

Generalmente, il *training set* presenta un numero di *patterns* maggiore rispetto a quello del *testing set*, in quanto l'addestramento richiede un notevole contingente di esempi, al fine del raggiungimento della configurazione dei pesi delle connessioni corrispondente all'apprendimento del *problema*.

I dati dei *file*, di addestramento e verifica, vengono normalizzati affinché risultino tra loro confrontabili ed esercitino la medesima influenza sulla rete neuronale.

La normalizzazione è stata effettuata secondo la formula:

$$\bar{x}_i = 0.2 + 0.6 \cdot \frac{(O_i - O_{\min})}{(O_{\max} - O_{\min})}$$

dove O_i è la i -esima osservazione della variabile O , O_{\min} è il valore minimo assunto dalla variabile O e O_{\max} è il valore massimo della stessa variabile.

La conversione ha consentito di ottenere valori compresi nell'intervallo 0.2-0.8, con l'intento di evitare le code della funzione di trasferimento *sigmoide* (Comrie A., 1997).

Una volta addestrata la rete si è provveduto alla conversione inversa dei valori di output ed alla loro analisi qualitativa.

I criteri di valutazione dei risultati sono molteplici. Una prima indicazione della bontà dei risultati è fornita dal valore del coefficiente di correlazione tra valori sperimentali e valori simulati. La valutazione delle capacità previsionali dei modelli, prevede anche dei test sull'abilità degli stessi a riprodurre gli eventi acuti d'inquinamento da ozono. Data l'assenza di valori sperimentali che eccedano i *livelli d'allarme*, il test è stato applicato solamente alla previsione di eventi di superamento delle soglie di concentrazione di O_3 , stabilite per il *livello d'attenzione*. Tale test, consiste in una serie di indici statistici calcolati sulla base di parametri ricavati da tabelle di contingenza¹.

5.1. Modelli per l'ozono a Bassano del Grappa

La prima rete neuronale per la previsione a scala di bacino, è stata addestrata sulla concentrazione attuale di ozono di Bassano del Grappa, intregando l'informazione in ingresso costituita dai dati rilevati a Montecchio Maggiore, Schio, Vicenza Ovest e

¹ Per ulteriori delucidazioni si rimanda al cap. 4, paragrafo 4.4.

Valdagno all'istante della previsione, con altri (soltanto variabili di tipo meteorologico) che descrivono lo stato del sistema a Bassano del Grappa, in istanti precedenti.

Una seconda rete neuronale, simile alla prima, è stata arricchita di informazioni ottenute a Bassano del Grappa in istanti precedenti, includendo le concentrazioni di NO₂ e di O₃ relative ad ore precedenti.

La terza rete neuronale è stata addestrata per fornire in uscita la concentrazione prossima di O₃ a Bassano del Grappa, ricevendo in ingresso dati di smog fotochimico in altri punti del territorio in istanti temporali precedenti, e gli stessi dati utilizzati nella seconda rete per descrivere lo stato del sistema a Bassano del Grappa, sempre in istanti temporali precedenti.

Per quanto riguarda il tipo di variabili in input sono state scelte quelle dotate di una più elevata correlazione con l'ozono di Bassano del Grappa.

I modelli sviluppati sono riportati in tabella 5.1, dov'è descritta anche la relativa configurazione. Nella prima colonna si riporta il nome assegnato alla rete, nella seconda si definisce il numero di neuroni in ciascun strato e nella terza colonna si definiscono le componenti del vettore d'input. Tali componenti sono variabili chimiche o meteorologiche riferite all'istante t e a quelli precedenti ($t-1$, $t-2$) e ad una stazione di misura: così $Rst(t-2)Bg$ indica la radiazione solare misurata a Bassano del Grappa all'istante $t-2$.

Nella seconda e nella terza rete riportate in tab. 5.1 sono presenti in input i valori di O₃ regressi (al tempo $t-1$) di Bassano del Grappa. Tale input che tiene conto della "componente autoregressiva" del fenomeno, conferisce alle rispettive reti maggiori capacità di simulazione. I risultati forniti dalla seconda e dalla terza rete, infatti, sono migliori di quelli forniti dalla prima. Si fa notare, inoltre, che la prima rete non presenta in input variabili chimiche relative alla stazione di Bassano del Grappa, ma solamente meteorologiche, mentre le variabili chimiche (in particolare il solo O₃) provengono dalle altre stazioni di riferimento. Previsioni anche discrete, se non ottime, realizzate da questo modello, stanno a significare che nel bacino provinciale di Vicenza lo smog fotochimico è un fenomeno dotato di una componente distribuita su larga scala spaziale.

Tabella 5.1. Reti neurali per il calcolo dell'ozono misurato a Bassano del Grappa. (*Bg* = Bassano del Grappa; *Mm* = Montecchio Maggiore; *Sc* = Schio; *Vl* = Valdagno; *Vo* = Vicenza Ovest).

Rete	Tipo	N° patterns		Elementi del vettore d'input
		Trn.	Tst.	
Bg-Net1	f-7-5-1	873	500	Rst(t-2)Bg-T(t-1)Bg-Ur(t-1)Bg-O ₃ (t)Sc-O ₃ (t)Mm-O ₃ (t)VI-O ₃ (t)Vo;
Bg-Net2	f-9-7-1	860	500	NO ₂ (t-1)Bg-T(t-1)Bg-Ur(t-1)Bg-Rst(t-2)Bg-O ₃ (t-1)Bg-O ₃ (t)Mm-O ₃ (t)Sc-O ₃ (t)VI-O ₃ (t)Vo;
Bg-Net3	f-9-7-1	859	500	NO ₂ (t-1)Bg-T(t-1)Bg-Ur(t-1)Bg-Rst(t-2)Bg-O ₃ (t-1)Mm-O ₃ (t-1)Sc-O ₃ (t-1)VI-O ₃ (t-1)Vo;

In tutte e tre le reti la coordinata temporale delle componenti meteorologiche è unica e corrisponde all'ora immediatamente precedente a quella di output. Fa eccezione la radiazione solare, che è fornita con due ore di anticipo. La scelta si deve ad un ritardo nella correlazione incrociata tra le serie storiche dell'ozono e della radiazione solare (v. tab. 3.12-3.13, Cap.3). La correttezza della scelta è confermata dai risultati dei calcoli di cinetiche chimiche riportati in appendice A, i quali mettono in risalto la dipendenza della concentrazione dell'ozono, al tempo t, dalla radiazione solare al tempo t-2. Il vento (velocità e direzione) non è stato considerato perché scorrelato da O₃.

Nelle fig. 5.1, 5.2 e 5.3 è riportata la retta di regressione calcolata per le reti "Bg-Net1", "Bg-Net2" e "Bg-Net3".

Fig. 5.1. *Analisi dei risultati della rete "Bg-Net1": regressione tra valori sperimentali e simulati.*

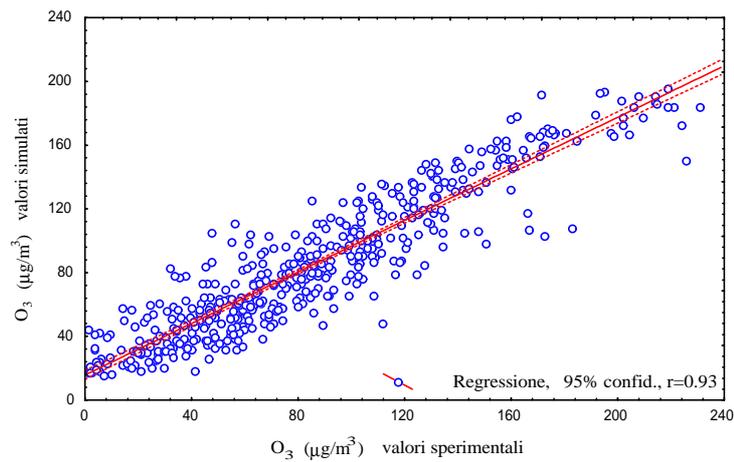


Fig. 5.2. Analisi dei risultati della rete “Bg-Net2”: regressione lineare tra valori sperimentali e simulati.

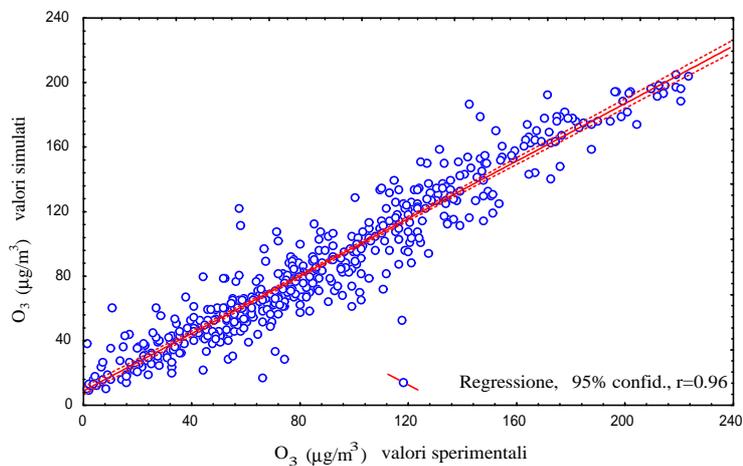
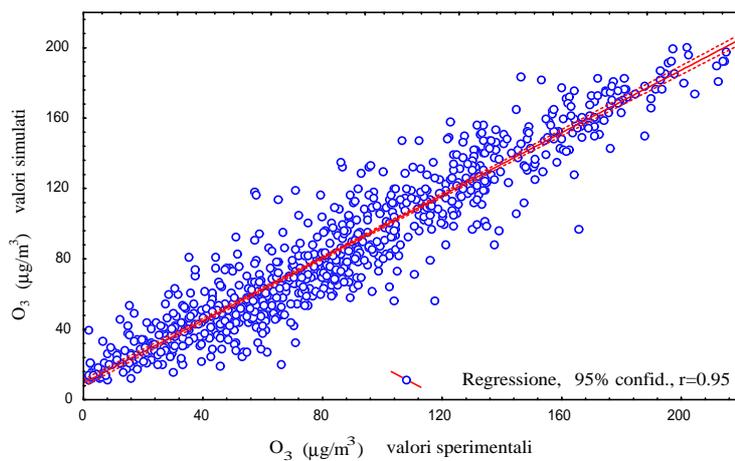


Fig. 5.3. Analisi dei risultati della rete “Bg-Net3”: regressione lineare tra i valori sperimentali e calcolati.



Il valore del coefficiente di correlazione (r), tra dati simulati e sperimentali, è molto prossimo all'unità per le simulazioni prodotte dalla seconda e dalla terza rete, mentre la

prima riproduce dei valori leggermente più dispersi con un coefficiente di correlazione di appena 0.93. In tutti e tre i casi si sono riportati i diagrammi di correlazione relativi al testing set.

Una seconda valutazione di qualità dei risultati è stata eseguita analizzando la natura dei residui tra la concentrazione di O₃ sperimentale e la concentrazione di O₃ simulato².

Fig. 5.4. Autocorrelazione dei residui della rete “Bg-Net1”.

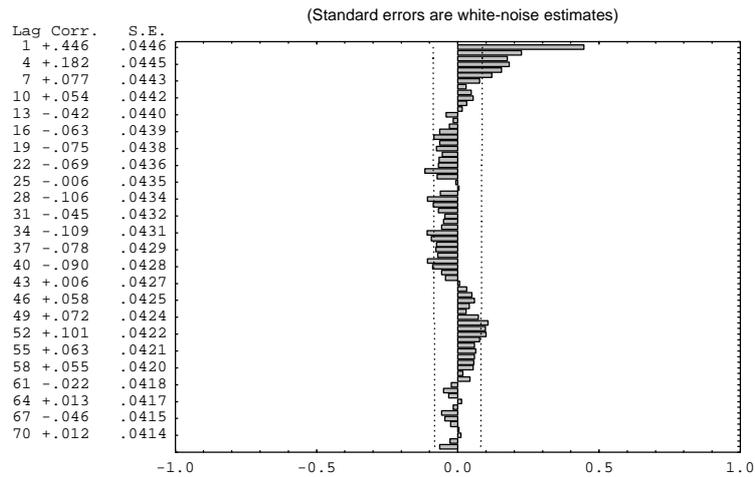


Fig. 5.5. Autocorrelazione dei residui della rete “Bg-Net2”.

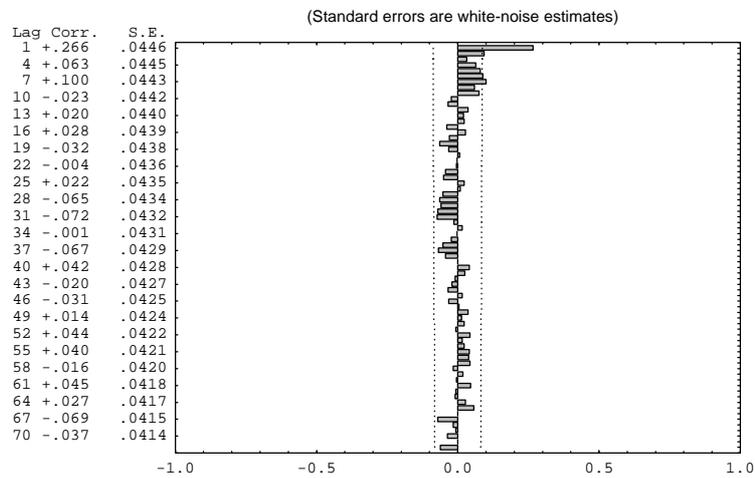
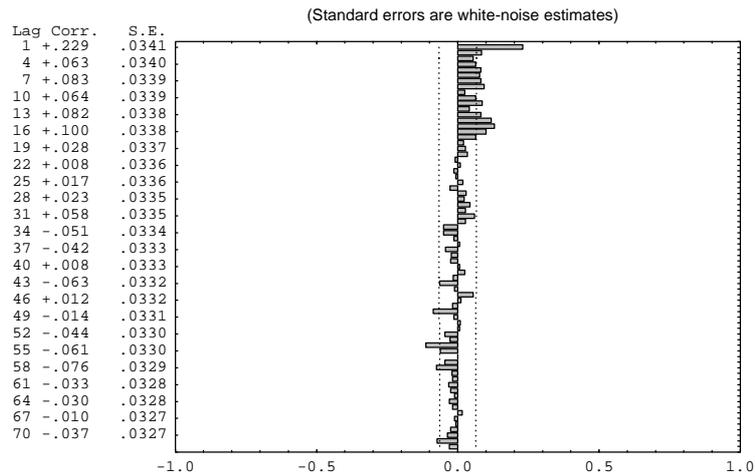


Fig. 5.6. Autocorrelazione dei residui della rete “Bg-Net3”.

² Un diagramma di autocorrelazione dei residui pressoché piatto o con piccole oscillazioni all’interno della banda di confidenza indica che il processo generatore della serie è di tipo *white noise*, le cui determinazioni sono di tipo puramente casuale, identicamente distribuite e tra loro scorrelate.



Dalle fig. 5.5 e 5.6 è possibile osservare che i residui delle reti “Bg-Net2” e “Bg-Net3” presentano valori di autocorrelazione per la maggior parte dei casi all’interno dell’intervallo di confidenza del *rumore bianco* e che i valori eccedenti tale intervallo sono comunque piuttosto bassi. Inoltre non sono evidenti particolari periodicità nella distribuzione dei valori di autocorrelazione. Dalla lettura della fig. 5.4, invece, si denota un andamento dei valori di autocorrelazione dotato di una certa periodicità e con valori piuttosto alti.

Le tabelle 5.2, 5.3 e 5.4³ riportano le statistiche per il confronto tra le serie sperimentali e quelle prodotte dai modelli.

³ Per i significati degli indici riportati nelle tabelle si rimanda al cap.4., paragrafo 4.4.

Tabella 5.2. Analisi statistica dell'accuratezza e della precisione delle previsioni realizzate dalla rete "Bg-Net1".

Modello "Bg-Net 1"				
	<i>Training set</i>		<i>testing set</i>	
numero di esempi, N	873		500	
media dei valori osservati, \bar{O}	85.60		84.50	
media dei valori previsti, \bar{P}	85.30		84.12	
deviazione standard dei valori osservati, s_o	48.27		50.92	
deviazione standard dei valori previsti, s_p	43.99		44.37	
coefficiente di correlazione	0.92		0.93	
varianza spiegata	0.85		0.86	
regressione lineare	a = 13.22	b = 0.84	a = 13.10	b = 0.81
errore medio assoluto, MAE	14.56		14.62	
radice dell'errore quadratico medio, RMSE	18.47		19.17	
errore quadratico medio sistematico, $RMSE_s$	7.62		9.74	
errore quadratico medio casuale, $RMSE_u$	16.82		16.51	
indici di Willmott, d_1 e d_2	$d_1 = 0.81$	$d_2 = 0.96$	$d_1 = 0.81$	$d_2 = 0.96$

Tabella 5.3. Analisi statistica dell'accuratezza e della precisione delle previsioni realizzate dalla rete "Bg-Net2".

Modello "Bg-Net 2"				
	<i>Training set</i>		<i>testing set</i>	
numero di esempi, N	860		500	
media dei valori osservati, \bar{O}	84.06		87.55	
media dei valori previsti, \bar{P}	83.75		86.85	
deviazione standard dei valori osservati, s_o	48.45		50.80	
deviazione standard dei valori previsti, s_p	45.63		47.26	
coefficiente di correlazione	0.95		0.96	
varianza spiegata	0.91		0.92	
regressione lineare	a = 8.13	b = 0.90	a = 8.87	b = 0.89
errore medio assoluto, MAE	10.88		10.84	
radice dell'errore quadratico medio, RMSE	14.34		14.73	
errore quadratico medio sistematico, $RMSE_s$	4.87		5.60	
errore quadratico medio casuale, $RMSE_u$	13.49		13.62	
indici di Willmott, d_1 e d_2	$d_1 = 0.86$	$d_2 = 0.98$	$d_1 = 0.86$	$d_2 = 0.98$

Tabella 5.4. *Analisi statistica dell'accuratezza e della precisione della previsione realizzata dalla rete "Bg-Net3".*

Modello "Bg-Net3"				
	training set		testing set	
numero di esempi, N	859		500	
media dei valori osservati, \bar{O}	85.64		84.86	
media dei valori previsti, \bar{P}	85.52		83.88	
deviazione standard dei valori osservati, s_o	49.41		49.32	
deviazione standard dei valori previsti, s_p	46.16		46.31	
coefficiente di correlazione	0.95		0.96	
varianza spiegata	0.90		0.89	
regressione lineare	a = 9.61	b = 0.89	a = 8.53	b = 0.89
errore medio assoluto, MAE	11.92		12.20	
radice dell'errore quadratico medio, RMSE	15.62		16.04	
errore quadratico medio sistematico, $RMSE_s$	5.61		5.61	
errore quadratico medio casuale, $RMSE_u$	14.57		15.03	
indici di Willmott, d_1 e d_2	$d_1 = 0.85$	$d_2 = 0.97$	$d_1 = 0.84$	$d_2 = 0.97$

Tabella 5.5. *Tabella di contingenza per il superamento della soglia d'attenzione dell' O_3 nei valori sperimentali e nei valori previsti dalla rete "Bg-Net1".*

Tabella di contingenza per $O_3 > 180 \text{ mg/m}^3$, "Bg-Net1"		
	Eventi favorevoli per i valori previsti	Eventi sfavorevoli per i valori previsti
Eventi favorevoli per i valori osservati	12 (A)	12 (B)
Eventi sfavorevoli per i valori osservati	1 (C)	475 (D)

Tabella 5.6. *Coefficienti per la valutazione della bontà della previsione dei valori eccedenti la soglia d'attenzione per l' O_3 effettuata dalla rete "Bg-Net1".*

Probability of detection, POD	0.50
Miss Rate, MISS	0.50
False Alarm Rate, FAR	0.08
Correct Null Forecast, CNULL	1.00
Critical Success Index, CSI	0.48
True Skill Scores, TSS	0.50
Heidke Skill Score, S	0.64

Tabella 5.7. Tabella di contingenza per il superamento del livello d'attenzione dell'O₃ nei valori sperimentali e in quelli previsti dalla rete "Bg-Net2".

Tabella di contingenza per O₃ > 180 mg/m³, "Bg-Net2"		
	Eventi favorevoli per i valori previsti	Eventi sfavorevoli per i valori previsti
Eventi favorevoli per i valori osservati	17 (A)	10 (B)
Eventi sfavorevoli per i valori osservati	3 (C)	470 (D)

Tabella 5.8. Analisi statistica per la valutazione della bontà delle previsioni di eventi acuti effettuate dalla rete "Bg-Net2".

<i>Probability of detection, POD</i>	0.63
<i>Miss Rate, MISS</i>	0.37
<i>False Alarm Rate, FAR</i>	0.15
<i>Correct Null Forecast, CNULL</i>	0.99
<i>Critical Success Index, CSI</i>	0.57
<i>True Skill Scores, TSS</i>	0.62
<i>Heidke Skill Score, S</i>	0.71

Tabella 5.9. Tabella di contingenza per il superamento del livello d'attenzione dell'O₃ nei dati sperimentali e in quelli simulati dalla rete "Bg-Net3".

Tabella di contingenza per O₃ > 180 mg/m³, "Bg-Net3"		
	Eventi favorevoli per i valori previsti	Eventi sfavorevoli per i valori previsti
Eventi favorevoli per i valori osservati	16 (A)	7 (B)
Eventi sfavorevoli per i valori osservati	3 (C)	474 (D)

Tabella 5.10. Parametri per la valutazione della bontà delle previsioni di eventi acuti realizzate dalla rete "Bg-Net3".

<i>Probability of detection, POD</i>	0.70
<i>Miss Rate, MISS</i>	0.30
<i>False Alarm Rate, FAR</i>	0.16
<i>Correct Null Forecast, CNULL</i>	0.99
<i>Critical Success Index, CSI</i>	0.61
<i>True Skill Scores, TSS</i>	0.69
<i>Heidke Skill Score, S</i>	0.75

Dalla

lettura delle tab. 5.2÷5.4 si osserva che:

- la rete “Bg-Net1” riproduce il fenomeno in modo abbastanza fedele, con uno scarto tra il valore medio delle osservazioni ed il valore medio delle previsioni di $0.30 \mu\text{g}/\text{m}^3$, per il training set, e di $0.38 \mu\text{g}/\text{m}^3$ per il testing set, un coefficiente di correlazione pari a 0.92 nel training e 0.93 nel testing ed un errore (RMSE) pari a circa il 10% della concentrazione di riferimento per la *soglia d’attenzione* ($180 \mu\text{g}/\text{m}^3$).
- la rete “Bg-Net2” produce delle simulazioni maggiormente correlate ai valori sperimentali, con $r = 0.95$ per il training set e $r = 0.96$ per il testing set e con un errore (RMSE) lievemente inferiore, corrispondente a circa l’8% della concentrazione di riferimento per la *soglia d’attenzione*, ma dotate di uno scarto tra il valore medio delle stesse e quello dei valori sperimentali superiore a quello prodotto dalla rete “Bg-Net1”: $0.31 \mu\text{g}/\text{m}^3$ per il training set e di $0.7 \mu\text{g}/\text{m}^3$ per il testing set.
- la rete “Bg-Net3” produce delle previsioni dotate della stessa correlazione con i valori sperimentali di quelle prodotte dalla rete “Bg-Net2”, ma l’errore (RMSE) è superiore, circa il 9% della soglia d’attenzione e lo scarto tra le medie di valori osservati e previsti è inferiore nel training set, $0.12 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ma superiore nel testing set, $0.98 \mu\text{g}/\text{m}^3$.
- si osserva come le riproduzioni relative al *testing set*, che comprende un insieme di dati non utilizzati durante l’addestramento, non si discostino molto da quelle realizzate dalle stesse reti sul *training set*: la rete “Bg-Net1” è caratterizzata da una differenza di $0.7 \mu\text{g}/\text{m}^3$ tra gli errori (RMSE) nel *training set* e nel *testing set*, la rete “Bg-Net2” di appena $0.39 \mu\text{g}/\text{m}^3$ e la rete “Bg-Net3” di $0.42 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Questo risultato è testimonianza di una buona capacità di generalizzazione delle reti addestrate.

Dalle tabelle 5.5÷5.10, si ricava che la rete “Bg-Net1” produce la più bassa percentuale di previsioni corrette degli eventi acuti, rispetto alle altre reti, ma produce anche il più basso coefficiente di falso allarme ed il più alto coefficiente di previsione corretta degli eventi non acuti. La rete “Bg-Net3” è quella che effettua la maggiore percentuale di previsioni corrette degli eventi acuti, ma anche la più alta percentuale di previsioni con falso allarme. La rete “Bg-Net3”, quindi, dalla serie delle analisi proposte, sembra la più adatta alle previsioni a scala di bacino dell’ozono di Bassano del Grappa.

I test di capacità previsionale degli eventi, sono stati applicati solamente al *validation set*. In questo modo si è potuto valutare se le reti sottoposte al test sono in grado di fornire risposte sostanzialmente corrette anche ad input non incontrati nella fase di addestramento.

Nelle figure 5.7÷5.9 è presentato uno *spezzone* dell'insieme degli output forniti dalle tre reti (rispettivamente "Bg-Net1", "Bg-Net2" e "Bg-Net3") sovrapposto ai corrispondenti dati sperimentali. I diagrammi permettono un confronto complessivo sulla riproduzione del fenomeno e mettono in evidenza episodi di alte concentrazioni. In ascissa non è riportato l'ordine delle osservazioni e delle corrispondenti previsioni, essendo le prime ottenute mediante estrazione casuale senza ripetizione da un set originario di esempi ordinati.

Fig. 5.7. Analisi dei risultati della rete "Bg-Net1": confronto tra i dati sperimentali ed i simulati.

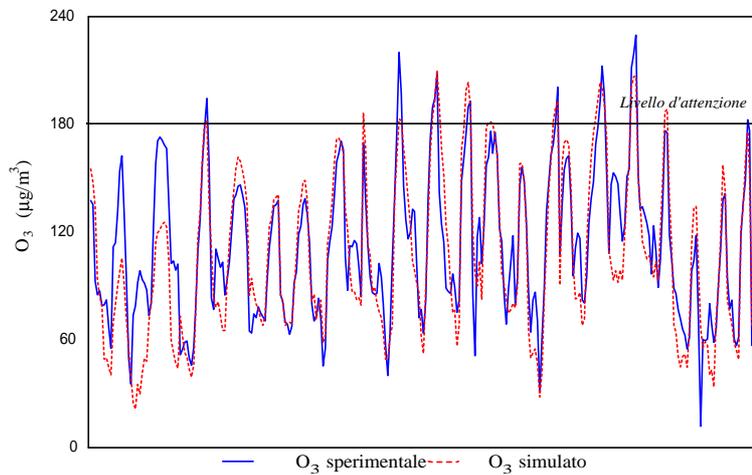


Fig. 5.8. Analisi dei risultati della rete "Bg-Net2": confronto tra valori sperimentali e simulati.

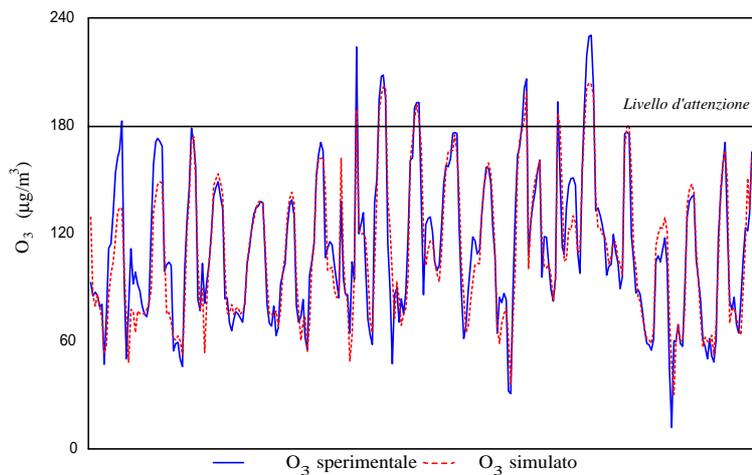
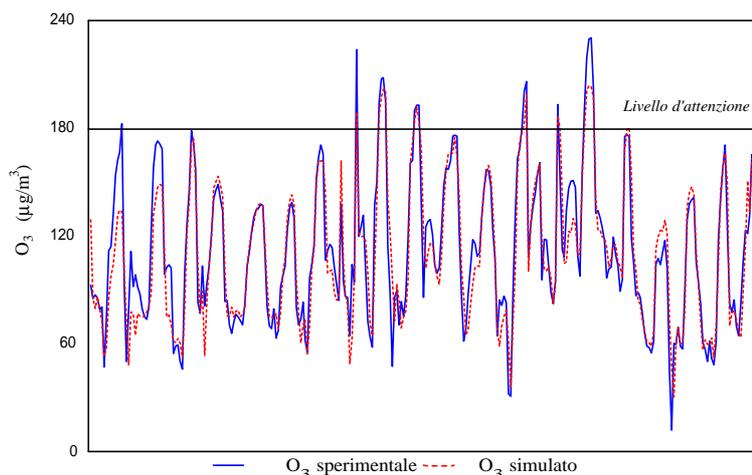


Fig. 5.9. Analisi dei risultati della rete "Bg-Net3": confronto tra i dati sperimentali e quelli simulati.



Osservando il diagramma 5.7 si nota la difficoltà della rete “Bg-Net1” nel riprodurre i picchi delle concentrazioni di O_3 : difficoltà che invece non è presente, se non in maniera molto limitata, nelle reti “Bg-Net2” e “Bg-Net3” riportate nei diagrammi 5.8 e 5.9.

In definitiva, dall’insieme delle analisi di qualità dei risultati si conclude che “Bg-Net2” e “Bg-Net3” forniscono le riproduzioni migliori, sotto ogni punto di vista.

Al di là della valutazioni in merito alle capacità di previsione, lo studio dei diversi modelli neurali ha consentito, tramite l’analisi di sensitività⁴, di fare alcuni considerazioni sul fenomeno “ozono” a Bassano del Grappa.

Per la rete “Bg-Net1” le variabili d’ingresso che maggiormente contribuiscono a determinare l’output sono, tra le variabili meteorologiche, $Ur(t-1)$ ed $Rst(t-2)$, mentre, tra le variabili chimiche, risaltano $O_3(t)Mm$ ed $O_3(t)Sc$; la rete “Bg-Net2” mette, invece, in risalto solamente variabili chimiche, in particolare $O_3(t-1)Bg$, $O_3(t)Sc$ e $O_3(t)Mm$; la rete “Bg-Net3” infine fornisce dei risultati che sono maggiormente determinati dalla temperatura e dalla radiazione solare ($T(t-1)$ e $RST(t-2)$), per quanto riguarda le componenti meteorologiche, e da $O_3(t-1)Bg$ e $O_3(t-1)Sc$ per quanto riguarda le variabili chimiche.

Questi risultati confermano il ruolo della meteorologia nella dinamica dell’inquinamento da ozono, guidato in particolare dalla radiazione solare, dalla

⁴ La sensitività della rete esprime le variazioni, calcolate su tutti gli output di *training*, con riferimento alla risposta del *pattern* medio. La sensitività è normalizzata in modo che risulti unitaria quando tutti gli input hanno lo stesso effetto sull’output. In questo modo, sensitività maggiori di uno amplificano l’effetto del corrispondente input e sensitività inferiori a uno lo deprimono.

temperatura e dall'umidità relativa, mettono in rilievo l'importanza del ruolo assunto dalla componente regressa di O_3 nel migliorare l'efficienza previsionale delle reti "Bg-Net2" e "Bg-Net3" rispetto la rete "Bg-Net1" ed infine ci dicono quali tra tutti i siti di monitoraggio del territorio provinciale di Vicenza utilizzati nel presente lavoro, contribuiscono al meglio nel determinare le concentrazioni di O_3 a Bassano del Grappa: Schio e Montecchio Maggiore. Quest'ultimo risultato conferma il coinvolgimento del fenomeno dello smog fotochimico in una scala aerologica che va oltre l'ambiente urbano.

5.2. Modelli per l'ozono a Montecchio Maggiore

Per Montecchio Maggiore sono stati sviluppati gli stessi tre modelli illustrati per Bassano del Grappa, con la differenza che ora le variabili di origine puntuale si riferiscono a Montecchio Maggiore e quelle distribuite nel territorio della provincia di Vicenza includono Bassano del Grappa al posto di Montecchio Maggiore (v. tab. 5.1).

Il numero dei *patterns* disponibili per l'addestramento e la validazione dei modelli di ozono per Montecchio Maggiore è inferiore a quello dei *patterns* disponibili a Bassano del Grappa. In particolare, Bassano del Grappa dispone di 873 esempi di addestramento e di 500 esempi per la validazione del modello, mentre Montecchio Maggiore dispone di 600 esempi per l'addestramento e 373 per la validazione. Tale mancanza a Montecchio Maggiore è dovuta al fatto che, pur usando lo stesso spezzone temporale della matrice dei dati, il numero effettivo degli esempi forniti nel *training* e nel *testing* set dipende dal numero dei dati mancanti, la cui presenza nel vettore di addestramento implica l'eliminazione dello stesso. Il ridotto numero dei *patterns* ha ridotto la possibilità di raggiungere una configurazione dei pesi delle connessioni sufficiente per una buona prestazione di ciascun modello.

Le figure 5.10÷5.12 mostrano la regressione lineare tra i valori sperimentali di O_3 e quelli simulati rispettivamente dalle reti "Mm-Net1", "Mm-Net2" e "Mm-Net3" per il set di *testing*. È stato scelto il *Testing set* per mostrare la capacità di generalizzazione dei modelli elaborati.