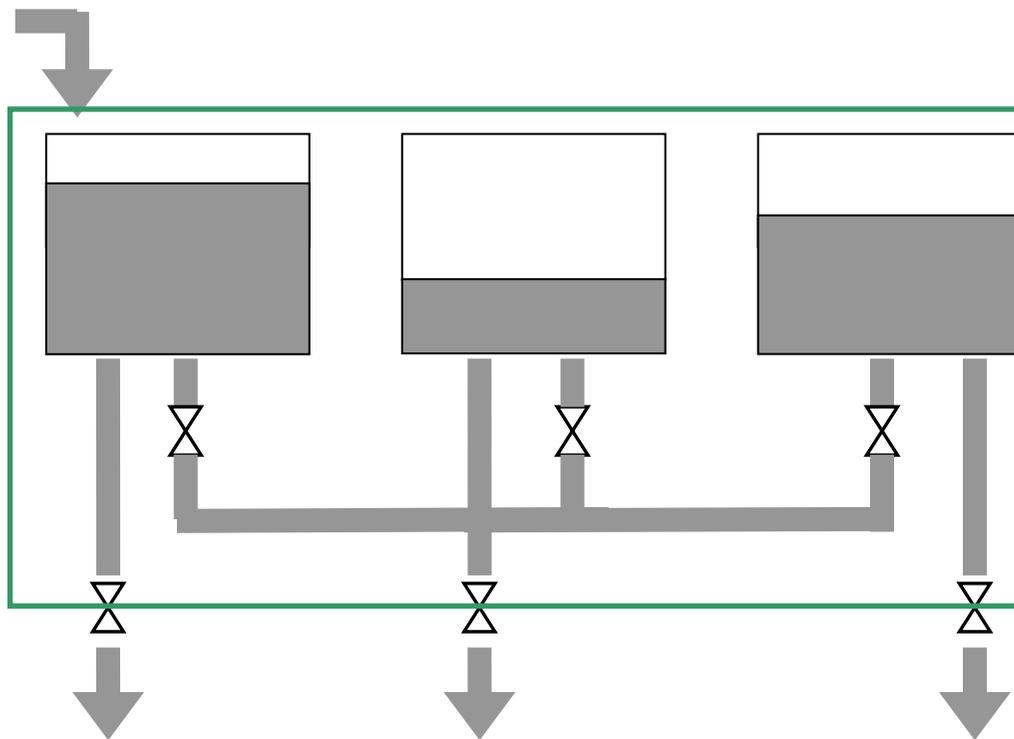


## LIVELLO III

Limitazione più restrittiva dei modelli al Livello I e II: assunzione dell'esistenza di un equilibrio tra tutte le fasi.

Si introduce una resistenza nei trasferimenti fra le fasi. Il sistema non è più in equilibrio ma sempre in stato stazionario.



Stabilire in quale comparto e/o comparti avvengono le immissioni.

Sono considerati due tipi di trasporto tra i diversi comparti:

- i processi di diffusione del soluto, guidati dal gradiente di fugacità
- i processi di trasferimento di materiale, in cui un volume di materiale si sposta da una fase all'altra trascinando del soluto

Calcolare i nuovi valori di Z relativi alla fase (*bulk*), i quattro comparti principali che includono anche fasi disperse all'interno di ogni comparto.

- ⇒ Comparto aria: miscela aria-aereosol
- ⇒ Comparto acqua: acqua con particelle sospese e «pesci»
- ⇒ Comparto suolo: composto da solido, aria e acqua
- ⇒ Comparto sedimenti: solidi e pori ripieni di acqua

Aria	$Z_{B1} = Z_1 + 2 \cdot 10^{-11} Z_7$	circa 30 mg/m <sup>3</sup> di aereosol
Acqua	$Z_{B2} = Z_2 + 5 \cdot 10^{-6} Z_5 + 10^{-6} Z_6$	5 ppm di solido, 1 ppm di pesci
Solidi	$Z_{B3} = 0.2 Z_1 + 0.3 Z_2 + 0.5 Z_3$	20% aria, 30% acqua, 50% solidi
Sedimenti	$Z_{B4} = 0.8 Z_2 + 0.2 Z_4$	80% acqua, 20% solidi

$Z_1$  ⇒ Aria  
 $Z_2$  ⇒ Acqua  
 $Z_3$  ⇒ Suolo

$Z_4$  ⇒ Sedimenti  
 $Z_5$  ⇒ Sedimenti sospesi  
 $Z_6$  ⇒ Pesci  
 $Z_7$  ⇒ Aereosol

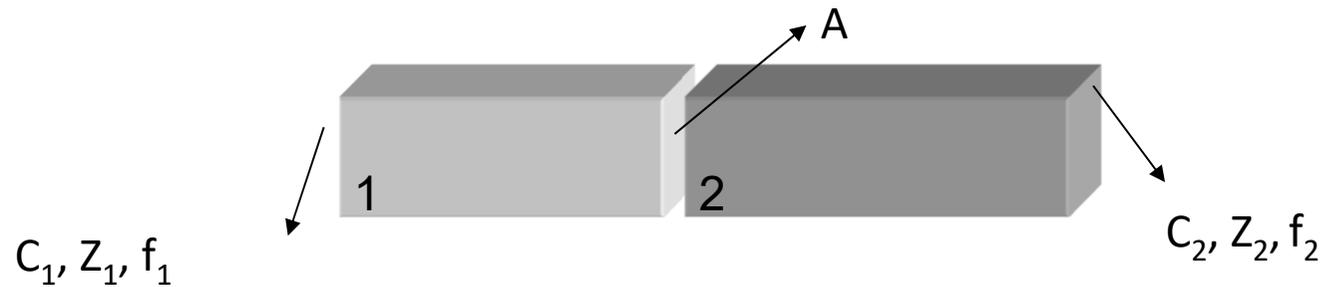
## Dimensioni dei comparti e frazione volumetrica (v)

Comparto	Fasi	Volume (m <sup>3</sup> )
Aria	<i>Volume totale</i>	$10^{14}$
	aria	$10^{14}$
	aereosol	$2000 (v = 2 \cdot 10^{-11})$
Acqua	<i>Volume totale</i>	$2 \cdot 10^{11}$
	acqua	$2 \cdot 10^{11}$
	sedimenti sospesi	$10 \cdot 10^6 (v = 5 \cdot 10^{-6})$
	pesci	$2 \cdot 10^5 (v = 1 \cdot 10^{-6})$
Suolo	<i>Volume totale</i>	$18 \cdot 10^9$
	aria interstiziale	$3.6 \cdot 10^9 (v = 0.2)$
	acqua	$5.4 \cdot 10^9 (v = 0.3)$
	solido	$9.0 \cdot 10^9 (v = 0.5)$
Sedimenti	<i>Volume totale</i>	$500 \cdot 10^6$
	acqua	$400 \cdot 10^6 (v = 0.8)$
	solido	$100 \cdot 10^6 (v = 0.2)$

## Processi diffusivi

- Evaporazione dall'acqua all'aria e processo inverso di adsorbimento (sostanza disciolta)
- Adsorbimento dall'acqua ai sedimenti sospesi e processo inverso di desorbimento
- Adsorbimento dall'aria alle particelle di aerosol e desorbimento
- Adsorbimento dall'acqua ai sedimenti profondi e desorbimento
- Diffusione all'interno del suolo e dal suolo all'aria
- Adsorbimento da parte del biota acquatico per diffusione attraverso le argille
- Trasferimento dell'inquinante tra altre membrane negli organismi

## Trasporto diffusivo



Il soluto diffonde a una velocità costante  $N$  (mol/h)

$$N = D_{12} (f_1 - f_2) \text{ mol/h}$$

$D$  = coefficiente di trasporto (mol/Pa h).

Applichiamo la prima legge di Fick a ogni fase a contatto (modello a due resistenze in serie):

$$N = K_1 A \Delta C_1 = K_2 A \Delta C_2 = K_i A \Delta C_i$$

- ⇒  $K_i$  è un coefficiente di velocità trasferimento di massa (m/h);
- ⇒  $\Delta C$  è la differenza di concentrazione tra il *bulk* di ogni fase e l'interfaccia.

### Significato di $K$

$K$  può essere visto come la velocità di un pistone che muove il soluto in ogni fase da e verso l'interfase.

sostituiamo  $C$  con  $Zf$

assumiamo equilibrio all'interfaccia ( $f_i$ )

$$N = K_1AZ_1(f_1 - f_i) = K_2AZ_2(f_i - f_2)$$

eliminando  $f_i$

$$N = (f_1 - f_2) / (1/K_1AZ_1 + 1/K_2AZ_2) = D_{12} (f_1 - f_2)$$

$D_{12}$  è una combinazione dei termini  $A$ ,  $K$  e  $Z$ .

In analogia alla legge di ohm ricaviamo una resistenza  $r$  considerando  $N$  come una corrente ed  $f$  il voltaggio.

I termini **1/KAZ** sono le resistenze  $r$ ; N può essere riscritto come:

$$N = (f_1 - f_i)/r_1 = (f_i - f_2)/r_2 = (f_1 - f_2)/(r_1 + r_2)$$

e

$$D_{12} = 1/(r_1 + r_2)$$

Le resistenze sono in serie, la resistenza totale è la somma delle due resistenze di fase, e **D** è una **conducibilità complessiva**.

### ESEMPIO

Il numero di automobili che passano lungo una strada nell'unità di tempo aumenta se:

- ⇒ si muovono velocemente (K grande)
- ⇒ la strada è più ampia (A)
- ⇒ sono ben incolonnate o molto ravvicinate (Z)

È molto utile conoscere le grandezze relative di queste resistenze: una resistenza piccola può essere trascurata se, in serie, sono presenti altre più grandi.

## Trasporto di materiale

Processi non diffusivi: una sostanza è trasferita da un comparto all'altro, associata a un volume di materiale che cambia fase.

- deposizione secca e umida del particolato atmosferico
- deposizione e risospensione dei sedimenti
- ingestione di cibo da parte del biota
- trasferimento suolo-acqua dovuto al *run-off*

La velocità del trasporto di un soluto da  $i$  a  $j$  per movimento di materiali è data dal prodotto della velocità di flusso  $G_i$  ( $\text{m}^3/\text{h}$ ) e la concentrazione  $C_i$ .

$$N = G_i C_i = G_i Z_i f_i = D_{ij} f_i$$

dove  $D_{ij} = G_i Z_i$ .

Trasferimento lungo un solo verso

( $\neq$  diffusione che può avvenire nei due sensi).

## Determinazione dei valori D

I valori di D possono essere calcolati

- dalle aree dell'interfaccia coinvolta nel trasferimento,
- dal coefficiente di trasferimento di massa,
- dalla velocità di assunzione e rilascio dei composti nei pesci o nei sedimenti,
- dai valori di Z.

Per le fasi che non sono in contatto, D è ovviamente uguale a zero e non c'è nessun flusso.

Tre diversi metodi per caratterizzare i valori  $D_{ij}$  utilizzando:

- il coefficiente di trasferimento di massa
- il coefficiente di diffusività
- i tempi di diffusione.

## Valori dei coefficienti di trasporto tra le fasi, D

Definire le velocità di trasporto tra le fasi dovute a processi diffusivi e non-diffusivi (U).

### Aria - acqua (D<sub>12</sub>)

Vengono considerati quattro processi:

1. la diffusione (adsorbimento);
2. la dissoluzione nella pioggia di composti chimici gassosi;
3. la deposizione umida del particolato;
4. la deposizione secca del particolato.

**Diffusione**. Si definiscono i coefficienti di trasferimento di massa (m/h) dalla parte dell'acqua,  $k_W$ , che viene posto uguale a 0.05 m/h e dalla parte dell'aria,  $k_A$ , che viene posto uguale a 5 m/h.  $D_{VW}$  contributo dell'adsorbimento al valore totale  $D_{12}$  è:

$$D_{VW} = 1/((1/k_A A_W Z_1) + 1/(k_W A_W Z_2))$$

dove  $A_W$  è l'area dell'interfaccia aria-acqua,  $Z_1$  e  $Z_2$  i valori di  $Z$  per le fasi pure. Le velocità  $k_A$  e  $k_W$  sono denominate  $U_1$  e  $U_2$ , rispettivamente.

**Dissoluzione.** Dovuta alla pioggia; viene utilizzata una velocità di precipitazione di 0.876 m/anno, *i.e.*  $U_R$  o  $U_3$  è  $10^{-4}$  m/h. Il contributo  $D_{RW}$  per la dissoluzione è:

$$D_{RW} = U_R A_W Z_2 = U_3 A_W Z_2$$

**Deposizione umida.** Si assume che il dilavamento operato dalla pioggia sia  $N = 2 \cdot 10^5$  volumi di aria per volume di pioggia. Il volume di aerosol rimosso per volume di pioggia, nell'ipotesi di una concentrazione di particelle (espressa come volume di particelle per volume di aria)  $V_Q = 2 \cdot 10^{-11}$ , è  $NV_Q = 4 \cdot 10^{-6}$ .

La velocità totale di rimozione di particolato per deposizione umida è  $NV_Q U_R A_W$  ( $m^3/h$ ). Per  $A_W = 1 \text{ m}^2$ , la velocità di trasporto "umido",  $NV_Q U_R$ , risulta uguale a  $4 \cdot 10^{-10} \text{ m/h}$ .

**Deposizione secca.** Viene assunta una velocità tipica  $U_Q$  di 10 m/h, che porta a una velocità di rimozione delle particelle  $U_Q V_Q A_W = 2 \cdot 10^{-10} A_W \text{ m}^3/\text{h}$ . La velocità di trasporto “secco”,  $U_Q V_Q$ , risulta uguale a  $2 \cdot 10^{-10} \text{ m/h}$ . Si ha quindi:

$$U_4 = N V_Q U_R + U_Q V_Q = V_Q (N U_R + U_Q)$$

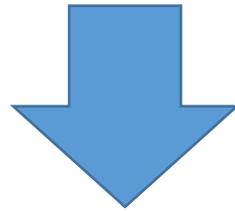
$$D_{QW} = U_4 A_W Z_7$$

Il valore totale  $D_{12}$  è dato dalla somma dei vari contributi:

$$D_{12} = D_{VW} + D_{RW} + D_{QW}$$

*Acqua - aria* ( $D_{21}$ )

Evaporazione = inverso adsorbimento → desorbimento



$$D_{21} = D_{vW}$$



(Vedi definizione  $D_{12}$ )

## Advezione dai sedimenti ( $D_{A4}$ )

Il valore del coefficiente di diffusione  $D_{A4}$  si ricava dalla relazione:

$$D_{A4} = U_B A_W Z_4$$

dove  $U_B$  è la velocità di ricoprimento dei sedimenti ( $2 \cdot 10^{-7}$  m/h). Il coefficiente di diffusione può essere espresso anche come  $G_B Z_{B4}$ , dove  $G_B$  è la velocità di ricoprimento;  $G_B$  è posta uguale a  $V_S/\tau_B$ , dove  $\tau_B$  (tempo di residenza) è di 50000 h e  $V_S$  (volume dei sedimenti) è calcolato come il prodotto tra lo spessore dei sedimenti (0.01 cm) e l'area  $A_W$ .  $Z_4$  e  $Z_{B4}$  sono i valori di  $Z$  per i sedimenti solidi e per il *bulk*, rispettivamente. Poiché i sedimenti sono costituiti per circa il 20% da solidi,  $Z_{B4}$  è circa uguale a  $0.2 Z_4$ .

## Parametri per il trasporto fra le fasi

U		m/h	m/year
1	Air side, air-water MTC*, $k_A$ or $U_1$	5	43800
2	Water-side, air-water MTC, $k_W$ or $U_2$	0.05	438
3	Rain rate, $U_R$ or $U_3$	$10^{-4}$	0.876
4	Aerosol deposition, $U_T$ or $U_4$	$6 \cdot 10^{-10}$	$5.256 \cdot 10^{-6}$
5	Soil-air phase diffusion, $k_{SA}$ or $U_5$	0.02	175.2
6	Soil-water phase transport MTC, $k_{SW}$ or $U_6$	$10 \cdot 10^{-6}$	0.0876
7	Soil-air boundary layer MTC, $k_S$ or $U_7$	5	43800
8	Sediment-water MTC, $k_T$ or $U_8$	$10^{-4}$	0.876
9	Sediment deposition, $U_D$ or $U_9$	$5 \cdot 10^{-7}$	0.00438
10	Sediment resuspension, $U_{RE}$ or $U_{10}$	$2 \cdot 10^{-7}$	0.00175
11	Soil-water run-off, $U_{SW}$ or $U_{11}$	$5 \cdot 10^{-5}$	0.438
12	Soil-solids run-off, $U_{SS}$ or $U_{12}$	$10^{-8}$	0.0000876

\*Mass Transfert Coefficient with scavenging ratio  $N = 2 \cdot 10^{-5}$ , dry deposition velocity  $U_Q = 10$  m/h; sediment burial rate  $U_B = 2.0 \cdot 10^{-7}$  m/h.

## Equazioni per calcolare i valori di D

Air-Water	$D_{12} = D_{VW} + D_{RW} + D_{QW}$ $D_{VW} = A_W / (1/U_1 Z_1 + 1/U_2 Z_2)$ $D_{RW} = U_3 A_W Z_2$ $D_{QW} = U_4 A_W Z_7$
Water-Air	$D_{21} = D_{VW}$
Air-Soil	$D_{13} = D_{VS} + D_{RS} + D_{QS}$ $D_{VS} = 1 / (1/D_S + 1/(D_W + D_A))$ $D_S = U_7 A_S Z_1$ $D_A = U_5 A_S Z_1$ $D_W = U_6 A_S Z_2$ $D_{RS} = U_3 A_S Z_2$ $D_{QS} = U_4 A_S Z_7$
Soil-Air	$D_{31} = D_{VS}$
Water-Sediment	$D_{24} = U_8 A_W Z_2 + U_{10} A_W Z_4$
Sediment-Water	$D_{42} = U_8 A_W Z_2 + U_{10} A_W Z_4$
Soil-Water	$D_{32} = U_{11} A_S Z_2 + U_{12} A_S Z_3$

## Livello III: equazioni

Per ciascun comparto,  $i$ , il bilancio di massa in stato stazionario può essere scritto come:

Immissione + *background* =

= (flusso advettivo in uscita + velocità di reazione) + trasporto =

$$E_i + G_i C_{Bi} = f_i V_i Z_i (k_{Ri} + k_{Ai}) + \sum_j D_{ij} f_j - \sum_j D_{ji} f_i$$

La somma è estesa a tutte le fasi,  $i$ , e  $D_{ii} = 0$ .

Si ottiene un sistema di equazioni lineari da risolvere.

Una volta calcolati i valori di  $f$  per ogni comparto, si ricavano la concentrazione, la quantità e le velocità dei processi.

Mass balance equations:

Air	$E_1 + f_2 D_{12} + f_3 D_{31} = f_1 D_{T1}$
Water	$E_2 + f_1 D_{21} + f_3 D_{32} + f_4 D_{42} = f_2 D_{T2}$
Soil	$E_3 + f_1 D_{13} = f_3 D_{T3}$
Sediment	$E_4 + f_2 D_{24} = f_4 D_{T4}$

where  $E_i$  is discharge rate,  $E_4$  usually being zero

$$D_{T1} = D_{R1} + D_{A1} + D_{12} + D_{13}$$

$$D_{T2} = D_{R2} + D_{A2} + D_{21} + D_{23} + D_{24}$$

$$D_{T3} = D_{R3} + D_{A3} + D_{31} + D_{32} \quad (D_{A3} = 0)$$

$$D_{T4} = D_{R4} + D_{A4} + D_{42}$$

Solution	$f_2 = (E_2 + J_1 J_4 / J_3 + E_3 D_{32} / D_{T3} + E_4 D_{42} / D_{T4}) / (D_{T2} - J_2 J_4 / J_3 - D_{24} D_{42} / D_{T4})$ $f_1 = (J_1 + f_2 J_2) / J_3$ $f_3 = (E_3 + f_1 D_{13}) / D_{T3}$ $f_4 = (E_4 + f_2 D_{24}) / D_{T4}$
----------	---

and:

$$J_1 = E_1 / D_{T1} + E_3 D_{31} / (D_{T3} D_{T1})$$

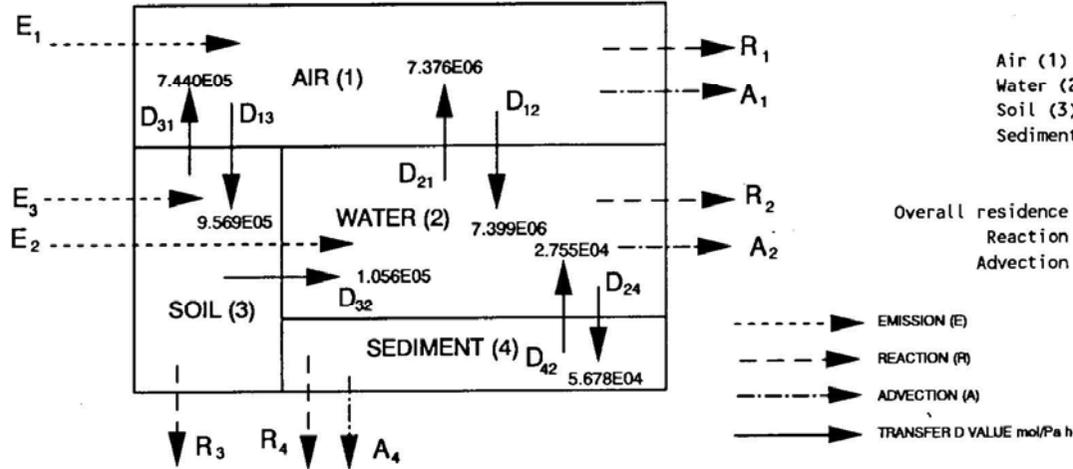
$$J_2 = D_{21} / D_{T1}$$

$$J_3 = 1 - D_{31} D_{13} / (D_{T1} D_{T3})$$

$$J_4 = D_{12} + D_{32} D_{13} / D_{T3}$$

Fugacity Level III calculations: (four compartment model)

Chemical name: Naphthalene



Phase Properties and Rates:

Compartment	Bulk	Half-life	D Values		
	Z mol/m <sup>3</sup> Pa		h	Reaction mol/Pa h	Advection mol/Pa h
Air (1)	4.034E-04	17	1.64E+09	4.03E+08	
Water (2)	2.329E-02	170	1.90E+07	4.66E+06	
Soil (3)	5.434E-01	1700	3.99E+06		
Sediment (4)	4.477E-01	5500	2.82E+04	4.48E+03	
Overall residence time =		E(1)=1000	E(2)=1000	E(3)=1000	E(1,2,3)
Reaction time =		21.15	161.82	2029.01	264.13 h
Advection time =		26.33	201.50	2101.70	322.38 h
		107.38	821.81	58664.77	1461.91 h

42

Phase Properties, Compositions, Transport and Transformation Rates:

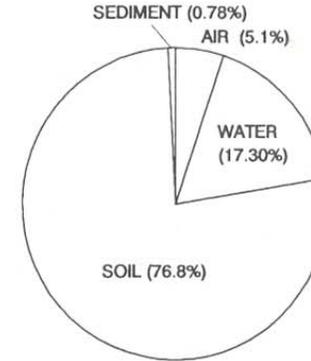
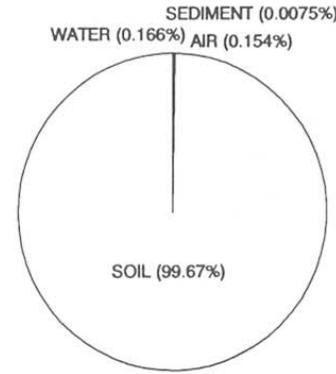
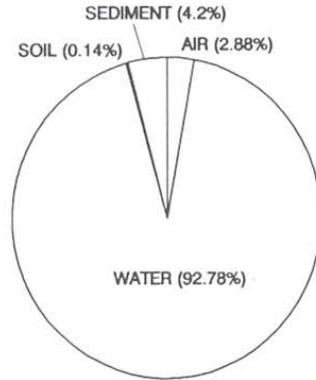
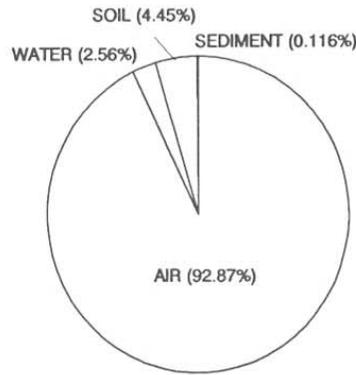
Emission, kg/h			Fugacity, Pa				Concentration, g/m <sup>3</sup>				Amounts, kg				Total Amount, kg
E(1)	E(2)	E(3)	f(1)	f(2)	f(3)	f(4)	c(1)	c(2)	c(3)	c(4)	m(1)	m(2)	m(3)	m(4)	
1000	0	0	3.797E-06	9.074E-07	7.511E-07	8.554E-07	1.964E-07	2.709E-06	5.233E-05	4.909E-05	1.964E+04	5.418E+02	9.419E+02	2.455E+01	2.115E+04
0	1000	0	9.019E-07	2.514E-04	1.784E-07	2.370E-04	4.664E-08	7.507E-04	1.243E-05	1.360E-02	4.664E+03	1.501E+05	2.237E+02	6.802E+03	1.618E+05
0	0	1000	6.038E-07	5.629E-06	1.613E-03	5.307E-06	3.122E-08	1.680E-05	1.124E-01	3.045E-04	3.122E+03	3.361E+03	2.022E+06	1.523E+02	2.029E+06
600	300	100	2.609E-06	7.654E-05	1.618E-04	7.216E-05	1.349E-07	2.285E-04	1.127E-02	4.141E-03	1.349E+04	4.570E+04	2.029E+05	2.071E+03	2.641E+05

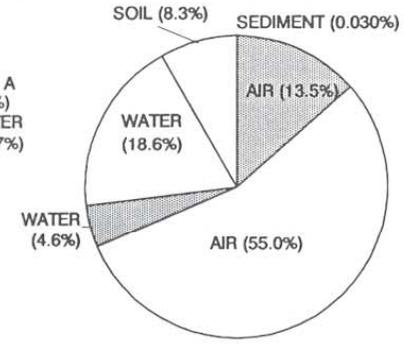
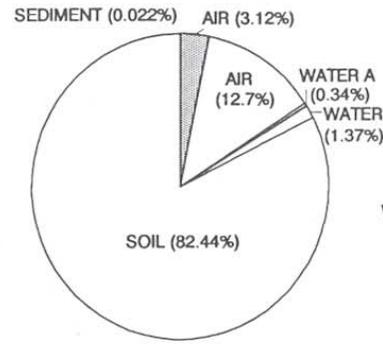
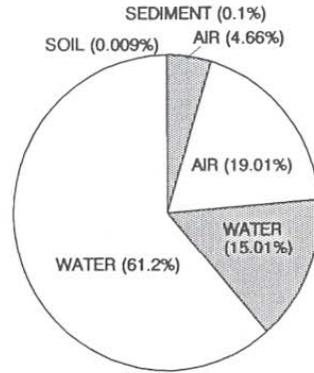
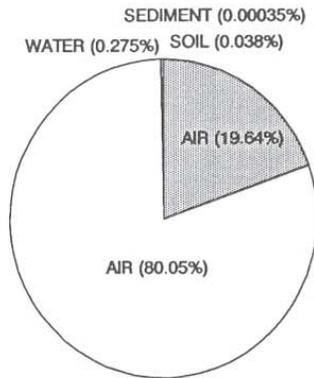
Emission, kg/h			Loss, Reaction, kg/h				Loss, Advection, kg/h			Intermedia Rate of Transport, kg/h						
E(1)	E(2)	E(3)	R(1)	R(2)	R(3)	R(4)	A(1)	A(2)	A(4)	T12	T21	T13	T31	T32	T24	T42
1000	0	0	8.005E+02	2.208E+00	3.84E-01	3.093E-03	1.964E+02	5.418E-01	4.909E-04	3.602E+00	8.578E-01	4.658E-01	7.164E-02	1.017E-02	6.604E-03	3.020E-03
0	1000	0	1.901E+02	6.120E+02	9.12E-02	8.571E-01	4.664E+01	1.501E+02	1.360E-01	8.554E-01	2.377E+02	1.106E-01	1.702E-02	2.415E-03	1.830E+00	8.369E-01
0	0	1000	1.273E+02	1.370E+01	8.24E+02	1.919E-02	3.122E+01	3.361E+00	3.045E-03	5.726E-01	5.322E+00	7.405E-02	1.538E+02	2.183E+01	4.097E-02	1.874E-02
600	300	100	5.501E+02	1.863E+02	8.27E+01	2.609E-01	1.349E+02	4.570E+01	4.141E-02	2.475E+00	7.236E+01	3.200E-01	1.543E+01	2.190E+00	5.571E-01	2.548E-01

Chemical name: Naphthalene  
Distribution of mass

Level III Distribution



Distribution of removal rates



Emission rates:

$E(1) = 1000 \text{ kg/h}$

$E(2) = 0$

$E(3) = 0$

Residence time:

$t = 21.15 \text{ h}$

$E(1) = 0$

$E(2) = 1000 \text{ kg/h}$

$E(3) = 0$

$t = 161.8 \text{ h}$



Reaction



Advection

$E(1) = 0$

$E(2) = 0$

$E(3) = 1000 \text{ kg/h}$

$t = 2029 \text{ h}$

$E(1) = 600 \text{ kg/h}$

$E(2) = 300 \text{ kg/h}$

$E(3) = 100 \text{ kg/h}$

$t = 264 \text{ h}$

## Risultati

### 1) Esame dei D

- ➔ trasferimento di fase
- ➔ reazione / advezione

La reazione e l'advezione sono più veloci rispetto al trasporto tra le fasi

### 2) Esame delle altre grandezze

fugacità  $\rightarrow C_i \rightarrow$  massa

$$D_R(i) = V_i Z_i \ln(2/k)$$

$$D_A(i) = V_i Z_i / \text{tempo residenza nel comparto}$$

$$R(i) = \text{velocità di reazione} = f(i) D_R(i) M$$

$$A(i) = \text{velocità di advezione} = f(i) D_A(i) M$$

$$T_{ij} = \text{velocità di trasporto tra fasi: } D_{ij} f(i) M$$

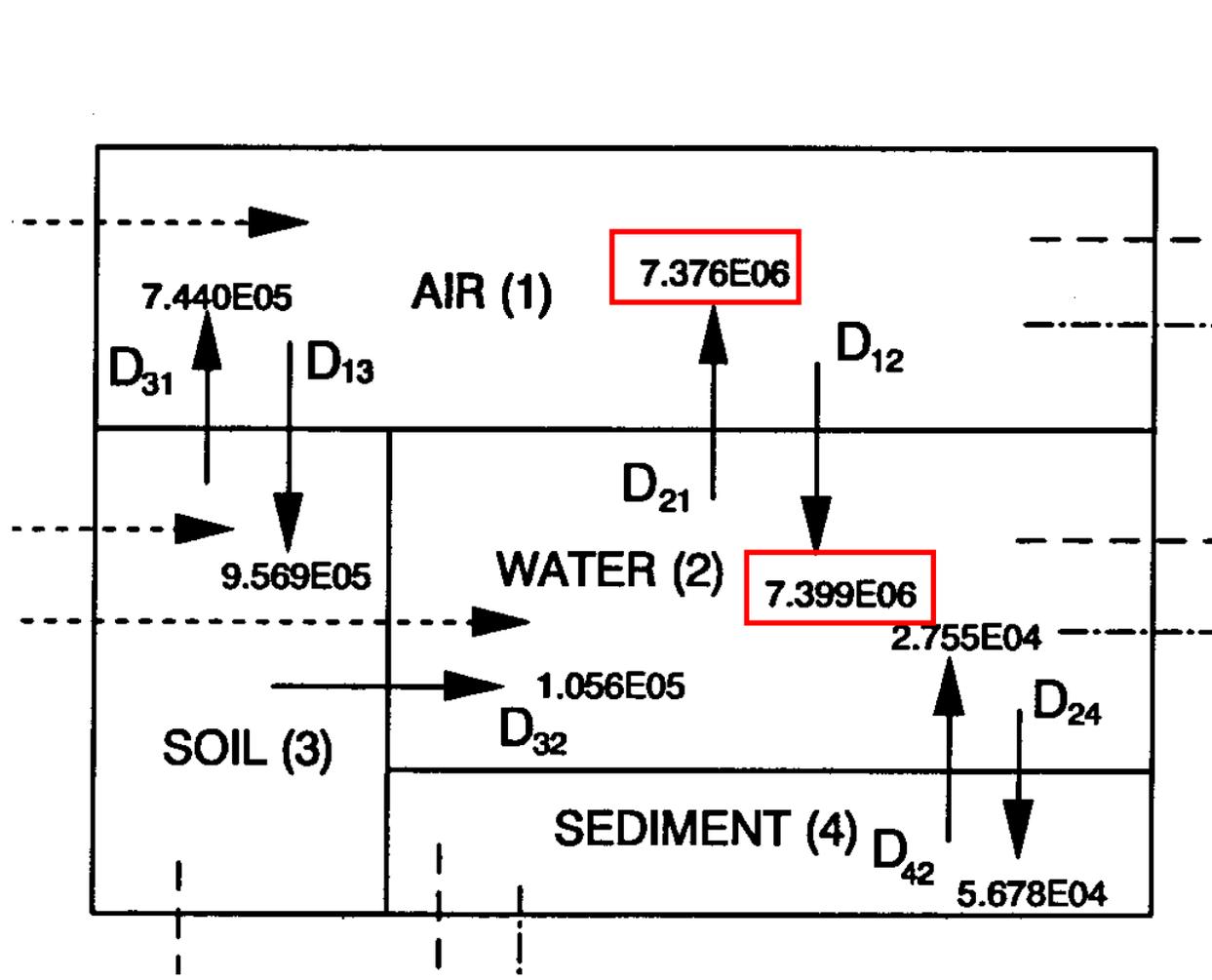
### 3) Tempo di residenza

$$\text{per reazioni} = \tau_r = \Sigma m(i) / \Sigma R(i)$$

$$\text{per advezione} = \tau_a = \Sigma m(i) / \Sigma A(i)$$

$$\text{globale} = \tau = \Sigma m(i) / [\Sigma A(i) + \Sigma R(i)]$$

# Esame dei valori D (confronto ordini di grandezza)



$V_i Z_{ik} A_i$

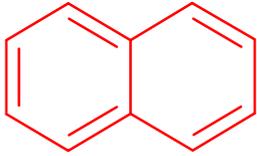
$V_i Z_{ik} R_i$

	D Values	
	Reaction mol/Pa h	Advection mol/Pa h
Aria	1.64E+09	4.03E+08
Acqua	1.90E+07	4.66E+06
Suolo	3.99E+06	4.48E+03
Sed.	2.82E+04	4.48E+03

**Tempo di residenza**

Globale = 21.15 h  
 Reazioni = 26.33 h  
 Advezione = 107.38 h

L'esame dei valori dei coefficienti  $D$  indica che gli scambi più importanti sono tra aria-acqua e aria-suolo. Il confronto tra l'ordine di grandezza di questi valori  $D$  (circa  $10^7$  mol/Pa h) e i valori delle velocità per le reazioni e per l'advezione ( $10^8 - 10^9$ ) suggerisce che la reazione e l'advezione sono molto più veloci rispetto al trasporto.



Emission, kg/h		
E(1)	E(2)	E(3)
1000	0	0

1. Aria
2. Acqua
3. Suolo
4. Sed.

$$C_i = Z_i f_i$$

Fugacity, Pa				Concentration, g/m <sup>3</sup>			
f(1)	f(2)	f(3)	f(4)	C(1)	C(2)	C(3)	C(4)
3.797E-06	9.074E-07	7.511E-07	8.554E-07	1.964E-07	2.709E-06	5.233E-05	4.909E-05

Amounts, kg				Total
m(1)	m(2)	m(3)	m(4)	Amount, kg
5 1.964E+04	5.418E+02	9.419E+02	2.455E+01	2.115E+04

$$R(i) = f_i D_R(i) M$$

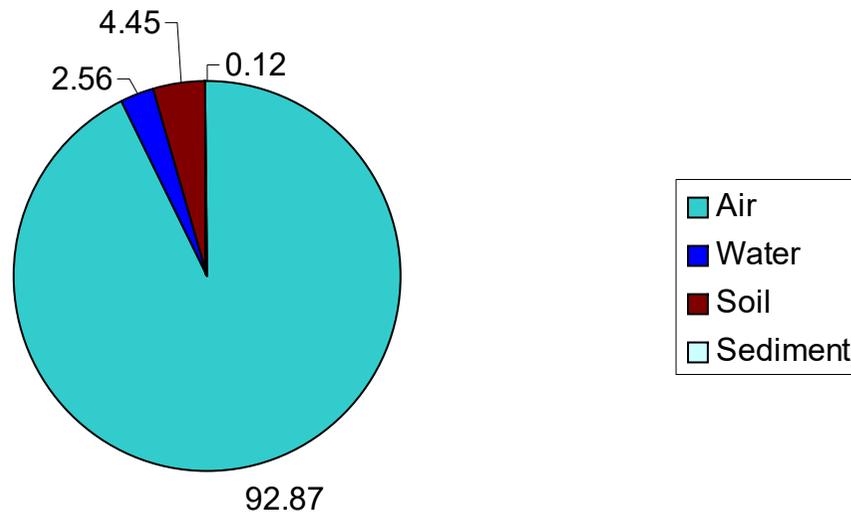
$$A(i) = f_i D_A(i) M$$

Loss, Reaction, kg/h				Loss, Advection, kg/h		
R(1)	R(2)	R(3)	R(4)	A(1)	A(2)	A(4)
8.005E+02	2.208E+00	3.84E-01	3.093E-03	1.964E+02	5.418E-01	4.909E-04

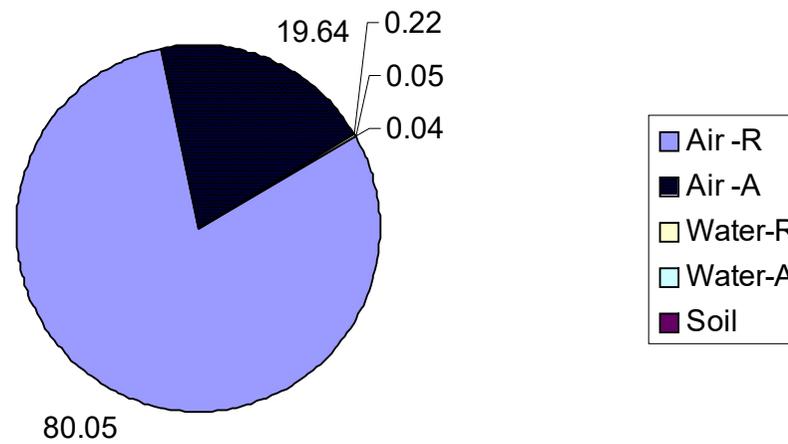
$$T_{ij} = D_{ij} f_i M$$

Intermedia Rate of Transport, kg/h						
T12	T21	T13	T31	T32	T24	T42
air-water	water-air	air-soil	soil-air	soil-water	water-sed	sed-water
3.602E+00	8.578E-01	4.658E-01	7.164E-02	1.017E-02	6.604E-03	3.020E-03

## Distribuzione delle masse (%)



## Distribuzione delle velocità di rimozione (%)



Analizzando i **risultati** per l'immissione di 1000 kg/h di naftalene solo nel comparto atmosfera, si ottiene che la ripartizione tra i comparti è simile a quella ottenuta dal calcolo al *Livello II*:

19600 kg in aria,

542 kg in acqua,

924 kg nel suolo

e solo 25 kg nei sedimenti.

Il naftalene immesso in atmosfera ha una bassissima probabilità di penetrare nei vari comparti. La velocità di trasferimento dall'aria all'acqua (T12) è di circa 4 kg/h. Anche se si aumentano i coefficienti di trasferimento di un fattore 10, le velocità rimangono trascurabili, perchè il processo di trasferimento è controllato dal coefficiente del processo di trasferimento di massa.

Il tempo di residenza globale è di 21 ore, simile a quello ottenuto per il *Livello II*.

# Dati di Input

## LIVELLO I

1. Molecular mass (g/mol);
2. Vapor pressure (Pa);
3. Water solubility (g/m<sup>3</sup>);
4. Log octanol water coefficient;
5. Amount of chemical (mol)

## LIVELLO II

1. Molecular mass (g/mol);
2. Vapor pressure (Pa);
3. Water solubility (g/m<sup>3</sup>);
4. Log octanol water coefficient;
5. Emission rate of chemical (100 mol/h);
6. Input overall reaction rate half-lives (h) [For zero reaction enter a fictitiously long half life eg 10<sup>-11</sup>];
7. Half life in air; water; soil; sediment;
8. Input advective flowrates in the form of residence times (h): Residence time in air; in water
9. Input advective inflow concentrations (mol/m<sup>3</sup>): Concentration in air; in water.

## LIVELLO III

1. Molecular mass (g/mol);
2. Vapor pressure (Pa);
3. Water solubility (g/m<sup>3</sup>);
4. Log octanol water coefficient;
5. input overall reaction rate half-lives (h); [For zero reaction enter a fictitiously long half life 10<sup>-11</sup> h];
6. Half life in air; in water; in soil; in sediment
7. Input advective flow rates in the form of residence times (100 h): Residence time in air; in water;
8. Input advective inflow concentrations (mol/m<sup>3</sup>): Concentration in air; in water;
9. Emission rate of chemical (mol/h)
10. Emission into air; water; to soil; sediment
11. Input intermedia D values as transport half lives (h);
12. Air to water; Air to soil; Water to air; Water to sediment;
13. Soil to air; Soil to water; Sediment to water