

giornata di studio

MODELLISTICA DELLE EMISSIONI ATMOSFERICHE: tra servizio e ricerca

***Antonio Laganà (lag@unipg.it)
Dipartimento di Chimica
Università di Perugia***

Metodi, strumenti e strategie
di risanamento della qualità
dell'aria in Umbria

TRACCIA DELLA PRESENTAZIONE

- 1- Modellistica dell'emissione e della dispersione
- 2- Il trattamento dei processi chimici di trasformazione
- 3- Obiettivi di servizio raggiunti (strumenti implementati)
- 4- Problematiche di ricerca

L'EMISSIONE E LA SUA DISPERSIONE



8 febbraio 2007

LA MODELLISTICA DEGLI INQUINANTI COME SERVIZIO

I database regionali e nazionali (D.M. N° 261/2002) degli inventari delle emissioni danno informazioni su:

- ◆ attività inquinanti sia naturali che antropiche.
- ◆ politiche per le emissioni inquinanti
- ◆ peso relativo delle fonti di inquinamento
- ◆ tipologia socio-economico del territorio

LE COMPONENTI DELLA MODELLISTICA DEGLI INQUINANTI NELL'ATMOSFERA

La quantità di un inquinante presente nell'aria di una data località dipende da:

- ◆ **EMISSIONI** dell'inquinante da sorgenti sia naturali che antropiche
- ◆ **TRASPORTO** e dispersione dello stesso in atmosfera
- ◆ **MECCANISMI** di trasformazione chimica delle sostanze emesse.



TIPI DI INQUINANTI ATMOSFERICI

- ◆ GAS (es: O_3 , C_6H_6 , CO, SO_2 , NO_x , metalli,..)
- ◆ LIQUIDI (es: aerosol)
- ◆ SOLIDI (es: polveri sottili PM10, PM2.5)



Gli strumenti della Modellistica dell'Atmosfera

Definizione di un modello di trasporto e diffusione degli inquinanti in atmosfera che utilizzi:

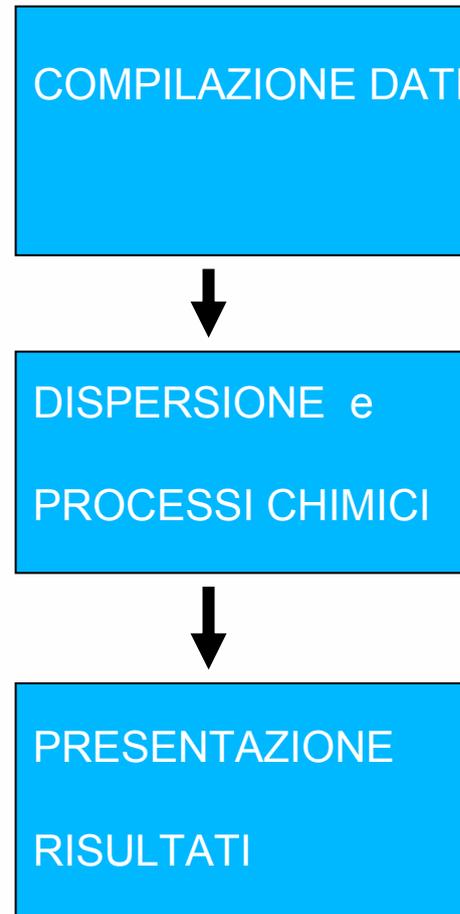
- ◆ dati di localizzazione emissioni con relative quantità
- ◆ dati meteorologici (venti, pressioni, temperature, etc.)
- ◆ strumenti di interpolazione multiscala
- ◆ strumenti di integrazione delle equazioni cinetiche di fluidi eterogenei su griglie multiscala
- ◆ formattazioni dei risultati per una facile gestione da parte dell'utente

SOFTWARE USATO

CHIMERE (chemistry-transport model): suite di codici basati su un modello multiscala

- ◆ realizzata e distribuita dall'Istituto Pierre Simon Laplace, Francia
- ◆ inizialmente progettata per la previsione in termini giornalieri dell'inquinamento atmosferico
- ◆ successivamente estesa a simulazioni a lungo termine
- ◆ intervallo spaziale che va da una scala continentale (migliaia di Km) e celle da 100 Km ad una scala interurbana (centinaia Km) e celle da 1 Km

FLOWCHART DEL PROGRAMMA



LA TRASFORMAZIONE CHIMICA



8 febbraio 2007

L'azione chimica degli inquinanti

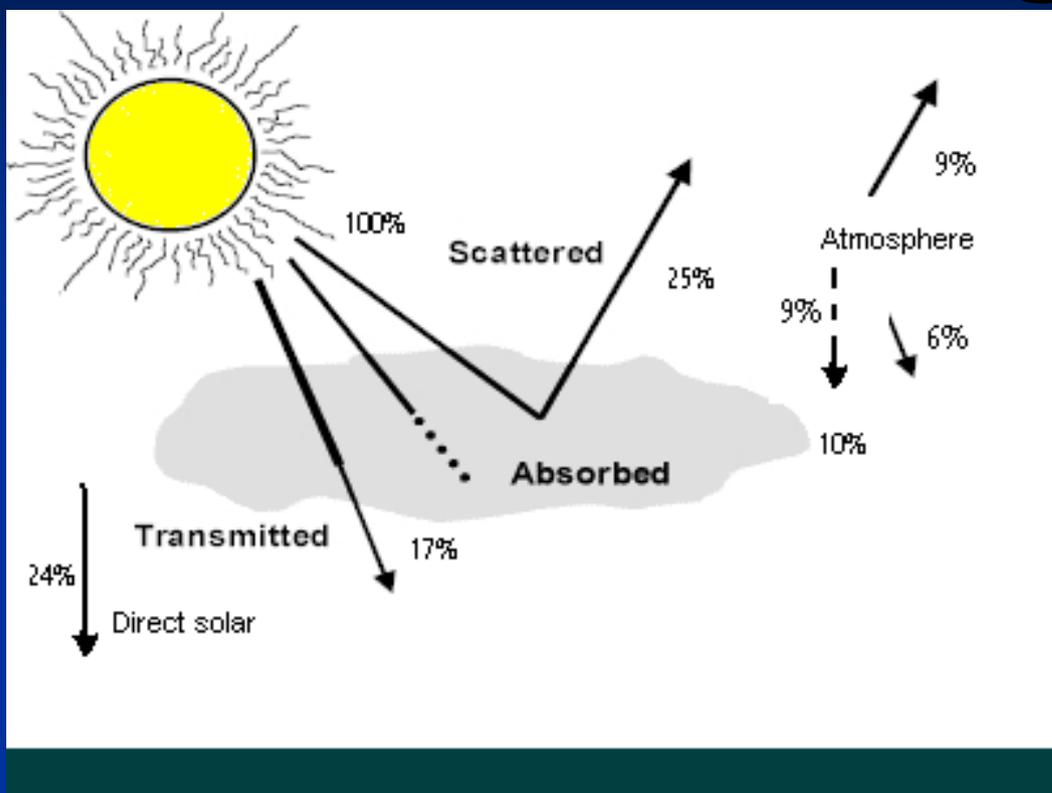
- Primaria (azione diretta delle sostanze emesse sia da attività antropiche che naturali)
- Secondaria (azione da sostanze generate da trasformazioni chimiche dalla componente primaria)



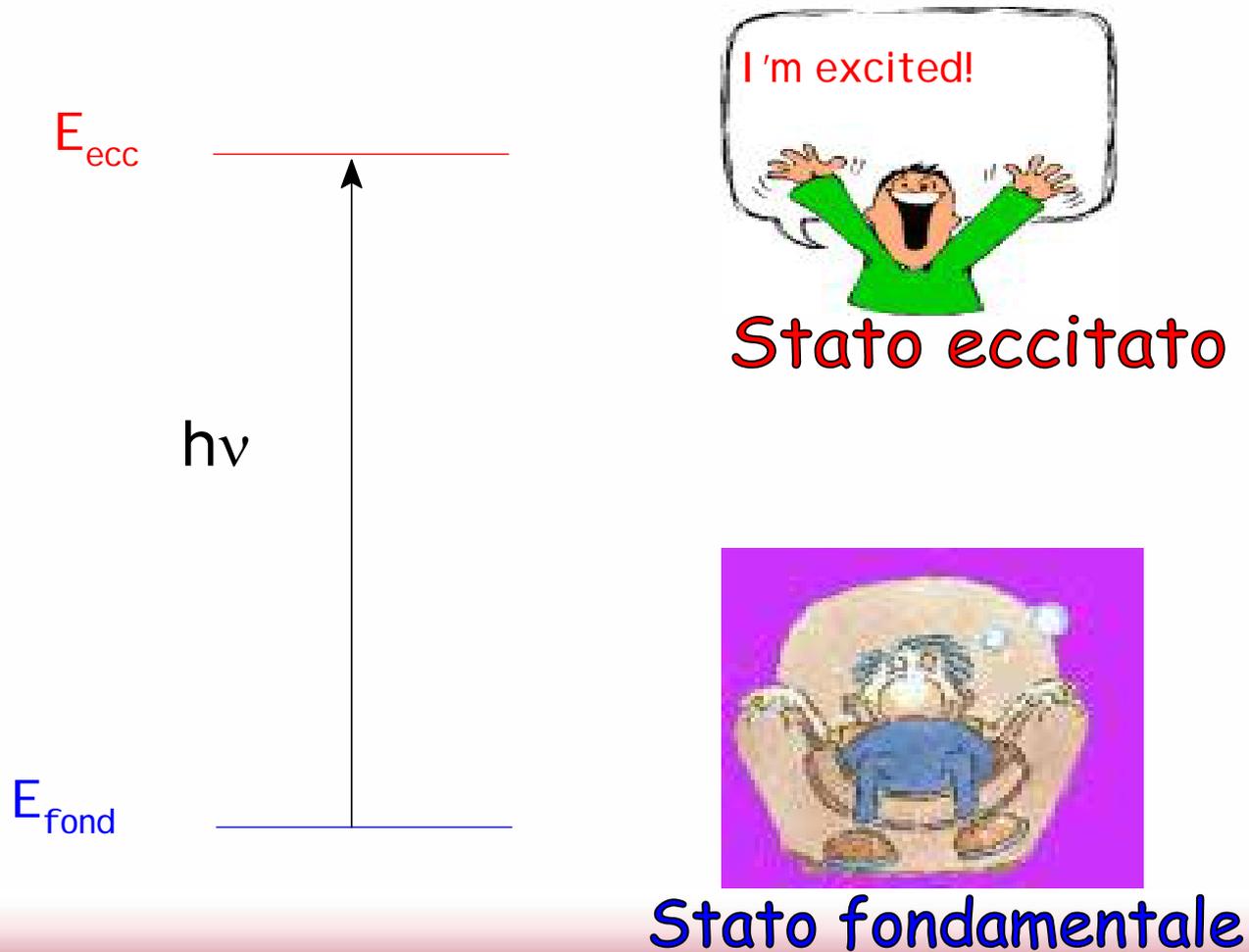
Le reazioni atmosferiche in fase gassosa

- Fotochimica (radiazione-materia)
- Scambio
- Ricombinazione
- Radicaliche





Eccitazione per assorbimento di luce



Reazione di scambio per collisione



Le reazioni atmosferiche in fase liquida

- Fotochimica di molecole solvatate
- Reazioni in soluzione acquosa
- Reazioni alle interfacce gas liquido e gas solido



Le approssimazioni

Data la limitazione delle risorse calcolo disponibili vengono abitualmente distinti due tipi di trattamenti

- Schema chimico completo (MELCHIOR 1) basato su un insieme esteso di meccanismi (80 specie, più di 300 reazioni)
- Schema chimico semplificato (MELCHIOR 2) basato su un insieme ridotto di meccanismi chimici (44 specie, circa 120 reazioni)



OBIETTIVI DI SERVIZIO RAGGIUNTI



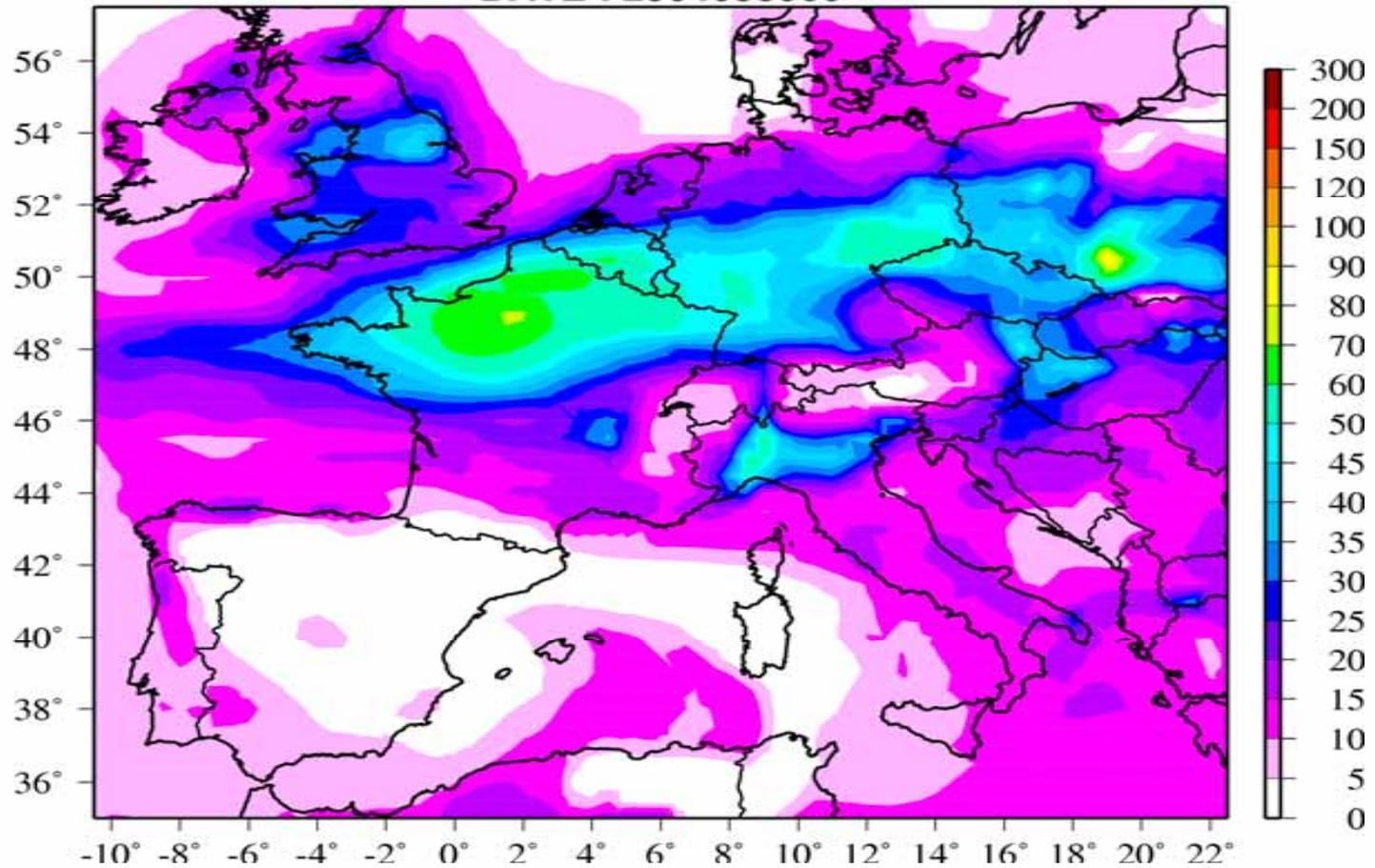
8 febbraio 2007

Chimere: implementazione del codice

- ◆ Una versione aggiornata del codice (V200606A) è stata installata su PC e su altre due architetture differenti:
 - cluster con 8 nodi, 16 processori Xeon HT, architettura Intel c/o Dipartimento di Matematica ed Informatica;
 - SUN biprocessore, ULTRAsparc, architettura Risc c/o Dipartimento di Chimica
- ◆ I programmi di benchmark sono stati eseguiti
- ◆ Le interfacce per l'utilizzo dei dati meteo italiani (LAMI) sono state predisposte in attesa della loro disponibilità

SIMULAZIONE SU SCALA EUROPEA

DATE : 2004033000



Concentrazione di PM10 simulate con CHIMERE-aerosols

PROBLEMATICHE DI RICERCA



8 febbraio 2007

Calcolo scientifico parallelo e distribuito

- ◆ Migliorare l'efficienza e l'usabilità del codice
- ◆ Aumentare la capacità di affrontare problemi complessi
- ◆ Ottimizzare gli algoritmi di parallelizzazione e la distribuzione del calcolo



Calcoli su computing Grid

Dal 2000 l'Università di Perugia è coinvolta, assieme ad altre Università ed enti di ricerca europei, nello sviluppo di griglie di calcolo nazionali e internazionali che rendano possibile l'effettuazione di simulazioni complesse (come Chimere).

“A computational Grid is a **hardware** and **software** infrastructure that provides dependable, consistent, pervasive and inexpensive access to high-end computational capabilities.”

Ian Foster, The Grid: Blueprint for a future computing infrastructure
(1999)

La computazionale GRID italiana



GRID.IT*

CNR

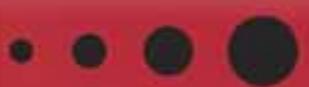
INFN

ASI

CNIT

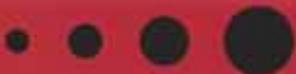
Università

*from the web site of GRID.IT



La Grid europea di EGEE

A livello europeo la UE ha promosso con il VI e VII programma quadro l'assemblaggio di una computational Grid europea centrata sul CERN ed il suo esperimento di fisica delle particelle







Chimere e Grid

Implementando Chimere in Grid sara' possibile

- effettuare simulazioni pesanti in parallelo utilizzando le risorse messe a disposizione dalla Grid
- utilizzare meccanismi chimici piu' complessi e dettagliati che richiedano una maggiore potenza di calcolo
- utilizzare domini con alta risoluzione e tempi di simulazione lunghi



Una nuova strutturazione di Chimere

- ◆ Ottimizzare l'uso di risorse e di tempo calcolo
- ◆ Ampliare la rosa di formati meteo supportati (attualmente solo MM5)
- ◆ Utilizzare tecniche di realtà virtuale per la visualizzazione dei risultati
- ◆ Migliorare l'accuratezza introducendo descrizioni più fedeli dei processi chimici

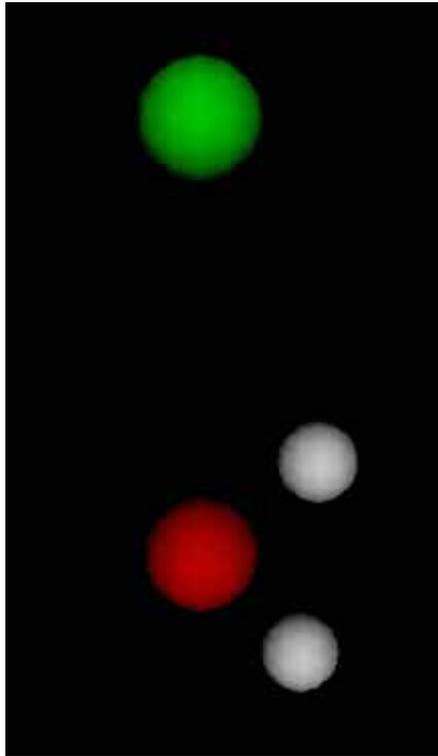


Sviluppo di nuovi modelli di reazione

L'Università di Perugia ha costruito apparati sperimentali che consentono di studiare i vari processi chimici in fase gassosa e stimarne con elevata precisione l'efficienza.



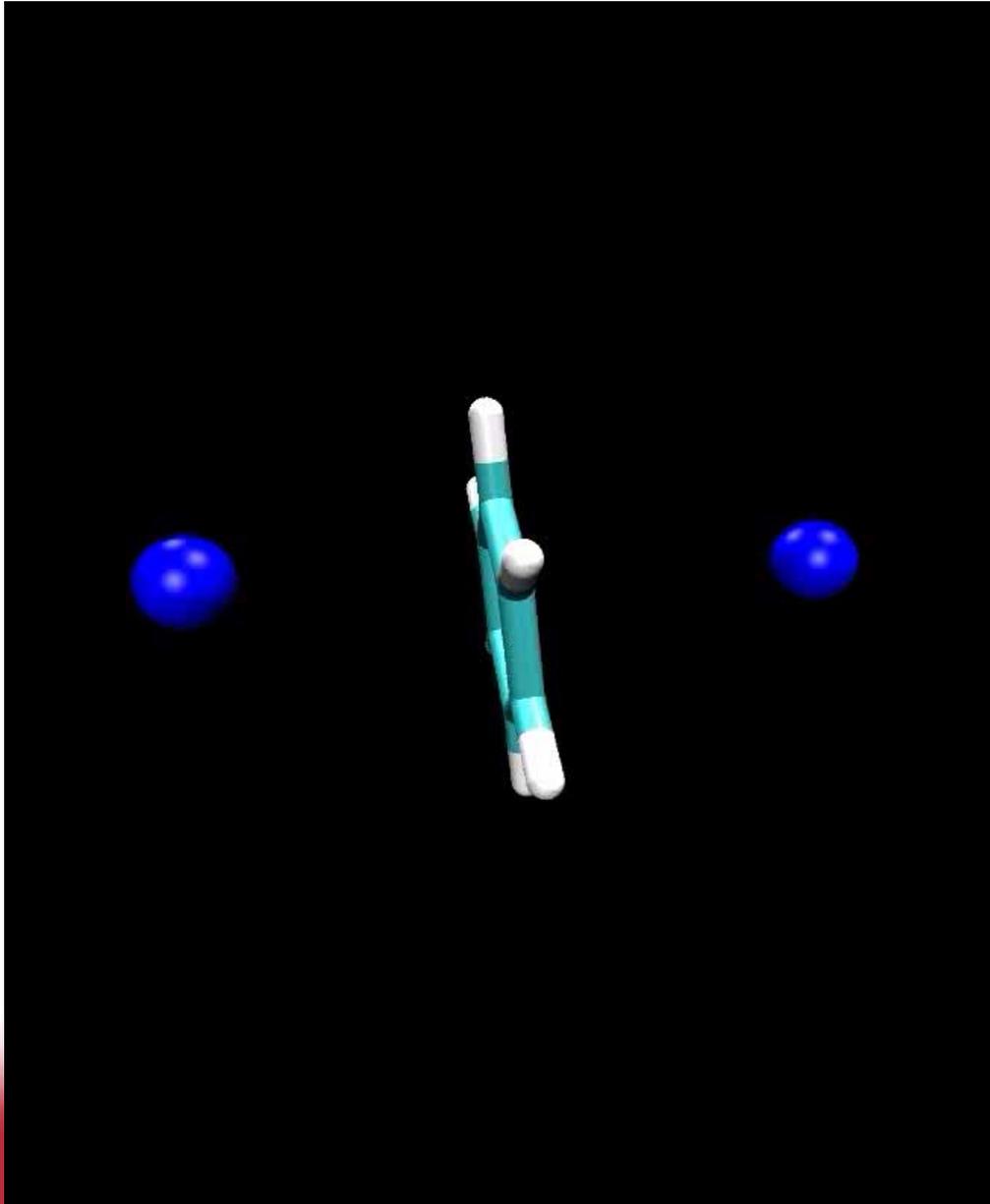
Reazioni radicaliche



L'apparato computazionale viene utilizzato per calcolare in forma rigorosa l'efficienza di alcuni processi reattivi veloci come

$$\text{OH} + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$$

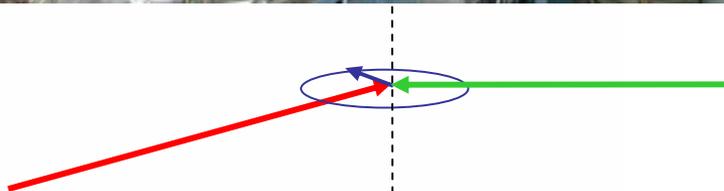
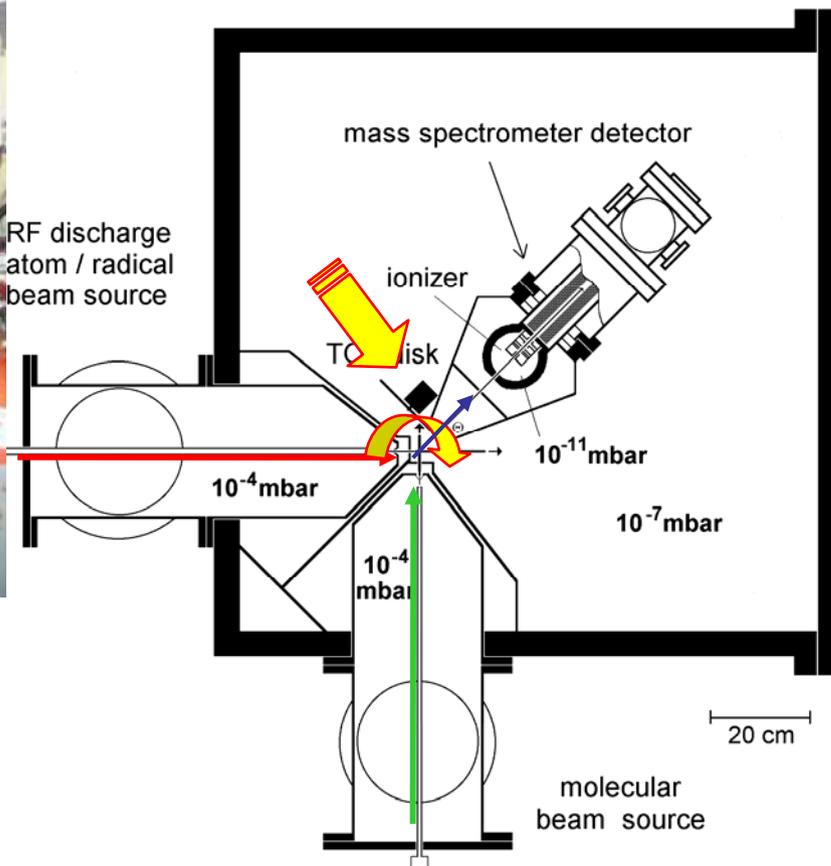

La solubilità del benzene in acqua



Studi di dinamica
molecolare
consentono la
razionalizzazione del
comportamento del
benzene in soluzione

MISURE SPERIMENTALI

FASCI MOLECOLARI PER LO STUDIO DEI PROCESSI CHIMICI ELEMENTARI



UNA PROPOSTA

- **Centro di ricerca e modellistica dell'atmosfera**



COLLABORATORI

S. Crocchianti, A. Costantini, Dip. Chimica

O. Gervasi, S. Tasso, Dip. Mat. & Informatica

M. Angelucci, M. Vecchiocattivi, ARPA Umbria



SPONSOR

Ministero Università e Ricerca (MIUR)

Agenzia Spaziale Italiana (ASI)

Agenzia spaziale europea (ESA)

Azioni europee COST D23 e D37

ARPA Umbria





8 febbraio 2007