

APPLICAZIONE COMPARATA DI MODELLI PER LA SIMULAZIONE DI RICADUTE DI INQUINANTI

Silvia Zenier, Sara Pozza, Franco Antonello – ARTES S.r.l. – Mirano (VE)

Tel +39-41-5700405 – Fax +39-41-5700402 – E-mail artes@shineline.it

1. SOMMARIO

L'uso di modelli di simulazione per la stima predittiva dell'inquinamento connesso ad emissioni aeriformi è ormai una prassi consolidata e numerosi sono gli strumenti di calcolo adottati. La teoria sulla quale è stata realizzata la maggior parte di questi modelli è in prevalenza quella gaussiana, riferita alla nota distribuzione statistica, tuttavia se si comparano i risultati forniti da alcuni di questi modelli si notano differenze anche rilevanti.

In alcuni settori appare in crescita anche l'utilizzo di modelli basati su teorie diverse, che forniscono ancora dati differenti pur se applicati alla stessa sorgente.

Con riferimento a comparazioni e protocolli ufficiali di test per modelli di simulazione si è eseguita una serie di applicazioni con diversi modelli scelti tra i più noti o utilizzati, confrontando i risultati e analizzando le differenze ottenute; le indicazioni ottenute, che potrebbero anche essere considerate come indici di efficienza dei modelli, mostrano invece la necessità di una oculata definizione degli input, o variabili di calcolo che descrivono la sorgente, e l'opportunità di un'attenta valutazione dei risultati.

2. GENERALITÀ SULLA MODELLISTICA

L'applicazione di modelli complessi e sofisticati, che considerano la molteplicità di fattori e di variabili caratterizzanti i fenomeni della dispersione di inquinanti nell'atmosfera, nonostante la diffusione e l'evoluzione degli strumenti di calcolo, presenta ancora difficoltà notevoli, sia per la necessità di specializzazione nell'uso dei computer, sia per la varietà e numero di variabili richieste, che spesso non sono facilmente reperibili.

Fino agli anni '70 circa, i modelli comunemente utilizzati erano quelli cosiddetti "gaussiani", risalenti, nelle prime formulazioni, alla prima metà del secolo [1] ed adottati specialmente nello studio dell'inquinamento atmosferico connesso alle emissioni da camini.

La necessità di simulare anche altre tipologie di emissione, le osservazioni e sperimentazioni che si effettuarono sempre più frequenti da quel periodo, la maggior disponibilità di strumenti di calcolo potenti e veloci, favorì lo sviluppo di teorie alternative che propendevano per l'uso di modelli matematici basati sulla fluidodinamica e termodinamica o che proponevano soluzioni diverse dell'equazione di diffusione ed avvezione (alcuni sono citati in bibliografia [2, 3, 4, 5]), considerando più attentamente caratteristiche particolari dell'inquinante emesso o del sito, quali la densità dell'inquinante, la presenza di aerosol, o l'orografia. Parallelamente si svilupparono teorie e modelli per tener conto della presenza di ostacoli alla dispersione, delle interazioni con fabbricati circostanti la sorgente, ecc. (esempi in bibliografia [6, 7, 8]).

Tale evoluzione riguardò anche la modellistica "gaussiana", che subì uno sviluppo notevole con l'adozione di coefficienti più appropriati per considerare l'orografia e la distanza dalla sorgente, con l'introduzione di affinamenti nel calcolo della risalita del pennacchio, con l'inserimento di algoritmi per la stima della "deposizione" di una frazione di inquinante in funzione delle eventuali reazioni con l'umidità atmosferica o delle caratteristiche di reattività dell'inquinante, ecc.

Tutto questo, sotto il profilo tecnico-scientifico ha costituito un miglioramento notevole della situazione, fornendo strumenti più affidabili e flessibili, ma, comportando anche una più vasta gamma di soluzioni o modelli, richiede una valutazione preliminare per la scelta del modello appropriato all'applicazione specifica allo scopo di evitare risultati e conclusioni approssimate o anche errate.

Un'esemplificazione di tali risultati può essere data da un caso proposto dall'AICHE come scenario di riferimento per la comparazione di modelli di dispersione [9].

Si tratta di un'emissione di vapori di acido solforico dallo sfiato di un edificio (la composizione del flusso e le caratteristiche dello scenario sono riportate in allegato, in quanto rappresentano uno degli scenari sui quali si è effettuata la comparazione). Gli autori hanno applicato due modelli di riconosciuta validità in ambito EPA (INPUFF, ISC3 [8, 10]), tuttavia i risultati appaiono notevolmente diversi, come si vede dalla Fig. 1, in quanto solo uno dei modelli permette di tener conto degli effetti generati dall'edificio sulla turbolenza locale.

Casi analoghi sono innumerevoli e trovano spiegazione, oltre che nella trattazione di alcuni parametri di calcolo, anche nella diversa impostazione dei modelli, spesso concepiti per particolari esigenze che non permettono di trattare la generalità dei casi. Guardando il risultato fornito da applicazioni diverse, comunque, si può avere un'impressione di estrema approssimazione, che qualche volta si acuisce confrontando applicazioni dello stesso modello fatte da utenti diversi.

3. CARATTERISTICHE DEI MODELLI UTILIZZATI PER LO STUDIO

Per quanto riguarda i modelli gaussiani, la particolarità che maggiormente li distingue è in genere data dalla trattazione della risalita del pennacchio: i modelli concepiti per la valutazione delle emissioni da camini di centrali termiche, che è poi una delle prime applicazioni estese, basano questa trattazione sulla spinta ascensionale determinata dalla temperatura dei fumi. In genere, l'effetto di risalita dovuto alla velocità di efflusso viene tenuto in considerazione solo a partire da determinati valori e, comunque, con formulazioni spesso semplificate.

Minore influenza hanno i coefficienti per il calcolo dei fattori di diluizione verticale (σ_z) o laterale (σ_y), anche se nei modelli più attuali possono aversi differenze notevoli nei risultati in funzione dell'orografia del terreno, ovvero della scelta tra ambiente rurale o urbano.

Queste considerazioni possono risultare più chiare riferendosi alla formulazione base adottata dai modelli gaussiani (legenda dei simboli alla fine):

$$C_{(x)} = \frac{Q}{\pi \cdot \sigma_y \cdot \sigma_z \cdot u} \cdot \exp \left[-\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{H}{\sigma_z} \right)^2 \right]$$

Le differenze di trattazione dei vari modelli riguardano, oltre alla determinazione dei coefficienti σ e dell'altezza di risalita H , anche la velocità del vento (u) che viene calcolata riferendosi alla quota H con l'uso di coefficienti empirici non sempre uguali tra modello e modello.

Alcuni di questi modelli contengono ulteriori coefficienti o parametri per tener conto dell'effetto "cavità" determinato dalla presenza di fabbricati in prossimità dell'emissione, della influenza della distanza, ovvero del tempo di contatto tra inquinante ed i componenti dell'atmosfera, e di altre ulteriori variabili che influenzano il trasporto e la diluizione di aeriformi o polveri nell'ambiente.

Vi è poi un'ampia gamma di modelli che risolve l'equazione di avvezione e dispersione con tecniche o metodi diversi, dalle soluzioni numeriche a quelle semiempiriche, in prevalenza sviluppati per esigenze diverse da quelle di stima dell'inquinamento generato dai camini di impianti termoelettrici. Tra questi ve ne sono alcuni di uso comune che in vari casi possono risultare più adatti dei modelli gaussiani, in particolare quando si tratta di valutare la dispersione da sorgenti non rientranti nella normale tipologia dei camini di centrali termoelettriche di grande potenza.

Nella comparazione effettuata si è considerata appunto una varietà di scenari utilizzando, o riprendendo i risultati dei seguenti modelli:

- DEGADIS [11], modello sviluppato originariamente per l'analisi dei rischi (1988) e poi integrato con il trattamento di emissioni verticali (jet).
- ISC3 (1995) modello gaussiano [8] che incorpora routine per il trattamento di sorgenti in ambienti industriali considerando, tra l'altro, l'influenza data dalla presenza di fabbricati situati vicino o lontano dalla sorgente, l'orografia del terreno mediante utilizzo di coefficienti diversi per siti urbani e siti rurali, la quota del terreno.
- SCREEN3 (1996) modello gaussiano [12] semplificato che utilizza alcune delle soluzioni matematiche presenti nel modello ISC.
- SLAB – modello sviluppato originariamente per la simulazione di dispersioni di gas pesanti [13] e successivamente integrato per la trattazione di scenari più generali, con trattazione del fenomeno jet, inserito anche nel pacchetto di modelli Effects (TNO)
- STARA – modello gaussiano ricavato dallo standard statunitense ASME [14, 15] con coefficienti modificati secondo le indicazioni fornite in [9] per poter meglio considerare l'orografia del terreno.
- STARH – modello non gaussiano basato sulla teoria di Huang and Yeh [4, 5, 15], che risolve analiticamente l'equazione di avvezione assumendo che la concentrazione dell'inquinante sia distribuita verticalmente secondo una legge esponenziale negativa, determinando quindi i coefficienti di dispersione verticale secondo una teoria diversa da quella classica, ma pur sempre in funzione della stabilità atmosferica e della velocità del vento. La distribuzione verticale adottata fa apparire questo modello più adatto a trattare inquinanti con densità maggiore dell'aria.
- STARJ – modello jet di Ooms [2, 15] basato sulla soluzione delle equazioni di conservazione della massa, del momento e dell'energia, adatto per emissioni ad alta velocità di inquinanti aeriformi anche più pesanti dell'aria.
- INPUFF [10] modello gaussiano sviluppato dall'EPA che tratta l'emissione continua come una serie di emissioni istantanee (puff), ma sempre secondo la teoria classica.

Non in tutti i casi sono stati messi a confronto tutti questi modelli, anche perché non sempre erano disponibili tutte le variabili richieste per l'utilizzo.

Uno dei parametri che più influiscono nel risultato è la stima dell'altezza raggiunta dal pennacchio: gran parte dei modelli più comuni utilizza la teoria di Briggs [16], ma vi sono numerose variazioni [17, 18] che, anche se lievi, come nel caso di alcuni dei modelli summenzionati (ISC3, SCREEN3, STARA E STARH), portano a risultati differenti.

4. COMPARAZIONI

Gli scenari utilizzati per effettuare le comparazioni sono stati ricavati da pubblicazioni e letteratura citate in bibliografia e vengono di seguito brevemente esposti, mentre le variabili di calcolo e i grafici sono riportati in allegato.

Scenario 1

Questo caso viene proposto nelle linee guida dell'AICHe-CCPS [9] come protocollo per la comparazione di modelli di dispersione: si tratta di un'emissione di miscela aria ed acido solforico da un camino di ventilazione situato sulla sommità di un fabbricato, ipotizzato come conseguenza di un rilascio di SO₃ all'interno del fabbricato stesso. Seguendo il protocollo del testo AICHe, che prevede anche un test di sensitività, si sono considerate tre variazioni dello scenario base: la prima con condizioni F/2 anziché C/2, la seconda con incremento dell'altezza del fabbricato e della quota dello sfiato, la terza con incremento della sola quota dello sfiato (rif. Fig. 2-3-4-5).

Fatta eccezione per le condizioni F/2, dalla comparazione appare che i risultati forniti dai modelli ISC3 e STARH sono abbastanza in sintonia, mentre sono notevoli gli scostamenti tra gli altri modelli. Tali scostamenti, compresi anche quelli dati per le condizioni F/2, possono essere spiegati con la diversa trattazione che i vari modelli fanno delle principali variabili di calcolo: ISC3 e STARH tengono conto, sia pure con teorie diverse, della presenza di fabbricati adiacenti o vicini alla sorgente, ma solo il primo considera anche l'accumulo di inquinante nella zona immediatamente sotto vento al fabbricato (*cavity wake*), mentre tutti gli altri modelli trattano la sorgente come se fosse in campo aperto.

Scenario 2

È una classica emissione dal camino di una centrale termica alto 183 m e con diametro di ca 6 m, costituita da gas di combustione con anidride solforosa. Nella configurazione proposta come esempio dalle norme ASME si è rilevata l'impossibilità di usare alcuni modelli per i limiti posti sui valori di input. SCREEN3, per esempio, non accetta velocità del vento superiori a 5 m/s per la classe di stabilità B e tuttavia tale condizione, sulla base di dati registrati, non è immaginaria neanche per gli USA. I risultati forniti dai modelli messi a confronto sono riportati nelle Fig. 6-7-8-9.

Nonostante le altezze di risalita calcolate risultino non molto diverse tra loro, le concentrazioni a terra appaiono anche notevolmente differenti: nel caso di condizioni B/10, quindi alta velocità del vento i modelli ASME e STARH appaiono abbastanza in sintonia, mentre negli altri casi, dove non sono presenti i modelli ASME, appaiono in sintonia i modelli STARA e SCREEN3. Se ne può dedurre che in condizioni particolari (alta velocità del vento) è consigliabile usare un modello diverso da quello applicabile per condizioni più normali.

Scenario 3

Si tratta di una emissione di cloro gas da uno sfiato a 30 m di quota, ipotizzata al fine di comparare i risultati di un sofisticato modello di calcolo messo a punto alcuni anni fa [6] in ambito BITC (oggi EuroChlore) per stimare le concentrazioni di inquinanti più pesanti dell'aria in ambienti industriali. I modelli applicati sono notevolmente diversi tra loro, tuttavia i risultati non presentano grandi scostamenti, come si vede dal grafico riportato in Fig. 10.

Oltre ad alcuni dei modelli già citati sono qui rappresentati i seguenti programmi:

BITC: modello bidimensionale che risolve le equazioni di continuità della massa, del momento e dell'energia considerando l'influenza della densità dell'inquinante sulla turbolenza locale e le interazioni con l'aria dell'eventuale inquinante [6].

BITC p: è una semplificazione del modello precedente che non considera l'interazione dell'inquinante con l'atmosfera, assumendo che nella dispersione siano ininfluenti le caratteristiche del gas.

I due modelli che mostrano maggiore scostamento sono SCREEN3 e STARH, anche se tali scostamenti sono inferiori ad un ordine di grandezza.

Scenario 4

L'emissione descritta consiste in uno sfiato verticale di butano con portata di 15 kg/s, simulato in 4 diverse conformazioni mediante modelli di tipo jet, proposta come scenario di comparazione nel testo [9].

Questo caso è stato prescelto per esaminare il comportamento dei modelli in una situazione di efflusso freddo a bassa quota: come si può vedere nelle figure seguenti, i risultati migliori sono ottenuti con i modelli che trattano il fenomeno del jet turbolento, soprattutto a causa della diversa trattazione che i modelli svolgono per determinare l'altezza di risalita, come si vede nelle Fig. 11-12. D'altronde è noto che per i modelli cosiddetti gaussiani il campo delle brevi distanze presenta approssimazioni notevoli. Nelle prove illustrate in Fig. 13-14 sono rappresentati i risultati delle ulteriori simulazioni eseguite con i modelli jet.

In tutti i casi i minori scostamenti si notano tra i modelli DEGADIS e STARJ, mentre appaiono macroscopiche le differenze date dai modelli di tipo gaussiano. La correttezza dei risultati forniti dai modelli jet per questo scenario è attestata dagli autori delle prove, tra i quali si annoverano anche funzionari e consulenti dell'ente federale americano per la protezione dell'ambiente [19].

5. CONCLUSIONI

Le applicazioni effettuate, pur parziali e suscettibili di ulteriori approfondimenti e considerazioni, mostrano tuttavia che l'adozione del modello di simulazione va soggetta a scelta sulla base di criteri che non possono prescindere da una sia pur minima conoscenza della teoria su cui si basa il modello e dalla valutazione delle prestazioni dei modelli in condizioni simili. Alcune comparazioni possono non fornire un quadro completo di tali prestazioni e dei limiti di applicazione, per ottenere i quali si richiederebbe un'analisi di sensitività puntuale, tuttavia permettono di affinare la scelta riducendo il campo di approssimazione dei risultati.

Nella pur positiva diffusione di programmi di calcolo, inoltre, va rilevato che non sempre la scelta dei valori di default proposti risulta quella migliore e che, anche con sistemi ufficiali quali il modello SCREEN3 può capitare di osservare una "blindatura" non giustificata, basata probabilmente su schemi generali che non tengono conto di situazioni meteorologiche ed orografiche particolari, per le quali è opportuno uno studio preliminare volto alla scelta del modello più adatto.

6. BIBLIOGRAFIA

- [1] "The theoretical scattering of smoke in a turbulent atmosphere" O.F.T. Roberts – 1923; "The theoretical distribution of airborne pollution from factory chimneys" O.G. Sutton – 1947; ecc.
- [2] "A New Method for the Calculation of the Plume Path of Gases Emitted by a Stack" G. Ooms (1972). "The Plume Path of Vent Gases Heavier than Air" – G. Ooms, A.P. Mathieu, F. Zelis – Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries – Elsevier Ed. (1974).
- [3] "Dispersion of Gases Vented to Atmosphere from Relief Valves" – A.L. Cude – Chemical Engineering (1974).
- [4] "A Theory of Dispersion in Turbulent Shear Flow" C.H. Huang – Atmospheric Environment vol. 13 (1979).
- [5] "Un modello matematico non gaussiano per il calcolo delle ricadute al suolo di emissioni da sorgenti stazionarie" – FISBAT-CNR e Regione Emilia Romagna – 1986.
- [6] "Atmospheric dispersion of toxic gases in a complex environment" – E. Vergison, J. Van Diest, J.C. Basler – J. of Hazardous Material, 22 (1989) e dispense BITC.
- [7] "Incorporation of the effects of buildings and obstructions on the gas cloud consequence analysis" D.M. Deaves – International conference on vapor cloud modeling – Boston 1987.
- [8] ISC Industrial Source Complex dispersion models U.S. Environmental Protection Agency
- [9] "Guidelines for Use of Vapor Cloud Dispersion Models" – S.R. Hanna, P.J. Drivas – AIChE – CCPS 2nd edition 1996.
- [10] INPUFF – Petersen & Lavdas – U.S. Environmental Protection Agency
- [11] "User's Guide for the DEGADIS 2.1 Dense Gas Dispersion Model" T. Spicer and J. Havens, EPA-450/4-89-019 – (1989/92).
- [12] SCREEN3 model – U.S. Environmental Protection Agency (update of Appendix A of screening procedures for estimating the air quality impact of stationary source)
- [13] "User's Manual for SLAB: An Atmospheric Dispersion Model for Denser than Air Releases" D.L. Ermak – LLNL (1990)
- [14] "Recommended guide for the prediction of the dispersion of airborne effluents" The American Society of Mechanical Engineers – 3^a ed.
- [15] STAR Safety Techniques for Risk Assessment – ARTES S.r.l. - Mirano (VE)
- [16] "Plume rise predictions" G.A. Briggs – Lectures on Air Pollution and Environmental Impact Analyses – A.M.S. (1975); "Plume Rise and Buoyancy Effects" – Atmospheric Science and Power Production – DOE/TIC-27601 (1984)
- [17] "Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates" – U.S. HEW – D.B. Turner – 1970
- [18] "The rise of a hot waste gas plume" – C.H. Bosanquet – Journal Inst. Fuel – 1957
- [19] "Uncertainties in Hazardous Gas Model Predictions" – "Developments in EPA's Air Dispersion Modeling for Hazardous/Toxic Releases" Int. Conference and Workshop on Modeling and Mitigating the Consequence of Accidental Releases of Hazardous Materials – New Orleans 1991 e 1995.

LEGENDA

- Q = portata di rilascio
 σ_y = deviazione standard della distribuzione di concentrazione lungo l'asse Y trasversale alla direzione del vento
 σ_z = deviazione standard della distribuzione di concentrazione lungo l'asse Z verticale
 x = distanza sottovento
 u = velocità del vento
 y = distanza sull'asse trasversale alla direzione del vento alla quale si determina la concentrazione
 H = altezza efficace della sorgente (altezza del camino + altezza di risalita del pennacchio)

SCHEDA DATI SCENARI

scenario:	1	2	3	4
sostanza:	aria/H ₂ SO ₄	aria/SO ₂	Cl ₂	butano
fonte:	AICHe96	ASME79	BITC A2.6	AICHe96
tipo emissione	camino	camino	camino	vent
peso molecolare	98	64,6	70,91	58,12
temperatura rilascio (K)	378	408	283	303
temperatura ambiente (K)	300	283	298	303
velocità vento a 10 m (m/s)	2	7,90	5	2
stabilità atmosferica	C	B	D	F
rugosità (m)	0,5	0,1	0,1	0,1
diametro sorgente (m)	1	6,08	0,6	0,75
altezza/quota rilascio (m)	20	183	30	5
portata rilascio (kg/s)	0,278	4,11	10	15
portata totale (Nm ³ /h)	24923	1,09E+06	10398	
altezza edificio (m)	18,0			
larghezza edificio (m)	22,4			
velocità efflusso (m/s)	6,37	15,5	10,2	24
quota z misura vel. vento (m)	10	108		
vel. vento alla quota z (m/s)	2	9,2		
vel. vento a quota sorgente		10		
tempo x media conc. (minuti)	10	60	10	10
sensitivity run 1	condizioni F/2			quota sorgente 20 m
sensitivity run 2	H fabb. 36 m H sorg. 38 m			diametro sorg. 0,3 m
sensitivity run 3	H sorgente 40 m			tempo medio 60 s





