

# TECHNIKY EMPIRICKÉ A STATISTICKÉ INTERPOLACE PRO KOREKCI MODELŮ ŠÍŘENÍ ZNEČISTĚNÍ

Petr Pecha, *Ústav teorie informace a automatizace, AV ČR, pecha@utia.cas.cz*  
Radek Hofman, *absolvent FJFI ČVUT Praha, KM, softwarové inženýrství*

V oblasti odhadování stavu modelovaného systému se vývoj ubírá dvěma směry. Předně, v souvislosti s prudkým rozvojem výpočetní techniky, jsou zaváděny složitější algoritmy respektující pokročilé fyzikální modely. Jinou cestou jdou postupy založené na procedurách obecně zvaných *data mining*, které v krajním případě obcházejí fyzikální modelování a spoléhají se výlučně na pozorování. A tam, kde tato pozorování nejsou k dispozici, se použijí jednoduché metody matematické interpolace a extrapolace. Technika „*data mining*“ může být úspěšně používána v těch oblastech, pro které není k dispozici adekvátní model a je shromážděn dostatek informativních dat. V situaci, kdy jsou data zatížena velkými chybami měření či jsou málo vypovídající, vede ignorování akumulované fyzikální (oborové) znalosti k chybným predikcím.

Jediným realistickým východiskem z problému představuje syntéza obou přístupů, nazývaná termínem asimilace dat. Ve svém obecném významu jde o modifikaci výsledků modelu pomocí měřených hodnot, přičemž ve schématu asimilace je současně respektována znalostní apriorní informace obsažená v modelu.

V našem případě jsou výpočty prováděny na polární mříži, kdy prostor kolem zdroje znečištění je rozdělen na 80 pravidelných úhlových segmentů (paprsků) a 35 radiálních (neekvidistantních) pásem. Rozložení modelované výstupní veličiny je tedy vyjádřeno diskrétně vektorem  $\mathbf{x}$  dimenze  $N = 80 \times 35 = 2\,800$ . Tato rozměrnost indikuje náročnost uvažovaného problému asimilace. Poznamenejme, že z hlediska asimilačních metod se tomuto řešení říká pole modelu (background field) nebo též první odhad (first guess).

Modelujeme šíření radioaktivního znečištění, přičemž je k počátku úniku k dispozici popis konkrétní meteorologické situace včetně její krátkodobé předpovědi na 48 hodin. Problém zúžíme na analýzu jediné výstupní proměnné, kterou bude deponice zvoleného radionuklidu na povrchu (jejího prostorového rozložení představovaného vektorem  $\mathbf{x}$ ). Vstupem do dalších úvah bude tedy situace, kdy:

1. v diskrétních bodech výpočtové polární sítě je k dispozici první odhad (background) výstupu matematickým modelem představovaný vektorem  $\mathbf{x}^b$  dimenze  $N$ ,
2. z míst měřících stanic obecně nepravidelně rozmístěných kolem zdroje znečištění přicházejí naměřené údaje (případně ve formě nepřímých pozorování, která lze přepočítat na analyzovaný výstup), které tvoří vektor pozorování  $\mathbf{y}^p$  (pole měření) dimenze  $P$ .

Oba typy údajů necht' jsou vztaženy k jednomu okamžiku (například k okamžiku odeznění úniku nad terénem resp. den, týden, měsíc, rok po nehodě apod.). Používáme Gaussův model šíření vlečky znečištění v atmosféře v jeho přímočaré resp. segmentované verzi. Úkolem je kombinovat modelové odhady s pozorováními a tak promítnout pole měření na regulární mříž modelu. Taková matematická procedura realizovaná automaticky na počítači se nazývá **objektivní analýzou** a jejím výsledkem je tzv. *vektor analýzy*  $\mathbf{x}^a$  dimenze  $N$ , což je základní odhad  $\mathbf{x}^b$  opravený měřeními  $\mathbf{y}^p$ . Procedury objektivní analýzy jsou formulovány v různých přiblíženích od postupů založených na klasické interpolaci přes statistické metody optimální

interpolace až po moderní adaptivní statistické postupy pracující s Kalmanovými filtry. Zavedením obecného operátoru objektivní analýzy  $\hat{O}$  vyjádříme krok analýzy generování korigovaného odhadu  $\mathbf{x}^a$  schématem:

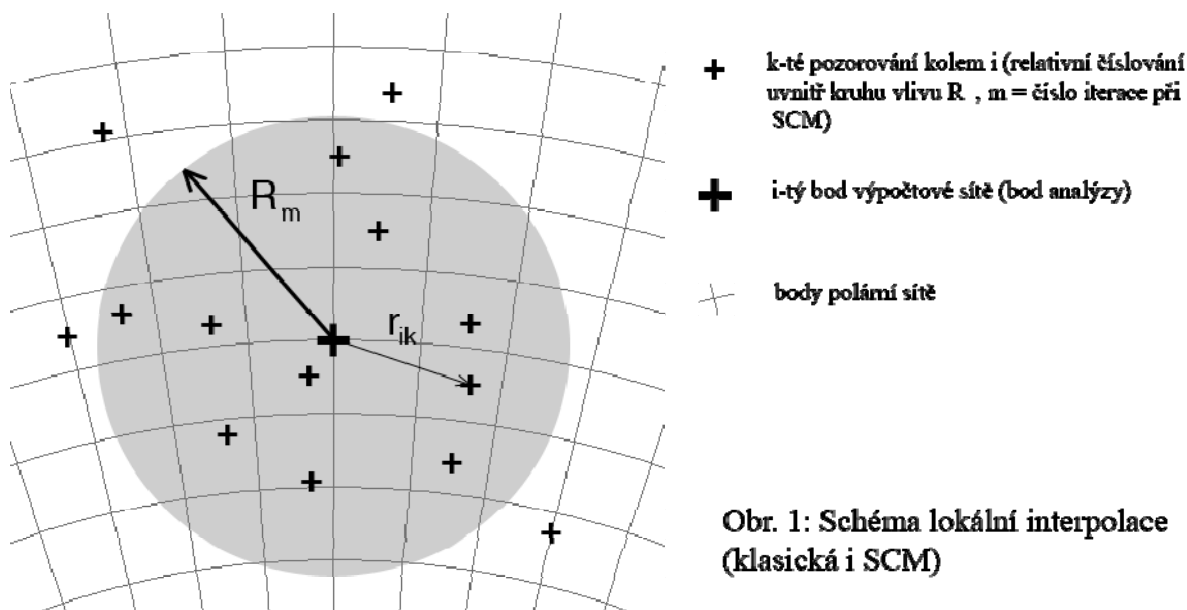
$$\hat{O}(\mathbf{x}^b ; \mathbf{y}^p) \Rightarrow \mathbf{x}^a \quad (1)$$

Použití té které metodiky objektivní analýzy je podmíněno nejen složitostí úlohy a úrovní modelování a měření, ale i kvalitou dalších vstupních informací včetně podrobného popisu chyb modelu a chyb měření. Dále zmíníme metodiky objektivní analýzy testované v rámci vývoje asimilačního subsystému kódu HAVAR RP.

#### A. Klasická lokální interpolace.

Uvažujme situaci, kdy existují spolehlivá měření hustě pokrývající terén, přičemž první odhad modelem není k dispozici. Ani chyby měření nejsou uvažovány.

Lze použít klasické interpolační techniky (forward interpolation) vycházející ze znalosti hodnot měření  $\mathbf{y}^p$ . Tyto techniky jsou běžně používané například v oblastech nauky o Zemi, kdy je třeba vyjadřovat určité prostorové kontinuální veličiny ve formě mřížových dat (výškopis, typ zemského povrchu, půdní mapy, průběhy teplot, tlaků či znečištění a pod.) na pravidelné prostorové mříži. Nepravidelně rozptýlená měření jsou transformována na pravidelná mřížová data, která pak mohou být různými standardními digitálními modely GIS systémů zpracovávána a vizualizována. Transformace nejsou jednoznačně definovány, neboť výběr vhodné metody prostorové interpolace závisí na dalších vložených podmínkách (geometrických, statistických, fyzikálních a pod.).



Příslušné algoritmy se rozdělují na přesné a vyrovnávací. V prvním případě jsou zachovávány hodnoty v datových bodech, kde je jim přiřazena váha 1 (např. triangulace). Vyrovnávací algoritmy se snaží o hladší vyrovnání nezachovávající hodnoty v datových bodech (i v nich je váha  $< 1$ ). Výsledná interpolace je však potom hladší s určitým (řízeným) stupněm vyrovnávání. Z mnoha technik vyrovnávání jmenujme alespoň polynomiální regresii. Často používanou technikou jsou vícerozměrné splajny. Klasická lokální polynomiální interpolace pro určení modelové hodnoty (t. zn. hledané  $i$ -té složky vektoru modelovaných hodnot) čistě z měřených hodnot je popsána vztahem (postupujeme podle obrázku 1):

$$x_i^a(u=0, v=0) = \sum_m \sum_n c_{mn} u^m v^n \quad m+n \leq M; \quad m, n \geq 0 \quad (2)$$

Zde v dílčí oblasti kolem určitého bodu výpočtové sítě  $i$  jsou definovány relativní lokální souřadnice  $(u, v)$  a je známa transformace mezi polárními a lokálními souřadnicemi. Oblast zájmu je omezena na kruh s poloměrem  $R_i$  kolem bodu  $\underline{i}$  (v tomto bodě jsou relativní souřadnice rovny nule). Uvažujme celkem  $K_i$  pozorování  $y^p(u_k, v_k)$ , která leží uvnitř kruhu  $R_i$ , tedy  $u_k^2 + v_k^2 \leq R_i^2$ . Neznámé koeficienty  $c_{mn}$  se určí metodou nejmenších čtverců, kdy se minimalizuje kvadratický výraz:

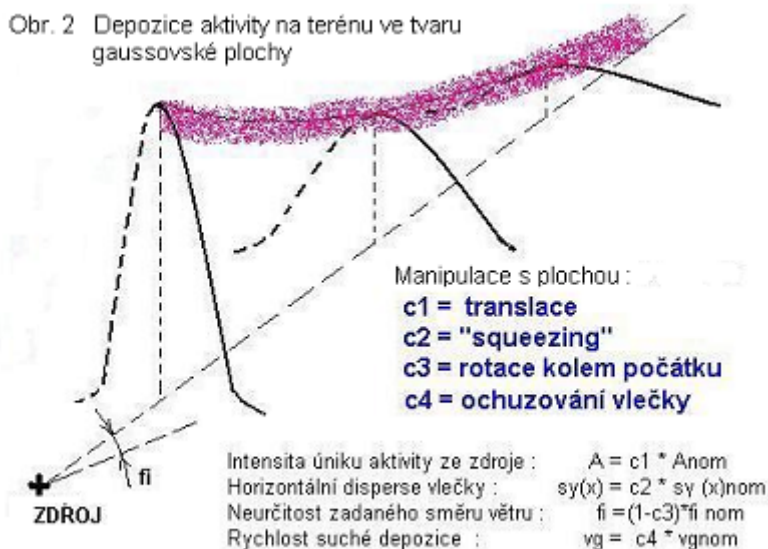
$$I = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{K_i} \left[ \sum_m \sum_n c_{mn} u_k^m v_k^n - y^p(u_k, v_k) \right]^2 \quad (3)$$

Na interpolovanou hodnotu  $x_i^a$  je možno se dívat jako na výsledek objektivní analýzy, kde operátorem  $\hat{O}$  podle obecného vztahu (1) je lokální interpolační schéma.

Poznamenejme, že pokud již existuje reprezentace kontinuální proměnné ve formě mřížových dat, lze potom formulovat úlohu opačnou, a sice nalézt funkci, která umožňuje s uspokojivou přesností určovat z mřížových dat hodnoty ve všech bodech prostoru. Formálně se počítá opět podle schémat (2) a (3) s tím rozdílem, že modelové hodnoty a pozorování jsou zaměněny.

### B. Globální fitování gaussovskou plochou

Jedná se o rozšíření zmíněného lokálního přístupu na celou doménu s využitím všech pozorování. Z řady možností (například globální polynomiální fitování nebo vícerozměrné splajny) jsme implementovali metodiku s přímou vazbou na gaussovský fyzikální model přímočarého šíření vlečky znečištění.



Na obrázku 2 je náčrt tvaru výsledné usazené aktivity radionuklidu ve formě gaussovské plochy. Je použita metoda nejmenších čtverců, kdy se minimalizuje suma (přes všechny body měření) čtverců odchylek modelu a měření. Přitom hodnoty modelu jsou počítány s očekávanými hodnotami vstupních parametrů, přičemž jsou přidány 4 náhodné vstupní parametry  $c1$  až  $c4$ , jejichž fluktuace způsobují deformace gaussovské plochy odezvy jako celku ve smyslu její translace, rotace,

horizontálního zmáčknutí (roztažení) a longitudinálního gradientu (ve směru šíření vlečky). Optimální čtveřici náhodných parametrů najde iterační minimalizační algoritmus (úspěšně testovány Nelder-Mead, Powell – viz [5, 2]).

### C. Metoda postupných korekcí SCM (Successive corrections)

Uvažujme situaci, kdy model poskytuje první odhad v bodech polární mříže  $\underline{i}$  a dále jsou k dispozici naměřené hodnoty  $\underline{k}$  (v lokálním měřítku viz obrázek 1). Je k dispozici alespoň rámcový expertní odhad poměru  $\epsilon^2$  disperzí chyb měření k chybám modelu. Objektivní

analýza metody SCM je vyjádřena iteračním cyklem v bodu mříže  $\underline{i}$  a začíná nultou iterací  $x_i^0$  ztotožněnou s daným prvním odhadem (background)  $x_i^0 \equiv x_i^b$ . Postupné upřesňování v dalších iteracích  $\underline{m}$  se děje podle:

$$x_i^{m+1} = x_i^m + \left( \sum_{k=1}^{K(im)} w_{ik}^m \cdot (y_k^p - x_k^m) \right) / \left( \sum_{k=1}^{K(im)} w_{ik}^m + \varepsilon^2 \right) \quad (4)$$

V  $m$ -té iteraci se berou v úvahu pozorování  $y_k^p$  ( $k=1, \dots, K(i,m)$ ) ve sféře vlivu kolem bodu  $\underline{i}$ . Hodnoty  $x_k^m$  jsou hodnoty předchozí iterace přetransformované pomocí operátoru pozorování z bodů výpočetní mříže do míst pozorování  $\underline{k}$ . Toto schéma je založeno na empiricky volených vahách  $w_{ik}^m$ . V nich se mohou (ale také nemusí) odrážet určité fyzikální nebo statistické vlastnosti. Při  $\varepsilon^2 \rightarrow 0$  se výsledky analýzy pomocí SCM v bodech měření přiklánějí k hodnotám zde měřeným. Vzhledem k empirické volbě  $w$  a  $\varepsilon^2$  patří SCM k empirickým metodám, nicméně byla dlouhodobě úspěšně používána na superpočítačích v oblasti meteorologických předpovědí.

#### **D. Základní statistická metoda objektivní analýzy – optimální interpolace (OI)**

Nechť jsou k dispozici modelové odhady i měření, jejichž kvalita je vyjádřena pomocí kovariančních matic chyb modelu a měření. Krok analýzy asimilačního cyklu metody OI hledá optimální hodnoty vektoru analýzy  $\mathbf{x}^a$  na základě kritéria minimalizace chyb procedury analýzy (1). Optimální oprava má, viz např. [1,4], tvar:

$$\mathbf{x}^a = \mathbf{x}^b + W \mathbf{d} \quad (5)$$

Vektor inovací je definován podle  $\mathbf{d} = \mathbf{y}^p - \hat{H}(\mathbf{x}^b)$ , přičemž  $\hat{H}$  je (lineární) operátor pozorování transformující hodnoty modelu do pozic pozorování podle schématu:

$$(\mathbf{x}^b)^p = \hat{H}(\mathbf{x}^b) \quad (6)$$

$N$ -rozměrné vektory chyb  $\mathbf{e}^b$  odhadu modelem, chyb  $\mathbf{e}^a$  výsledné analýzy  $\mathbf{x}^a$  a  $P$ -rozměrný vektor chyb pozorování  $\mathbf{e}^p$  definujeme vztahy:

$$\mathbf{e}^b = \mathbf{x}^b - \mathbf{x}^s; \quad \mathbf{e}^a = \mathbf{x}^a - \mathbf{x}^s; \quad \mathbf{e}^p = \mathbf{y}^p - \hat{H}(\mathbf{x}^s)^p \quad (7)$$

Index  $\underline{s}$  označuje skutečnou hodnotu, kterou odhadujeme. Ta je sice neznámá, nicméně lze zavést určité předpoklady o jejích statistických vlastnostech. Bez dalších detailů uvedeme výsledný vztah pro optimální váhovou matici  $W$  z (5) plynoucí z podmínky minimalizace chyby analýzy (podrobněji [1, 4]):

$$W = B H^T (H B H^T + R)^{-1} \quad (8)$$

Horní indexy  $T$  a  $-1$  po řadě označují operaci transponování a inverze.  $H$  je matice  $P \times N$  sdružená s operátorem pozorování.  $B$  značí kovarianční matici ( $N \times N$ ) chyb modelu počítané jako střední hodnota  $\langle \mathbf{e}^b (\mathbf{e}^b)^T \rangle$ , tedy s prvky  $b_{ij} = \langle e_i^b \cdot e_j^b \rangle$ ;  $e_i, e_j$  jsou složky vektoru chyb,  $\langle \rangle$  je operátor střední hodnoty. Tuto střední hodnotu lze odhadnout pomocí Monte Carlo procedury z velkého počtu  $K$  realizací modelu. Hodnota  $K$  musí být podstatně větší než je rozměr stavu, tedy řádově několik tisíc. Z důvodů efektivity je nutné užít metodu vzorkování LHS (Latin Hypercube Sampling) pro generování  $M$ -tic náhodných vstupních parametrů modelu  $\{z_1^k, z_2^k, \dots, z_M^k\}_{k=1, \dots, K}$ , pro  $M=12$  podrobně v [5, 3]. Postupným dosazováním těchto  $M$ -tic do modelu se získá zmíněných  $K$  náhodných realizací  $N$ -rozměrného vektoru  $\mathbf{x}^b$  (konkrétně pro produkt HAVAR RP řešeno v [5]).  $R$  značí

kovarianční matici ( $P \times P$ ) chyb pozorování počítanou jako střední hodnota  $\langle \boldsymbol{\varepsilon}^p (\boldsymbol{\varepsilon}^p)^T \rangle$ . Optimální váhová matice je tedy podle (8) dána součinem kovariancí chyb modelu promítnutých do prostoru pozorování a inverzí součtu kovariance chyb modelu a pozorování.

### ***E. Použití moderních asimilačních variačních technik a adaptivních statistických postupů založených na bayesovské interpretaci***

Jedná se o rozšíření dimenze úlohy o časovou složku s využitím technik Kalmanových filtrů a s nutností zahrnout časovou evoluci statistik chyb modelu. Téma bylo zformulováno do žádosti o grantovou podporu GAČR a na problému začínáme pracovat.

### **Přednosti užití statistických metod před „slepou“ klasickou interpolací**

Závěrem budeme demonstrovat na konkrétním scénáři úniku schopnost statistické metody optimální interpolace OI respektovat apriorní informaci obsaženou v modelu. Optimální nastavení výsledků pomocí techniky OI vzhledem k **chybám modelu a měření** bude zmíněno až při ústní presentaci (analýza se přiklání k menším chybám, tedy buď k přesnějšmu modelu nebo naopak přesnějšmu měření).

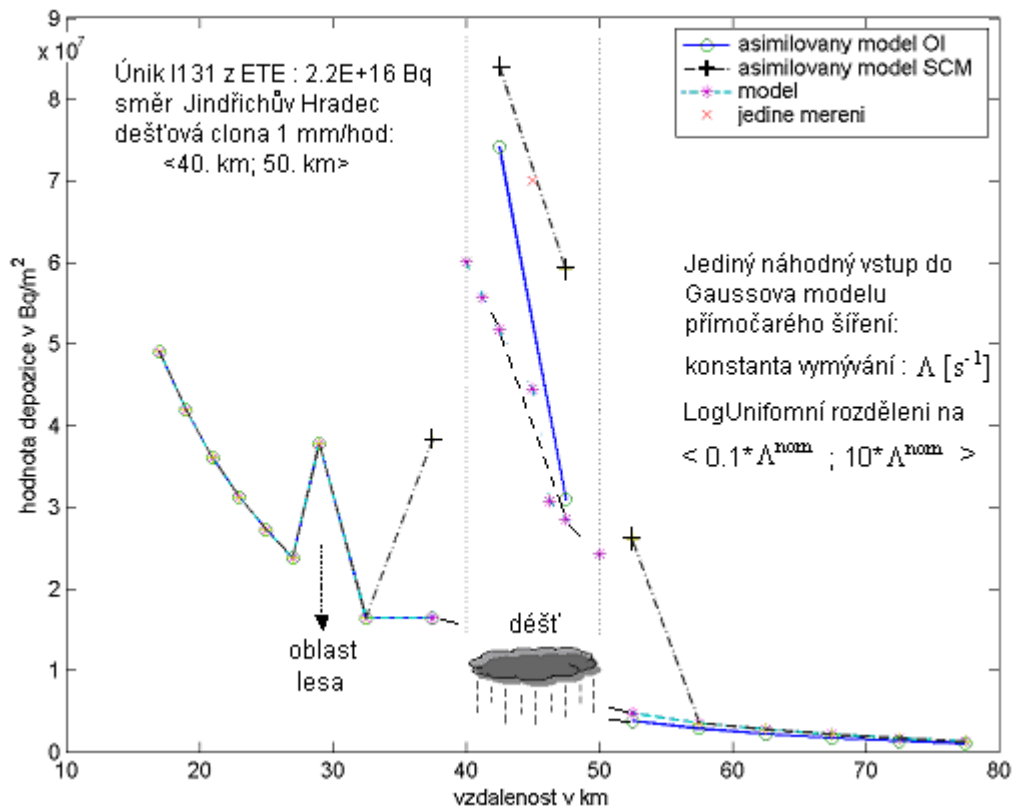
V tomto příspěvku se dotkneme druhého tématu, kterým jsou naše představy o rozlišení efektu vstupních parametrů na **lokální a globální**. V [5] je vybrána grupa dvanácti náhodných vstupních parametrů atmosférického modelu šíření znečištění. Jestliže zkoumáme vliv fluktuací jednotlivých parametrů na prostorovou závislost fluktuací zvolené výstupní proměnné (necht' je to depozice I131 na terénu), zjistíme, že například fluktuace (primární chyba v odhadu) celkové uniklé aktivity zjevně ovlivní depozici ve všech  $N$  bodech prostorové sítě v jednom směru (silná prostorová korelace). Naopak třeba neurčitost konstanty vymývání  $\Lambda$  ( $s^{-1}$ ) se uplatní při lokálních atmosférických srážkách zase jen lokálně (resp. v určité podoblasti), přičemž například korelace s částí před clonou nedotčenou deštěm musí být nulové. Předností OI je, že takové rozlišení je implicitně obsaženo již v samotné kovarianční matici chyb modelu jako znalostní informace modelu.

Pro ukázkou jsme si vymysleli jednoduchý scénář, kdy uvažujeme přímočaré šíření vlečky škodlivin. Předpokládejme únik aktivity I131  $2.2 \cdot 10^{16}$  Bq z JE Temelín ve směru na Jindřichův Hradec, přičemž ve vzdálenosti mezi 40. a 50. kilometrem od zdroje se vyskytuje po celou dobu přechodu vlečky nad terénem dešťová clona s konstantní intenzitou 1 mm/hod. I další parametry meteorologické situace necht' jsou po celou dobu neměnné (kategorie stability atmosféry D, disperzní formule SCK/CEN pro venkovský terén, střední rychlost větru  $v_{10} = 1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ ). Výška úniku je 100 m. Pokud jsme uvažovali zmíněných 12 vstupních náhodných parametrů podle [5], namodelovali jsme i kovarianční matici označenou  $KM^{I2}$ . V našem demo zjednodušení však uvažujeme pouze jediný náhodný vstupní parametr příslušný konstantě vymývání  $\Lambda$  (logaritmicke-rovnorné rozdělení, fluktuace v rozmezí jednoho řádu kolem nominální hodnoty). Ostatním vstupům přiřadíme jejich nominální hodnoty („best estimate“). Provedeme celé mnohonásobné modelování náhodného výstupu (depozice I131) pouze s náhodným  $\Lambda$  a určíme tak kromě jiného i kovarianční matici  $KM^A$ , která nyní jako matice chyb modelu  $B$  vstupuje do vztahu (8) procedury OI. Dále necht' na terénu provedeme jedině měření depozice I131, a to v centru dešťové clony na kilometru 45. Hodnota této naměřené depozice I131 necht' je  $7.0E+7 \text{ Bq} \cdot \text{m}^2$ .

Nyní provedeme asimilaci tohoto jediného měření s modelovou předpovědí, která je totožná s nominálním výpočtem s dešťovou clonou (relevantní body výpočtu označené “\*” jsou náznakově spojeny čárkovanou křivkou na obr. 3). Tvar průběhu vyjadřuje apriorní informaci

obsaženou v modelu. Asimilaci provedeme dvojím způsobem, a to procedurou objektivní analýzy metody SCM podle (4) (čerchovaná čára, relevantní výpočtové body označeny jako ‘+’) a dále statistickou metodou OI podle (5) (plná čára, body výpočtu značí kroužky ‘o’).

Obr. 3: Porovnání původního odhadu s korigovanými hodnotami po asimilaci (pod osou mraku)



Nyní konečně můžeme dojít k závěrům týkajícím se odlišnosti obou přístupů a konstatovat, že empirická metoda SCM se řídí pouze vágně volenou sférou vlivu, přičemž s určitou váhou (závislou na distanci) „vytáhne“ hodnoty původního odhadu za měřeními (zde voleno měření s velkou přesností, tedy  $\varepsilon^2 \rightarrow 0$ ) existujícími v oblasti vlivu (na obrázku 3 pro SCM byla zvolena oblast vlivu 10 km). Je evidentní, že empirická interpolace SCM je „slepá“ k apriorní modelové znalosti a nesprávně modifikuje hodnoty modelu v některých částech, například v oblasti před a za dešťovou clonou. To je jednak fyzikální absurdita a jednak je porušena bilance aktivity I131 na terénu. Naproti tomu statistická metoda OI provádí korektní modifikace modelu a ve výsledné asimilaci je zjevně zachována apriorní fyzikální znalost modelu a bilance aktivity na terénu.

### Literatura:

- [1] Daley R.: Atmospheric data analysis. Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1991.
- [2] Hofman R.: Zpřesnění matematického modelu na základě procedury asimilace s měřeními daty. Diplomová práce, ČVUT, FJFI KM -softwarové inženýrství, (květen 2006).
- [3] Housa L.: Pravděpodobnostní přístup posuzování závažnosti radioaktivních úniků do atmosféry. Diplomová práce, ČVUT, FJFI KM -softwarové inženýrství, (květen 2006).
- [4] Kalnay E. : Atmospheric modeling, data assimilation and predictability. Cambridge Univ. Press, 2003, ISBN 0-521-79179-0.
- [5] Pecha P., Pechová E.: Pravděpodobnostní přístup k predikci důsledků úniku radioaktivity do životního prostředí. Etapa E 02-c projektu 6/2003, 119 stran, deponováno na SÚJB, 2005.