

## SCHEDA TECNICA PER L'ACQUISTO DI LICENZA SoFi RT

Nell'ambito del progetto ITINERIS è sorta la necessità di acquisire una licenza per l'utilizzo del software "Source finder pro Real Time" (SoFi RT, Datalystica inc.) per l'elaborazione statistica dei dati di composizione chimica dell'aerosol atmosferico ed in particolare per il "source apportionment" della sua frazione organica misurate dai sistemi di spettrometri di massa per aerosol (AMS/ACSM, Aerodyne inc.) già acquisiti grazie a progetti infrastrutturali, come il PON PER-ACTRIS ed utilizzati in campagne di misura nell'ambito di ITINERIS. Si richiede la fornitura della licenza per almeno otto unità di personale che stanno lavorando al progetto e la formazione dedicata di tale personale per il corretto utilizzo del software. L'utilizzo della licenza deve essere garantito fino alla data di fine progetto, ovvero il 31 ottobre 2025.

Il riconoscimento e la quantificazione delle sorgenti ("source apportionment") dell'aerosol atmosferico (PM) ed in particolare della sua frazione organica riveste un ruolo sempre più importante nella comprensione dei suoi impatti su salute umana e clima. In particolare, identificare quali attività antropiche influiscono maggiormente sulle concentrazioni di aerosol in atmosfera diventa fondamentale nella pianificazione di azioni mitigative dell'inquinamento specialmente in aree urbane/densamente popolate. Esistono diversi metodi di source apportionment basati su vari tipi di analisi statistica multivariata applicata a misure di aerosol in specifici siti recettori. La Positive matrix factorization (PMF) è di gran lunga il modello statistico più utilizzato su dataset di spettrometria di massa per aerosol (AMS/ACSM). SoFi è di gran lunga il software PMF più avanzato con una moltitudine di funzionalità per supportare la pre-analisi, i calcoli PMF e la post-analisi. Per questo motivo è considerato ormai come un software di riferimento imprescindibile e utilizzato anche in ambito ACTRIS e in progetti europei quali RI-URBANS (nel quale viene valutata proprio il suo nuovo modulo Real-Time o RT per il quale chiediamo la licenza).

Risulta quindi cruciale la sua acquisizione per una elaborazione accurata e state of the art dei dati nell'ambito ITINERIS, sia dagli osservatori fissi (CMN-PV), che delle piattaforme mobili (AEROLAB, Voyager e SENECA III). L'utilizzo di questo software permette di mettere in relazione la dinamica verticale del PBL non solo alla variazione delle concentrazioni, ma anche alla modulazione diurna delle sorgenti stesse.

SoFi RT fornirà la ripartizione delle sorgenti in tempo reale sulla base di un approccio che unisce PMF e Chemical Mass Balance (CMB, il quale utilizza profili determinati da un PMF a rotazione automatizzata) sulle misure ACSM di lungo periodo, sistematiche e continue previste da ACTRIS.

Le caratteristiche tecniche richieste sono da intendersi quali specifiche minime per la corretta esecuzione del "source apportionment" di dati ACSM (ToF e quadrupole), così come richiesta da ACTRIS/RIURBANS (procedura descritta in Chen et al., 2022).

- Importazione dei dati:
  - File supportati:
    - PMF input: .itx; .xls(x)
    - Serie temporali/profilo esterni: .itx, .xls(x), .csv, .dat, .txt
  - Matrice di errore:
    - importabili come matrici
    - calcolo automatico della matrice di errore seguendo la procedura descritta da Polissar et al. (1998) or Norris et al. (2014)
  - medie temporali nell'intervallo desiderato: possibilità di calcolare sui dati e/o sugli errori la media per qualsiasi risoluzione temporale inferiore con un clic
- Pre-analisi: grafici completamente personalizzabili di alta qualità. Possibilità di confrontare i propri dati con dati esterni. Ad esempio, grafici a dispersione di variabili (assolute o frazionarie) rispetto a elementi esterni, rapporti

- segnale-rumore (S/N) dell'intera matrice o solo per ioni selezionati per ciascun punto temporale e in media. Possibilità di definire "classi" di dati all'interno del dataset e di analizzarle separatamente.
- Preparazione/esecuzione calcoli PMF
    - Preparazione delle matrici per ME2-solver: eliminazione righe / colonne vuote, sostituzione singole celle con indicatore di valore mancante, come richiesto per il ME-2 solver
    - Creazione "blacklist" di dati (dati da escludere): Gli utenti possono facilmente definire classi su serie temporali o variabili. Opzione per definire punti nella blacklist: singoli punti orari/variabili, basati su indici per singoli o in blocco, selezione in blocco tramite marquee, in base a elenco esterno, in base a determinati mesi, giorni (singoli giorni ma anche fine settimana/feriali), ore e minuti.
    - "Downweighting" di variabili:
      - per l'intera matrice di dati: passo per passo (valori personalizzabili per variabili deboli e cattive) o in funzione di  $1/(S/N)$ , basato sul S/N medio o per cella (singolo punto temporale) S/N
      - le singole variabili possono essere ridimensionate con valori personalizzabili
    - numero di fattori: eseguire (ripetutamente) il PMF su una serie di fattori
    - impostazioni punto di partenza ("seed"): casuale (casuale per ogni esecuzione PMF), pseudo-casuale (casuale per la prima esecuzione PMF, tutte le successive utilizzeranno quindi lo stesso seed) e in base al riferimento ("constrain")
    - impostazione riferimenti ("constrains"): Le serie temporali o i profili possono essere vincolati con dati esterni. I vincoli casuali e controllati dalla sensibilità sono facili da impostare:
      - - a-value (random, exact, sensitivity analysis, ME-2 limits)
      - - pulling equations
      - - fpeak (per valutazione ambiguità rotazionale)
    - Bootstrapping: non bloccato, a blocchi e controllato dall'utente (gruppi mensili, giornalieri, orari, definiti dall'utente)
    - rolling PMF/approccio a finestra mobile: completamente automatizzato, facile da combinare con la tecnica del valore a casuale e il bootstrap
    - C-value approach (relative error scaling): C- value specifico per l'utente facile da impostare, analisi dei residui specifica per confrontare i residui
    - Multi-time PMF: matrici di input PMF preparate automaticamente
    - Controllo completo dei criteri di convergenza
    - gestione matrici di grandi dimensioni.
  - Post-analisi: ampia gamma di opzioni grafiche, possibilità di visualizzare molte soluzioni PMF e la loro media. Possibilità di calcolare la media delle soluzioni PMF (da poche fino a diverse migliaia). Pieno controllo su tutte le soluzioni definendo criteri per soluzioni ragionevoli dal punto di vista ambientale.
  - Supporto: supporto tecnico e scientifico su software/PMF.

E' da intendersi che la fornitura della licenza include il supporto tramite appositi training di formazione per l'apprendimento del pieno e corretto utilizzo della stessa.

## Termine di consegna

20

La garanzia fornita dall'aggiudicatario dovrà coprire tutto il periodo di validità della licenza, ovvero dalla fornitura fino al 31/10/2025. Per l'intero periodo di vigenza della garanzia, l'aggiudicatario si impegna a fornire gratuitamente gli eventuali upgrade alle licenze software.

Si richiede che la licenza sia inviata, in formato digitale su apposito supporto, con costi di spedizione a carico dell'aggiudicatario, al CNR-ISAC sede di Bologna, all'attenzione della dott.ssa Angela Marinoni:

Istituto di Scienze dell'Atmosfera e del Clima del Consiglio Nazionale delle Ricerche, Via Gobetti 101, 40129 Bologna, Italy

CNR ISAC - ISTITUTO DI SCIENZE DELL'ATMOSFERA E DEL CLIMA

SEDE DI BOLOGNA - Via P. Gobetti 101 - 40129 Bologna (BO) ITALY - Tel. +39 051 6399626

Sede Secondaria di ROMA - Via Fosso del Cavaliere, 100 - 00133 Roma (RM) - Tel. +39 06 4993- 4277/4327

Sede Secondaria di LECCE - St. Prov. Lecce-Monteroni Km 1,200 - 73100 Lecce (LE) - Tel. +39 0832 422- 406/401/413

Sede Secondaria di TORINO - Corso Fiume 4 - 10133 Torino (TO) - Tel. +39 011 6606376

Sede Secondaria di PADOVA - Corso Stati Uniti 4 - 35127 Padova (PD) - Tel. +39 049 8295926

Sede Secondaria di LAMEZIA TERME - Zona Industriale-Comparto 15-presso Fondazione Mediterranea Terina-88046 Lamezia Terme (CZ)

Sede di lavoro di CAGLIARI - c/o Dipartimento di Fisica, Università di Cagliari - St. Prov. Monserrato Sestu Km. 0,700 - 09042 Cagliari (CA) Tel. +39 070 6754905