



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI ROMA TRE
FACOLTÀ DI SCIENZE M.F.N.
CORSO DI LAUREA MAGISTRALE IN MATEMATICA

Tesi di Laurea Magistrale in
Matematica

**Tecniche numeriche in problemi inversi di
dispersione atmosferica:
sintesi**

Emanuela Miggiano

Anno Accademico 2013/2014

Relatore
Prof. Roberto Ferretti

Correlatore
Prof. Wolfgang Plastino

1 Introduzione

All'inizio le esplosioni venivano condotte con poco riguardo per l'ambiente in quanto non si conoscevano gli effetti a lungo termine delle radiazioni nucleari. In questa fase i test nucleari venivano condotti principalmente sul terreno aperto o nell'atmosfera, per verificare la dinamica delle esplosioni nucleari ed i loro effetti su cose e persone, progettare nuove armi nucleari e studiare il successivo fallout radioattivo, che è molto maggiore se l'esplosione nucleare avviene al suolo o sulla superficie del mare.

Questa prima fase si chiuse con il PTBT (Partial Test Ban Treaty), firmato il 5 agosto 1963 che proibì agli Stati firmatari i test in atmosfera, terrestri e sottomarini lasciando la possibilità di effettuare ancora quelli sotterranei. Successivamente i test nucleari sono dunque continuati nel sottosuolo, e con potenze minori a partire dalla firma tra USA e URSS del TTBT, firmato il 3 luglio 1974, che limita le esplosioni sotterranee alla potenza di 150 chilotoni. I negoziati che si sono svolti presso Ginevra, attraverso un'apposita commissione (NTB), sono giunti alla firma del Trattato per la proibizione totale delle esplosioni nucleari (CTBT), anche se per la sua entrata in vigore è ancora necessaria la sua ratifica da parte di un notevole numero di Stati. Il Trattato prevede la creazione di un'apposita organizzazione degli Stati firmatari che si occuperà di sovrintendere il 24 settembre 1996, all'esecuzione degli obblighi previsti dal trattato stesso, il CTBTO (Comprehensive Test Ban Treaty Organization) che avrà la sua sede centrale presso il Centro Internazionale di Vienna facente parte dell'Organizzazione delle Nazioni Unite.

Per far rispettare il trattato è stato progettato l'IMS (International Monitoring System) costituito da circa 321 stazioni di rilevamento (sismico,

infrasonico, idroacustico e radionuclidico) che hanno il compito di mantenere sotto controllo l'ambiente terrestre, atmosferico, marino e sotterraneo per individuare eventuali sorgenti di segnali provenienti da esplosioni nucleari. La rete di monitoraggio della radioattività in aria è costituita da 80 stazioni di monitoraggio fisse e da 16 laboratori certificati.

Per monitorare le particelle radioattive e i gas nobili prodotti dalle esplosioni sotterranee e atmosferiche e disperse dai venti atmosferici, è stato progettato l'ATM (Atmospheric Transport Modelling). Al fine di localizzare una potenziale sorgente viene utilizzata la modalità backtracking dell'ATM, che associa ai rilevamenti di radionuclidi i possibili luoghi d'origine, in posizioni di monitoraggio. Il sistema backtracking dell'ATM utilizza gli input meteorologici provenienti dal Centro Europeo per le previsioni di medio raggio (ECMWF, European Centre for Medium Range Forecast), uno dei più avanzati centri meteorologici nel mondo. Inoltre, l'IDC (International Data Centre) integra le stime dell'ATM tramite la WMO (World Meteorological Organization) in modo da aumentare la fiducia nella valutazione della posizione d'origine. Inoltre l'ATM contribuendo in modo significativo alle caratterizzazioni dei gas nobili, segnala le false rivelazioni di xeno provenienti da fonti fisse note.

L'energia in eccesso ad una esplosione nucleare viene rilasciata dalla reazione a catena esotermica di fissione nucleare indotta. Al contrario di una fissione nucleare spontanea, dove un isotopo decade senza influenze esterne a causa di una propria configurazione dei nuclei instabile, la fissione indotta viene avviata da un neutrone esterno. In questo caso un neutrone entrato viene assorbito dal nucleo, lo eccita ad uno stato instabile e pertanto provoca il processo di fissione.

Gli isotopi dello xeno vengono prodotti in grande quantità durante le esplosioni nucleari e sono difficili da contenere; quindi l'individuazione di radioisotopi dello xeno da una fissione può essere usata per verificare se una esplosione nucleare si è o meno verificata.

Un altro gas nobile è il radioxeno, che è principalmente generato come prodotto di fissione nei reattori nucleari ma anche attraverso la fissione spontanea di alcuni isotopi transuranici come ad esempio il ^{240}Pu . Gli isotopi stabili possono provenire dalla fissione spontanea o rimanere come residuo dalla fissione nel reattore nucleare. I rapporti degli isotopi stabili possono essere usati per distinguere tra sorgenti di combustibile irraggiato e sorgenti di pure fissioni spontanee. Gli isotopi radioattivi dello xeno rappresentano un indicatore significativo della produzione nucleare a causa del fondo naturale inferiore rispetto a quello degli isotopi stabili.

In particolare lo xeno è considerato lo strumento principale per fornire la prova (smoking gun) dell'avvenuta effettuazione di test nucleari clandestini. Dal 1963 i test nucleari in tutto il mondo sono stati sotterranei per limitare il rilascio dei prodotti di fissione.

Il radioxeno, quindi, è usato per rilevare a distanza le esplosioni nucleari essendo emesso come gas nobile da esplosioni nucleari sotterranee e trasportato attraverso l'atmosfera senza attacchi chimici. Può essere rilevato ad una distanza di qualche migliaio di chilometri da una sorgente. Purtroppo, esistono anche altre fonti di radioxeno, in primo luogo ci sono le centrali nucleari. Poi ci sono anche gli impianti di produzione di isotopi medici, ce ne sono solo pochi al mondo: uno in Canada, uno in Belgio, uno in Sud Africa, uno in Australia e uno nei Paesi Bassi. Ciascuna di queste strutture produce una quantità di radioxeno circa uguale a tutte le centrali nucleari messe insieme. Pertanto, è di grande interesse limitare eventuali posizioni d'origine per ot-

tenere informazioni sulle emissioni.

Quando le particelle sono emesse in atmosfera sono soggette agli agenti atmosferici: il vento, le precipitazioni ecc., in questo modo esse possono essere trasportate attraverso l'atmosfera e rilevate in una posizione remota. La diluizione delle particelle dipende dalle diverse traiettorie delle particelle. L'obiettivo principale dell'ATM è di riprodurre la relazione tra l'emissione S da una sorgente e la concentrazione c al recettore. La modellazione inversa può essere utilizzata per individuare una fonte sconosciuta, o per limitare eventuali posizioni di origine, e per ottenere informazioni sulle emissioni. Nella sua versione più semplice, il problema si pone nella forma di un sistema delle equazioni normali.

I coefficienti di sensibilità vengono calcolati tramite un apposito software di simulazione dei processi di trasporto atmosferico, e la soluzione del problema inverso si basa tipicamente su stime di errore quadratico minimo. Partendo dalla implementazione di questo algoritmo di base, in questo lavoro si cercherà di migliorarne l'attendibilità e la robustezza, lavorando su casi noti, ed in particolare sui dati relativi all'incidente di Fukushima.

2 Ricostruzione del termine sorgente

Quando viene rilasciato, il gas xeno può essere trasportato con le masse d'aria per distanze lontane dal punto di rilascio.

La dispersione e il trasporto delle emissioni di radioxeno attraverso l'atmosfera possono essere simulati con la modellazione del trasporto atmosferico. Esistono molte fonti legittime di radioxeno: le centrali nucleari e gli impianti di produzione di isotopi sono i principali responsabili del fondo mondiale.

Quando una sola fonte con posizione nota contribuisce alla concentrazione al recettore, la relazione tra sorgente e recettore potrebbe non essere lineare, ma ha significativamente meno gradi di libertà rispetto a scenari di sorgenti multiple. La modellazione inversa può essere utilizzata per individuare una fonte sconosciuta, o limitare possibili posizioni d'origine, e ottenere informazioni sulle emissioni. Nella seguente sezione viene descritto come ricostruire informazioni sulle emissioni dipendenti dal tempo provenienti da una posizione nota.

Ciò è esemplare sulla base dell'incidente nucleare di Fukushima nel 2011. Sono state pubblicate altre ricostruzioni del termine sorgente per mezzo della modellazione inversa. In seguito sono descritti i passaggi di base per trasformare il problema in un insieme di equazioni lineari, che semplificherebbe l'automazione della ricostruzione del termine sorgente.

Quando le particelle sono emesse in atmosfera sono soggette alle condizioni atmosferiche dominanti quali il vento, le precipitazioni ecc. In questo modo possono essere trasportate attraverso l'atmosfera e rilevate in una posizione lontana. La diluizione della concentrazione dipende dalle varie traiettorie delle particelle. Lo scopo generale dell'ATM è riprodurre la relazione tra

l'emissione da una sorgente e la concentrazione al recettore.

Data la relazione che lega il rapporto tra sorgente e concentrazione osservata e il rapporto tra sorgente e concentrazione del modello utilizzato:

$$\frac{c_{\text{realtà}}}{S_{\text{realtà}}} \equiv \frac{c_{\text{modello}}}{S_{\text{modello}}} \quad (1)$$

il lato destro può essere incorporato in M , matrice sensibilità sorgente-recettore (SRS), che descrive la diluizione teorica della concentrazione tra sorgente e recettore:

$$M = \frac{c_{\text{modello}}}{S_{\text{modello}}}, \quad (2)$$

Definiamo le seguenti quantità: S_{ijk} sorgente nella posizione (i, j) durante l'intervallo di tempo k , c concentrazione al recettore e M_{ijk} matrice SRS; la concentrazione al recettore può essere espressa come il prodotto tra le emissioni della sorgente e il valore concordante della SRS:

$$c = M_{ijk} S_{ijk}. \quad (3)$$

Nel caso di simulazioni all'indietro, si calcola la concentrazione di un singolo campione sommando i contributi di tutti gli n intervalli di tempo da tutte le sorgenti conosciute nelle posizioni i, j .

Dati n intervallo di tempo di emissione, ovvero il tempo di campionamento e m intervallo di tempo di rilevamento, cioè quando il campione viene prelevato, ciò può essere riscritto nel caso di una singola sorgente nota ($i, j = \text{cost}$):

$$c_m = \sum_n M_{mn} S_n. \quad (4)$$

Quando si ha una serie di tempi di rilevamento, le sensibilità sorgente-recettore possono essere scritte come:

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & \dots & M_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ M_{m1} & \dots & M_{mn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} S_1 \\ \vdots \\ S_n \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Questo sistema descrive come le concentrazioni dei recettori c_m sono date dal prodotto delle emissioni S_n dei vari intervalli di tempo e le rispettive matrici SRS. È un sistema di equazioni lineari e, a seconda dei numeri m ed n , può anche essere sovra o sotto-determinato.

Ci sono vari metodi per risolvere automaticamente i sistemi sovradeterminati di equazioni lineari, che potrebbero includere anche il metodo di minimizzare la somma degli errori quadratici.

Quando le emissioni provengono da sorgenti multiple situate in varie località, e quando gli intervalli di tempo possono contribuire alla concentrazione al recettore, i rispettivi prodotti della formula sopra devono essere sommati:

$$c = \sum_{ijn} M_{ijn} S_{ijn} \quad (6)$$

La variabile sconosciuta anche in questo sistema è il campo delle sorgenti S_{ijn} .

Ci sono vari metodi per risolvere automaticamente i sistemi sovradeterminati di equazioni lineari

$$c_m = \sum_n M_{mn} S_n,$$

noi trattiamo il metodo di minimizzare la somma degli errori quadratici. Cambiamo le notazioni, $y = c$ vettore delle misure, $\Phi = M$ matrice dei coefficienti sensibilità sorgente-recettore, $a = S$ emissioni da determinare e $n = m$, vediamo come risolvere il sistema.

Ponendo la funzione approssimante nella forma di combinazione lineare

$$y(x) = a_1\phi_1(x) + \dots + a_m\phi_m(x),$$

il tentativo di imporre le condizioni di passaggio per tutti gli n punti (x_i, y_i) porta al sistema (sovradeterminato se $n > m$)

$$\Phi a = y \tag{7}$$

in cui si è posto $a = (a_1, \dots, a_m)^t$, $y = (y_1, \dots, y_n)^t$, e

$$\Phi = \begin{pmatrix} \phi_1(x_1) & \dots & \phi_m(x_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_1(x_n) & \dots & \phi_m(x_n) \end{pmatrix}.$$

Un altro modo di vedere lo stesso procedimento si ha notando che il residuo quadratico del sistema, che viene minimizzato, è la somma degli scarti quadratici.

Il residuo quadratico è definito come la somma degli scarti quadratici medi:

$$r(a) = \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^m y_i - \Phi_{ij} a_j \right)^2 = \|y - \Phi a\|_2^2 = (y - \Phi a)^t (y - \Phi a) = y^t y - 2y^t \Phi a + a^t \Phi^t \Phi a.$$

Applicando alcuni risultati noti dell'analisi matematica, si ottiene che la minimizzazione del residuo è data dal minimo locale dell'equazione di residuo. La tecnica di ricerca di un minimo locale implica la risoluzione del sistema di equazioni ottenuto imponendo che si annullino le derivate parziali rispetto a ciascuna variabile a_j con $j = 1, \dots, m$ del residuo quadratico

$$\nabla r(a) = 2\Phi^t \Phi a - 2\Phi^t y = 0$$

da cui

$$\Phi^t \Phi a = \Phi^t y. \tag{8}$$

Quindi la soluzione del sistema $\Phi a = y$ nel senso del minimo residuo quadratico porta al sistema $\Phi^t \Phi a = \Phi^t y$, detto sistema delle equazioni normali (tale sistema è ben posto se la matrice Φ ha rango massimo).

Si verifica inoltre che la matrice $\Phi^t \Phi$ risulta essere definita positiva, e quindi la soluzione di 8 è il vettore di minimo per la funzione residuo quadratico.

Quando non è ragionevole supporre che ogni osservazione dovrebbe essere trattata allo stesso modo, i minimi quadrati pesati possono spesso essere utilizzati per massimizzare l'efficienza di stima dei parametri. Viene fatto il tentativo di dare ad ogni punto dato la corretta quantità di influenza sulle stime dei parametri.

Vengono introdotte costanti supplementari non negative, o pesi, associati a ciascun punto di dati. La dimensione del peso indica la precisione delle informazioni contenute nell'osservazione associata. In particolare, l'errore quadratico associato a misure meno attendibili sarà pesato da una costante più piccola, secondo lo schema che segue.

Si supponga che i valori y_i siano affetti da certi errori. Per $i = 1, \dots, n$ la $Var(\epsilon_i) = \sigma^2$. D'altronde ci sono casi in cui

$$Var(\epsilon_i) = \frac{\sigma^2}{w_i},$$

con w_1, \dots, w_n costanti positive note e σ^2 eventualmente non nota. Se la deviazione standard degli errori casuali nei dati non è costante, i minimi quadrati pesati con pesi che sono inversamente proporzionali alla varianza producono una stima più realistica.

Vogliamo dare ad alcune osservazioni più peso di altre. Il metodo dei minimi quadrati pesati minimizza la stima di errore

$$WSSE = \frac{\sum_j (y - \Phi a)_j^2}{Var(\epsilon_i)} = \frac{1}{\sigma^2} \sum_j w_j (y - \Phi a)_j^2 \quad (9)$$

dove w_j sono i pesi. I pesi determinano quanto ogni valore influisce sulle stime dei parametri finali.

Sia W una matrice diagonale con elementi diagonali w_1, \dots, w_n . L'errore quadratico pesato è definito da

$$WSSE = \sum_j w_j (y - \Phi a)_j^2 = (y - \Phi a)^t W (y - \Phi a).$$

Applicando le stesse idee del caso senza pesi, si ottiene la condizione di stazionarietà

$$\nabla r(a) = 2\Phi^t W \Phi a - 2\Phi^t W y = 0$$

da cui

$$\Phi^t W \Phi a = \Phi^t W y. \quad (10)$$

La soluzione generale di questo sistema è

$$a = (\Phi^t W \Phi)^{-1} \Phi^t W y. \quad (11)$$

Consideriamo il sistema delle equazioni normali $\Phi^t \Phi a = \Phi^t y$.

Definiamo $A = \Phi^t \Phi$, $x = a$ e $b = \Phi^t y$;

I metodi iterativi per sistemi lineari $Ax = b$ si possono interpretare come metodi di minimizzazione (non vincolata) se la matrice del sistema è definita positiva, come nel nostro caso.

Si basano su una forma generale del tipo:

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + c \quad (12)$$

La matrice jacobiana della trasformazione è la matrice B (detta anche matrice di iterazione). Per darle una espressione esplicita nei vari casi, si partiziona la matrice A come $A = D + E + F$ dove

$$d_{ij} = \begin{cases} a_{ij} & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases}$$

$$e_{ij} = \begin{cases} a_{ij} & \text{se } i > j \\ 0 & \text{se } i \leq j \end{cases}$$

$$f_{ij} = \begin{cases} a_{ij} & \text{se } i < j \\ 0 & \text{se } i \geq j \end{cases}$$

Il metodo di Gauss-Seidel consiste nel porre la iterazione $x^{(k+1)} = T(x^{(k)})$, utilizzando nella stessa iterazione le variabili già aggiornate, nella forma:

$$x_j^{(k+1)} = \frac{1}{a_{jj}} \left(b_j - \sum_{i < j} a_{ji} x_i^{(k+1)} - \sum_{i > j} a_{ji} x_i^{(k)} \right) \quad (j = 1, \dots, n) \quad (13)$$

che si ottiene esplicitando la variabile j -esima dalla j -esima equazione. Il metodo di Gauss-Seidel si porta nella forma $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + c$ ponendo

$$B_{GS} = -(D + E)^{-1}F, \quad c_{GS} = (D + E)^{-1}b.$$

Un ulteriore modifica del metodo di Gauss-Seidel è il metodo SOR (Successive Over-Relaxation) in cui, per accelerare la convergenza, si introduce un parametro (detto *parametro di rilassamento*) ω modificando lo schema nella forma:

$$x_j^{(k+1)} = (1 - \omega)x_j^{(k)} + \omega x_{j,GS}^{(k+1)} \quad (j = 1, \dots, n). \quad (14)$$

in cui $x_{j,GS}^{(k+1)}$ è il secondo membro di Gauss-Seidel. Si noti che il valore $\omega = 0$ corrisponde a non effettuare aggiornamenti, ed il valore $\omega = 1$ al metodo di Gauss-Seidel. Anche il metodo SOR può essere messo nella forma $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + c$ ponendo

$$B_{SOR} = (D + \omega E)^{-1}[(1 - \omega)D - \omega F], \quad c_{SOR} = (D + \omega E)^{-1}b.$$

Nel nostro caso la minimizzazione del residuo è in linea di principio soggetta a vincoli fisici, in particolare a vincoli di positività sulle emissioni, quindi diventa interessante effettuarla in forma di minimizzazione vincolata.

Denotando con f il residuo quadratico, trattiamo in seguito schemi per la soluzione del problema

$$f(x^*) = \min_{x \in S} f(x). \quad (15)$$

Il rilassamento proiettato è un metodo primale, si impone il vincolo passo per passo ottenendo quindi una successione di approssimazioni che soddisfano tutte i vincoli, ed è applicabile a problemi con vincoli di tipo n -intervallo, ovvero

$$S = \{x \in \mathbb{R}^n : a_i \leq x \leq b_i \quad (i = 1, \dots, n)\} \quad (16)$$

in cui gli estremi a_i, b_i possono essere finiti o no. La formulazione del metodo di rilassamento in \mathbb{R}^n , viene modificata in questo caso nella forma

$$x_j^{(k+1)} = \operatorname{argmin}_{a_j \leq t \leq b_j} f(x_1^{(k+1)}, \dots, x_{j-1}^{(k+1)}, t, x_{j+1}^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}) \quad (17)$$

(per j in sequenza da 1 a n , $k \geq 1$). La minimizzazione rispetto a t equivale, se la funzione è convessa, ad una proiezione del minimo unidimensionale libero all'interno dell'intervallo $[a_j, b_j]$ (da cui il nome dell'algoritmo). Analogamente a quanto visto per il metodo di Gauss–Seidel, per accelerare la convergenza si può introdurre un *parametro di rilassamento* ω modificando lo schema nella forma SOR (sovrarilassata):

$$x_j^{(k+1)} = P_{[a_j, b_j]} \left[(1 - \omega)x_j^{(k)} + \omega \operatorname{argmin}_t f(x_1^{(k+1)}, \dots, x_{j-1}^{(k+1)}, t, x_{j+1}^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}) \right] \quad (18)$$

che corrisponde a proiettare il valore ottenuto dallo schema SOR senza vincoli all'interno dell'intervallo $[a_j, b_j]$. Come nel metodo di Gauss–Seidel, il valore

$\omega = 1$ corrisponde al metodo di rilassamento puro, e si tenta di utilizzare valori $\omega > 1$ nell'intento di accelerare la convergenza dello schema.

Il metodo di Uzawa è un metodo duale, cioè quello che si risolve non è il problema originale ma un problema ausiliario senza vincoli. È un metodo iterativo in \mathbb{R}^{n+m} per cercare il punto sella per la funzione Lagrangiana di un problema di minimizzazione vincolata. Fissato $\lambda_0 \in \mathbb{R}_+^m$, si aggiornano alternativamente i valori di x_k e λ_{k+1} tramite l'iterazione

$$x_k = \operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}^n} L(x, \lambda_k), \quad (19)$$

$$\lambda_{k+1} = P_{\mathbb{R}_+^m} \left[\lambda_k + \beta g(x_k) \right], \quad (20)$$

dove $g(x) = (g_1(x), \dots, g_m(x))^t$ si può interpretare come il gradiente della Lagrangiana rispetto alle variabili λ_i , e $P_{\mathbb{R}_+^m}$ è la proiezione nel cono positivo di \mathbb{R}^m . Si tratta quindi di alternare una minimizzazione della Lagrangiana rispetto ad x con una iterazione di gradiente a passo fisso (in questo caso, cercando il massimo) fatto rispetto al vettore λ .

Sono possibili anche varianti in cui entrambi gli aggiornamenti si effettuano allo stesso modo, sia tutti e due tramite ricerca esatta, sia tutti e due a passo fisso o predeterminato.

3 Il modello lagrangiano Flexpart

Esistono due approcci per simulare il trasporto e la dispersione delle particelle nell'atmosfera: il modello euleriano e il modello lagrangiano. Il modello euleriano divide il mondo in blocchi griglia e calcola l'afflusso e il deflusso e le sorgenti locali aggiuntive g :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \nabla u = g, \quad (21)$$

dove u è il rapporto di mescolanza (frazione molare) della massa e v è il vettore vento.

Ciò significa che nel modello euleriano il sistema di coordinate viene definito dalle celle della griglia, che in genere rappresentano i gradi di latitudine e di longitudine. Un esempio di modello euleriano è il modello GEOS-Chem [<http://www.geos-chem.org/>], che viene applicato soprattutto per risolvere problemi di composizione atmosferica, e il modello di circolazione generale ECHAM5, che per esempio può essere utilizzato per un'analisi di lungo periodo del fondo di ^{85}Kr .

Il modello lagrangiano invece segue la traiettoria di ciascuna particella simulata. Risolve l'equazione della traiettoria per ogni particella:

$$\frac{du}{dt} = v[u(t)]. \quad (22)$$

Quelle che vengono chiamate particelle nel modello lagrangiano, necessariamente non rappresentano realmente le particelle, ma piuttosto infiniti piccoli pacchetti d'aria. Tale modello calcola le statistiche di un eventuale numero elevato di traiettorie delle particelle.

Il principale vantaggio rispetto al modello euleriano è che questo quadro di

riferimento in movimento non produce diffusione numerica. Inoltre, mentre i modelli euleriani osservano rilasci immediatamente distribuiti su una cella dell'intera griglia, i modelli lagrangiani possono interpolare tra i punti della griglia mentre calcolano il comportamento statistico delle particelle, e quindi hanno un'alta risoluzione potenziale infinitesimale. La qualità di una simulazione di Lagrange dipende molto dal numero di particelle simulate; un più alto numero di particelle di norma non solo comporta tempi di calcolo elevati, ma anche una maggiore accuratezza delle stime. Esempi di modelli lagrangiani sono CLaMS (Chemical Lagrangian Model of the Stratosphere) e Flexpart.

In ogni modo il modello applicato ha bisogno di dati meteorologici per effettuare i calcoli di trasporto. La meteorologia può essere calcolata derivando equazioni prognostiche compresi i principi fisici come la conservazione dell'energia e del momento e sulla base di variabili che descrivono lo stato dell'atmosfera; d'altra parte il modello può contare su dati meteorologici generati esternamente. Normalmente, le concentrazioni dei residui di gas sono indicate in rapporti di mescolanza della massa m o del volume V , poiché la concentrazione in massa o le particelle per volume dipendono dai parametri della legge dei gas ideali/equazione di van der Waals. Tuttavia, le concentrazioni dei residui radioattivi sono fornite anche in attività per volume, cioè Bq/m^3 , facendo riferimento alla temperatura standard di 0°C e pressione di 1000 hPa .

Quindi i modelli deterministici sono suddivisi, da un punto di vista matematico, in modelli euleriani e lagrangiani; la differenza è che nei primi le equazioni vengono scritte e integrate in una griglia spazio-temporale fissa, nei secondi si segue invece la particella nel suo moto studiando il problema in un riferimento mobile. L'approccio euleriano ha come problema principale

quello della chiusura (avere tante equazioni quante sono le incognite), mentre nel caso lagrangiano si pone il problema della difficile reperibilità di dati statistici sul moto delle particelle e meteorologici.

Un esempio di modello lagrangiano è Flexpart. Flexpart è un software che modella i processi di trasporto atmosferico. Esso utilizza campi eolici come file di input. Questi campi eolici hanno una certa risoluzione rispetto al mondo, ad esempio 1 grado. Ciò significa che Flexpart simula la sensibilità tra una sorgente ed un recettore su una griglia globale con un numero finito di punti della griglia. Usiamo questo modello per calcolare la diluizione di particelle radioattive nell'atmosfera.

Il software v8.2 Flexpart è stato supportato al computer della rete locale dell'Università Roma Tre/INFN e alla rete europea del Mediterraneo (EU-MEDGRID) al fine di usufruire del calcolo parallelo per la produzione rapida dei campi SRS.

Durante la simulazione delle concentrazioni in arrivo nelle stazioni IMS, qualsiasi simulazione all'indietro di Flexpart è condotta con parametri il più possibile simili a quelli effettivamente utilizzati dal CTBTO. Questo significa un tempo di simulazione di due settimane, una risoluzione spaziale di un grado e una risoluzione temporale di tre ore. Se non diversamente indicato, tutte le simulazioni all'indietro di Flexpart che vengono qui eseguite assumono un tracciante ideale senza decadimento radioattivo, non essendo soggette a processi di rimozione chimica o fisica durante il trasporto. Questo approccio permette di fare simulazioni una sola volta e successivamente introdurrà il decadimento radioattivo per diversi isotopi, quando si analizzano i dati. Tuttavia, è impossibile introdurre altri processi di eliminazione dopo che la simulazione è completata. Questo approccio è valido per i gas nobili in quanto

sono, come tracciante ideale, non soggetti ad altri processi di rimozione.

L'output di Flexpart non è inizialmente leggibile, ma può essere facilmente convertito con uno script Fortran fornito dal servizio meteo austriaco (Zentralanstalt für Meteorologie und Geodynamik, ZAMG, Vienna). Il nuovo output contiene la matrice sorgente-recettore in un formato leggibile. Le sensibilità sono date per tutte le coordinate e gli intervalli di tempo con valori diversi da zero. Ciascuna voce contiene le coordinate latitudinali e longitudinali, il periodo di tempo del contributo e l'SRS stesso. Il valore SRS rappresenta il collegamento meteorologico tra la sorgente, ad una coordinata e intervallo di tempo determinati, e il recettore.

Le matrici SRS devono essere ripiegate con un campo sorgente al fine di calcolare la concentrazione al recettore. Per ogni sorgente la posizione deve essere determinata entro la griglia globale usata.

Poiché il periodo è dato solo in intervalli di tempo interi, la risoluzione temporale di tre ore è anche la risoluzione temporale del decadimento radioattivo. Il contributo alla concentrazione al recettore può essere calcolato dal termine sorgente assunto, il valore SRS e il fattore di decadimento. La matrice sorgente-recettore prodotta (SRM) elenca tutti i valori SRS diversi da zero in relazione alla sorgente (per le simulazioni in avanti) o al recettore (per le simulazioni all'indietro).

4 Test numerici

Consideriamo 30 file dati Flexpart contenenti coefficienti di sensibilità sorgente-recettore (SRS) associati alla stazione tedesca DEX33, in posizione (7.90, 47.90), e tramite tali coefficienti si vuole ricostruire il termine sorgente.

I dati sono simulati in quanto i dati sperimentali sono riservati, non sono accessibili.

Consideriamo il caso di ricostruzione di una sorgente ipotetica situata a Londra. Tra questi coefficienti selezioniamo per ogni file i coefficienti di sensibilità relativi a Londra, cioè quelli con latitudine e longitudine Londra (51, 0).

I coefficienti di sensibilità vengono fatti a intervalli di 3 ore, mentre le misure sono fatte su intervalli più grossi; conviene quindi riportare tutto a giorni.

Mediamo su una base di 8 coefficienti per volta associati a una giornata; ad esempio, il primo blocco da 8 rappresenta i coefficienti relativi a un giorno prima del giorno di fine misurazione, il secondo blocco 2 giorni prima e così via.

Scelta una data iniziale di inizio emissione t_0 , le incognite sono le emissioni dei giorni intorno quel t_0 ; una volta scelte le incognite in ogni file di sensibilità si scelgono i coefficienti che cascano in quei giorni in cui si vuole ricostruire l'emissione e si mettono in corrispondenza della variabile che corrisponde a quei giorni.

Ogni file va a costruire i coefficienti di sensibilità legati alle incognite che servono, ogni file costruisce una riga della matrice A .

Ogni riga, cioè equazione del sistema, è legata a un giorno di misura e i coefficienti sono quelli che legano l'emissione nel giorno indicato dall'indice di colonna con la misura relativa al giorno corrispondente all'indice di riga,

ciò legano la misura del giorno data dalla riga i all'emissione effettuata nel giorno j .

Sulla base di questi coefficienti a_{ij} genero misure simulate b definite da

$$b_i = \sum_j a_{ij} \cdot f(t_j)$$

dove

$$f(t) = \begin{cases} 1 & \text{se } t > t_0 \\ 0 & \text{se } t \leq t_0 \end{cases}$$

Quindi ad ogni misura ottenuta in questo modo dai 30 file, aggiungo un rumore casuale con distribuzione gaussiana.

Sulla base di queste misure simulate b ricostruiamo le emissioni mediante il metodo dei minimi quadrati.

Consideriamo il sistema:

$$b = Ax$$

dove x è il vettore delle incognite, cioè l'emissioni simulate. Applicando il metodo dei minimi quadrati al sistema ottengo

$$A^t b = A^t A x$$

da cui

$$x = (A^t A)^{-1} A^t b$$

Non è ragionevole supporre che ogni osservazione deve essere trattata allo stesso modo, in quanto i coefficienti di sensibilità hanno una forte variabilità; quindi introducendo costanti supplementari non negative, o pesi, l'errore quadratico associato a misure meno attendibili sarà pesato da una costante più piccola.

Inoltre non è detto che l'emissione venga sempre positiva, possono anche esserci risultati negativi, quindi vanno inseriti dei vincoli di positività. Per fare ciò possiamo servirci dei metodi di Gauss-Seidel con vincoli di positività o di Uzawa.

Osserviamo in seguito come varia l'emissione ottenuta dal sistema delle equazioni normali $A^t b = A^t A x$ con il metodo dei minimi quadrati standard, pesati e vincolati (SOR vincolato).

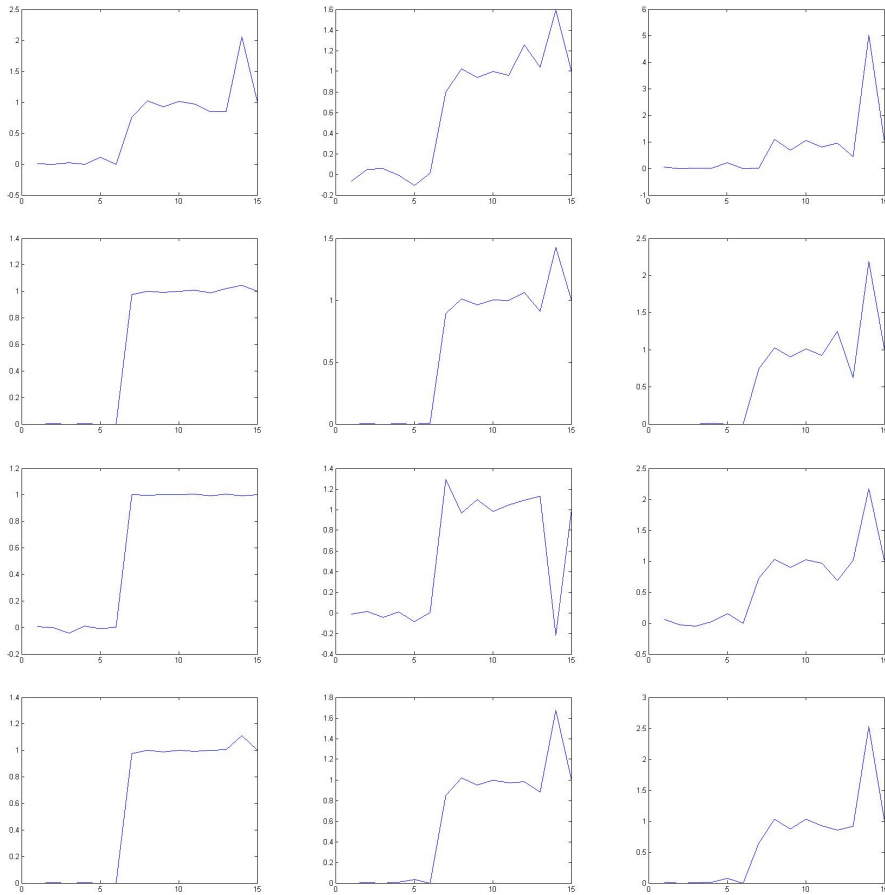


Figura 1: Sequenza casuale n. 1. I grafici sulla prima riga rappresentano le emissioni ottenute con il metodo dei minimi quadrati standard con rumore gaussiano con deviazione standard rispettivamente 0.5, 1 e 2; sulla seconda, terza e quarta riga i grafici delle emissioni ottenute con il metodo dei minimi quadrati rispettivamente vincolati, pesati e pesati+vincolati con deviazione standard 0.5, 1 e 2.

5 Conclusioni

Lavorando con coefficienti di sensibilità reali, appare evidente la loro forte variabilità, che può essere di vari ordini di grandezza.

Quando tutte le misure dipendono poco dal valore dell'emissione in un giorno, c'è una variabilità molto forte sull'elemento corrispondente a tale giorno. I coefficienti di sensibilità sono tutti quanti bassi per i giorni di misura corrispondenti a quel giorno di emissione; valori molto piccoli stanno a indicare il fatto che la sensibilità della funzione errore quadratico rispetto ai valori che stanno in questi giorni è molto bassa e quindi ci sono variazioni molto forti; in questo caso si può usare la tecnica dei minimi quadrati pesati.

Un'idea sarebbe pesare di meno i giorni a cui corrispondono dei coefficienti di sensibilità troppo bassi.

Sulla diagonale della matrice $A^t A$ ci sono i prodotti scalari di ognuna delle colonne per se stessa, se la norma euclidea di una colonna è piccola significa che quel giorno di emissione influisce poco sostanzialmente su tutti i giorni di misura e quindi nel momento che lo ricostruiamo quella è una misura poco affidabile.

Quindi considerando come peso i -esimo la norma euclidea della i -esima colonna della matrice A

$$w_i = \|A_i\| \quad i = 1, \dots, n.$$

In questo modo vengono pesate poco le misure meno affidabili, cioè quelle per cui la variabilità può essere più forte. Il problema ai minimi quadrati che si ottiene con la matrice diagonale

$$W = \begin{pmatrix} w_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & w_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & w_3 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & w_n \end{pmatrix}$$

restituisce come soluzione

$$x = (A^t W A)^{-1} W b$$

Inoltre non è detto che l'emissione venga sempre positiva, possono anche esserci risultati negativi che non avrebbero senso, quindi vanno inseriti dei vincoli di positività. Per fare ciò possiamo servirci dei metodi di Gauss-Seidel con vincoli di positività o di Uzawa.

In generale i minimi quadrati con peso o vincoli di positività sembrano comportarsi mediamente meglio dei minimi quadrati puri.

Si potrebbero ipotizzare scelte differenti dei pesi, come anche l'uso di una soglia per escludere i coefficienti di sensibilità troppo bassi.

Riferimenti bibliografici

- [1] SCHOPPNER M., *Analysis of the Global Radioxenon Background with Atmospheric Transport Modelling for Nuclear Explosion Monitoring*, 2012.
- [2] FERRETTI ROBERTO, *Appunti del corso di Analisi Numerica*
- [3] PLASTINO W., SCHÖPPNER M., BELLA F., DE VINCENZI F., WOTAWA G., PAVEL P. POVINEC, BUDANO A., RUGGIERI F. , *Atmospheric Transport Modeling Based Estimation of Radioactive Release from the Fukushima Dai-ichi Nuclear Power Plant Accident* , Seventh International Conference on Natural Computation, 2027-2030, 2011.
- [4] B. ORR, M. SCHOEPPNER, R. TINKER, W.PLASTINO, *Detection of radioxenon in Darwin, Australia following the Fukushima Dai-ichi nuclear power plant accident* (to be submitted to the Journal of Environmental Radioactivity, 2012)
- [5] M. SCHOPPNER, W. PLASTINO, N. HERMANSPAHN, E. HOFFMANN, M. KALINOWSKI, B. ORR, R. TINKER, *Atmospheric transport modelling of time resolved xenon-133 emissions from ANSTO, Australia* (under submission to the Journal of Environmental Radioactivity, 2012)
- [6] W. PLASTINO, R. PLENTEDA, G. AZZARI, A. BECKER, P. SAEY, G. WOTAWA, *Radioxenon Time Series and Meteorological Pattern Analysis for CTBT Event Categorisation* (Pure and Applied Geophysics, Pure and Applied Geophysics, 2010)

- [7] M. ZHRINGER, A. BECKER, M. NIKKINEN, *Testing Noble Gas Categorization with IMS data*. (Presentation at the Working Group B meeting, 17 February 2009)
- [8] A. STOHL, M. HITTENBERGER, G. WOTAWA, *Validation of the Lagrangian particle dispersion model Flexpart against large-scale tracer experiment data* (Atmospheric Environment Vol. 32, No. 24, 1998)
- [9] M. SCHOPPNER, W. PLASTINO, P. POVINEC, G. WOTAWA, F. BELLA, A. BUDANO, M. DE VINCENZI, F. RUGGERI, *Estimation of the time-dependent radioactive source-term from the Fukushima nuclear power plant accident using atmospheric transport modelling* (Journal of Environmental Radioactivity, Special Fukushima Edition, 2011)
- [10] M.SCHOPPNER, M. KALINOWSKI, W. PLASTINO, A. BUDANO, M. DE VINCENZI, A. RINGBOM, F. RUGGIERI, C.SCHLOSSER, *Impact of monthly radioxenon source time-resolution on atmospheric concentration predictions* (Topical Volume II, Nuclear Explosion Monitoring, Pure Appl. Geophys., DOI 10.1007/s00024-012-0499-z, 2012)
- [11] A. STOHL, P. SEIBERT, G. WOTAWA, D. ARNOLD, J. F. BURKHART, S. ECKHARDT, C. TAPIA, A. VARGAS, and T. J. YASUNARI, *Xenon-133 and caesium-137 releases into the atmosphere from the Fukushima Dai-ichi nuclear power plant: determination of the source term, atmospheric dispersion, and deposition* (Atmos. Chem. Phys. Discuss., 11, 28319-28394, October 2011)
- [12] M. AUER, T. KUMBERG, H. SARTORIUS, B. WERNSPERGER, C. SCHLOSSER, *Ten years of development of equipment for measurement*

- of atmospheric radioactive xenon for the verification of the CTBT* (Pure and Applied Geophysics, Vol. 167, 2010)
- [13] J.-P. FONTAINE, F. POINTURIER, X. BLANCHARD, T. TAFFARY, *Atmospheric xenon radioactive isotope monitoring* (J. Environ. Rad. 72, 2004)
- [14] *Noble Gas Monitoring Handbook* International Noble Gas Experiment (INGE) (CTBTO, Version 1.0, 2003)
- [15] A. STOHL, H. SODEMANN, S. ECKHARDT, A. FRANK, P. SEIBERT, G. WOTAWA, *The Lagrangian particle dispersion model Flexpart version 8.2* (<http://transport.nilu.no/flexpart>, 2010)
- [16] A. RINGBOM, T. LARSON, A. AXELSSON, K. ELMGREN, C. JOHANSSON, *SAUNA-A system for automatic sampling, processing, and analysis of radioactive xenon* (Nucl. Inst. Meth, 2003)
- [17] P. Seibert, A. Stohl, *Inverse modelling of the ETEX-1 release with particle model* (Proc. Third GLOREAM Workshop, Ischia, Italy, September 1999, 2000)
- [18] G. Wotawa et al., *Atmospheric transport modelling in support of CTBT verification-overview and basic concepts* (Atmospheric Environment 37)