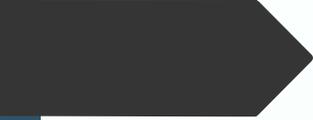


**Introduzione al
source
apportionment (SA)
tramite modelli a
recettore (RM)**

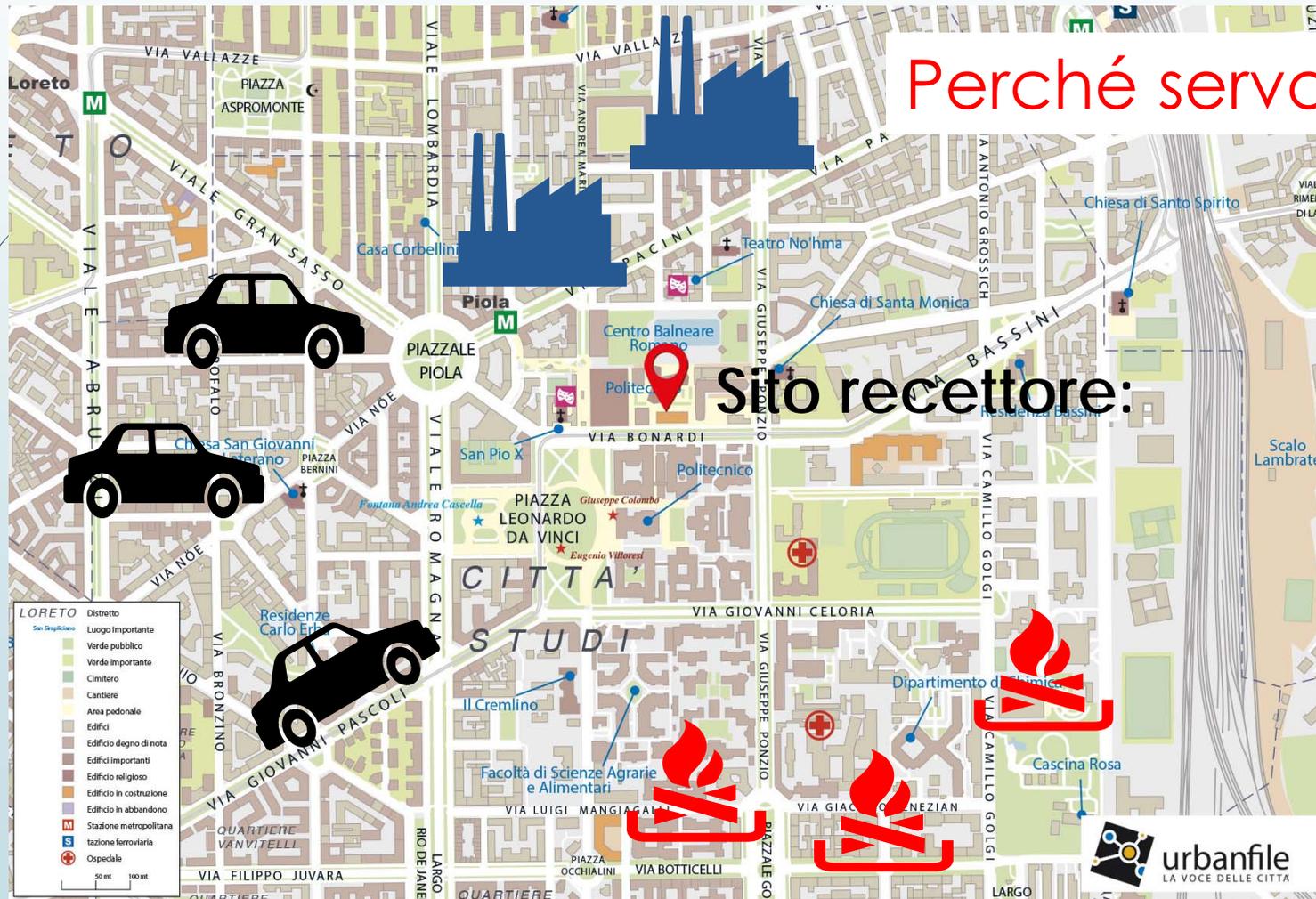


Source apportionment e modelli a recettore

- Per Source Apportionment mediante modelli a recettore si intende la ripartizione del contributo quantitativo in un punto, detto recettore, delle diverse categorie di sorgenti di un inquinante o di un insieme di inquinanti attraverso algoritmi che considerano le immissioni rilevate nel recettore, senza conoscere a-priori le quantità emesse dalle diverse sorgenti presenti nel territorio che possono influire direttamente o indirettamente.

Source apportionment e modelli a recettore... ilPM

Perché servono?



Qualità dell'aria - PM10

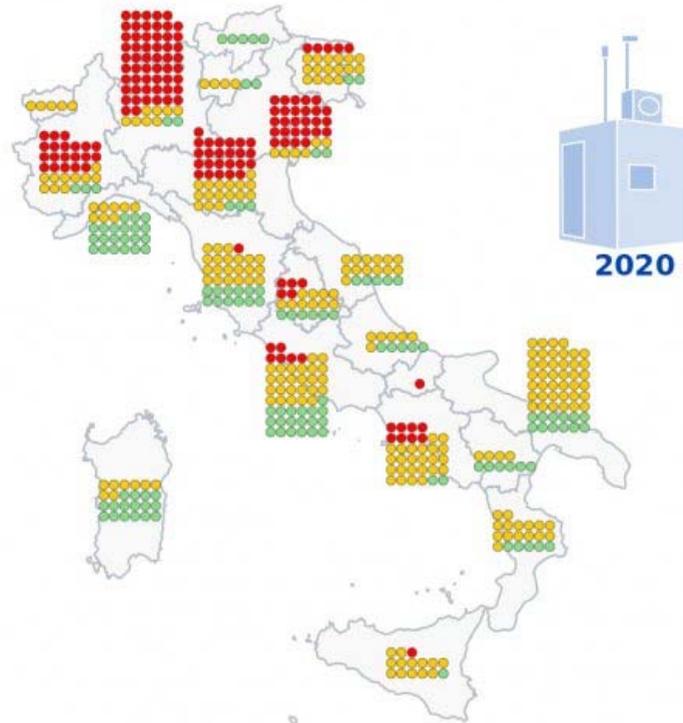


PM10, cos'è

Le polveri fini, denominate PM10 (diametro inferiore a 10 µm), sono delle particelle inquinanti presenti nell'aria che respiriamo. Possono essere di origine naturale e/o antropica (riscaldamento, industrie, traffico, fenomeni di attrito su strada, ecc.)

Punti di campionamento che hanno superato il **limite di legge** (●), superato il **valore di riferimento** dell'OMS (●), e rispettato il **valore di riferimento** dell'OMS (●)

Media annuale 40 ug m-3
Media annuale 20 ug m-3



534 punti di campionamento
379 entro il limite di legge
155 superamenti del limite di legge
129 entro il valore di riferimento OMS
405 superamenti del valore di riferimento OMS



Limite di legge: 50 microgrammi/m³ da non superare più di **35 volte** in un anno



Valore di riferimento OMS: 50 microgrammi/m³ da non superare per più di **3 volte** in un anno

Il raggiungimento del rispetto del valore di riferimento dell'OMS è uno dei 17 obiettivi per lo sviluppo sostenibile contenuti nell'Agenda 2030 dell'ONU

Source apportionment e modelli a recettore... ilPM

Qualora le concentrazioni siano superiori ai valori limite o ai valori obiettivo dell'UE, le regioni devono predisporre i piani di qualità dell'aria (AQP) conformemente alle direttive sulla qualità dell'aria ambiente (AAQD art 1.18). A sostegno di tale processo, devono essere fornite informazioni sull'origine dell'inquinamento.

LIMITAZIONI PERMANENTI PER GENERATORI DI CALORE A BIOMASSA LEGNOSA (STUFE E CAMINETTI)

In vigore nei periodi indicati a prescindere dai livelli di inquinamento dell'aria su tutto il territorio regionale



DIVIETO dal 1° ottobre 2018:

- di utilizzo di generatori di classe ambientale 0 e 1 stella → per **impianti esistenti**
- di installazione di generatori di classe inferiore a 3 stelle → per **nuovi impianti**



DIVIETO dal 1° gennaio 2020:

- di utilizzo di generatori di classe ambientale 0, 1 e 2 stelle → per **impianti esistenti**
- di installazione di generatori di classe inferiore a 4 stelle → per **nuovi impianti**



OBBLIGO dal 1° ottobre 2018

di utilizzo di **pellet** certificato di classe A1 nei generatori di calore per il riscaldamento domestico

LIMITAZIONI TEMPORANEE DI 1° LIVELLO (dall'11 gennaio 2021)

Scattano dopo 4 giorni consecutivi di PM10 elevato e si aggiungono alle limitazioni già vigenti



STOP AI VEICOLI

SOLO nelle province interessate dall'attivazione

Comuni in Fascia 1 e 2 con più di 30 mila abitanti

Altri Comuni in Fascia 1 in caso di adesione volontaria

Altri Comuni in Fascia 2 in caso di adesione volontaria

Benzina Euro 0 - 1 permanenti per tutti i Comuni in Fascia 1 e 2

lun-ven 7.30-19.30

Diesel Euro 0 - 1 - 2 - 3 (anche con FAP*)

lun-ven 7.30-19.30 (tutti i veicoli)
sab e festivi 8.30-18.30 (solo autovetture)

Diesel Euro 4 (anche con FAP*)

8.30-18.30 (solo autovetture)

(*) sono limitati tutti i veicoli diesel anche se dotati di FAP

Regione Lombardia : PRIA Piano Regionale degli interventi sulla qualità dell'aria



Source apportionment e modelli a recettore... ilPM

Qualora le concentrazioni siano superiori ai valori limite o ai valori obiettivo dell'UE, le regioni devono predisporre i piani di qualità dell'aria (AQP) conformemente alle direttive sulla qualità dell'aria ambiente (AAQD art 1.18). A sostegno di tale processo, devono essere fornite informazioni sull'origine dell'inquinamento.

L'AAQD menziona anche fonti specifiche come l'inquinamento transfrontaliero (art. 1.20), i superamenti che possono essere attribuiti a fonti naturali (art. 20) o la sabbiatura/salatura invernale delle strade (art. 21) specificando le implicazioni dirette che possono avere sui piani di qualità dell'aria.

Articolo 20, comma 2:

Nei casi in cui la Commissione è informata di un superamento imputabile a fonti naturali ai sensi del paragrafo 1, detto superamento non è considerato tale ai fini della presente direttiva.



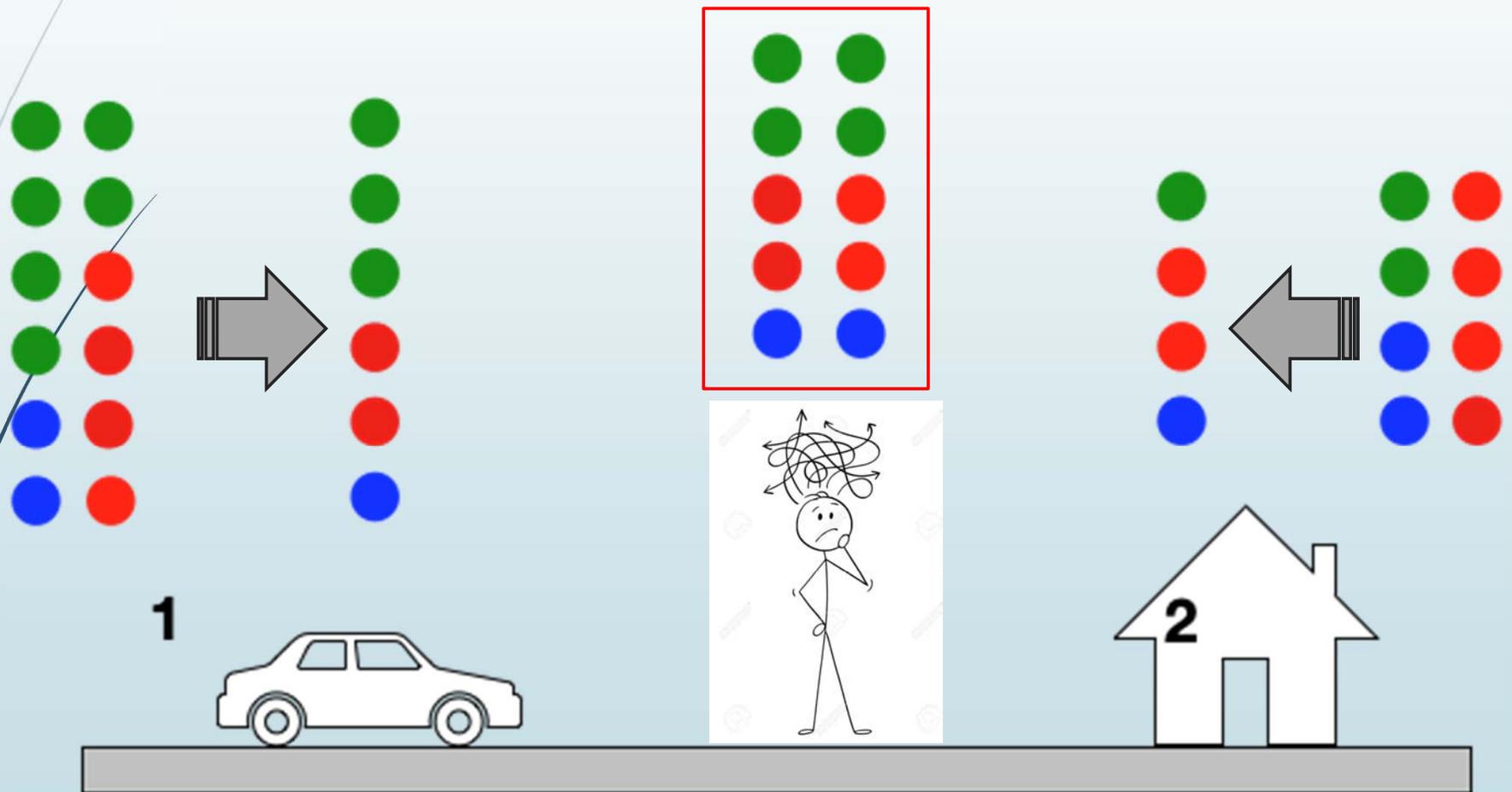
Source apportionment e modelli a recettore... ilPM

Qualora le concentrazioni siano superiori ai valori limite o ai valori obiettivo dell'UE, le regioni devono predisporre i piani di qualità dell'aria (AQP) conformemente alle direttive sulla qualità dell'aria ambiente (AAQD art 1.18). A sostegno di tale processo, devono essere fornite informazioni sull'origine dell'inquinamento.

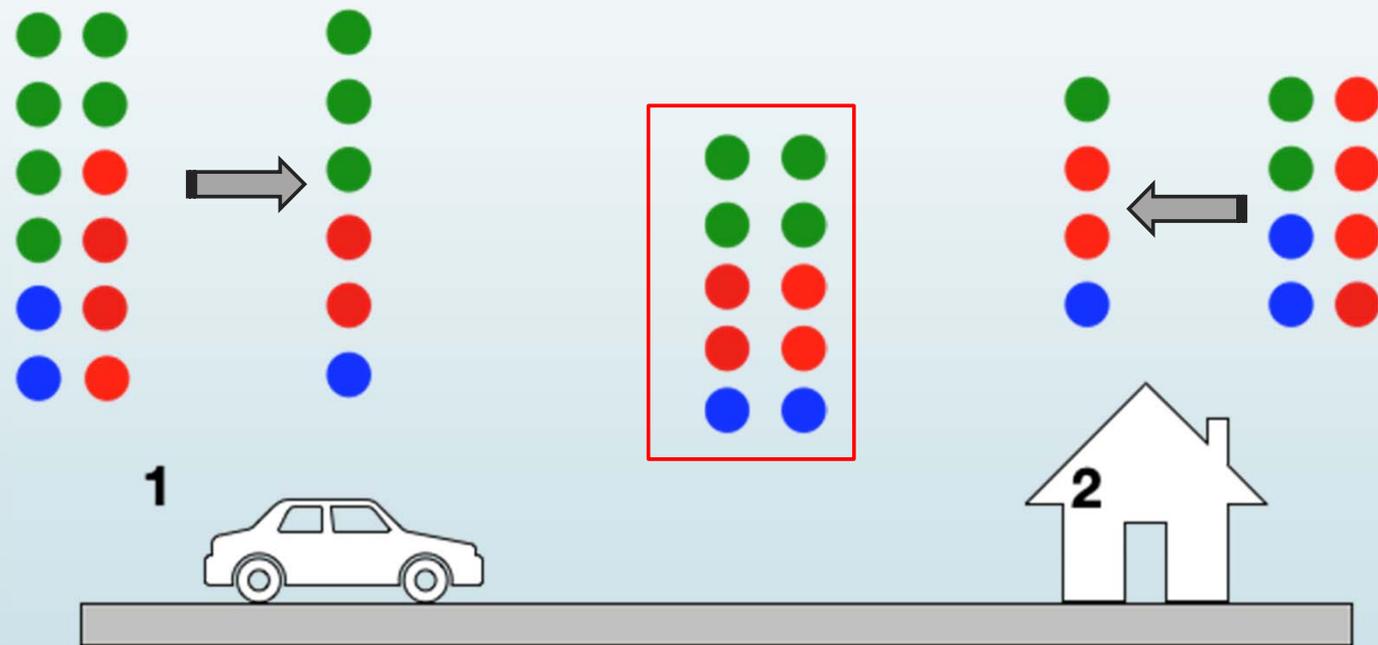
L'AAQD menziona anche fonti specifiche come l'inquinamento transfrontaliero (art. 1.20), i superamenti che possono essere attribuiti a fonti naturali (art. 20) o la sabbatura/salatura invernale delle strade (art. 21) specificando le implicazioni dirette che possono avere sui piani di qualità dell'aria.

L'obiettivo di fornire informazioni sulla ripartizione delle fonti nell'ambito dell'AAQD è pertanto quello di sostenere la progettazione di piani per la qualità dell'aria, ossia individuare le misure di qualità dell'aria più efficaci da attuare. L'obiettivo è quello di fornire informazioni sulla ripartizione delle fonti.

Quali sono le sorgenti degli inquinanti osservati nel sito recettore?



Quali sono le sorgenti degli inquinanti osservati nel sito recettore?



A numero di ●
 B numero di ●
 C numero di ●

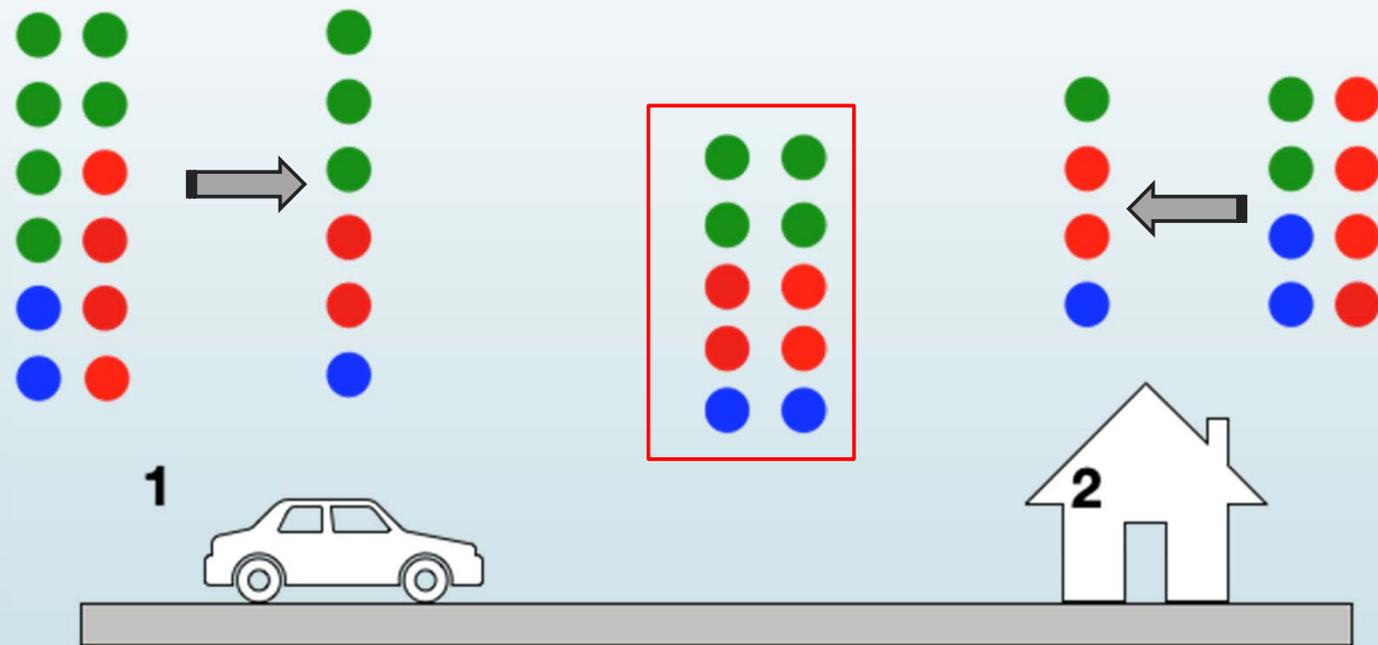
$$[A] = M_1 * fa_1 + M_2 * fa_2$$

$$[B] = M_1 * fb_1 + M_2 * fb_2$$

$$[C] = M_1 * fc_1 + M_2 * fc_2$$

- M_i è il contributo in massa della sorgente i -esima al recettore.
- fx_i è il fattore di emissioni della specie x della sorgente i -esima

Quali sono le sorgenti degli inquinanti osservati nel sito recettore?



A numero di ●
B numero di ●
C numero di ●

$$\begin{aligned} [A] &= M_1 * fa_1 + M_2 * fa_2 \\ [B] &= M_1 * fb_1 + M_2 * fb_2 \\ [C] &= M_1 * fc_1 + M_2 * fc_2 \end{aligned}$$

Se conosco $fa_1, fb_1, fc_1,$
 $fa_2, fb_2, fc_2,$

Sistema di 3 equazioni in 2 incognite: risolvibile

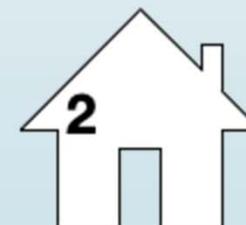
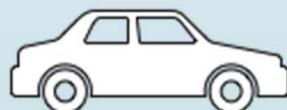
Quali sono le sorgenti degli inquinanti osservati nel sito recettore?



$$\begin{aligned} [A] &= 8 \\ [B] &= 6 \\ [C] &= 4 \end{aligned}$$



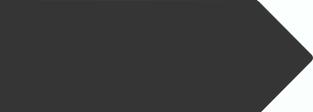
1



A numero di ●
B numero di ●
C numero di ●

$$\begin{aligned} M_1 &= ? \\ M_2 &= ? \end{aligned}$$

**Problema di source
apportionment risolvibile
con modello a recettore**



Source apportionment e modelli a recettore

- ▶ Alcuni modelli a recettore richiedono la conoscenza **quantitativa** delle emissioni delle categorie di **sorgenti** e, combinando queste informazioni con le concentrazioni misurate al sito recettore, ne ricavano il relativo contributo.
- ▶ Il Chemical Mass Balance (**CMB**) è uno dei più noti tra i modelli a recettore appartenenti a questa prima classe

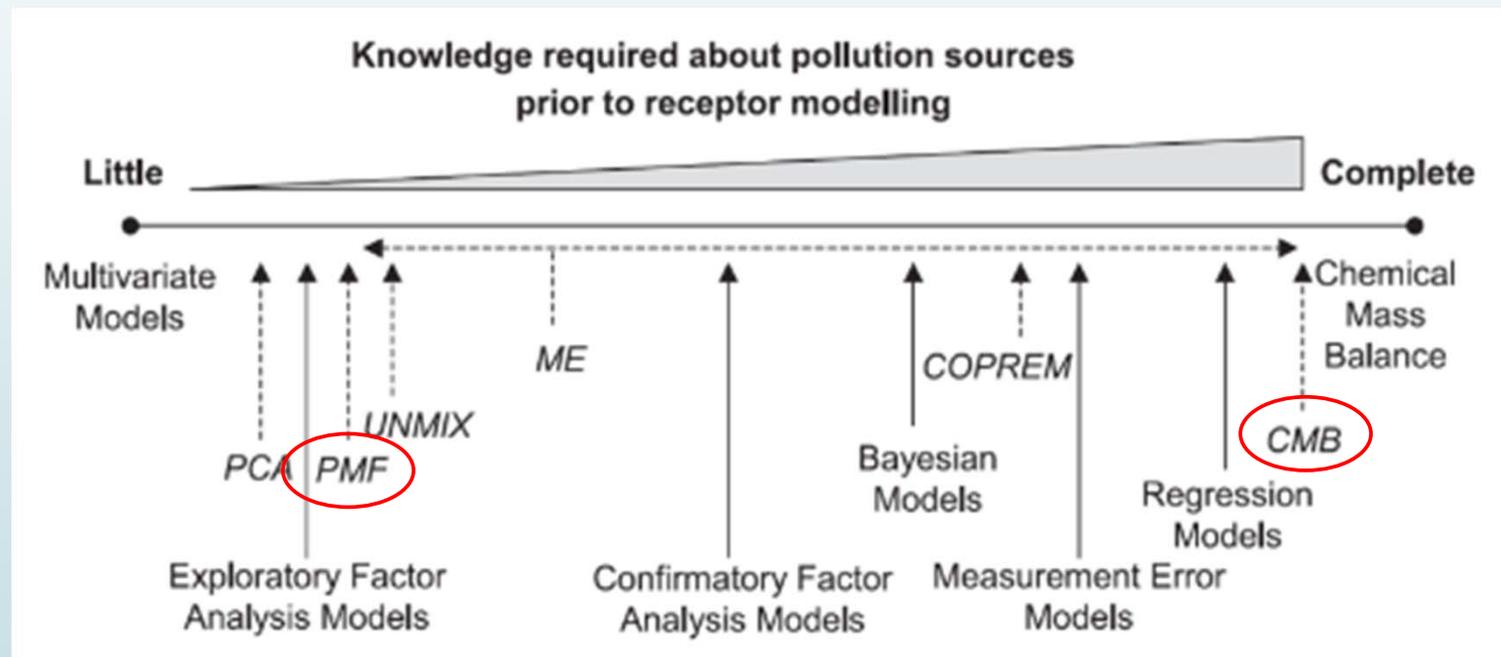


Source apportionment e modelli a recettore

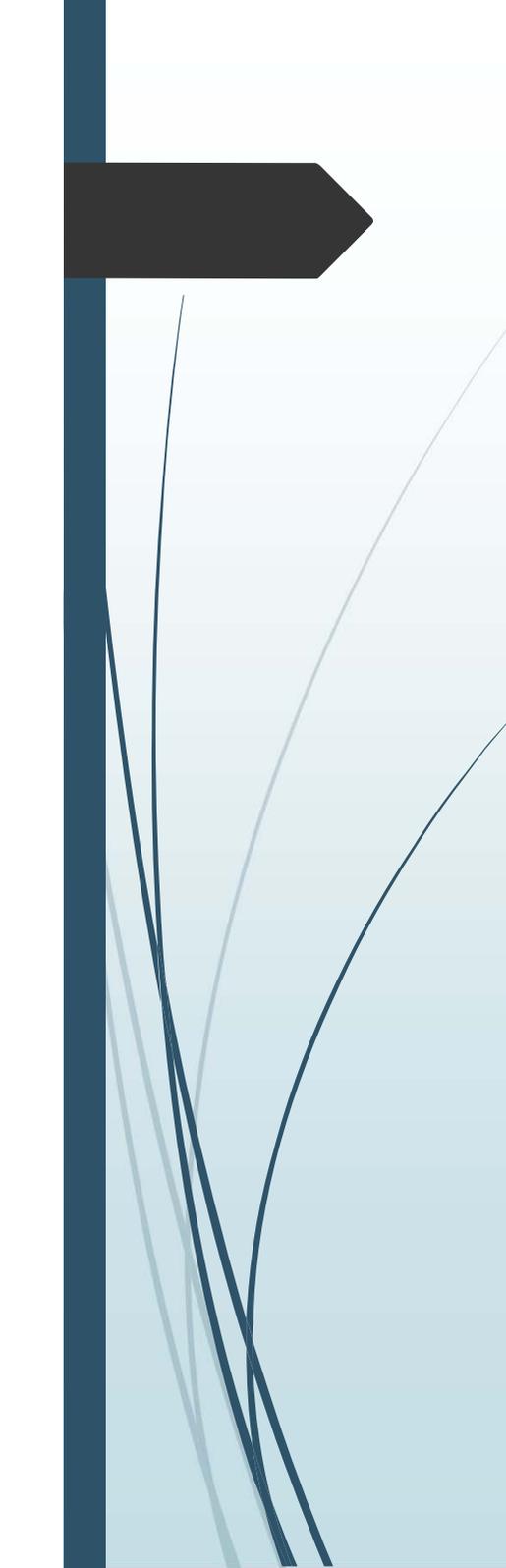
- ▶ Alcuni modelli a recettore richiedono la conoscenza **quantitativa** delle emissioni delle categorie di **sorgenti** e, combinando queste informazioni con le concentrazioni misurate al sito recettore, ne ricavano il relativo contributo.
- ▶ Il Chemical Mass Balance (**CMB**) è uno dei più noti tra i modelli a recettore appartenenti a questa prima classe.
- ▶ Altri modelli, sfruttando la **variabilità intrinseca nel database** delle immissioni al recettore, stimano sia il contributo che la composizione quantitativa delle emissioni delle categorie di sorgenti.

Source apportionment e modelli a recettore

- La Positive Matrix Factorization (PMF) appartiene a questa seconda classe.



- Nella sua versione 5 (PMF5 USA-EPA) sono state implementate alcune opzioni che consentono di miscelare in parte le caratteristiche delle due classi citate di modelli a recettore (ME o Multilinear Engine).



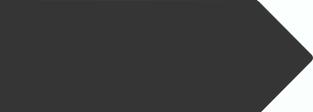
Source apportionment e modelli a recettore

- ▶ I modelli a recettore sono algoritmi di **natura statistica**, che non tengono conto delle trasformazioni che i vari inquinanti possono subire nel trasporto dalla sorgente al recettore.
- Equazioni che descrivono l'equilibrio chimico
- Equazioni che descrivono la cinetica di reazione
- Equazioni che descrivono i processi di diffusione
- Equazioni che descrivono i processi di rimozione



Source apportionment e modelli a recettore

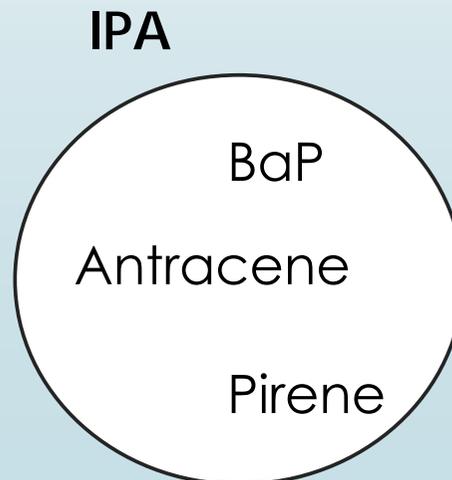
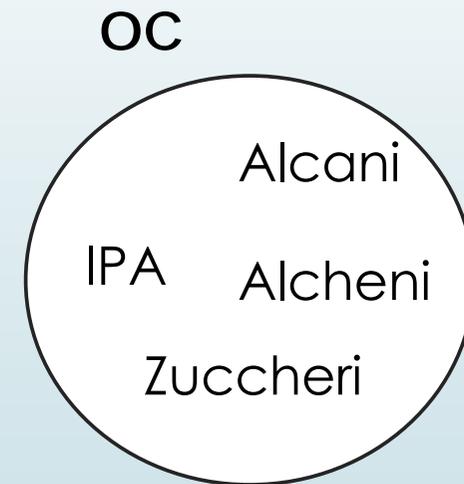
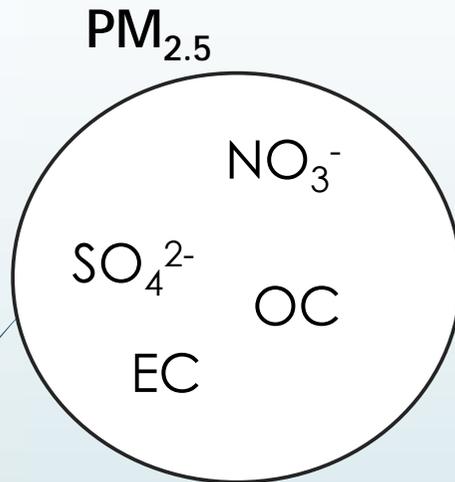
- I modelli a recettore sono algoritmi di **natura statistica**, che non tengono conto delle trasformazioni che i vari inquinanti possono subire nel trasporto dalla sorgente al recettore.
- Tuttavia, anzi proprio per tale motivo, richiedono specifiche competenze all'utilizzatore sia riguardanti i **processi chimico-fisici** che gli inquinanti possono subire, sia sulle **tecniche di campionamento** e di analisi, che una **conoscenza del territorio** oggetto di studio, al fine di poter adottare/modificare in modo efficace i parametri previsti dal modello, poter valutare adeguatamente i limiti del modello ed infine poter interpretare adeguatamente i risultati prodotti.

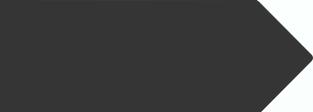


Nomenclatura

- ▶ **Source apportionment** la ripartizione del contributo quantitativo in un punto, detto recettore, delle diverse categorie di sorgenti di un inquinante o di un insieme di inquinanti
- ▶ **Modello a recettore** algoritmi di natura statistica per la risoluzione di un problema di source apportionment
- ▶ **Variabile globale:** insieme di specie chimiche differenti che nel contesto in studio possono essere considerate nel loro insieme come un unico inquinante

Variabile globale





Nomenclatura

- ▶ Source apportionment la ripartizione del contributo quantitativo in un punto, detto recettore, delle diverse categorie di sorgenti di un inquinante o di un insieme di inquinanti
- ▶ Modello a recettore algoritmi di natura statistica per la risoluzione di un problema di source apportionment
- ▶ Variabile globale: insieme di specie chimiche differenti che nel contesto in studio possono essere considerate nel loro insieme come un unico inquinante
- ▶ Categoria di sorgenti o sorgente: un insieme di sorgenti che emettono la **variabile globale** con rapporti tra le specie chimiche componenti che nel contesto in studio possono essere considerati costanti.

Categoria di sorgenti o sorgente



autoveicoli a benzina: ogni autoveicolo a benzina emette allo scarico composti chimici differenti. Considerando la flotta di veicoli nel contesto di studio, possiamo assumere costanti i rapporti tra le singole specie chimiche.

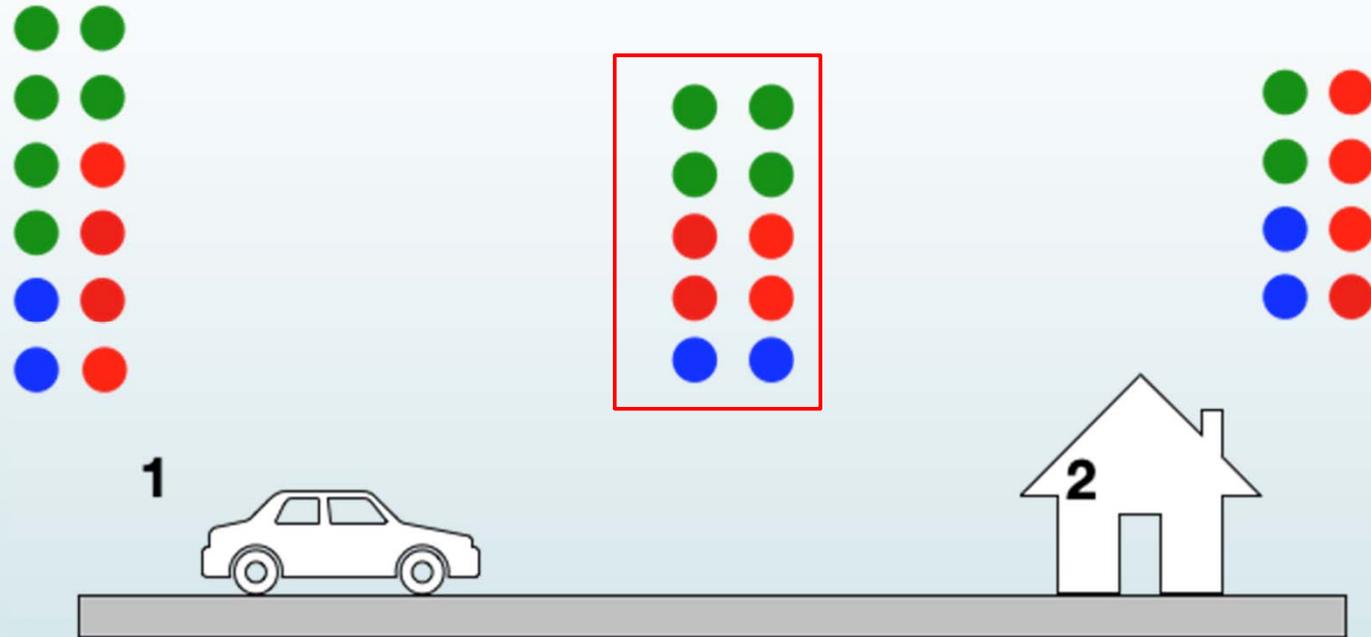
Biomass burning per riscaldamento domestico: ogni impianto emette composti chimici differenti. Nel contesto in studio possiamo assumere costanti i rapporti tra le singole specie chimiche.



Nomenclatura

- ▶ Source apportionment la ripartizione del contributo quantitativo in un punto, detto recettore, delle diverse categorie di sorgenti di un inquinante o di un insieme di inquinanti
- ▶ Modello a recettore algoritmi di natura statistica per la risoluzione di un problema di source apportionment
- ▶ Variabile globale: insieme di specie chimiche differenti che nel contesto in studio possono essere considerate nel loro insieme come un unico inquinante
- ▶ Categoria di sorgenti o sorgente: un insieme di sorgenti che emettono la **variabile globale** con rapporti tra le specie chimiche componenti che nel contesto in studio possono essere considerati costanti.
- ▶ Fingerprint di una sorgente: insieme dei rapporti f_j tra diverse specie chimiche presenti nella **variabile globale** emessa dalla **sorgente** considerata rispetto ad una od un insieme di esse.

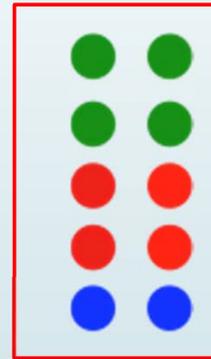
Fingerprint (o profili)



● $4/12 = 0.33$
● $2/12 = 0.17$
● $6/12 = 0.50$

$4/8 = 0.50$
 $2/8 = 0.25$
 $2/8 = 0.25$

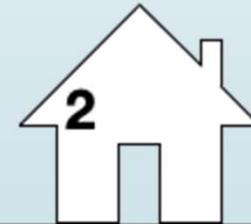
PMF: Positive Matrix Factorization



1



2

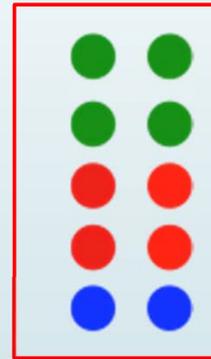
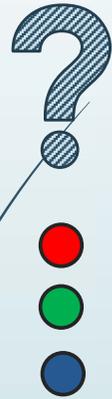


A numero di ●
B numero di ●
C numero di ●

$$\begin{aligned} [A] &= M_1 * fa_1 + M_2 * fa_2 \\ [B] &= M_1 * fb_1 + M_2 * fb_2 \\ [C] &= M_1 * fc_1 + M_2 * fc_2 \end{aligned}$$

Numero di incognite?

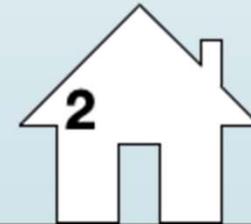
PMF: Positive Matrix Factorization



1



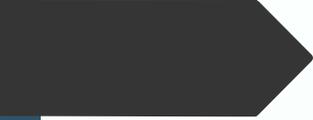
2



A numero di ●
B numero di ●
C numero di ●

$$\begin{aligned} [A] &= M_1 * fa_1 + M_2 * fa_2 \\ [B] &= M_1 * fb_1 + M_2 * fb_2 \\ [C] &= M_1 * fc_1 + M_2 * fc_2 \end{aligned}$$

**Sistema di 3 equazioni
in 8 incognite:
problema non
risolvibile**



PMF: Positive Matrix Factorization

Al tempo t_1 :

$$[A]_{t_1} = M_{1t_1} * fa_1 + M_{2t_1} * fa_2$$

$$[B]_{t_1} = M_{1t_1} * fb_1 + M_{2t_1} * fb_2$$

$$[C]_{t_1} = M_{1t_1} * fc_1 + M_{2t_1} * fc_2$$

**variabilità intrinseca nel database
delle immissioni al recettore**

T1:3 equazioni 8 incognite

PMF: Positive Matrix Factorization

Al tempo t1:

$$[A]_{t1} = M_{1t1} * fa_1 + M_{2t1} * fa_2$$

$$[B]_{t1} = M_{1t1} * fb_1 + M_{2t1} * fb_2$$

$$[C]_{t1} = M_{1t1} * fc_1 + M_{2t1} * fc_2$$

T1:3 equazioni 8 incognite

Al tempo t2:

$$[A]_{t2} = M_{1t2} * fa_1 + M_{2t2} * fa_2$$

$$[B]_{t2} = M_{1t2} * fb_1 + M_{2t2} * fb_2$$

$$[C]_{t2} = M_{1t2} * fc_1 + M_{2t2} * fc_2$$

T2:6 equazioni 10 incognite

Al tempo t3:

$$[A]_{t3} = M_{1t3} * fa_1 + M_{2t3} * fa_2$$

$$[B]_{t3} = M_{1t3} * fb_1 + M_{2t3} * fb_2$$

$$[C]_{t3} = M_{1t3} * fc_1 + M_{2t3} * fc_2$$

T3:9 equazioni 12 incognite

T4:12 equazioni 14 incognite

T5:15 equazioni 16 incognite

T6:18 equazioni 18 incognite

PMF: Positive Matrix Factorization

Con n istanti temporali (o campioni), 2 sorgenti e 3 variabili

$3 \times n$ è il numero di equazioni
 $2 \times (3 + n)$ è il numero di incognite

$$3n > 6 + 2n$$

$$n > 6$$

Se m numero variabili e p numero sorgenti:

$m \times n$ è il numero di equazioni
 $p(m+n)$ è il numero di incognite

T1:3 equazioni 8 incognite

T2:6 equazioni 10 incognite

T3:9 equazioni 12 incognite

T4:12 equazioni 14 incognite

T5:15 equazioni 16 incognite

T6:18 equazioni 18 incognite

PMF: Positive Matrix Factorization

Con n campioni, p sorgenti e m variabili, all'istante tn possiamo scrivere:

$$\begin{aligned} [x_1]_{tn} &= M_{1\ tn} * fa_1 + M_{2\ tn} * fa_2 + \dots + M_{p\ tn} * fa_p \\ [x_2]_{tn} &= M_{1\ tn} * fb_1 + M_{2\ tn} * fb_2 + \dots + M_{p\ tn} * fb_p \\ [x_3]_{tn} &= M_{1\ tn} * fc_1 + M_{2\ tn} * fc_2 + \dots + M_{p\ tn} * fc_p \\ &\dots \\ &\dots \\ [x_m]_{tn} &= M_{1\ tn} * fm_1 + M_{2\ tn} * fm_2 + \dots + M_{p\ tn} * fm_p \end{aligned}$$

$$x_{i,j} = \sum_{k=1}^p g_{i,k} \cdot f_{k,j} + \varepsilon_{i,j}$$

i-esimo campione (1-n)
j-esima specie (1-m)
k-esima sorgente (1-p)

PMF: Positive Matrix Factorization

Fattorizzazione di una matrice nota \mathbf{X} in due matrici non note \mathbf{G} ed \mathbf{F} ad elementi tutti positivi

$$\mathbf{X} = \mathbf{G} \times \mathbf{F}$$

$$\mathbf{X} = [x_{i,j}], \quad \mathbf{G} = [g_{i,k}], \quad \mathbf{F} = [f_{k,j}]$$

$$x_{i,j} \geq 0 \quad \forall i, j; \quad g_{i,k} \geq 0 \quad \forall i, k; \quad f_{k,j} \geq 0 \quad \forall k, j$$

$x_{i,j}$ concentrazione della specie j -esima nel campione i -esimo

$g_{i,k}$ contributo della sorgente k -esima al campione i -esimo

$f_{k,j}$ concentrazione della specie j -esima nel profilo sorgente k -esima

PMF: Positive Matrix Factorization

Fattorizzazione di una matrice nota X in due matrici non note G ed F ad elementi tutti positivi

$$X = G \times F$$

$$X = [x_{i,j}], \quad G = [g_{i,k}], \quad F = [f_{k,j}]$$

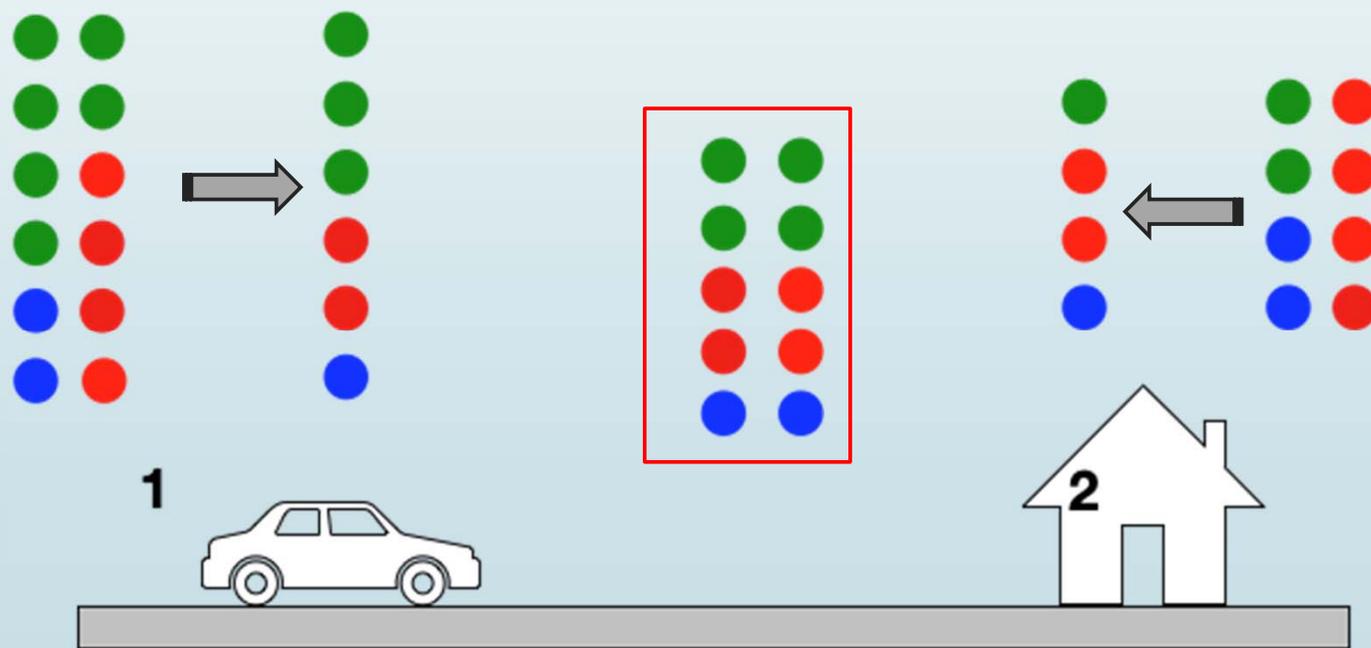
n numero campioni
 m numero di variabili
 p numero di sorgenti

Numero equazioni $n \times m >$ Numero incognite $p \times (m + n)$

PMF: Positive Matrix Factorization

Assunzione fondamentale:

Le specie chimiche emesse dalle sorgenti non subiscono trasformazioni chimiche nel tragitto dal punto di emissione al recettore.



PMF: Positive Matrix Factorization

Assunzione fondamentale:

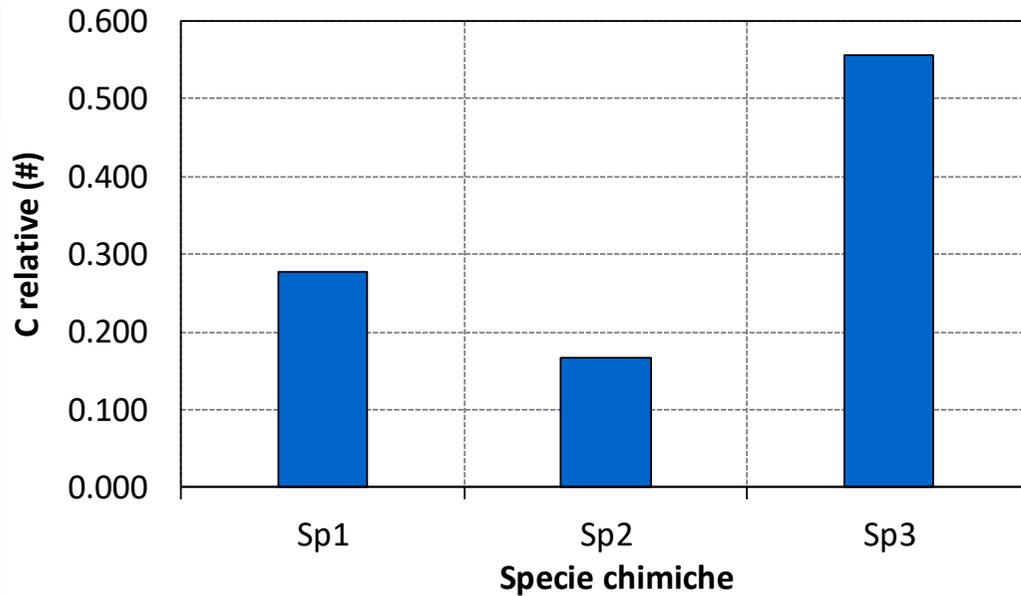
Le specie chimiche emesse dalle sorgenti non subiscono trasformazioni chimiche nel tragitto dal punto di emissione al recettore.

Dati p fattori (sorgenti), considerato l' i -esimo campione, allora la concentrazione $x_{i,j}$ della j -esima specie chimica in un punto recettore può essere scritta come:

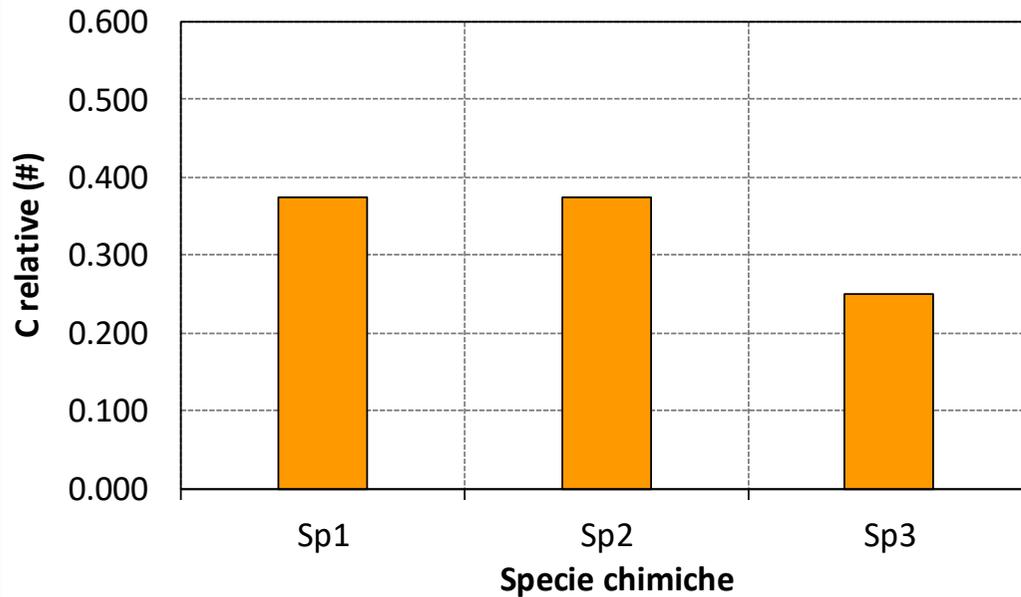
$$x_{i,j} = \sum_{k=1}^p g_{i,k} \cdot f_{k,j} + \varepsilon_{i,j}$$

$g_{i,k}$ è il contributo all' i -esimo campione del k -esimo fattore e $f_{k,j}$ la j -esima componente del profilo del k -esimo fattore e $\varepsilon_{i,j}$ rappresenta il residuo per ciascun campione e specie

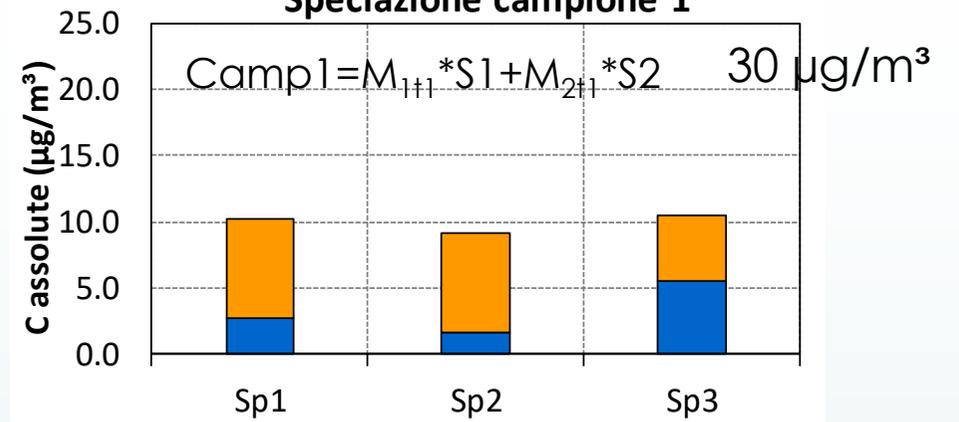
Sorgente S1: profilo



Sorgente S2: profilo

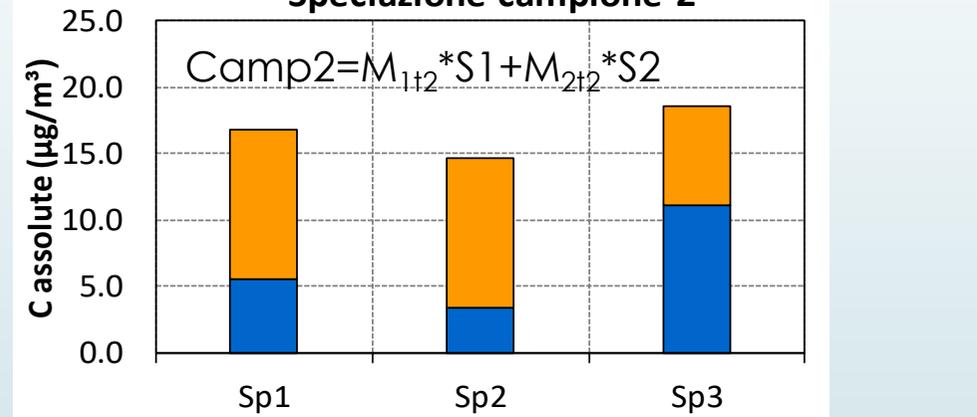


Speciazione campione 1



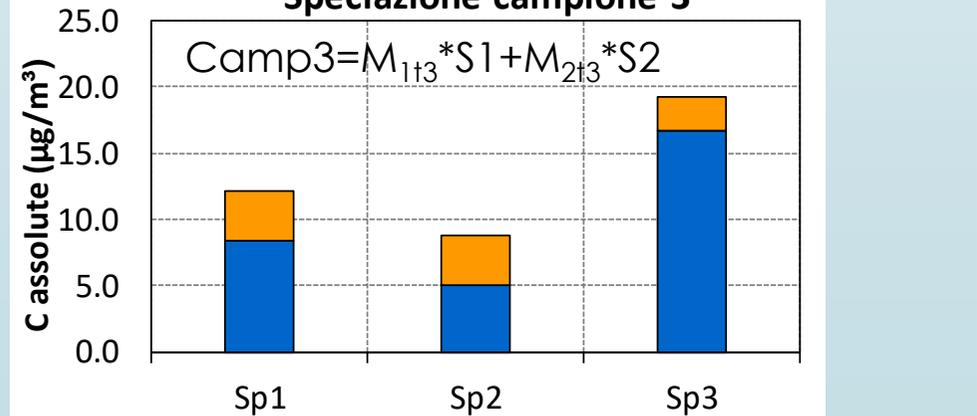
Specie chimiche

Speciazione campione 2



Specie chimiche

Speciazione campione 3



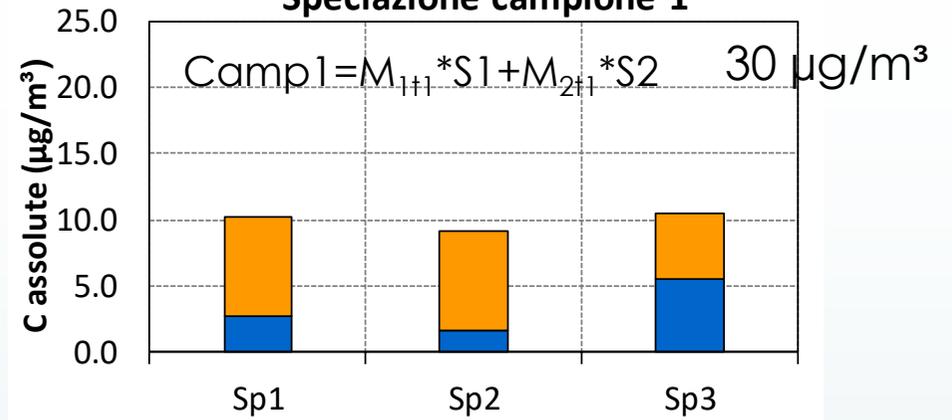
Specie chimiche

Variabile globale

$x_{i,j}$

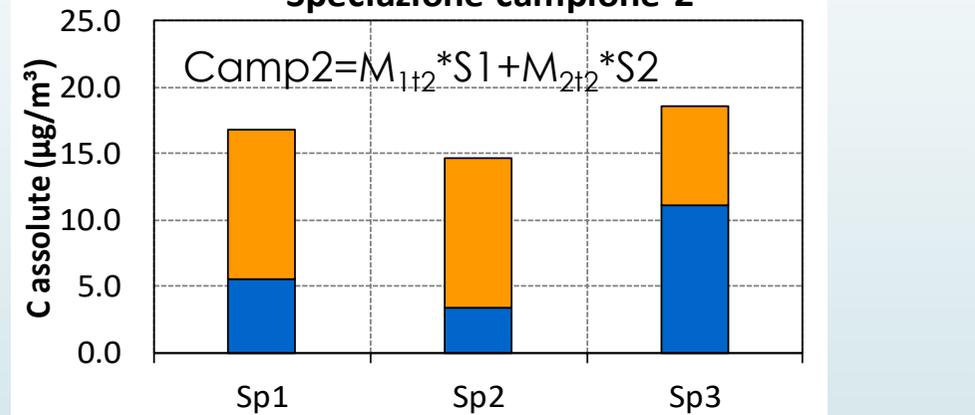
| | | | | |
|----|---|------|------|------|
| 30 | = | 10.4 | 9.3 | 10.6 |
| 50 | = | 17.0 | 14.8 | 18.7 |
| 40 | = | 12.2 | 8.9 | 19.3 |

Speciazione campione 1



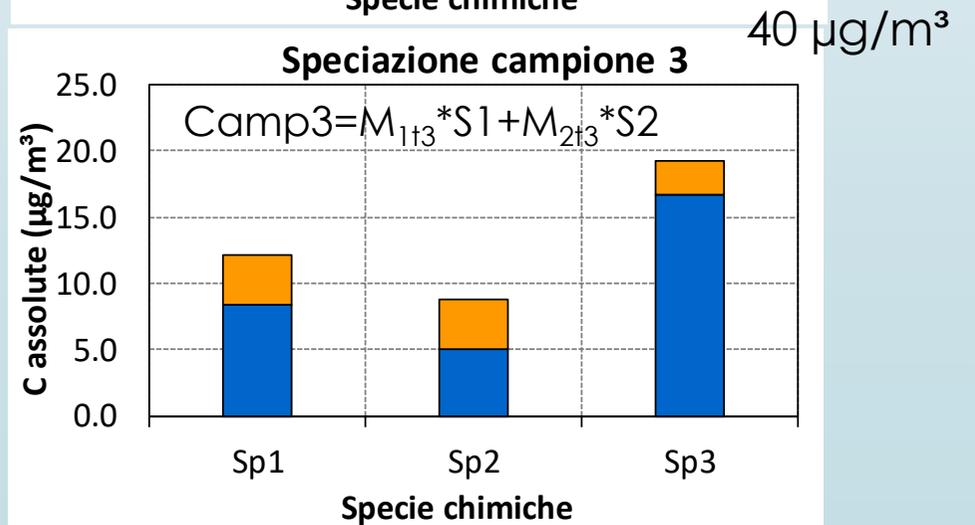
Specie chimiche

Speciazione campione 2



Specie chimiche

Speciazione campione 3



Specie chimiche

PMF: Positive Matrix Factorization

Variabile globale

$$\begin{bmatrix} 30 \\ 50 \\ 40 \end{bmatrix}$$

=

$$\begin{bmatrix} 10.4 & 9.3 & 10.6 \\ 17.0 & 14.8 & 18.7 \\ 12.2 & 8.9 & 19.3 \end{bmatrix}$$

=

$$\begin{bmatrix} 10 & 20 \\ 20 & 30 \\ 30 & 10 \end{bmatrix}$$

x

$$\begin{bmatrix} 0.28 & 0.17 & 0.56 \\ 0.38 & 0.38 & 0.25 \\ & & \end{bmatrix}$$

$x_{i,j}$

$g_{i,k}$

$f_{k,j}$

PMF: Positive Matrix Factorization

Variabile globale

$$\begin{bmatrix} 30 \\ 50 \\ 40 \end{bmatrix}$$

=

$$\begin{bmatrix} 10.4 & 9.3 & 10.6 \\ 17.0 & 14.8 & 18.7 \\ 12.2 & 8.9 & 19.3 \end{bmatrix}$$

=

$$\begin{bmatrix} 10 & 20 \\ 20 & 30 \\ 30 & 10 \end{bmatrix}$$

X

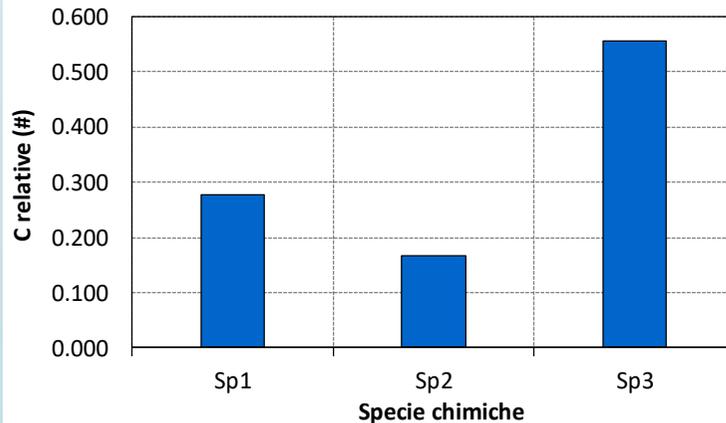
$$\begin{bmatrix} 0.28 & 0.17 & 0.56 \\ 0.38 & 0.38 & 0.25 \end{bmatrix}$$

$x_{i,j}$

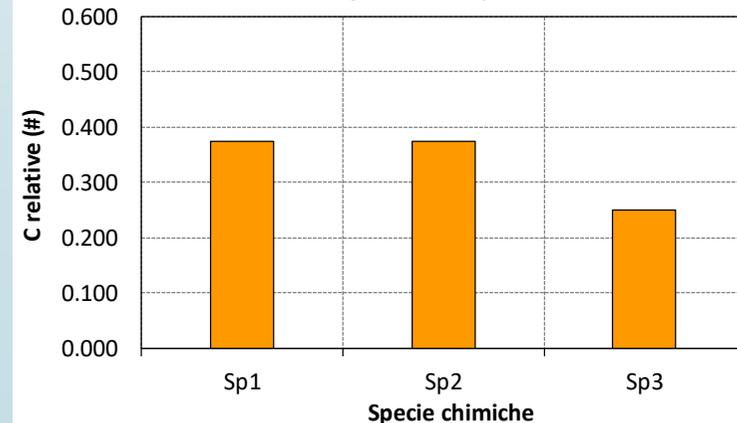
$g_{i,k}$

$f_{k,j}$

Sorgente S1: profilo



Sorgente S2: profilo





Esempio pratico

Source Apportionment of
PM_{2.5} in Delhi, India Using PMF
Model (Bull Environ Contam
Toxicol (2016) 97:286–293)

$n = 140$ campioni

$m = 23$ variabili

$p = 7$ sorgenti

E' risolvibile?

Esempio pratico

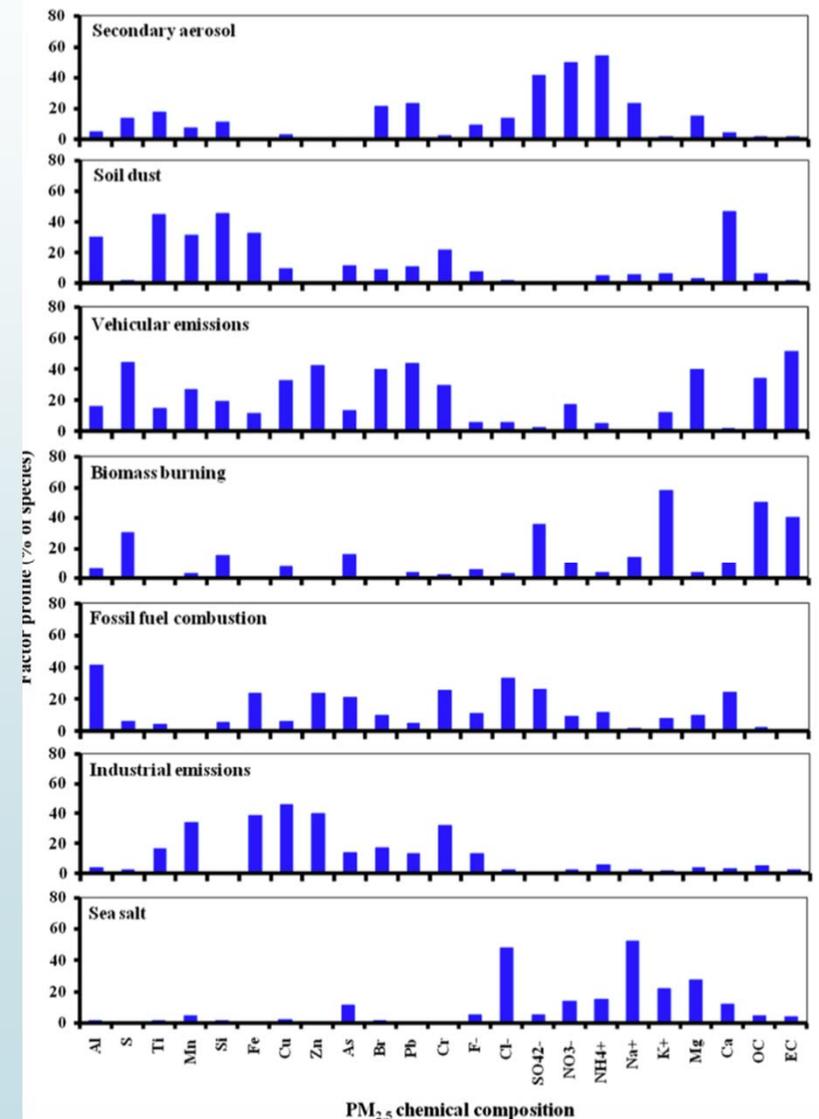
Source Apportionment of PM_{2.5} in Delhi, India Using PMF Model (Bull Environ Contam Toxicol (2016) 97:286–293)

n = 140 campioni
m = 23 variabili
p = 7 sorgenti

Numero equazioni $n \times m$
Numero incognite $p \times (n + m)$

$$3220 > 7 \times (163)$$

Il problema è sovradeterminato (ammette in generale infinite soluzioni) e non è risolvibile analiticamente



Come l'algoritmo della PMF risolve il problema del SA?

- Minimizzando il **fattore di merito** (o **funzione obiettivo**):

$$Q = \sum_i^n \sum_j^m \left[\frac{(x_{i,j} - \sum_k^p g_{i,k} f_{k,j})}{u_{i,j}} \right]^2$$

n : numero di campioni; m : numero di specie della variabile globale; p : numero di fattori

$u_{i,j}$: incertezza attribuita alla j -esima specie $x_{i,j}$ del campione i e comprende

- **l'incertezza analitica**
- **l'incertezza del campionamento**
- ma anche l'incertezza relativa alla validità **dell'assunzione** fondamentale del modello

Come l'algoritmo della PMF risolve il problema del SA?

- Minimizzando il **fattore di merito** (o **funzione obiettivo**):

$$Q = \sum_i^n \sum_j^m \left[\frac{(x_{i,j} - \sum_k^p g_{i,k} f_{k,j})}{u_{i,j}} \right]^2$$

Q_{robusto} = calcolato escludendo punti per i quali
l'incertezza scalata per i residui è maggiore di 4 ($Q_{ij} > 4$)

Q_{robusto} non è influenzato da outlier

Input del modello

- Le concentrazioni misurate $x_{i,j}$
- Le incertezze $u_{i,j}$

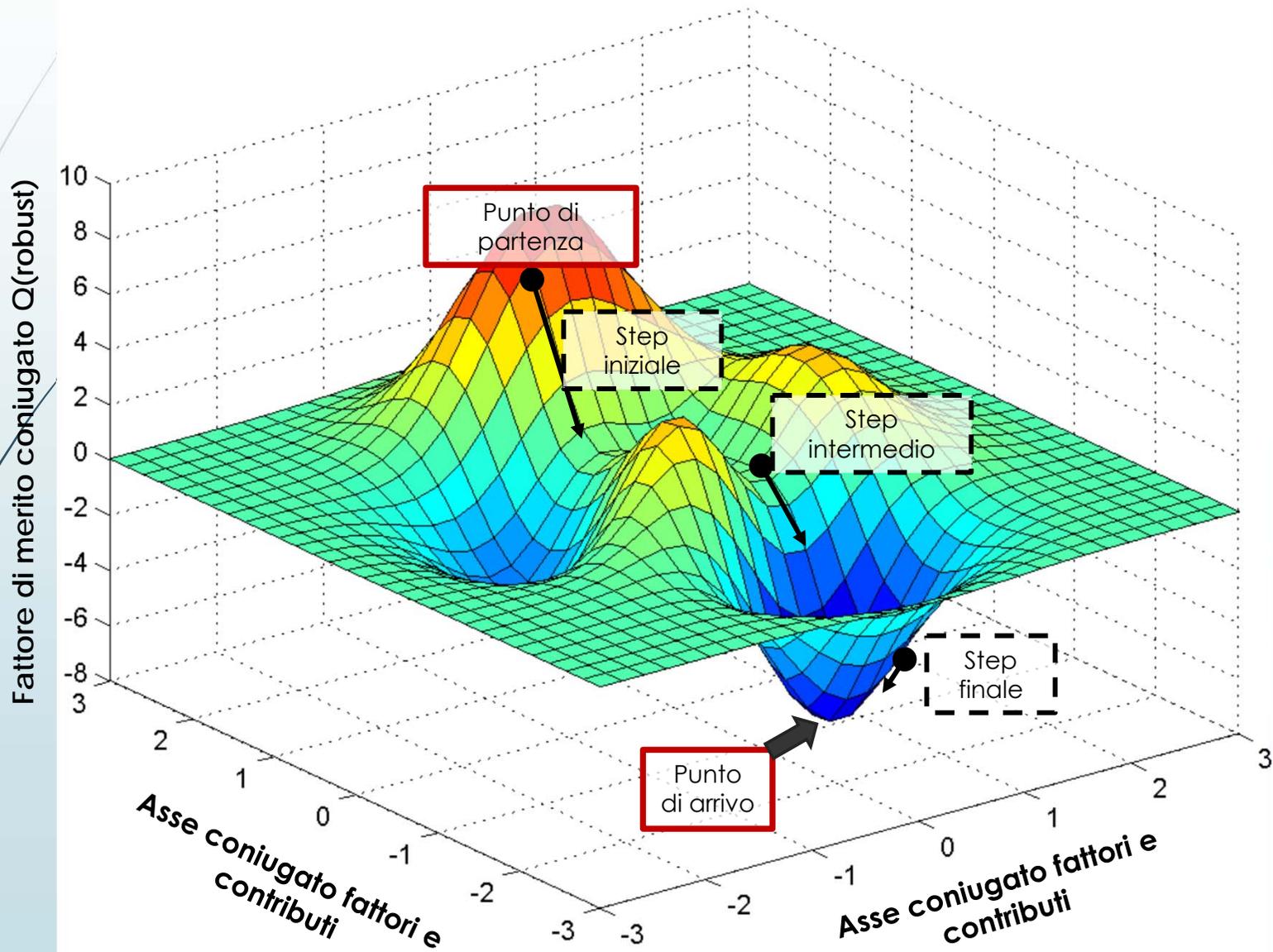
- Se $x_{i,j} < DL$ $x_{i,j} = DL/2$ & $u_{i,j} = 5/6 \times DL$

- Se $x_{i,j} > DL$ $u_{i,j} = \sqrt{(\varepsilon \cdot x_{i,j})^2 + \left(\frac{1}{2} \cdot mdl_j\right)^2}$

oppure calcolata dall'utente
(error propagation equations)

Avendo introdotto le incertezze, valori negativi per le concentrazioni, i contributi e i fattori sono ammessi, purché non significativamente differenti da zero

Ricerca della soluzione



Ricerca della soluzione

Partendo da un punto casuale nello spazio di $p \times m$ dimensioni (spazio coniugato), l'algoritmo ricerca il minimo (relativo) di $Q(\text{robust})$ attraverso iterazioni con tre livelli di **iterazioni**: iniziale, intermedio, finale.

1° livello - iniziale: $dQ < 0.1$ (su 20 passi consecutivi in meno di 800 passi)

2° livello - intermedio: $dQ < 0.005$ (su 50 passi consecutivi in meno di 2000 passi)

3° livello - finale: $dQ < 0.0003$ (su 100 passi consecutivi in meno di 5000 passi)

Se non viene trovata alcuna soluzione che rispetta i requisiti precedenti si dice che la soluzione non converge.

Per trovare il minimo assoluto vengono effettuati diversi **run (20-100)**, ciascuno a partire da un punto di partenza differente

Valore di Q atteso

$$Q = \sum_i^n \sum_j^m \left[\frac{(x_{i,j} - \sum_k^p g_{i,k} f_{k,j})}{u_{i,j}} \right]^2$$

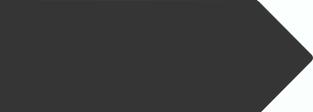
Q_{expected} è uguale al numero di gradi di libertà del sistema

$Q_{\text{expected}} = \text{numero di dati} - \text{numero di vincoli}$

$$Q_{\text{expected}} = m \times n - p \quad (n+m)$$

Q/Q_{expected} deve tendere a 1*

*se incertezze del data base sono ragionevoli



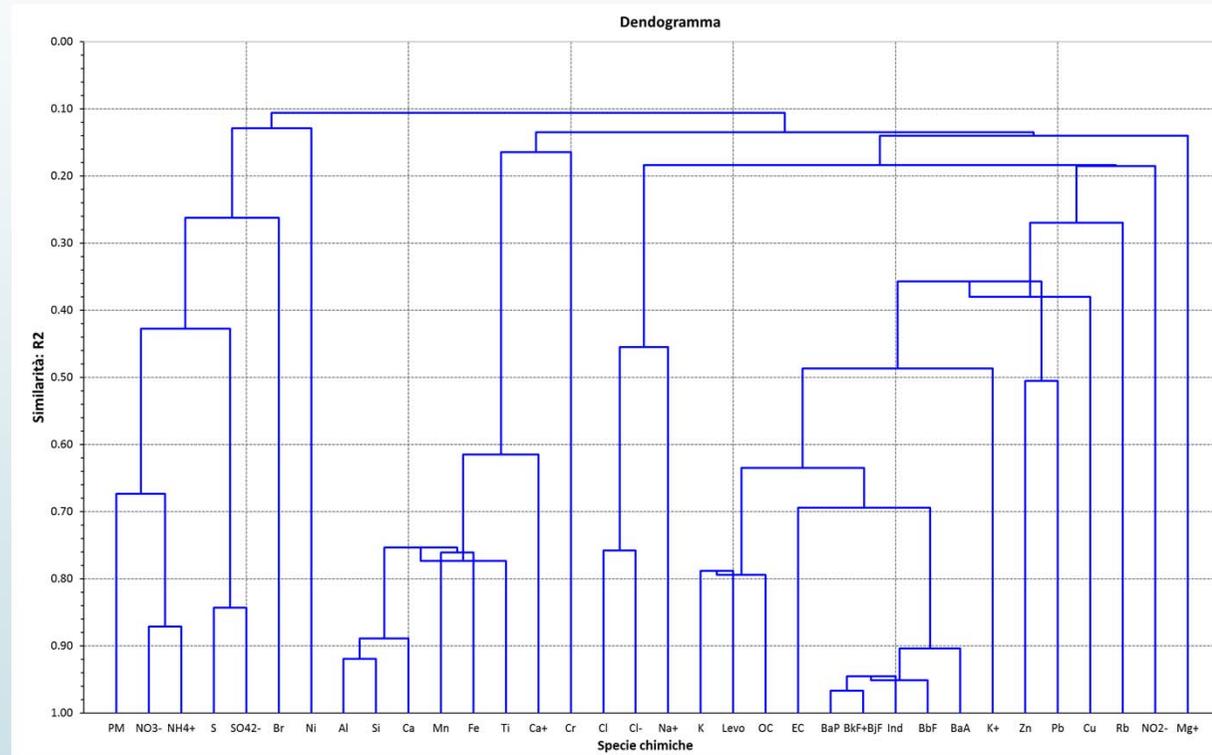
Quale è la dimensione minima del database (X)

- E' consigliato fortemente che il numero dei campioni (n) sia almeno il triplo rispetto al numero di specie che vengono utilizzate nei calcoli (m).

Si tenga presente che:

- la PMF5 consente all'utilizzatore di escludere dai calcoli alcune variabili (specie) presenti nel database
- Se due variabili sono fortemente correlate tra loro e lo scarto dalla linearità può essere considerato 'rumore' allora le due variabili portano la stessa informazione; una delle due può quindi essere trascurata.

Quale è la dimensione minima del database (X)



L'analisi a cluster con **indice di similarità R2** consente, tra altro, di eliminare nelle elaborazioni le variabili tra loro molto correlate:

PMF5 EPA

<https://www.epa.gov/air-research/positive-matrix-factorization-model-environmental-data-analyses>

System requirements

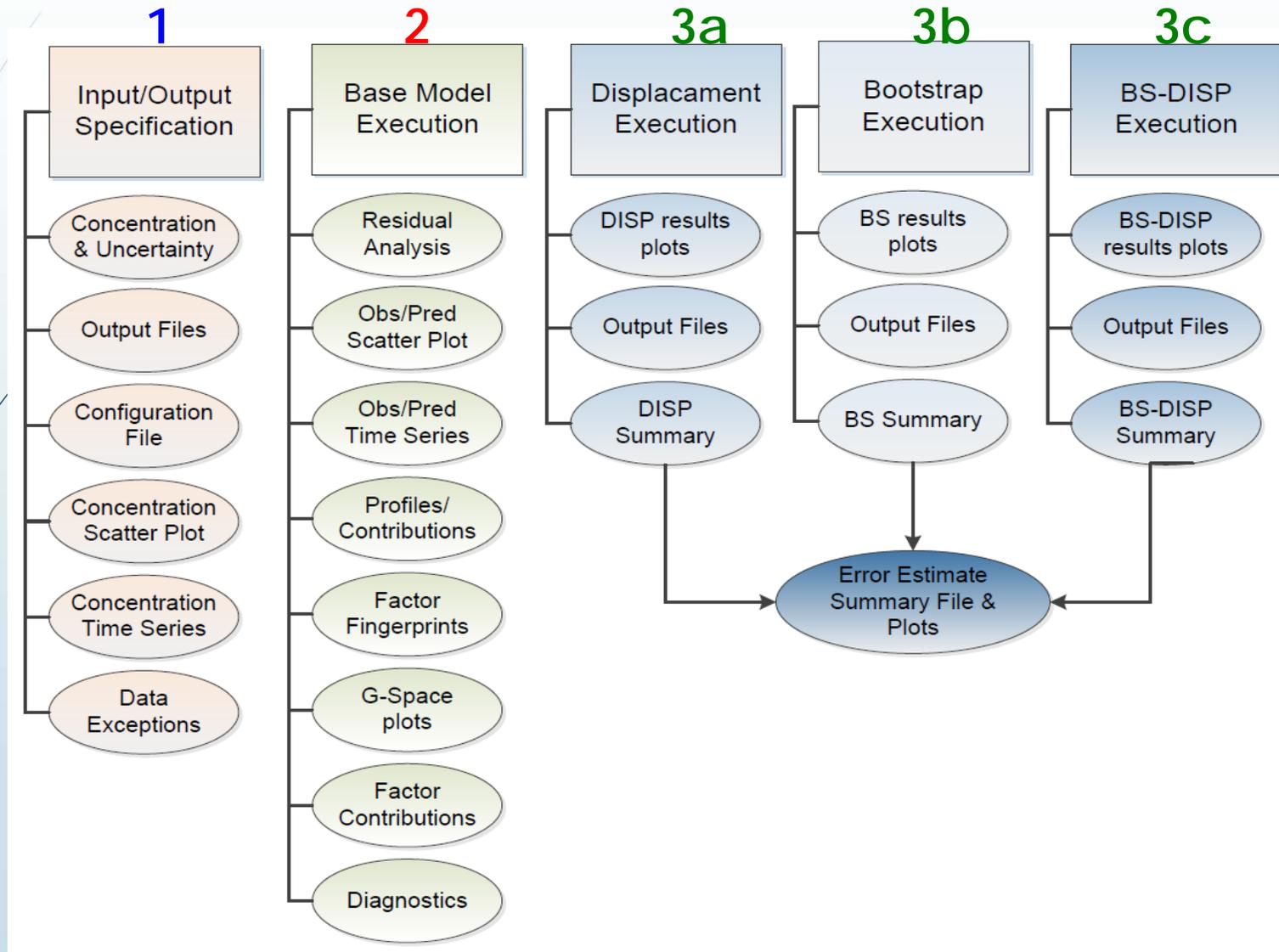
Version 5.0 of EPA's Positive Matrix Factorization Model works on Windows versions 7 to 10. The computer should have at least a 2.0 GHz processor, 1 GB of memory, and a 1024x768 pixel display. Users will need to have permissions to write to the computer's C:\ drive to install and run the PMF Model as this may not be the default setting for some users. Since files will be written to a user's C:\ drive, the PMF Model needs to be run in Administrator mode. No further updates to the PMF Model are planned.

Downloads & Registration

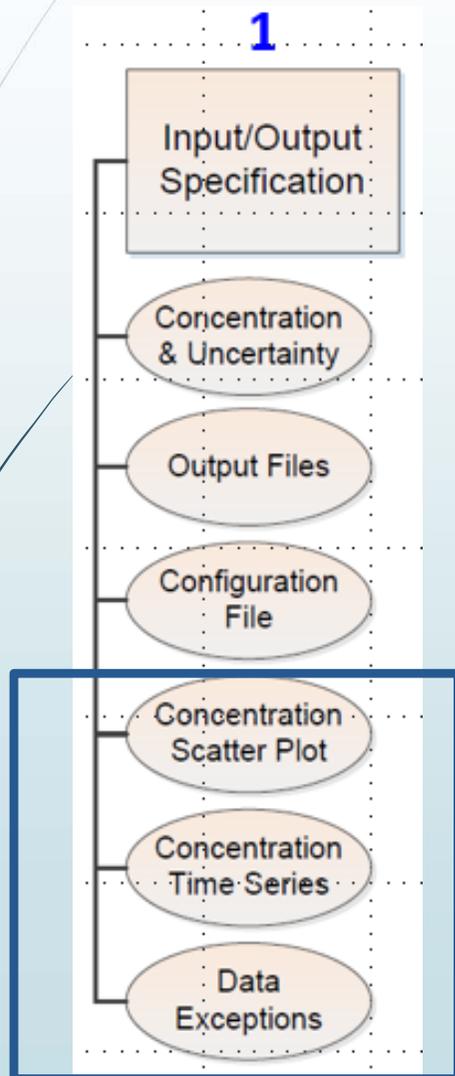
- [Download PMF 5.0 Software \(exe\)](#) (13.38 MB) 
- [PMF 5.0 Fundamentals and User Guide](#)
- [Register for PMF model download](#)

Please register your download of EPA PMF 5.0 so we can keep you informed of any modifications, revisions, or improvements to the software.

Esecuzione del modello

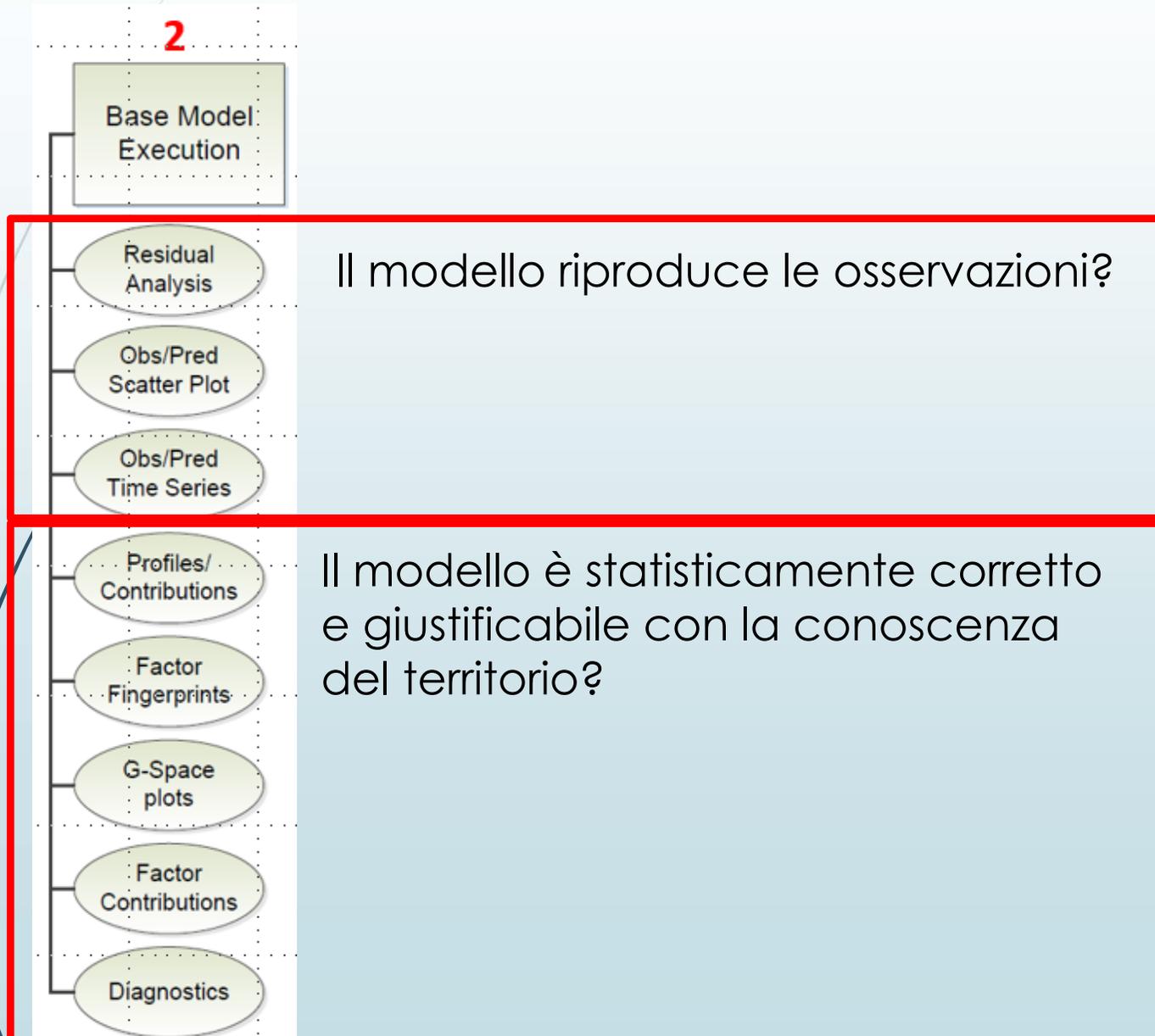


Esecuzione del modello



Offre strumenti per esplorare il database, verificando l'esistenza di eventuali correlazioni tra variabili, la presenza di campioni outlier o di stagionalità nelle serie temporali delle variabili, con la possibilità di eliminare campioni dal calcolo, non dal database, ecc.

Esecuzione del modello



Base Model Runs

Number of Runs: 20 Number of Factors: 6

Random Start Seed Number: 79

Base Model Run Summary

| Run Number | Q (Robust) | Q (True) | Converged |
|------------|------------|----------|-----------|
| 1 | 15863.0 | 18549.3 | Yes |
| 2 | 15829.8 | 18692.4 | Yes |
| 3 | 15829.6 | 18692.4 | Yes |
| 4 | 15829.6 | 18692.4 | Yes |
| 5 | 15829.1 | 18692.8 | Yes |
| 6 | 15829.8 | 18692.5 | Yes |
| 7 | 15829.5 | 18692.3 | Yes |
| 8 | 15829.5 | 18692.3 | Yes |
| 9 | 15829.5 | 18692.2 | Yes |
| 10 | 15857.8 | 18527.5 | Yes |
| 11 | 15829.6 | 18692.5 | Yes |
| 12 | 15829.8 | 18692.4 | Yes |
| 13 | 15830.0 | 18692.3 | Yes |
| 14 | 15829.7 | 18692.6 | Yes |
| 15 | 15829.8 | 18692.3 | Yes |
| 16 | 15829.7 | 18692.4 | Yes |
| 17 | 15866.7 | 18601.0 | Yes |
| 18 | 15829.7 | 18692.5 | Yes |
| 19 | 15829.4 | 18692.4 | Yes |
| 20 | 15829.6 | 18692.7 | Yes |

Base Model BS-DISP Method

| Displacement | Species | Cat | S/N |
|-------------------------------------|--------------|--------|-----|
| <input checked="" type="checkbox"/> | PM2.5 | Strong | 9.0 |
| <input type="checkbox"/> | Aluminum | Strong | 0.1 |
| <input type="checkbox"/> | Ammonium Ion | Strong | 8.9 |
| <input type="checkbox"/> | Arsenic | Strong | 0.1 |

Factor Names

| | Factor 1 | Factor 2 | Factor 3 | Factor 4 | Factor 5 | Factor 6 |
|-------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| Run 5 | Factor 1 | Factor 2 | Factor 3 | Factor 4 | Factor 5 | Factor 6 |
| Run 6 | Factor 1 | Factor 2 | Factor 3 | Factor 4 | Factor 5 | Factor 6 |
| Run 7 | Factor 1 | Factor 2 | Factor 3 | Factor 4 | Factor 5 | Factor 6 |

Run Progress:

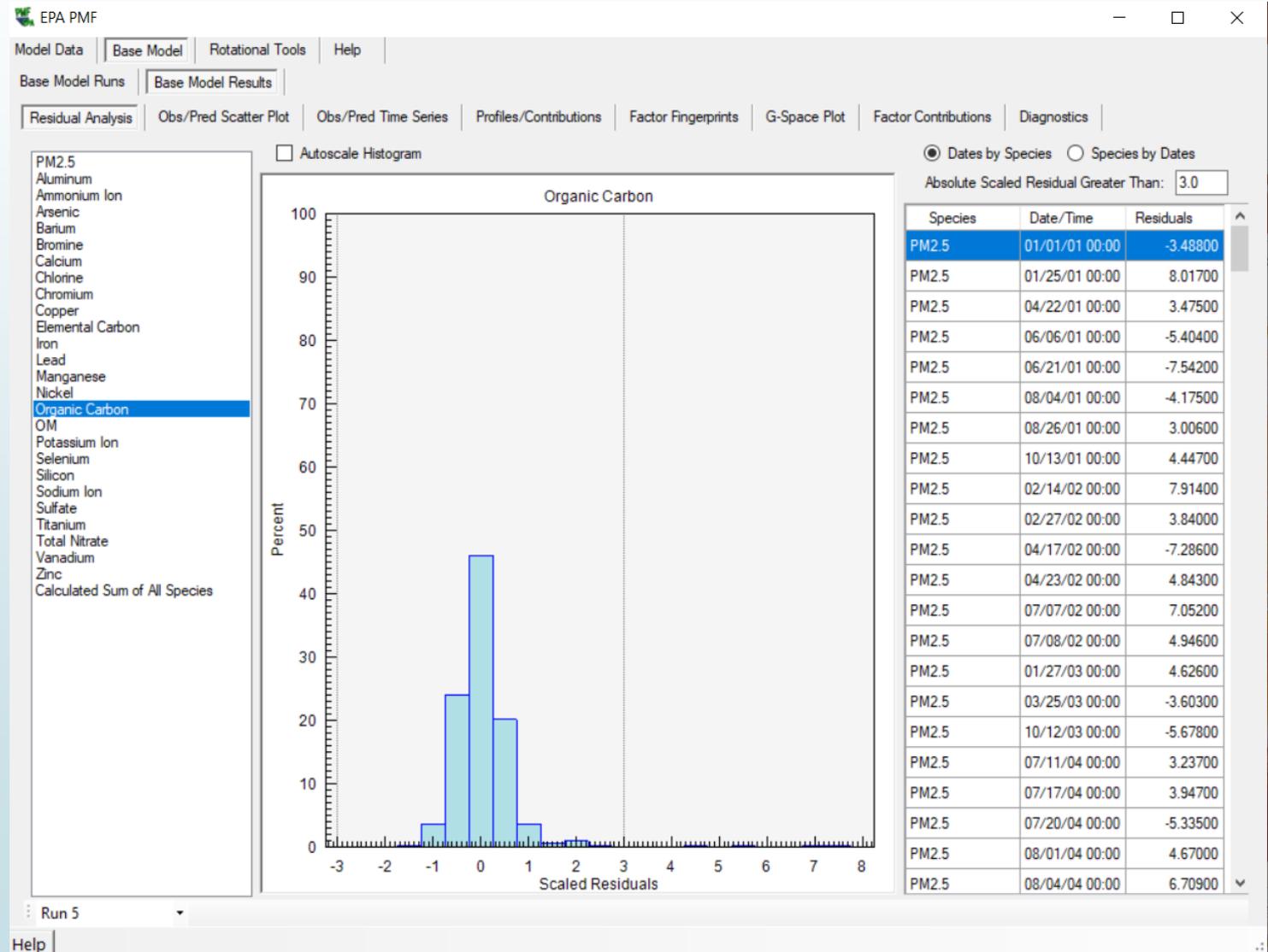
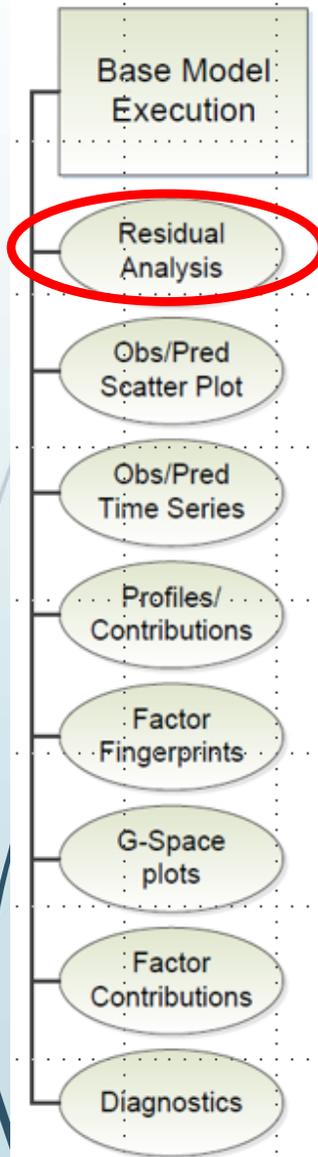
All'avvio sono consigliati 20 run. Dopo le analisi critiche e quindi rivalutati e decisi in modo definitivo i parametri del Base Model, è consigliabile utilizzare 100 run per la ricerca della soluzione 'finale'.

Per valutare l'effetto delle variazioni dei parametri è necessario utilizzare un Seed qualunque ma fisso. Per la ricerca della soluzione finale invece è opportuno utilizzare un Seed casuale.

Dopo una analisi critica dei primi risultati l'utente deciderà eventuali variazioni (incrementi o decrementi del numero di fattori).

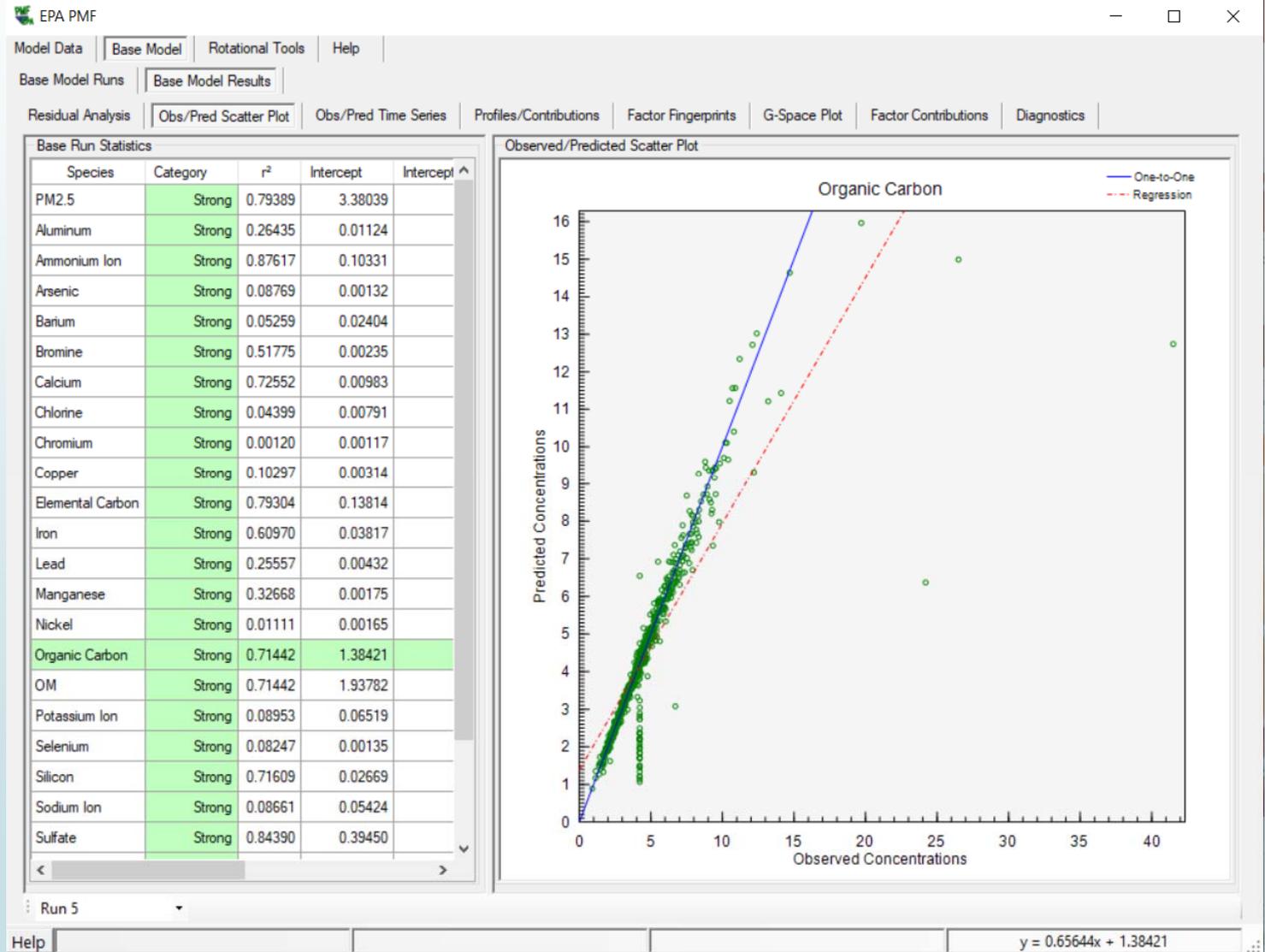
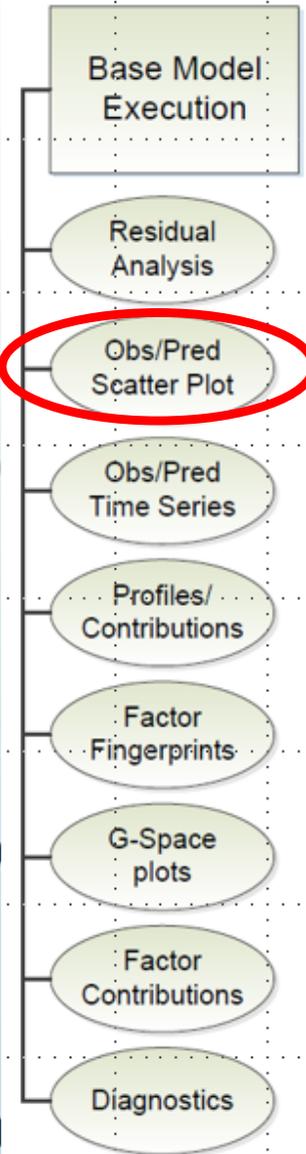
Esecuzione del modello

2



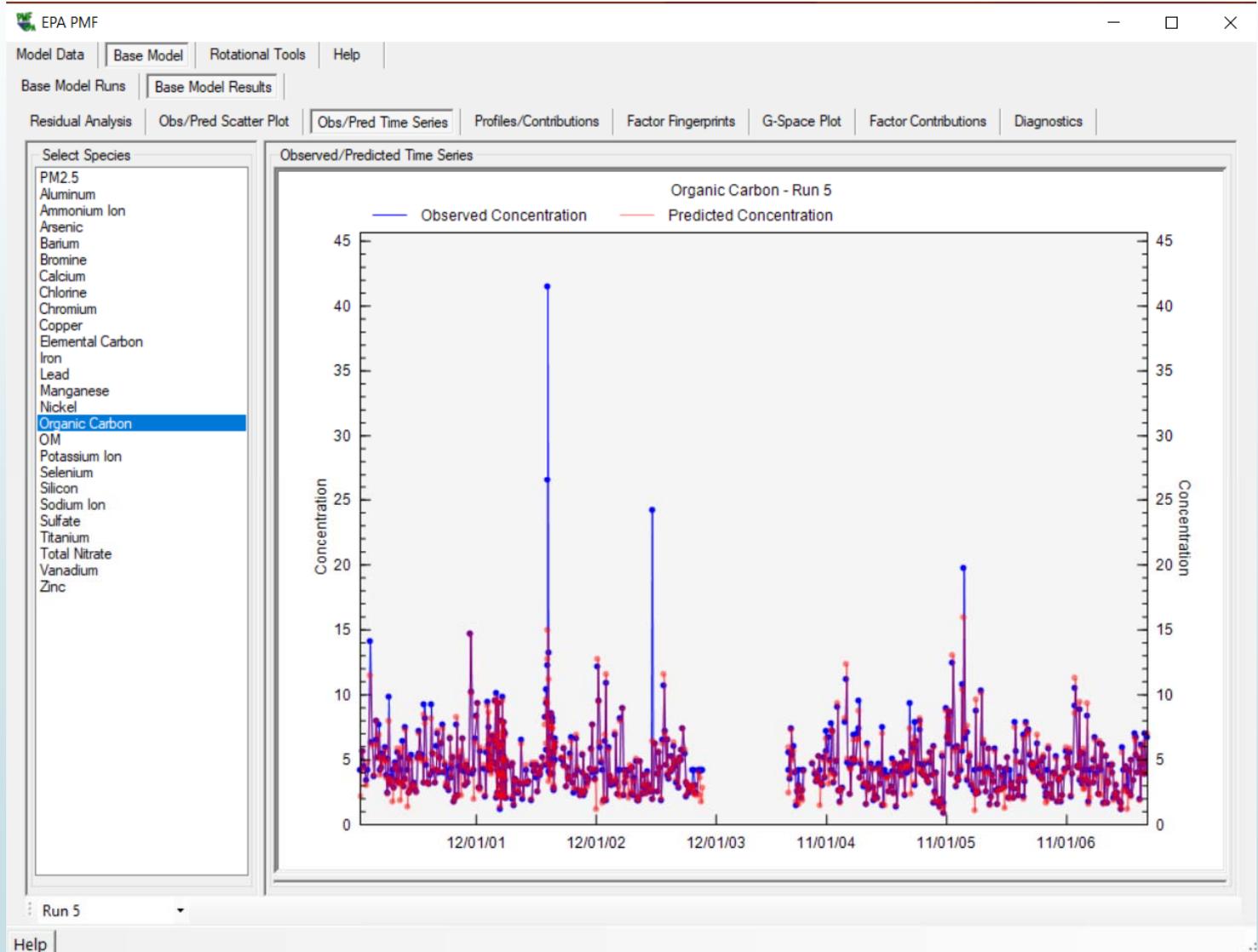
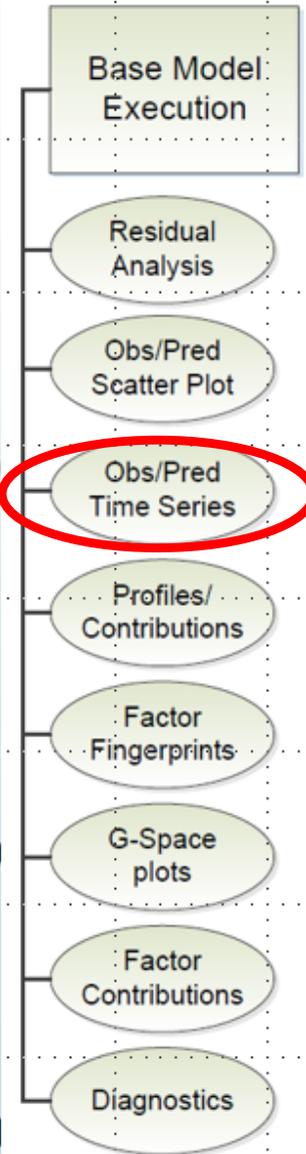
Esecuzione del modello

2



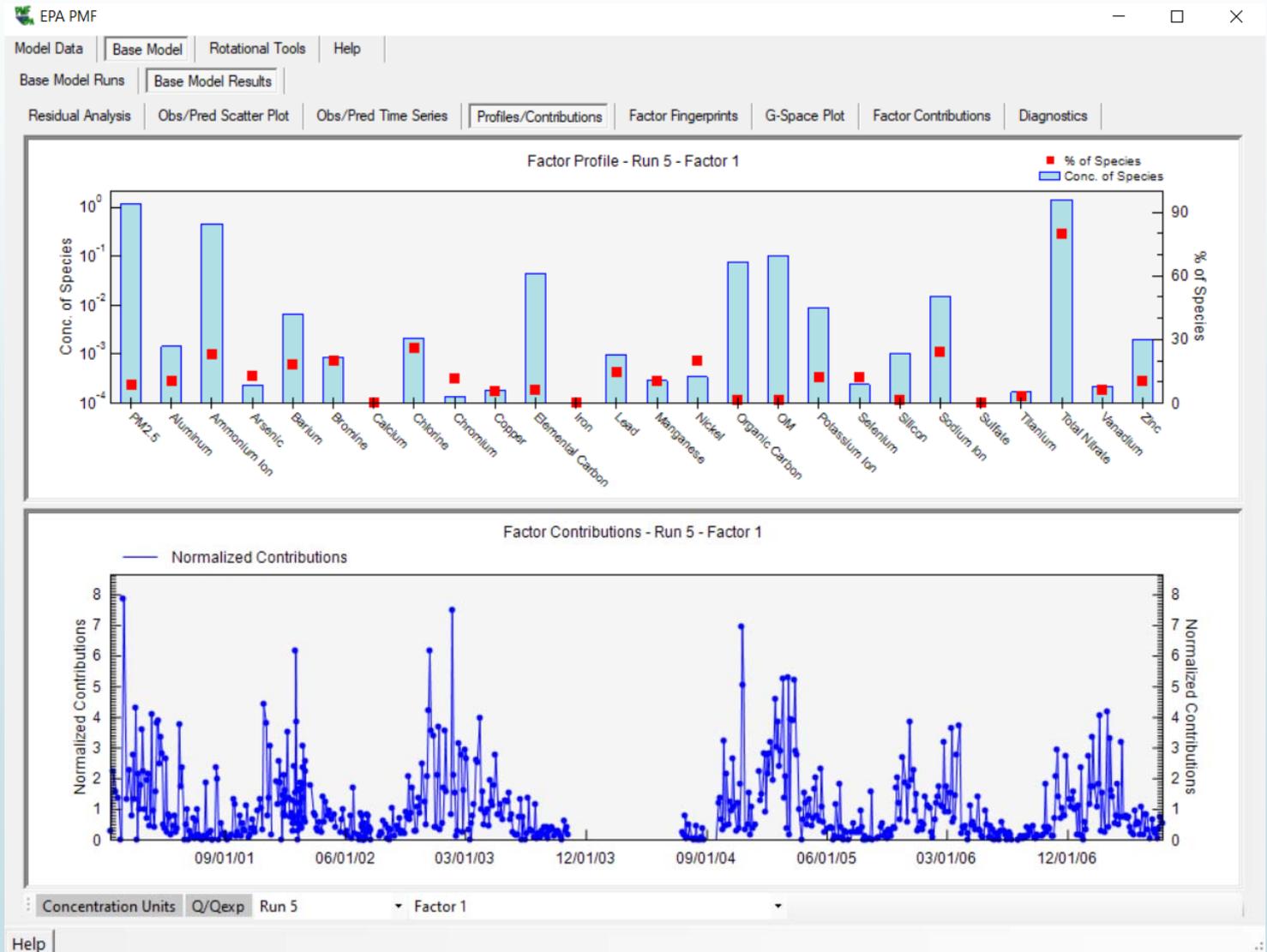
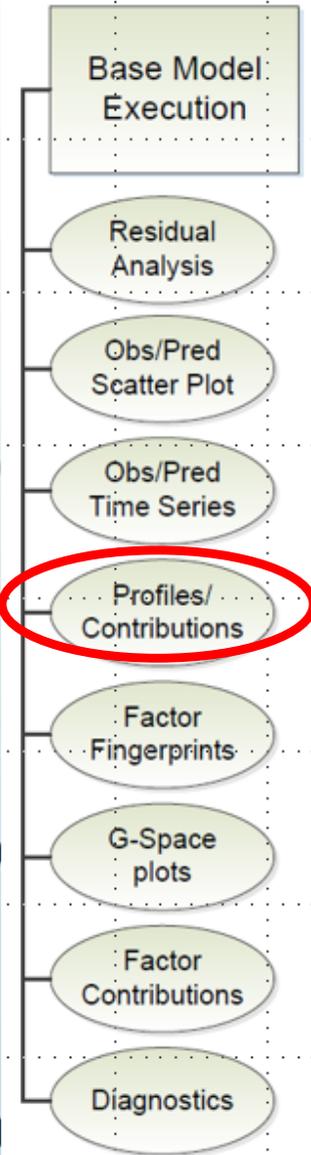
Esecuzione del modello

2



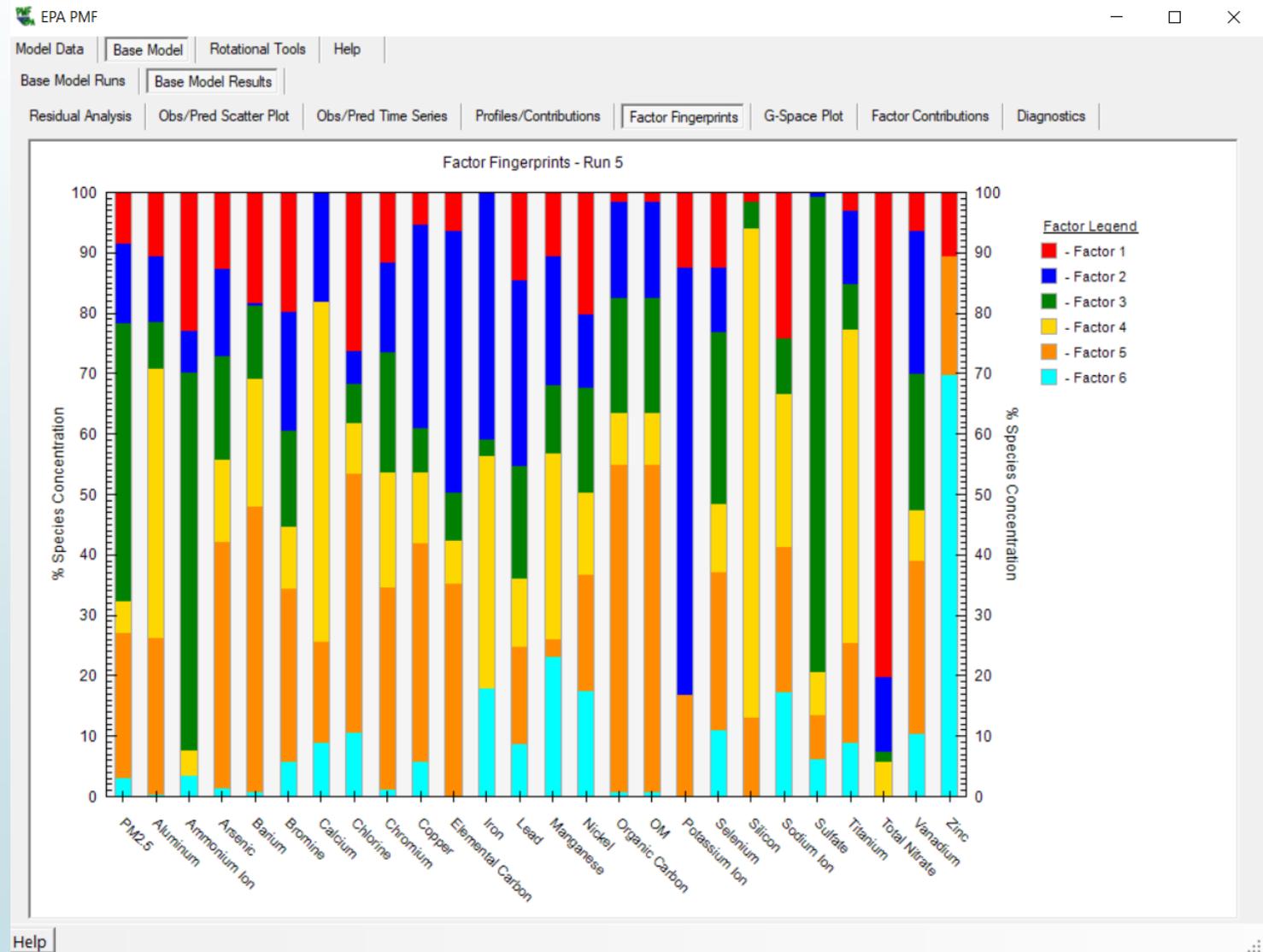
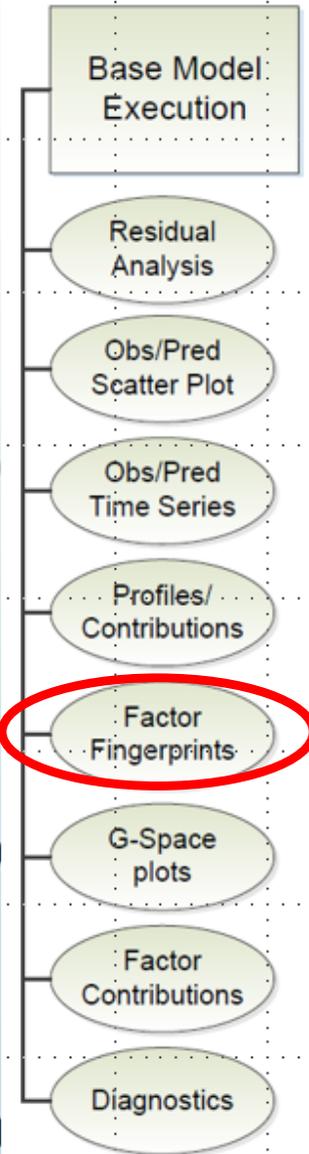
Esecuzione del modello

2



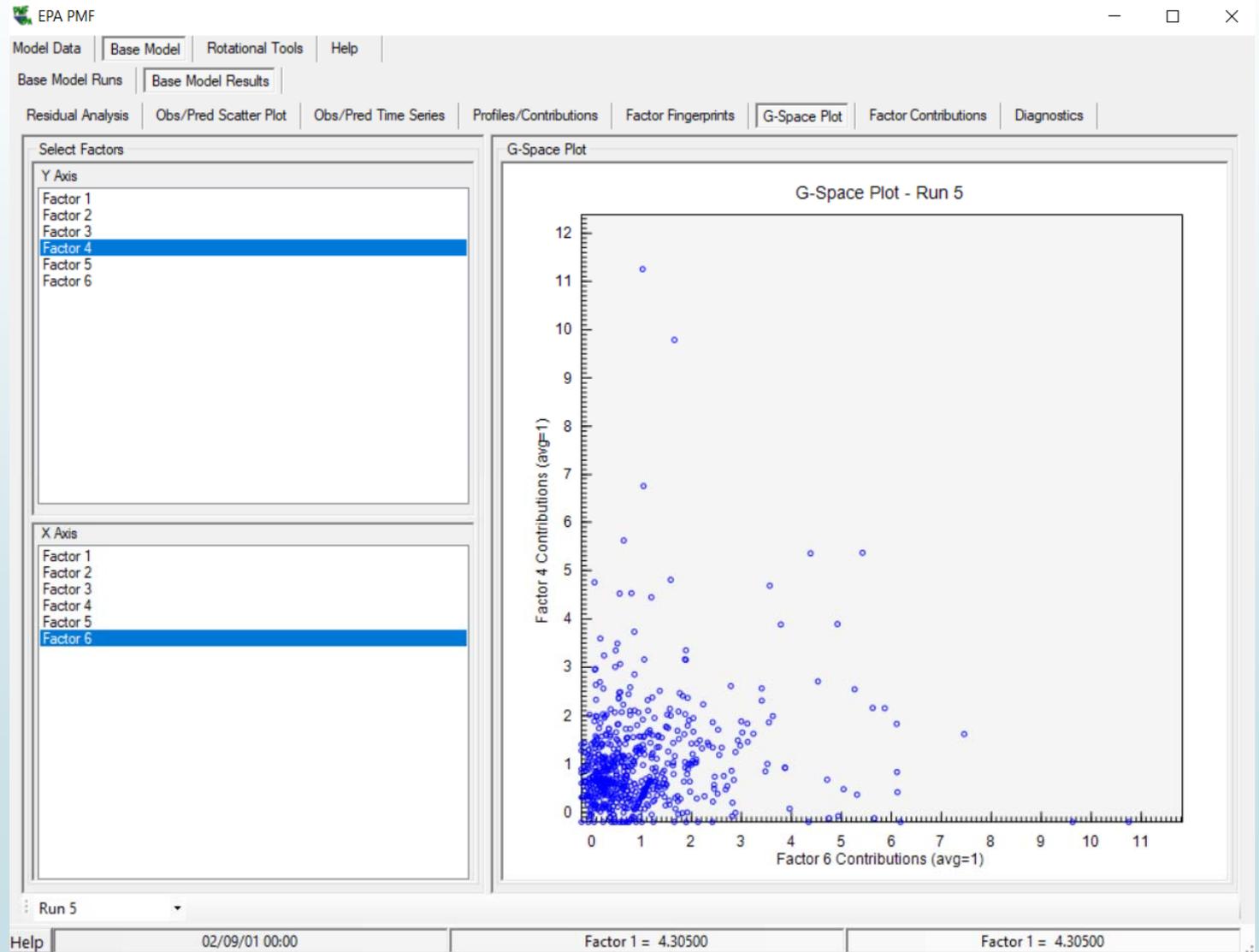
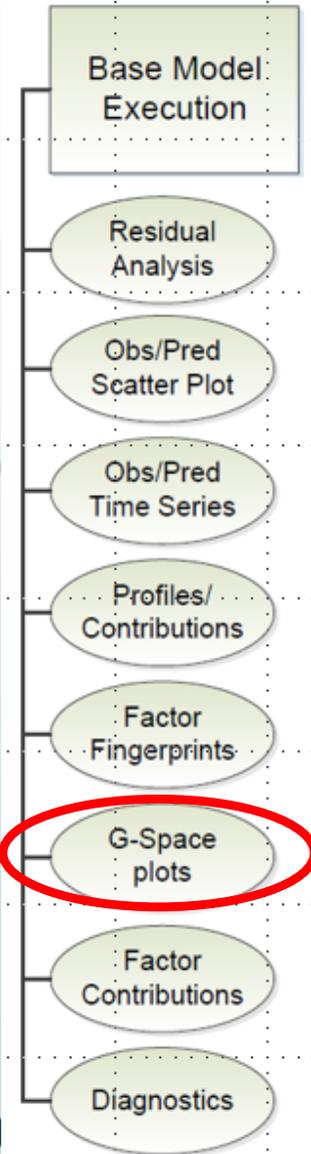
Esecuzione del modello

2



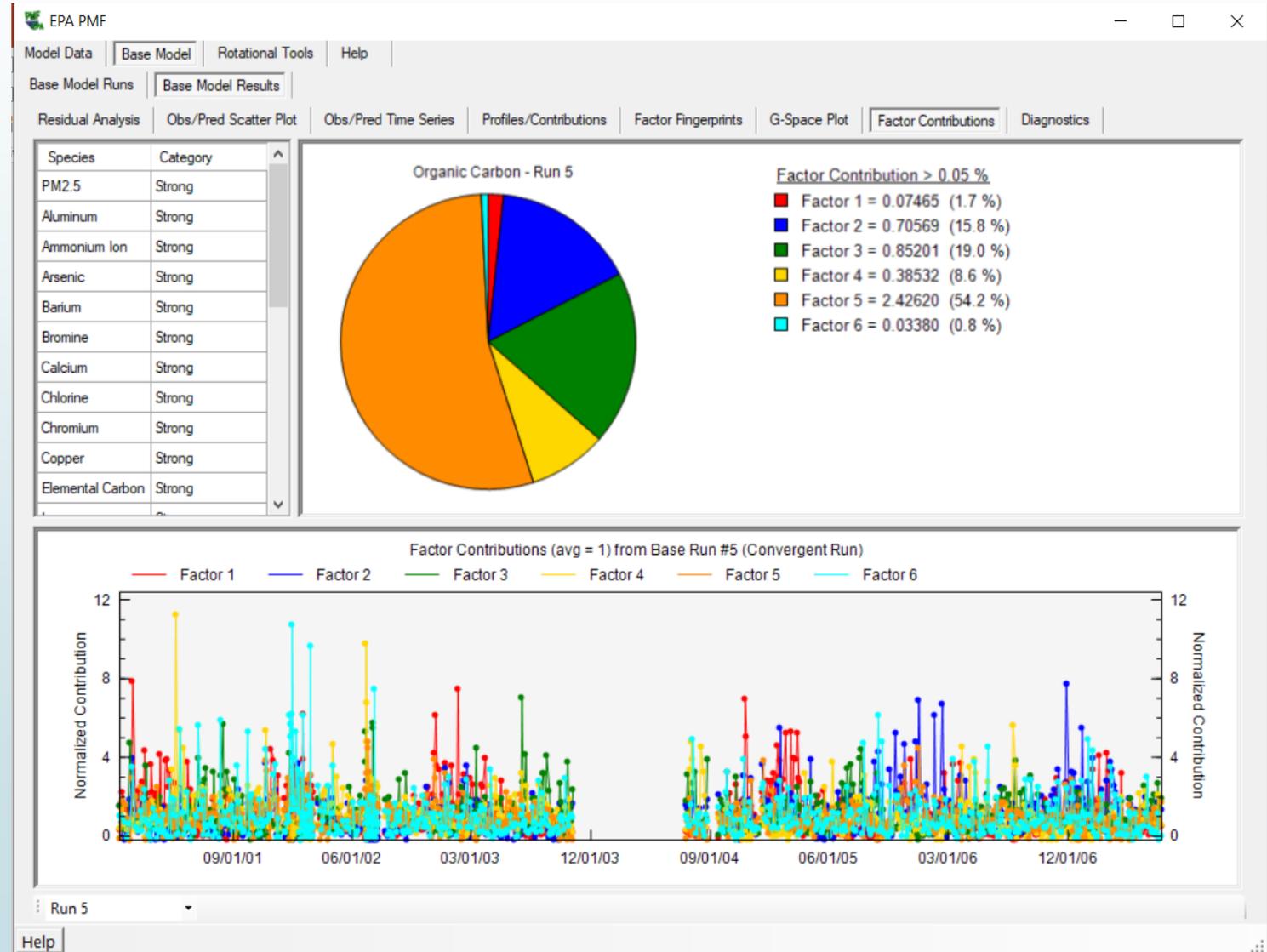
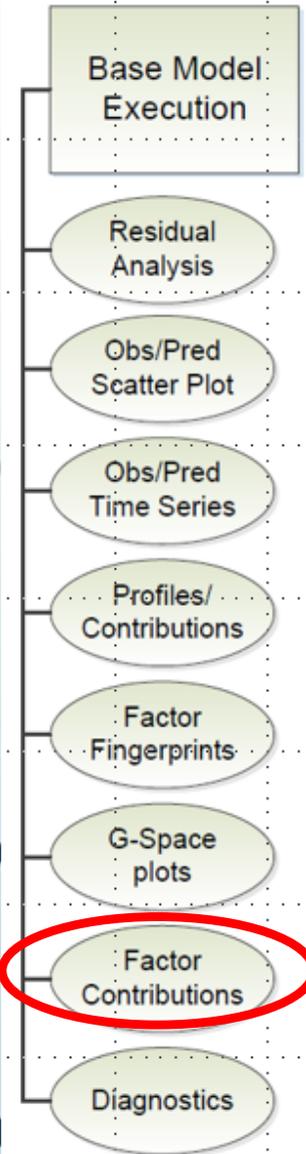
Esecuzione del modello

2



Esecuzione del modello

2





Come attribuire un fattore ad una sorgente specifica?

- Studio correlazione tra il profilo di emissione del fattore e i profili di emissioni pubblicati in letteratura per le diverse sorgenti;
- Studio della correlazione tra la serie temporale del fattore e la serie temporale della concentrazione di traccianti specifici emessi dalla sorgente;
- Studio della variabilità diurna, settimanale, e stagionale.



Risorse disponibili on-line

https://www.epa.gov/sites/default/files/2015-02/documents/pmf_5.0_user_guide.pdf

https://www.lcsqa.org/system/files/media/documents/eu_guide_source_apportionment_jrc_2013.pdf

<https://publications.jrc.ec.europa.eu/repository/handle/JRC130562>