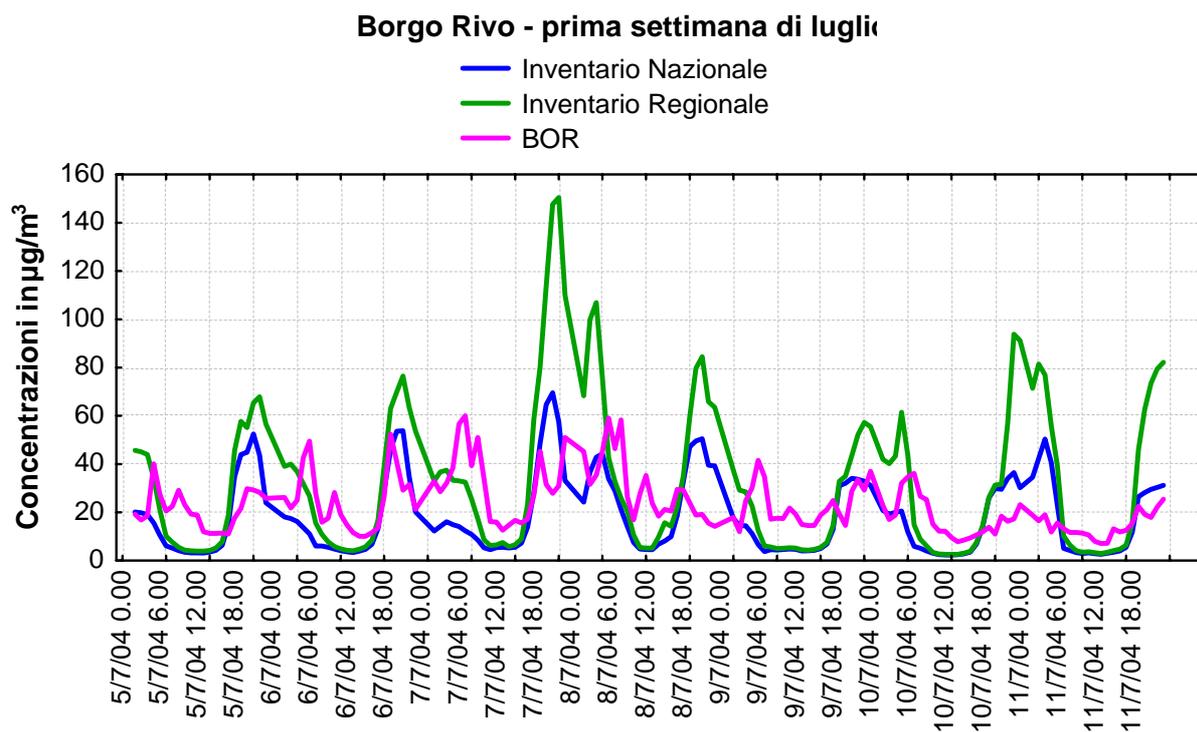


Figura 4.19: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di NO_2

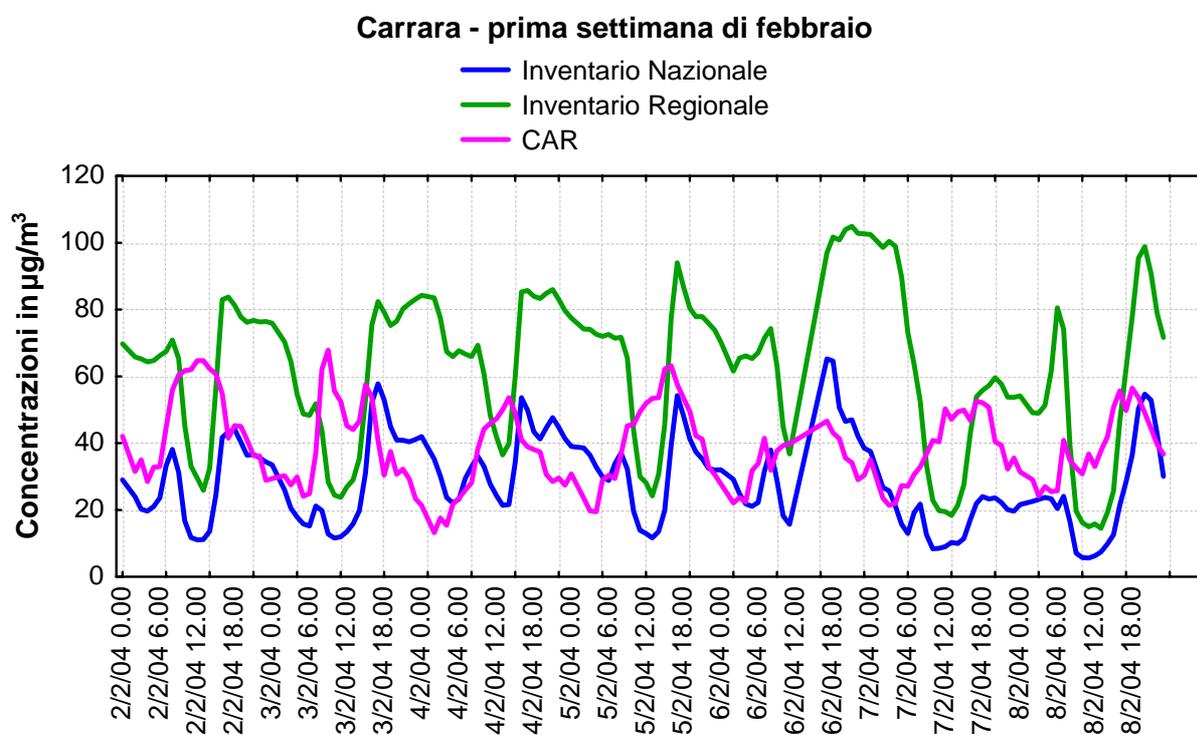


Figura 4.20: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di NO_2

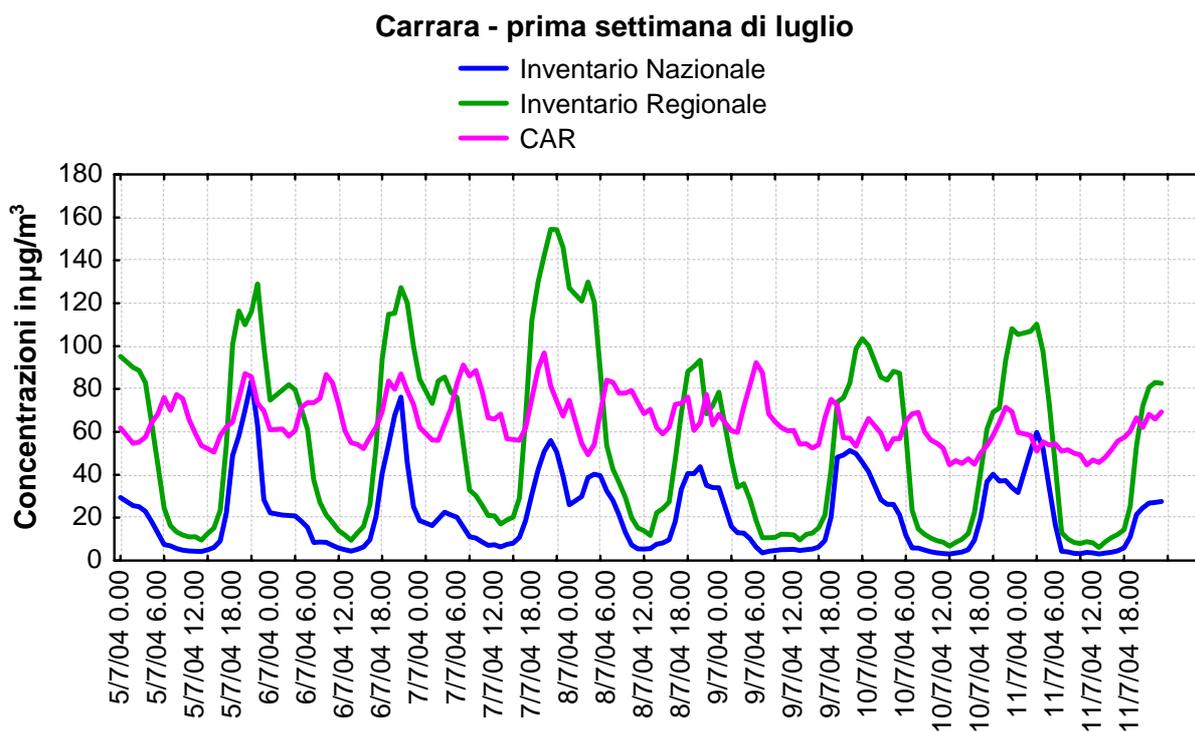


Figura 4.23: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di NO_2

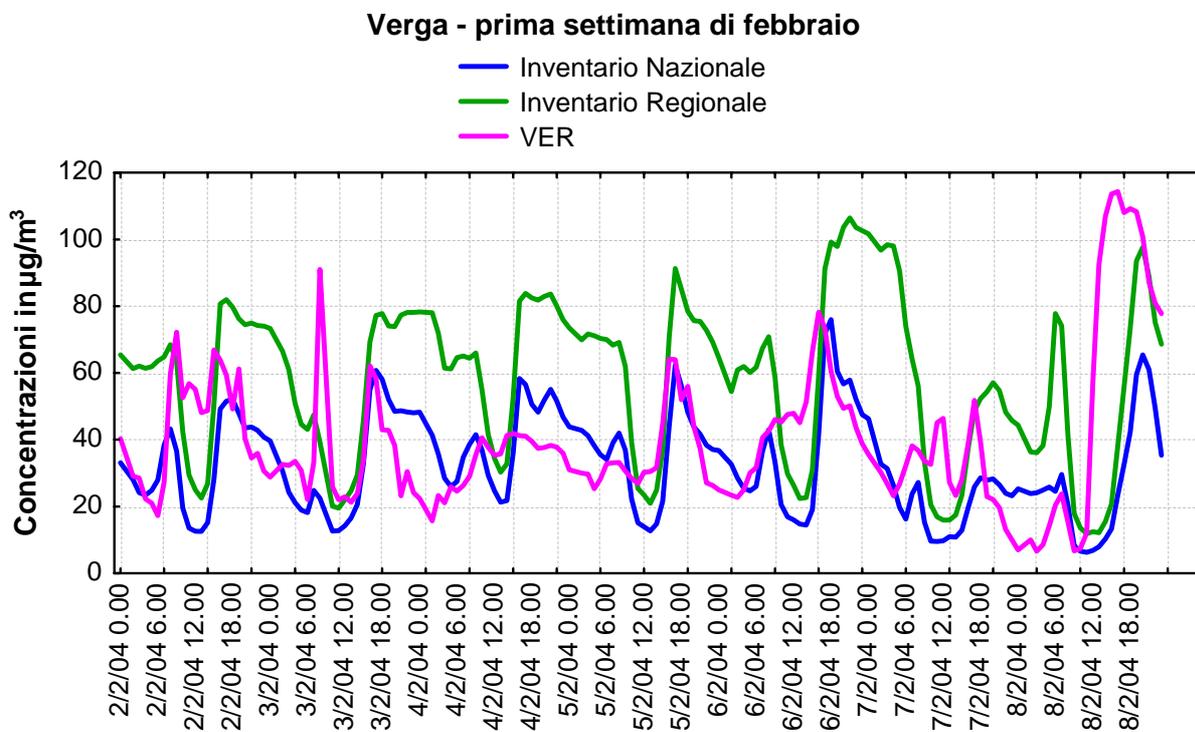


Figura 4.22: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di NO_2

Verga - prima settimana di luglio

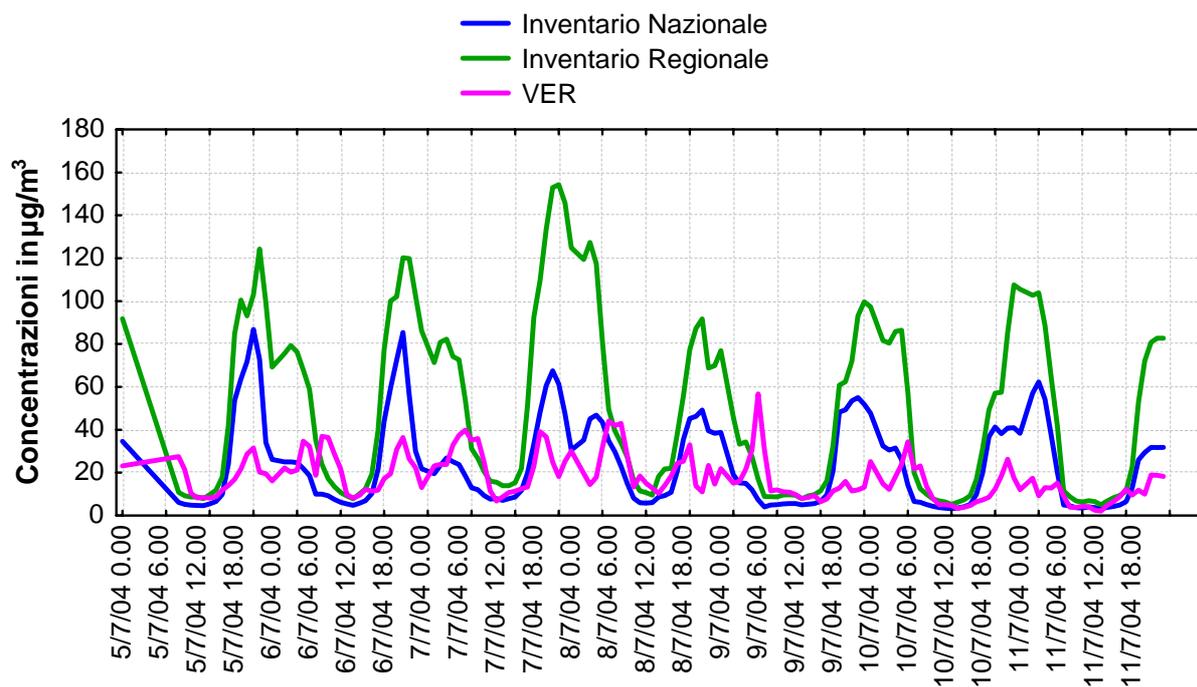


Figura 4.23: Confronto tra i dati orari misurati e stimati di NO_2

4.4 Confronto particolato PM₁₀

La normativa nazionale sul particolato (DM 60 02/04/2002) individua come indici di comparazione la media annua e quella giornaliera. Pertanto nel confronto tra dati misurati e dati stimati sono state utilizzate queste informazioni, congiuntamente alla mediana annua ed al 98,1° percentile. Questi ultimi due valori sono stati scelti al fine rendere il più esaustivo possibile il confronto e in particolare il valore del 98,1° percentile, indicato della normativa per il PM₁₀.

Per entrambe le aree considerate sono riportate le analisi per le stazioni fisse in cui era presente nel 2004 l'analizzatore di PM₁₀.

Area metropolitana di Perugia

Nell'area metropolitana di Perugia, nel 2004, erano attive tre stazioni per la misura del PM₁₀: la stazione di Cortonese (COR), la stazione di Fontivegge (FON) e la stazione di Ponte San Giovanni (PSG).

Nella tabella 4.10 sono riportate le grandezze caratterizzanti le distribuzioni esaminate. Sia per i dati simulati che per quelli misurati sono stati calcolati i valori di media, mediana (50° percentile), 98,1° percentile e deviazione standard.

Da una prima analisi si evince che le simulazioni tendono a sottostimare le concentrazioni di PM₁₀, tale comportamento può essere evitato risolvibile tramite una procedura di correzione.

Tabella 4.10: Grandezze statistiche caratterizzanti le distribuzioni di PM₁₀ per l'area metropolitana di Perugia

Indici	Unità di misura	Centralina	Inventario nazionale	Inventario regionale
Stazione Cortonese				
Media	µg/m ³	32,56	14,67	14,11
50° Percentile	µg/m ³	29,54	13,72	12,77
98,1° Percentile	µg/m ³	86,55	34,19	35,77
Deviazione Standard	µg/m ³	18,88	6,71	7,17
Stazione Fontivegge				
Media	µg/m ³	41,20	14,44	14,22
50° Percentile	µg/m ³	33,90	13,60	12,96
98,1° Percentile	µg/m ³	142,82	33,34	35,76
Deviazione Standard	µg/m ³	28,59	6,57	7,19
Stazione Ponte San Giovanni				
Media	µg/m ³	37,45	14,39	16,00
50° Percentile	µg/m ³	31,96	13,81	14,81
98,1° Percentile	µg/m ³	107,67	31,17	39,20
Deviazione Standard	µg/m ³	20,69	6,29	7,63

Le figure 4.24 e 4.25 mostrano due tipici andamenti delle concentrazioni di quest'inquinante nel periodo invernale ed in quello estivo, i grafici confrontano i dati misurati con quelli stimati con la catena modellistica utilizzando le emissioni dell'inventario nazionale e di quello regionale.

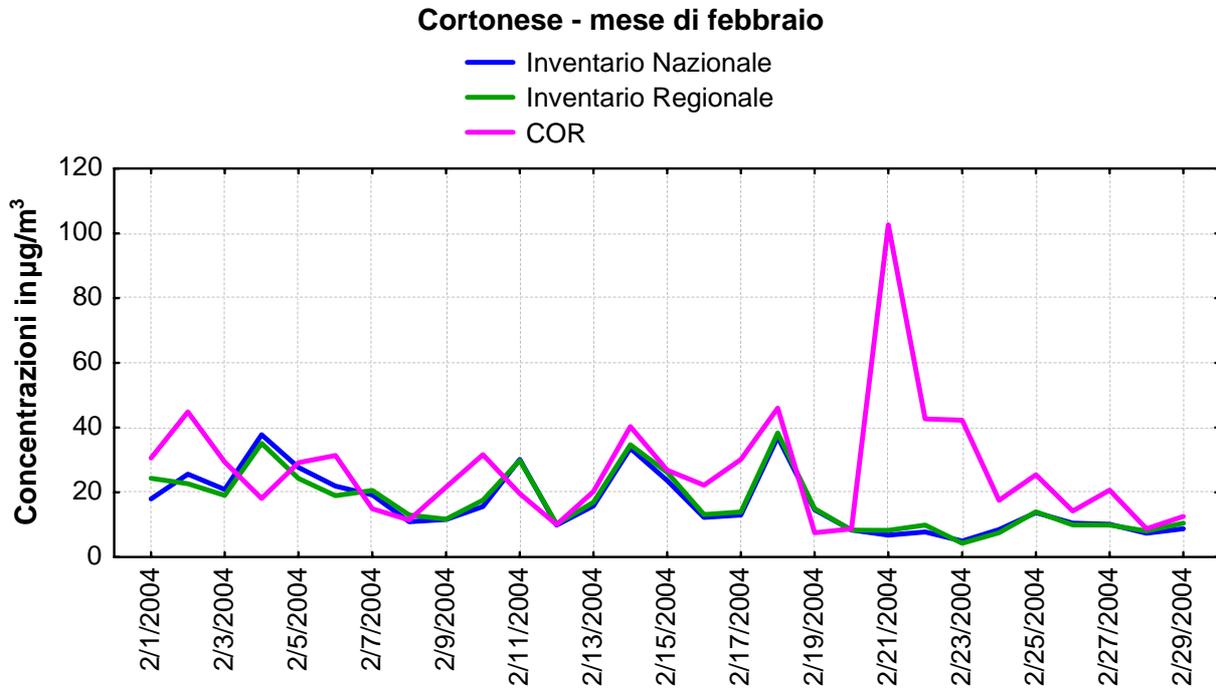


Figura 4.24: Andamento della concentrazione di PM₁₀, espressa in µg/m³, durante il mese di febbraio

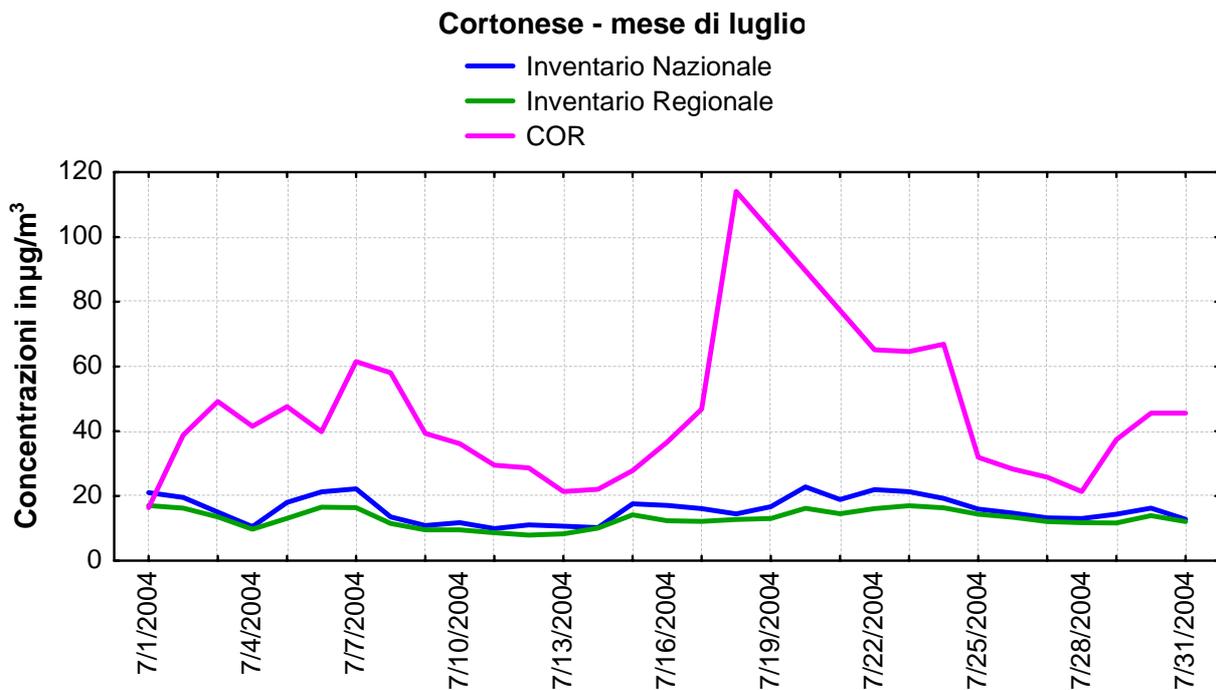


Figura 4.25: Andamento della concentrazione di PM₁₀, espressa in µg/m³, durante il mese di luglio

L'analisi di performance del modello Chimere è realizzata utilizzando degli opportuni indici statistici. Nella tabella 4.11 sono riportati gli indici utilizzati nel confronto tra i dati stimati e quelli misurati nelle stazioni di Cortonese, Fontivegge e Ponte San Giovanni.

Il confronto delle misure di PM₁₀ nell'area di Perugia e Ponte San Giovanni con le simulazioni di Chimere evidenzia una sottostima sistematica. Il BIAS è compreso tra -18 e -27 µg/m³ e tutti gli altri indici confermano questa tendenza del modello.

Tabella 4.11: Indicatori statistici valori stimati con il modello Chimere di PM₁₀ per l'area metropolitana di Perugia

Indici	Unità di misura	Valore ottimale indice	Inventario nazionale	Inventario regionale
Stazione Cortonese				
BIAS	µg/m ³	0	-17,89	-18,45
R	adimensionale	1	0,53	0,50
FB	adimensionale	0	-0,76	-0,79
NMBF	adimensionale	0	-1,22	-1,31
NMSE	adimensionale	0	1,19	1,27
SKILL-VAR	adimensionale	1	0,36	0,38
MG	adimensionale	1	2,22	2,31
VG	adimensionale	1	1,89	2,01
Stazione Fontivegge				
BIAS	µg/m ³	0	-26,76	-26,98
R	adimensionale	1	0,46	0,55
FB	adimensionale	0	-0,96	-0,97
NMBF	adimensionale	0	-1,85	-1,90
NMSE	adimensionale	0	2,04	2,05
SKILL-VAR	adimensionale	1	0,23	0,25
MG	adimensionale	1	2,85	2,90
VG	adimensionale	1	3,00	3,10
Stazione Ponte San Giovanni				
BIAS	µg/m ³	0	-23,06	-21,45
R	adimensionale	1	0,53	0,64
FB	adimensionale	0	-0,89	-0,80
NMBF	adimensionale	0	-1,60	-1,34
NMSE	adimensionale	0	1,55	1,24
SKILL-VAR	adimensionale	1	0,30	0,37
MG	adimensionale	1	2,60	2,34
VG	adimensionale	1	2,50	2,06

Gli indici FB e NMBF assumono sempre valori negativi (indicando quindi una sottostima). Anche indici MG e VG, che danno sempre una indicazione sulla sovrastima e sottostima, sono sistematicamente sopra al valore dell'unità indicando quindi una sottostima.

L'indice SKILL-VAR, che misura la capacità del modello di riprodurre la variabilità delle osservazioni, è sempre positivo con valori che oscillano tra 0,25 e 0,38; ciò indica che l'errore prodotto dal modello è sistematico.

La correlazione (R) delle medie giornaliere di PM₁₀ è molto vicina a 0,60 in quasi tutti i punti di confronto evidenziando una correlazione sufficiente. L'errore prodotto dal modello e normalizzato (NMSE) varia intorno al valore 2.

Area della Conca Ternana

Nell'area della Conca Ternana, nel 2004, erano attive tre stazioni per la misura delle polveri fini: la stazione di Borgo Rivo (BOR), la stazione di Carrara (CAR) e la stazione di Verga (VER).

Per i dati simulati e per quelli misurati sono stati calcolati i valori di media, mediana (50° percentile), 98,1° percentile e deviazione standard, nella tabella 4.12 sono riportate le grandezze caratterizzanti le distribuzioni esaminate.

Anche in questo caso una prima analisi si mostra che le simulazioni tendono a sottostimare le concentrazioni di PM₁₀. Tale comportamento è superabile tramite una procedura di correzione.

Tabella 4.12: Grandezze statistiche caratterizzanti le distribuzioni di PM₁₀ per l'area della Conca Ternana

Indici	Unità di misura	Centralina	Inventario nazionale	Inventario regionale
Stazione Borgo Rivo				
Media	µg/m ³	35,75	8,94	10,36
50° Percentile	µg/m ³	34,30	8,38	10,00
98,1° Percentile	µg/m ³	78,32	17,54	20,47
Deviazione Standard	µg/m ³	17,92	3,97	4,37
Stazione Carrara				
Media	µg/m ³	30,60	12,62	14,29
50° Percentile	µg/m ³	28,50	12,33	14,10
98,1° Percentile	µg/m ³	67,78	23,16	28,30
Deviazione Standard	µg/m ³	12,81	4,62	5,60
Stazione Verga				
Media	µg/m ³	23,68	13,64	14,17
50° Percentile	µg/m ³	20,10	13,35	13,78
98,1° Percentile	µg/m ³	62,18	25,24	27,93
Deviazione Standard	µg/m ³	13,50	4,86	5,60

La sistematica sottostima dei dati stimati rispetto a quelli misurati e evidenziata anche nelle figure 4.26 e 4.27, dove sono riportati due tipici andamenti delle concentrazioni di PM₁₀ nel periodo invernale ed in quello estivo per la stazione VER.

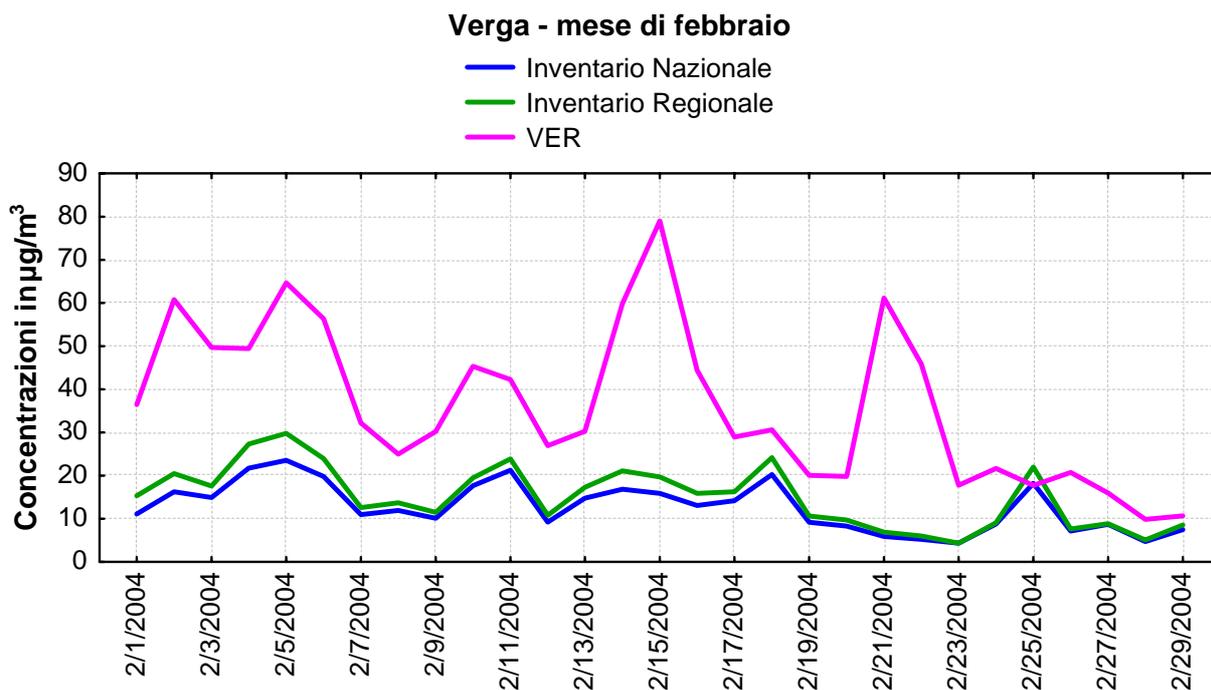


Figura 4.26: Andamento della concentrazione di PM₁₀, espressa in µg/m³, durante il mese di febbraio

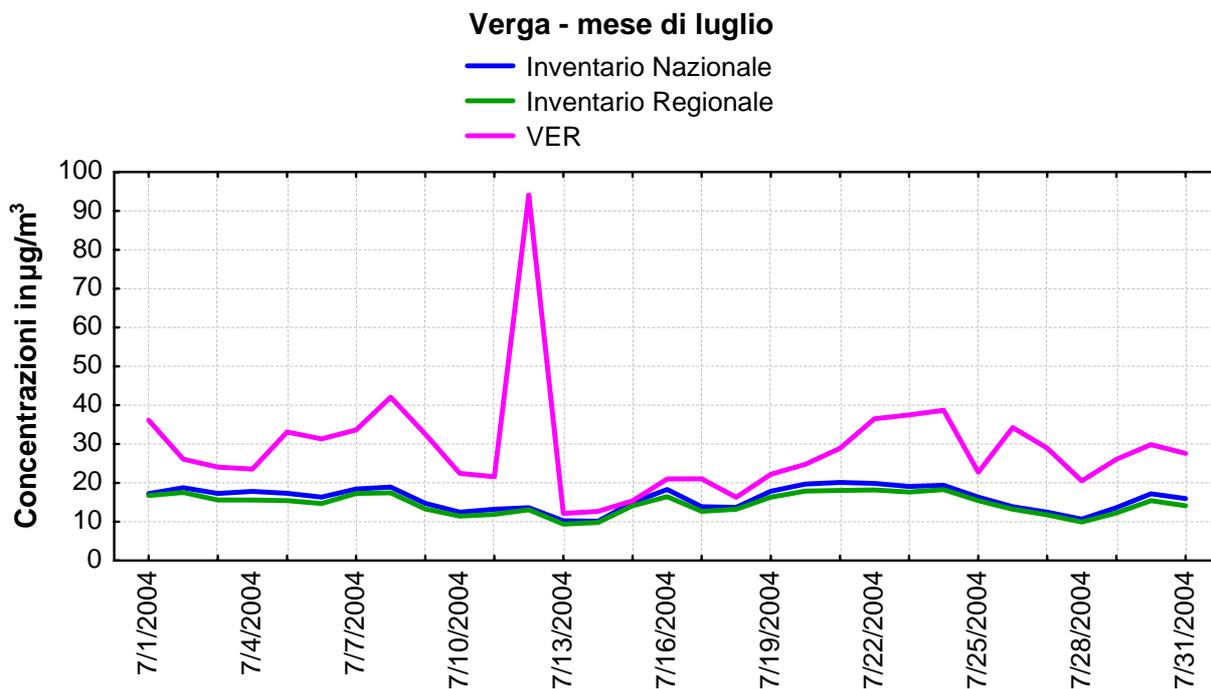


Figura 4.27: Andamento della concentrazione di PM₁₀, espressa in µg/m³, durante il mese di luglio

L'analisi degli indici statistici conferma la sottostima dei dati ottenuti con il modello Chimere. Nella tabella 4.13 sono riportati indici di performance del modello utilizzati nel confronto tra i dati misurati dalle tre stazioni presenti sul territorio e quelli stimati con la catena modellistica utilizzando dati emissivi dell'inventario nazionale e regionale. Tutti gli indici confermano questa tendenza del modello alla sottostima.

Il BIAS della media è compreso tra -10 e -27 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, ovvero sempre negativo.

Gli indici FB e NMBF, che indicano il comportamento di sovrastima o sottostima del modello, assumono sempre valori negativi e gli indici MG e VG sono sistematicamente sopra al valore dell'unità, il tutto indica quindi una sottostima.

Tabella 4.13: Indicatori statistici valori stimati con il modello Chimere di PM_{10} per l'area della Conca Ternana

Indici	Unità di misura	Valore ottimale indice	Inventario nazionale	Inventario regionale
Stazione Borgo Rivo				
BIAS	$\mu\text{g}/\text{m}^3$	0	-26,80	-25,38
R	adimensionale	1	0,44	0,55
FB	adimensionale	0	-1,20	-1,10
NMBF	adimensionale	0	-3,00	-2,45
NMSE	adimensionale	0	3,06	2,39
SKILL-VAR	adimensionale	1	0,22	0,24
MG	adimensionale	1	4,00	3,45
VG	adimensionale	1	6,82	4,63
Stazione Carrara				
BIAS	$\mu\text{g}/\text{m}^3$	0	-17,97	-16,31
R	adimensionale	1	0,43	0,58
FB	adimensionale	0	-0,83	-0,73
NMBF	adimensionale	0	-1,42	-1,14
NMSE	adimensionale	0	1,17	0,86
SKILL-VAR	adimensionale	1	0,36	0,44
MG	adimensionale	1	2,42	2,14
VG	adimensionale	1	2,19	1,79
Stazione Verga				
BIAS	$\mu\text{g}/\text{m}^3$	0	-10,04	-9,51
R	adimensionale	1	0,36	0,42
FB	adimensionale	0	-0,54	-0,50
NMBF	adimensionale	0	-0,74	-0,67
NMSE	adimensionale	0	0,78	0,69
SKILL-VAR	adimensionale	1	0,36	0,41
MG	adimensionale	1	1,74	1,67
VG	adimensionale	1	1,36	1,30

L'indice SKILL-VAR, che misura la capacità del modello di riprodurre la variabilità delle osservazioni, è sempre positivo con valori che oscillano tra 0,22 e 0,44.

La correlazione delle medie giornaliere di PM_{10} è molto vicina a 0,50 in quasi tutti i punti di confronto; l'errore prodotto dal modello e normalizzato (NMSE) varia dal valore 0,69 al valore 3, in dipendenza del punto di confronto. Questo indica una scarsa correlazione tra i dati misurati e quelli stimati.

4.5 Ozono extraregionale

Come già spiegato precedentemente, il dominio di calcolo della modellizzazione copre un'area più vasta di quella della Regione Umbria (vedi figura 2.2 cap. 2); pertanto il codice effettua le sue valutazioni anche in punti esterni ai confini regionali.

In questa vasta zona del centro Italia, sono presenti numerose stazioni fisse di monitoraggio della qualità dell'aria. Pertanto si è ritenuto utile effettuare un confronto dell'output del modello Chimere anche con le misure effettuate da queste stazioni.

Il confronto è stato fatto con la stessa metodologia utilizzata per le stazioni dell'Umbria; i punti sono stati scelti in base alla localizzazione delle stazioni ed alla disponibilità dei dati (trattandosi di centraline extraregionali non è stato sempre possibile reperire i dati). Lo sviluppo modellistico è stato applicato all'anno 2004, utilizzando i dati emissivi estratti dall'inventario nazionale per ovvi motivi di disponibilità di informazioni; inoltre, il confronto è stato fatto per il solo ozono in quanto l'inquinata per il quale è stato possibile reperire un buon numero di misure orarie di monitoraggio della concentrazione al suolo².

Nella figura 4.28 sono riassunte le posizioni delle stazioni utilizzate per il confronto extraregionale. Si può notare che alcune di queste sono posizionate oltre il confine della Regione Umbria. In ogni caso esse ricadono nel dominio di calcolo, rappresentato nella figura dalle linee rosse.



Figura 4.28: Posizione delle stazioni di misura regionali ed extra regionali

² Al fine di confrontare valori temporalmente corrispondenti, è stato necessario effettuare uno shift orario dei dati registrati dalle centraline pari ad un'ora per ritornare all'UTC.

La tipologia e le caratteristiche delle centraline situate fuori dal confine regionale sono riassunte nella tabella 4.14.

Tabella 4.14: Descrizione delle stazioni fisse extraregionali di O₃ considerate

Stazione	Tipo stazione	Tipo zona	Caratteristiche
RM_Montelibretti	fondo	rurale	stazione della rete EMEP
BO_Giardini Margherita	fondo	urbano	residenziale
FI_Boboli	fondo	urbano	residenziale, commerciale
RM_Villa Ada	fondo	urbano	naturale
RI_Leonessa	fondo	rurale	naturale
BO_Montecuccolino	fondo	suburbano	naturale
LI_Gabbro	fondo	rurale	naturale
PE_Teatro D'Annunzio	fondo	suburbano	parco naturale, vicino a spiaggia
AN_Chiaravalle	fondo	suburbano	aperta campagna, zona commerciale

Le stazioni di misura sono tutte classificate come di fondo, la scelta della tipologia è legata alla loro localizzazione; in generale una stazione di fondo è collocata in un'area verde non direttamente interessate dalle sorgenti emissive e quindi in condizioni che meglio si avvicinano a quelle utilizzate dal modello di calcolo che non riesce a riprodurre in modo ottimale situazioni singolari, tipo di *canyon street*.

In analogia con quanto fatto per le stazioni della regione Umbria, sono stati utilizzati indici e valori statistici. Per ogni punto sono state calcolate media e deviazione standard dei valori simulati e misurati tre principali indici di performance, ovvero l'indice di correlazione R, l'indice FB e l'indice NMSE.

Nel confronto è stata anche inserita la stazione umbra Cortonese in quanto stazione di fondo per l'ozono.

Nella tabella 4.15 sono sintetizzati i parametri e gli indici calcolati sia per i punti dell'Umbria, sia per quelli extraregionali.

Analizzando i risultati è possibile notare che in confronto con le stazioni fuori regione si mantiene buono così come era avvenuto per il confronto regionale.

L'indice di correlazione lineare (R) assume valori molto buoni, intorno a 0,60, considerando che il suo valore ottimale è pari a 1.

La stima degli scarti complessivi tra i valori osservati e quelli simulati è accettabile in quanto l'indice NMSE assume valori inferiori a 0,50 (fatta eccezione per FI_Boboli e Rm_Villa Ada); il valore ottimale di questo indice è pari a 0 ma valori inferiori a 0.5 indicano un risultato accettabile del confronto.

L'indice FB, che misura la sovra o sotto stima del modello, varia tra 0,37 e -0,28, mostrando un ottimo comportamento del modello nel riprodurre sia l'andamento spaziale che quello temporale dell'ozono considerando che il suo valore ottimale è pari a 1.

Tabella 4.15: Parametri statistici e di performance relative a O₃

Centraline	Parametri statistici				Indici di performance		
	media centralina	dev.st centralina	media simulazione	dev.st simulazione	R	FB	NMS E
	µg/m ³	µg/m ³	µg/m ³	µg/m ³	-	-	-
Pg_Cortonese (*)	57,88	37,67	61,69	34,34	0,76	0,06	0,18
Pg_Fontivegge(*)	32,78	25,98	58,96	33,38	0,64	0,57	0,70
Pg_Ponte San Giovanni(*)	40,37	31,47	58,16	33,17	0,79	0,36	0,33
Tr_Narni Scalo(*)	54,81	42,41	70,96	26,91	0,77	0,26	0,26
Tr_Borgo Rivo(*)	46,43	33,34	70,58	25,13	0,65	0,41	0,38
Tr_Carrara(*)	32,78	28,22	69,40	25,18	0,75	0,72	0,75
Tr_Verga(*)	42,73	32,08	66,54	27,17	0,74	0,44	0,37
Tr_Le Grazie(*)	59,61	47,48	71,63	28,81	0,77	0,18	0,26
Fi_Boboli	36,41	33,46	52,92	35,57	0,61	0,37	0,62
Bo_Giardini Margherita	42,87	40,31	50,55	40,64	0,72	0,16	0,46
Rm_Villa Ada	42,46	40,37	40,75	39,03	0,59	-0,04	0,75
Ri_Leonessa	108,50	27,27	93,04	13,98	0,45	-0,15	0,08
Pe_Teatro D'Annunzio	41,98	35,58	55,01	28,69	0,61	0,27	0,44
An_Chiaravalle	44,54	36,94	63,01	29,11	0,60	0,34	0,45
Bo_Montecuccolino	65,98	47,51	51,86	40,85	0,64	-0,24	0,48
Li_Gabbro	71,66	43,68	79,70	26,08	0,44	0,11	0,29
Rm_Montelibretti	79,70	26,10	60,19	32,73	0,63	-0,28	0,22
Valore ottimale indice di performance					1	0	0

(*) Per le stazioni ombre i dati della simulazione riportati sono quelli valutati con le emissioni estratte dall'Inventario Nazionale. Il confronto con i risultati simulati con le emissioni estratte dall'Inventario Regionale risultato confrontabili come evidenziato nel paragrafo 4.1.

Il buon accordo tra i valori stimati e quelli misurati dalle stazioni fisse è anche evidenziato nei grafici di figura 4.29, 4.30 e 4.31 in cui è riportato l'andamento dei tre indici statistici di performance utilizzati: R, FB, NMSE.

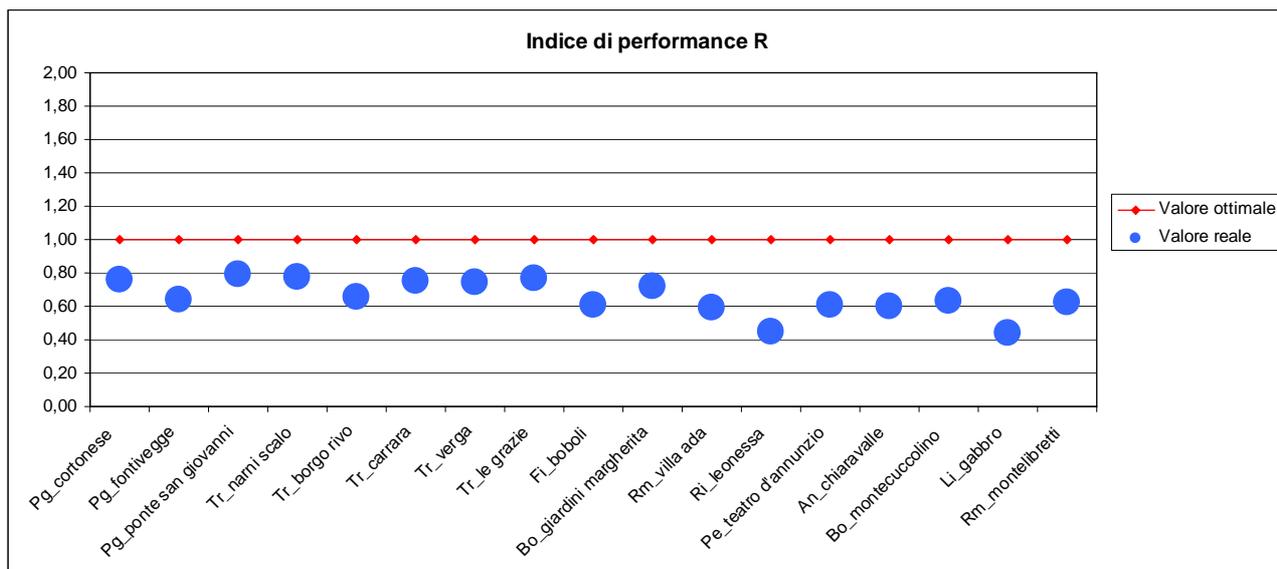


Figura 4.29: Andamento dell'indice di performance R relativo a O_3

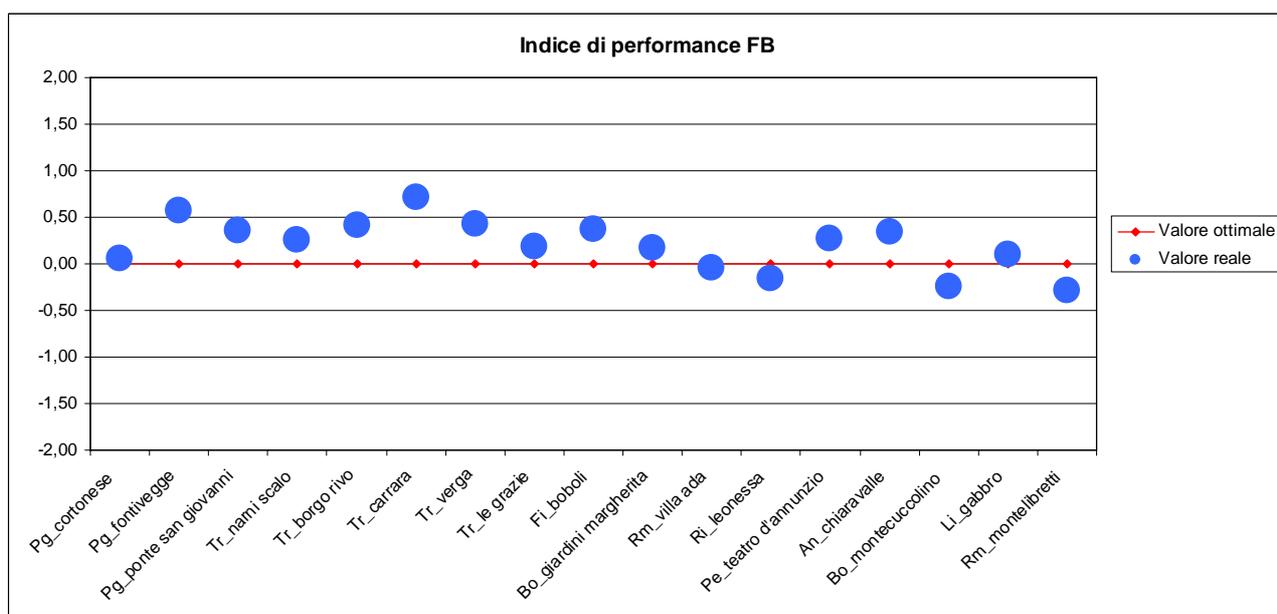


Figura 4.30: Andamento dell'indice di performance FB relativo a O_3

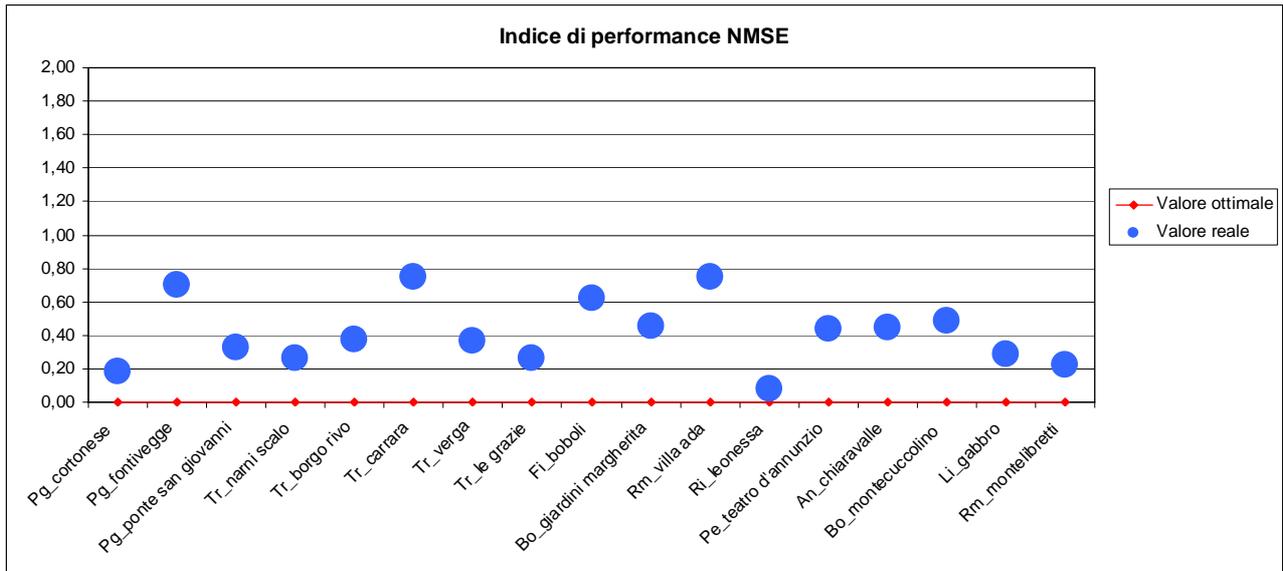


Figura 4.31: Andamento dell'indice di performance NMSE relativo a O_3

5. Risultati scenario base

In questo capitolo sono riportate le mappe di concentrazione degli inquinanti ottenuti come risultati della simulazione dello scenario base. Sono mostrate le concentrazioni medie annue di O₃, NO₂, PM₁₀ e PM_{2.5} sia per l'intero dominio che per la sola regione Umbria.

Oltre alle concentrazioni medie annue per l'ozono sono riportate anche le elaborazioni di alcuni degli indici di legge previsti dalla normativa, ovvero le mappe con il numero di superamenti di 120 µg/m³, quale medie mobili 8 ore giornaliera, l'indice AOT40, l'indice AOT40 foreste e l'indice SOMO35.

Infine è stato riportato anche l'andamento percentuale del rapporto tra PM_{2.5} e PM₁₀ per tutto il dominio di studio e per la sola regione Umbria.

5.1 Risultati per ozono

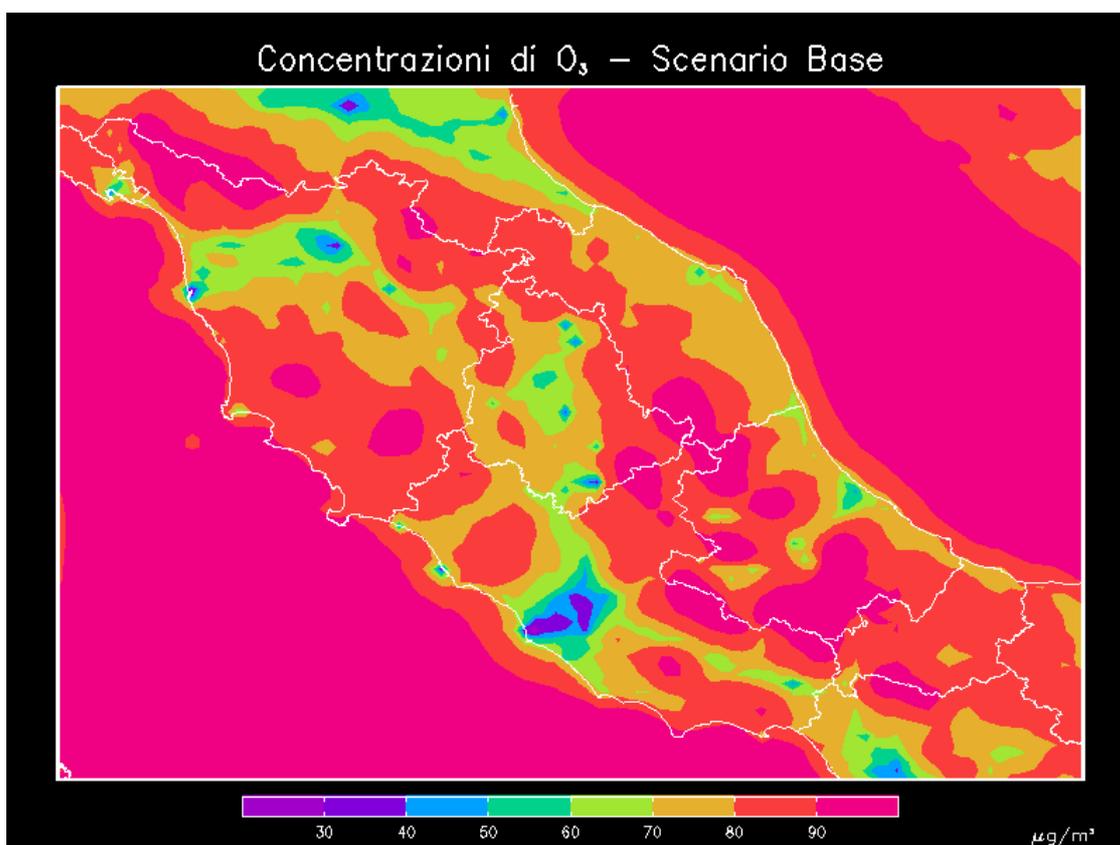


Figura 5.1: Concentrazione media annua di O₃ Italia centrale – scenario base

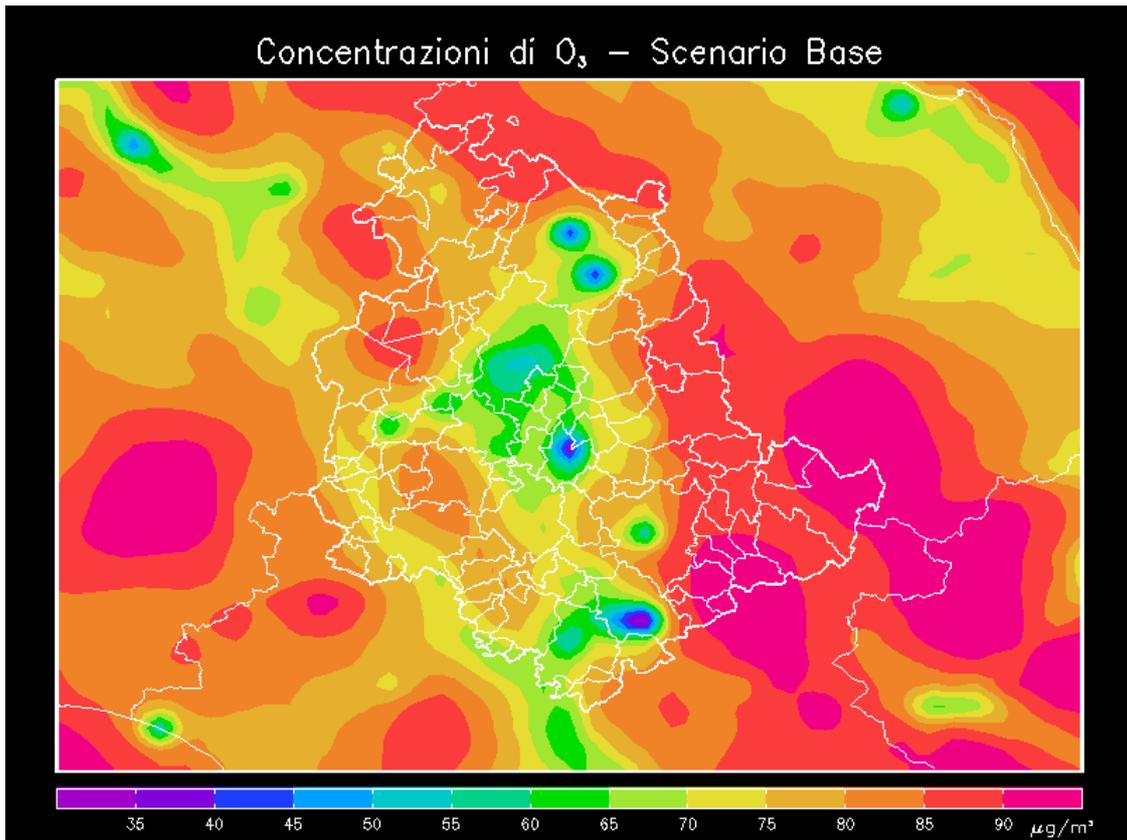


Figura 5.2: Concentrazione media annua di O₃ Umbria – scenario base

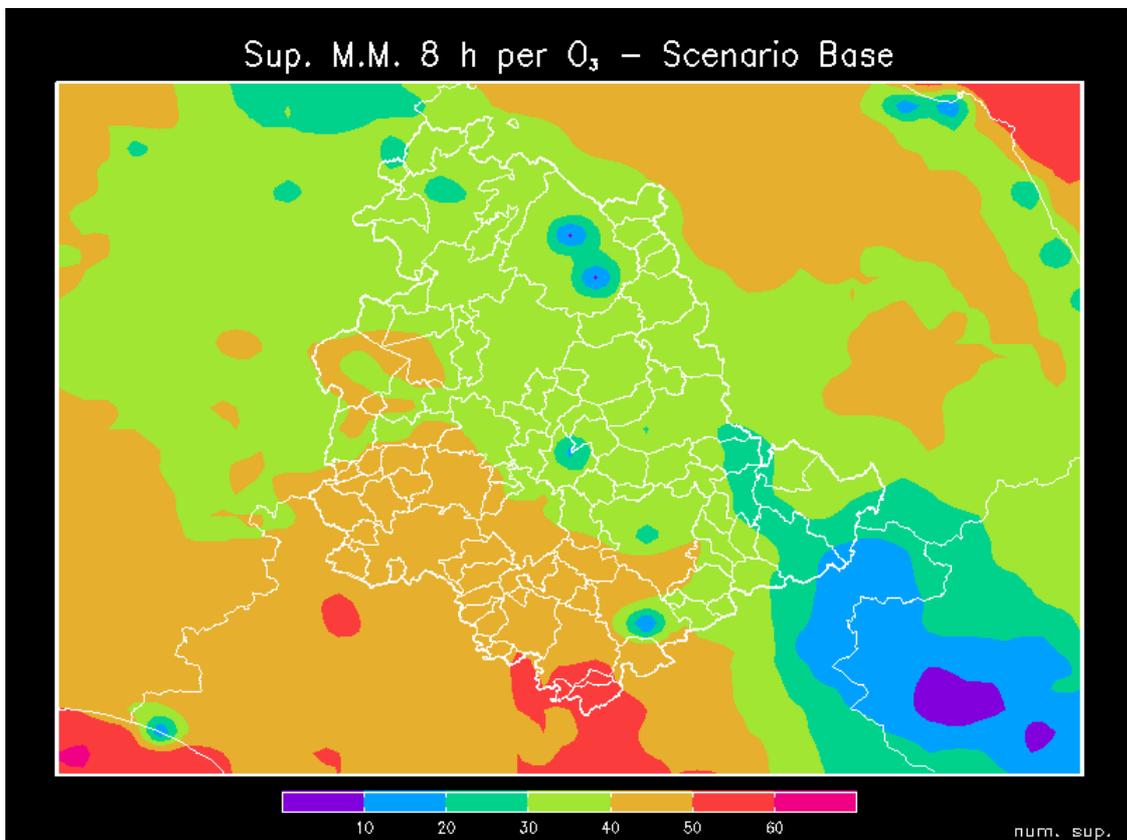


Figura 5.3: Numero di superamenti di 120 µg/m³ quale media mobile 8 ore giornaliera per O₃ Umbria – scenario base

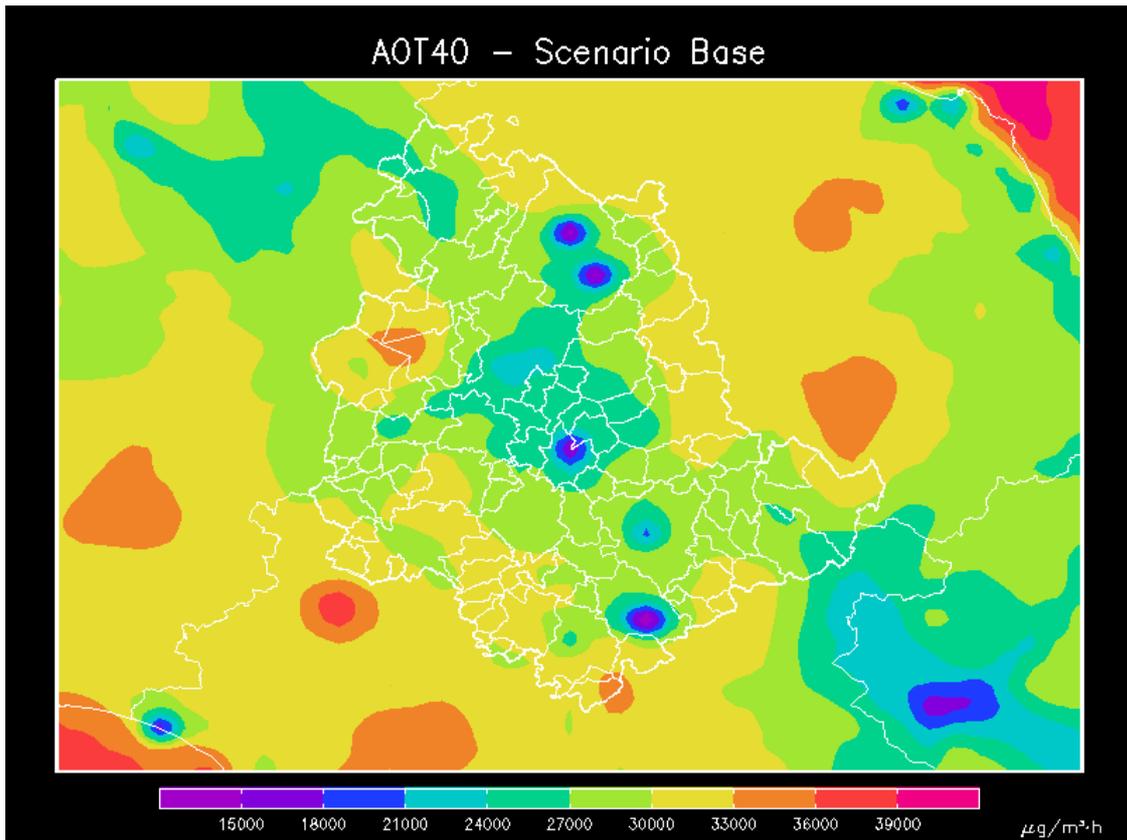


Figura 5.4: Indice AOT40 per O₃ Umbria – scenario base

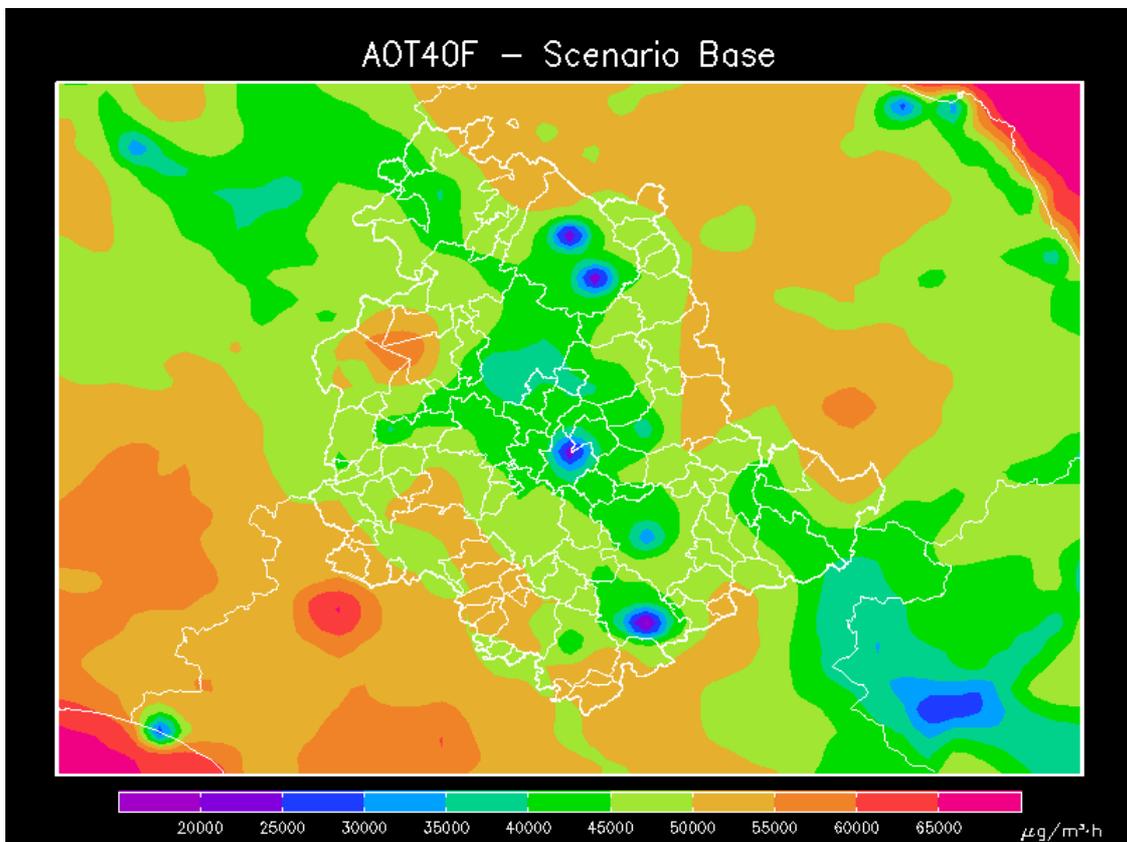


Figura 5.5: Indice AOT40 foreste per O₃ Umbria – scenario base

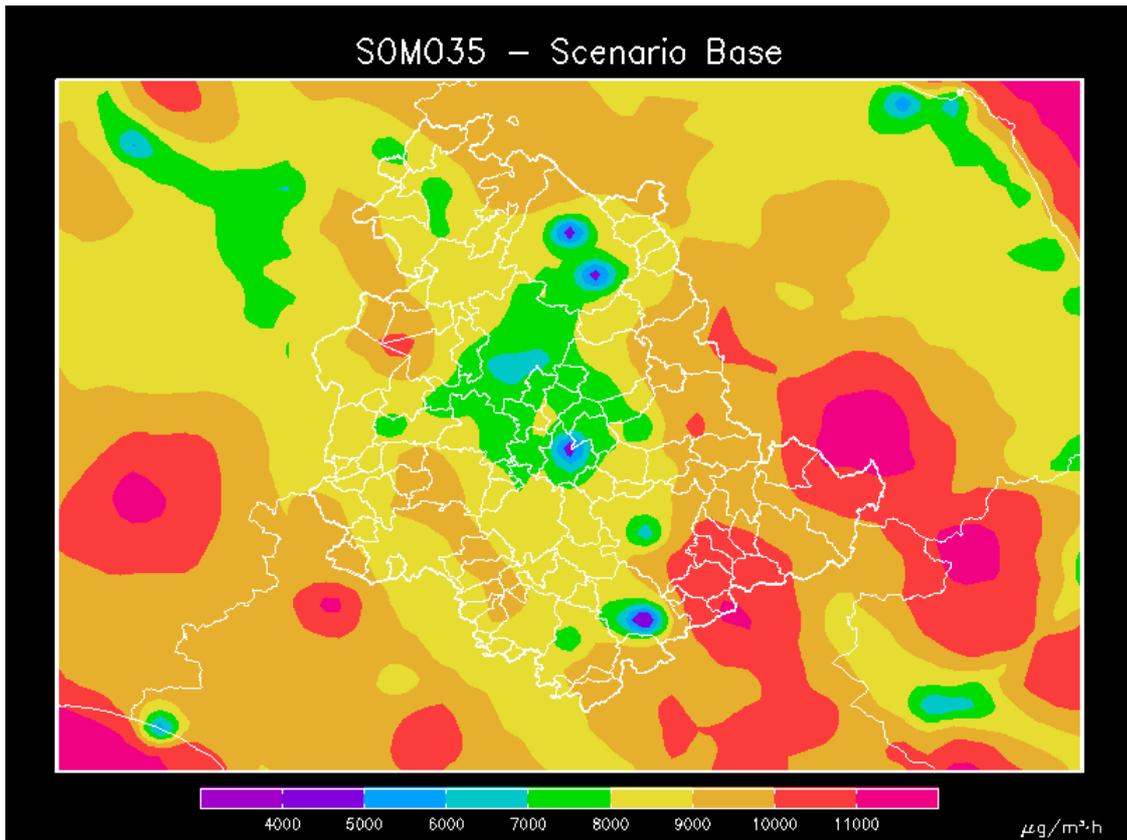


Figura 5.6: Indice SOMO35 per O₃ Umbria – scenario base

5.2 Risultati per biossido di azoto

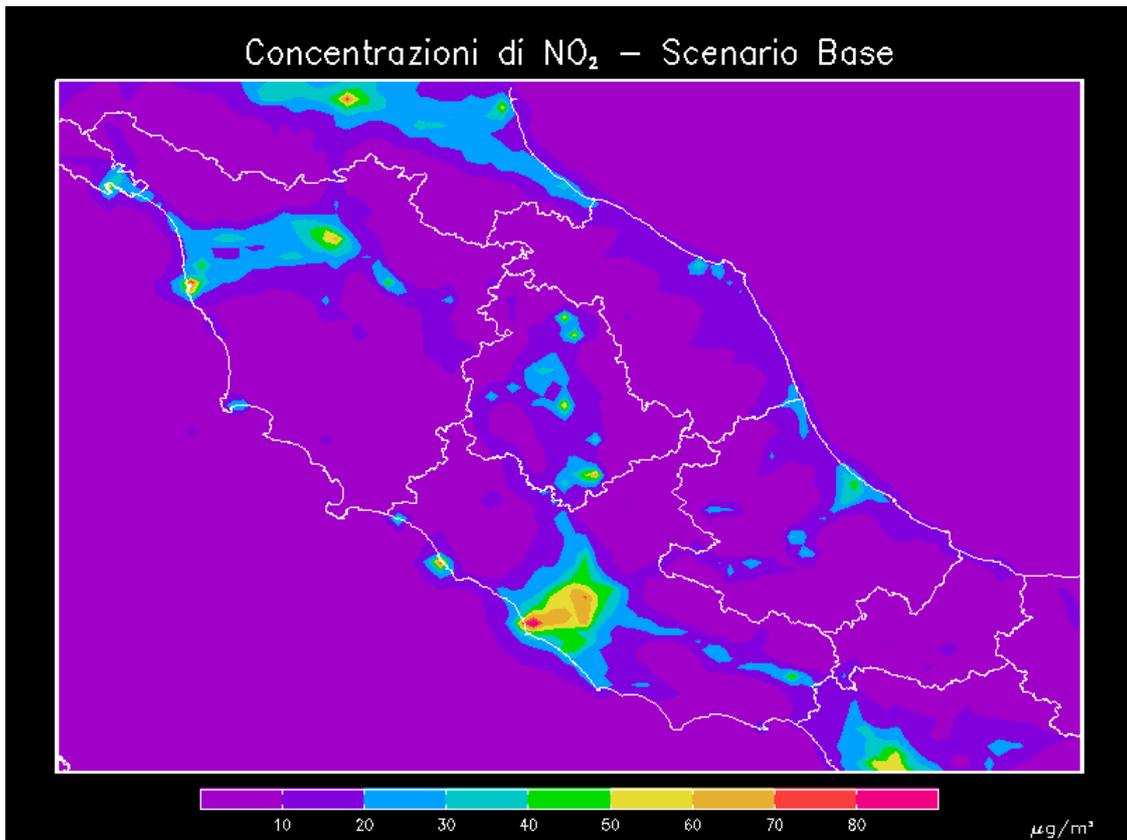


Figura 5.7: Concentrazione media annua di NO₂ Italia centrale – scenario base

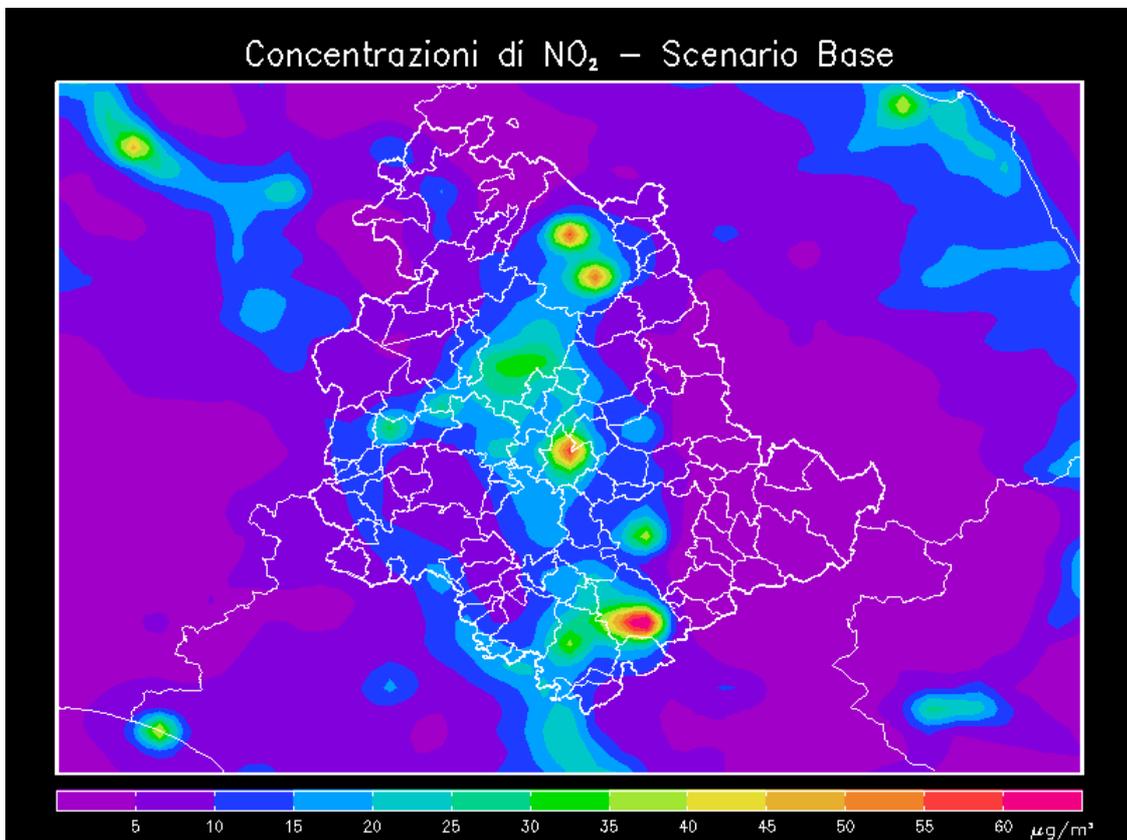


Figura 5.8: Concentrazione media annua di NO₂ Umbria – scenario base

5.3 Risultati per particolato PM₁₀ e PM_{2.5}

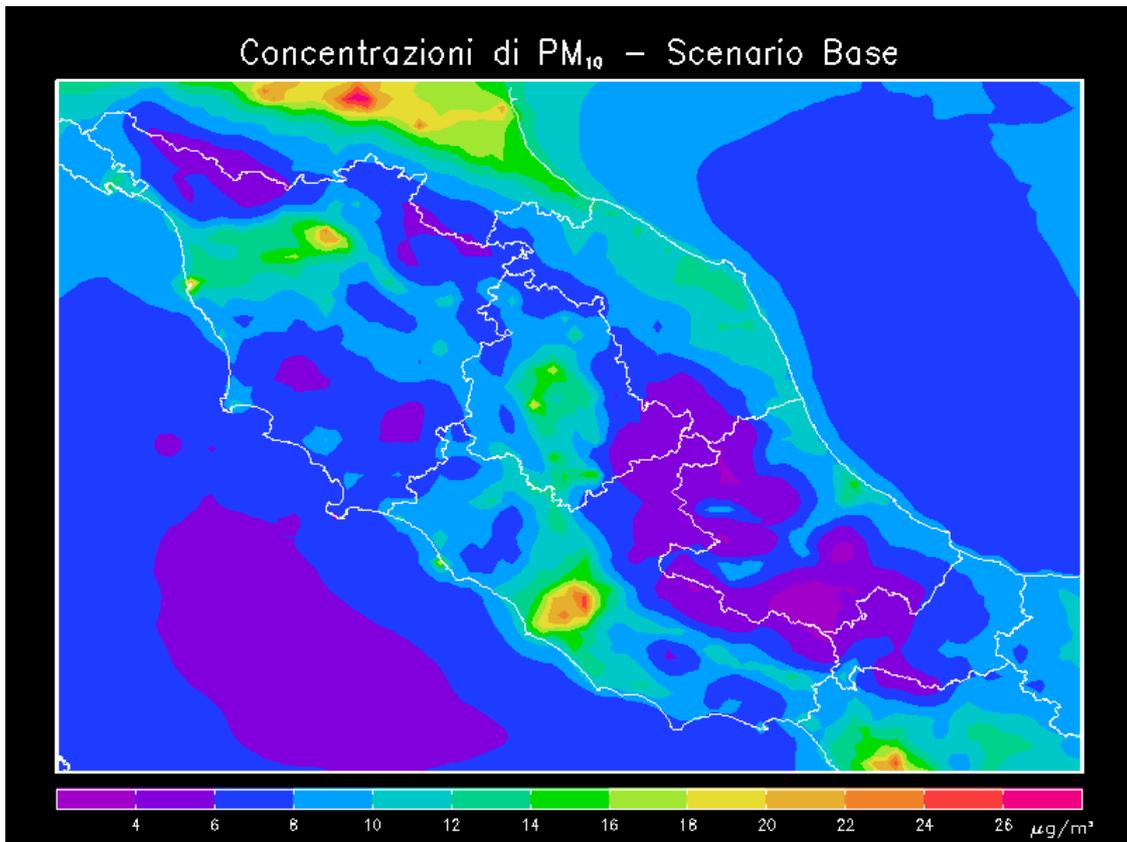


Figura 5.9: Concentrazione media annua di PM₁₀ Italia centrale – scenario base

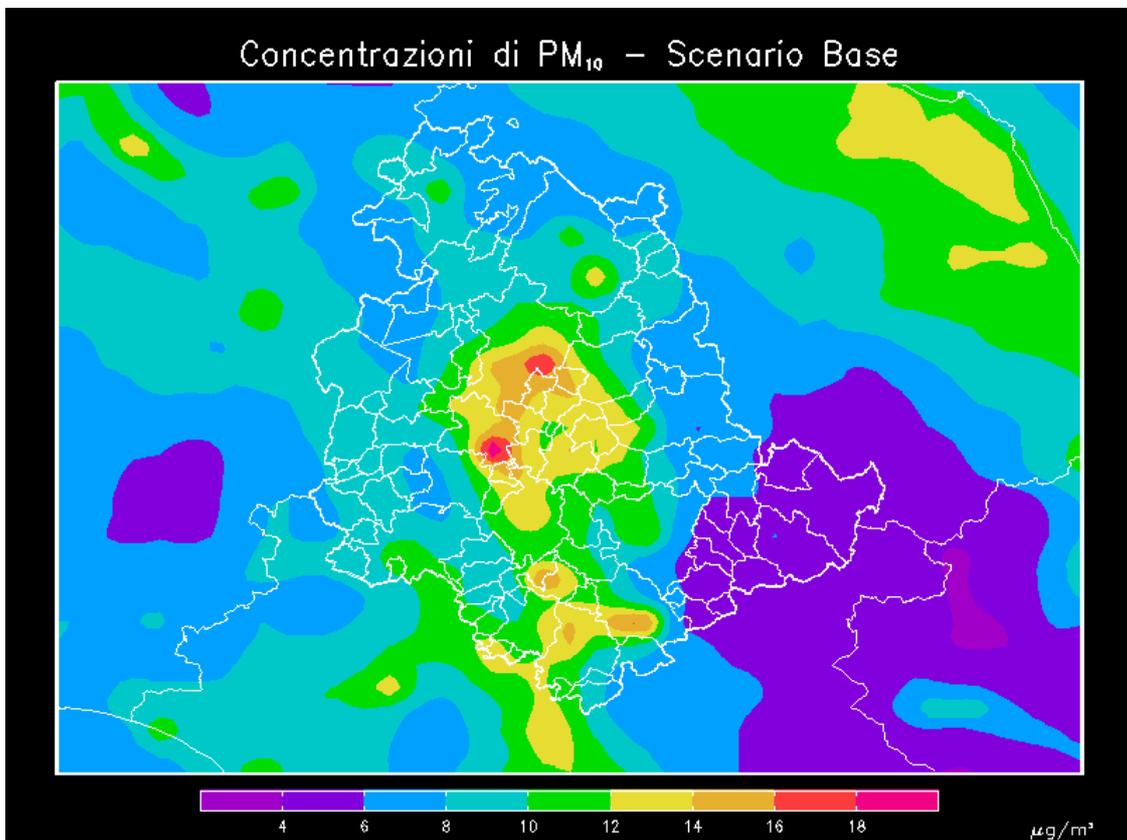


Figura 5.10: Concentrazione media annua di PM₁₀ Umbria – scenario base

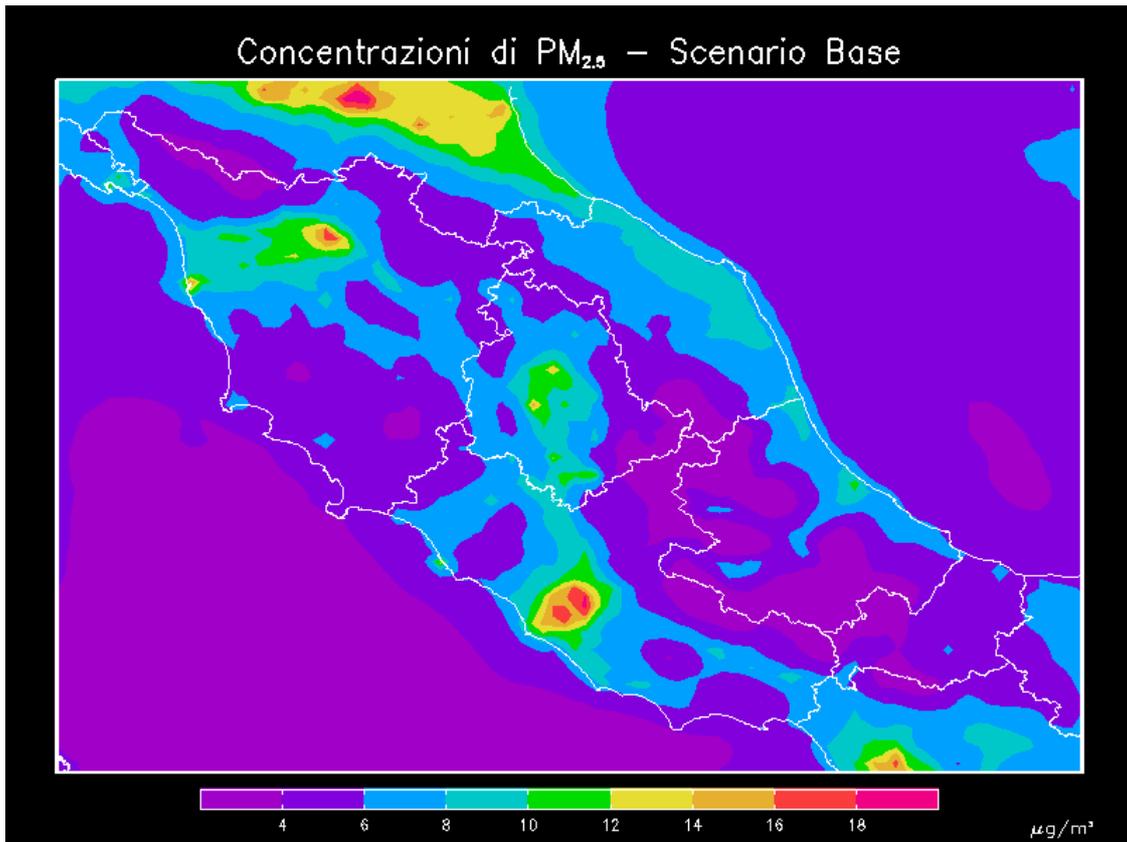


Figura 5.11: Concentrazione media annua di $PM_{2.5}$ Italia centrale – scenario base

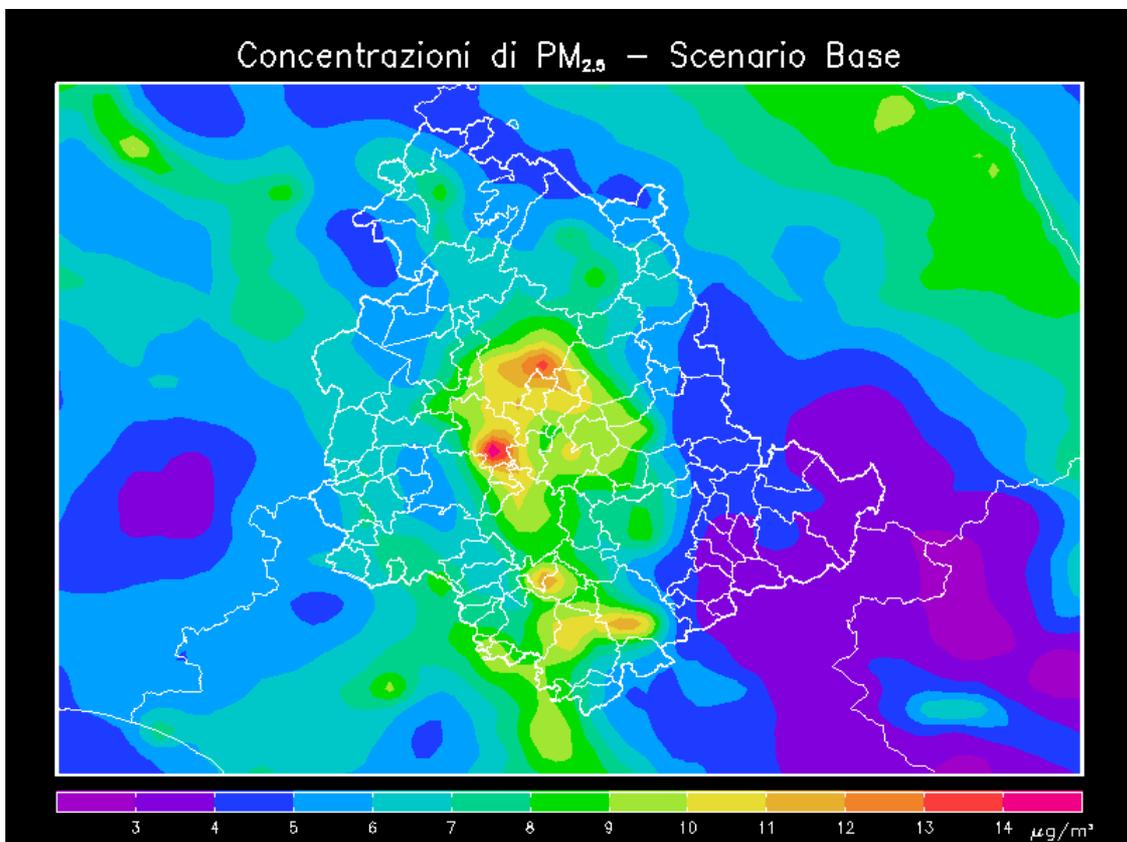


Figura 5.12: Concentrazione media annua di $PM_{2.5}$ Umbria – scenario base

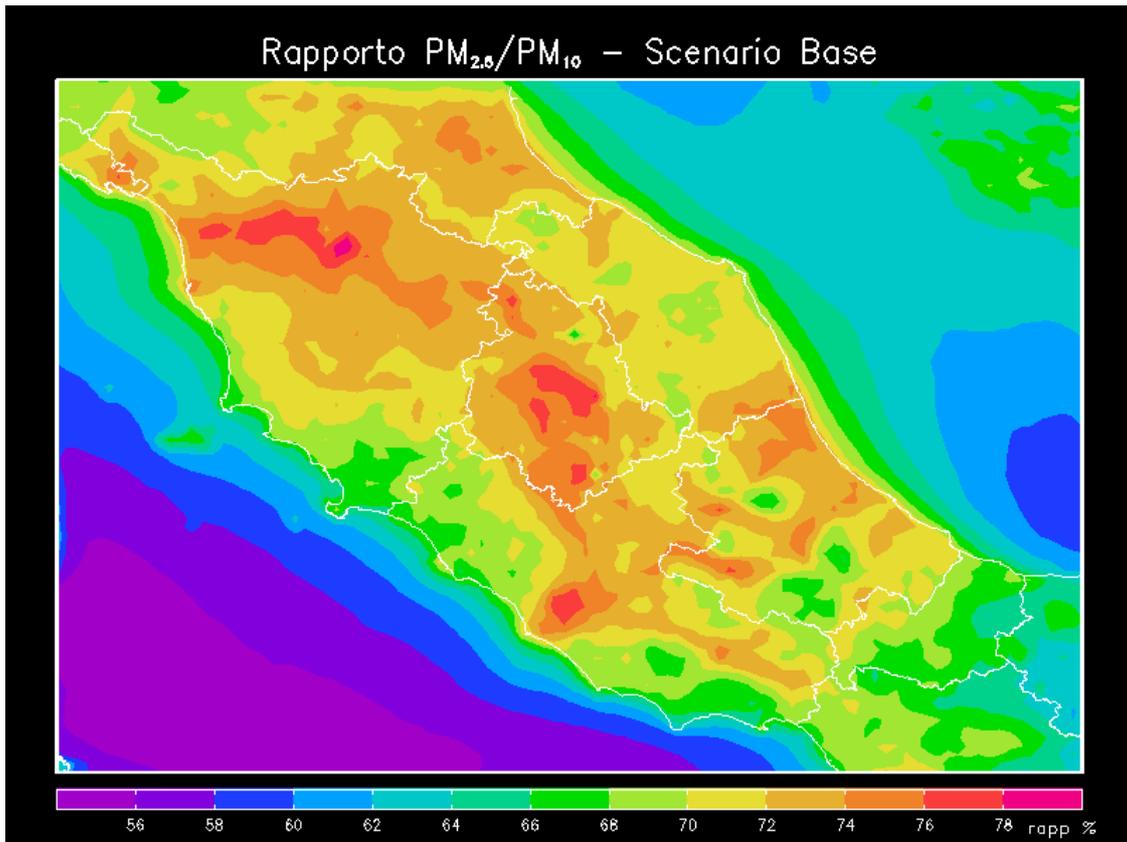


Figura 5.13: Rapporto percentuale tra $PM_{2.5}$ e PM_{10} Italia centrale – scenario base

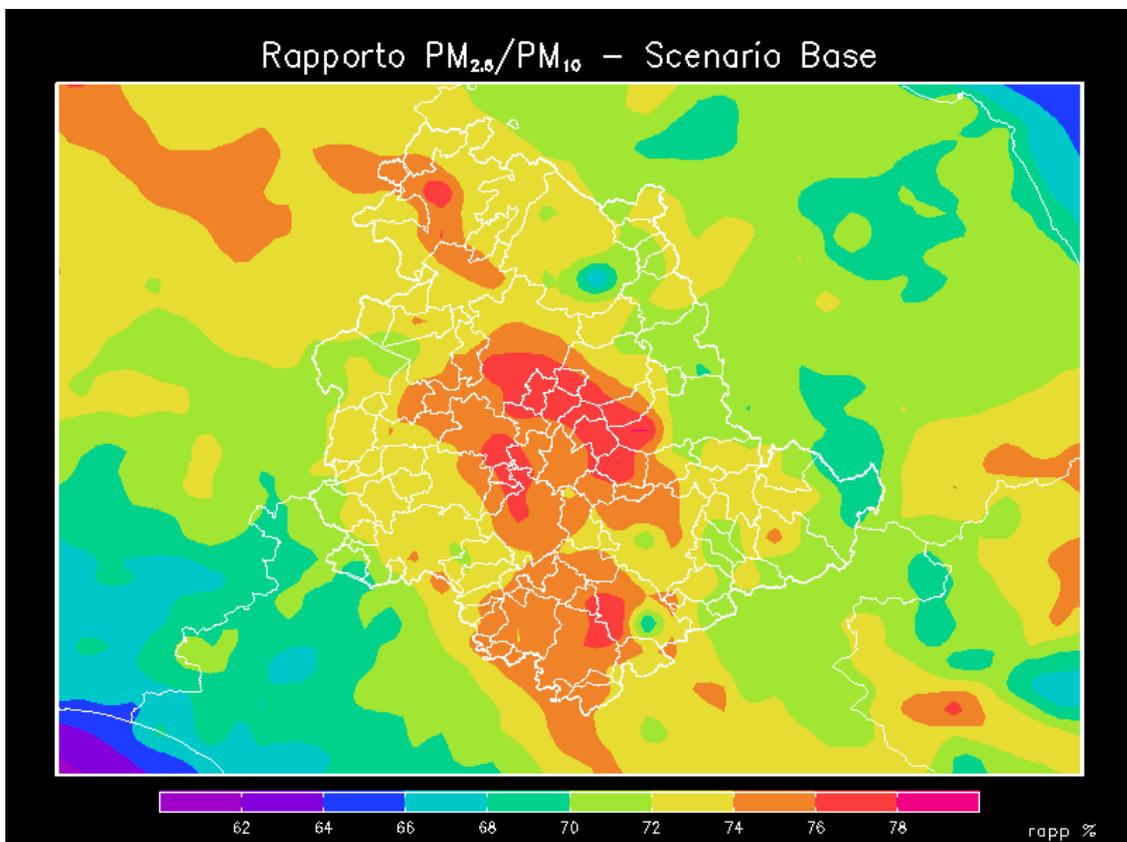


Figura 5.14: Rapporto percentuale tra $PM_{2.5}$ e PM_{10} Umbria – scenario base

6. Conclusioni

La realizzazione di una catena modellistica con trasformazioni chimico-fisiche basata sul modello Chimere è stata completata e, con questa, è stata prodotta la simulazione completa di uno scenario base relativo all'anno 2004.

Questo ha permesso di valutare il modello grazie al confronto tra i dati da esso prodotti e quelli misurati da stazioni fisse di monitoraggio di qualità dell'aria presenti sul territorio regionale e extra regionale.

Questo confronto ha mostrato in media un buon accordo tra i dati stimati e quelli misurati; ciò permette di considerare l'intera catena modellistica adatta ai fini della valutazione della qualità dell'aria non solo nei pressi dei punti fissi di misura, ma su tutto il territorio considerato. Inoltre, è adatta ad ottenere le informazioni base utili per il calcolo dell'esposizione collettiva della popolazione nella zona interessata.

La catena modellistica può essere usata come strumento di supporto alle valutazioni presenti all'interno del Piano Regionale di Risanamento e Mantenimento della Qualità dell'Aria in quanto, oltre alla realizzazione dello scenario base, è possibile valutare altri ipotetici scenari futuri relativi a ipotesi di riduzione delle emissioni così come indicate dalle misure di contenimento presenti nel Piano stesso.

Le possibili applicazioni future, per tanto, sono la realizzazione di scenari emissivi a partire dallo scenario base già realizzato o la realizzazione di un nuovo scenario base con i dati relativi all'anno 2007 (anno relativo all'ultimo aggiornamento previsto dell'Inventario Regionale delle Emissioni) e di relativi scenari futuri.

Come tutti gli strumenti modellistici, anche questo è da considerarsi "work in progress" in quanto sia l'intero codice di calcolo Chimere che la sua implementazione nell'attuale catena modellistica sono sottoposti a continui aggiornamenti e miglioramenti che, quindi, sarà necessario integrare di volta in volta.