

Uno studio sull'Ozono

Momica Angelucci, Alessandro Costantini, Stefano Crocchianti, Antonio Laganà, Marco Vecchiocattivi

L'installazione di un nuovo programma sulle piattaforme di calcolo, già a disposizione dell'Università, ha permesso la simulazione delle concentrazioni di ozono nell'Italia centrale

La modellistica di diffusione e trasformazione degli inquinanti in atmosfera è un innovativo strumento già indicato dalla Comunità Europea attraverso la direttiva 96/62/CE al fine di ottemperare alle modalità di gestione della qualità dell'aria. L'Italia ha recepito queste indicazioni attraverso il D.Lgs. 351 del 04/08/1999 e i relativi decreti attuativi, nei quali vengono indicate le modalità di realizzazione di tali strumenti. Questi si basano su modelli matematici che risolvono contemporaneamente le equazioni di fluidodinamica per il trasporto delle masse gassose e quelle cinetiche per le interazioni materia-materia e luce-materia con i vincoli imposti dagli input di emissione di tutte le sorgenti interne al territorio considerato e al contorno dello stesso nonché dall'orografia e la meteorologica.

Tali simulazioni sono importanti perché permettono, ai fini delle normative sopra richiamate, di determinare la qualità dell'aria in tutte le aree non coperte da misure strumentali e di avere un quadro completo per l'intero territorio. Inoltre, con la possibilità di realizzare scenari emissivi relativi all'attuazione di misure contenute in piani e programmi che prevedono riduzioni delle emissioni, i modelli matematici permettono di valutare l'efficacia di tali misure, rendendo così la modellistica diffusoria uno strumento decisionale strategico e di fondamentale importanza per il decisore politico.

I codici di modellistica computazionale su cui si basano le simulazioni sono stati realizzati e validati da importanti laboratori di ricerca internazionali e le relative *suite* di programmi sono oggi disponibili per una loro messa a punto e utilizzo su appropriate piattaforme computazionali. Alcune realizzazioni sono già implementate o in corso di implementazione in diversi paesi, tra cui l'Italia¹, sia a fini scientifici e di ricerca sia a fini operativi, da parte di agenzie ambientali e amministrazioni locali. Esse sono mirate a stimare le concentrazioni in atmosfera delle specie gassose (come l'ozono) e solide (come le polveri fini) e a stimare la produzione di inquinanti secon-

dari prodotti dall'interazione tra i vari inquinanti primari e tra questi e la luce.

La Regione Umbria ha adottato, con delibera del Consiglio Regionale n. 466 del 09/02/2005, il "Piano di Risanamento e mantenimento della Qualità dell'Aria" nel quale sono definite le strategie e gli strumenti che la Regione mette in campo per la gestione della qualità dell'aria nel proprio territorio. In particolare, con esso viene istituito l'Inventario Regionale delle Emissioni (IRE), viene definita la rete di monitoraggio, vengono individuate le zone di risanamento e le zone di mantenimento della qualità dell'aria (procedura denominata "zonizzazione"), vengono predisposte le strategie per risanare le criticità e viene previsto l'uso di proiezioni e modelli di stima al fine di valutare gli effetti prodotti dalle strategie di risanamento adottate. I principali inquinanti presi in considerazione sono gli ossidi di zolfo (SO_x), gli ossidi di azoto (NO_x), i composti organici volatili ad esclusione del metano (COVNM), il monossido di carbonio (CO), gli aggregati di materia (particolato) con diametro inferiore ai $10 \mu m$ (PM_{10}). A tal fine, il territorio dell'Umbria è stato suddiviso in cinque zone nelle quali devono essere applicate delle misure di riduzione delle emissioni di NO_x , SO_x , CO, COVNM e PM_{10} per mantenere le concentrazioni in aria di tali inquinanti al di sotto dei limiti di legge e, in prospettiva, al di sotto di determinati valori minimi desiderabili.

A tutt'oggi manca, invece, la zonizzazione del territorio per quanto riguarda l'ozono (O_3), prescritta dal D.Lgs. n. 183 del 21/05/2004. Questo è dovuto al fatto che, per poter valutare le concentrazioni di O_3 sull'intero territorio, è necessario avere a disposizione una catena di simulazione che utilizzi modelli di diffusione e trasformazione chimico-fisica degli inquinanti, essendo O_3 un inquinante non emesso direttamente ma prodotto esclusivamente a seguito di reazioni tra altri inquinanti già presenti in aria. Proprio per venire incontro a questa esigenza, il Dipartimento di Chimica dell'Università di Perugia, in col-



laborazione con il Servizio Aria e Agenti Fisici dell'Unità Operativa Tecnica di Arpa Umbria, ha implementato sulle proprie piattaforme di calcolo uno specifico software di simulazione per l'intera area dell'Italia centrale.

In questa sede viene illustrata la fase di messa a punto di tali strumenti e presentato il primo caso di studio effettuato per l'Umbria, con il confronto tra alcune concentrazioni di ozono calcolate con le analoghe misurazioni di una centralina di monitoraggio.

IL SOFTWARE DI SIMULAZIONE CHIMERE E LA SUA IMPLEMENTAZIONE

Il software di simulazione adottato dal Dipartimento di Chimica è Chimere². Chimere è un codice computazionale di modellistica della qualità dell'aria adatto ai fini dell'implementazione, della ricerca e dello sviluppo di nuovi algoritmi. Esso, pertanto, presenta la necessaria versatilità per assolvere a compiti di ricerca scientifica e, al tempo stesso, adattarsi alle specificità delle esigenze della gestione territoriale locale. Il software è basato su un modello euleriano chimico e di trasporto per la simulazione della qualità dell'aria ed è stato sviluppato dall'Istituto *Pierre Simon Laplace* e il Lisa del Cnrs e dall'Ineris francese. È stato progettato per svolgere previsioni quotidiane di O₃, PM e numerosi altri inquinanti in aria e anche per realizzare simulazioni di medio periodo su scala locale (risoluzioni di ~ 1-2 km) o continentali. Il programma

Lo studio è stato condotto da Università di Perugia e Arpa Umbria, con il supporto di istituti di ricerca francesi e le Arpa Emilia Romagna e Lombardia

modellizza gran parte dei fenomeni chimico-fisici subiti dagli inquinanti atmosferici, inclusi la diffusione, il trasporto, la deposizione e le reazioni chimiche e fotochimiche. Esso è anche in grado di trattare i processi subiti dagli aerosol (cioè il particolato, i nitrati, i solfati, l'acqua e le specie organiche secondarie) e le reazioni in fase eterogenea. Il software originale Chimere è stato scritto in FORTRAN 77, successivamente adattato al FORTRAN 90 ed è, tuttora, in continua evoluzione attraverso il supporto di tutta la comunità scientifica che lo utilizza atti-

vamente. La versione impiegata per l'indagine descritta in questo articolo è la 200606A, ovvero quella stabile più recente e disponibile nel sito degli sviluppatori al momento della predisposizione del calcolo. Si tratta di un'implementazione parallela del codice, costruita secondo lo schema SPMD (*Single Process, Multiple Data*) facendo uso della libreria MPI (*Message Passing Interface*). Questa è una delle prime versioni stabili nelle quali, per accelerare i tempi di calcolo, è stata effettuata una ristrutturazione parallela perdendo, purtroppo, la possibilità di eseguire direttamente il codice in modo seriale a meno che non si simuli la presenza di più processori all'interno della macchina che ne utilizza, poi, uno solo. Questo ha comportato una notevole complicazione dell'ambiente in cui il codice può essere eseguito, in quanto richiede in ogni caso l'installazione di librerie parallele quali LAM/MPI. Tale versione di Chimere era, comunque, indicata dal manuale come validata. Sebbene vi siano all'interno del codice tracce di tentativi di *porting* ad altre architetture e sistemi operativi, il manuale sostiene che il programma è stato sviluppato ed eseguito solo su processori del tipo x86 e sistema operativo *Linux RedHat*. Come primo approccio, si è pertanto deciso di installare il codice in un gruppo di computer ad alta velocità, interconnessi con rete dedicata (*cluster*) di architettura *Intel* (processore *Xeon 3 GHz*, 8 nodi, sistema operativo basato su *RedHat 8.0*, compilatore *Intel Ifort 3.1.036*, rete *Gbit*).

La scelta è stata motivata innanzitutto dal fatto che l'ambiente è quello che più da vicino riproduce le caratteristiche dei computer impiegati dagli sviluppatori e dagli utilizzatori italiani con i quali siamo venuti in contatto (Arpa Emilia-Romagna). Inoltre, tali computer sono interconnessi ad una griglia distribuita³ di calcolatori europei (EGEE⁴) espressamente dedicata ai grandi calcoli, che risulterà utile nella fase di produzione del progetto. Parallelamente, si è provveduto all'implementazione del codice su una piattaforma totalmente diversa (nodi RISC, processori *UltraSPARC-IIIi*, sistema operativo SUN SOLARIS 9, compilatore FORTRAN SUN STUDIO 11 e ambiente parallelo SUN HPC5.0). Tale implementazione, che si è rivelata notevolmente più onerosa, mostra alcuni dei limiti di Chimere e la scarsa armonizzazione delle sue componenti. Oltre al miglioramento dei programmi di *setup* dell'esecuzione (*script*), il lavoro speso nell'implementazione su SUN del codice ha messo a disposizione un ambiente di sviluppo computazionale di alto livello, in grado di evidenziare ad esempio alcuni

errori di programmazione (*bug*) non messi in evidenza dall'esecuzione su sistema operativo *RedHat*, ma in grado di inficiare l'esattezza del risultato. Il miglioramento degli *script* di lancio ha anche comportato il loro adattamento affinché ad ogni lancio non venga ricompilato tutto il codice (oltre 62000 righe), ma solo le singole routine eventualmente modificate rispetto alla precedente compilazione. L'esecuzione del codice su ambedue le piattaforme, facendo uso dei dati di input relativi all'ondata di caldo eccezionale che si verificò in Europa dal 30 luglio al 3 agosto 2003 e scaricabili dal sito degli sviluppatori, ha riprodotto ogni elemento significativo dei risultati mostrati allo schermo, riportati per confronto nel manuale del programma. Successivamente abbiamo implementato il codice anche con la libreria MPICH1, riproducendo anche in questo caso la simulazione di prova.

LA PREDISPOSIZIONE DEL MODELLO

Per poter utilmente eseguire Chimere, è stato necessario costruire i file dei dati in ingresso per il periodo temporale di interesse: le condizioni meteorologiche (dati METEO); le emissioni biogeniche (dati BEMISSIONS); le emissioni antropogeniche (dati AEMISSIONS); le condizioni al contorno (dati BC). Per quanto riguarda i dati METEO, essi sono stati prodotti a partire da quelli calcolati dal modello LAMI (*Local Area Model Italy*), forniti da Arpa Emilia-Romagna, mettendo a punto un apposito programma che ne adattasse i formati.

I dati BEMISSIONS, relativi alle emissioni biogeniche orarie nel periodo simulato, si calcolano a partire dal-

l'utilizzo del suolo e, in particolare, dipendono dal tipo di vegetazione e dalle stesse informazioni meteorologiche utilizzate per simulare il processo di diffusione. Essi sono stati adattati da quelli prodotti da Arpa Emilia-Romagna per mezzo di un programma appositamente generato.

Le AEMISSIONS sono state calcolate a partire dai dati dell'Inventario Nazionale delle Emissioni dell'anno 2003, già disaggregato spazialmente sul reticolo del dominio di calcolo, tramite una specazione delle emissioni nelle classi chimiche richieste dal modello e una disaggregazione temporale (entrambe utilizzando i profili elaborati nell'ambito del CTN_ACE) arrivando ad ottenere le concentrazioni orarie di tutte le 22 specie chimiche richieste in ogni punto del dominio di calcolo. Le concentrazioni degli inquinanti (BC) ai contorni del dominio di calcolo ed all'inizio della simulazione sono state riadattate a partire dai dati forniti dal servizio Prev'Air a cura dell'istituto francese Ineris. I parametri principali della simulazione sono riassunti in tabella 1.

I RISULTATI OTTENUTI

Per rendere più immediata la comprensione dei risultati ottenuti nella trasformazione dei dati meteo e dei vecchi dati delle emissioni biogeniche ed antropogeniche, si è proceduto alla loro visualizzazione mediante l'uso di un programma di visualizzazione di dati su grigliato.

Nelle fig. 1, 2 e 3 sono riportate, rispettivamente, la temperatura all'altezza di 2 m dal suolo, le emissioni biogeniche e antropogeniche di NO per alcune ore di un giorno del mese di luglio 2004 (si noti che i massimi emissivi sono diversi per gli ultimi due grafici). Come si può notare, la progressione temporale e la localizzazione degli aumenti sono quelle attese sulla base dell'orografia e dell'urbanizzazione nel dominio in esame. Una volta predisposti i dati di input, si è proceduto con l'esecuzione del modello euleriano. Il dominio di calcolo in esso utilizzato, nel sistema di riferimento piano WGS84-UTM32N come rappresentato in fig. 4, è costituito da 8000 celle quadrate di 5 km di lato per un'estensione totale di 500x400 km². Per l'esecuzione del modello, si è scelto di simulare la fase gassosa e l'aerosol dell'estate 2004 (più precisamente dal 1 maggio al 31 agosto 2004) in quanto è in tali mesi che le concentrazioni di O₃ raggiungono il loro massimo. Come già accennato, il meccanismo chimico utilizzato è MELCHIOR2, lo schema ridotto contenuto in Chimere che prevede 44 specie chimiche e 120 reazioni in fase gassosa

Tabella 1 - parametri della simulazione

Versione modello	V200606A
Risoluzione orizzontale	5x5 Km
Griglia verticale	Sigma P ibrida
Livelli verticali	8
Spessore primo livello	~43m
Interfaccia ultimo livello	500hPa
Periodo simulato	1/5/04-31/8/04
Tempo di calcolo	123.43 ore
n. processori	8
n. celle dominio	8000
Spazio disco input	10.6 GB
Spazio disco output	30 GB
Meccanismo chimico gas	MELCHIOR2 (40 specie, 120 reazioni)
Chimica dell'aerosol	basato su ISORROPIA
n. specie aerosol	7
n. classi granulometriche	6
Specie salvate in output	13
Specie depositate calcolate	190

oltre ad un modulo di simulazione degli aerosol. La simulazione è stata condotta con *run* parallelo di Chimere su 8 nodi del *cluster Intel* richiedendo tempi di esecuzione di circa 124 ore e un totale di circa 30 GB in risultati utili. Alcune immagini relative alle concentrazioni di O₃, così calcolate per alcune ore del giorno, sono mostrate in fig. 5. Le analisi effettuate evidenziano chiari andamenti oscillanti lungo le 24 ore e lungo i giorni della settimana per le specie in esame nelle zone geografiche di interesse. A titolo illustrativo, si riporta in fig. 6 l'andamento giornaliero, settimanale e mensile sempre in funzione delle ore trascorse (il dato relativo all'evoluzione nel mese è riferito alla rilevazione alle ore 15:00 di ogni giorno) che mostra i massimi giornalieri, la ciclicità settimanale delle concentrazioni di ozono con la tipica riduzione di fine settimana e i picchi di concentrazione. In fig. 7 viene riportato un confronto tra le concentrazioni di O₃ misurate da una centralina di monitoraggio collocata in una zona urbana a bassa densità di traffico (Perugia - Via Cortonese), rappresentativa di una concentrazione "media" dovuta sia alle vicine emissioni dirette che a quelle trasportate dalle altre zone urbane e di periferia, e quelle calcolate dal modello. Si può facilmente notare l'ottimo accordo esistente tra i dati misurati e quelli prodotti dal modello, seppure l'oscillazione di questi ultimi sia più smorzata. È importante sottolineare, però, che le concentrazioni misurate dipendono dalla particolare localizzazione della strumentazione usata anche se, essendo essa inserita all'interno di un parco urbano, i valori forniti possono ragionevolmente rappresentare le concentrazioni di fondo nella zona urbana in quanto l'ozono non viene prodotto in modo significativo negli immediati paraggi. È comunque lecito pensare che tali dati siano più direttamente confrontabili con quelli ottenuti dalle simulazioni che non quelli provenienti da centraline poste nelle immediate vicinanze di incroci urbani ad alta densità di traffico. Va anche detto che i valori calcolati, di contro, si riferiscono ad una cella con superficie di 25 km² e alta circa 43 m.

I POSSIBILI SVILUPPI FUTURI

Come abbiamo avuto modo di discutere, l'uso di modelli chimici e di trasporto per la descrizione dei complessi meccanismi di formazione, trasporto ed eliminazione degli inquinanti nell'aria è essenziale per la descrizione dettagliata di fenomeni che riguardano da vicino la vita di tutti i cittadini. Molto lavoro è stato fatto in questa

direzione, passando dai singoli modelli matematici di fluidodinamica, in grado di descrivere esclusivamente il trasporto dei materiali emessi in atmosfera, all'integrazione in essi di alcune delle reazioni più significative in cui gli inquinanti possono prendere parte, una volta emessi in atmosfera, come reagenti, come prodotti e persino come catalizzatori.

Il lavoro svolto è stato finalizzato a un'implementazione critica di Chimere su piattaforme computazionali moderne (distribuite), puntando non solo a disporre di

Il modello sviluppato sarà un utile supporto per valutare l'efficacia delle misure adottate per il risanamento della qualità dell'aria

un codice di modellistica dell'atmosfera tra i più adatti a tale compito e all'utilizzo di supporti computazionali di griglia capaci di scalare opportunamente all'aumentare della dimensione del calcolo, ma adattando anche le modalità di esecuzione del modello alle condizioni dell'Italia centrale ed in particolare dell'Umbria. Questo renderà lo strumento un utile supporto alle valutazioni dell'efficacia delle misure già contenute nell'attuale Piano Regionale di Risanamento e Mantenimento della Qualità dell'Aria e sarà indispensabile per poterne proporre e analizzare di nuove; questo, nell'ottica di un continuo aggiornamento dello stesso Piano, necessario sia per seguire le disposizioni contenute nelle nuove normative nazionali e internazionali, ma anche per tener conto delle nuove tecnologie (nel settore dell'industria, del trasporto, del riscaldamento, etc.) che rendono possibili nuovi scenari.

Per conseguire questi obiettivi, conclusa la fase implementativa della catena modellistica, saranno realizzate alcune simulazioni su base annua effettuando calcoli che permettano di valutare tutti gli indici di legge oggi previsti dalla normativa per la qualità dell'aria (DM 60/02, D.Lgs. 183/04 e D.Lgs. 152/07), nonché l'efficacia di alcuni scenari base già previsti dall'attuale Piano in termini di miglioramento della qualità dell'aria.

Inoltre, saranno pianificate anche una serie di attività di ricerca sulla modellistica applicata alla qualità dell'aria: **aspetto gestionale:** estensione delle simulazioni ad archi temporali più lunghi al fine di confrontarne i risultati

con i dati misurati dalle reti di qualità dell'aria presenti nel territorio regionale, nella prospettiva di utilizzarli come strumenti di programmazione e previsione (anche in eventuali situazioni di emergenza).

aspetti implementativi dei codici di calcolo: ottimizzazione e velocizzazione dei codici eventualmente ristrutturando la parte parallela e distribuita e implementandone una versione stabile sulla griglia europea di calcolo scientifico EGEE;

aspetti chimici: valutazione della sensibilità dei risultati ai dati di input e soprattutto ai meccanismi di formazione degli inquinanti potrà essere studiata in dettaglio e migliorata, sia per quel che riguarda la fase gassosa che quella liquida (aerosol) eventualmente introducendo degli aspetti di catalisi eterogenea da parte del particolato;

aspetti modellistici: inserimento del calcolo diretto dei dati meteorologici ed utilizzo del modello meteorologico diagnostico MM5 al fine di una più estesa valutazione dei modelli usati ed eventuale implementazione di modelli alternativi.

Un ringraziamento va, in conclusione, all'*Institute Pierre-Simon Laplace* (CNRS), e all'*Ineris* e *Lisa* (CNRS) francesi, per aver messo a disposizione il codice Chimere e i dati relativi alle condizioni al contorno; all' *Agenzia Arpa Emilia Romagna* e *Lombardia* per aver messo a disposizione, i dati meteo e le emissioni biogeniche la prima, e le emissioni antropogeniche disaggregate su grigliato la seconda.

Il lavoro si è basato su finanziamenti europei (COST CMST (azione D37) ed EGEE III) e locali (Fondazione Cassa di Risparmio di Perugia e Arpa Umbria).

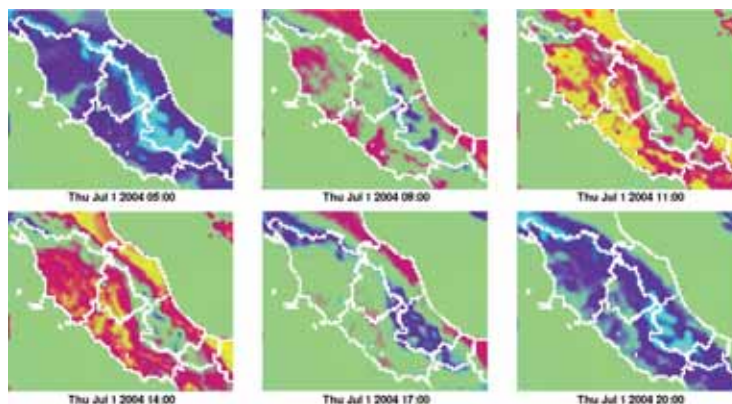


Figura 1 - Rappresentazione della temperatura a 2 m. di altezza per diverse ore del 1 luglio 2004. Il blu intenso rappresenta il minimo di temperatura (pari a 6° C), il rosso il massimo di temperatura (pari a 42° C).

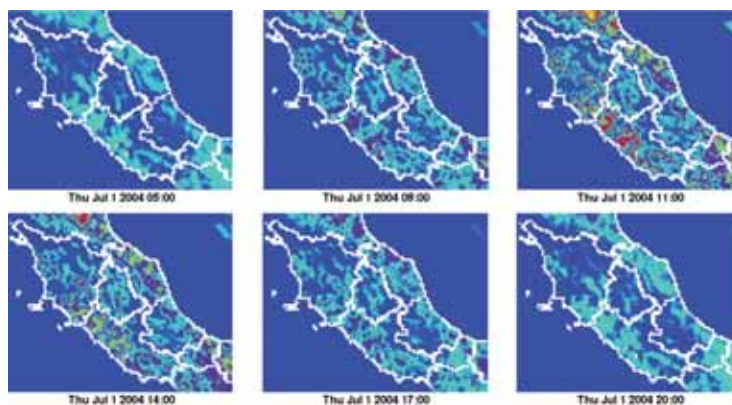


Figura 2 - Rappresentazione dell'emissione biogenica di NO (molecole/(cm² s)) per diverse ore del 1 luglio 2004. Il blu intenso rappresenta il minimo di emissione (pari a 0 molecole/(cm² s)), il rosso il massimo di emissione (pari a $6 \cdot 10^{11}$).

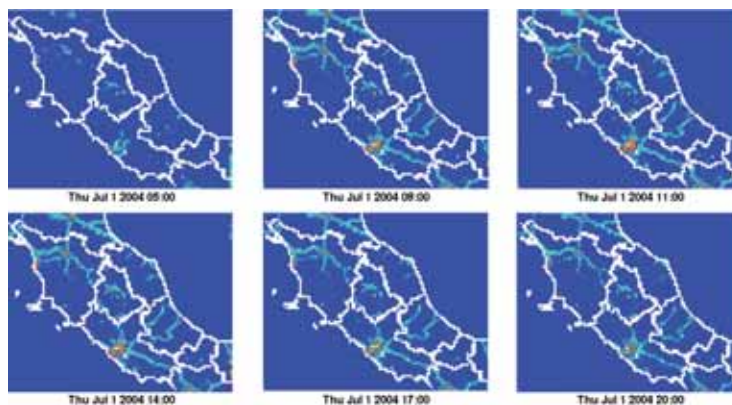


Figura 3 - Rappresentazione dell'emissione antropogenica di NO (molecole/(cm² s)) per diverse ore del 1 luglio 2004. Il blu intenso rappresenta il minimo di emissione (pari a 0 molecole/(cm² s)), il rosso il massimo di emissione (pari a $3 \cdot 10^{12}$).



Figura 4 - Rappresentazione del dominio di calcolo della simulazione (griglia centrale a maglia più fitta delimitata dal bordo rosso) e del dominio delle condizioni al contorno (griglia più rada in blu). L'estensione del dominio di calcolo, nel sistema di riferimento piano WGS84-UTM32N, è da 542500,4547500 (angolo sud-ovest) a 1037500,4942500 (angolo nord-est).

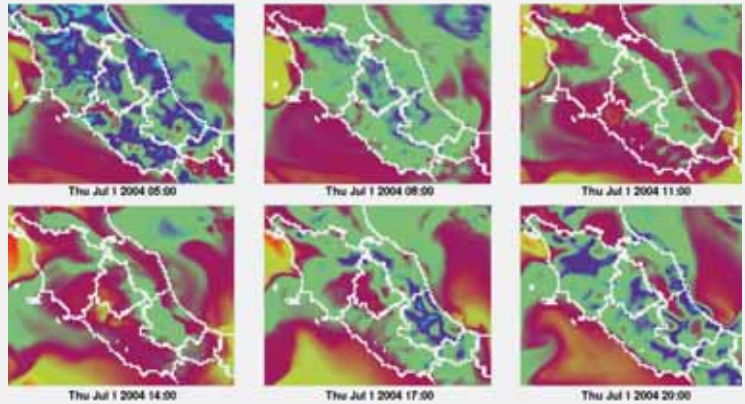


Figura 5 - Rappresentazione delle concentrazioni di O₃ a diverse ore del 1 luglio 2004. Il blu intenso rappresenta il minimo di concentrazione (pari a 15.7 ppb), il rosso il massimo della concentrazione (pari a 82.9 ppb).

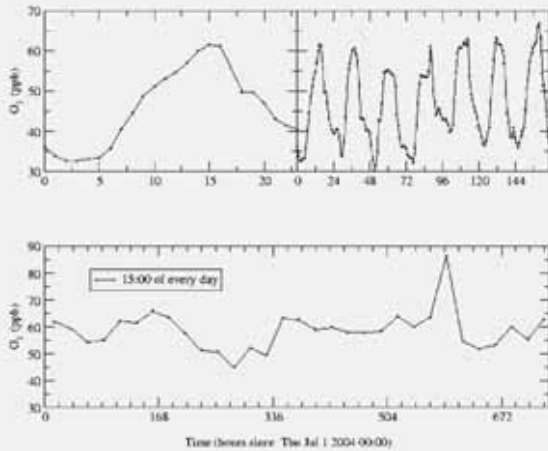


Figura 6 - Rappresentazione della variazione in funzione del tempo della concentrazione di O₃ (in ppb) in una delle celle di calcolo nei pressi della città di Perugia. Nel riquadro in alto a sinistra si riportano gli andamenti nella giornata del 1 luglio 2004; in alto a destra gli andamenti dal 1 al 7 luglio 2004 ed in quello in basso si rappresentano le concentrazioni alle 15 di ogni giorno dello stesso mese.

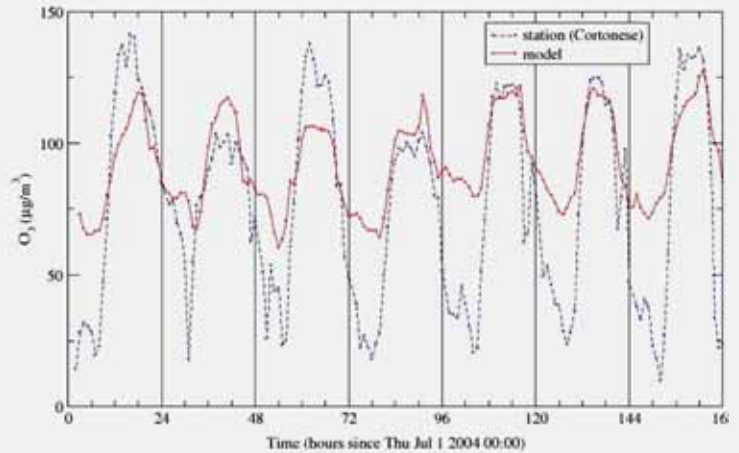


Figura 7 - Confronto tra le concentrazioni di O₃ (in µg/m³) calcolate (in rosso) e rilevate (in blu) da una centralina di fondo urbana (Perugia, via Cortonese), nel periodo dal 1 al 7 luglio 2004.

Riferimenti bibliografici

¹ M. Deserti, S. Bande, E. Angelino, G. Pession, F. Dalan, E. Minguzzi, M. Stortini, G. Bonafè, R. De Maria, G. Fossati, E. Peroni, M. Paolo Costa, F. Liguori, S. Pillon. *Rapporto tecnico sull'applicazione di modellistica al Bacino Padano Adriatico* http://www.apat.gov.it/site/_files/rapporto_modellistica_finale_pdf.pdf (2007)

²The Chimere chemistry-transport model. A multi-scale model for air quality forecasting and simulation. © Institut Pierre-Simon Laplace, INERIS, LISA, C.N.R.S. (2004) - <http://euler.lmd.polytechnique.fr/chimere>

³ C. Kesselman, I. Foster. *The Grid: Blueprint for a Future Computing Infrastructure*. Morgan Kaufmann Publisher, USA (1998)

⁴ EGEE: Enabling Grids for E-Science in Europe. - <http://www.eu-egce.org>