

Borsa di studio attivata ai sensi di quanto disposto dal D.M. n. 1061 del 10/08/2021

Titolo del progetto: Verso una comprensione microscopica delle interazioni aerosol-nuvola che governano il bilancio radiativo dell'atmosfera

La borsa sarà attivata sul seguente corso di dottorato accreditato per il XXXVII ciclo:

FISICA

Responsabile scientifico: John Russo

Area per la quale si presenta la richiesta: GREEN

Numero di mensilità da svolgere in azienda: 12

Numero di mensilità da svolgere all'estero: 12 presso IBM Research, The Hartree Centre STFC Laboratory, Sci-Tech Daresbury Warrington, Warrington WA4 4AD, UK,

Azienda: IBM Research, The Hartree Centre STFC Laboratory, Sci-Tech Daresbury Warrington, Warrington WA4 4AD, UK,

Il Dipartimento è disponibile a cofinanziare per un importo pari a euro: 10000

Dipartimento finanziatore: DIPARTIMENTO DI FISICA con delibera del 20/9/2021

Progetto di ricerca:

Il problema degli effetti degli aerosol sulla formazione delle nuvole è attualmente considerato una delle più importanti questioni irrisolte nella modellazione numerica del clima terrestre. Gli aerosol sono particelle liquide e solide sospese nell'atmosfera che possono provenire da una varietà di fonti, tra cui tempeste di polvere, combustione di biomassa, attività vulcanica, attività industriale umana, e può persino origini extra-terrestri. Secondo il rapporto sui cambiamenti climatici dell'IPCC del 2021 [1], la maggiore incertezza nella stima dei forzanti radiativi (cioè l'influenza che un dato fattore climatico ha sul bilancio energetico dell'atmosfera) risiede negli effetti dell'albedo delle nuvole che sono dovuti alla capacità di nucleazione del vapore d'acqua delle particelle di aerosol. A seconda della loro composizione chimica, delle loro dimensioni e delle condizioni ambientali, le particelle di aerosol agiscono come superfici di nucleazione per la condensazione delle nuvole o la formazione di ghiaccio, controllando così l'impatto radiativo delle nuvole. La comprensione delle interazioni aerosol-nuvole è quindi un requisito per ottenere modelli climatici più accurati.

Le difficoltà associate allo studio della nucleazione controllata dagli aerosol sono due. Prima di tutto, le simulazioni hanno bisogno di un parametro d'ordine appropriato per l'identificazione dei nuclei cristallini. Il secondo problema deriva dal fatto che la nucleazione è un processo attivo, che coinvolge eventi rari che si verificano in modo casuale in tutto il volume del sistema. Entrambi i problemi sono ancora più difficili nello studio della nucleazione del ghiaccio [2], dove i nuclei incipienti nascono in condizioni molto lontane dalla fase bulk, e dove i modelli molecolari di acqua sono notoriamente molto difficili da cristallizzare.

In questo progetto puntiamo a risolvere entrambi i problemi utilizzando una nuova generazione di parametri d'ordine e di potenziali basati su tecniche di Machine Learning. Le reti neurali sono sempre più impiegate nella scienza dei materiali, poiché possono essere addestrate su modelli molecolari computazionalmente costosi e generare modelli parametrici che hanno le stesse proprietà strutturali della simulazione atomistica completa, ma con un numero ridotto di gradi di libertà. Sono anche incredibilmente accurati nel rilevamento di strutture cristalline ordinate incorporate in una fase amorfa [3].

Miriammo a sviluppare una nuova generazione di potenziali per descrivere l'interazione tra l'acqua e la superficie di alcuni degli agenti aerosol più efficaci, tra cui particelle di argilla (SiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 e MgO), minerali di argilla (ad esempio illite, caolinite) ed efficaci agenti nucleatori di ghiaccio come lo ioduro di argento. L'obiettivo sarà quello di valutare come le proprietà di nucleazione del ghiaccio di questi nuclei dipendano dai seguenti parametri: insolubilità dell'acqua, dimensioni, idrofobicità, somiglianza dei legami chimici, somiglianza cristallografica e numero di siti attivi. I nostri risultati ci permetteranno di capire meglio l'impatto degli aerosol sulle proprietà radiative delle nuvole, e di affrontare una delle maggiori sfide contemporanee nella modellazione del clima.

Il progetto beneficerà della partnership con il laboratorio IBM Research di Daresbury, Regno Unito. IBM è il leader mondiale nel mercato software per l'intelligenza artificiale [4] ed è il partner ideale per un progetto che combina la scienza dei materiali con l'intelligenza artificiale per affrontare il problema del cambiamento climatico. Il ricercatore sarà ospitato dal Dr. Fausto Martelli di IBM, che è un esperto sia nella nucleazione dell'acqua che nei metodi di apprendimento automatico e ha offerto pieno supporto per questo progetto.

Referenze

[1] IPCC, 2021: Climate Change 2021: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change [Masson-Delmotte, V., P. Zhai, A. Pirani, S.L. Connors, C. Pean, S. Berger, N. Caud, Y. Chen, L. Goldfarb, M.I. Gomis, M. Huang, K. Leitzell, E. Lonnoy, J.B.R. Matthews, T.K. Maycock, T. Waterfield, O. Yelekci, R. Yu, and B. Zhou (eds.)]. Cambridge University Press. In Press.

[2] Russo, John, Flavio Romano, and Hajime Tanaka. "New metastable form of ice and its role in the homogeneous crystallization of water." *Nature Mat.* 13, 733 (2014)

[3] Leoni, Fabio, and John Russo. "Non-classical nucleation pathways in stacking-disordered crystals." *Phys. Rev. X* 11, 031006 (2021)

[4] <https://www.idc.com/getdoc.jsp?containerId=prUS47482321>

Titolo del progetto (inglese): Towards a microscopic understanding of Aerosol-Cloud Interactions that govern the radiative balance of the atmosphere

Progetto di ricerca (inglese):

The problem of the cloud formation effects of aerosols is currently considered one of the most important unresolved issues in climate modelling. Aerosols are liquid and solid particles suspended in the atmosphere that can come from a variety of sources, including dust storms, biomass burning, volcanic activity, human industrial activity and even extra-terrestrial origins.

According to the 2021 IPCC's Climate Change Report [1], the largest uncertainty in the estimation of radiative forcing terms (i.e. the influence a given climatic factor has on the energy balance of the atmosphere) lies in the cloud albedo effect, namely the nucleation capability of aerosol particles to form clouds. Depending on their chemical composition, their size, and environmental conditions, aerosol particles act as nucleating surfaces for either cloud condensation or ice formation, thus controlling the radiative impact of clouds. Understanding the aerosol-cloud interactions is thus a requisite towards more accurate climate models.

The difficulties associated with studying aerosol-controlled nucleation are twofold. First of all, simulations need an

appropriate order parameter for the identification of crystal nuclei from simulation trajectories. The second problem stems from the fact that nucleation is an activate process, which involves rare events that occur randomly through the system. Both problems are even more aggravating in the study of ice nucleation [2], where the incipient nuclei are born at conditions which are very far from the bulk phase, and where molecular models of water are notoriously very poor crystal formers.

In this project we aim at resolving both issues by using a new generation of order parameters and potentials based on Machine Learning techniques. Deep Neural Networks are being increasingly adopted as valuable tools in material science, as they can be trained on computationally expensive molecular models and generate parametric models that have the same structural properties of the full atomistic simulation but with a reduced number of degrees of freedom. They are also incredibly accurate in the detection of ordered crystalline structures embedded in an amorphous phase [3].

We aim at developing a new generation of potential models to describe the interaction between water and the surface of some of the most effective aerosols agents, including clay particles (SiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 and MgO), clay minerals (e.g. illite, kaolinite) and effective ice nucleating agents such as silver iodide. The goal will be to assess how the ice nucleating properties of these nuclei depends on the following parameters: water insolubility, size, hydrophobicity, chemical bond similarity, crystallographic similarity, and the number of active sites. Our results will allow us to better understand the impact of aerosols on the radiative properties of clouds, and hopefully tackle one of the biggest challenges in climate modelling today.

The project will benefit from the partnership with IBM Research's lab in Daresbury, UK. IBM is the Worldwide market share leader in Artificial Intelligence [4] and is the ideal partner for a project combining material science with artificial intelligence to tackle the problem of Climate Change. The researcher will be hosted by Dr. Fausto Martelli from IBM, who is an expert in both water nucleation and machine learning methods and has offered full support for this project.

References

[1] IPCC, 2021: Climate Change 2021: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change [Masson-Delmotte, V., P. Zhai, A. Pirani, S.L. Connors, C. Pean, S. Berger, N. Caud, Y. Chen, L. Goldfarb, M.I. Gomis, M. Huang, K. Leitzell, E. Lonnoy, J.B.R. Matthews, T.K. Maycock, T. Waterfield, O. Yelekci, R. Yu, and B. Zhou (eds.)]. Cambridge University Press. In Press.

[2] Russo, John, Flavio Romano, and Hajime Tanaka. "New metastable form of ice and its role in the homogeneous crystallization of water." *Nature Mat.* 13, 733 (2014)

[3] Leoni, Fabio, and John Russo. "Non-classical nucleation pathways in stacking-disordered crystals." *Phys. Rev. X* 11, 031006 (2021)

[4] <https://www.idc.com/getdoc.jsp?containerId=prUS47482321>