ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΡΗΤΗΣ - ΤΜΗΜΑ ΧΗΜΕΙΑ

ΕΘΝΙΚΟ ΑΣΤΕΡΟΣΚΟΠΕΙΟ ΑΘΗΝΩΝ- ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΕΡΕΥΝΩΝ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ ΚΑΙ ΒΙΩΣΙΜΗΣ ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ

ΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Επίδραση πυρκαγιάς σε εξωτερικό χώρο περι-αστικής περιοχής στα επίπεδα της ατμοσφαιρικής ρύπανσης της πόλης

Φαίδρα-Αικατερίνη Κοζωνάκη Α.Μ. 1639

Ημ/νία Διεξαγωγής: Ακαδημαϊκό έτος 2016-2017

Ευχαριστίες

Η παρούσα διπλωματική διατριβή εκπονήθηκε στο Τμήμα Χημείας του Πανεπιστημίου, στον τομέα της Υπολογιστικής και Ατμοσφαιρικής Χημείας, σε συνεργασία με το Ινστιτούτο Ερευνών Περιβάλλοντος και Βιώσιμης Ανάπτυξης (ΙΕΠΒΑ) - Εθνικό Αστεροσκοπείο Αθηνών (ΕΑΑ). Προτού ξεκινήσει η παρουσίαση θα ήθελα να αναφερθώ σε όσους βοήθησαν για να ολοκληρωθεί αυτή η εργασία.

Πρώτα από όλα θα ήθελα να ευχαριστήσω την Καθηγήτρια κ. Κανακίδου Μαρία για την πολύτιμη βοήθεια της και την επίβλεψή της κατά τη διάρκεια της διπλωματικής που χωρίς τις συμβουλές της και την υποστήριξή της δεν θα μπορούσε να προχωρήσει η μελέτη.

Έπειτα δεν θα ήταν σωστό αν δεν αναφερόμουν στην ερευνήτρια του ΙΕΠΒΑ- ΕΑΑ κ. Αθανασοπούλου Ελένη για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε για να προχωρήσει αυτή η εργασία. Δίχως την υπομονή που έδειχνε, την τακτική επίβλεψή της, τη βοήθεια της και τις συμβουλές που μου έδινε είναι σίγουρο πως δεν θα είχα φέρει εις πέρας αυτή την εργασία. Χαίρομαι που η αρχή στον τομέα της έρευνας έγινε με ένα τόσο αξιόλογο και έμπειρο άτομο.

Η υλοποίηση των αριθμητικών προσομοιώσεων που εκτέλεσα έγινε σε υπολογιστική υποδομή του ΙΑΑΔΕΤ – ΕΑΑ, με την υποστήριξη του ερευνητή Σταύρου Σολωμού, τόσο σε τεχνικό επίπεδο, όσο και με την παροχή των απαραίτητων μετεωρολογικών δεδομένων εισόδου.

Ολοκληρώνοντας ευχαριστώ όλους τους ανθρώπους και των δύο εργαστηρίων που ήταν εκεί όποτε χρειαζόταν καθώς και το οικογενειακό και φιλικό περιβάλλον για την συμπαράστασή τους.

Περίληψη

Αντικείμενο της συγκεκριμένης διπλωματικής εργασίας αποτελεί η επίδραση πυρκαγιάς σε εξωτερικό χώρο περι-αστικής περιοχής, στα επίπεδα της ατμοσφαιρικής ρύπανσης της πόλης. Παρακάτω μελετώνται τόσο αέριοι όσο και σωματιδιακοί ρύποι που εκπέμπονται από τη σημειακή πηγή της φωτιάς.

Η μελέτη της αέριας ρύπανσης γίνεται με τη χρήση του αριθμητικού μοντέλου CAMx. Συζητείται τόσο η χωρική διασπορά των συγκεντρώσεων των ρύπων στην ευρύτερη περιοχή της Αττικής όσο και η αναλυτική πιστότητα του μοντέλου στα αποτελέσματα του. Η αξιοπιστία του μοντέλου ελέγχεται με τη βοήθεια των δεδομένων χημικής ανάλυσης που είχαν γίνει στην περιοχή της πυρκαγιάς από το ΕΑΑ. Ακόμα γίνεται σύγκριση των αποτελεσμάτων του μοντέλου CAMx, με αυτά του μοντέλου FLEXPART, τα οποία είχαν προηγηθεί της παρούσας εργασίας, καθώς το FLEXPART εφαρμόστηκε από το ΕΑΑ την ίδια περίοδο με το ξέσπασμα της πυρκαγιάς.

Αυτή η εργασία σκοπό έχει την απόκτηση γνωστικού υποβάθρου για τη σωστή χρήση του μοντέλου CAMx αλλά και την μελέτη των επιπέδων αέριας ρύπανσης περιοχής κατάντη του ατυχήματος.

Περιεχόμενα

1. Εισαγωγή……4
2. Θεωρητικό Υπόβαθρο……5
2.1. Μελέτη των αέριων και σωματιδιακών ρύπων ……5
2.1.1. Γενικά ……5
2.1.2 Κύκλος Ρύπανσης στην Ατμόσφαιρα……5
2.1.3 Διαχείριση ποιότητας αέρα,……6
2.1.4 Βασικοί ρύποι από καύσεις χαρτιού και πλαστικού……8
2.1.5 Μείωση της αέριας ρύπανσης……15
2.2. Αριθμητικά μοντέλα ατμοσφαιρικής ρύπανσης……15
2.2.1. Γενικά……15
2.2.2. Το αριθμητικό μοντέλο CAMx……16
3. Μεθοδολογία ……17
3.1 Εγκατάσταση και Βαθμονόμηση του Αριθμητικού Μοντέλου……17
***3.2.* Οριοθέτηση της περιοχής και περιόδου ενδιαφέροντος……19**
***3.3.* Διαθέσιμα πειραματικά και διαγνωστικά δεδομένα……20**
***3.4.* Εφαρμογή του ατμοσφαιρικού μοντέλου……22**
3.4.1. Αρχικές και οριακές συνθήκες ατμοσφαιρικής ρύπανσης……23
3.4.2. Εκπομπές αέριας ρύπανσης……24
3.4.3. Μετεωρολογικά δεδομένα……26
3.4.4. Προετοιμασία του κεντρικού αρχείου εργασίας (jobscript)……26
4. Αποτελέσματα ……28
4.1. Παρουσίαση αριθμητικών αποτελεσμάτων του μοντέλου CAMx ……28
4.2. Σύγκριση αποτελεσμάτων των αριθμητικών μοντέλων FLEXPART και CAMx…..28
4.3. Οπτικοποίηση αριθμητικών αποτελεσμάτων και εκτίμηση συγκέντρωσης ρύπων στο χώρο ……33
4.4. Σύγκριση αποτελεσμάτων του αριθμητικού μοντέλου με τη δειγματοληψία……38
5. Συμπεράσματα……40
6. Μελλοντική έρευνα……42
7. Αναφορές και Βιβλιογραφία……43
8. Παράρτημα…. ……44

1. Εισαγωγή

Η παρούσα εργασία αποτελεί συνέχεια της αναφοράς που έχει επιμεληθεί το Εθνικό Αστεροσκοπείο Αθηνών (ΕΑΑ) και πραγματεύεται τη διάχυση των εκπομπών ρύπων στην ατμόσφαιρα της ευρύτερης περιοχής της Αττικής από το επεισόδιο πυρκαγιάς που εκδηλώθηκε το καλοκαίρι του 2015 στη θέση Πεύκο Μαυράκη στον Ασπρόπυργο. Πιο συγκεκριμένα, στο κέντρο διαλογής ανακυκλώσιμων υλικών με την επωνυμία «Γενική Ανακυκλώσεως – Κτηματική Ξενοδοχειακή Α.Ε.» και ιδιαίτερα στον χώρο αποθήκευσης των υπό ανακύκλωση απορριμμάτων. Στο πλαίσιο της συγκεκριμένης πτυχιακής πραγματοποιήθηκε η μελέτη του συγκεκριμένου περιστατικού με εξοικείωση και προετοιμασία του αριθμητικού μοντέλου αέριας ρύπανσης CAMx για την εφαρμογή του για το συγκεκριμένο ατύχημα. Παράλληλα, έγινε σύγκριση με πειραματικά δεδομένα ρύπανσης.

Η πυρκαγιά στο εργοστάσιο ξέσπασε την 6η Ιουνίου 2015 και ήταν ενεργή μέχρι και τη 12η Ιουνίου. Η ομάδα του ΕΑΑ ξεκίνησε την έρευνα και τις μετρήσεις στην περιοχή και συγκεκριμένα στο χώρο του κέντρου διαλογής ανακυκλωσίμων, την 9η Ιουνίο(4η ημέρα πυρκαγιάς), που εξακολουθούσε να υπάρχει ακόμα ιδιαιτέρως έντονος και πυκνός καπνισμός και συνεχίστηκαν μέχρι και τη 12η Ιουνίου. Την 11η Ιουνίου ο καπνισμός από τις εκπομπές της καιόμενης εγκατάστασης ήταν σε χαμηλότερα επίπεδα και την 12η Ιουνίου πλέον η πυρκαγιά είχε τεθεί υπό έλεγχο και ο όποιος καπνισμός, που συνεχίστηκε και τις επόμενες ημέρες, προέρχονταν από τους σωρούς με τα αποκαΐδια των αποβλήτων που είχαν πιάσει φωτιά. Η έκλυση των απαερίων καύσης και αντίστοιχες οσμές ήταν σε χαμηλότερα επίπεδα σε σχέση με τις προηγούμενες ημέρες, και ενίσχυση του καπνισμού εμφανίζονταν κυρίως μετά από έντονες ρυπές του ανέμου. Η καύση της πυρκαγιάς περιορίστηκε στην περιοχή του εργοστασίου. Η καιόμενη έκταση ανέρχεται στα 62,842 στρέμματα. Εκεί υπήρχαν σύμμικτα υλικά χαρτιού και πλαστικού. Το γεγονός αυτό επιβάρυνε την ατμόσφαιρα, με πιθανές επιπτώσεις στην υγεία τόσο των κατοίκων της περιοχής όσο και του ευρύτερου λεκανοπεδίου. [1]

Η διασπορά των ρύπων τις ημέρες που ξέσπασε η πυρκαγιά οφείλεται στη διεύθυνση και την ένταση των ανέμων εκείνων των ημερών. Όπως εμφανίζει και ο Πίνακας 1. παρατηρήθηκε ότι τις πρώτες μέρες που η πυρκαγιά βρισκόταν σε έξαρση και οι ταχύτητες των ανέμων ήταν πολύ μεγάλες, πράγμα που βοήθησε στη επέκταση του θυσάνου στην ευρύτερη Αττική.

Πίνακας 1. Κατεύθυνση (προς τα πού φυσάει) και ταχύτητα ανέμων για την κάθε ημέρα που εκτυλισσόταν η πυρκαγιά, σύμφωνα με την αναφορά του ΕΑΑ. [2]

Ημερομηνία	Κατεύθυνση και ταχύτητα ανέμου
6/6/2015	ΝΔ με υψηλές ταχύτητες ανέμων
7/6/2015	ΝΑ και Ν-ΝΔ με υψηλές ταχύτητες ανέμων
8/6/2015	ΝΑ (Χαμηλές ταχύτητες ανέμων τις βραδινές ώρες (συγκεντρώσεις στην περιοχή)
9/6/2015	Β-ΒΑ με χαμηλές ταχύτητες ανέμων
10/6/2015	Ν με μέτριες ταχύτητες ανέμων*
11/6/2015	Ν » » » »*
12/6/2015	Ν με υψηλές ταχύτητες ανέμων

*Τις ημέρες 10-11/6 η κατεύθυνση του ανέμου ήταν κυρίως Ν εκτός από τις απογευματινές ώρες που στράφηκαν σε Β λόγω της θαλάσσιας αύρας.

2. Θεωρητικό Υπόβαθρο

2.1. Μελέτη των αέριων και σωματιδιακών ρύπων

2.1.1. Γενικά

Ατμοσφαιρική ρύπανση ονομάζεται η παρουσία ρύπων στην ατμόσφαιρα, δηλαδή η συγκέντρωση κάθε είδους ουσιών, θορύβου, ακτινοβολίας ή άλλων μορφών ενέργειας σε ποσότητα ή διάρκεια που μπορούν να προκαλέσουν αρνητικές επιπτώσεις στην υγεία των ζωντανών οργανισμών και γενικότερα να διαταράξουν την οικολογική ισορροπία σε μεγάλη ή μικρή γεωγραφική κλίμακα. Υπό ορισμένες συνθήκες η ατμοσφαιρική ρύπανση είναι πιθανό να φτάσει σε επίπεδα που δημιουργούν ανεπιθύμητες συνθήκες διαβίωσης.

Μία πρώτη διακριτοποίηση των ρύπων γίνεται βάσει της μορφής στην οποία βρίσκονται. Έτσι χωρίζονται στους αέριους ρύπους, τους σωματιδιακούς ρύπους και τα αερολύματα. Αέριοι είναι ρύποι οι οποίοι βρίσκονται στην αέρια φάση (πχ.CO_2). Σωματιδιακοί είναι κάθε μεγέθους υλικό στον αέρα σε υγρή ή στερεή μορφή, από μερικά nm μέχρι δεκάδες μm (πχ. Λεπτή σκόνη). Αερόλυμα (aerosol) είναι κάθε διασπορά υγρών (σταγόνες) ή στερεών σωματιδίων στον αέρα.

Ανάλογα με την προέλευσή τους οι ρύποι χωρίζονται στις παρακάτω ευρείς κατηγορίες:

1. Πρωτογενείς ρύποι οι οποίοι εκπέμπονται άμεσα από τις πηγές ρύπανσης.
2. Δευτερογενείς ρύποι σχηματίζονται στην ατμόσφαιρα σαν αποτέλεσμα χημικών αντιδράσεων μεταξύ πρωτογενών ρύπων. Τυπικό παράδειγμα δευτερογενούς ρύπου αποτελεί το όζον.

Οι ατμοσφαιρικοί ρύποι, τους οποίους μελετούν κατά κύριο λόγο οι περιβαλλοντικές υπηρεσίες είναι: το διοξείδιο του θείου, το μονοξείδιο του άνθρακα, τα οξείδια του αζώτου (κυρίως το διοξείδιο του αζώτου), οι υδρογονάνθρακες (κυρίως το βενζόλιο), το όζον, και τα αιωρούμενα σωματίδια (κυρίως τα PM_{10} και τα $PM_{2.5}$) και ο μόλυβδος.

2.1.2 Κύκλος Ρύπανσης στην Ατμόσφαιρα

Σε πολλές περιοχές της γης, η ατμοσφαιρική ρύπανση αποτελεί το σημαντικότερο περιβαλλοντικό πρόβλημα, ιδιαίτερα λαμβάνοντας υπόψη τις μεγάλες επιπτώσεις στην ανθρώπινη υγεία.
Αντίθετα με την κοινή αντίληψη, το μεγαλύτερο ποσοστό των παραγόμενων αέριων ρύπων προέρχεται από καθαρά φυσικές πηγές. Με τον όρο φυσικές πηγές αναφερόμαστε στις πηγές εκπομπών αερίων ρύπων που δεν οφείλονται στην ανθρώπινη δραστηριότητα. Παρ' όλα αυτά οι ανθρωπογενείς εκπομπές είναι κυρίως υπεύθυνες για τα μεγάλα περιβαλλοντικά προβλήματα που εμφανίσθηκαν. Αυτό οφείλεται βεβαίως στην ανατροπή της φυσικής ισορροπίας αλλά επίσης και στην μεγάλη πυκνότητα των εκπομπών από ανθρωπογενείς εκπομπές οι οποίες συγκεντρώνονται σε μικρές γεωγραφικές περιοχές (κυρίως αστικές περιοχές και βιομηχανικές ζώνες). Αντίθετα, η καλή διασπορά των φυσικών πηγών παγκόσμια προσφέρει τη δυνατότητα καλύτερης ανάμιξης των ρύπων με τον καθαρό αέρα. Κατά συνέπεια, με κάποιες μικρές εξαιρέσεις, οι εκπομπές αερίων ρύπων από φυσικές πηγές από μόνες τους δεν οδηγούν σε υψηλές συγκεντρώσεις.

Οι σημαντικότερες φυσικές πηγές είναι:

- Τα ηφαίστεια, (κυρίως αιωρούμενα σωματίδια, διοξείδιο του θείου, υδρόθειο και μεθάνιο).
- Οι πυρκαγιές δασών, (κυρίως αιωρούμενα σωματίδια, μονοξείδιο και διοξείδιο του άνθρακα).

- Οι ωκεανοί και γενικότερα οι θαλάσσιες εκτάσεις, (κυρίως χλωριούχο νάτριο και θειϊκά άλατα).
- Βιολογική αποσύνθεση των φυτών και των ζώων, (κυρίως υδρογονάνθρακες, αμμωνία και υδρόθειο).
- Η αποσάθρωση του εδάφους, (αιωρούμενα σωματίδια).
- Τα φυτά και τα δέντρα, (κυρίως υδρογονάνθρακες).

Οι κυριότερες ανθρωπογενείς πηγές είναι:

- Βιομηχανικές πηγές (καύσεις, επεξεργασία), (κυρίως SO_2,NO_X,VOCs και αιωρούμενα σωματίδια)
- Παραγωγή και μεταφορά ενέργειας, (κυρίως SO_2,NO_X,VOCs και αιωρούμενα σωματίδια)
- Μεταφορές, (κυρίως CO,υδρογονάνθρακες, SO_2,NO_X,VOCs και αιωρούμενα σωματίδια)
- Κεντρική θέρμανση, (κυρίως CO,υδρογονάνθρακες,NO_X,VOCs και αιωρούμενα σωματίδια)

ΠΙΝΑΚΑΣ 2. Κύριοι φυσικοί και ανθρωπογενείς ρύποι με αντιστοίχιση των πηγών από τις οποίες εκπέμπονται. Πηγή άντλησης πίνακα Pearson Prentice Hall, Inc, Βρείτε τον εδώ: http://users.itia.ntua.gr/nikos/oikologia/AirPolution_31_5.pdf

	EMISSIONS (% OF TOTAL)			
Air Pollutant	Natural	Human-Produced	Major Source of Human-Produced Component	%
Sulfur oxides (SO_x)	50	50	Combustion of fuels (stationary sources, mostly coal) Industrial processes	84 9
Nitrogen dioxide (NO_2)		Nearly all	Automobiles Combustion of fuels (stationary sources, mostly natural gas and coal)	37 38
Carbon monoxide (CO)	91	9	Automobiles	54
Ozone (O_3)	A secondary pollutant derived from reactions with sunlight, NO_2, and oxygen (O_2)		Concentration that is present depends on reaction in lower atmosphere involving hydrocarbons and thus automobile exhaust	
Hydrocarbons (HC)	84	16	Automobiles Industrial processes	27 7
Particulates	85	15	Dust Industrial processes Combustion of fuels (stationary sources)	85 7 8

Copyright © 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

2.1.3. <u>Διαχείριση ποιότητας αέρα</u>

Το σύστημα της ατμοσφαιρικής ρύπανσης συντίθεται από ένα αριθμό συνιστωσών[24] :

- Τις εκπομπές των ατμοσφαιρικών ρύπων, τόσο από ανθρωπογενείς όσο και από φυσικές πηγές.
- Την τεχνολογία ελέγχου πηγών. Η έννοια αυτή χρησιμοποιείται για να δηλώσει συσκευές, συστήματα και λειτουργικές διαδικασίες που χρησιμοποιούνται για να εμποδίσουν ένα μέρος των ρύπων να καταλήξει στην ατμόσφαιρα.
- Τους μηχανισμούς διασποράς και εναπόθεσης καθώς και τους χημικούς μετασχηματισμούς που δρουν στην ατμόσφαιρα.
- Την ποιότητα του αέρα η οποία προσδιορίζεται σαν το συνολικό αποτέλεσμα των εκπομπών των ρύπων και της επίδρασης των ατμοσφαιρικών μηχανισμών πάνω σ' αυτούς.
- Τις νομοθετικές ρυθμίσεις που προκύπτουν σαν αποτέλεσμα της αντίδρασης των ανθρώπων που εκτίθενται στην ατμοσφαιρική ρύπανση
- Τον αυτόματο έλεγχο που ασκείται στις πηγές όταν το δίκτυο παρακολούθησης της ρύπανσης δείχνει επίπεδα ρύπανσης τα οποία υπερβαίνουν τις θεσμοθετημένες τιμές.

Διαχείριση της ποιότητας του αέρα είναι η παρακολούθηση των επιπέδων ρύπανσης και ο έλεγχος των εκπομπών ώστε να εξαλειφθούν ή να περιοριστούν οι συνέπειές τους στο περιβάλλον

Οι ρύποι οι οποίοι εκπέμπονται στην ατμόσφαιρα φθάνουν στους αποδέκτες (receptors) μέσω των κινήσεων του αέρα. Σε αυτές τις περιπτώσεις χρησιμοποιείται ο όρος διασπορά (dispersion) για να δηλώσει την μεταφορά και εξάπλωση στην ατμόσφαιρα ενός στοιχείου (ρύπου) το οποίο εκπέμπεται από κάποια πηγή. Με τον όρο τυρβώδης διάχυση (turbulent diffusion) εννοούμε την διαδικασία κατά την οποία οι εκπεμπόμενοι ρύποι διασκορπίζονται υπό την επίδραση των τυρβώδων στροβίλων (turbulent eddies). Κεντρικό ρόλο στην μελέτη της διασποράς, ιδιαίτερα από σημειακές πηγές, παίζει και η έννοια του θυσάνου-πλουμίου (plume). Στην ατμοσφαιρική ρύπανση, θύσανος ονομάζεται ένα αναγνωρίσιμο ρεύμα αέρα του οποίου η σύσταση διαφέρει από την αντίστοιχη του περιβάλλοντος.

Οι παράμετροι που παίζουν ρόλο στη διασπορά των ατμοσφαιρικών ρύπων είναι οι εξής:

Α. Στοιχεία πηγής:

- *Γεωμετρία εκπομπής* (σημειακή πηγή(point source), εμβαδική πηγή(area source) , γραμμική πηγή(line source))
- *Χρονική διάρκεια εκπομπής* (στιγμιαία εκπομπή(instantaneous release), συνεχής εκπομπή(continuous emission))

Β. Ο ατμοσφαιρικός κύκλος διασποράς:

- *Το ύψος του θυσάνου*.Το ύψος αυτό είναι βέβαια υψηλότερο του φυσικού ύψους της πηγής καύσης και ονομάζεται ενεργό ύψος (effective height) της καμινάδας. Η διαφορά ανάμεσα στο φυσικό και στο ενεργό ύψος της καμινάδας ονομάζεται αρχική ανύψωση του θυσάνου (plume rise).

- *Μεταφορά του θυσάνου* μακρυά από την πηγή λόγω των ανέμων με οριζόντια κίνηση.

- *Η διάχυση (diffusion) του θυσάνου*. Οι αναταρακτικές κινήσεις του αέρα (τυρβώδεις στρόβιλοι, (turbulent eddies)) είναι υπεύθυνες για την κατακόρυφη μεταφορά και την διαπλάτυνση του θυσάνου, με τελικό αποτέλεσμα την αραίωση.

- Η μεταφορά των ρύπων από την ατμόσφαιρα στο έδαφος ονομάζεται απόθεση (deposition).

- Κατά τον χρόνο της παραμονής τους στην ατμόσφαιρα οι ρύποι υφίστανται διάφορους χημικούς μετασχηματισμούς λόγω αντιδράσεων είτε μεταξύ τους είτε με τα συστατικά της καθαρής ατμόσφαιρας. Η ατμόσφαιρα είναι ένα αποτελεσματικό εργαστήριο αντιδράσεων μέσα στο οποίο διοχετεύονται χημικά ενεργά συστατικά με αποτέλεσμα την παραγωγή ενός αριθμού καινούργιων ουσιών. Οι καινούργιες ουσίες παράγονται από αέρια και υγρά τα οποία αντιδρούν μεταξύ τους και με τα σωματίδια που υπάρχουν στην ατμόσφαιρα.

- Ένα μέρος της ρύπανσης διαφεύγει από το στρώμα ανάμειξης στην ελεύθερη ατμόσφαιρα . Η απουσία αναταρακτικών κινήσεων στην ελεύθερη ατμόσφαιρα έχει σαν αποτέλεσμα η διάχυση και η κατακόρυφη μεταφορά των ρύπων να γίνεται με πολύ βραδύτερους ρυθμούς. Από την άλλη μεριά, οι αντίστοιχοι ατμοσφαιρικοί μηχανισμοί είναι μεγαλύτερης χωρικής και χρονικής κλίμακας με αποτέλεσμα τα φαινόμενα να επηρεάζουν ευρύτερες περιοχές της γης.

Γ. Τεχνικοί παράγοντες:

Παραδείγματα τεχνικών παραγόντων είναι η θερμοχωρητικότητα των εκπεμπόμενων αερίων (η οποία επηρεάζει σε μεγάλο βαθμό την ανύψωση του θυσάνου), το κατώρευμα (downwash) λόγω της αεροδυναμικής της καμινάδας το οποίο μπορεί να οδηγήσει σε κάθοδο του κεντρικού άξονα του θυσάνου, η καθίζηση λόγω βαρύτητας των μεγαλυτέρων σωματιδίων κ.τ.λ.

2.1.4. *Βασικοί ρύποι από καύσεις χαρτιού και πλαστικού*

Κατά την καύση χαρτιού και πλαστικού, η οποία είναι άμεσα συνδεδεμένη με το συμβάν που εξετάζεται στην παρούσα εργασία (βλέπε παρ. 2.3.), υπάρχει παραγωγή τόσο αέριων όσο και σωματιδιακών ρύπων. Οι αέριοι ρύποι που εξετάζονται είναι οι CO, NOx, O_3, HCl και οργανικές πτητικές ενώσεις και σωματιδιακοί ρύποι PM_{10} και $PM_{2,5}$.

Οξείδια του Αζώτου (NO_x)

Με τον όρο οξείδια του αζώτου εννοούνται το μονοξείδιο του αζώτου (NO) και το διοξείδιο του αζώτου (NO_2) που εμφανίζονται στον ατμοσφαιρικό αέρα. Το άζωτο N_2 αποτελεί το 78% περίπου της σύστασης του ατμοσφαιρικού αέρα. Κατά την καύση σχηματίζει οξείδια. Όσο μεγαλύτερη είναι η θερμοκρασία της καύσης, τόσο μεγαλύτερη είναι και η ποσότητα των σχηματιζόμενων οξειδίων του αζώτου. Το μονοξείδιο του αζώτου (NO) είναι ένα αέριο άχρωμο και άοσμο. Αντίθετα, το διοξείδιο του αζώτου (NO_2) έχει έντονη οσμή και ένα κόκκινο, κίτρινο και καστανό χρώμα. Η παρουσία του στην ατμόσφαιρα έχει επιπλέον αποτέλεσμα τη μείωση της φωτεινότητας και συντελεί στη δημιουργία της φωτοχημικής αιθαλομίχλης.

Περιβάλλον πλούσιο σε NO_x έχει ως αποτέλεσμα την παραγωγή O_3 στην τροπόσφαιρα. Το NO με διάφορες χημικές αντιδράσεις που συντελούνται στην ατμόσφαιρα και ενισχύονται με την παρουσία της ηλιακής ακτινοβολίας, μετατρέπεται σε διοξείδιο του αζώτου (NO_2).

Τοπική παραγωγή O_3 με αντίδραση περόξυ ριζών με NO:[4]

$$HO_2 + NO \longrightarrow OH + NO_2 \quad [R1]$$

$$CH_3O_2 + NO \rightarrow CH_3O + NO_2 \quad [R2]$$

$$RO_2 + NO \rightarrow RO + NO_2 \quad [R3]$$

Αυτές ακολουθούνται από φωτόλυση του NO_2:

$$NO_2 + h\nu \rightarrow NO + O^{\cdot}$$

$$O^{\cdot} + O_2 + M \rightarrow O_3 + M$$

$$P(O_3) = (k_1[HO_2] + k_2[CH_3O_2] + k_3[RO_2]) \cdot [NO]$$

Ο σχηματισμός NO στην στρατόσφαιρα έχει μεγάλη σημασία για το περιβάλλον, αφού καταστρέφει το στρατοσφαιρικό όζον, δηλαδή το όζον της οζονόσφαιρας που «φιλτράρει» τις υπεριώδεις ακτίνες του ήλιου.

$$NO + O_3 \rightarrow NO_2$$

$$NO_2 + O_2 \xrightarrow{h\nu} NO + 2O^{\cdot}$$

$$NO + 2O^{\cdot} \rightarrow NO + O_2$$

Τα οξείδια του αζώτου συμμετέχουν στην εμφάνιση ποικιλίας αρνητικών επιπτώσεων στο περιβάλλον. Προκαλούν σημαντικές αλλαγές στη σύσταση ορισμένων ειδών βλάστησης, υδροβιότοπων και χερσαίων εκτάσεων. Επίσης λόγω της ιδιότητας τους να τρέπονται σε νιτρικό οξύ HNO_3 καθίστανται υπεύθυνα για τη δημιουργία όξινης βροχής. Πιο αναλυτικά, η παραγωγή νιτρικού οξέος *κατά τη διάρκεια της ημέρας* γίνεται φωτοχημικά λόγω της αντίδρασης των ριζών ·OH με το διοξείδιο του αζώτου(NO_2).

$$NO_2 + \ ^{\cdot}OH \longrightarrow HNO_3 \quad -\frac{d}{dt}[HNO_3] = 2\ ppb \cdot h^{-1}$$

Κατά τη διάρκεια της νύχτας, σε ρυπασμένη ατμόσφαιρα η παραγωγή του νιτρικού οξέος λαμβάνει χώρα λόγω αντιδράσεις των νιτρικών ριζών $^{\cdot}NO_3$ με πτητικές οργανικές ενώσεις VOCs (RH,RCHO συμπεριλαμβανομένου και του DMS [21]), αποσπώντας τους ένα υδρογόνο. Οι αντιδράσεις αυτές είναι εξίσου σημαντικές με τις αντιδράσεις με ρίζες υδροξυλίου.

$$^{\cdot}NO_3 + RH \longrightarrow HNO_3 + R\ ^{\cdot}C$$

$$^{\cdot}NO_3 + RCHO \longrightarrow HNO_3 + R\ ^{\cdot}CO$$

$$-\frac{d}{dt}[HNO_3] \approx 0{,}3\ ppb \cdot h^{-1}$$

Επίσης αντιδράσεις του N_2O_5 συμμετέχουν στη παραγωγή του HNO_3. Αυτές μπορεί να είναι αντίδραση N_2O_5 με νερό σε αέρια ή σε υγρή φάση.

$$N_2O_5 + H_2O \longrightarrow 2HNO_3\ k \leq 1{,}3 \cdot 10^{-21} cm^3 molecules^{-1} s^{-1}$$

Η αντίδραση με νερό σε αέρια φάση είναι πολύ αργή ($k<2 \times 10\text{-}21$ $cm^3 molecule^{-1} s^{-1}$). Αλλά σε ρυπασμένη ατμόσφαιρα η συμμετοχή της είναι ίση με εκείνη της αντίδρασης των NO_3 με υδρογονάνθρακες (RH) και αλδεΰδες (RCHO).

Πτητικές Οργανικές Ενώσεις (VOCs)

Οι πτητικές οργανικές ενώσεις VOC αποτελούν σημαντική κατηγορία ατμοσφαιρικών ρύπων, που εντοπίζονται κυρίως σε αστικά κέντρα και βιομηχανικές περιοχές. Ο ακριβής ορισμός των VOCs περιλαμβάνει όλες τις ενώσεις οι οποίες είναι παρούσες στην ατμόσφαιρα σε αέρια κατάσταση, αλλά κάτω από κανονικές συνθήκες θερμοκρασίας και πίεσης θα ήταν υγρά ή στερεά. Επειδή όμως αυτός ο ορισμός δεν καλύπτει όλες τις οργανικές ενώσεις που είναι ρυπαντές της ατμόσφαιρας, στην ευρύτερη κατηγορία των VOCs συμπεριλαμβάνονται όλες οι ενώσεις που περιέχουν άνθρακα, εκτός του στοιχειώδη άνθρακα, του CO και του CO_2 . Έτσι συμπεριλαμβάνονται σε αυτές οξυγονούχες αλογονούχες και θειούχες οργανικές ενώσεις.

Οι VOCs εκπέμπονται είτε από ανθρωπογενείς πηγές (καύσεις αυτοκινήτων, χρήση διαλυτών στους ελαιοχρωματισμούς, διύλιση μεταφορά και χρήση πετρελαίου κ.ά.), είτε από φυσικές πηγές (εκπομπές από φυτά, δένδρα, φωτιές δασών και διάφορες άλλες αναερόβιες διεργασίες).

Οι επιπτώσεις των VOC στην ατμόσφαιρα μπορούν να ταξινομηθούν στις παρακάτω κατηγορίες:

- Καταστροφή στρατοσφαιρικού όζοντος
- Φωτοχημική παραγωγή όζοντος στην επιφάνεια της Γης
- Τοξικές ή καρκινογενείς επιπτώσεις στον άνθρωπο
- Συνεισφορά στο φαινόμενο του θερμοκηπίου

Πολλές από τις οργανικές αυτές ενώσεις είναι αρκετά σταθερές ώστε να φτάσουν στην στρατόσφαιρα και μέσω της φωτόλυσης και της αντίδρασής τους με τις υδροξιλικές ρίζες να παράγουν ενώσεις που καταστρέφουν το όζον. Κοντά στην επιφάνεια της Γής πολλές από τις πτητικές οργανικές ενώσεις συμβάλλουν στις φωτοχημικές διαδικασίες παραγωγής όζοντος.

α. Αντίδραση με ρίζα OH την ημέρα[4]

$$CH_3CH_2CH_2CH_3 + \ ^{\cdot}OH \longrightarrow CH_3CH_2CH_2\ ^{\cdot}CH_2 + H_2O$$

$$\rightarrow CH_3CH_2\ \dot{C}H\ \ CH_3 + H_2O$$

$$CH_3CH_2CH = CH_2 + \ \dot{O}H \xrightarrow{0.65} CH_3CH_2\ \dot{C}HCH_2OH$$

$$\xrightarrow{0.35} CH_3CH_2CH(OH)\ \dot{C}H_2$$

Οι παραγόμενες ρίζες αντιδρούν με το O_2 και προκύπτουν οι παρακάτω αντιδράσεις :

Όπου
R μπορεί να είναι για παράδειγμα :
$CH_3CH_2CH_2\ \dot{C}H_2,\ CH_3CH_2\ \dot{C}H\ \ CH_3,\ \ CH_3CH_2\ \dot{C}HCH_2OH,\ CH_3CH_2CH(OH)\ \dot{C}H_2$

1. $R + O_2 + M \longrightarrow RO_2^{\cdot} + M$
2. $RO_2^{\cdot} + NO \longrightarrow RO^{\cdot}\ + NO_2$

   $RO_2^{\cdot} + HO_2^{\cdot} \longrightarrow ROOH + O_2$

   $R_1O_2^{\cdot} + R_2O_2^{\cdot} \longrightarrow R_1OOR_2 + O_2$

3. $RO^{\cdot}\ + O_2 \longrightarrow καρβονυλοπαράγωγα + HO_2^{\cdot}$
   ή *ισομερίωση*
   $RCH_2O^{\cdot}\ \longrightarrow RCH_2OH$
   ή διάσπαση
   $R_1R_2R_3CO^{\cdot}\ \rightarrow R_1^{\cdot} + R_2R_3C(O)$

Έτσι σχηματίζονται $R^{\cdot}$ τα οποία ξανά αντιδρούν με το O_2 για RO_2 και επανάληψη των ανωτέρων μηχανισμών. Απ' ότι είδαμε έχουμε σχηματισμό ριζών τύπου $HO_2^{\cdot}$ και $RO_2^{\cdot}$ οι οποίες αντιδρώντας με NO θα παράγουν NO_2 χωρίς κατανάλωση όζοντος. Αντίθετα το παραγόμενο NO_2 θα φωτολυθεί και θα παράγει O_3.

β. Οξείδωση από νιτρικές ρίζες $NO_3^{\cdot}$ τη νύχτα

$$CH_3CH = CH_2 + NO_3 \longrightarrow CH_3CHCH_2ONO_2 + O_2 \rightarrow CH_3CH(O)CH_2ONO_2$$
$$\rightarrow καρβονυλικές\ ενώσεις - οργανικές\ νιτρώδεις\ ενώσεις$$

γ. Οζονόλυση μέρα και νύχτα

Προσθήκη όζοντος στον διπλό δεσμό και δημιουργία οζονιδίου το οποίο διασπάται κατόπιν σε καρβολυνική ένωση και Criegee ενδιάμεσο.

Στις VOCs υπάγονται διάφορες ενώσεις όπου έχουν σοβαρές βλαβερές επιπτώσεις στην ανθρώπινη υγεία. Κάποιες από τις ενώσεις αυτές συμβάλλουν στη δημιουργία του τροποσφαιρικού όζοντος.

Τροποσφαιρικό όζον

Το όζον παίζει σημαντικό ρόλο στη φωτοχημεία της τροπόσφαιρας, καθώς είναι η βασική πηγή των ·OH (μέσω της φωτοδιάσπασης του όζοντος σε O(1 D) και αντίδραση του O(1 D) με τους υδρατμούς) τα οποία και καθορίζουν τη διάρκεια ζωής πολλών ρύπων στην ατμόσφαιρα.

$$O_3 \xrightarrow{h\nu} O_2 + O(\ ^3P)\ \lambda > 310nm$$

$$O_3 \xrightarrow{h\nu} O_2 + O(\ ^1D)\ \lambda < 310nm$$

$$O(^1D) + H_2O \rightarrow 2\ ^{\cdot}OH$$

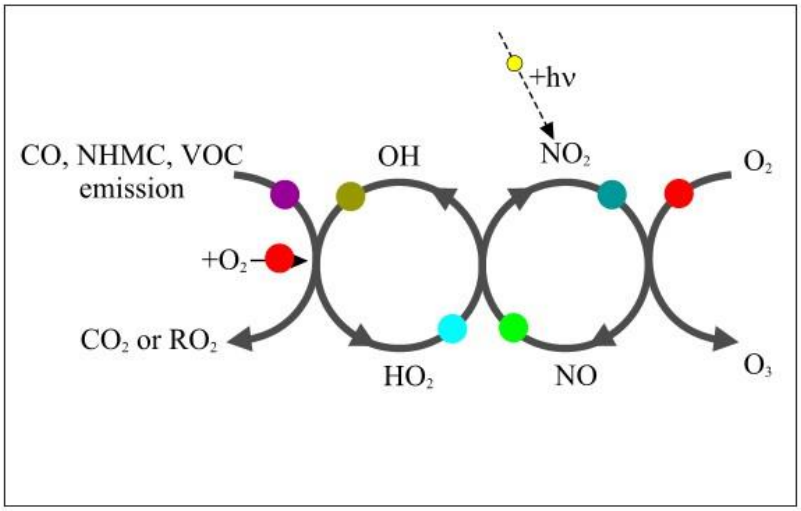
Το τροποσφαιρικό όζον είναι ένας δευτερογενής αέριος ρύπος που παράγεται κυρίως από φωτοχημικές αντιδράσεις οξειδίων του αζώτου (NO_x) ή πτητικών οργανικών ενώσεων (VOCs) με την επίδραση της ακτινοβολίας.

Παραγωγή όζοντος από φωτοδιάσπαση του NO_2 και περεταίρω αντίδραση του O^{3P} με O_2 για σχηματισμό O_3. Τα NO_x όμως εκπέμπονται κυρίως με μορφή NO και μετατρέπονται σε NO_2 με αντίδραση με υδροπερόξυ (HO_2) ή οργανική περόξυ (RO_2) ρίζες. Οι RO_2 προέρχονται από την οξείδωση των VOCs ενώ οι HO_2 από την οξείδωση του CO και των VOCs.

$$NO_2 + h\nu \rightarrow NO + O(3P)$$

$$O(3P) + O_2 \rightarrow O_3$$

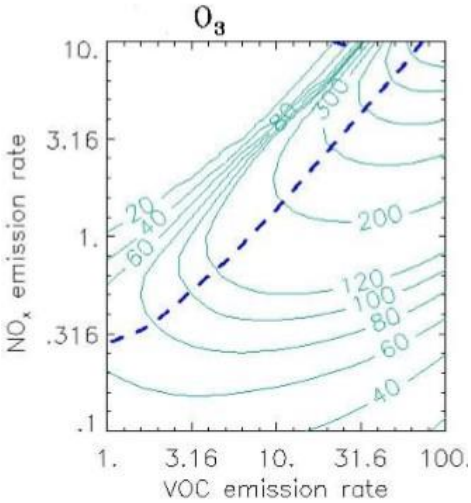
$$NO + RO_2(\text{ή } HO_2) \rightarrow NO_2 + RO(\text{ή } OH)$$



ΕΙΚΟΝΑ 1. Κύκλος των VOCs και NO_X προς παραγωγή O_3. Πηγή: http://elte.prompt.hu/sites/default/files/tananyagok/AtmosphericChemistry/ch08s02.html

Η ευαισθησία της παραγωγής όζοντος σε σχέση με τα NO_x και τις πτητικές οργανικές ενώσεις (VOCs) έχει μελετηθεί τόσο σε αγροτικές περιοχές όσο και σε αστικές περιοχές. Στις αγροτικές περιοχές, τις οποίες μπορούμε να χαρακτηρίσουμε ημι-ρυπασμένες σε σχέση με τις αστικές περιοχές, ο καθαρός ρυθμός παραγωγής όζοντος εξαρτάται μόνο από τα NO_x ενώ πολύ μικρή ευαισθησία δείχνει στις αλλαγές των συγκεντρώσεων των VOCs. Από την άλλη στις αστικές και περιαστικές περιοχές (NO_x > μερικά ppbv) ο ρυθμός παραγωγής όζοντος αυξάνεται αυξανόμενης της συγκέντρωσης των VOCs αλλά μένει αμετάβλητο ή μειώνεται αυξανόμενης της συγκέντρωσης των NO_x. Αυτό συμβαίνει επειδή στη ρυπασμένη αστική ατμόσφαιρα όταν ο λόγος των συγκεντρώσεων NO_x προς VOCs είναι πολύ υψηλός τότε η ελεύθερη ρίζα OH οξειδώνει κατά προτίμηση περισσότερο NO_2 προς HNO_3 από ότι VOCs, οδηγώντας κατά συνέπεια στην καταστολή της παραγωγής όζοντος μέχρις ότου μειωθεί ουσιαστικά η συγκέντρωση των NO_x. Η ευαισθησία του O_3 σε σχέση με τα NO_x και VOCs για μεμονωμένες τοποθεσίες και επεισόδια είναι συχνά πολύ αβέβαιη και υπόκειται σε πολλές εξαιρέσεις. Οι παρακάτω παράγοντες αποτελούν γενικές κατευθυντήριες γραμμές για την κατανόηση των λόγων που προκαλούν την ευαισθησία του O_3 σε σχέση με τα NO_x και VOC να ποικίλει για διαφορετικές τοποθεσίες και για διαφορετικά επεισόδια[26]:

- **Λόγος VOC/NO_x**. Οι συνθήκες όπου το O_3 έχει ευαισθησία ως προς τα NO_x συνδέονται με υψηλές τιμές του λόγου VOC/NO_x ενώ οι συνθήκες όπου το O_3 έχει ευαισθησία ως προς τα VOC συνδέονται με χαμηλές τιμές του λόγου VOC/NO_x.
- **Βιογενείς πτητικές οργανικές ενώσεις.** Τα φυσικής προέλευσης VOCs (ειδικά το ισοπρένιο, που εκπέμπονται κυρίως από βελανιδιές και άλλα φυλλοβόλα δένδρα) αντιπροσωπεύουν ένα σημαντικό τμήμα των συνολικών ατμοσφαιρικών VOCs, ιδίως σε ημιαστικές και αγροτικές περιοχές ρυθμίσεις καθώς και όταν τα VOCs είναι σταθμισμένα με την αντιδραστικότητα τους. Οι βιογενείς πτητικές οργανικές ενώσεις είναι σημαντικές, δεδομένου ότι συνήθως είναι ιδιαίτερα δραστικές. Οι βιογενείς πηγές των NO_x είναι κατά πολύ μικρότερες σε σχέση με τις ανθρωπογενείς πηγές. Γενικά ένα υψηλό ποσοστό των βιογενών πτητικών οργανικών ενώσεων αυξάνει το λόγο των συγκεντρώσεων των VOCs σταθμισμένων με την δραστικότητα τους προς τη συγκέντρωση των NO_x οδηγώντας πιθανώς σε συνθήκες όπου η παραγωγή του O_3 να εξαρτάται από τη διαθεσιμότητα των NO_x.
- **Η κατά την διεύθυνση του ανέμου απόσταση.** Καθώς ο αέρας κινείται απομακρυνόμενος (downwind) από πηγές εκπομπής και παλαιώνει φωτοχημικά, οι ατμοσφαιρικές συνθήκες τείνουν να αλλάξουν από συνθήκες όπου το O_3 μειώνεται λόγω κατανάλωσης από τα NO_x (κοντά στις πηγές εκπομπής) και δημιουργίας NO_2 και HNO_3, σε περιβάλλον που επηρεάζεται από τα VOCs με παραγωγή O_3 παρουσία ικανών ποσοτήτων NO_x. Αυτό συμβαίνει επειδή τα NO_x απομακρύνονται ταχύτερα από ότι τα VOCs καθώς η μάζα αέρα κινείται κατά την διεύθυνση του ανέμου αυξάνοντας έτσι το λόγο VOCs/NO_x και επειδή τα VOCs ανθρωπογενούς αλλά και βιογενούς προέλευσης γίνονται σημαντικές για τη φωτοχημεία καθόσον αποικοδομούνται και παράγουν RO_2.



ΕΙΚΟΝΑ 2. Ευαισθησία των συγκεντρώσεων όζοντος (ppb) ως συνάρτηση του μέσου ρυθμού εκπομπών NO_x και VOCs (10^{12} molecules cm^{-2} s^{-1}) από υπολογισμούς σε χημικό μοντέλο μηδενικών διαστάσεων. Οι ισοπληθείς όζοντος (πράσινες γραμμές) αναπαριστούν συνθήκες κατά τη διάρκεια του απογεύματος την ώρα που αντιστοιχεί στο μέγιστο του όζοντος μετά από 3 ημέρες υπολογισμών με σταθερό ρυθμό εκπομπών. Η διακεκομμένη μπλε γραμμή αντιπροσωπεύει τη μετάβαση από συνθήκες ευαισθησίας σε VOCs σε συνθήκες ευαισθησίας σε NO_x.[26]

Μονοξείδιο του άνθρακα (CO)

Το μονοξείδιο του άνθρακα είναι ένα δηλητηριώδες αέριο που γενικότερα εκλύεται κατά τις ατελείς καύσεις. Είναι μη ερεθιστικό, άχρωμο, άγευστο και άοσμο αέριο. Προκαλεί βλάβες που οφείλονται ουσιαστικά στη στέρηση του οργανισμού από το οξυγόνο. Όταν εισπνέεται, δεσμεύει την αιμοσφαιρίνη (hemoglobin) του αίματος, εκτοπίζοντας (υποκαθιστώντας) το οξυγόνο. Το

όνομα του συμπλόκου που δημιουργείται από το μονοξείδιο του άνθρακα και την αιμοσφαιρίνη ονομάζεται καρβοξιαιμοσφαιρίνη (Carboxyhemoglobin). Το ποσοστό της καρβοξιαιμοσφαιρίνης στο αίμα είναι ο καλύτερος δείκτης της έκθεσης στο μονοξείδιο του άνθρακα. Το μονοξείδιο του άνθρακα δεν είναι αέριο του θερμοκηπίου, οξειδώνεται όμως σε διοξείδιο του άνθρακα επηρεάζοντας έμμεσα το παγκόσμιο κλίμα.

Ο κύκλος οξείδωσης του μονοξειδίου του άνθρακα στην τροπόσφαιρα εξαρτάται από το επίπεδο των NO_X. Σε υψηλά επίπεδα NO_X ισχύει[25]:

$$CO + \ ^{\cdot}OH \rightarrow CO_2 + H^{\cdot}$$

$$H^{\cdot} + O_2 \xrightarrow{M} HO_2$$

$$HO_2 + NO \rightarrow \ ^{\cdot}OH + NO_2$$

Η μετατροπή του NO σε NO_2 αναγεννά 1 mole ριζών ·OH για κάθε mole CO που καταναλώνεται από την αντίδραση οξείδωσης. Όπως αναφέρεται στην παράγραφο ανάλυσης των NO_X , το NO_2 φωτολύεται προς παραγωγή O_3 και ριζών ·OH.

$$NO_2 + h\nu \rightarrow NO + O^{\cdot} \qquad \lambda \leq 400nm$$

$$O^{\cdot} + O_2 \xrightarrow{M} O_3$$

Έτσι η ολοκληρωμένη αντίδραση της οξείδωσης του CO που προκύπτει από τα παραπάνω είναι :

$$CO + 2O_2 \rightarrow CO_2 + O_3$$

Σε μη ρυπασμένη ατμόσφαιρα η οξείδωση του CO περιγράφεται ως εξής:

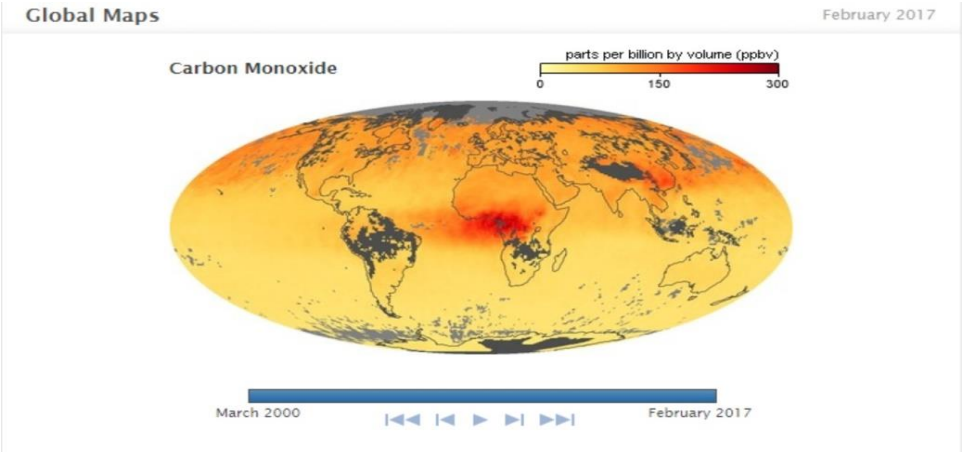
$$CO + \ ^{\cdot}OH \rightarrow CO_2 + H^{\cdot}$$

$$H^{\cdot} + O_2 \xrightarrow{M} HO_2$$

$$HO_2 + O_3 \rightarrow \ ^{\cdot}OH + 2O_2$$

$$CO + O_3 \rightarrow CO_2 + O_2$$

Ανεξάρτητα από τα επίπεδα των NO_X και οι δύο διαδικασίες παράγουν διοξείδιο του άνθρακα. Σε ρυπασμένη ατμόσφαιρα παράγεται επίσης και O_3 και εν συνεχεία ρίζες υδροξυλίου. Σε μη ρυπασμένη ατμόσφαιρα το μονοξείδιο του άνθρακα καταναλώνει το O_3.



ΕΙΚΟΝΑ 3. Συγκέντρωση CO σε παγκόσμια κλίμακα για το Φεβρουάριο του 2017 σε ppbv. Πηγή εικόνας Earth observatory της NASA. https://earthobservatory.nasa.gov/GlobalMaps/view.php?d1=MOP_CO_M **.**

Αιωρούμενα Σωματίδια (PM)

Εκτός από τους αέριους ρύπους, όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, κατά την καύση έχουμε παραγωγή και αιωρούμενων σωματιδιακών ρύπων. Τα αιωρούμενα σωματίδια είναι μίγμα στερεών σωματιδίων και σταγονιδίων διαφόρων ενώσεων, όπως οξέων (νιτρικών, θειϊκών και οργανικών), οργανικών και ανόργανων ενώσεων(π.χ. μέταλλα, μαύρος άνθρακας), σκόνης ή και χώματος. Τα αιωρούμενα σωματίδια έχουν διάμετρο από 0,002 μm μέχρι και 100 μm (περιοχή ενδιαφέροντος από 0,02 μέχρι 10 μm). Τα αιωρούμενα σωματίδια τα διακρίνουμε σε πρωτογενή και δευτερογενή.

Ένας σημαντικός παράγοντας στο χαρακτηρισμό των αιωρούμενων σωματιδίων (0,01 – 50 μm) είναι το μέγεθός τους (π.χ. η ισοδύναμος διάμετρος). Τα σωματίδια καλούνται [20]:

• Αδρόκοκκα σωματίδια (coarse particles) όταν η διάμετρός τους είναι μεγαλύτερη από 10 μm. Δεν εισπνέονται συνήθως από τον άνθρωπο, γιατί αναχαιτίζονται στη ρινική ή τη στοματική κοιλότητα.

• Λεπτόκοκκα σωματίδια (fine particles), όταν η αεροδυναμική διάμετρός τους είναι μικρότερη από 10 μm. Το τμήμα (ή η συγκέντρωση) των σωματιδίων που έχουν διάμετρο μικρότερη από 10 μm αναφέρεται στη βιβλιογραφία ως PM_{10} (σωματίδια διαμέτρου έως 10 μm). Ως $PM_{2,5}$ αναφέρεται το τμήμα των σωματιδίων με διάμετρο μικρότερη από 2,5 μm. Τα σωματίδια αυτά διεισδύουν και εναποτίθενται στους πνεύμονες. Διακρίνονται σε δύο κατηγορίες: d<0,1 μm και d>0,1 μm.

• Υπέρλεπτα σωματίδια (ultrafine particles), όταν η διάμετρός τους είναι μικρότερη από 0,1 μm.

Τα σωματίδια στις αστικές περιοχές, αποτελούν τον σημαντικότερο ρύπο. Στις μεγαλουπόλεις λοιπόν, τα αιωρούμενα σωματίδια προέρχονται από την κυκλοφορία των οχημάτων, τις βιομηχανίες και τις κεντρικές θερμάνσεις. Ακόμα ένας παράγοντας συσσώρευσης σωματιδίων στην ατμόσφαιρα αστικών περιοχών είναι και τα επεισόδια σκόνης από την αιολική διάβρωση ερημικών περιοχών (π.χ. Sahara dust event). Η χημική σύσταση των σωματιδίων χωρίζεται σε τέσσερα κλάσματα [22]:

1. *το ανόργανο ιοντικό κλάσμα* (Cl^- , NO_3^- , SO_4^{2-} , Na^+ , K^+ , NH_4^+ , Ca^+, Mg^{2+})

2. *το ανθρακικό κλάσμα*, το οποίο αποτελείται από στοιχειακό και οργανικό άνθρακα και αποτελεί μεγάλο ποσοστό των αιωρούμενων σωματιδίων. Η περιεκτικότητά του σε ευρωπαϊκές αστικές περιοχές φτάνει μέχρι το 25-40% των PM_{10} και 30-50% των $PM_{2.5}$
3. *το στοιχειακό κλάσμα* το οποίο αποτελείται από Al, Si, Fe, Ca, K, Mg, Ti και περιλαμβάνει τα χαρακτηριστικά στοιχεία του φλοιού της Γης (Al, Si, Ti) καθώς και στοιχεία με μεγάλο ποσοστό στο φλοιό της Γης (Ca, Fe, K, Mg) και
4. *το κλάσμα των μετάλλων σε ίχνη*, στα οποία περιλαμβάνονται και τα τοξικά μέταλλα, τα οποία είναι Mn, Pb, Cu, Zn, Ni.

Εκτός από τις αρνητικές επιδράσεις που έχουν στην υγεία, τα σωματίδια επιδρούν στο περιβάλλον μειώνοντας την ορατότητα λόγω εξασθένησης της ακτινοβολίας φαινόμενο καθόσον έχουν την λόγω εξασθένησης της ακτινοβολίας φαινόμενο καθόσον έχουν την ιδιότητα να απορροφούν (μαύρος και καφέ άνθρακας, ορυκτή σκόνη) ή να σκεδάζουν την ακτινοβολία (υπόλοιπα σωματίδια όπως θειικά, νιτρικά, οργανικά). Στην ιδιότητά τους αυτή οφείλεται και η άμεση κλιματική τους επίδραση που προκαλεί συνολικά ψύξη στην ατμόσφαιρα της γης ενώ η έμμεση κλιματική τους επίδρασης σχετίζεται με την ιδιότητα των σωματιδίων να δεσμεύουν ατμοσφαιρικό νερό και να δρουν ως πυρήνες συμπύκνωσης σύννεφων. Τα αιωρούμενα σωματίδια μέσω εναπόθεσής τους στο έδαφος και τα ύδατα να επηρεάζουν τους βιογεωχημικούς κύκλους των στοιχείων προκαλώντας λίπανση ή και μόλυνση των εδαφών, και ευτροφισμό ή οξίνιση των υδάτων.

Μαύρος άνθρακας (BC)

Ο μαύρος άνθρακας ή αιθάλη αποτελεί συστατικό των λεπτών σωματιδίων $PM_{2,5}$. Η αιθάλη αποτελείται από άνθρακα που συνήθως περιβάλλεται από πολυαρωματικούς υδρογονάθρακες . Σχηματίζεται μέσα από την ατελή καύση των ορυκτών καυσίμων, βιοκαυσίμων και της βιομάζας, και εκπέμπεται τόσο ανθρωπογενώς αλλά και φυσικά. Η αιθάλη θερμαίνει τη Γη απορροφώντας το φως του ήλιου και θερμαίνοντας την ατμόσφαιρα μειώνοντας και τη φωταύγεια (albedo) όταν εναποτίθενται σε χιόνι και πάγο (άμεσες επιδράσεις) και έμμεσα μέσω αλληλεπίδρασης με τα σύννεφα. Η αιθάλη μένει στην ατμόσφαιρα για αρκετές ημέρες έως εβδομάδες.

Δεν υπάρχουν πολλές τοξικολογικές μελέτες για την διαφοροποίηση των επιπτώσεων του μαύρου άνθρακα στην υγεία έναντι των επιπτώσεων των PM. Οι υπάρχουσες τοξικολογικές μελέτες παρουσιάζουν πώς ο BC ως καλός φορέας μεγάλης ποικιλίας τοξικών ουσιών στους πνεύμονες, στον κύτταρα άμυνας και στο αίμα. Έτσι μπορεί να προξενήσει στο ανθρώπινο σώμα προβλήματα στο αναπνευστικό και το κυκλοφορικό. [23].

2.1.5. Μείωση της αέριας ρύπανσης

Για τη βελτίωση της ποιότητας του αέρα απαιτείται μείωση των εκπεμπόμενων ρύπων στην πηγή. Για τον λόγο αυτό εφαρμόζεται ένα εύρος διεργασιών και τεχνολογιών μείωσης των ρύπων οι οποίες εξαρτώνται από το είδος της εγκατάστασης, δηλαδή αν πρόκειται για βιομηχανική μονάδα ή για κινητή πηγή και από το είδος της διεργασίας που παράγει ρύπους. Οι συσκευές που χρησιμοποιούνται για μείωση της ρύπανσης από διεργασίες καύσης είναι διαφορετικές από τις συσκευές που χρησιμοποιούνται σε χημικές διεργασίες, διυλιστήρια κλπ.

Λόγος γίνεται για τα βασικά στοιχεία των κύριων τεχνολογιών που χρησιμοποιούνται για αντιρρύπανση. Δεν θα πρέπει όμως να διαφύγει το γεγονός ότι προσπάθειες γίνονται όχι μόνο για τη δέσμευση ή απομάκρυνση των ρύπων μετά τον σχηματισμό τους, αλλά και για μείωση της παραγωγής τους κατά τη διάρκεια της διεργασίας. Ένα πολύ χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι οι κινητήρες των οχημάτων, στους οποίους έχει επιτευχθεί σημαντική μείωση των

εκπεμπόμενων ρύπων λόγω του καλύτερου σχεδιασμού του συστήματος καύσης. Επίσης, σημαντική βελτίωση προέρχεται και από βελτίωση των καυσίμων.

Για τη μείωση λοιπόν της αέριας ρύπανσης έχουν αναπτυχθεί τεχνολογίες που συμβάλλουν στον καθαρισμό των απαερίων από τους αέριους ρύπους. Τέτοιες τεχνολογίες είναι η απορρόφηση, η προσρόφηση, ή καταλυτική επεξεργασία. Το είδος του ρύπου καθορίζει τη μέθοδο απορρύπανσης που θα χρησιμοποιηθεί. Η ρύπανση της ατμόσφαιρας μπορεί να αποφευχθεί αν χρησιμοποιηθεί τεχνολογία καθαρισμού των απαερίων από το σωματιδιακό φορτίο, πράγμα που προϋποθέτει ότι θα γίνει επέμβαση στις εκπομπές πριν την έκλυσή τους στην ατμόσφαιρα. Τέλος εφ' όσον ένας από τους κύριους παράγοντες της αέριας ρύπανσης και κατά συνέπεια της κλιματικής αλλαγής είναι οι εκπομπές του CO_2, η κύρια αντιμετώπιση του προβλήματος είναι η μείωση των εκπομπών CO_2 στην ατμόσφαιρα. [25]

2.2. Αριθμητικά μοντέλα ατμοσφαιρικής ρύπανσης

2.2.1.Γενικά

Τα ατμοσφαιρικά μοντέλα ρύπανσης προσομοιώνουν τον κύκλο της ατμοσφαιρικής ρύπανσης και είναι αποτελεσματικά εργαλεία οπτικοποίησης της σχέσης μεταξύ των πηγών και των επιπτώσεων τους στην ατμόσφαιρα. Κυμαίνονται από τα απλά μονοδιάστατα μοντέλα τύπου κουτιού(box) έως τα μοντέλα ευρείας χωρικής κλίμακας.

Τα *box* μοντέλα θεωρούν τη μάζα του αέρα πάνω από μία περιοχή ως μέσα σε κύβο, εντός του οποίου οι ρύποι εκπέμπονται, μεταφέρονται προς και από τις παρακείμενες περιοχές αέρα και υφίστανται διασπορά με βασικό πλεονέκτημα τα απλουστευμένα δεδομένα εισόδου εκπομπών, μετεωρολογίας και ποιότητας αέρα, τα οποία οδηγούν σε αποτελέσματα μικρής χωρικής και χρονικής ανάλυσης. Αυτό το μοντέλο βασίζεται στην εξίσωση διατήρησης της μάζας με δυνατότητα ενσωμάτωσης των χημικών διαδικασιών.

Τα μοντέλα box επεκτάθηκαν στα Langragian μοντέλα, τα οποία χρησιμοποιούν την θεώρηση Lagrange, ώστε το μοντέλο να «ακολουθεί» την τροχιά στήλης αέρα με συγκεκριμένη αρχική συγκέντρωση ρύπων. Εδώ δηλαδή υπάρχει μία διαδοχική σειρά συνδεόμενων κύβων αέρα.

Οι δύο παραπάνω τύποι μοντέλων αντικαταστάθηκαν από τα μοντέλα Euler (ή αλλιώς κυψελίδας). Η χωρική κλίμακα αυτών των μοντέλων μπορεί να είναι τοπική (μεγέθους κτηρίου, πόλης), περιοχική (μεγέθους ευρύτερων περιοχών πόλεων, χώρων και ηπείρου) ή παγκόσμια. Η περιοχή προσομοίωσης χωρίζεται σε κυψελίδες (ή κουτιά), κατά την οριζόντια και την κατακόρυφη διεύθυνση. Οι συγκεντρώσεις των ρύπων υπολογίζονται στις συγκεκριμένες κυψελίδες σε κάθε χρονικό βήμα και εξαρτώνται από τις αρχικές τους συγκεντρώσεις, τις εκπομπές, τη μεταφορά προς και από την κάθε κυψελίδα, τη διάλυση και τις χημικές αντιδράσεις. Τα μοντέλα αυτά ενσωματώνουν τις βασικές διεργασίες διάχυσης, διασποράς, χημείας και εναπόθεσης της αέριας και σωματιδιακής ρύπανσης στην εξίσωση διατήρησης της μάζας σε κάθε κυψελίδα. [3] Από τις κύριες συνιστώσες των αριθμητικών μοντέλων προσομοίωσης της ατμόσφαιρας είναι οι χημικοί μηχανισμοί της αέριας ,της συμπυκνωμένης ύλης καθώς και της σωματιδιακής φάσης.

Τα αριθμητικά μοντέλα ατμοσφαιρικής ρύπανσης απαιτούν συγκεκριμένες ομάδες δεδομένων εισόδου, όπως:

- *Μετεωρολογικά δεδομένα (Meteorological input data)*: Τα δεδομένα αυτά λαμβάνονται από μετεωρολογικά μοντέλα, τα οποία εξάγουν αποτελέσματα για τις μετεωρολογικές συνθήκες που επικρατούν στις περιοχές που οριοθετούν.

- *Δεδομένα εισόδου εκπομπών (Emissions input data) :* Τα δεδομένα αυτά λαμβάνονται από βάσεις δεδομένων εκπομπών. Τα στοιχεία που δίνονται από αυτά αφορούν ρυθμούς εκπομπής συγκεκριμένων αέριων και σωματιδιακών ρύπων από συγκεκριμένους τύπους πηγών. Τα δεδομένα αυτά αφορούν εκτεταμένες περιοχές ενδιαφέροντος και διατίθενται σε συγκεκριμένη χωρική ανάλυση.
- *Δεδομένα αρχικών και οριακών συνθηκών (boundary and initial conditions):* Συγκεντρώσεις αέριας ρύπανσης στα όρια της περιοχής ενδιαφέροντος και κατά την έναρξη της αριθμητικής προσομοίωσης που θα εκτελέσει το μοντέλο.
- *Δεδομένα εισόδου επιφάνειας, χρήσης εδάφους, εδαφοκάλυψης (landuse input data): Τοπογραφικά* δεδομένα (ανάγλυφο, τύποι/χρήσεις γης, λοιπά εδαφικά χαρ/κα) .

Αποτέλεσμα αυτής της προσομοίωσης είναι η τρισδιάστατη απεικόνιση της συγκέντρωσης των ρύπων της ατμόσφαιρας, συναρτήσει του χρόνου.

2.2.2. <u>Το αριθμητικό μοντέλο CAMx</u>

Οι αριθμητικές προσομοιώσεις σε αυτή την εργασία πραγματοποιήθηκαν με τη χρήση του μοντέλου CAMx (έκδοση CAMx.6.30-2016)[7][8].

Το CAMx είναι ένα Eulerian φωτοχημικό μοντέλο διασποράς, περιοχικής κλίμακας. Αυτό επιτρέπει την εκτίμηση της τροποσφαιρικής και ατμοσφαιρικής ρύπανσης σε όζον, σωματίδια και αέριες τοξικές ουσίες. Είναι υπολογιστικά αποδοτικό, ευέλικτο αλλά και διαθέσιμο προς το κοινό. Ως κώδικα χρησιμοποιεί τη Fortran και τα δυαδικά αρχεία ειδόδου/εξόδου(binary inputs/outputs) είναι συμβατά με πολλούς προ- και μέτα- επεξεργαστές(pre-&post processors). Μετεωρολογικά πεδία που παρέχονται στο CAMx από ξεχωριστά μοντέλα πρόγνωσης καιρού αλλά και όλες οι είσοδοι των εκπομπών παρέχονται από εξωτερικά συστήματα προ-επεξεργασίας.

Το CAMx, προσομοιώνει την εκπομπή, τη διασπορά, τη χημική αντίδραση και την απομάκρυνση των ρύπων,μέσω της εξίσωσης. Όλα αυτά σε κάθε χρονικό βήμα (t) και για κάθε χημικό είδος (l). Η εξίσωση περιγράφει την χρονική εξάρτηση του μέσου όρου του όγκου της συγκέντρωσης σε κάθε κελί του πλέγματος ως άθροισμα όλων των φυσικών και χημικών διεργασιών . Η εξίσωση αυτή εκφράζεται ως εξής:

$$\frac{\partial c_l}{\partial t} = -\nabla_H \cdot V_H c_l + \left[\frac{\partial (c_l \eta)}{\partial z} - c_l \frac{\partial^2 h}{\partial z\, \partial t}\right] + \nabla \cdot \rho K \nabla (c_l / \rho) + \left.\frac{\partial c_l}{\partial t}\right|_{Emission} + \left.\frac{\partial c_l}{\partial t}\right|_{Chemistry} + \left.\frac{\partial c_l}{\partial t}\right|_{Removal}$$

Όπου:

c_l: *συγκέντρωση των ειδών* $\left(\frac{\mu\acute{\alpha}\zeta\alpha}{\acute{o}\gamma\kappa o}\right)$

V_H: *παράγοντας ανέμου κατά την οριζόντια μεταφορά*

η: *συντελεστής οριζόντιας διάχυσης πλέγματος*

h: *ύψος στρώματος διεπαφής*

ρ: *πυκνότητα ατμόσφαιρας*

Κ: *συντελεστής τυρβώδους διάχυσης*

Ο πρώτος όρος στην δεξιά πλευρά αντιπροσωπεύει την οριζόντια μεταφορά, ο δεύτερος όρος αντιπροσωπεύει την κατακόρυφη μεταφορά σε ύψος πλέγματος που μεταβάλλεται σύμφωνα με το χώρο αλλά και το χρόνο και ο τρίτος όρος αντιπροσωπεύει την τυρβώδη διάχυση του κάθε κελιού.

Η χημεία περιγράφεται με την ταυτόχρονη επίλυση ενός συνόλου διαφορικών εξισώσεων για αντιδράσεις που ορίζονται με χημικούς μηχανισμούς. Η απομάκρυνση των ρύπων από την ατμόσφαιρα περιλαμβάνει την εναπόθεση σε ξηρή ή υγρή επιφάνεια ή την υγρή κατακρύμνιση μέσω βροχόπτωσης. Οι επιλογές για την προβολή της περιοχής ενδιαφέροντος σο οριζόντιο επίπεδο είναι η γεωγραφική LATLON (γεωγραφικό πλάτος,γεωγραφικό μήκος), η ζωνική UTM, η πολική POLAR, η LAMBERT κ.α. Η κατακόρυφη δομή πλέγματος πρέπει να ακολουθεί τη δομή που έχουν τα τρισδιάστατα δεδομένα εξόδου του μετεωρολογικού μοντέλου από το οποίο αντλούνται τα δεδομένα εισόδου του CAMx. Ο αριθμός των επιπέδων και το ύψος του καθένα καθορίζεται από το χρήστη και το ύψος ακολουθεί την τοπογραφία.

3. Μεθοδολογία

3.1. Εγκατάσταση και Βαθμονόμηση του Αριθμητικού Μοντέλου

Αρχικά ήταν απαραίτητη η εγκατάστασή του αριθμητικού μοντέλου CAMx στο υπολογιστικό σύστημα εργασίας (σύστημα Linux του ΙΑΑΔΕΤ/ΕΑΑ) και έπειτα η βαθμονόμησή του. Πιο αναλυτικά επιχειρήθηκε μια εφαρμογή ελέγχου και πιστοποίησης της ορθής εγκατάστασης και λειτουργίας του μοντέλου για κάθε επόμενη εφαρμογή του.

Για τη σωστή χρήση του μοντέλου ήταν απαραίτητη η επιλογή και η εγκατάσταση στο πρόγραμμα των προ-επεξεργαστών(pre-processors). Η επιλογή έγινε από τη διαδικτυακή λίστα που υπάρχει στη σελίδα του προγράμματος, με γνώμονα τα χαρακτηριστικά του καθενός.

Οι preprocessors που επιλέχθηκαν είναι οι εξής:

- ***ICBCPREP***: Το πρόγραμμα αυτό χρησιμοποιήθηκε για να καθορίσει τις αρχικές και τις οριακές συνθήκες της ατμοσφαιρικής ρύπανσης για την περιοχή και περίοδο της προσομοίωσης με το CAMx. Οι τιμές που παρέχει για κάθε ατμοσφαιρικό ρύπο θεωρούνται σταθερές στο χρόνο και το χώρο..

- ***O3MAP***: Αυτό το πρόγραμμα προετοιμάζει αρχεία εισόδου της στήλης όζοντος για CAMx, και πρέπει να εκτελεστεί πριν από την εκτέλεση του μοντέλου TUV.

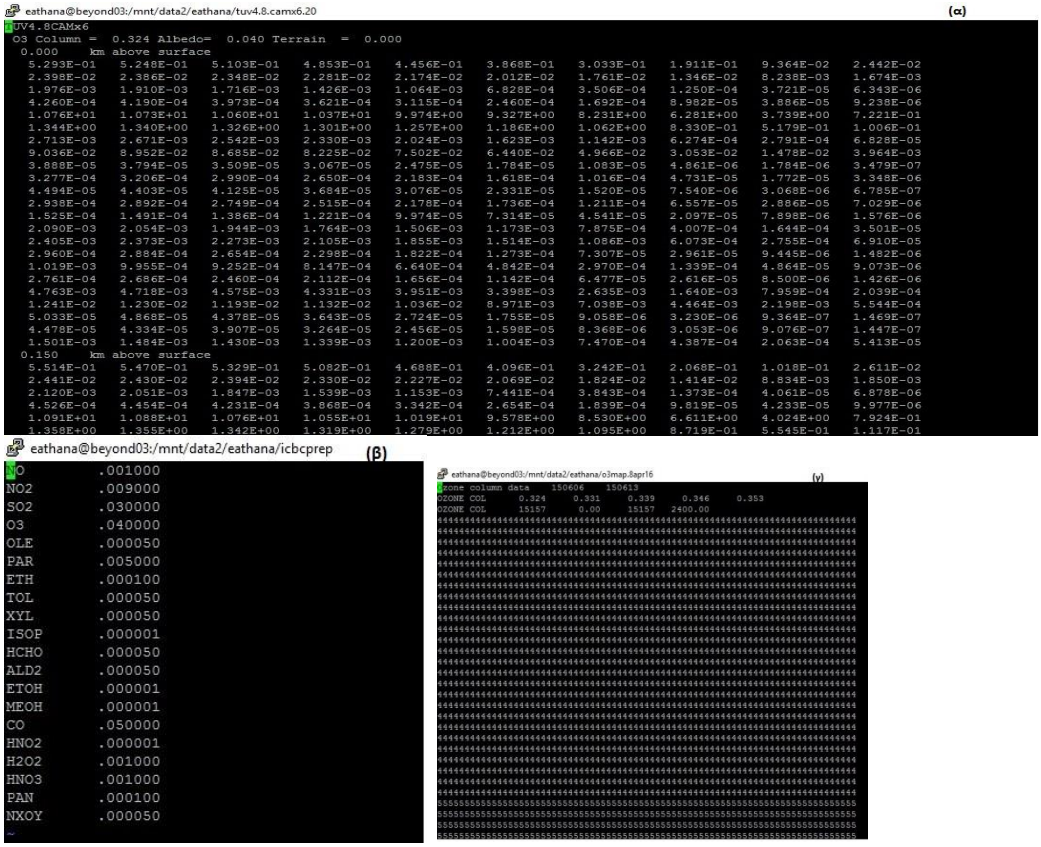
- ***TUV***: Αυτό είναι ένα μοντέλο μεταφοράς ακτινοβολίας που αναπτύσσει αρχεία εισόδου με το ποσοστό φωτόλυσης καθαρού ουρανού για όλους τους φωτοχημικούς μηχανισμούς του CAMx. Από το πρόγραμμα αυτό δημιουργείται αρχείο με 5 διαστήματα επιφανειακής UV λευκαύγειας ,για 3 επίπεδα , σε 11 υψόμετρα πάνω από το έδαφος, για 10 ηλιακές γωνίες ζενίθ και 5 διαστήματα στήλης του όζοντος (από O3MAP).

- **WRFCAMx**: Το πρόγραμμα αυτό δημιουργεί μετεωρολογικά αρχεία εισόδου CAMx v6 από αρχεία WRF (ARW core) v3 αρχεία εξόδου.

Αφού έγινε η εγκατάσταση των pre-processors έπρεπε να γίνει η κατάλληλη μετατροπή τους σε εκτελέσιμα αρχεία ώστε να μπορέσει να γίνει η επεξεργασία τους και η εκκίνησή τους για τη

δημιουργία των αρχείων εισόδου. Ο κάθε pre-processor είχε εγκατεστημένο ένα αρχείο μεταγλώττισης (Makefile) και σύμφωνα με αυτό έγινε η σωστή τροποποίηση του κώδικα του προγράμματος ώστε να είναι συμβατό με τον μεταγλωττιστή ifort της γλώσσας fortran αλλά και την μη σειριακή μορφή (no-MPI) του αρχείου εργασίας του κεντρικού προγράμματος. Έπειτα ο κάθε pre-processor τέθηκε σε διαδικασία τρεξίματος αρχικά με τυχαίες τιμές των παραμέτρων ώστε να επιβεβαιωθεί η σωστή λειτουργία τους.

Μετά τον έλεγχο της λειτουργίας των προγραμμάτων αυτών έγινε η σταδιακή αλλαγή των τιμών των παραμέτρων σε κάθε εκτελέσιμο αρχείο και στη συνέχεια ξεκίνησε η διαδικασία εκτέλεσής τους ώστε να δημιουργηθούν τα αρχεία εξόδου (outputs) που θα χρησιμοποιηθούν ως αρχεία εισόδου (inputs) στο μοντέλο CAMx.



ΕΙΚΟΝΑ 4. Ενδεικτικά outputs των preprocessors (α)TUV (β)ICBCPREP (γ)O3MAP.

Στη συνέχεια εκτελέστηκε το μοντέλο και παρατηρήθηκε ότι οι αποκλίσεις της εφαρμογής ελέγχου από την πρότυπη εφαρμογή ήταν αμελητέες. Η βαθμονόμηση του μοντέλου ως πρώτη εκτέλεση του μοντέλου CAMx έδειξε την αξιοπιστία του μοντέλου μέσω των αποτελεσμάτων του. Έπειτα από διαδικασία βαθμονόμησης, το μοντέλο ήταν προετοιμασμένο ώστε να γίνει η εφαρμογή του στην περιοχή ενδιαφέροντος για το συγκεκριμένο επεισόδιο πυρκαγιάς. Περαιτέρω στοιχεία για την εκτέλεση της βαθμονόμησης του μοντέλου παρατίθενται στην εργασία της αντίστοιχης Πρακτικής Άσκησης που προηγήθηκε της παρούσας πτυχιακής. [6]

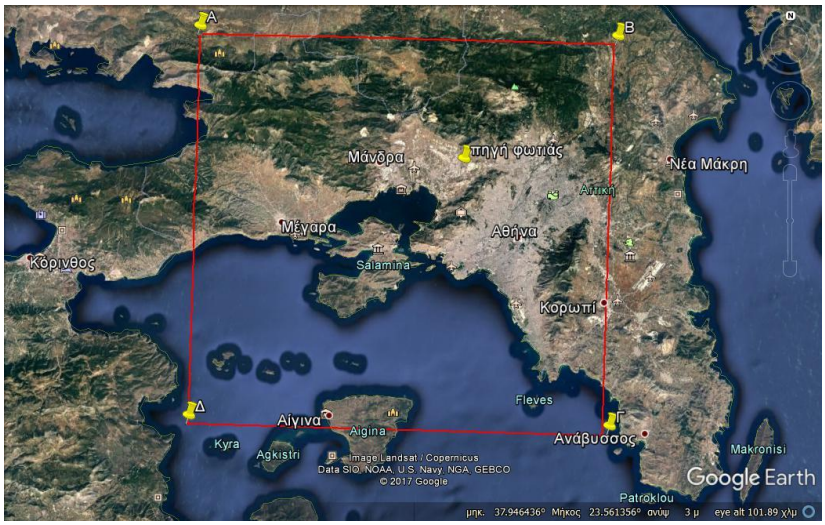
3.2. Οριοθέτηση της περιοχής και περιόδου ενδιαφέροντος

Η περιοχή ενδιαφέροντος ορίστηκε ως ένα μεγάλο τμήμα του νομού Αττικής στο οποίο εμπεριέχεται ο Ασπρόπυργος ως περιοχή του συμβάντος και οι περιοχές που ενδέχεται να επηρεάστηκαν σύμφωνα και με τα μετεωρολογικά δεδομένα των ημερών (π.χ. κατεύθυνση ανέμου). Η χωρική έκταση που καλύπτουν οι προσομοιώσεις καταλαμβάνει επιφάνεια 3336,378 km^2 της ευρύτερης περιοχής της Αττικής και η χρονική περίοδος που εξετάζεται είναι από την 6/6/2015-13/06/15. Η περιοχή και η περίοδος ανάλυσης που οριοθετήθηκαν επιλέχθηκαν βάσει της περιοχής επιρροής του ατυχήματος και τις ημέρες που έκαιγε η φωτιά.

Το μοντέλο εφαρμόστηκε στη συγκεκριμένη υπο-περιοχή της Αττικής με γεωγραφικό πλάτος από (37°73'01.09 έως 38°23'17.40»B) και (23°19'62.89,23°19'62.89»A), και μήκος από (37°73'01.09, 38°23'17.40»B) έως (23°88'16.69, 23°88'16.69»A), με οριζόντια έκταση κελιού 1 km^2 αντίστοιχα και κατακόρυφα χρησιμοποιήθηκαν 14 στρώματα ανέρχονται σε υψόμετρο 5,63268 km πάνω από την επιφάνεια του εδάφους.

Καθορίστηκε πώς η περιοχή θα υπάγεται σε ένα και μόνο πλέγμα(grid). Η ΝΔ γωνία του πλέγματος ορίζεται με συντεταγμένες (xcord,ycord) (23.19°,37.73°). Το κάθε κελί έχει διαστάσεις (dx,dy) (1 km×1 km) και έτσι το grid διαχωρίζεται σε 77 στήλες(nx), 56 γραμμές(ny) και 14 στρώματα(nz), με συνολικό αριθμό κελιών 60368.

Ως σημειακή πηγή, με τη βοήθεια των χαρτών αλλά και των δεδομένων για το ατύχημα όπως αναφέρεται στην εισαγωγή ορίστηκε το σημείο εντός του κώδικα, με συντεταγμένες (22.63°,38.07°). Όλα τα παραπάνω στοιχεία παρουσιάζονται στην Εικόνα 5.



ΕΙΚΟΝΑ 5. Εμφάνιση του grid με τη βοήθεια του προγράμματος Google earth. Στο χάρτη παρουσιάζεται το σημείο της πηγής της φωτιάς καθώς και όλη η οριοθετημένη περιοχή ανάλυσης (η περιοχή που περικλείεται από τις κόκκινες γραμμές).

3.3. Διαθέσιμα πειραματικά και διαγνωστικά δεδομένα

Τα διαθέσιμα πειραματικά και διαγνωστικά δεδομένα που χρειάστηκαν για την αξιολόγηση των αποτελεσμάτων του μοντέλου CAMx, αντλήθηκαν από τις εκθέσεις αξιολόγησης του ΕΑΑ για το επεισόδιο της πυρκαγιάς. [1][2]

Στην περιοχή της πυρκαγιάς είχε εγκατασταθεί σταθερός μετρητικός σταθμός, που πέραν των δειγματοληψιών για περαιτέρω χημικές αναλύσεις είχε σκοπό την εκτίμηση του βεληνεκούς της άμεσης επίδρασης των εκπομπών στις γύρω και κοντινές περιοχές και κοντά στην επιφάνεια εδάφους. Επίσης η μελέτη της διασποράς των σωματιδίων καπνού έγινε με τη χρήση του

αριθμητικού μοντέλου FLEXPART-WRF, που πραγματοποιήθηκε στο πλαίσιο των υπηρεσιών του Κέντρου Αριστείας BEYOND (http://www.beyond-eocenter.eu/) του ΕΑΑ. Στους Πινακες 3,4,5 παρουσιάζονται τα στοιχεία που απορρέουν από τις αναφορές του ΕΑΑ.

ΠΙΝΑΚΑΣ 3. Μέγιστες συγκεντρώσεις PM_{10} και $PM_{2,5}$ από τη δειγματοληψία στο σημείο της πυρκαγιάς.

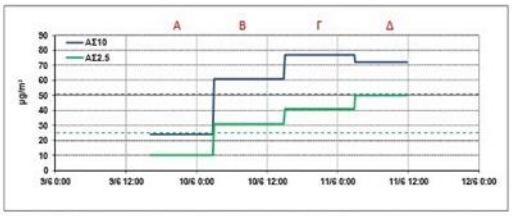
ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ	ΡΥΠΟΣ	Συγκέντρωση από δειγματοληψία(μg/m³)[1]	
		00.00-12.00	12.00-0.00
9/6	PM10		25
	PM2,5		10
10/6	PM10	60	75
	PM2,5	30	40
11/6	PM10	70	
	PM2,5	50	
12/6	PM10		
	PM2,5		

ΠΙΝΑΚΑΣ 4. Μέγιστες συγκεντρώσεις PEC και CO από τη δειγματοληψία στο σημείο της πυρκαγιάς.

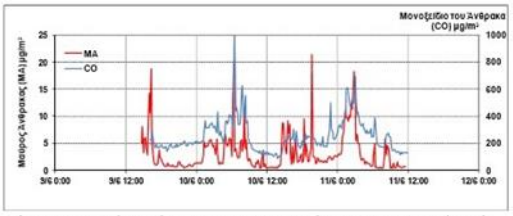
ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ	ΡΥΠΟΣ	Συγκέντρωση από δειγματοληψία(μg/m³)[1]
9/6	PEC max	18
	CO max	300
10/6	PEC max	21
	CO max	1000
11/6	PEC max	17,5
	CO max	700
12/6	PEC max	
	CO max	

ΠΙΝΑΚΑΣ 5. Εύρος μέγιστων τιμών συγκέντρωσης PM_{10} όπως απορρέουν από τα αποτελέσματα του μοντέλου FLEXPART σε μg/m^3.

ΗΜΕΡ/ΝΙΕΣ	FLEXPART
8/6/2015	25-35
9/6/2015	25-35
10/6/2015	15-25
11/6/2015	10-15
12/6/2015	15-25



Διάγραμμα 1. Συγκεντρώσεις $ΑΣ_{2.5}$ και $ΑΣ_{10}$ στο σταθερό σταθμό του ΕΑΑ στην περιοχή της πυρκαγιάς. Οι διαφορετικές περίοδοι δειγματοληψίας σημειώνονται ως αναφορά με τα γράμματα Α, Β, Γ και Δ.



Διάγραμμα 2. Συγκεντρώσεις Μαύρου Άνθρακα (MA) και Μονοξειδίου του Άνθρακα στο σταθερό σταθμό του ΕΑΑ στην περιοχή της πυρκαγιάς

Πίνακας 1. Στοιχεία συγκεντρώσεων $ΑΣ_{2.5}$, $ΑΣ_{10}$, ΜΑ και CO για τις περιόδους των δειγματοληψιών. Επίσης, υπολογίζεται το ποσοστό του χρόνου (% επίδρ.) κατά τον οποίο ο σταθμός βρισκόταν υπό την άμεση επίδραση του νέφους καπνού. Στις παρενθέσεις δίδονται οι μέγιστες 10λεπτες τιμές.

Ημερομηνία (Έναρξη – Λήξη)	Δειγματοληψία	% επίδρ.	$ΑΣ_{2.5}$ μg/m³	$ΑΣ_{10}$ μg/m³	ΜΑ μg/m³	CO μg/m³	$ΑΣ_{2.5}/ΑΣ_{10}$
9/6/2015 15:05 – 10/6/2015 3:00	Α	30	10	24	2.7 (18.7)	211 (366)	0.42
10/6/2015 3:00 – 10/6/2015 15:00	Β	37	30	61	3 (19.7)	260 (1004)	0.49
9/6/2015 15:05 – 10/6 2015 15:00	**Α+Β**	**34**	**20**	**43**	**2.9 (19.7)**	**237 (1004)**	**0.47**
10/6/2015 15:00 – 11/6/2015 3:00	Γ	43	36	77	4.6 (21.3)	281 (610)	0.47
11/6/2015 3:00 – 11/6/2015 11:52	Δ	21	23	72	1.9 (11.8)	241 (693)	0.32
10/6/2015 15:00 – 11/6/2015 11:52	**Γ+Δ**	**32**	**29**	**75**	**3.5 (21.3)**	**264 (693)**	**0.39**

ΕΙΚΟΝΑ 6. Οι συγκεντρώσεις από τη δειγματοληψία όπως εμφανίζονται στην αναφορά του ΕΑΑ. Ως $ΑΣ_{10}$ αναφέρονται τα PM_{10} , $ΑΣ_{2,5}$ αναφέρονται τα $PM_{2,5}$ και ΜΑ τα σωματίδια Μαύρου Άνθρακα. [1]

3.4. Εφαρμογή του ατμοσφαιρικού μοντέλου

Στην παράγραφο αυτή παρουσιάζεται η προ-επεξεργασία των δεδομένων καθώς επίσης και το πώς έγινε η εφαρμογή του μοντέλου. Εμφανίζεται η μέθοδος που ακολουθήθηκε για τη δημιουργία των δεδομένων εισόδου και έπειτα το πώς διαμορφώθηκε το κεντρικό αρχείο επεξεργασίας του μοντέλου και τα σενάρια εφαρμογής του.

Πριν την εφαρμογή του μοντέλου CAMx απαιτείται η δημιουργία των δεδομένων εισόδου. Το CAMx απαιτεί αρχεία εισόδου που καθορίζουν τον χημικό μηχανισμό και περιγράφουν τις φωτοχημικές συνθήκες, τα χαρακτηριστικά της επιφάνειας, τις αρχικές / οριακές συνθήκες, τις εκπομπές και διάφορα μετεωρολογικά πεδία αντιπροσωπευτικά για την περιοχή εφαρμογής του μοντέλου. Τα δεδομένα εισόδου βελτιώνουν τα αποτελέσματα του μοντέλου. Οι βελτιώσεις γίνονται στα πεδία που προαναφέρθηκαν με τους εξής τρόπους (βλέπε Πίνακα 6.):

- *Μετεωρολογικά δεδομένα εισόδου*: Δεδομένα για την μετεωρολογία της οριοθετημένης περιοχής αντλούνται από προγνωστικά μετεωρολογικά μοντέλα.
- *Δεδομένα εισόδου Ποιότητας Αέρα*: Τα δεδομένα αυτά αντλούνται είναι από άλλα μοντέλα είτε από βάσεις δεδομένων, κι έτσι γίνεται η τοποθέτηση των αρχικών και οριακών συνθηκών της περιοχής ανάλυσης.
- *Δεδομένα εισόδου Εκπομπών*: Δεδομένα εκπομπών παρέχονται στο μοντέλο CAMx είτα από άλλα μοντέλα εκπομπών είτε με την βοήθεια επεξεργαστών.
- *Γεωγραφικά δεδομένα εισόδου*: Τα δεδομένα αυτά αναπτύσσονται από βάσεις δεδομένων επιφάνειας, χρήσης εδάφους/εδαφοκάλυψης και αγροτικής πυκνότητας.
- *Δεδομένα εισόδου Φωτόλυσης*: Απορρέουν από δορυφορικές μετρήσεις και μοντέλα μεταφοράς ακτινοβολίας.

ΠΙΝΑΚΑΣ 6. Περιγραφή των τύπων των δεδομένων εισόδου και τα αντίστοιχα πεδία τα οποία καλύπτουν. Πηγή άντλησης πίνακα [8].

Data Types	Data Fields
Meteorology *Supplied by Prognostic Meteorological Models*	• 3-Dimensional Gridded Fields: - Vertical Grid Structure - Horizontal Wind Components - Temperature - Pressure - Water Vapor - Vertical Diffusivity - Clouds/Precipitation (optional) - Snow Cover (optional)
Air Quality *Developed from Other Models or Measurement Data*	• Gridded Initial Concentrations • Gridded Lateral Boundary Concentrations • Gridded Top Boundary Concentrations (optional)
Emissions *Supplied by Emissions Models and Processors*	• Elevated Point Sources (optional), e.g.: - Industrial Facilities - Prescribed, Agricultural, Wild Fires - Lightning NOx • Combined Gridded Sources (optional), e.g.: - Low-Level Point - On-Road and Non-Road Mobile - Area - Biogenic - Oceanic
Geographic *Developed from Terrain, Landuse/Landcover, and Vegetation Density Datasets*	• Gridded Surface Characteristics - Landuse/LandCover - Terrain Elevation (optional) - Leaf Area Index (LAI; optional) - Land/Ocean Mask (optional)
Photolysis *Derived from Satellite Measurements and Radiative Transfer Models*	• Atmospheric Radiative Properties - Gridded Ozone Column Codes - Photolysis Rates Lookup Table

3.4.1. Αρχικές και οριακές συνθήκες ατμοσφαιρικής ρύπανσης

Επειδή το μοντέλο είναι περιοχικής κλίμακας, είναι απαραίτητο να ληφθεί υπ' όψιν η επίδραση των γύρω περιοχών. Αυτό δεν θα είχε σημασία μόνο αν το μοντέλο ήταν παγκόσμιας κλίμακας. Οι οριακές συνθήκες δηλώνουν την μεταφορά από έξω προς τα μέσα, δηλαδή το πόση ρύπανση έχει φτάσει στα όρια της περιοχής ενδιαφέροντος του μοντέλου (grid) από τις γύρω περιοχές, αλλά και τι φεύγει προς τις γύρω περιοχές.

Για να είναι πιο ακριβείς οι υπολογισμοί του μοντέλου, ελήφθησαν δεδομένα για τη συγκέντρωση των ρύπων στα όρια του grid, από τη βάση δεδομένων του παγκοσμίου κλίμακας μοντέλου Mozart-4. Επειδή το μοντέλο MOZART-4 έχει ανάλυση 0,7°× 0,7°, η περιοχή η οποία εξετάζουμε είναι μόνο ένα κελί του MOZART-4. Οι τιμές των συγκεντρώσεων εξήχθησαν από το

μοντέλο σε VMR (Volume Mix Ratio) και μετατράπηκαν σε μg/m^3 για τους σωματιδιακούς ρύπους και σε ppm για τους αέριους, ώστε να εισαχθούν στα αρχεία του icbcprep.

Ο προ-επεξεργαστής icbcprep όπως αναφέρθηκε και παραπάνω καθορίζει τις αρχικές σε όλα τα κελιά του μοντέλου και τις οριακές συνθήκες στα κελιά στα όρια του μοντέλου. Από το MOZART-4 δημιουργήθηκαν διαφορετικά αρχεία αρχικών συνθηκών για τις ημέρες 6-13 Ιουνίου. Από αυτά εκτελώντας το πρόγραμμα του icbcprep δημιουργήθηκαν τα αρχεία των οριακών συνθηκών για κάθε μέρα (Εικόνα 2.).Ο κώδικας icbcprep χρησιμοποιείται για την δημιουργία των αρχικών συνθηκών της πρώτης ημέρας που εκτελείται το μοντέλο καθώς και για τη δημιουργία του πρώτου σεναρίου ευαισθησίας. Για κάθε επόμενη μέρα το μοντέλο χρησιμοποιεί το instant αρχείο της προηγούμενης ημέρας, που έχει δημιουργηθεί μετά την εκτέλεση του κεντρικού προγράμματος και οι τιμές αυτές τοποθετούνται ως αρχικές συνθήκες, για την καινούρια μέρα . Αυτό σημαίνει ότι χρησιμοποιούνται σαν οριακές και αρχικές συνθήκες τα 3D πεδία όλων των ρύπων της τελευταίας ώρας της προηγούμενης ημέρας.

3.4.2. Εκπομπές αέριας ρύπανσης

Ο ρυθμός εκπομπής των ρύπων είναι απαραίτητο στοιχείο για τον υπολογισμό της διασποράς των ρύπων που εκλύονται από τη σημειακή πηγή. Για το λόγο αυτό συντέθηκε πρόγραμμα, σε γλώσσα fortran που δημιουργεί αρχεία με τις ημερήσιες εκπομπές των ρύπων της σημειακής πηγής της φωτιάς. Τα αρχεία αυτά είναι σε δυαδικό σύστημα(binary) και χρησιμοποιούνται στο κεντρικό αρχείο εργασίας ως δεδομένα εισόδου για το προφίλ των εκπομπών. Το πρόγραμμα αυτό έγινε δημιουργήθηκε σύμφωνα με τα στοιχεία που χρειάζεται να εισαχθούν στο μοντέλο CAMx.

Η επιλογή των ρύπων έγινε σύμφωνα με τις εκπομπές που μπορεί να υπάρξουν έπειτα από καύση χαρτιών και πλαστικών. Οι αέριοι ρύποι που επιλέχθηκαν είναι οι CO, NOx,HCl και οι σωματιδιακοί ρύποι είναι οι BC (black carbon), PM_{10} και $PM_{2,5}$. Πιο αναλυτικά και για να συμβαδίζουμε με την ορολογία του CAMx οι αέριοι ρύποι που εισήχθησαν είναι οι εξής:

- Αέριοι ρύποι: CO, NOx τα οποία διαχωρίστηκαν σε NO και NO_2 και HCl
- Σωματιδιακοί ρύποι: Τα PM_{10} και $PM_{2,5}$ διαχωρίστηκαν εφ' όσον παρέχεται η δυνατότητα από το μοντέλο στα επιμέρους σωματίδια POA (primary organic aerosol), PEC (particulates of elementary carbon-black carbon),PSO_4 (sulfates' particulates) και τα υπόλοιπα πρωτογενή σωματίδια CPRM (coarse particulates), FPRM (fine particulates).

Από τη βιβλιογραφία[10] έχουμε ότι :

PM_{10}=4,51 kg/Mg waste

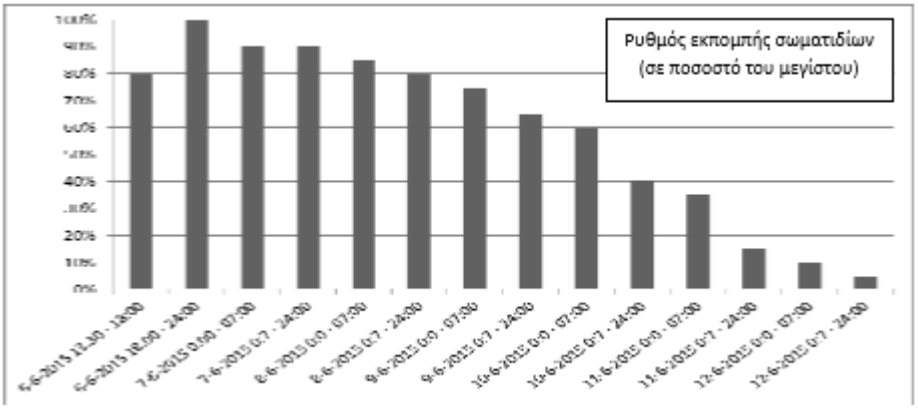
$PM_{2,5}$=4,19 kg/Mg waste

Επίσης τα $PM_{2,5}$ είναι το 93% των PM_{10} και το υπόλοιπο 7% αντιστοιχεί στα αδρόκκοκα $PM_{2,5\text{-}10}$=CPRM . Ακόμα το 42% των $PM_{2,5}$ αντιστοιχεί στον Μαύρο άνθρακα=PEC και το υπόλοιπο 58% μοιράζεται ισότιμα στα υπόλοιπα λεπτά σωματίδια FPRM,POA,PSO4.

Από την αρχική αναφορά του ΕΑΑ[1][2], ελήφθησαν δεδομένα για το ρυθμό εκπομπής των σωματιδίων (Διάγραμμα 1) καθώς και το μέγιστο των εκπομπών σωματιδιακών ρύπων στα 0,15 kg/sec (540000g/hr). Ανάγοντας το μέγιστο ποσοστό σωματιδιακών εκπομπών στα ποσοστά των εκάστοτε σωματιδιακών ρύπων εξήχθησαν οι μέγιστες τιμές εκπομπών που σύμφωνα με το Διάγραμμα 1. αντιστοιχούν στις 6/6/2015 την χρονική περίοδο 18.00-24.00. Έπειτα σύμφωνα με τα ποσοστά που δίνονται από το ίδιο Διάγραμμα 1. για τον ρυθμό εκπομπής εξήχθησαν και οι εκπομπές για τα σωματίδια για τις υπόλοιπες ημέρες και χρονικές περιόδους (Πίνακας 8.).

Για του αέριους ρύπους (από βιβλιογραφία όπως εμφανίζεται στον Πίνακα 7.) οι τιμές των εκπομπών ορίστηκαν σε σχέση με το ποσοστό των σωματιδίων. Αφού βρέθηκε η αναλογία των αέριων ρύπων συναρτήσει των σωματιδιακών, έγινε χρήση του μέγιστου εκπομπών σωματιδιακών ρύπων ώστε να βρεθεί η τιμή μέγιστης εκπομπής των αέριων ρύπων. Έπειτα με χρήση του ρυθμού εκπομπής από το Διάγραμμα 1. Εξήχθησαν και οι τιμές για τους αέριους ρύπους για τις υπόλοιπες ημέρες και χρονικές περιόδους (Πίνακας 8.).

Ακόμα σύμφωνα με τα ημερήσια ποσοστά παρατηρείται και η διακύμανση του ύψους της φλόγας φωτιάς. Οι εκπομπές υπολογίζονται συναρτήσει της ώρας, του αριθμού των ρύπων και του αριθμού των πηγών. Παράλληλα όμως χρησιμοποιούνται και τα ημερήσια ποσοστά και το ύψος της φλόγας ώστε να εξαχθούν πιο ρεαλιστικά αποτελέσματα.



Διάγραμμα 1: Ρυθμός εκπομπής σωματιδίων από την πηγή της φωτιάς στο εργοστάσιο στον Ασπρόπυργο σε ποσοστό του μεγίστου. Μέγιστο εκπομπών 0,15 kg/sec.[2]

ΠΙΝΑΚΑΣ 7: Ποσοστά εκπομπών ρύπων σε tons/year που προέρχονται από καύση χαρτιού και πλαστικού.[6]

Object	CO_2	CO	HCN	NO_x	SO_2	HCl	Particles
House	9,530	367	0.2	16	73	35	538
Apartm.	2,170	87	0.1	8	19	21	149
School	2,980	117	0	2	31	20	222
>1 MSEK	4,300	166	0.1	6	1	46	40
Cars	1,910	76	0.2	10	7	16	12
Material							
wood	14,860	529	0.1	12	0	0	91
paper	990	36	0	0.9	0	0	24
textiles	815	29	0	0.7	0	0	11
PVC	630	52	0	0.2	0	138	26
PUR	575	46	0.5	26	0	0	3
polystyrene	365	36	0	0.1	0	0	2
polyethylene	450	10	0	0.3	0	0	2
PMMA	605	21	0	0.4	0	0	3
rubber	205	16	0	0.4	5	0	1.5
petrol, oil	775	16	0	0.5	2	0	2.5
gypsum					123		787
grain	620	22		0.5	1		8

ΠΙΝΑΚΑΣ 8 : Τιμές εκπομπών για αέριους αλλά και σωματιδιακούς ρύπους για τις ημέρες του ατυχήματος.

			GASES (mol/hr)					PARTICLES (g/hr)							
date	time	Ημερήσια ποσοστα%	CO	NO_x	NO_2	NO	HCl	CPRM	$PM_{2,5}$	PM_{10}	BC	FPRM	POA	PSO_4	Ύψος φωτιάς (ht)(m)
	13.30-18.00	80	27158,4	540	486	54	31,57056	30240	401760	432000	168739,2	77673,6	77673,6	77673,6	400
6.6.15	18.00-24.00	100	33948	675	607,5	67,5	39,4632	37800	502200	540000	210924	97092	97092	97092	500
	00.00-07.00	90	30553,2	607,5	546,75	60,75	35,51688	34020	451980	486000	189831,6	87382,8	87382,8	87382,8	450
7.6.15	07.00-24.00	90	30553,2	607,5	546,75	60,75	35,51688	34020	451980	486000	189831,6	87382,8	87382,8	87382,8	450
	00.00-07.00	85	28855,8	573,75	516,375	57,375	33,54372	32130	426870	459000	179285,4	82528,2	82528,2	82528,2	425
8.6.15	07.00-24.00	80	27158,4	540	486	54	31,57056	30240	401760	432000	168739,2	77673,6	77673,6	77673,6	400
	00.00-07.00	75	25461	506,25	455,625	50,625	29,5974	28350	376650	405000	158193	72819	72819	72819	375
9.6.15	07.00-24.00	65	22066,2	438,75	394,875	43,875	25,65108	24570	326430	351000	137100,6	63109,8	63109,8	63109,8	325
	00.00-07.00	60	20368,8	405	364,5	40,5	23,67792	22680	301320	324000	126554,4	58255,2	58255,2	58255,2	300
10.6.15	07.00-24.00	40	13579,2	270	243	27	15,78528	15120	200880	216000	84369,6	38836,8	38836,8	38836,8	200
	00.00-07.00	35	11881,8	236,25	212,625	23,625	13,81212	13230	175770	189000	73823,4	33982,2	33982,2	33982,2	175
11.6.15	07.00-24.00	15	5092,2	101,25	91,125	10,125	5,91948	5670	75330	81000	31638,6	14563,8	14563,8	14563,8	75
	00.00-07.00	10	3394,8	67,5	60,75	6,75	3,94632	3780	50220	54000	21092,4	9709,2	9709,2	9709,2	50
12.6.15	07.00-24.00	5	169740	33,75	30,375	3,375	1,97316	1890	25110	27000	10546,2	4854,6	4854,6	4854,6	25

3.4.3. Μετεωρολογικά δεδομένα

Τα μετεωρολογικά δεδομένα αντλήθηκαν από προσομοίωσεις του μοντέλου WRF/ARW v3 (αναφορά) και εισήχθηκαν στον προεπεξεργαστή WRF-CAMx, ώστε να παραχθούν τα απαραίτητα δεδομένα εισόδου στο CAMx. Τα αρχεία εξόδου αυτού του προγράμματος (δεδομένα εισόδου του CAMx), δίνουν πληροφορίες για τους ανέμους, τη θερμοκρασία, τη ροή της ηλιακής ακτινοβολίας, το ανώτατο στρώμα ανάμειξης, την εδαφοκάλυψη και τη χρήση εδάφους, τις βροχοπτώσεις και χιονοπτώσεις καθώς και για την κάλυψη της ατμόσφαιρας από σύννεφα.

3.4.4. Προετοιμασία του κεντρικού αρχείου εργασίας(jobscript)

Για να πραγματοποιηθεί η εκκίνηση του προγράμματος και το αριθμητικό μοντέλο να τρέξει για την περίοδο του ατυχήματος, ήταν απαραίτητο να τροποποιηθούν οι παράμετροι που ορίζονται σε αυτό, με τις απαιτήσεις και τα δεδομένα τα οποία υπάρχουν. Ο τύπος της εφαρμογής είναι και πάλι ο μη σειριακός - no-MPI.

Στο jobscript αρχικά ορίζονται οι ημερομηνίες και οι χρονικές περίοδοι οι οποίες μας ενδιαφέρουν. Το πρόγραμμα έτρεξε για τις ημερομηνίες 6-13 Ιουνίου του 2015. Εν συνεχεία τροποποιούνται κατάλληλα οι παράμετροι για τις συντεταγμένες της περιοχής εξέτασης, καθώς επίσης ορίζεται και ως μέθοδος οριζόντιας προβολής η "Latlon". Θέτονται ως αρχεία εισόδου τα αρχεία τα οποία έχουν δημιουργηθεί από τους preprocessors καθώς επίσης εισάγεται και το πρόγραμμα των pointsources, έτσι ώστε να ληφθούν υπ' όψιν οι σημειακές πηγές και συγκεκριμένα η προς μελέτη πηγή και οι εκπομπές της. Ως χημικοί μηχανισμοί χρησιμοποιήθηκαν οι εξής:

- Χημικοί Μηχανισμοί για *πολλαπλές φωτοχημικές αντιδράσεις αέριας φάσης*. Χρησιμοποιήθηκε ο CB6 μηχανισμός για χημεία Δεσμού Άνθρακα (Carbon Bond chemistry). Αυτός ο μηχανισμός επιλύνεται με τη μέθοδο EBI (Euler Bacward Iretative) η οποία είναι γρήγορη και ακριβής.

- Χημικός Μηχανισμός για *Αιωρούμενα Σωματίδια* (PM), και περιλαμβάνονται σε αυτόν αλγόριθμοι για αερολύματα ανόργανων σωματιδίων (ISORROPIA) και προσεγγίσεις για τα οργανικά αερολύματα (VBS). Η επιλογή για την διαφοροποίηση των σωματιδίων βάση μεγέθους γίνεται από την προσέγγιση coarse/fine (CF).

- Για την *οριζόντια μεταφορά* παρέχεται από το μοντέλο ο μηχανισμός PPM (Piecewise Parabolic Method), μία μερικώς παραβολική μέθοδος που διαθέτει υψηλής τάξης ακρίβεια, μικρή αριθμητική διάχυση και είναι αρκετά γρήγορη για εφαρμογή της σε μεγάλα δίκτυα.

- Ως μηχανισμός *ξηρής εναπόθεσης* δίνεται ο WESELY89, μία προσέγγιση που βασίζεται στο μοντέλο Wesely (1989) και είναι διατυπωμένο για 11 κατηγορίες landuse.

Το πρόγραμμα κατά το τρέξιμο του δημιουργεί έναν φάκελο αρχείων εξόδου (outputs) στο οποίο εμπεριέχονται τα αρχεία εξόδου των τύπων avrg (αρχείο μέσων συγκεντρώσεων), depn(αρχείο επιφανειακής εναπόθεσης), inst (αρχείο αρχικών στιγμιαίων συγκεντρώσεων), mass (αρχείο επιλεγμένων συγκεντρώσεων), out. Εκεί υπάρχει μία ξεχωριστή συστάδα με αρχεία εξόδου (output files) για κάθε μέρα. Στο out αρχείο καταγράφονται τα αποτελέσματα της εφαρμογής. Με την οπτικοποίηση των δεδομένων συγκεντρώσεων επιλεγμένων ατμοσφαιρικών ρύπων μέσω του PANOPLY (https://www.giss.nasa.gov/tools/panoply/), διαπιστώνεται η χωρική κατανομή τους στην περιοχή και την περίοδο ενδιαφέροντος.

Το μοντέλο έτρεξε δύο φορές αλλάζοντας τα δεδομένα εισόδου. Αρχικά έγινε μία εφαρμογή του μοντέλου χρησιμοποιώντας τα δεδομένα εισόδου με αρχικές/οριακές συνθήκες και τις εκπομπές τις σημειακής πηγής. Έτσι με την αφαίρεση των αποτελεσμάτων αυτών των δύο σεναρίων κατά την οπτικοποίηση τους, μπορεί να διαπιστωθεί η ακριβής επίδραση της σημειακής πηγής στην περιοχή ανάλυσης του μοντέλου. (Πίνακας 9)

ΠΙΝΑΚΑΣ 9. Σενάρια εφαρμογής του μοντέλου με τις αντίστοιχες επιλογές δεδομένων.

Εφαρμογή Μοντέλου CAMx	Επιλογές Δεδομένων Εισόδου
1η	Initial/boundaries conditions data, **Pointsource emissions data**, Photolysis rates data, Meteorology conditions data, Landuse/Landcover data
2η	Initial/boundaries conditions data, Photolysis rates data, Meteorology conditions data, Landuse/Landcover data

4. Αποτελέσματα

Κατά την εξαγωγή των αποτελεσμάτων παραλείπουμε τις δύο πρώτες ημέρες που έτρεξε το μοντέλο, διότι χρειάζεται να δοθεί κάποιο περιθώριο σταθεροποίησής του (spin-up time) ώστε να δίνονται έγκυρα αποτελέσματα.

4.1. Παρουσίαση αριθμητικών αποτελεσμάτων του μοντέλου CAMx

Στον Πίνακα 10. παρουσιάζονται οι μέγιστες μέσες ημερήσιες τιμές των συγκεντρώσεων όλων των ρύπων στην περιοχή της πυρκαγιάς. Οι συγκεντρώσεις αυτές προήλθαν έπειτα από εφαρμογή διαφορετικών παραμέτρων κατά την εκτέλεση του μοντέλου. Το πρώτο σενάριο εφαρμογής του μοντέλου όπως παρουσιάζει ο Πίνακας 9, πραγματοποιήθηκε την ενεργοποίηση των εκπομπών της σημειακή πηγής. Δηλαδή το μοντέλο έτρεξε με δεδομένα μόνο για μετεωρολογία και αρχικές/οριακές συνθήκες. Στο δεύτερο σενάριο τώρα εφαρμόστηκαν και τα δεδομένα των εκπομπών της σημειακής πηγής. Κατά τη διαδικασία της οπτικοποίησης των αποτελεσμάτων ελήφθησαν οι μέγιστες τιμές τόσο από το πρώτο και το δεύτερο σενάριο, όσο και από την διαφορά των δύο αυτών, η οποία αποδίδει αποτελέσματα για τις συγκεντρώσεις των ρύπων από την επίδραση της πηγής.

ΠΙΝΑΚΑΣ 10. Μέγιστες μέσες ημερήσιες συγκεντρώσεις όλων των ρύπων στην περιοχή ανάλυσης για κάθε σενάριο που εφαρμόστηκε το μοντέλο.

ΡΥΠΟΣ	ΜΕΓΕΘΟΣ	ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΜΟΝΤΕΛΟΥ	8-Ιουν	9-Ιουν	10-Ιουν	11-Ιουν	12-Ιουν
CO	ppm	no pointsources	0,164001	0,163986	1,118849	0,402623	0,187951
		with pointsources	0,168539	0,175457	1,118849	0,403097	0,217925
		επίδραση πηγής (with-no)	0,004697	0,011875	0,012681	0,006677	0,027915
NO_2		no pointsources	0,010467	0,013058	0,022272	0,027656	0,021351
		with pointsources	0,010467	0,013058	0,022272	0,027656	0,021347
		επίδραση πηγής (with-no)	0,000192	0,000272	0,000321	0,000179	0,00027
NO		no pointsources	0,00124	0,001714	0,002924	0,003184	0,002841
		with pointsources	0,00124	0,001714	0,002924	0,003184	0,002841
		επίδραση πηγής (with-no)	0,0000001	0,0000001	0,0000001	0,0000001	0,000011
CPRM	μg/m^3	no pointsources	1,01E-09	1,01E-09	1,01E-09	1,01E-09	1,006651
		with pointsources	0,157251	0,499168	0,539274	0,433952	1,335723
		επίδραση πηγής (with-no)	0,149441	0,433395	0,507894	0,407638	1,227191
FPRM		no pointsources	1,08E-09	1,05E-09	1,06E-09	1,06E-09	1,08E-09
		with pointsources	0,554857	1,352245	1,408433	1,156419	3,52235
		επίδραση πηγής (with-no)	0,530208	1,33749	1,328188	1,074357	3,235578
PEC		no pointsources	1,470947	0,262008	0,306116	0,341809	0,424757
		with pointsources	1,470947	3,192778	3,361571	2,706692	8,070084
		επίδραση πηγής (with-no)		2,905712	2,878192	2,198657	7,028817
POA		no pointsources	0,857535	0,57	0,623008	1,296929	2,020514
		with pointsources	0,33547	1,909855	2,03882	2,149933	5,516782
		επίδραση πηγής (with-no)	0,530278	1,337942	1,335134	0,8248	3,238448
PSO_4		no pointsources	6,0273	5,3817	4,3725	2,7113	4,0008
		with pointsources	6,0285	6,6121	5,7489	3,6556	7,4601
		επίδραση πηγής (with-no)	0,535	1,3471	1,3847	0,7573	3,2381

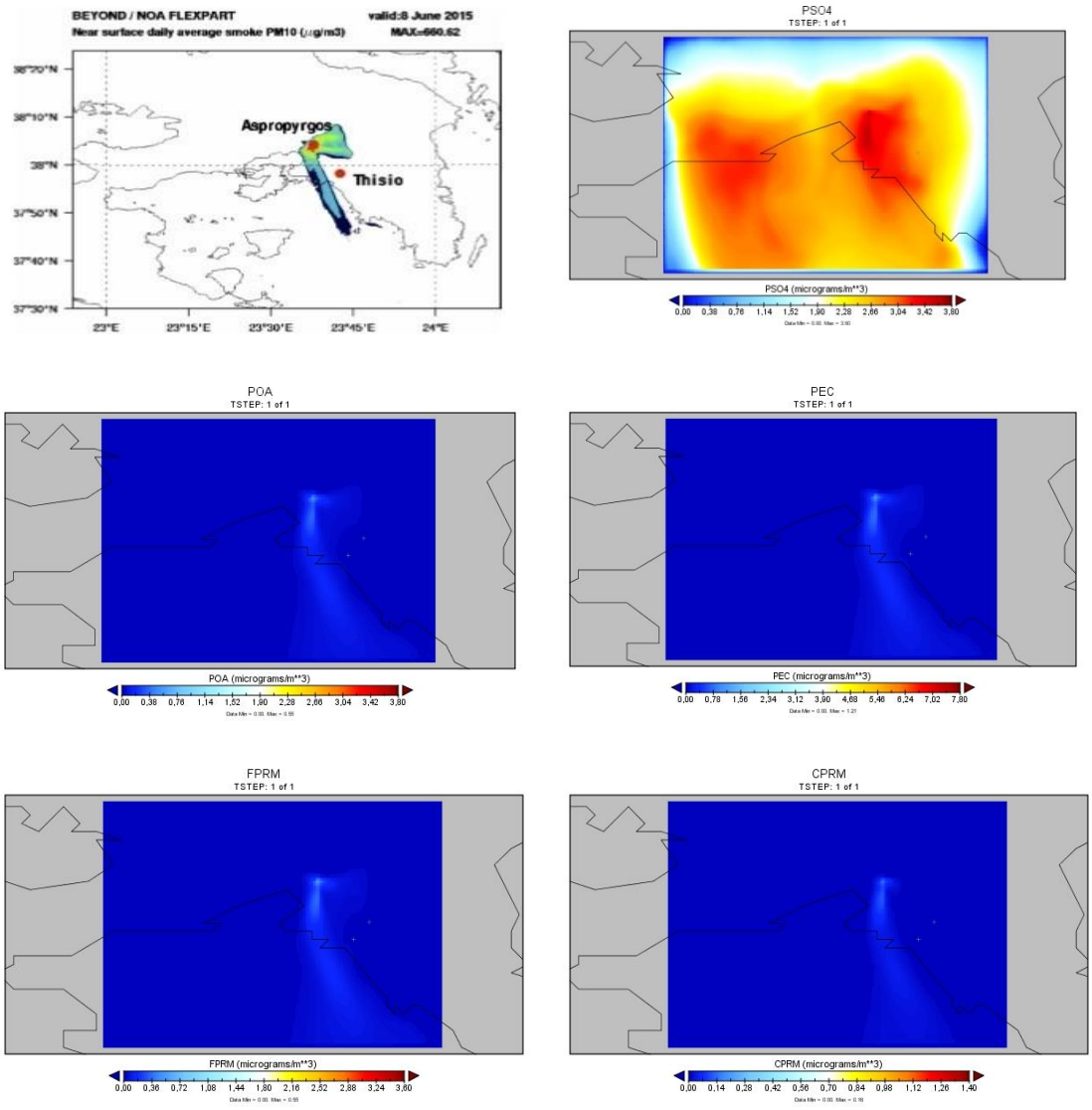
4.2. Σύγκριση αποτελεσμάτων των αριθμητικών μοντέλων FLEXPART και CAMx

Σε αυτό το σημείο της εργασία παρουσιάζεται μία σύγκριση των αποτελεσμάτων του μοντέλου διασποράς FLEXPART και του CAMx για το ίδιο επεισόδιο πυρκαγιάς.

Στις παρακάτω απεικονίσεις των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων, παρατηρείται ότι τα αποτελέσματα των δύο μοντέλων παρουσιάζουν πολλές ομοιότητες αλλά και διαφορές. Αρχικά η μορφή των πλουμίων στις περισσότερες ημέρες είναι ίδια. Όμως υπάρχει διαφοροποίηση στη χωρική διάχυση των πλουμίων. Μέρος των πλουμίων που εμφανίζονται στις προσομοιώσεις από το CAMx δεν εμφανίζεται στις αντίστοιχες του FLEXPART. Αυτό πιθανώς να οφείλεται στη διαφοροποίηση της οριζόντιας έκτασης των κελιών των δύο μοντέλων. Η ανάλυση του κελιού του FLEXPART είναι 0,5×0,5 km σε αντίθεση με την ανάλυση του κελιού του CAMx που είναι 1×1 km. Αυτός είναι και πιθανόν ο λόγος της μεγαλύτερης διασποράς των στοιχείων στο μοντέλο CAMx.

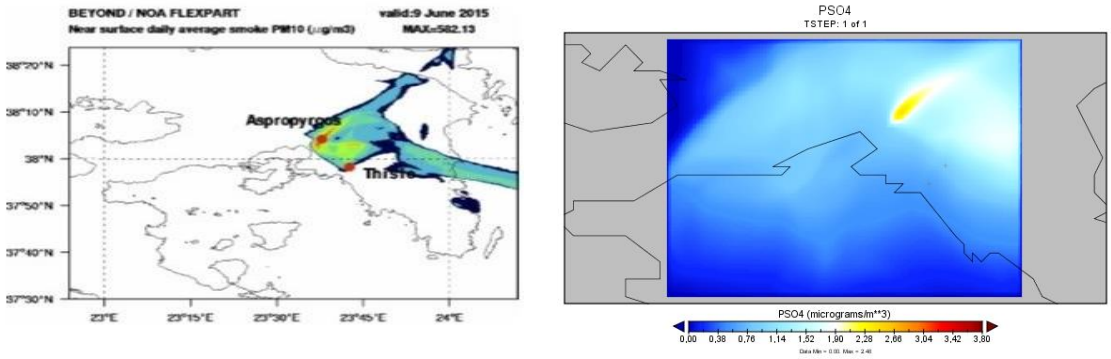
Το μοντέλο CAMx, δίνει τη δυνατότητα επίσης να γίνεται διαχωρισμός των σωματιδιακών ρύπων PM_{10}.

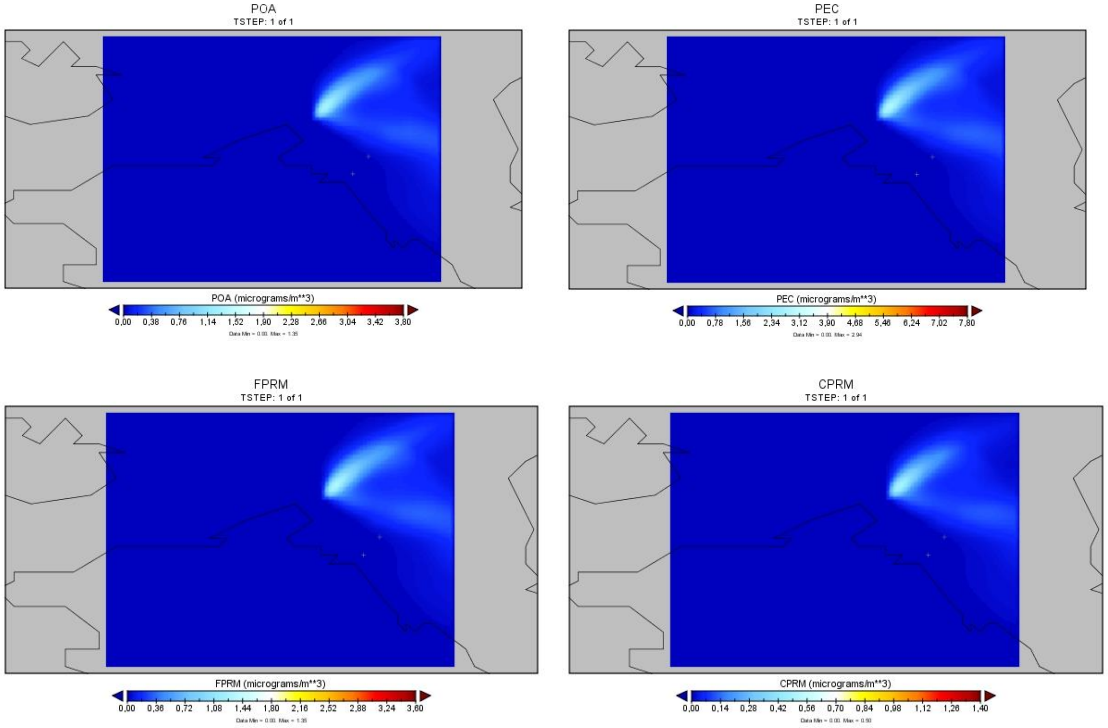
- 8/6/2015



ΕΙΚΟΝΑ 5. Σύγκριση γεωγραφικών κατανομών των μέσων ημερήσιων επιφανειακών τιμών PM_{10} των δύο μοντέλων για τις 8/6.

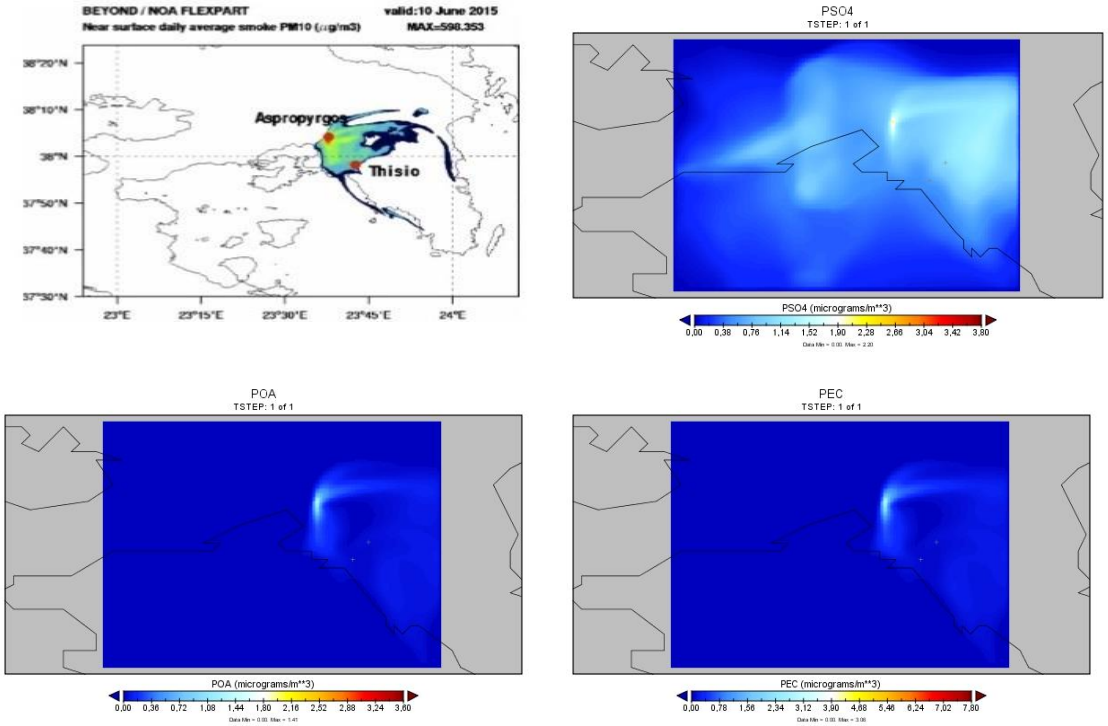
- 9/6/2015

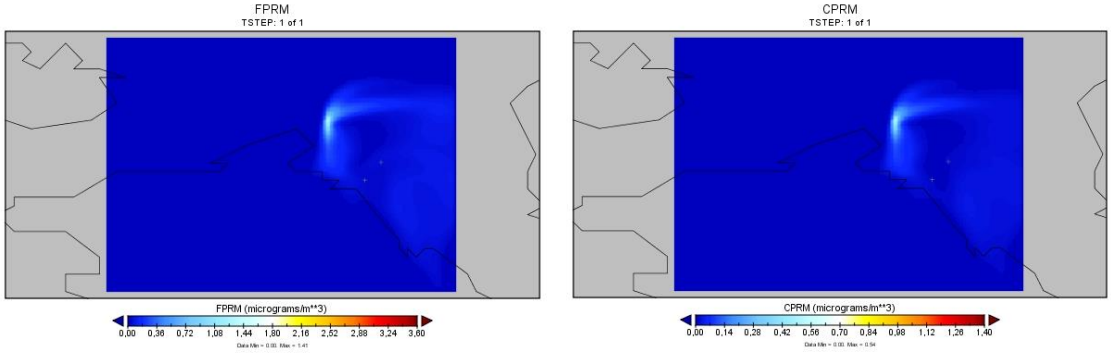




ΕΙΚΟΝΑ 6. Σύγκριση γεωγραφικών κατανομών των μέσων ημερήσιων επιφανειακών τιμών PM_{10} των δύο μοντέλων για τις 9/6.

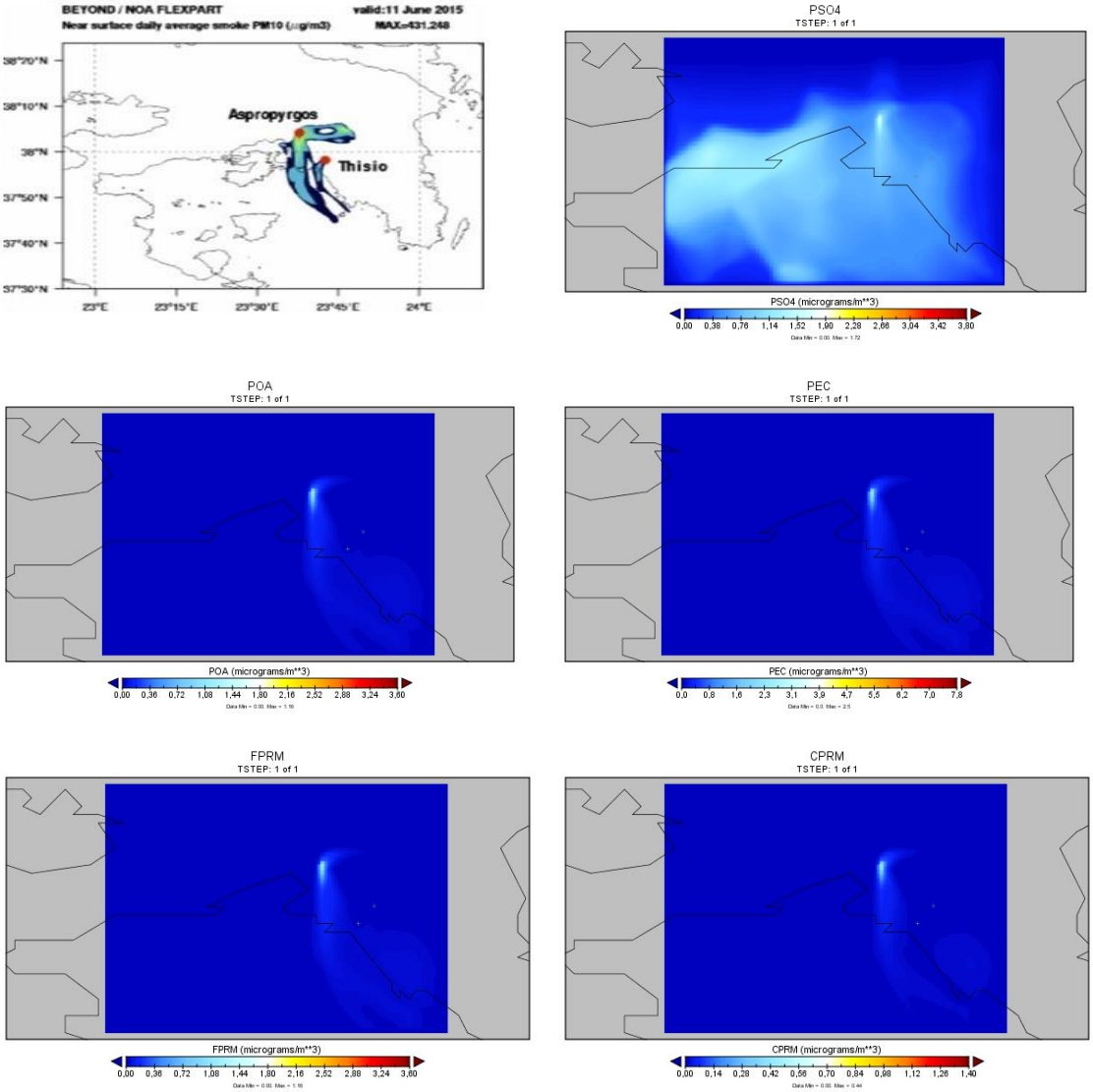
- 10/6/2015





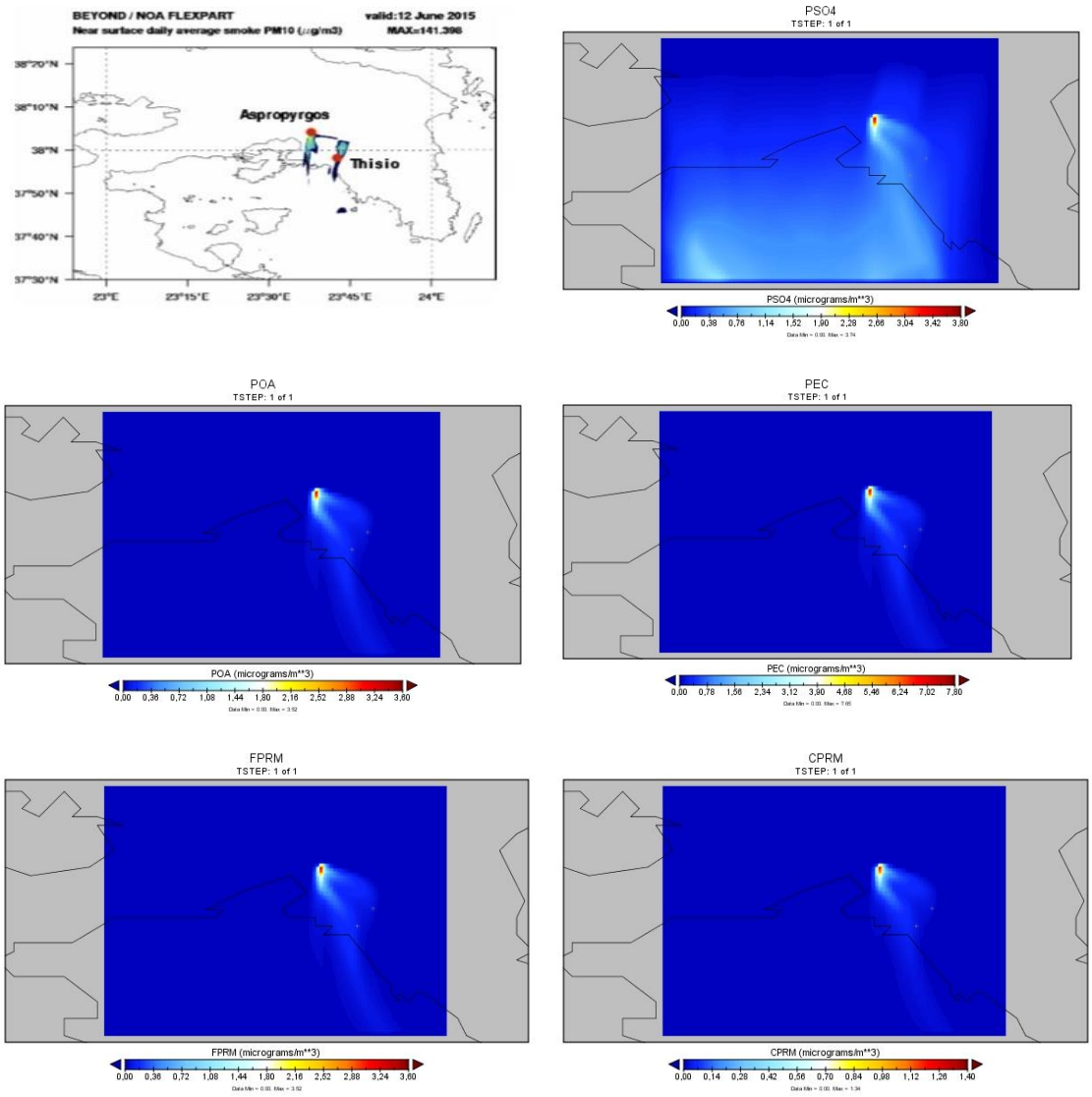
ΕΙΚΟΝΑ 7. Σύγκριση γεωγραφικών κατανομών των μέσων ημερήσιων επιφανειακών τιμών PM_{10} των δύο μοντέλων για τις 10/6.

- 11/6/2015

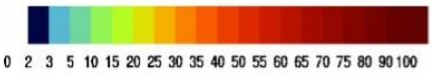


ΕΙΚΟΝΑ 8. Σύγκριση γεωγραφικών κατανομών των μέσων ημερήσιων επιφανειακών τιμών PM_{10} των δύο μοντέλων για τις 11/6.

- 12/6/2015



ΕΙΚΟΝΑ 9. Σύγκριση γεωγραφικών κατανομών των μέσων ημερήσιων επιφανειακών τιμών PM_{10} των δύο μοντέλων για τις 12/6.



Σχήμα 6. Μέση ημερήσια συγκέντρωση του καπνού από την πυρκαγιά στα $ΑΣ_{10}$ κοντά στο έδαφος ($μg/m^3$) 6-12 Ιουνίου 2015.

ΕΙΚΟΝΑ 10. Κλίμακα παρουσίασης αποτελεσμάτων συγκέντρωσης PM_{10} του μοντέλου FLEXPART.

Στον Πίνακα 11. συγκρίνονται οι μέγιστες μέσες τιμές σωματιδιακών ρύπων ημερησίως για PM_{10}. Καθώς στο CAMx δεν υπάρχουν συνολικά τα PM_{10} γίνεται πρόσθεση των μεγίστων τιμών των επιμέρους ρύπων (PSO_4,POA,PEC,FPRM,CPRM) και έπειτα γίνεται η σύγκριση με το FLEXPART. Επειδή οι τιμές του FLEXPART λαμβάνονται σαν εύρος συγκρίνονται με τις αντίστοιχες μέσες ημερήσιες τιμές του CAMx κάνοντας χρήση της τυπικής απόκλισης των τιμών του CAMx. Παρατηρείται έτσι ότι για τις 10,11 και 12 Ιουνίου, το εύρος της μέγιστης μέσης ημερήσιας τιμής που εξάγει το CAMx βρίσκεται μεταξύ των ορίων που καλύπτει το εύρος μέγιστων μέσων ημερήσιων τιμών του FLEXPART. Από την άλλη όμως, δεν παρατηρείται αλληλεπικάλυψη του εύρους των τιμών των δύο μοντέλων για τις πρώτες δύο ημέρες. Το

γεγονός της μεγαλύτερης ανάλυσης του κελιού του CAMx, είναι πιθανός λόγος που συμβάλει στις πολύ μικρότερες συγκεντρώσεις που εξήγαγε το μοντέλο CAMx σε σχέση με τα αποτελέσματα των συγκεντρώσεων του FLEXPART.

ΠΙΝΑΚΑΣ 11. Σύγκριση μέγιστων μέσων ημερήσιων τιμών των PM_{10} των δύο μοντέλων σε $\mu g/m^3$.

ΗΜΕΡ/ΝΙΕΣ	FLEXPART	CAMx	Τυπική απόκλιση τιμών CAMx
8/6/2015	25-35	8,547	2,8482
9/6/2015	25-35	13,566	0,3386
10/6/2015	15-25	13,097	0,5732
11/6/2015	10-15	10,103	2,0704
12/6/2015	15-25	25,905	5,8307

4.3. Οπτικοποίηση αριθμητικών αποτελεσμάτων και εκτίμηση συγκέντρωσης ρύπων στο χώρο

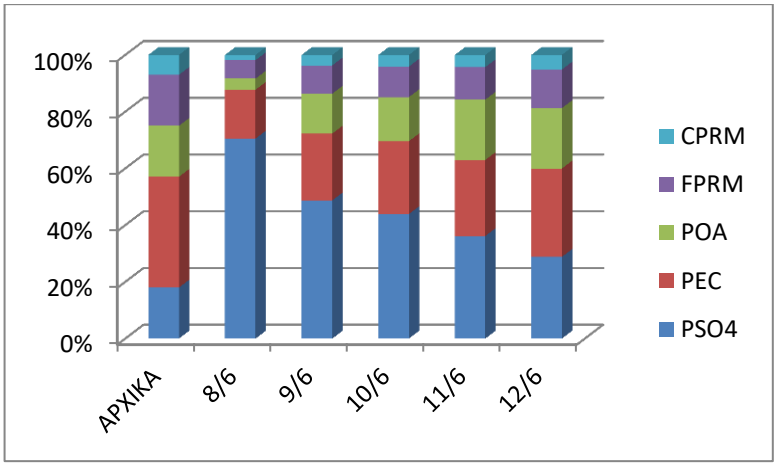
Αρχικά η επίδραση της πηγής εξετάστηκε με την επί τοις εκατό των συγκεντρώσεων των επιμέρους ρύπων ως προς το αρχικό χημικό προφίλ των εκπομπών. Παρακάτω δίνονται αναλυτικά διαγράμματα και πίνακες που εμφανίζουν τη διαφοροποίηση αυτή.

Ο Πίνακας 12. δείχνει ενδεικτικά τις μέσες ημερήσιες συγκεντρώσεις των σωματιδιακών ρύπων λόγω μεταφοράς τους από το εξωτερικό περιβάλλον στην περιοχή μελέτης αλλά και λόγω των εκπομπών της πηγής. Σε συνεργασία με το Διάγραμμα 2 παρατηρείται η ταυτόχρονη αλληλεπίδραση των ρύπων της πηγής και εκείνων που εισέρχονται από τον εξωτερικό χώρο του grid .

Παρατηρείται μεγάλη διαφοροποίηση στο ποσοστό των ρύπων στις ημέρες καύσης της φωτιάς σε σύγκριση με τις αρχικές εκπομπές. Πιο συγκεκριμένα υπάρχει μεγάλη ποσοστιαία αύξηση των θειϊκών σωματιδίων έναντι των υπολοίπων. Για τα θειϊκά σωματίδια παρατηρείται μεγάλη ποσοστιαία αύξηση σε σχέση με τους υπόλοιπους σωματιδιακούς ρύπους για τις 8/6. Το ποσοστό των θειϊκών μειώνεται τις επόμενες ημέρες και παράλληλα το ποσοστό των υπολοίπων αρχίζει και αυξάνεται. Παράλληλα όμως τα θειϊκά παραμένουν στο μεγαλύτερο ποσοστό και αυτό αποδίδεται στο γεγονός ότι είναι δευτερογενής ρύπος. Σε υψηλό ποσοστό βρίσκονται ακόμη και τα σωματίδια του στοιχειακού άνθρακα. Μεγαλύτερες επιπτώσεις ρύπανσης λοιπόν εμφανίζεται αν έχουν οι σωματιδιακοί ρύποι PSO4 και PEC.

ΠΙΝΑΚΑΣ 12. Αρχικές συγκεντρώσεις σωματιδιακών εκπομπών στην περιοχή μελέτης και μέγιστες μέσες ημερήσιες τιμές του κάθε σωματιδιακού ρύπου model grid. Με αλληλεπίδραση των αρχικών και οριακών συνθηκών και της πηγής. Δίνονται σε μg/m^3.

Με boundaries και pntsrc						
ΡΥΠΟΙ	**ΑΡΧΙΚΑ**	**8/6**	**9/6**	**10/6**	**11/6**	**12/6**
PSO_4	17,98	6,029	6,612	5,749	3,656	7,460
PEC	39,06	1,471	3,193	3,362	2,707	8,070
POA	17,98	0,335	1,910	2,039	2,150	5,517
FPRM	17,98	0,555	1,352	1,408	1,156	3,522
CPRM	7	0,157	0,499	0,539	0,434	1,336

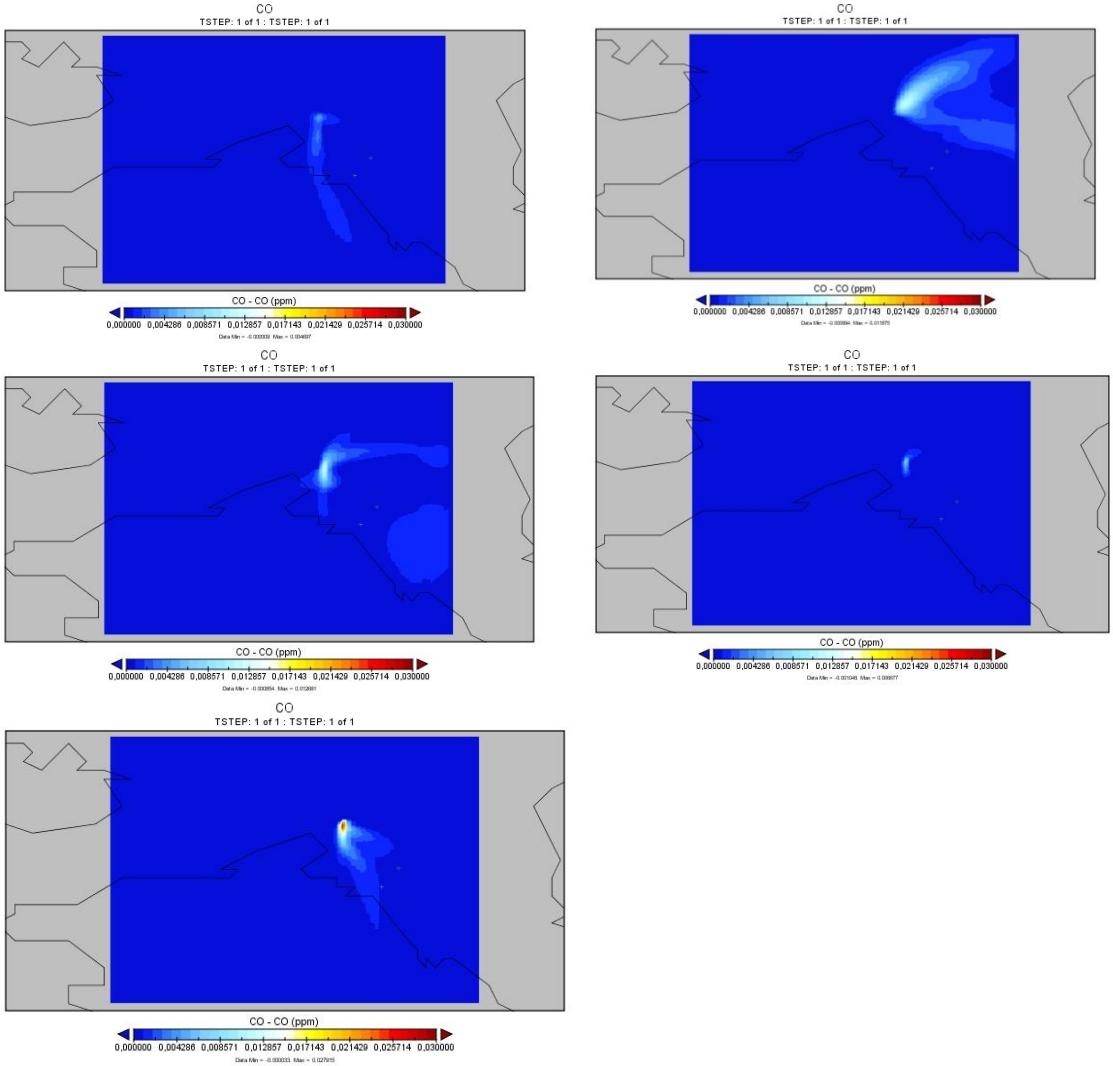


Διάγραμμα 2. Η επι τοις εκατό κατανομή των μέσων ημερήσιων τιμών των σωματιδιακών ρύπων σε σχέση με τις αρχικές συγκεντρώσεις..

Ενδεικτικά εμφανίζονται παρακάτω οι μέσες ημερήσιες τιμές των ρύπων λόγω καθαρής επίδρασης της πηγής της φωτιάς, αέριων ρύπων CO και NO_2 που έχουν μεγάλη επίδραση στην περιοχή για τις ημέρες 8 με 12 Ιουνίου και των σωματιδιακών PSO_4 και PEC. Η χωρική διάχυση των υπόλοιπων ρύπων έχει ίδια μορφή. Για την εξαγωγή των αποτελεσμάτων έγινε η αφαίρεση των αποτελεσμάτων των 2 σεναρίων εφαρμογής (Πίνακας 9) του μοντέλου ώστε να εξαχθούν τα αποτελέσματα για την καθαρή επίδραση της πηγής.

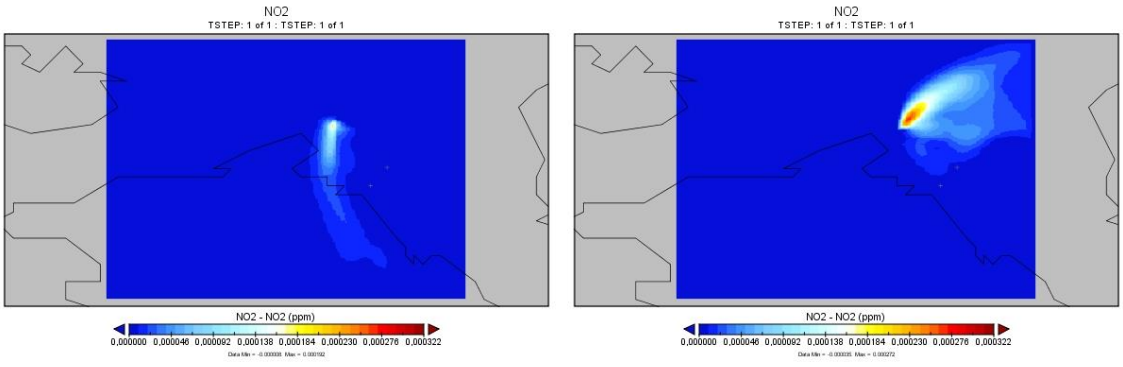
Η διασπορά των ρύπων στην περιοχή ανάλυσης του μοντέλου ακολουθεί την κατεύθυνση των ανέμων όπως αποδίδονται στον Πίνακα 1. Για τις 8/6 παρατηρούμε ότι τα πλούμια των ρύπων έχουν κατεύθυνση ΝΑ και όχι τόσο μεγάλη διάχυση στην ατμόσφαιρα λόγω της μικρής ταχύτητας των ανέμων. Στις 9/6 το πλούμιο των ρύπων κατευθύνεται Β-ΒΑ λόγω της αντίστοιχης κατεύθυνσης ανέμου, με μεγάλη χωρική διασπορά καθώς οι ταχύτητες των ανέμων εκείνη την ημέρα ήταν υψηλές. Στις 10 κ 11/6 παρατηρείται μεγάλη συγκέντρωση των ρύπων στην περιοχή της πυρκαγιάς λόγω επανακυκλοφορίας των ρύπων στην περιοχή, καθώς η κατεύθυνση του αέρα από Β έγινε Ν λόγω της θαλασσινής αύρας. Στις 12/6 αν και η φωτιά είχε πλέον τεθεί υπο έλεγχο η διάχυση των ρύπων, λόγω των μεγάλων ταχυτήτων των ανέμων, έχουν κατεύθυνση Ν-ΝΑ σε πλήρη συμφωνία με την κατεύθυνση του ανέμου. Η έκταση και οι περιοχές που έχουν πληγεί από τις εκπομπές τις πηγής παρουσιάζονται στο Παράρτημα Εικ. 15

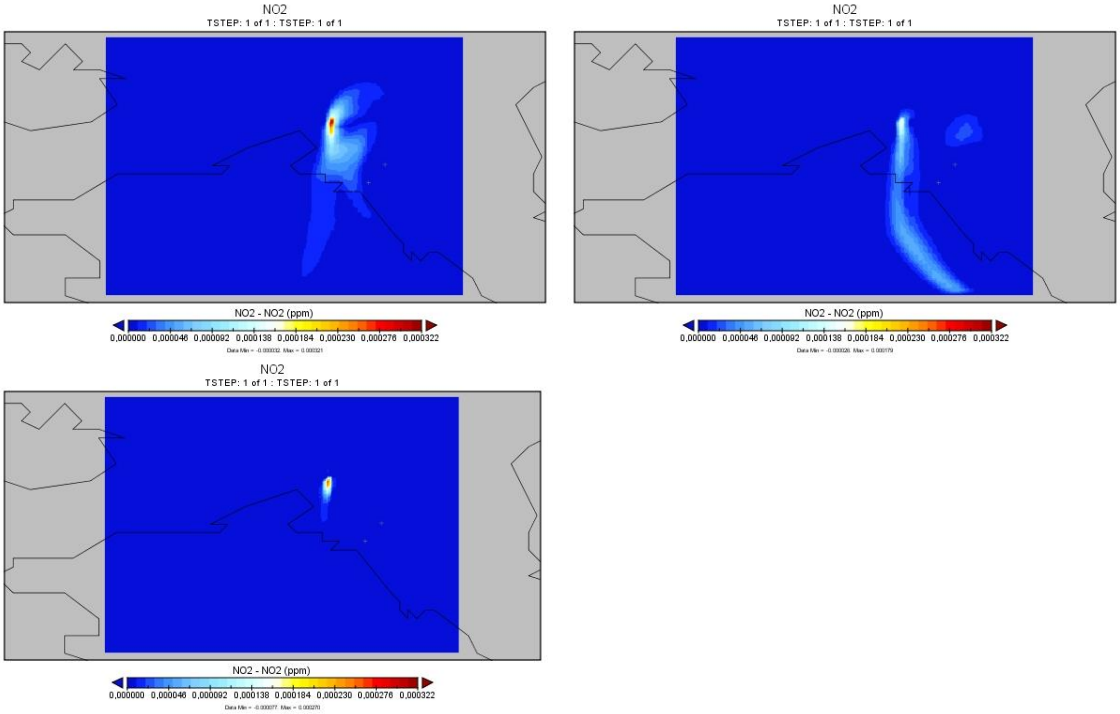
- CO :



ΕΙΚΟΝΑ 11. 8-12/6/2015 χωρική διάχυση του ρύπου CO.

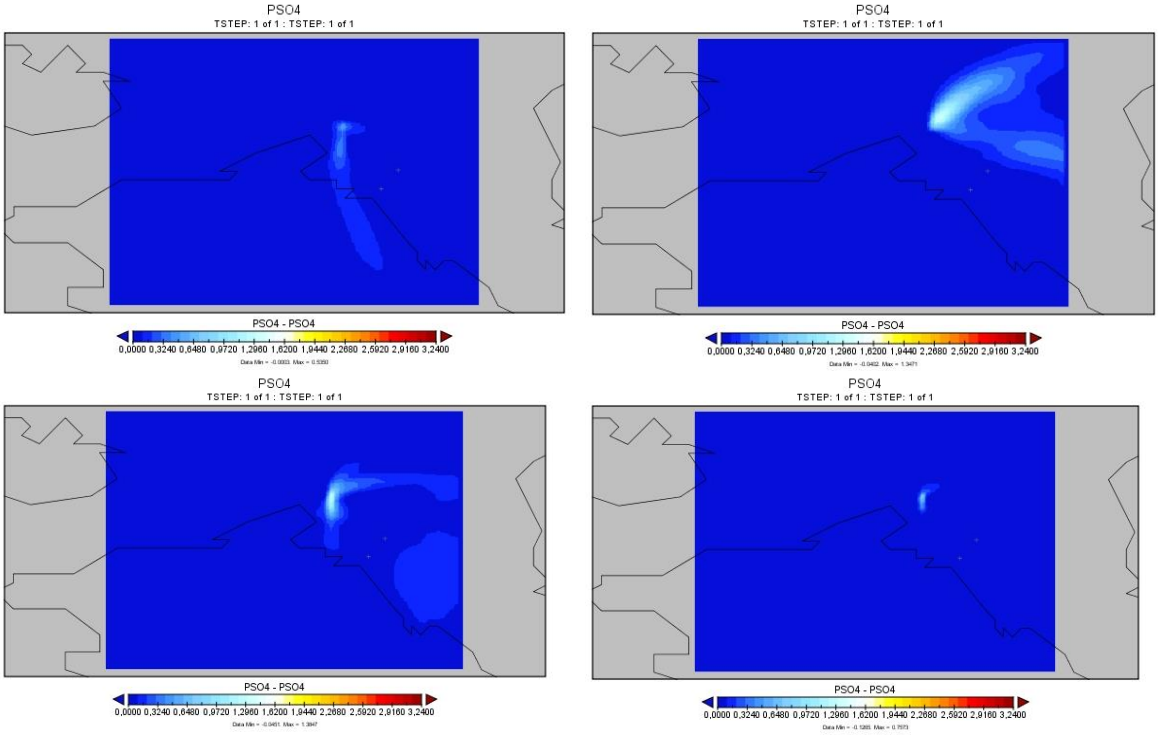
- NO_2 :

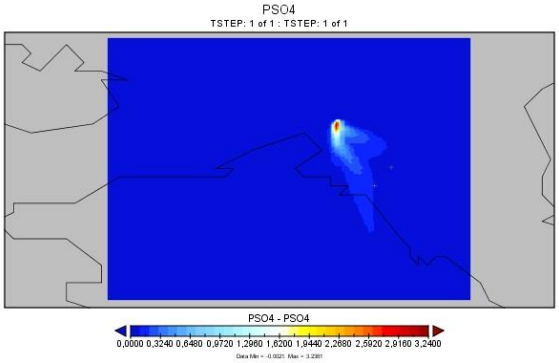




ΕΙΚΟΝΑ 12. 8-12/6/2015 χωρική διάχυση του ρύπου NO_2.

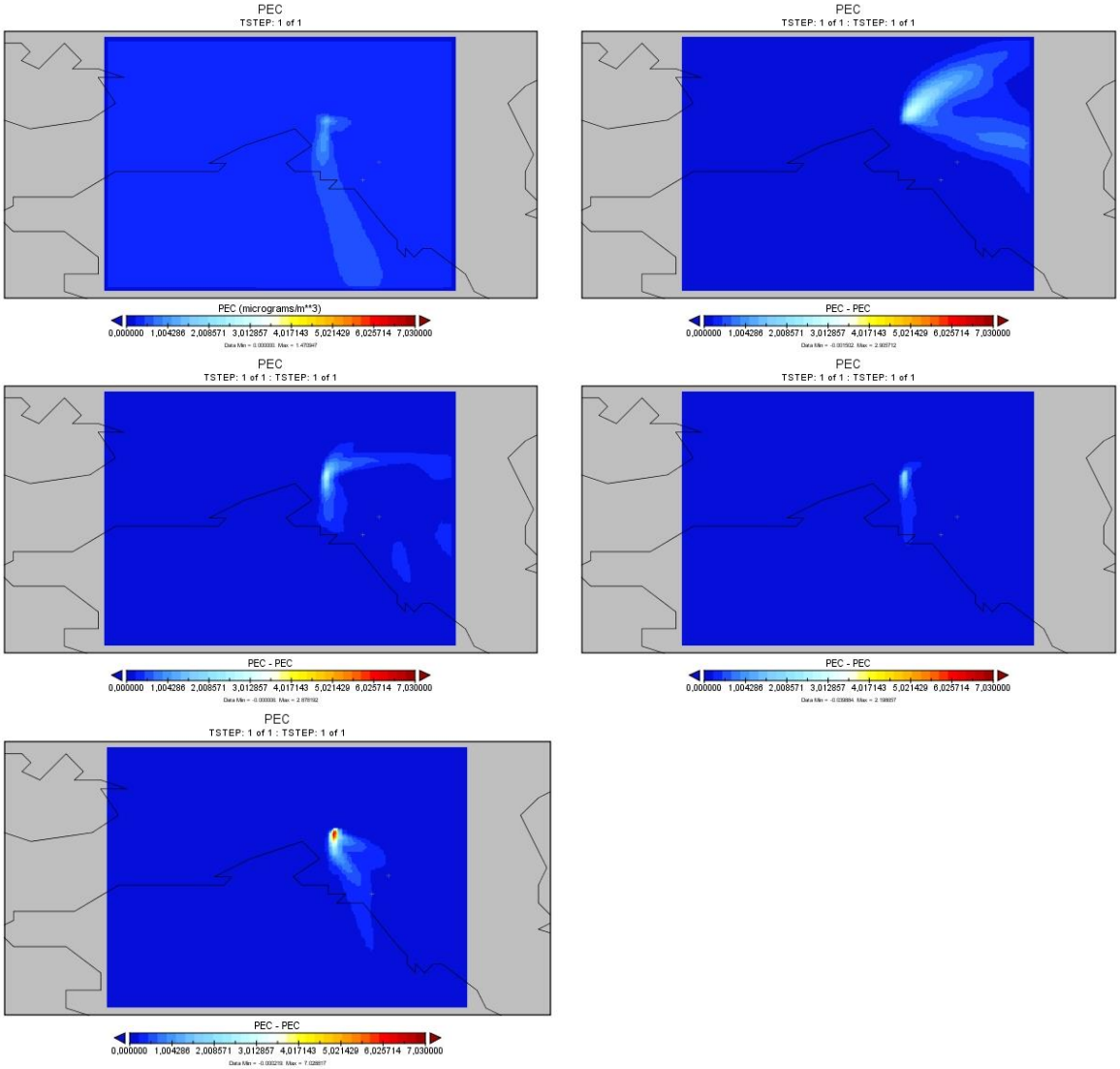
- **PSO_4:**





ΕΙΚΟΝΑ 13. 8-12/6/2015 χωρική διάχυση του ρύπου PSO_4.

- PEC :



ΕΙΚΟΝΑ 14. 8-12/6/2015 χωρική διάχυση του ρύπου PEC.

4.4. Σύγκριση αποτελεσμάτων του αριθμητικού μοντέλου με τη δειγματοληψία

Παρατηρείται μεγάλη διαφοροποίηση των αποτελεσμάτων του μοντέλου από τη δειγματοληψία στον σταθμό που είχε δημιουργηθεί προσωρινά στον χώρο της πυρκαγιάς. Στη σύγκριση PM_{10} στον Πίνακα 13. παρατηρείται ότι οι συγκεντρώσεις του μοντέλου είναι πολύ μειωμένες σε σχέση με τις μετρήσεις κοντά στην πηγή, μόνο στις 12/6 έχουμε μία μεγάλη άνοδο που πλησιάζει λίγο τις τιμές των μετρήσεων. Σε αυτό σίγουρα συμβάλει το γεγονός ότι στο μοντέλο δεν έχουν εισαχθεί όλες οι πηγές εκπομπών που βρίσκονται στην περιοχή του μοντέλου παρά μόνο η πηγή της φωτιάς. Άλλος πιθανός λόγος είναι ο εφαρμοσμένος ρυθμός εκπομπής των ρύπων από το συγκεκριμένο επεισόδιο φωτιάς.

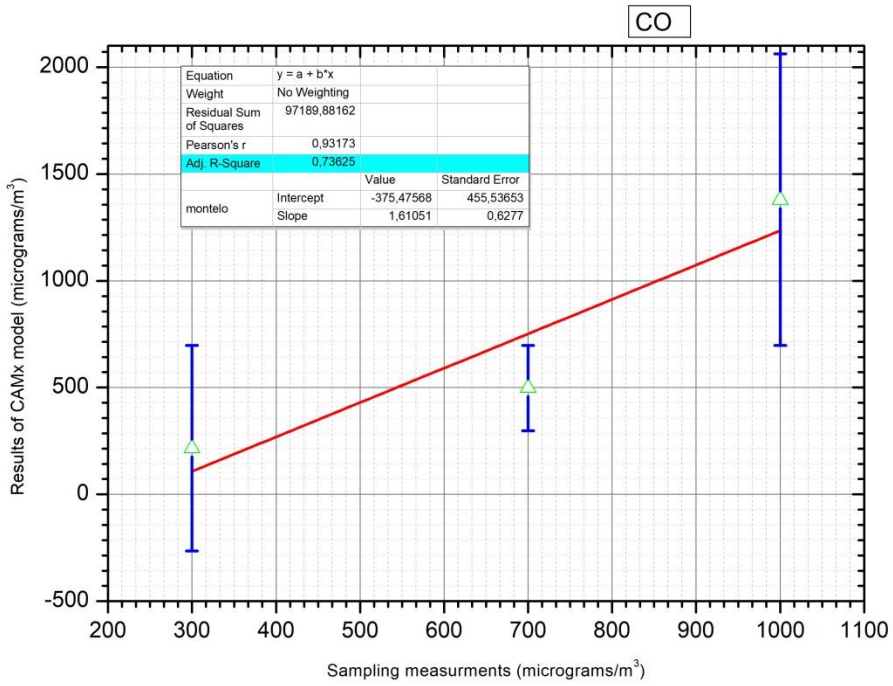
Στον Πίνακα 14. έχουμε τη σύγκριση για PEC και CO. Οι συγκεντρώσεις αυτές απορρέουν από την εφαρμογή του πρώτου σεναρίου (Πίνακας 9). Για το PEC παρατηρείται διαφοροποίηση στις τιμές περίπου μία τάξη μεγέθους. Όσον αφορά το CO δεν υπάρχει μεγάλη απόκλιση στις τιμές του μοντέλου και της δειγματοληψίας. Στο Διάγραμμα 3. εμφανίζεται πώς η απόκριση του μοντέλου ως προς τα αποτελέσματα δειγματοληψίας για τις μέγιστες ημερήσιες συγκεντρώσεις του CO, έχουν σχέση γραμμική. Αυτό επιβεβαιώνει πώς τα αριθμητικά αποτελέσματα του μοντέλου είναι έγκυρα, τόσο ως προς τη συγκέντρωση του ρύπου CO όσο και ως προς τη χωρική διάχυση του. Η μείωση των τιμών των συγκεντρώσεων μπορεί να οφείλεται στη μεγάλη ανάλυση του κελιού που ορίζει το μοντέλο CAMx.

ΠΙΝΑΚΑΣ 13. Σύγκριση συγκεντρώσεων δειγματοληψίας και μοντέλου για PM_{10} [1].

ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ	ΡΥΠΟΣ	Συγκέντρωση από δειγματοληψία(μg/m³)[1]		Συγκέντρωση από μοντέλο (μg/m³)
		00.00-12.00	12.00-0.00	
9/6	PM_{10}		25	13,57
	$PM_{2,5}$		10	
10/6	PM_{10}	60	75	13,1
	$PM_{2,5}$	30	40	
11/6	PM_{10}	70		10,10
	$PM_{2,5}$	50		
12/6	PM_{10}			25,91
	$PM_{2,5}$			

ΠΙΝΑΚΑΣ 14. Σύγκριση συγκεντρώσεων δειγματοληψίας και μοντέλου για PEC και CO[1].

ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ	ΡΥΠΟΣ	Συγκέντρωση από δειγματοληψία(μg/m³)[1]	Συγκέντρωση από μοντέλο (μg/m³)
9/6	PEC max	18	3,193
	CO max	300	216,4
10/6	PEC max	21	3,362
	CO max	1000	1380
11/6	PEC max	17,5	2,707
	CO max	700	498.2
12/6	PEC max		8,070
	CO max		268,8



Διάγραμμα 3. Σύγκριση μέγιστων ημερήσιων τιμών συγκέντρωσης CO, δειγματοληψίας- μοντέλου**.** Εμφανίζεται ότι η σχέση μεταξύ αποτελεσμάτων από δειγματοληψία και αποτελεσμάτων του μοντέλου είναι σχεδόν γραμμική (R-Square= 0,75625). Τα αποτελέσματα του μοντέλου εμφανίζονται με την τυπική τους απόκλιση ως τυπικό σφάλμα της μέτρησης. Εμφανίζεται πως τα όρια των μετρήσεων βρίσκονται μέσα στη γραμμική καμπύλη.

5. Συμπεράσματα

Βάσει των δεδομένων των χημικών αναλύσεων από το σταθμό του ΕΑΑ και τα αριθμητικά αποτελέσματα του FLEXPART, έγινε η ρύθμιση των παραμέτρων του αριθμητικού μοντέλου CAMx έτσι ώστε να βρεθεί η επίδραση των εκπομπών του επεισοδίου πυρκαγιάς του κέντρου ανακυκλώσιμων υλικών. Εν συνεχεία έγινε σύγκριση των αποτελεσμάτων των δύο μοντέλων καθώς και έλεγχος των αποτελεσμάτων με τα σχετικά αναλυτικά δεδομένα δειγματοληψίας.

Στο μοντέλο μας μεγαλύτερη συγκέντρωση ρύπων έχουμε στις 12 Ιουνίου καθώς εκεί εμφανίζονται όλα τα μέγιστα των ρύπων (βλ. Πίνακα 10). Από το ατύχημα αυτό λόγω των αυξημένων ανέμων στις ημέρες μελέτης, επηρεάστηκε μεγάλο μέρος της ευρύτερης Αττικής και συγκεκριμένα του λεκανοπεδίου. Στο παράρτημα παρουσιάζονται χάρτες με τη βοήθεια του Googleearth που εμφανίζουν ακριβώς τις περιοχές που έφτασαν τα πλούμια των εκπομπών των ρύπων της πηγής (Εικόνα 15). Εκτός από την περιοχή του Ασπρόπυργου που βρισκόταν σε άμεση έκθεση του καπνού της πυρκαγιάς, οι άνεμοι μετέφεραν τα πλούμια τόσο σε περιοχές της Β και ΒΑ Αττικής και της Ν και ΝΑ, καθώς και του λεκανοπεδίου.

Αρχικά η σύσταση των εκπομπών της πηγής προερχόταν από αέριους ρύπους (CO,NO_X-NO,NO_2,HCl) και σωματιδιακούς ρύπους (FPRM,CPRM,POA,PEC,PSO4). Τα πλούμια κατά τη διασπορά τους συνέχισαν να έχουν την ίδια σύσταση εκτός από την ελαχιστοποίηση του αέριου ρύπου NO ο οποίος φαίνεται να τράπηκε σε NO_2. Οι διαφοροποιήσεις των πλουμίων οφείλονται κυρίως στη μετεωρολογία που έχουμε εντάξει στην περιοχή για εκείνες τις ημέρες και όχι της χημικής αλληλεπίδρασης των ρύπων.

Σύμφωνα με τα στοιχεία μετρήσεων του ΕΑΑ στην περιοχή της πηγής στον Ασπρόπυργο που δίνονται στην αναφορά του ΕΑΑ που έγινε για το ατύχημα το 2015 οι συγκεντρώσεις των ρύπων που υπολογίστηκαν από το μοντέλο φαίνεται να συγκλίνουν στην περίπτωση του CO. Αντίθετα για τους υπόλοιπους ρύπους υπάρχει μεγάλη απόκλιση. Αυτό είναι ξεκάθαρα ο αντίκτυπος του γεγονότος ότι δεν εισήχθησαν δεδομένα για όλες τις πηγές εκπομπών ρύπανσης που βρίσκονται στην οριοθετημένη περιοχή.

Όσον αφορά τη σύγκριση των δύο μοντέλων, μέσω του CAMx μπορούμε να εντοπίσουμε καλύτερα τις περιοχές που έχουν πληγεί από το ατύχημα καθώς το CAMx, λόγω μεγαλύτερης διάχυσης των εκπομπών στο grid του εμφανίζει πώς μεγαλύτερο μέρος της ευρύτερης περιοχής της Αττικής έχει επηρεαστεί από την πηγή. Αυτό αποδόθηκε κυρίως στο γεγονός ότι το κελί του CAMx έχει μικρότερη ανάλυση(1×1 km) από το κελί του FLEXPART(0,5×0,5 km), δηλαδή οι συγκεντρώσεις των ρύπων διασπείρονται σε μεγαλύτερο χώρο. Επίσης άλλη μία διαφορά που παρατηρήθηκε μεταξύ των δύο μοντέλων είναι η ικανότητα του CAMx, έναντι του FLEXPART, να διακρίνει τους σωματιδιακούς ρύπους σε μικρότερες κατηγορίες ή και στοιχειακά, δίνοντας μας έτσι καλύτερη εικόνα για την προέλευση της ρύπανσης της ατμόσφαιρας. Παρ' όλες τις διαφοροποιήσεις των δύο μοντέλων παρατηρείται περίπου ίδια μορφή στα πλούμια που αποδίδεται κυρίως στην μετεωρολογία.

Η λύση των προβλημάτων εγκυρότητας του μοντέλου που παρουσιάστηκαν σε αυτή τη μελέτη υπάρχει και αποσκοπούμε σε επόμενη εφαρμογή του προγράμματος έτσι ώστε να επιλυθούν όλες οι δυσκολίες και να αναβαθμιστεί.

6. Μελλοντική έρευνα

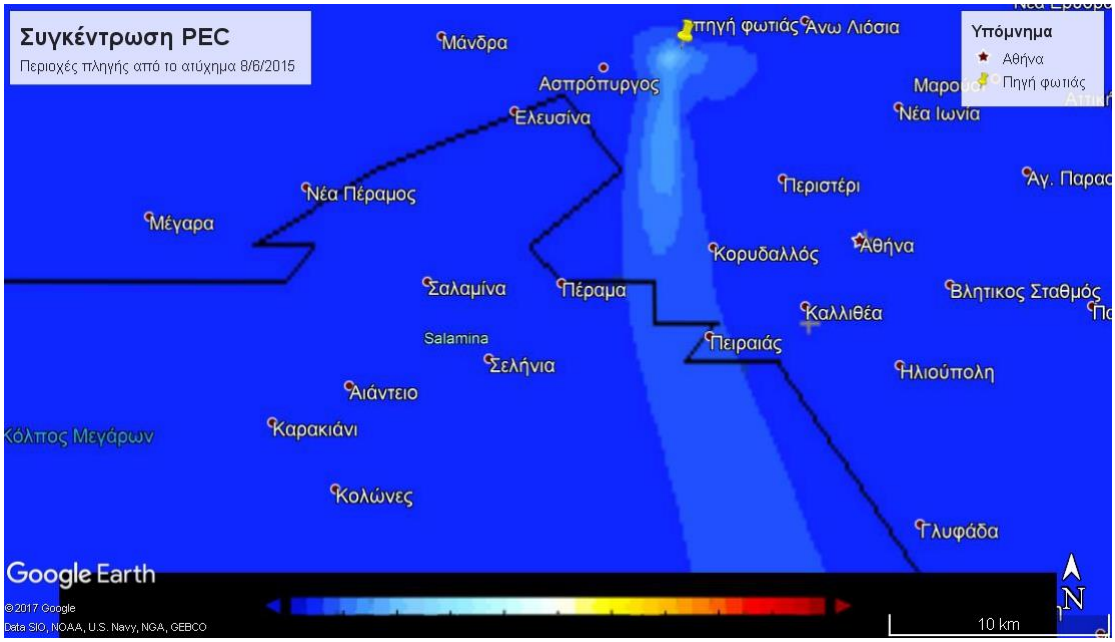
Κατά την εκπόνηση της διπλωματικής αυτής εργασίας προέκυψαν κάποια ενδιαφέροντα θέματα τα οποία μπορεί να χρησιμοποιηθούν για μελλοντική έρευνα. Αρχικά η εφαρμογή του μοντέλου με επαναπροσδιορισμό των εκπομπών από το ατύχημα, δηλαδή της συνολικής μάζας των ρύπων και της χημικής σύστασης. Χρειάζεται να γίνουν απανωτές εφαρμογές του μοντέλου ώστε να γίνει έλεγχος της ευαισθησίας, συγκρίνοντας κάθε φορά τα αποτελέσματα με τα πειραματικά δεδομένα. Αυτό θα έχει ως αποτέλεσμα να διαπιστωθεί ένα πιο ρεαλιστικό στήσιμο της εκπομπής και άρα να έχουμε πιο ρεαλιστικά αποτελέσματα για την επίδραση του ατυχήματος. Τέλος είναι αναγκαίο να γίνει ενσωμάτωση των εκπομπών ρύπανσης του λεκανοπεδίου, πράγμα που είναι και ο κύριος λόγος ασυνέπειας των ήδη υπάρχοντων αποτελεσμάτων του μοντέλου.

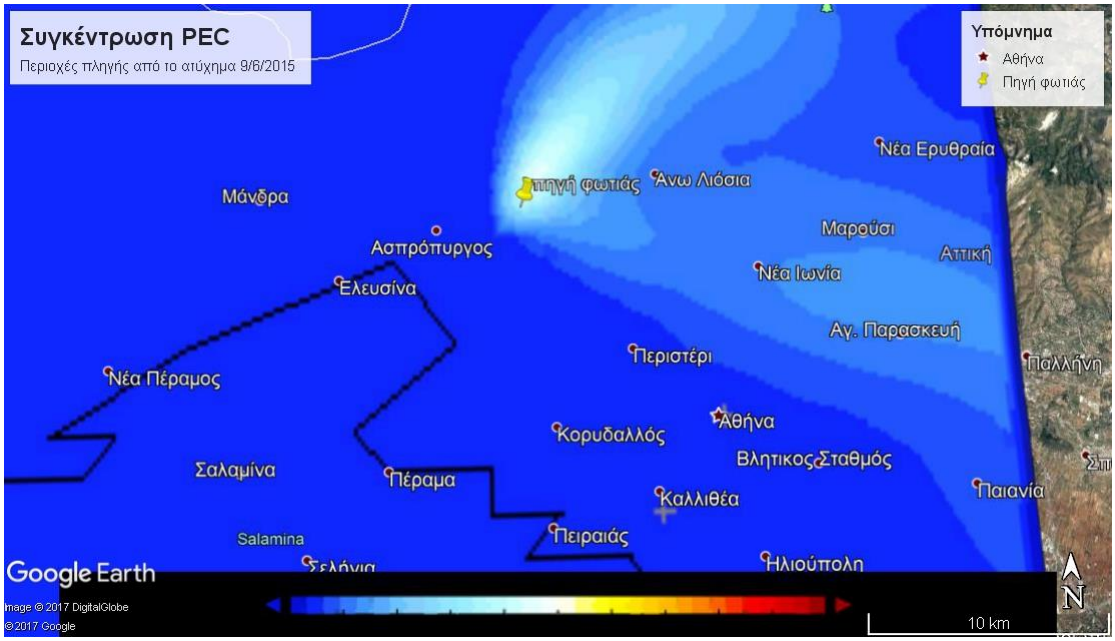
7. Αναφορές και Βιβλιογραφία

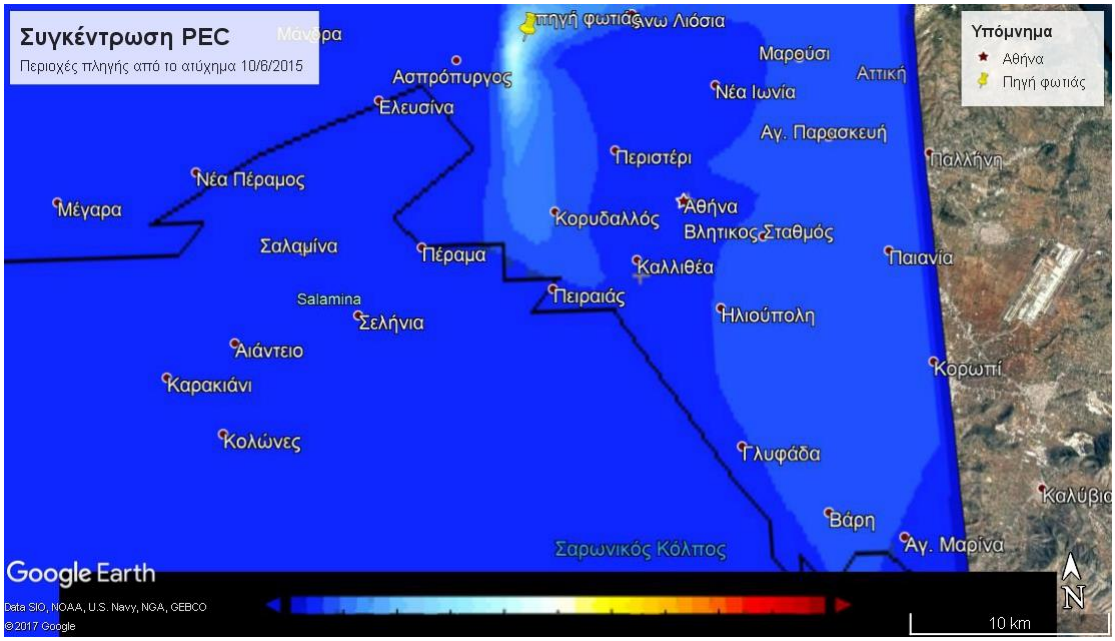
1. «Αποτύπωση τιμών συγκεντρώσεων σωματιδιακής και αέριας ρύπανσης από καιόμενη εγκατάσταση «ΓΕΝΙΚΗ ΑΝΑΚΥΚΛΩΣΕΩΣ – ΚΤΗΜΑΤΙΚΗ ΞΕΝΟΔΟΧΕΙΑΚΗ Α.Ε.» Δραστηριότητα Ανακύκλωσης μη Μεταλλικών Αποβλήτων στον Ασπρόπυργο Θέση Πεύκο Μαυράκη ή Πάτημα στον Ασπρόπυργο», Εθνικό Αστεροσκοπείο Αθηνών, Επιτόπιες Μετρήσεις, ΜΕΡΟΣ Α
2. Αποτύπωση τιμών συγκεντρώσεων σωματιδιακής και αέριας ρύπανσης από καιόμενη εγκατάσταση «ΓΕΝΙΚΗ ΑΝΑΚΥΚΛΩΣΕΩΣ – ΚΤΗΜΑΤΙΚΗ ΞΕΝΟΔΟΧΕΙΑΚΗ Α.Ε.» Δραστηριότητα Ανακύκλωσης μη Μεταλλικών Αποβλήτων στον Ασπρόπυργο Θέση Πεύκο Μαυράκη ή Πάτημα στον Ασπρόπυργο», Εθνικό Αστεροσκοπείο Αθηνών, Χημικές αναλύσεις και αριθμητικές προσομοιώσεις, Μέρος Β
3. Μελέτη της σωματιδιακής ρύπανσης της ατμόσφαιρας της Αττικής με τη χρήση της αριθμητικής προσομοίωσης, Διδακτορική Διατριβή, Ελένη Αθανασοπούλου, Αθήνα 2009
4. Οδηγός Ατμοσφαιρικής Χημείας (σημείωσεις), Νίκος Μιχαλόπουλος, Ηράκλειο 2009
5. ΕΚΘΕΣΗ ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗΣ ΤΩΝ ΜΕΤΡΗΣΕΩΝ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΕΩΝ ΔΙΟΞΙΝΩΝ (PCDDs) ΦΟΥΡΑΝΙΩΝ (PCDFs), ΠΟΛΥΧΛΩΡΙΩΜΕΝΩΝ ΔΙΦΑΙΝΥΛΙΩΝ (PCBs) ΚΑΙ ΑΙΩΡΟΥΜΕΝΩΝ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ PM-10 ΚΑΙ PM-2,5 ΣΕ ΔΕΙΓΜΑΤΑ ΑΤΜΟΣΦΑΙΡΙΚΟΥΑΕΡΑ ΣΤΗΝ ΠΕΡΙΟΧΗ ΠΕΡΙΞ ΤΟΥ ΚΑΙΟΜΕΝΟΥ ΚΕΝΤΡΟΥ ΔΙΑΛΟΓΗΣ ΑΝΑΚΥΚΛΩΣΙΜΩΝ ΥΛΙΚΩΝ (ΚΔΑΥ) ΣΤΗΝ ΘΕΣΗ ΠΕΥΚΟ ΜΑΥΡΑΚΗ ΣΤΟΝ ΑΣΠΡΟΠΥΡΓΟ, ΕΘΝΙΚΟ ΚΕΝΤΡΟ ΕΡΕΥΝΑΣ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ», ΕΦΑΜΑΔ 15/28, Αγία Παρασκευή, 16/06/2015
6. Πρακτική Άσκηση, Συνέργεια Μετρήσεων και Αριθμητικών Προσομοιώσεων για τον χαρακτηρισμό των ατμοσφαιρικών διεργασιών,στο πλαίσιο των εκπομπών ρύπων από βιομηχανικό ατύχημα, Κοζωνάκη Φ., 2016
7. Fire Emissions into the Atmosphere, Bmr Persson and Margaret Simonson Swedish National Testing and Research Institute, Bor&, Sweden, Fire Technology, Vol. 34, No. 3, 1998
8. CAMx User's Guide Comprehensive Air Quality Model With Extensions,Version V6.3.
9. Contributions of regional transport and local sources to ozone exceedances in Houston and Dallas: Comparison of results from a photochemical grid model to aircraft and surface measurements, Susan Kemball-Cook, David Parrish, Thomas Ryerson, Uarporn Nopmongcol, Jeremiah Johnson, Edward Tai, and Greg Yarwood, JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH, VOL. 114, D00F02, doi:10.1029/2008JD010248, 2009
10. Open burning of waste, EMEP/EEA emission inventory guidebook 2013
11. http://users.ntua.gr/apdlidar/Kefalaio3.pdf
12. Ατμοσφαιρική Ρύπανση, Κεφ.5, http://www.physics.upatras.gr/UploadedFiles/course_109_2195.pdf
13. http://treasure.eu-project-sites.com/
14. http://www.ypeka.gr/Default.aspx?tabid=894&language=el-GR
15. Conversion MOZART -> WRF-Chem by Alma Hodzic (alma@ucar.edu) last updated Feb. 2013
16. Description and evaluation of the Model for Ozone and Related chemical Tracers, version 4 (MOZART-4)L. K. Emmons1, S. Walters1, P. G. Hess1,*, J.-F. Lamarque1, G. G. Pfister1, D. Fillmore1,**, C. Granier2,3, A. Guenther1, D. Kinnison1, T. Laepple1,***, J. Orlando1, X. Tie1, G. Tyndall1, C. Wiedinmyer1, S. L. Baughcum4, and S. Kloster5,* Received: 6 August 2009 – Published in Geosci. Model Dev. Discuss.: 27 August 2009 Revised: 7 December 2009 – Accepted: 8 December 2009 – Published: 12 January 2010
17. https://faculty.washington.edu/jaegle/558/ozone_NOx.pdf
18. Formation of HNO3and NO3 in the anthropogenically-influenced eastern Mediterranean marine boundary layer, M. Vrekoussis, E. Liakakou, N. Mihalopoulos, M. Kanakidou, P. J. Crutzen, and J. Lelieveld, GEOPHYSICAL RESEARCH LETTERS, VOL. 33, L05811, doi:10.1029/2005GL025069, 2006
19. Atmospheric Acidity:Sources, Consequences anda Abatement.-(Environmental Management Series), Radojevic M., Harrison Roy. M., Series 363.73, ISBN 1-85166-77-6
20. Νίκος Ανδρίτσος, «Ενέργεια και Περιβάλλον», Διδακτικές Σημειώσεις, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, 2008

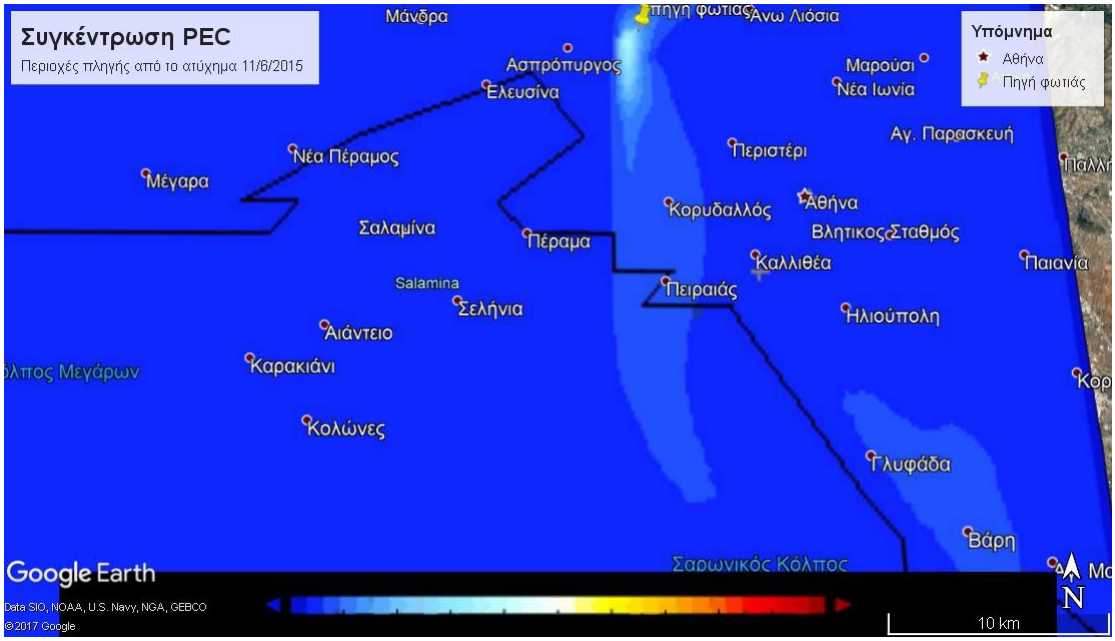
21. Formation of HNO3 and $NO3^-$ in the anthropogenically-influenced eastern Mediterranean marine boundary layer, M. Vrekoussis, E. Liakakou, N. Mihalopoulos, M. Kanakidou, P. J. Crutzen, and J. Lelieveld,
22. Σημειώσεις Δρ. Κ.Π. Μουστρής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών ΤΕ, ΑΤΕΙ Πειραιά, «Τεχνολογία Περιβαλλοντικών Μετρήσεων», Ενότητα 6: Οι βασικότεροι ρύποι-Στερεά Αιωρούμενα Σωματίδια, http://eclass.teipir.gr/openeclass/modules/document/file.php/MECH111/6%CE%B7%20%CE%95%CE%BD%CF%8C%CF%84%CE%B7%CF%84%CE%B1%20-%20%CE%A4%CE%B5%CF%87%CE%BD%CE%BF%CE%BB%CE%BF%CE%B3%CE%AF%CE%B1%20%CE%A0%CE%B5%CF%81%CE%B9%CE%B2%CE%B1%CE%BB%CE%BB%CE%BF%CE%BD%CF%84%CE%B9%CE%BA%CF%8E%CE%BD%20%CE%9C%CE%B5%CF%84%CF%81%CE%AE%CF%83%CE%B5%CF%89%CE%BD.pdf
23. Health Effects of Black Carbon, World Health Organisation, Nicole AH Janssen, Miriam E Gerlofs-Nijland, Timo Lanki, Raimo O Salonen, Flemming Cassee, Gerard Hoek, Paul Fischer, Bert Brunekreef, Michal Krzyzanowski , http://www.euro.who.int/__data/assets/pdf_file/0004/162535/e96541.pdf
24. Σημειώσεις Ατμοσφαιρικής Διάχυσης και Διασποράς, Τμήμα Φυσικής ΑΠΘ, Δημήτρης Μελάς, 2012 http://lap.physics.auth.gr/atmdiasp/index_files/notes.htm
25. http://www.atmosp.physics.utoronto.ca/people/loic/chemistry.html#2.4 Oxidation of Carbon
26. «Σημειώσεις για την Ρύπανση και Χημεία της Ατμόσφαιρας», Πρόδρομος Ζανής, Αναπληρωτής Καθηγητής, Τμήμα Γεωλογίας Τομέας Μετεωρολογίας - Κλιματολογίας Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 2014

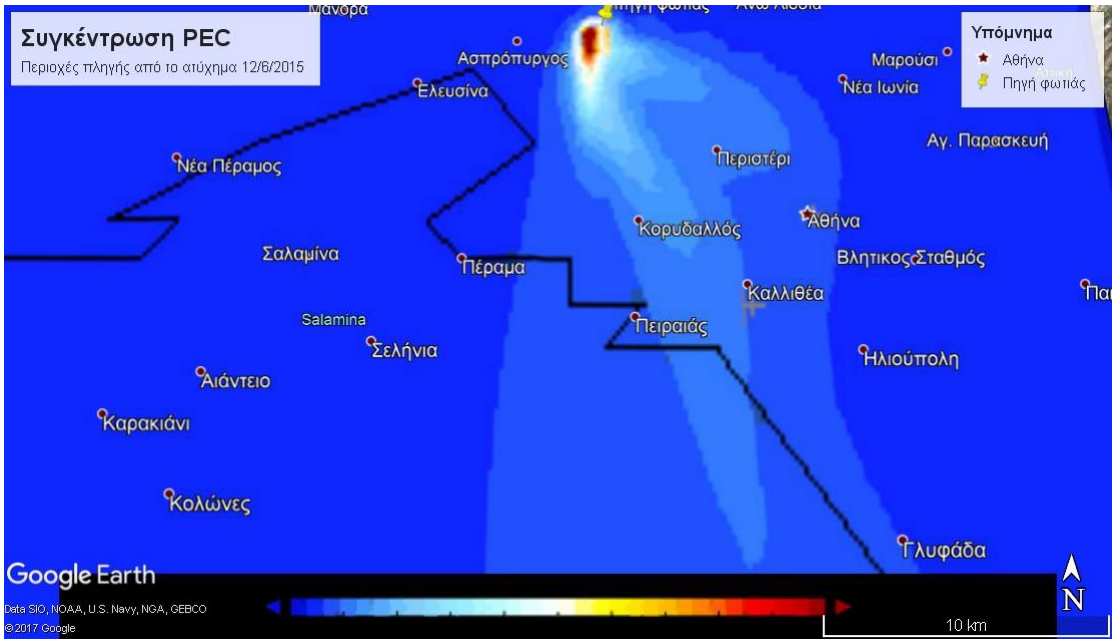
8. Παράρτημα


Συγκέντρωση PEC
Περιοχές πληγής από το ατύχημα 8/6/2015
Υπόμνημα
Αθήνα
Πηγή φωτιάς
Μάνδρα
πηγή φωτιάς
Άνω Λιόσια
Ασπρόπυργος
Ελευσίνα
Νέα Ιωνία
Περιστέρι
Νέα Πέραμος
Μέγαρα
Κορυδαλλός
Αθήνα
Σαλαμίνα
Πέραμα
Βλητικος Σταθμός
Καλλιθέα
Salamina
Πειραιάς
Σελήνια
Ηλιούπολη
Αιάντειο
Καρακιάνι
Κόλπος Μεγάρων
Κολώνες
Γλυφάδα
Google Earth
© 2017 Google
Data SIO, NOAA, U.S. Navy, NGA, GEBCO
10 km
N


Συγκέντρωση PEC
Περιοχές πληγής από το ατύχημα 9/6/2015
Υπόμνημα
Αθήνα
Πηγή φωτιάς
Νέα Ερυθραία
πηγή φωτιάς
Άνω Λιόσια
Μάνδρα
Μαρούσι
Ασπρόπυργος
Αττική
Νέα Ιωνία
Ελευσίνα
Αγ. Παρασκευή
Περιστέρι
Παλλήνη
Νέα Πέραμος
Αθήνα
Κορυδαλλός
Βλητικος Σταθμός
Σαλαμίνα
Πέραμα
Παιανία
Καλλιθέα
Salamina
Πειραιάς
Σελήνια
Ηλιούπολη
Google Earth
Image © 2017 DigitalGlobe
© 2017 Google
10 km
N


Συγκέντρωση PEC
Περιοχές πληγής από το ατύχημα 10/6/2015
Μάνδρα
Πηγή φωτιάς
Άνω Λιόσια
Μαρούσι
Αττική
Ασπρόπυργος
Νέα Ιωνία
Ελευσίνα
Αγ. Παρασκευή
Περιστέρι
Παλλήνη
Νέα Πέραμος
Μέγαρα
Αθήνα
Κορυδαλλός
Βλητικός Σταθμός
Σαλαμίνα
Πέραμα
Καλλιθέα
Παιανία
Salamina
Πειραιάς
Σελήνια
Ηλιούπολη
Αιάντειο
Κορωπί
Καρακιάνι
Κολώνες
Γλυφάδα
Καλύβια
Βάρη
Σαρωνικός Κόλπος
Αγ. Μαρίνα
Υπόμνημα
Αθήνα
Πηγή φωτιάς
Google Earth
Data SIO, NOAA, U.S. Navy, NGA, GEBCO
© 2017 Google
10 km
N





ΕΙΚΟΝΑ 15. Χάρτες που αποδίδουν τις περιοχές που επηρεάστηκαν από το επεισόδιο της πυρκαγιάς με εμφανή τη σημειακή πηγή για τις ημέρες εφαρμογής του μοντέλου CAMx 8-12/6/2015.