

Μελετώντας τη σύσταση και τη συμπεριφορά νανοσωματιδίων της ατμόσφαιρας με τεχνολογίες High Performance Computing του ΕΔΕΤ



Ατμοσφαιρικά Νανοσωματίδια

Τα ατμοσφαιρικά σωματίδια απασχολούν την επιστημονική κοινότητα και μελετώνται εκτενώς τις τελευταίες δεκαετίες καθώς σχετίζονται άμεσα με την κλιματική αλλαγή, επηρεάζουν την ανθρώπινη υγεία, το χρόνο ζωής των πολιτιστικών μνημείων, τη βιοποικιλότητα της γης, αλλά και την ορατότητα που είναι και η πιο άμεσα αντιληπτή συνέπεια της αυξημένης συγκέντρωσής τους σε μια περιοχή. Η παρουσία των ατμοσφαιρικών σωματιδίων συνδέεται άμεσα με το ενεργειακό ισοζύγιο της ατμόσφαιρας, επηρεάζοντας έτσι τη μέση θερμοκρασία του πλανήτη. Επιπλέον, τα ατμοσφαιρικά σωματίδια δρουν και ως πυρήνες συμπύκνωσης νεφών, γεγονός που επηρεάζει το ρυθμό κατακρήμνισης των σύννεφων (βροχόπτωση).

Οι επιπτώσεις των νανοσωματιδίων στην ανθρώπινη υγεία αφορούν κυρίως στα μικρότερα σε μέγεθος ατμοσφαιρικά σωματίδια, με διάμετρο έως και 2.5 μικρόμετρα (μm), $\text{PM}_{2.5}$, και σχετίζονται με τη μείωση του μέσου προσδόκιμου του ορίου ηλικίας, τον αυξημένο καρδιαγγειακό κίνδυνο, τις χρόνιες παθήσεις του αναπνευστικού συστήματος, τις κακοήθειες νεοπλασίες, τις αλλεργίες, τα αυτο-άνοσα νοσήματα και τις φλεγμονές, ακόμη και τις εγκεφαλικές αλλοιώσεις. Θεωρείται πως αυξημένες συγκεντρώσεις σε αιωρούμενα σωματίδια συνδέονται με αυξημένα ποσοστά θνησιμότητας.¹

Η ανάγκη για υπολογιστική ισχύ για τη μελέτη των νανοσωματιδίων στην ατμόσφαιρα

Οι ερευνητές (καθ. Βλάσης Μαυραντζάς, καθ. Σπύρος Πανδής, Δρ. Κατερίνα Καραδήμα) στο Εργαστήριο Στατιστικής Θερμοδυναμικής & Μακρομορίων του Τμήματος Χημικών Μηχανικών του Πανεπιστημίου Πατρών πραγματοποιούν προσομοιώσεις της μορφολογίας των νανοσωματιδίων χρησιμοποιώντας την υπολογιστική μέθοδο της μοριακής δυναμικής (ΜΔ).

«Με τη βοήθεια της μοριακής δυναμικής μπορούμε να κατανοήσουμε πληρέστερα την κατάσταση φάσης και τις δομικές ιδιότητες των σωματιδίων σε επίπεδο νανοκλίμακας. Μ' αυτόν τον τρόπο υπολογίζουμε γρήγορα, με ακρίβεια αλλά κυρίως με χαμηλό κόστος, ιδιότητες που παραδοσιακά μετρούνται εργαστηριακά με χρήση πολύπλοκων πειραματικών διατάξεων που κοστίζουν

σημαντικά», αναφέρει ο καθ. Μαυραντζάς και προσθέτει: «Ωστόσο, εάν οι προσομοιώσεις πραγματοποιούνταν με συμβατικούς υπολογιστικούς πόρους, θα απαιτούνταν αρκετά χρόνια για να ολοκληρωθούν και άρα να εξαχθούν αξιόπιστα αποτελέσματα, συγκρίσιμα με τις πειραματικές μετρήσεις».

High Performance Computing ARIS: η τεχνολογική λύση του ΕΔΕΤ για μοριακές προσομοιώσεις

Για την κατανόηση και την εξαγωγή πληροφοριών σχετικά με τις φυσικοχημικές ιδιότητες των αερολυμάτων, ο ομάδα του καθ. Μαυραντζά μελετά τον τρόπο και το βαθμό που αυτές οι ιδιότητες επηρεάζονται από (i) την παρουσία οργανικών μορίων (ή μιγμάτων αυτών) με διαφορετικές ιδιότητες (π.χ. διαφορετική διαλυτότητα ή πτητικότητα ή πολικότητα), (ii) τη συνολική ποσότητα οργανικής μάζας στα υπό εξέταση σωματίδια, που συνδέεται και με το μέγεθος του νανοσωματιδίου, (iii) τη σχετική υγρασία, και (iv) τη θερμοκρασία.

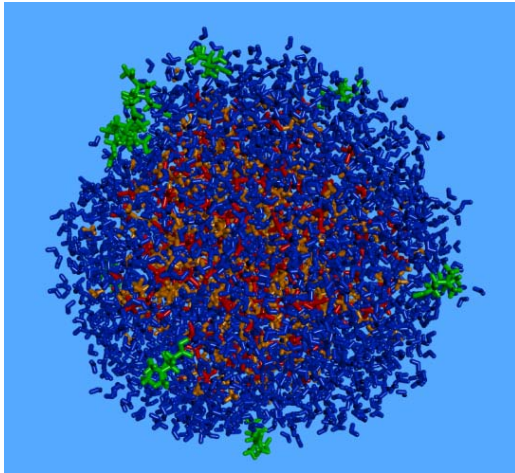
Η εξέταση όλων αυτών των παραμέτρων απαιτεί την προσομοίωση ενός μεγάλου αριθμού συστημάτων. Για το λόγο αυτό η ερευνητική ομάδα του καθ. Μαυραντζά απευθύνθηκε στο Εθνικό Δίκτυο Έρευνας και Τεχνολογίας προκειμένου να χρησιμοποιήσει την υπερ-υπολογιστική υποδομή ARIS για την εκτέλεση μεγάλου αριθμού και μεγάλης κλίμακας προσομοιώσεων σε εύλογο χρονικό διάστημα.

«Τα αποτελέσματά μας παρέχουν μια νέα προσέγγιση στο ζήτημα της μορφολογίας των ατμοσφαιρικών νανοσωματιδίων και συμβάλλουν στη βαθύτερη κατανόηση του βαθμού συμμετοχής διαφόρων οργανικών ενώσεων στις ετερογενείς χημικές αντιδράσεις και της διάρκειας ζωής τους στη σωματιδιακή φάση λόγω της οξειδωσης, θέματα που απασχολούν για πολλά χρόνια την επιστημονική κοινότητα που ασχολείται με την ατμοσφαιρική ρύπανση», αναφέρει ο καθ. Μαυραντζάς.

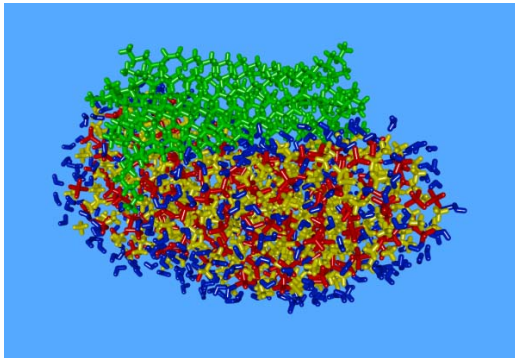
Τα ατμοσφαιρικά συστήματα που κατά κανόνα μελετούνται στη βιβλιογραφία με τη μέθοδο της μοριακής δυναμικής περιλαμβάνουν χημικές ενώσεις που βρίσκονται στην ατμόσφαιρα, αλλά συχνά (και έως πρόσφατα) περιορίζονταν μόνο σε οργανικά είδη και νερό. Στη μελέτη της ομάδας του καθ. Μαυραντζά υιοθετήθηκε μια πιο ρεαλιστική σύσταση σωματιδίων, που αποτελούνται τόσο από οργανικά είδη όσο και από ανόργανες ενώσεις, συμπεριλαμβανομένου του νερού, και ιόντα, ακριβώς όπως συμβαίνει στην πράξη. Οι προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής που διεξάγονται επιτρέπουν την παρακολούθηση του τρόπου σχηματισμού νανοσωματιδίων πολλών συστατικών που είναι πιθανόν να παρατηρηθούν στην ατμόσφαιρα και μας παρέχουν αποτελέσματα για τη μορφολογία τους, για ζητήματα που σχετίζονται με το μέγεθος και την τοπική τιμή της πυκνότητάς τους, για τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των μοριακών ειδών που συμμετέχουν στο νανοσωματίδιο, για την κινητικότητα και το βαθμό διάχυσης των συστατικών ειδών στη σωματιδιακή φάση, αλλά και για τη θερμοδυναμική φύση της ίδιας της σωματιδιακής φάσης (π.χ., αν αυτή αντιστοιχεί στην υγρή ή στην υαλώδη ή σε μια ενδιάμεση θερμοδυναμική κατάσταση).

Οι πληροφορίες σχετικά με τη δομή και τη μορφολογία των ατμοσφαιρικών σωματιδίων επιτρέπουν τη βελτίωση μοντέλων ατμοσφαιρικής χημείας μεγάλης κλίμακας που

χρησιμοποιούνται για τη μελέτη των διεργασιών που λαμβάνουν χώρα στην ατμόσφαιρα,ⁱⁱ και βοηθούν στην πρόβλεψη και στη λήψη μέτρων με στόχο τη μείωση της ατμοσφαιρικής ρύπανσης.ⁱⁱⁱ



Σχήμα 1: Προσομοιούμενο ατμοσφαιρικό σωματίδιο^{iv} (ισοδύναμης) διαμέτρου ίσης περίπου με 6 nm και υγρασίας κοντά στο 50% που αποτελείται από 10 οργανικά μόρια πινονικού οξέος (πράσινο), 200 ιόντα θειϊκού οξέος (κόκκινο), 400 ιόντα αμμωνίου (πορτοκαλί) και 3200 μόρια νερού (μπλε).



Σχήμα 2: Προσομοιούμενο ατμοσφαιρικό σωματίδιο^{iv} (ισοδύναμης) διαμέτρου ίσης περίπου με 4.2 nm και υγρασίας σχεδόν 20% που αποτελείται από 10 οργανικά μόρια κανονικού τριαντανίου (πράσινο), 200 ιόντα θειϊκού οξέος (κόκκινο), 400 ιόντα αμμωνίου (κίτρινο) και 400 μόρια νερού (μπλε).

«Το υπέρ-υπολογιστικό σύστημα ARIS έπαιξε καταλυτικό ρόλο στη διεξαγωγή όλων των προσομοιώσεων, καθώς οι απαιτούμενοι χρόνοι είναι της τάξης των μικροδευτερολέπτων, δηλαδή δισεκατομμυρίων χρονικών βημάτων προσομοίωσης. Επί της ουσίας, η διεξαγωγή, ολοκλήρωση και ανάλυση των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων θα ήταν αδύνατη αν δεν υπήρχε ο ARIS. Πρακτικά, δεν θα μπορούσαμε να λάβουμε ολοκληρωμένα και έγκυρα αποτελέσματα για άμεση σύγκριση με το πείραμα. Το σημαντικότερο κέρδος μάλιστα είναι πως έχουμε πλέον πιστοποιήσει την ικανότητα των προσομοιώσεων μας να αναπαράγουν πειραματικά δεδομένα με μεγάλη ακρίβεια και να ερμηνεύουν τους μοριακούς μηχανισμούς που συνεισφέρουν στην ιδιαίτερή τους συμπεριφορά. Η παρουσία τέτοιων ισχυρών υπολογιστικών υποδομών στη χώρα μας, σε συνδυασμό με την πρόοδο που έχει συντελεστεί τα τελευταία χρόνια στο πεδίο των ατομιστικών προσομοιώσεων, μας επιτρέπει να διεξάγουμε υπολογιστικά πειράματα αντίστοιχα με αυτά που εκτελούνται εργαστηριακά με τις πιο σύγχρονες πειραματικές διατάξεις σε μερικά από τα πιο φημισμένα εργαστήρια παγκοσμίως», σημειώνει ο καθ. Μαυραντζάς.

Σημειώνεται ότι για τους υπολογισμούς της ερευνητικής εφαρμογής χρησιμοποιήθηκαν 1.100.000 υπολογιστικές ώρες στο υπερ-υπολογιστικό σύστημα ARIS του ΕΔΕΤ. Η μέγιστη κλιμάκωσή της, δηλαδή ο μέγιστος αριθμός υπολογιστικών πυρήνων που χρησιμοποιήθηκαν ταυτόχρονα από μια διεργασία, ήταν 800.





Εθνικό Δίκτυο Έρευνας και Τεχνολογίας

 www.grnet.gr, hpc.grnet.gr

 hpc-info@lists.grnet.gr

 @grnet_gr


 @grnet.gr

 grnet

 GRNET EDET

Πανεπιστήμιο Πατρών

 lstm.chemeng.upatras.gr

 vlas@chemeng.upatras.gr

Παραπομπές

ⁱ <http://www.who.int/publications/10-year-review/health-guardian/en/index1.html>.

ⁱⁱ 13E. Baranzadeh, B. Murphy, J. Julin, S. Falahat, C. Reddington, et. al., *Geosci. Model Dev.* **9**, 2741 (2016).

ⁱⁱⁱ A. Megaritis, C. Fountoukis, P. Charalampidis, C. Pilinis, S.N. Pandis, *Atmos. Chem. Phys.* **13**, 3423 (2013).

^{iv} K.S. Karadima, V.G. Mavrantzas, S.N. Pandis, European Aerosol Conference (EAC 2017), Zurich, Switzerland, August 27-September 01, 2017.