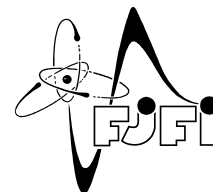


ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská



Fyzikální omezení v inverzním modelování atmosférických úniků

Physical bounds in atmospheric inverse modeling

Bakalářská práce

Autor: **Lukáš Kysilka**
Vedoucí práce: **Ing. Ondřej Tichý, Ph.D.**
Akademický rok: 2020/2021

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Student:	Lukáš Kysilka
Studijní program:	Aplikace přírodních věd
Obor:	Matematické inženýrství
Zaměření:	Aplikované matematicko-stochastické metody
Název práce (česky):	Fyzikální omezení v inverzním modelování atmosférických úniků
Název práce (anglicky):	Physical bounds in atmospheric inverse modeling

Pokyny pro vypracování:

1. Seznamte se s formulací lineární inverzní úlohy a konstrukcí jednotlivých elementů základní lineární rovnice.
2. Nastudujte základy pravděpodobnostního modelování a bayesovského odhadování.
3. Seznamte se s aproximativními metodami pro výpočet aposteriorních rozdělání, případně s dalšími vybranými metodami pro odhad parametrů modelu.
4. Navrhněte úpravu základního modelu s vhodně zvoleným fyzikálně motivovaným omezením, např. omezení velikosti radiačního úniku za danou časovou jednotku.
5. Navržené postupy experimentálně ověřte.

Doporučená literatura:

1. S. M. Miller, A. M. Michalak, P. J. Levi, Atmospheric inverse modeling with known physical bounds: an example from trace gas emissions. *Geoscientific Model Development* 7, 2014, 303–315.
2. O. Tichý, V. Šmídl, R. Hofman, A. Stohl, LS-APC v1.0: a tuning-free method for the linear inverse problem and its application to source-term determination. *Geoscientific Model Development* 9, 2016, 4297–4311.
3. M. Hutchinson, H. Oh, W. Chen, A review of source term estimation methods for atmospheric dispersion events using static or mobile sensors. *Information Fusion* 36, 2017, 130–148.
4. A. Leelóssy, I. Lagzi, A. Kovacs, R. Meszaros, A review of numerical models to predict the atmospheric dispersion of radionuclides. *Journal of environmental radioactivity* 182, 2018, 20–33.
5. N. Hase, S. M. Miller, P. Maaß, J. Notholt, M. Palm, T. Warneke, Atmospheric inverse modeling via sparse reconstruction. *Geoscientific Model Development* 10, 2017, 3695–3713.
6. V. Šmídl, A. Quinn, *The Variational Bayes Method in Signal Processing*. Springer, 2006.

Jméno a pracoviště vedoucího bakalářské práce:

Ing. Ondřej Tichý, Ph.D.

Ústav teorie informace a automatizace, Pod Vodárenskou věží 4, 182 00, Praha 8, Česká republika

Jméno a pracoviště konzultanta:

Datum zadání bakalářské práce: 31.10.2019

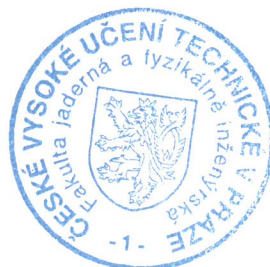
Datum odevzdání bakalářské práce: 7.7.2020

Doba platnosti zadání je dva roky od data zadání.

V Praze dne 23. října 2019

.....
garant oboru

.....
vedoucí katedry



.....
děkan

Poděkování:

Chtěl bych zde poděkovat především svému školiteli Ing. Ondřeji Tichému, Ph.D. za pečlivost, ochotu, vstřícnost a odborné i lidské zázemí při vedení mé bakalářské práce. Z jeho strany bylo potřeba i mnoho trpělivosti a mnohdy i neúměrné množství času, neboť toto téma pro mě bylo zcela nové a ze začátku velmi náročné.

Čestné prohlášení:

Prohlašuji, že jsem tuto práci vypracoval samostatně a uvedl jsem všechnu použitou literaturu.

V Praze dne 6. ledna 2021

Lukáš Kysilka

Název práce:

Fyzikální omezení v inverzním modelování atmosférických úniků

Autor: Lukáš Kysilka

Obor: Matematické inženýrství

Zaměření: Aplikované matematicko-stochastické metody

Druh práce: Bakalářská práce

Vedoucí práce: Ing. Ondřej Tichý, Ph.D., Ústav teorie informace a automatizace

Abstrakt: Při detekci radioaktivity v ovzduší je zásadním úkolem určení lokace úniku a jeho časového průběhu. Zatímco lokace bývá velmi často známa, časový průběh a celkové množství uniklé látky bývá většinou známo jen jako hrubý odhad nebo vůbec. Hlavním úkolem navrhované práce je určení časového průběhu úniku z dostupných terénních měření. Toho lze dosáhnout optimalizací mezi naměřenými hodnotami a mezi numerickými výsledky atmosférického modelu šíření. Práce se bude zabývat jak klasickými optimalizačními metodami, tak především s bayesovským přístupem a metodami odhadu parametrů pravděpodobnostních modelů a také pomocí fyzikálního omezení. Odvozené postupy a metody budou testovány na cvičných datech, ale i na reálném experimentu ETEX.

Klíčová slova: aproximace distribuční funkce, atmosférická disperze, bayesovská pravděpodobnost, inverzní model, Lagrangeův model,

Title:

Physical bounds in atmospheric inverse modeling

Author: Lukáš Kysilka

Abstract: When detecting radioactivity in the air, the crucial task is to determine the location of the leak and its time course. While the location is very often known, the time course and the total amount of leaked substance is usually known only as a rough estimate or not at all. The main task of the proposed work is to determine the time course of escape from available field measurements. This can be achieved by optimizing between the measured values and between the numerical results of the atmospheric propagation model. The work will deal with both classical optimization methods and especially with the Bayesian approach and methods of estimating the parameters of probabilistic models and also with the help of physical constraints. The derived procedures and methods will be tested on training data, but also on a real ETEX experiment.

Key words: approximation of distribution function, atmospheric dispersion, Bayesian probability, inverse model, Lagrange model

Obsah

Úvod	8
1 Atmosferické modelování	10
1.1 Modelování atmosferické disperze	10
1.2 Atmosférické vrstvy	10
1.3 Gaussův model	11
1.4 Lagrangeův model	12
1.4.1 Mokrý depozice	13
1.4.2 Suchá depozice	13
1.4.3 Radioaktivní rozpad	13
1.5 Eulerův model	13
1.6 Řešení inverzního modelu	14
1.6.1 Vliv chyby atmosferického modelu	14
1.6.2 Optimalizační metoda	15
1.6.3 Variační Bayesovská metoda	15
2 Bayesovská metodologie	17
2.1 Pravděpodobnostní míra	17
2.1.1 Hustoty pravděpodobnosti	18
2.2 Aproximace distribuční funkce	19
2.2.1 Kullback-Leiblerova divergence	20
2.2.2 Variační Bayesova věta	20
3 Inverzní model	22
3.1 Odvození LS-APC	22
3.1.1 Model pozorování a model zdrojového členu	22
3.1.2 Řešení podle Bayesovy metody	23
3.2 LS-APC s fyzikálním omezením	26
3.2.1 Ořezané normální rozdělení	27
4 Experimenty	29
4.1 Syntetický experiment	29
4.1.1 Řídký model	32
4.1.2 Fyzikální omezení	32
4.2 Experiment ETEX	33
4.2.1 Implementace LS-APC	35
4.2.2 Aproximace křížových prvků \mathbf{xx}^T	35

Úvod

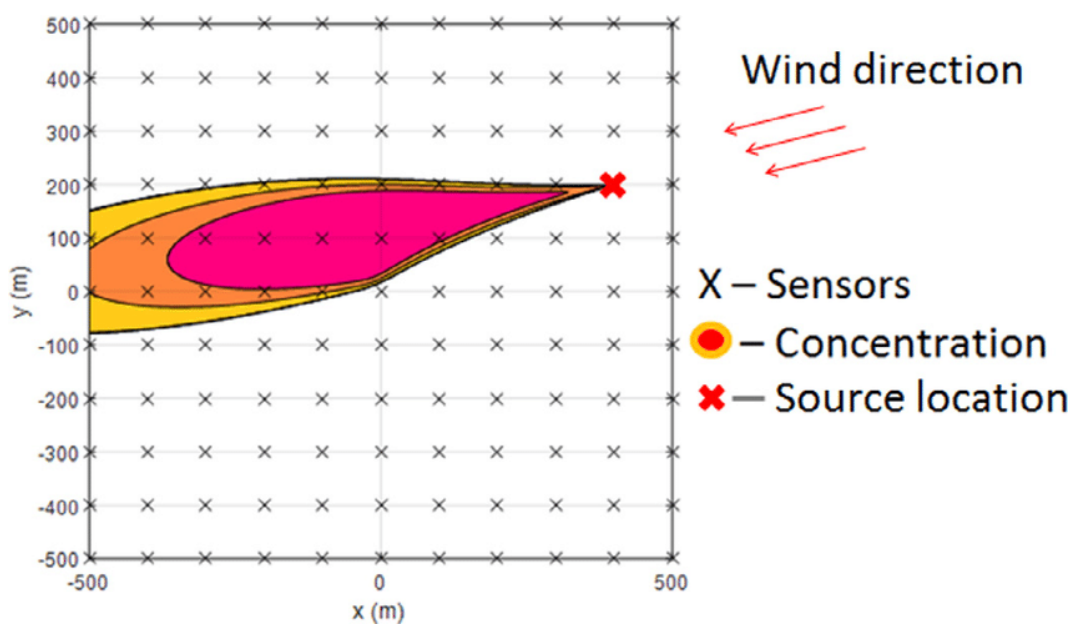
Představme si méně optimistickou situaci, že dojde k úniku radiace například po výbuchu černobylské jaderné elektrárny v roce 1986. Dalším příkladem může být únik radioaktivního jódu v Maďarsku v roce 2011. Ve stejném roce se stala havárie elektrárny Fukušima I, kde byla tato elektrárna zatopena vlnou tsunami a následkem byl únik 20500 TBq radioaktivního cézia-137 [1]. Neposlední událost tohoto typu se stala před třemi lety v Rusku, kde z továrny unikl izotop ruthenia-106. Více zde [15]. Úniků tohoto charakteru se stalo v minulosti už mnoho.

Zatímco přesná poloha, kde dochází k úniku chemických látek, bývá většinou dobře známá, problém nastává v určení časového vývoje úniku dané látky ze zdroje. Tato informace bývá často velkou neznámou a hraje klíčovou roli v řešení důsledků této nemilé události, která se stala. Množství látky, která unikla ze zdroje, známe většinou jen velmi zhruba. Například po výbuchu elektrárny Černobyl se velmi těžko dalo změřit, kolik radioaktivní látky celkově uniklo do atmosféry. A právě touto problematikou se budu zabývat. Budu pomocí matematických metod odhadovat časový průběh úniku dané látky do atmosféry.

Abych mohl tuto neznámou veličinu odhadnout, potřebuji mít k dispozici určitý typ dat. Zaprvé jsou potřeba k výpočtu naměřená data úniku látky ze zdroje za nějaký čas. Prakticky to znamená toto: Kolem zdroje úniku je síť statických senzorů, která detekuje danou látku a její množství viz Obr. 1. Druhou informací, bez které se neobejdeme, je numerický atmosférický model šíření v dané oblasti.

Mým úkolem v první části bude vytvořit vhodný inverzní model, který budu testován na cvičných datech se známým výsledkem. V druhé fázi svůj model implementuji na reálná data experimentu ETEX, a přirozeně, budu diskutovat, jak je můj model přesný, robustní, stabilní a obecný.

Diskutovat také budeme použití fyzikálního omezení, které zpřesňuje výsledek úniku závislého na čase. V tomto omezení použijeme informace o továrně, elektrárně atd., kde došlo k úniku. Toto fyzikální omezení omezuje velikost uniklé látky za jednotku času. Tyto informace se budou zakládat na tom, že víme, že mohlo dojít k maximálně takovému úniku a k většímu už ne. Obvykle se uvažuje pouze s omezením zdola. My se ve své práci zaměříme i na omezení shora a budeme porovnávat tato omezení mezi sebou.



Obrázek 1: Příklad sítě statických senzorů, převzato z [2]

Kapitola 1

Atmosferické modelování

1.1 Modelování atmosferické disperze

Modelování atmosferické disperze je matematická simulace toho, jak se látky, které se dostanou do ovzduší, rozptylují v okolní atmosféře. Tyto disperzní modely se používají k odhadu koncentrace látek v okolí zdroje, které znečišťují ovzduší, nebo toxických látek emitovaných ze zdrojů, jako jsou průmyslová zařízení, automobilová doprava nebo náhodné úniky chemikálií, jak často vidíme. Tyto modely jsou neefektivnější pro uniklé látky ze zdroje, které jsou rozptýleny na velké vzdálenosti. Pro tyto látky, které mají velmi vysokou časovou a prostorovou variabilitu, se také používají statistické regresní modely.

Disperzní modely se v zásadě liší tím, na jakém matematickém modelu jsou založeny (o těch si povíme zanedlouho). Ale všechny potřebují informace o počátečních podmínkách, které mohou zahrnovat:

- Meteorologické podmínky, jako je rychlost a směr větru, množství atmosferické turbulence (charakterizované tzv. Třídou stability), teplota vzduchu, inverze teploty vzduchu, která může být přítomna, oblačnost, sluneční záření a tlak.
- Množství látky ve zdroji z hlediska emisí nebo náhodného úniku v závislosti na čase a teplota materiálu.
- Emise nebo parametry úniku, jako jsou umístění a výška zdroje, typ zdroje (tj. oheň, bazén nebo odvětrávací komín), teplota unikající látky a rychlost uvolňování.
- Nadmořská výška zdroje a senzorů.
- Poloha, výška a šířka jakýchkoli překážek (například budov) v dráze emitovaného plynného oblaku, drsnosti povrchu (nebo použití obecnějšího parametru „venkovský“ nebo „městský“ terén).

1.2 Atmosferické vrstvy

Zásadní téma k této problematice jsou vrstvy v atmosféře a jejich vlastnosti. Vrstva nejbližší zemskému povrchu se nazývá troposféra. Rozkládá se od hladiny moře do výšky asi 18 km a obsahuje asi 80% hmotnosti celkové atmosféry. Stratosféra je další vrstva a sahá od 18 km do 50 km. Třetí vrstva je mezosféra, která sahá od 50 km do asi 80 km. Existují i další vrstvy nad 80 km, ale vzhledem k modelování rozptylu v atmosféře jsou nevýznamné. Nejnižší část troposféry se nazývá atmosferická mezní vrstva (ABL). Zde teplota vzduchu klesá s rostoucí nadmořskou výškou, dokud nedosáhne tzv. Inverzní vrstvy (kde se teplota zvyšuje s rostoucí nadmořskou výškou), která překrývá konvektivní mezní vrstvu,

obvykle ve výšce 1,5 až 2,0 km. ABL je nejdůležitější z hlediska emise, transportu a rozptylu látek ve vzduchu. Část ABL mezi zemským povrchem a spodní částí inverzní vrstvy je známá jako směšovací vrstva. Téměř všechny toxické látky přenášené vzduchem emitované do okolní atmosféry jsou transportovány a rozptýleny ve směšovací vrstvě. Některé emise pronikají inverzní vrstvou a vstupují do volné troposféry nad ABL. Nyní se dostáváme k základním matematickým modelům, na kterých fungují tyto disperzní odhady. Existuje pět typů základních disperzních modelů:

- Krabicové modely
- Gaussovy modely
- Lagrangeovy modely
- Eulerovy disperzní modely
- Modely pro hustý plyn

Úplný seznam typů těchto modelů najdete v [16]. Já se zaměřím na Gaussův, Lagrangeův a Eulerův model.

1.3 Gaussův model

Gaussův model je nejstarší (kolem roku 1936) a možná nejčastěji používaný typ modelu. Předpokládá, že disperze znečišťujících látek v ovzduší má Gaussovo rozdělení. Gaussovské modely se nejčastěji používají k predikci rozptylu kontinuálních vznášejících se oblaků znečišťující ovzduší, které pochází z přízemních nebo zvýšených zdrojů. Gaussovy modely lze také použít k předpovědi rozptylu nekontinuálních oblaků znečištění ovzduší (tzv. Obláček). Gaussův model jen hrubě aproximuje reálný únik látky ze zdroje do atmosféry. Nejvíce se používá na úniky látky, který se pohybuje v řádu desítek kilometrů od zdroje.

Hlavním algoritmem používaným v Gaussově modelování je Generalized Dispersion Equation For A Continuous Point-Source Plume [15]. Klíčové parametry v modelu jsou koeficienty turbulence v atmosféře σ_y a σ_z , které představují standardní odchylky, které popisují horizontální a vertikální pohyb znečišťující látky. Existuje několik odvození těchto hodnot. Jedno z odvození je založeno na Pasquillově atmosférické stabilitní třídě. Rovnice Gaussova modelu vypadá takto:

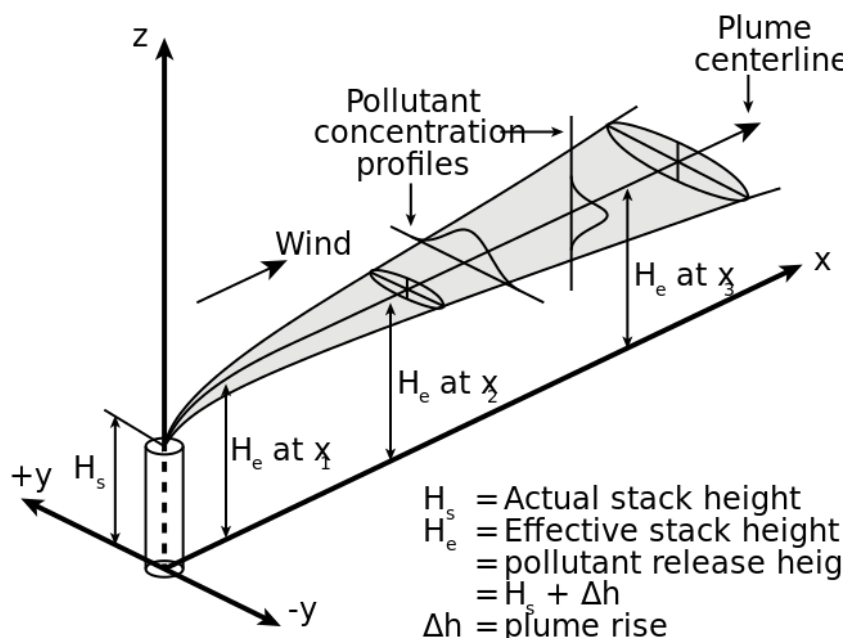
$$C(x, y, z, Q) = \frac{Q}{u\sigma_y\sigma_z2\pi} \left(\frac{-y^2}{2\sigma_y^2} \right) \left[\exp\left(-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right], \quad (1.1)$$

kde C je koncentrace uniklé látky v daném místě, Q je rychlost uvolňování ze zdroje, x , resp. y , resp. z jsou kartézské souřadnice, které představují směr pohybu látky po větru, resp. směr kolmo na pohyb větru, ale v rovině pohybu větru, resp. směr kolmý na rovinu pohybu větru, u je střední rychlost větru ve výšce h .

σ_y a σ_z jsou funkce atmosférické stability (tj. míra turbulence v atmosféře okolí zdroje) a vzdálenosti větru k receptor. V rozptylu dané látky hraje největší roli výška zdroje a stupeň atmosférické turbulence. Rovnice [17] pro σ_y a σ_z jsou:

$$\begin{aligned} \sigma_y(x) &= \exp(I_y + J_y \ln(x) + K_y [\ln(x)]^2) \\ \sigma_z(x) &= \exp(I_z + J_z \ln(x) + K_z [\ln(x)]^2) \end{aligned}$$

Gaussova rovnice pro rozptyl znečišťujících látek v ovzduší vyžaduje navíc vstupní parametr H , což je výška oblaku látky nad úrovní země. H je součet H_s (výška zdroje oblaku znečišťujících látek) a δH (změna výšky díky vztlaku oblaku) 1.1.



Obrázek 1.1: Vizualizace vznášejícího se oblaku znečišťujících látek podle Gaussova modelu, převzato z [3]

1.4 Lagrangeův model

Lagrangeův model částic vypočítává trajektorie velkého počtu částic/balíků (nekonečně malé vzdušné krychle) a popisuje transport a difúzi látek v atmosféře. Hlavní výhodou Lagrangeových modelů je, že na rozdíl od Eulerových modelů neexistují žádné numerické hodnoty difúze. Jeho soustava souřadnic se pohybuje s částicemi. Pozorovaný balík se nachází v počátku $\forall t$. Kromě transportu a turbulentní difúze je schopen simulovat suché nebo mokré unikající látky, radioaktivní látky, nebo látky s lineárním rozpadem. Je založen na tomto vztahu [4]:

$$\mathbf{X}(t + \Delta t) = \mathbf{X}(t) + \mathbf{v}(\mathbf{X}, t)\Delta t, \quad (1.2)$$

kde chyba této rovnice je prvního řádu. X je polohový vektor částice, t je čas, Δt je přírůstek času a celková rychlost unikající látky je $\mathbf{v}[\mathbf{X}(t)] = \frac{d\mathbf{X}(t)}{dt} = \bar{\mathbf{v}} + v_t + v_m$, kde $\bar{\mathbf{v}}$ značí průměrnou rychlost větru, v_t je turbulentní fluktuace větru, v_m značí fluktuaci větru v mesoscale. Turbulentní fluktuaci větru definuje Langevinova rovnice [5]:

$$dv_{i_t} = a_i(\mathbf{x}, \mathbf{v}_t, t)dt + b_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{v}_t, t)dW_j,$$

kde a_{ij} je driftový člen a b_{ij} difúzní člen: jsou funkcemi polohy, turbulentní rychlosti a času. dW_j jsou přírůstkové části procesu Wiener se střední hodnotou v nule a rozptylem dt , které jsou časově nekorelované.

Jedním z modelů založených na Lagrangeově modelu je FLEXPART. FLEXPART ("FLEXible Particle dispersion model") je Lagrangeův transportní a disperzní model vhodný pro simulaci velkého rozsahu atmosférických úniků. Podmínkou tohoto modelu je inerciální soustava.

Nyní popíšeme hlavní parametry Lagrangeova modelu, kterými jsou mokrá a suchá depozice.

1.4.1 Mokrá depozice

Mokrá depozice se zabývá pohybem aerosolů a plynů z atmosféry. Nicméně, údaje o výšce a hloubce spodní straně mraků nejsou k dispozici. V mraku a pod mrakem jsou tyto plyny modelovány pomocí FLEXPARTU. Pomocí koeficientů pročišťování má mokrá depozice tvar exponenciálního rozpadu:

$$m(t + \Delta t) = m(t) \exp(-\Lambda \Delta t),$$

kde m a Λ jsou hmotnost částic a koeficient pročišťování. Koeficient čistění Λ se zvyšuje s rychlostí srážek podle $\Lambda = AI^B$, kde I je rychlost srážek *mm/hod*. B udává závislost na rychlosti srážení.

1.4.2 Suchá depozice

Suchá depozice je popsána ve FLEXPARTu depoziční rychlostí:

$$v_d(z) = -\frac{F_c}{C(z)},$$

kde F_c a C jsou tok a koncentrace druhu ve výšce z uvnitř vrstvy mraku s konstantní rychlostí toku.

1.4.3 Radioaktivní rozpad

Radioaktivní rozpad je způsoben nestabilitou stavby atomů. Důsledkem je snížením hmotnosti částic podle:

$$m(t + \Delta t) = m(t) \exp\left(-\frac{\Delta t}{\beta}\right),$$

kde $m(t)$ je hmotnost částice v čase t a časová konstanta $\beta = \frac{T_{1/2}}{\ln(2)}$ se stanoví z poločasu rozpadu $T_{1/2}$, kde tato perioda znamená, za jak dlouho se přemění polovina celkového počtu atomárních jader.

1.5 Eulerův model

Model Eulerianova rozptylu je podobný lagrangeovskému modelu v tom, že také sleduje pohyb velkého počtu balíků při jejich pohybu z původního umístění. Nejdůležitější rozdíl mezi těmito dvěma modely spočívá v tom, že Eulerův model používá pevnou trojrozměrnou kartézskou soustavu souřadnic, na rozdíl od pohyblivé soustavy, Lagrangeova modelu, která se pohybuje s mrakem látky. Eulerovský model [6] sleduje koncentraci látky v závislosti na poloze a čase $c(x, y, z, t)$:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -V \cdot \nabla c + D \cdot \nabla^2 c + S, \quad (1.3)$$

kde V je vektor rychlosti větru, D značí molekulární difuzivitu a S je poloha zdroje (je třeba vzít v úvahu chemické reakce) Výhodou Eulerova a Lagrangeova modelu je, že jsou stavěné na úniky látek v kontinentálním měřítku, jsou tedy globálně použitelné.

1.6 Řešení inverzního modelu

Zabývejme se nyní lineárními modely disperze látky do atmosféry pomocí matice SRS (Source-receptor-sensitivity) [7], která byla použita v inverzním modelování [8]. Zde model atmosférického přenosu vypočítává lineární vztah mezi potenciálním zdrojem a koncentrací c , o které jsem mluvil v předchozí kapitole. Citlivost zdrojového receptoru se počítá jako $m_{ij} = \frac{c_i}{x_j}$, kde x_j je předpokládaný únik z místa zdroje v čase j a c_i je vypočítaná koncentrace na receptoru c_i v příslušném časovém období. Měření y_i v daném čase a na určitém senzoru je chápáno jako celkový příspěvek ze všech prvků zdroje, který jsme definovali jako m_{ij} . Základní inverzní problém je formulován na základě následujícího lineárního modelu.

$$y = Mx + e, \quad (1.4)$$

kde $y \in \mathbb{R}^p$ je vektor měření, kde $y_i \forall i \in p$ vyjadřuje, kolik se celkově naměřilo na i -tém statickém senzoru. $M \in \mathbb{R}^{p \times n}$ jak už bylo výše zmíněno, numerický atmosférický model SRS, $x \in \mathbb{R}^n$ značí množství uniklé látky ze zdroje závislé na čase, zde máme n časových kroků a $e \in \mathbb{R}^p$ značí celkovou chybu modelu a měření, tedy $e_i \forall i \in p$ vyjadřuje chybu na i -tém senzoru.

Zatímco model vypadá triviálně, jeho praktické použití představuje velký problém. Klíčovým důvodem je, že všechny prvky modelu podléhají neurčitosti (znárodnění). Ve zbytku této kapitoly probereme vliv chyby modelování a ukážeme, jak k této problematice přistupují stávající metody. Budeme podrobně analyzovat dvě metody pro odhad zdrojového členu:

1. Optimalizační: například navržený v [9]
2. Bayesovský model. Zde je formulován pravděpodobnostní model a odvozen iterativní algoritmus pro odhad parametrů tohoto modelu. [11]

1.6.1 Vliv chyby atmosférického modelu

V této kapitole, která je citována z [13], si vysvětlíme, jakou roli v atmosférickém modelu hraje chyba měření. V ideálním případě bychom předpokládali, že matice SRS (budeme značit M) je správná a skutečný zdrojový člen minimalizuje chybu rovnice $y = Mx$. M je však náchylná k chybám kvůli řadě aproximací ve formulaci modelu atmosférické disperze a použití dat podle toho, jaké bude počasí. Měli bychom tedy raději uvažovat o hypotetickém modelu.

$$y = (M + \Delta_M)x, \quad (1.5)$$

kde M je odhad matice z numerického modelu a člen Δ_M je odchylka od odhadu skutečné generující matice: $M_{true} = M + \Delta_M$. Přesný odhad Δ_M není možný kvůli nedostatku dat, mnoho stávajících regularizačních technik lze interpretovat jako různé zjednodušené parametrizace Δ_M . Normou L_2 rezidua mezi měřeními a rekonstrukcí chápeme:

$$\begin{aligned} \|y - Mx - \Delta_M x\|_2^2 &= \|y - Mx\|_2^2 - 2y^T \Delta_M x + x^T \Xi x \\ \Xi &= M^T \Delta_M + \Delta_M^T M + \Delta_M^T \Delta_M \end{aligned} \quad (1.6)$$

Ideální optimalizační problém (pravá strana 1.6) lze rozdělit na normu reziduí odhadovaného modelu $\|y - Mx\|_2^2$ na lineární člen v x : $2y^T \Delta_M x$ a kvadratický člen: $x^T \Xi x$. Pokud je Δ_M významná odchylka, k neznámému odhadu x přispívají oba členy.

V ideální situaci bychom chtěli optimalizovat levou stranu 1.6. Kvůli neznámé odchylce ΔM je lineární člen obvykle ignorován (předpokládáme, že je zanedbatelný) a kvadratický člen je aproximován pomocí parametrického tvaru 1.6 z Ξ . Kritérium optimalizace je tedy:

$$J = \|y - Mx\|_2^2 - x^T \Xi x \quad (1.7)$$

Chyba odhadu způsobená aproximací 1.7 může být ovlivněna regularizační maticí Ξ . Pro správnou volbu těchto hodnot by měl být lineární člen blízký nule. Volba parametrického tvaru matice Ξ odpovídá výběru odchylky matice SRS, protože

$$\Xi = \Delta_M^T \Delta_M. \quad (1.8)$$

V následujících kapitolách probereme metody, které odhadují parametrickou matici Ξ z dat pomocí parametrizace tridiagonální maticí Ξ s omezeným počtem parametrů. Konkrétně budeme zkoumat, zda volba x má dopad na lepší odhad Ξ .

1.6.2 Optimalizační metoda

V literatuře Eckhardt a kol. [9] je kritérium optimalizace 1.7 rozebráno dopodrobna. Parametrická matice Ξ je ve tvaru:

$$\Xi = B + \epsilon D^T D \quad (1.9)$$

kde B je vybrána, nebo přesně odhadnutá matice, matice D diskretně znázorňuje druhé derivace s prvky na diagonále -2 a 1 na prvních dílčích úhlopříčkách a ϵ je parametr, který zajišťuje hladkost řešení x .

Minimalizace 1.7 nezaručuje nezápornost odhadovaného zdrojového členu x . Pro vyřešení tohoto problému použijeme iterační postup ([9]), který minimalizuje 1.7 pomocí stále se zmenšujícími diagonálními prvky matice B vztahující se k negativním částem řešení, čímž se zlepšuje řešení na apriorního zdrojového členu, který je, jak předpokládáme, nezáporný. Na druhou stranu lze diagonální prvky matice B , které souvisejí s kladnou částí řešení, zvětšit až k vybrané konstantě. Tento postup iterujeme, dokud absolutní hodnota součtu záporných zdrojových prvků nebude nižší než 0,01% součtu kladných prvků zdroje. Formálně se diagonální prvky matice B v i -té iteraci počítají jako

$$B_{j,j}^{(i)} = \begin{cases} 0.5B_{j,j}^{(i-1)}, & \text{pro } x_j^{(i-1)} < 0, \\ \min\{\sqrt{1.5}B_{j,j}^{(i-1)}, \text{err}_x\}, & \text{pro } x_j^{(i-1)} \geq 0. \end{cases} \quad (1.10)$$

Tato kapitola byla citována z [14].

1.6.3 Variační Bayesovská metoda

V literatuře Tichý a kol. [7], je problém řešen pomocí Bayesovského přístupu. Hlavní rozdíly oproti optimalizační metodě jsou dva. Nejprve má jinou aproximaci kovarianční matice Ξ :

$$\Xi = LVL^T \quad (1.11)$$

kde matice L modeluje hladkost a matice V modeluje, nebo vyjadřuje určitý vztah mezi sousedními členy zdrojového členu x . Matice $V = \text{diag}(v_1, \dots, v_n)$ je diagonální matice s kladnými parametry, zatímco matice L je poddiagonální matice:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & l_{n-1} & 1 \end{pmatrix} \quad (1.12)$$

Za druhé, Bayesovský přístup umožňuje odhadnout hyperparametry V a L z dat. Konkrétně formuluje hierarchický pravděpodobnostní model:

$$f(y|x, \omega) = \mathcal{N}_p(Mx, \omega^{-1}\mathbb{I}_p) \quad (1.13)$$

$$f(\omega) = \mathcal{G}(\vartheta_0, \rho_0) \quad (1.14)$$

$$f(x|V, L) = t\mathcal{N}_n(0, (LV L^T)^{-1}, [0, \infty)) \quad (1.15)$$

$$f(v_i) = \mathcal{G}(\alpha_0, \beta_0) \quad \forall i \in n \quad (1.16)$$

$$f(l_j|\sigma_j) = \mathcal{N}(l_{0j}, \sigma_j^{-1}) \quad \forall j \in n - 1 \quad (1.17)$$

$$f(\sigma_j) = \mathcal{G}(\zeta_0, \eta_0) \quad \forall j \in n - 1, \quad (1.18)$$

kde \mathcal{N} resp. \mathcal{G} je normální resp. gamma rozdělení. Jejich definice je v kapitole 2. Zde jsou apriorní konstanty α_0 a β_0 zvoleny stejně jako ϑ_0 a ρ_0 hodnotou 10^{-10} , čímž se získá neinformativní apriora a apriorní konstanty ζ_0 a η_0 mají hodnotu 10^{-2} , což má za důsledek hladkost řešení.

Já se v této bakalářské práci pokusím, jak už bylo zmíněno výše, vyřešit inverzní model Bayesovským přístupem. A abychom se mohli posounout dále a dostat řešení Bayesovy metody, je třeba zavést teorii, jak pravděpodobnostní, tak i bayesovskou.

Kapitola 2

Bayesovská metodologie

V této kapitole formalizujeme problém neřešitelné parametrické distribuční funkce, která odhaduje rozdělení parametru θ za podmínky naměřených dat, a následně její aproximaci prostřednictvím postačujících alternativ. Naším cílem bude vymyslet dobré aproximace aposteriorních marginálních distribucí a momentů, které přesně neznáme, hlavním zaměřením bude metoda Variační Bayes, která slouží pro aproximaci distribuce. Klíčovým výstupem bude iterativní VB algoritmus, tzv. IVB, u kterého je zaručeno, že konverguje ke skutečné minimální disparitní funkci. Metoda VB (variační Bayesova metoda) poskytuje soubor jasných a systematických kroků pro výpočet VB-aproximací pro širokou škálu Bayesovských modelů. Než se ale pustíme do problematiky Variational Bayes, zaved' me si pár nezbytných pojmů z pravděpodobnosti, které budeme při výpočtu používat.

2.1 Pravděpodobnostní míra

Bayesovský pravděpodobnostní model přirozeně počítá s chybami modelu, jak pozorovatele, tak zdroje. Informace o zdroji jsou obohaceny o aposteriorní informaci, která vyšla z dat při průběžných měření koncentrace. Všechny dostupné informace, které o úniku látky ze zdroje máme, shrnuje vhodně zvolená hustota pravděpodobnosti. K hledání pravděpodobnostního modelu je potřeba znát základy pravděpodobnosti a statistiky. Uvedu zde nezbytné znalosti, které čerpám z literatury [12].

Mějme Ω jako základní množinu jevů, A označme jev, \mathcal{A} jako σ -algebru a P jako pravděpodobnostní míru.

Definice 2.1.1 (Podmíněná pravděpodobnost). *Necht' je $A, B \in \mathcal{A}$ a $P(B) > 0$. Pak definujeme podmíněnou pravděpodobnost:*

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}. \quad (2.1)$$

Věta 2.1.1 (Součinové pravidlo). *Necht' $A_1, \dots, A_n \in \mathcal{A}$ a dále necht' také $P(A_1, \dots, A_n) > 0$. Potom platí*

$$P(A_1, \dots, A_n) = P(A_1) \cdot P(A_2|A_1) \cdot P(A_3|A_2, A_1) \cdot \dots \cdot P(A_n|A_1, \dots, A_{n-1}). \quad (2.2)$$

Věta 2.1.2 (Nezávislost jevů). *Necht' $A_j \in \mathcal{A} (\forall j \in \mathbb{N})$. Potom jevy nazveme nezávislé právě tehdy, když platí podmínka*

$$P(A_1, \dots, A_k) = \prod_{i=1}^k P(A_i). \quad (2.3)$$

Věta 2.1.3 (Bayesova věta). *Mějme $(H_k)_{k=0}^{\infty}$ jako úplný rozklad Ω , $A \in \mathcal{A}$, $\mathbb{P}(A) > 0$. Potom $\forall k \in \mathbb{N}$ platí, že*

$$\mathbb{P}(H_k|A) = \frac{\mathbb{P}(A|H_k)\mathbb{P}(H_k)}{\sum_{j=1}^{n,\infty} \mathbb{P}(A|H_j)\mathbb{P}(H_j)}. \quad (2.4)$$

Věta 2.1.4 (Bayesova věta pro spojité náhodné veličiny). *Mějme X, Y spojité náhodné veličiny s hustotou pravděpodobnosti $f_{X,Y}$, $g(y) \neq 0$. Pak*

$$f(y/x) = \frac{f(x|y)g(y)}{\int_{\mathcal{Y}} f(x|y)g(y) dy}, \quad (2.5)$$

kde $g(y)$ nazýváme apriorní hustota pravděpodobnosti a $f(y/x)$ je aposteriorní hustota pravděpodobnosti a jmenovatel je často nazýván jako evidence.

2.1.1 Hustoty pravděpodobnosti

Celé variační Bayesovská teorie stojí na náhodné veličině (pod kterou si můžeme představit únik látky ze zdroje, rozptyl úniku látky, jeho střední hodnotu, celkovou chybu atd.). Proto si ty, co budeme používat, zadefinujme.

Exponenciální rodina rozdělení

Jednparametrická exponenciální rodina je množina distribucí pravděpodobnosti, jejichž funkce hustoty pravděpodobnosti (nebo funkce pravděpodobnostní hmotnosti, v případě diskrétního rozdělení) lze vyjádřit ve formě:

$$f_X(x|\theta) = h(x) \exp(\eta(\theta)T(x) - A(\theta)), \quad (2.6)$$

kde $h(x)$, $\eta(\theta)$, $T(x)$ a $A(\theta)$ jsou libovolné funkce.

Normální rozdělení

Toto rozdělení se řadí mezi exponenciální rodinu rozdělení. Jeho hustota je definována $\forall x \in \mathbb{R}$ pomocí dvou parametrů $\mu \in \mathbb{R}$ a $\sigma > 0$ vztahem

$$\mathcal{N}(\mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left\{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right\}. \quad (2.7)$$

- $E[X] = \mu$ (střední hodnota)
- $D[X] = \sigma^2$ (rozptyl)

Budeme hlavně využívat n -dimenzionální Gaussovo rozdělení s parametry $\mu \in \mathbb{R}^n$ (vektor střední hodnoty) a $\Sigma \in \mathbb{R}^{n,n}$ (kovarianční matice), které se definuje takto:

$$\mathcal{N}(\mu, \Sigma) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n |\Sigma|}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mu)^T \Sigma^{-1}(\mathbf{x}-\mu)\right\}, \quad (2.8)$$

kde $|\Sigma|$ značí determinant kovarianční matice. Uveď me si zde opět základní momenty:

- $E[\mathbf{X}] = (E[X_1] \cdots E[X_n]) = \mu$
- $D[\mathbf{X}] = \Sigma$

Gamma rozdělení

I toto rozdělení patří do exponenciální rodiny. Hustotu pravděpodobnosti $\forall x \in \mathbb{R}^+$ s parametry $\alpha, \beta > 0$, definujeme vztahem

$$\mathcal{G}(\alpha, \beta) = \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)} x^{\alpha-1} \exp(-\beta x), \quad (2.9)$$

kde $\Gamma(\alpha) = \int_0^\infty t^{\alpha-1} e^{-t} dt$ se nazývá gamma funkce. Stejně jako u předchozího rozdělení si zaved' me vybrané integrální charakteristiky.

- $E[X] = \frac{\alpha}{\beta}$
- $D[X] = \frac{\alpha}{\beta^2}$

Apriorní rozdělení

Apriorní rozdělení (spolu s modelem) reprezentuje informaci o neznámém parametru θ , která je dostupná předem, tj. bez informace z dat. Má zásadní význam v případě, že data jsou málo informativní. Jeho definice je zde 2.5. Obvykle se vybírají určité třídy apriorních rozdělení, které lze snadno interpretovat a zjednodušují výpočet. **Přirozeně konjugovaný prior** má obě tyto vlastnosti. Konjugované apriorní rozdělení je takové, které po kombinaci s věrohodnostní funkcí dává posteriorní hustotu, která spadá do téže třídy rozdělení. Více o tomto tématu zde [10].

2.2 Aproximace distribuční funkce

Aplikace Bayesova pravidla 2.16, normalizace 2.17, marginalizace a výpočet momentů aposteriorního rozdělení, je zaručeno pouze u omezené třídy modelů. Numerickou integraci lze použít, ale je to často výpočetně složité a dlouhé, zejména při vyšších dimenzích. Problém lze překonat aproximací skutečné aposteriorní distribuce distribucí, která je výpočetně úsporná:

$$f(\theta|D) \approx A[f(\theta|D)] \equiv \tilde{f}(\theta|D), \quad (2.10)$$

kde θ je právě odhadovaný parametr, D jsou poskytnutá naměřená data. Jakmile je $f(\theta|D)$ nahrazeno $\tilde{f}(\theta|D)$, pak lze teoreticky provádět všechny výše uvedené inferenční operace. Mnoho metod aproximace naleznete v literatuře [2].

Úkolem je obecně zvolit optimální rozdělení, $\tilde{f}(\theta|D) \in \mathbb{F}$ z prostoru všech možných distribucí. $\tilde{f}(\theta|D)$ by mělo být "uchopitelné" a v jistém smyslu "blízko" ke skutečné aposteriorní $f(\theta|D)$. Úkol lze formalizovat jako optimalizační problém vyžadující zadefinování následujících pojmů:

1. Subprostor distribucí, $\mathbb{F}_c \in \mathbb{F}$, je definován tak, že všechny funkce $\tilde{f} \in \mathbb{F}_c$, jsou "dobře uchopitelné".
2. Míra vzdálenosti $\Delta(f||\tilde{f})$ značí vzdálenost mezi skutečnou distribucí $f \in \mathbb{F}$ a distribucí $\tilde{f} \in \mathbb{F}_c$. $\Delta(f||\tilde{f})$ je tedy definována na prostoru $\mathbb{F} \times \mathbb{F}_c$.

Potom nejlepší volba aproximační funkce je

$$\tilde{f}(\theta|D) = \arg \min_{\tilde{f} \in \mathbb{F}_c} \Delta(f(\theta|D)||\tilde{f}(\theta|D)) \quad (2.11)$$

2.2.1 Kullback-Leiblerova divergence

Když hledáme aproximační funkci 2.11, dopouštíme se, při nejlepším ztráty v řádu logaritmu, pokud chceme ztratit co nejméně informací ze skutečného rozdělení. Použití funkce logaritmické ztráty vede k Kullback-Leiblerově divergenci:

$$\Delta(f(\theta|D)\|\check{f}(\theta|D)) = KL(f(\theta|D)\|\check{f}(\theta|D)) \quad (2.12)$$

Kullback-Leiblerova divergence je definována jako:

$$KL(f(\theta|D)\|\check{f}(\theta|D)) = \int_{\Theta^*} f(\theta|D) \ln\left(\frac{f(\theta|D)}{\check{f}(\theta|D)}\right) d\theta = E_{f(\theta|D)}\left[\ln\left(\frac{f(\theta|D)}{\check{f}(\theta|D)}\right)\right] \quad (2.13)$$

Z vlastností KL [2] je třeba věnovat pozornost pořadí v $KL(\cdot)$. Říkáme, že 2.13 je z $f(\theta|D)$ do $\check{f}(\theta|D)$. Pro budoucí účely proto rozlišujeme mezi dvěma možnými uspořádáními argumentů v divergenci KL:

1. *Minimum Risk* je definováno jako

$$KLD_{MR} = KL(f(\theta|D)\|\check{f}(\theta|D)) \quad (2.14)$$

2. *Variational Bayes* (VB) je definován jako

$$KLD_{VB} = KL(\check{f}(\theta|D)\|f(\theta|D)) \quad (2.15)$$

2.2.2 Variační Bayesova věta

Mějme naměřená data D . Parametrický pravděpodobnostní model dat je dán hustotou pravděpodobnosti $f(D|\theta)$, která je podmíněná znalostí parametru θ . Náš předchozí stav znalostí θ je definován distribucí $f(\theta)$. Naše znalosti o parametru θ po pozorování D je kvantifikován aposteriorním rozdělením $f(\theta|D)$. Tyto funkce spolu souvisí prostřednictvím Bayesovy věty 2.5:

$$f(\theta|D) = \frac{f(\theta \cap D)}{f(D)} = \frac{f(D|\theta)f(\theta)}{\int_{\Theta} f(D|\theta)f(\theta) d\theta} \quad (2.16)$$

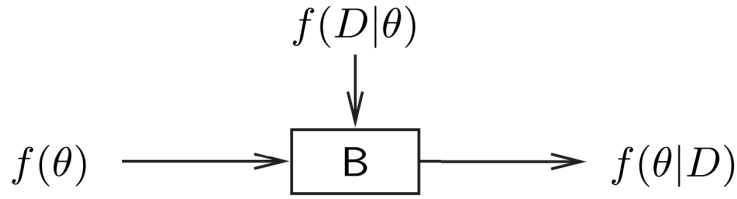
$\zeta = f(D)$ je normalizační konstanta, ve fyzikální literatuře známá jako funkce oddílu.

$$\zeta = f(D) = \int_{\Theta} f(D \cap \theta) d\theta = \int_{\Theta} f(D|\theta)f(\theta) d\theta \quad (2.17)$$

Bayesova věta 2.16 může být přepsána:

$$f(\theta|D) = \frac{1}{\zeta} f(D|\theta)f(\theta) \propto f(D|\theta)f(\theta) \quad (2.18)$$

kde \propto znamená proporcionální rovnost, to znamená "rovná se" až na normalizační konstantu v našem případě ζ a Θ značí parametrický prostor. Aposteriorní hustota pravděpodobnosti je plně určena součinem $f(D|\theta)f(\theta)$, protože normalizační konstanta vyplývá z požadavku, aby $f(\theta|D)$ bylo rozdělení pravděpodobnosti; tj. $\int_{\Theta} f(\theta|D) d\theta = 1$. Hodnota ζ dle 2.17 se nebude moct dát, nebo jen velmi těžko, spočítat. Pokud integrál 2.17 diverguje, distribuce se nazývá nevhodná. Aposteriorní distribuce s explicitně známou normalizační konstantou 2.18 se bude nazývat normalizované rozdělení. Na obr. 2.1 reprezentujeme Bayesovo pravidlo 2.16 jako operátora B , transformujícího apriorní rozdělení do aposteriorního rozdělení, pomocí pozorovacího modelu, $f(D|\theta)$.



Obrázek 2.1: Bayesovo pravidlo v roli operátoru, převzato z [2]

Metoda aproximace distribuční funkce Variational Bayes (VB) je optimalizační metoda, jak najít nejlepší aproximaci posteriorního rozdělení $f(\theta|D)$ s následujícími podmínkami. Jako prostor podmíněně nezávislých distribucí je prostor distribucí \mathbb{F}_c

$$\mathbb{F}_c \equiv \{f(\theta_1, \theta_2|D) : f(\theta_1, \theta_2|D) = f(\theta_1|D)f(\theta_2|D)\} \quad (2.19)$$

parametr θ musí být tedy vícerozměrný parametr.

Věta 2.2.1 (Variační Bayesova věta). *Necht' $f(\theta|D) \in \mathbb{F}$ je skutečné posteriorní rozdělení parametru $\theta \in \mathbb{R}^n$, který je rozdělen do n sub-vektorů:*

$$\theta = (\theta'_1, \dots, \theta'_n)' \quad (2.20)$$

Necht' $\check{f}(\theta|D) \in \mathbb{F}_c$ je přibližné rozdělení omezené na množinu podmíněně nezávislých rozdělení pro $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_n)$:

$$\check{f}(\theta|D) = \prod_{i=1}^n \check{f}(\theta_i|D) \quad (2.21)$$

Potom pro KLD_{VB} :

$$\tilde{f}(\theta|D) = \arg \min_{\check{f}(\cdot)} KL(\check{f}(\theta|D) || f(\theta|D)) \quad (2.22)$$

je minimum:

$$\tilde{f}(\theta_i|D) \propto \exp\left(E_{\tilde{f}(\theta_i|D)}[\ln f(\theta \cap D)]\right), \quad (2.23)$$

kde θ_{j_i} je doplněk θ_i do θ a $\tilde{f}(\theta_{j_i}|D) = \prod_{j=1, j \neq i}^n \check{f}(\theta_j|D)$

Budeme označovat $\tilde{f}(\theta|D)$ 2.22 jako Variační-Bayesovskou apoximaci a $\tilde{f}(\theta_i|D)$ 2.23 jako marginální variační bayesovskou hustotu pravděpodobnosti.

Tato stěžejní věta 2.2.1 nám v praxi poskytne sadu implicitních rovnic pro parametry $\theta_i \quad \forall i \in n$, která se hodí na exponenciální třídu rozdělení a po použití této věty opět dostaneme rozdělení této třídy, protože pracujeme s přirozeně konjugovaným priorem. Tyto rovnice se řeší buď analyticky nebo se řeší numericky pomocí iteračního algoritmu. Tato věta bude dále použita v sekci 3.1.

Kapitola 3

Inverzní model

V této kapitole si odvodíme pomocí věty 2.2.1 sadu implicitních rovnic pro parametry, které jsou definovány 3.1 a které budeme řešit numericky pomocí iteračního algoritmu LS-APC (Least Squares with Adaptive Prior Covariance) z [13]. Dále v kapitole 3.2 zavedeme úpravu modelu LS-APC, kde budeme předpokládat fyzikální omezení ve smyslu znalosti maximálního množství uniklé látky za jednotku času, což lze formalizovat pomocí ořezaného normálního rozdělení s konečnou horní mezí.

3.1 Odvození LS-APC

Nyní se už můžeme, po té co jsme zadefinovali klíčové pojmy pravděpodobnosti a bayesovské teorie, pustit do řešení inverzní úlohy. Mějme tedy model:

$$y = Mx + e, \quad (3.1)$$

kde $y \in \mathbb{R}^p$ je vektor měření, kde $y_i \forall i \in p$ vyjadřuje kolik koncentrace uniklé látky se celkově naměřilo na i -tém statickém senzoru. $M \in \mathbb{R}^{p,n}$ jak už bylo výše zmíněno, je numerický atmosférický model, $x \in \mathbb{R}^n$ značí množství uniklé látky závislé na čase, zde máme tedy n časových kroků a $e \in \mathbb{R}^p$ značí celkovou chybu měření, tedy $e_i \forall i \in p$ vyjadřuje chybu na i -tém senzoru.

Model LS-APC je definován tím, jaké distribuční rozdělení mají náhodné veličiny inverzního modelu a jejich znárodněné parametry. Pojd' me si je tedy postupně zadefinovat.

3.1.1 Model pozorování a model zdrojového členu

Mějme model, kde člen šumu $e \in \mathbb{R}^p$ je iid. Pro vektor $y \in \mathbb{R}^p$ platí to samé, tím pádem je pro každou složku těchto vektorů definováno rozdělení:

$$f_e(e) = \mathcal{N}_p(0, \omega^{-1}) \quad (3.2)$$

$$f_y(y|x, \omega) = \mathcal{N}_p(Mx, \omega^{-1}\mathbb{I}_p), \quad (3.3)$$

kde \mathbb{I}_p značí jednotkovou matici o rozměrech $p \times p$

$$f_x(x|V, L) = t\mathcal{N}_n(0, (LV L^T)^{-1}, [0, \infty)) \quad (3.4)$$

o omezení intervalu $[0, \infty)$, který souvisí s fyzikálním omezením, si povíme v následující sekci.

Znáhodněný parametr ω

Tento parametr vyjadřuje, jakou směrodatnou odchylku, nebo mezi jakými hodnotami se bude nejčastěji pohybovat hodnota vektoru měření y a je definován následovně:

$$f(\omega) = \mathcal{G}(\vartheta_0, \rho_0) \quad (3.5)$$

Znáhodněný parametr V

$V \in \mathbb{R}^{n,n}$ je diagonální matice daných rozměrů s prvky $v_j \quad \forall j \in n$. Je definována podle gamma rozdělení.

$$f(v_j) = \mathcal{G}(\alpha_0, \beta_0) \quad \forall j \in n \quad (3.6)$$

Parametry této v_j souvisí s tzv. řídkostí modelu. V momentě, kdy je nedostatek informací o členu x (kolem 0), V^{-1} se blíží 0 a odhad zdroje x se pohybuje kolem 0. Zatímco, když je dostatek informací, jejich rozptyl se zvětší (V se blíží 0) a odhad je přesnější.

Znáhodněný parametr L

Matice $L \in \mathbb{R}^{n,n}$ je ve tvaru:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & l_{n-1} & 1 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

kde společně s maticí V (LVL^T) tvoří tzv. Choleskyho dekompozici. Matice L je toho významu, že kromě "klidného" chování, které zaručuje matice V , garantuje hladkost modelu a její nenulové prvky $\{l_1 \cdots l_{n-1}\}$ jsou definovány podle Gaussova rozdělení:

$$f(l_j | \sigma_j) = \mathcal{N}(l_0, \sigma_j^{-1}) \quad \forall j \in n - 1 \quad (3.8)$$

Znáhodněný parametr σ

Tento parametr rozptylu parametru $l_j \quad \forall j \in n - 1$, je znáhodněn pomocí gamma rozdělení.

$$f(\sigma_j) = \mathcal{G}(\zeta_0, \eta_0) \quad \forall j \in n - 1 \quad (3.9)$$

3.1.2 Řešení podle Bayesovy metody

Abychom mohli použít Variační bayesovu větu 2.2.1, musíme nejprve spočítat pravou stranu rovnice, což je $f(\theta, y)$, při použití 2.3, 2.5 a 2.18 dostáváme:

$$\begin{aligned}
f(y, x, \omega, V, L, \sigma) &= f(y|x, \omega)f(x|V, L)f(V)f(L)f(\omega) \\
&= f(y|x, \omega)f(x|V, L) \prod_{i=1}^n f(v_i) \prod_{j=1}^{n-1} f(l_j|\sigma_j) \prod_{j=1}^{n-1} f(\sigma_j)f(\omega) \\
&\propto \omega^{\frac{p}{2}+\vartheta_0-1} \prod_{k=1}^n \sqrt{v_k} \prod_{i=1}^n v_i^{\alpha_0-1} \prod_{j=1}^{n-1} \sigma_j^{\zeta_0-\frac{1}{2}} \\
&\exp \left[-\frac{1}{2}\omega(y - Mx)^T(y - Mx) - \frac{1}{2}x^T LVL^T x - \sum_{j=1}^{n-1} \frac{1}{2}(l_j - l_{0j})^2 \sigma_j - \sum_{i=1}^n \beta_0 v_i - \sum_{j=1}^{n-1} \eta_0 \sigma_j - \rho_0 \omega \right],
\end{aligned} \tag{3.10}$$

kde člen $\prod_{k=1}^n \sqrt{v_k}$ je determinant matice LVL^T .

Při použití Variační Bayesovy věty $\forall i$ tedy dostaneme:

$$\begin{aligned}
\tilde{f}(\theta_i|y) &= \exp \left(E_{\tilde{f}(\theta_i|y)} \left[-\frac{1}{2}\omega(y - Mx)^T(y - Mx) - \frac{1}{2}x^T LVL^T x - \sum_{j=1}^{n-1} \frac{1}{2}(l_j - l_{0j})^2 \sigma_j - \sum_{i=1}^n \beta_0 v_i - \sum_{j=1}^{n-1} \eta_0 \sigma_j - \rho_0 \omega \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \left(\frac{p}{2} + \vartheta_0 - 1 \right) \ln \omega + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \ln v_i + \sum_{i=1}^n (\alpha_0 - 1) \ln v_i + \sum_{j=1}^{n-1} \left(\zeta_0 - \frac{1}{2} \right) \ln \sigma_j \right] \right) \tag{3.11}
\end{aligned}$$

kde θ_i značí jakýkoliv parametr našeho modelu.

Nyní si zaved' me nejlepší možnou aproximaci, která minimalizuje KL divergenci mezi odhadovaným řešením a hypotetickým opravdovým aposteriorním řešením. Tato minimalizace jednoznačně určuje formu aposteriorní distribuce a je definována takto:

$$\tilde{f}(x|y) = t\mathcal{N}(\mu_x, \Sigma_x) \tag{3.12}$$

$$\tilde{f}(v_i|y) = \mathcal{G}(\alpha_i, \beta_i), \quad \forall i \in n \tag{3.13}$$

$$\tilde{f}(l_j|y) = \mathcal{N}(\mu_{l_j}, \Sigma_{l_j}), \quad \forall j \in n - 1 \tag{3.14}$$

$$\tilde{f}(\sigma_j|y) = \mathcal{G}(\zeta_j, \eta_j), \quad \forall j \in n - 1 \tag{3.15}$$

$$\tilde{f}(\omega|y) = \mathcal{G}(\vartheta, \rho) \tag{3.16}$$

kde tyto tvarovací parametry $\mu_x, \Sigma_x, \alpha_i, \beta_i, \mu_{l_j}, \Sigma_{l_j}, \zeta_j, \eta_j, \vartheta$ a ρ , které si odvodíme dále, jsou funkce standartních momentů aposteriorního rozdělení. Tyto momenty, které označujeme \hat{x} , vyjadřují očekávanou hodnotu vzhledem k jejímu rozdělení.

Tyto momenty spolu s tvarovacími parametry tvoří množinu implicitních rovnic, které jsou iterativně řešeny pomocí algoritmu, který se nazývá *LS-APC*.

Nyní se podíváme na odvození tvarovacích parametrů. Jak plyne z KL-divergence a Bayesovy věty, porovnáme i -tý parametr aproximovaného aposteriorního rozdělení 3.11 s rozdělením, které minimalizuje KL-divergenci.

Kvůli problému s formátováním budu v následujících podsekcích značit odhadované momenty buď \hat{x} , nebo $E[x]$.

Parametry μ_x a Σ_x

Mějme tedy aposteriorní rozdělení, nyní už náhodné veličiny x . Ostatní parametry jsou v tomto případě brány jako konstanty proto za použití vztahu 2.18 dostáváme:

$$\tilde{f}(x|y) \propto \exp \left[-\frac{1}{2} \widehat{\omega} (y - Mx)^T (y - Mx) - \frac{1}{2} x^T (\widehat{LVL}^T) x \right] \propto \exp \left[-\frac{1}{2} (x - \mu_x)^T \Sigma^{-1} (x - \mu_x)^T \right] \quad (3.17)$$

Protože pracujeme s exponenciální třídou rozdělení, jednoduše porovnáme lineární a kvadratický argument exponenciální funkce a vyjdou nám tvarovací parametry ve tvaru:

$$\Sigma_x = (\widehat{\omega} M^T M + \widehat{LVL}^T)^{-1} \quad (3.18)$$

$$\mu_x = \widehat{\omega} \Sigma_x M^T y \quad (3.19)$$

První a druhý moment \widehat{x} a \widehat{xx}^T si zavedeme v sekci 3.2.

Parametry ρ a ϑ

Mějme aposteriorní rozdělení argumentu ω , ostatní parametry jsou brány jako konstanty.

$$\tilde{f}(\omega|y) \propto \exp \left[-\frac{1}{2} \omega E \left[(y - Mx)^T (y - Mx) \right] - \rho_0 \omega + \left(\frac{p}{2} + \vartheta_0 - 1 \right) \ln \omega \right] \propto \omega^{\vartheta-1} \exp(-\rho_0 \omega) \quad (3.20)$$

Protože máme konjugované apriorní rozdělení, stačí porovnat argumenty exponenciální funkce a parametrů bez exponenciální funkce a dostaneme tvar tvarovacích parametrů.

$$\rho = \frac{1}{2} y^T y - y^T M \widehat{x} + \frac{1}{2} E \left[x^T M^T M x \right] + \rho_0 \quad (3.21)$$

$$\vartheta = \frac{p}{2} + \vartheta_0 \quad (3.22)$$

První moment gamma rozdělení:

$$\widehat{\omega} = \frac{\vartheta}{\rho} \quad (3.23)$$

Parametry α a β

Stejně jako v předchozím paragrafu dostáváme:

$$\tilde{f}(v_i|y) \propto \exp \left[-\frac{1}{2} E \left[x^T LVL^T x \right]_i - \beta v_i + \frac{1}{2} \ln v_i + (\alpha_0 - 1) \ln v_i \right] \propto v_i^{\alpha_i-1} \exp(-v_i \beta_i) \quad \forall i \in n \quad (3.24)$$

kde tvarovací parametry vypadají:

$$\alpha_i = \alpha_0 + \frac{1}{2} \quad \forall i \in n \quad (3.25)$$

$$\forall i \in n - 1 : \beta_i = \frac{1}{2} \left(\widehat{x}_i^2 + 2E \left[x_i x_{i+1} | l_i \right] + E \left[x_{i+1}^2 | l_i \right] \right) \quad (3.26)$$

$$i = n : \beta_n = \frac{1}{2} x_n^2 + \beta_0 \quad (3.27)$$

První moment je:

$$\widehat{v}_i = \frac{\alpha_i}{\beta_i} \quad (3.28)$$

Parametry μ_{l_j} a Σ_{l_j}

Mějme soustavu $n - 1$ rovnic:

$$\tilde{f}(l_j|y) \propto \exp\left[-\frac{1}{2}E\left[x^T LVL^T x\right]_j - \frac{1}{2}(l_j - l_{0j})^2 \widehat{\sigma}_j\right] \propto \exp\left[-\frac{1}{2}(l_j - \mu_{l_j})^2 \Sigma_{l_j}^{-1}\right] \quad \forall j \in n - 1 \quad (3.29)$$

kde tvarovací parametry vypadají $\forall j \in n - 1$:

$$\Sigma_{l_j} = (x_{j+1}^2 v_j + \widehat{\sigma}_j)^{-1} \quad (3.30)$$

$$\mu_{l_j} = \Sigma_{l_j} (l_{0j} \widehat{\sigma}_j - E[x_j x_{j+1} v_j]) \quad (3.31)$$

První a druhý moment zkoumaného parametru $\forall j \in n - 1$:

$$\widehat{l}_j = \mu_{l_j} \quad (3.32)$$

$$\widehat{l}_j^2 = \Sigma_{l_j} + \mu_{l_j}^2 \quad (3.33)$$

Parametry ζ a η

Mějme soustavu $n - 1$ rovnic:

$$\tilde{f}(\sigma_j|y) = \sigma_j^{\zeta_0 - \frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(l_j - \widehat{l}_{0j})^2 \sigma_j - \eta_0 \sigma_j\right] \propto \sigma_j^{\zeta_j - 1} \exp(-\eta_j \sigma_j) \quad (3.34)$$

Tvarovací parametry vypadají $\forall j \in n - 1$:

$$\zeta_j = \zeta_0 + \frac{1}{2} \quad (3.35)$$

$$\eta_j = \frac{1}{2} \widehat{l}_j^2 - \widehat{l}_j l_{0j} + \frac{1}{2} l_{0j} + \eta_0 \quad (3.36)$$

První moment je:

$$\widehat{\sigma}_j = \frac{\zeta_j}{\eta_j} \quad \forall j \in n - 1 \quad (3.37)$$

3.2 LS-APC s fyzikálním omezením

Nyní si zavedeme tzv. Truncated normal distribution (Ořezané normální rozdělení), které cituji z [2]. Toto rozdělení bude zaručovat lepší odhad zdrojového členu x . Budeme konstruovat normální rozdělení, jehož definiční obor je omezená množina, budeme značit $[a, b]$, kde $a, b \in \mathbb{R}^+$. Což tedy znamená změnu definice náhodné veličiny x v rovnici 3.4. Přejdeme tedy z rovnice

$$f_x(x|V, L) = t\mathcal{N}_n(0, (LVL^T)^{-1}, [0, +\infty)) \quad (3.38)$$

na rovnici

$$f_x(x|V, L) = t\mathcal{N}_n(0, (LVL^T)^{-1}, [a, b]) \quad (3.39)$$

Na rovnici parametru x a algoritmu LS-APC se prakticky nic nezmění, protože rovnice 3.4 a 3.40 se liší pouze v konstantě, tzn. proporcionálně se rovnají.

3.2.1 Ořezané normální rozdělení

Pojďme si tedy konkrétně zadefinovat naši omezenou hustotu pravděpodobnosti veličiny x , kterou jsme předefinovali rovnicí 3.39. Definice zkrácené normální distribuce je:

$$f(x|\mu, s, a, b) = \frac{\sqrt{2} \exp\left[-\frac{1}{2r}(x - \mu)^2\right]}{\sqrt{\pi r}(\operatorname{erf}(\beta) - \operatorname{erf}(\alpha))} \chi_{(a,b)}(x), \quad (3.40)$$

kde $\alpha = \frac{a-\mu}{2r}$, $\beta = \frac{b-\mu}{2r}$. Momenty této hustoty jsou:

$$\widehat{x} = \mu - \sqrt{r}\varphi(\mu, r) \quad (3.41)$$

$$\widehat{x^2} = r + \mu\widehat{x} - \sqrt{r}\kappa(\mu, r) \quad (3.42)$$

kde pomocné funkce jsou definovány:

$$\varphi(\mu, r) = \frac{\sqrt{2}[\exp(-\beta^2) - \exp(-\alpha^2)]}{\sqrt{\pi}[\operatorname{erf}(\beta) - \operatorname{erf}(\alpha)]} \quad (3.43)$$

$$\kappa(\mu, r) = \frac{\sqrt{2}[b \exp(-\beta^2) - a \exp(-\alpha^2)]}{\sqrt{\pi}[\operatorname{erf}(\beta) - \operatorname{erf}(\alpha)]}, \quad (3.44)$$

kde erf je chybová funkce a je definována: $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-t^2) dt$. Parametry a, b stanovují interval, mezi kterým se pohybuje proměnná x . V praxi to znamená, že omezíme únik zdroje na minimální a maximální možnou hodnotu, kterou to může v daný časový interval nabývat.

Tato funkce počítá celý první moment \widehat{x} , ale u druhého momentu spočítá pouze diagonální prvky matice $\widehat{xx^T}$ a nediagonální prvky se odhadují pomocí \widehat{x} tak, že

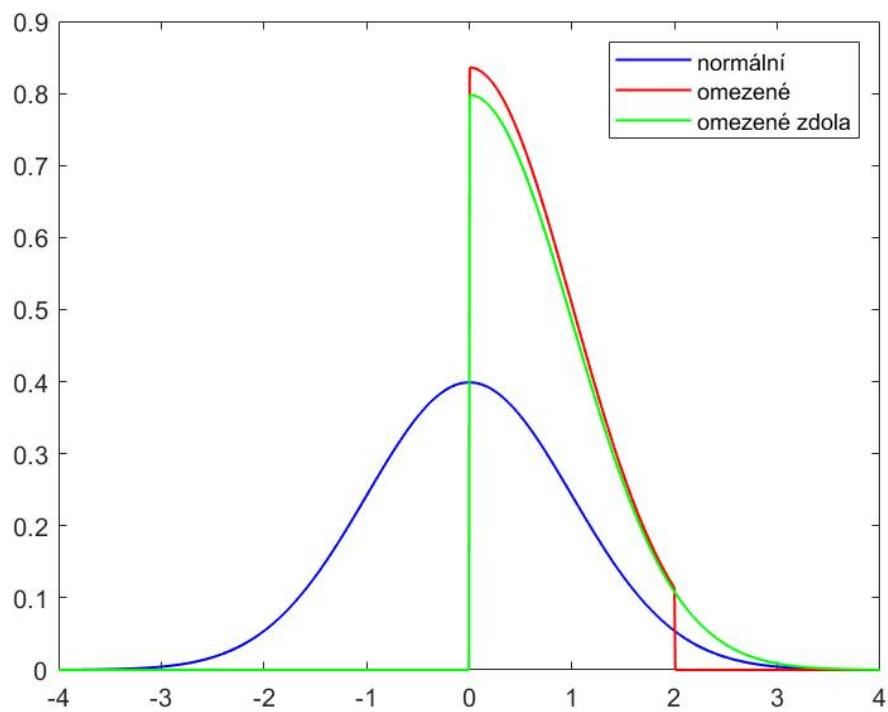
$$\widehat{xx^T}(i, j) = \widehat{x}(i)\widehat{x}(j) \quad \forall i, j \in n, i \neq j \quad (3.45)$$

Toto může být však příliš hrubá aproximace protože ignoruje kovarianci prvků. Alternativou je aproximace:

$$\widehat{xx^T} = \widehat{xx^T} + \operatorname{diag}(\mathbf{o})\Sigma_x \operatorname{diag}(\mathbf{o}) \quad (3.46)$$

kde \mathbf{o} je vektor prvků $o_i = \sqrt{\widehat{\sigma}_i \sigma_i}$. Toto zavedení je motivováno pozorováním, že pro normální rozdělení kde $o_i \rightarrow 1$ vektor x přestává mít hladký průběh a odpovídá momentu nezkrácené normální distribuce. Ověření a porovnání použití této vylepšené aproximace podrobně rozeberu v další kapitole.

Na obrázku 3.1 můžeme vidět porovnání mezi klasickou normálou a naším ořezaným normálním rozdělením. Ořezané normální rozdělení splňuje všechny axiomy hustoty pravděpodobnosti, tudíž je to klasické rozdělení.



Obrázek 3.1: Graf ilustrující normální rozdělení, ořezané normální rozdělení s definičním oborem $[0, 2]$ a ořezané normální rozdělení s definičním oborem \mathbb{R}^+ se střední hodnotou 0 a rozptylem 1.

Kapitola 4

Experimenty

4.1 Syntetický experiment

Pojďme si náš algoritmus LS-APC implementovat na uměle nagenovaná data. Celý tento algoritmus píše v programovacím prostředí MATLAB. Abychom mohli tento program vyzkoušet na syntetických datech, potřebujeme vědět skutečný časový vývoj úniku ze zdroje, numerický atmosferický model SRS a celkovou chybu měření a modelu SRS. Dále potřebujeme znát počáteční parametry ve všech rozdělení, které jsme definovali v kapitole 3.1.1. Pojďme si tyto základní veličiny a parametry nadefinovat. Vektor úniku $x \in \mathbb{R}^n$:

$$\mathbf{x} = (0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 0)' \quad (4.1)$$

Numerický atmosferický model v podobě matice $M \in \mathbb{R}^{p,n}$, která je upravená do podoby:

$$M = rand(p, n) \quad (4.2)$$

$$M(M < 0.5) = 0 \quad (4.3)$$

$$M(:, 3 : 5) = 0.1 \cdot M(:, 3 : 5) \quad (4.4)$$

$$M(5 : 10, :) = 3500 \cdot M(5 : 10, :) \quad (4.5)$$

$$(4.6)$$

tak, aby matice M byla špatně podmíněná. Počet měřících statických senzorů volím 20. Celková chyba je zvolena $\mathbf{e} = 0.8 \cdot randn(p)$. Vektor měření $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$ je nastaven tak, aby odpovídal základní rovnici ???. Počáteční parametry jsou nastaveny v následující tabulce 4.1. Na následujícím obrázku 4.1 je ilustrován

ρ_0	ϑ_0	α_0	β_0	ζ_0	η_0
1e-10	1e-10	1e-10	1e-10	1e-2	1e-2

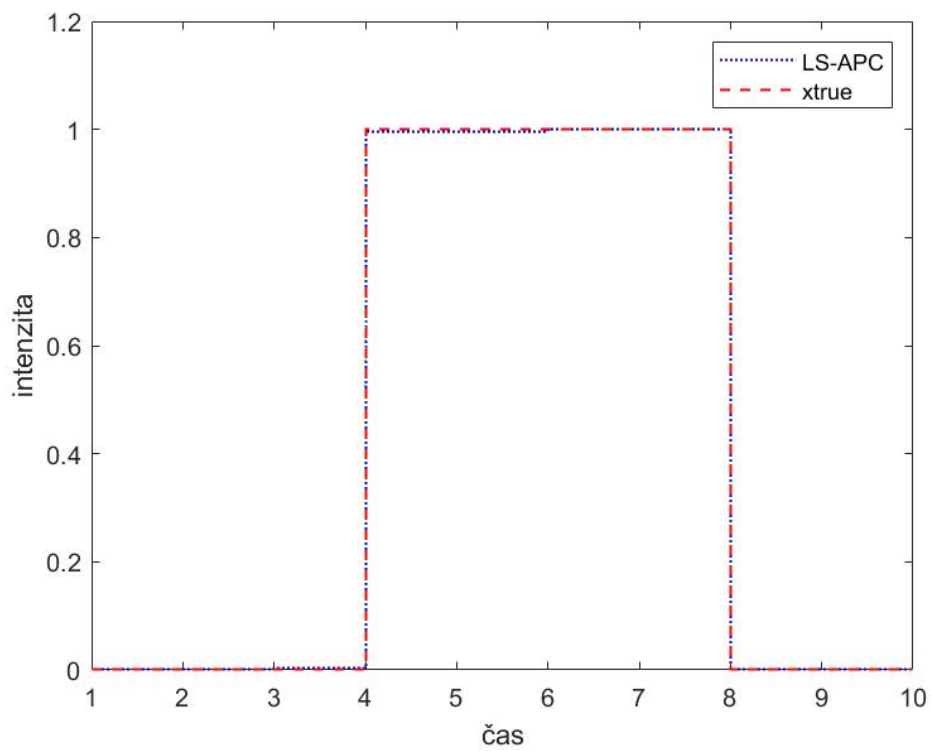
Tabulka 4.1: Tabulka s definovanými parametry distribučních funkcí

skutečný únik 4.1 a vypočítaný únik pomocí kompletního algoritmu LS-APC, který má 100 iterací.

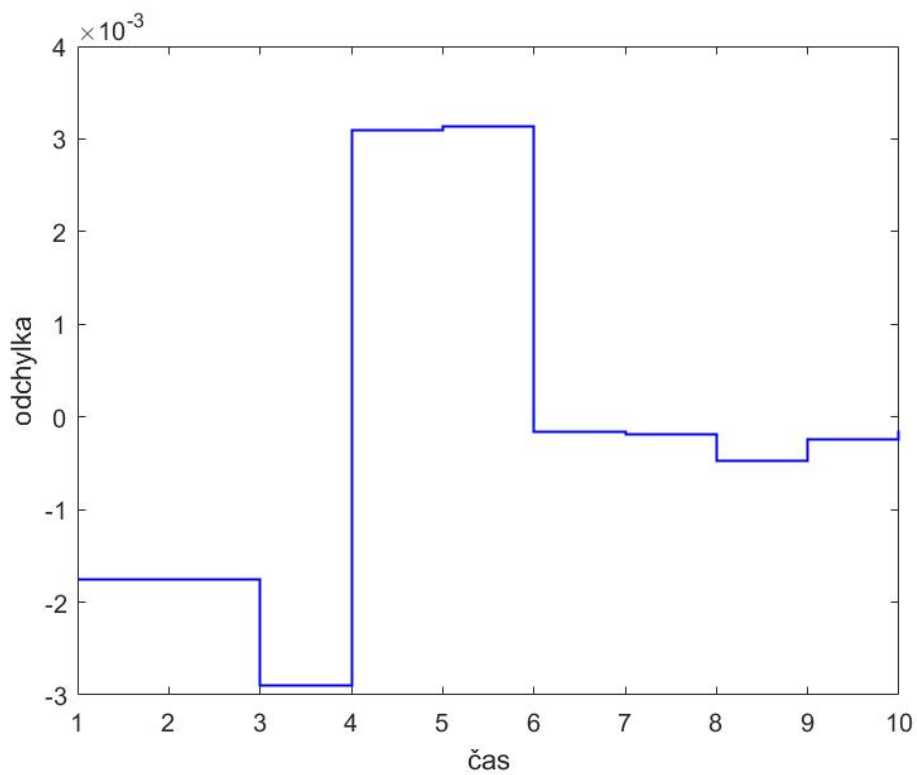
Na první pohled je vidět, že opravdový únik s odhadnutým jsou totožné. Obrázek 4.1 zobrazuje rozdíl mezi x_{true} a x (LS-APC).

Je vidět, že relativní odchylka se pohybuje v řádu desetin procenta (10^{-3}), což není špatné na algoritmus, který má velmi špatně podmíněná vstupní data. Pojďme se podívat na parametry V , L a σ , jaký mají časový průběh a jakou mají konvergenci.

Z obrázků 4.2 je vidět, že parametry V , L a σ rychle konvergují ke své limitní hodnotě, kromě parametru ω , ten jsem nechal iterovat 200× aby dokonvergoval na hodnotu kolem 1, 1. Počáteční hodnoty těchto parametrů byly nastaveny: $\omega = 0, 1$ a pro $diag(V)$, \mathbf{I} a σ jako jednotkové vektory.

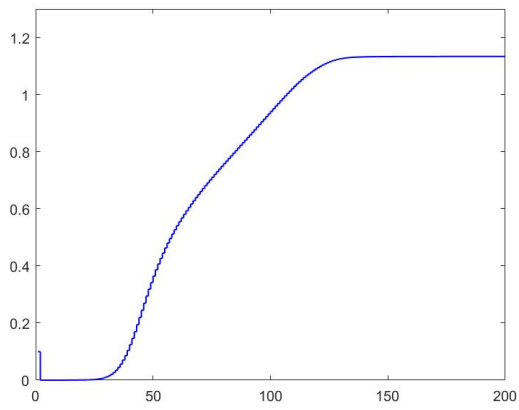


(a) Graf skutečného a odhadnutého úniku závislého na čase

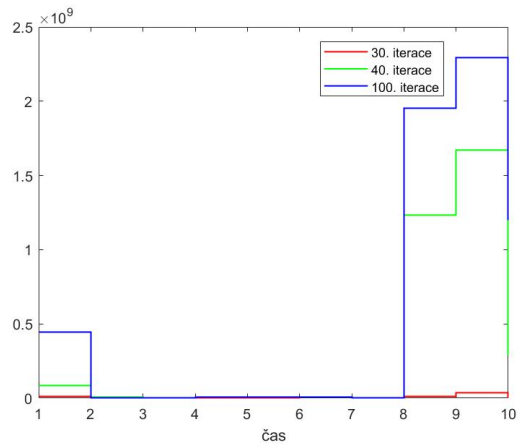


(b) Graf odchylky x od x_{true}

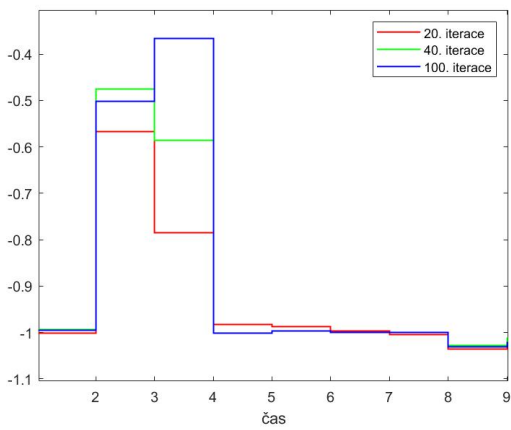
Obrázek 4.1: Model LS-APC aplikován na syntetických datech



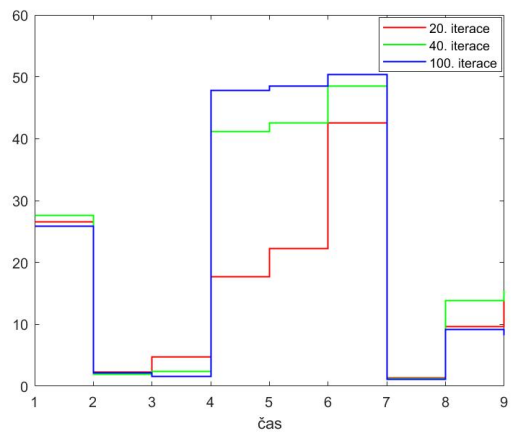
(a) Graf průběhu ω na iteraci



(b) Graf průběhu V na čase



(c) Graf průběhu L na čase



(d) Graf průběhu σ na čase

Obrázek 4.2: Grafy průběhu a konvergence jednotlivých parametrů

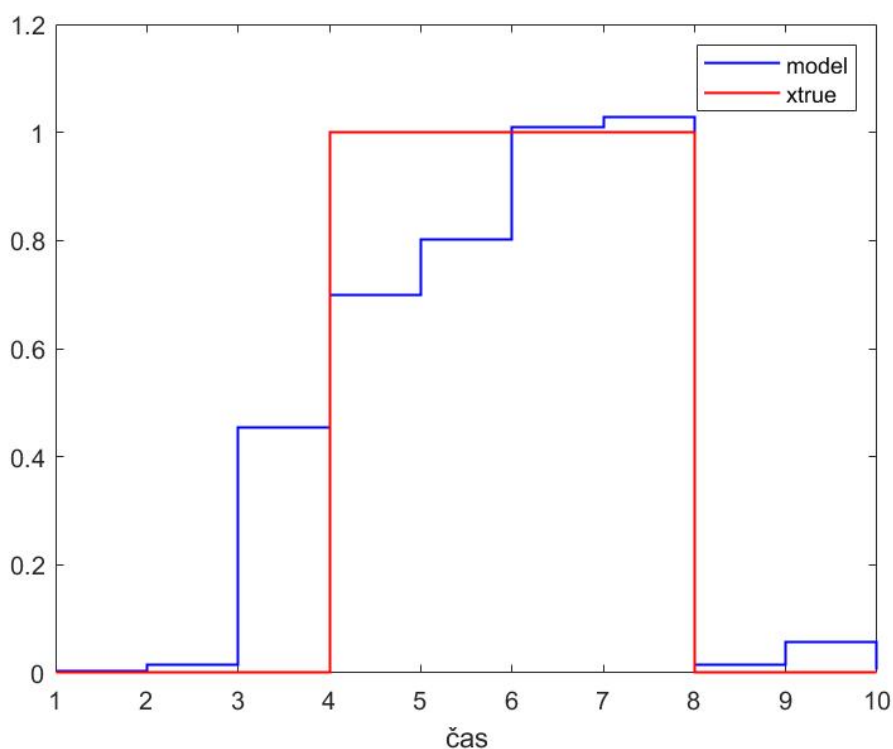
Abychom si lépe uvědomili přesnost a robustnost tohoto modelu a uvědomili si, na čem tento program hlavně stojí, pojd' me si přestavit jednotlivé důležité části, které mohou za to, že je tak kvalitní.

4.1.1 Řídký model

Zde si ukážeme, jak by vypadal namodelovaný zdroj úniku, kdybychom použili tzv. řídký model. Řídký model definuje distribuční funkci pro zdroj:

$$f(x|V) = t\mathcal{N}(0, V^{-1}, [0, +\infty)) \quad (4.7)$$

kde V je matice definovaná v kapitole 3.1.1 A zbytek parametrů je definován stejně, to znamená, že platí rovnice v kapitole 3.1.1. To znamená, že oproti definici v kapitole 3.1.1, je rozptyl náhodé veličiny x definován pouze maticí V a nikoliv už L , tím pádem nepočítáme s korelací křížových členů, neboli korelace mezi sousedními hodnotami vektoru x tj.: $xx_{i,i+1}^T$ a $xx_{i+1,i}^T$ je nulová. Odhadnutý zdroj nebude tak hladký, jak bychom si představovali. Na obrázku 4.3 vidíme odhadnutý únik ze zdroje a skutečný únik. Model má nastavené počáteční podmínky podle 4.1, 4.2 a tabulky 4.1.



Obrázek 4.3: Graf porovnávající řídký model se skutečným únikem

4.1.2 Fyzikální omezení

Zde porovnáme model, který má omezenou množinu hodnot úniku látky ze zdroje:

$$f(x|V, L) = \mathcal{N}(0, (LVL^T)^{-1}, [a, b]) \quad (4.8)$$

s tím, který tento předpoklad nemá, respektive se pohybuje na intervalu \mathbb{R}^+ . Definice distribuce zdroje bez omezení je:

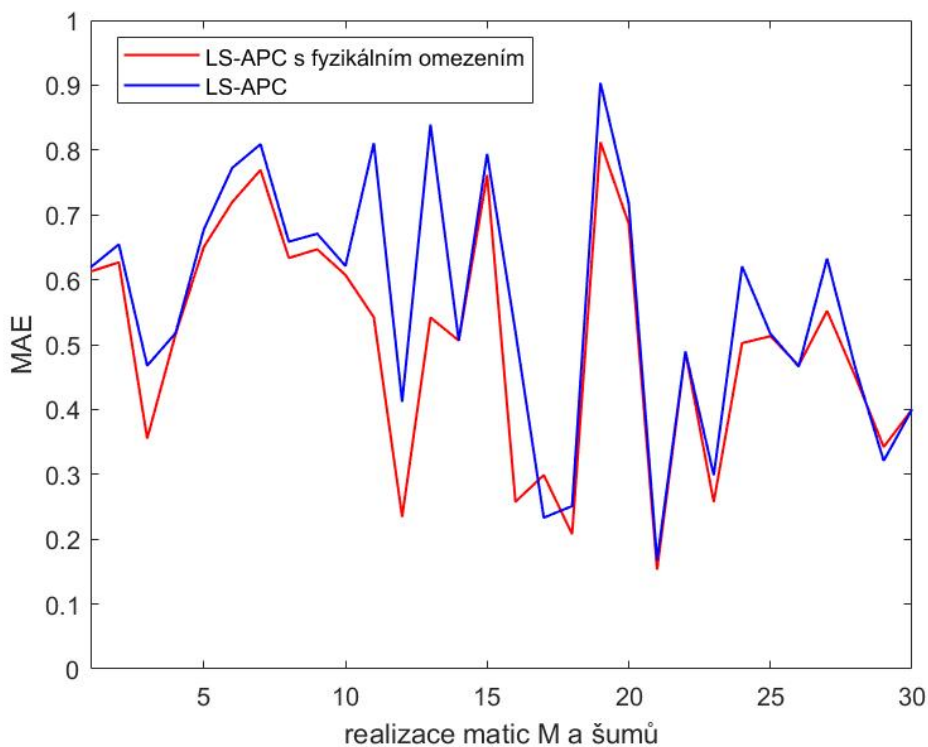
$$f(x|V, L) = \mathcal{N}(0, (LVL^T)^{-1}, [0, \infty)) \quad (4.9)$$

kde matice V a L jsou zadefinovány v kapitole 3.1.1. Předpokládáme zde únik, který jsme si definovali vztahem 4.1 s dobře podmíněnou maticí $M = \text{rand}(p, n)$. Počáteční parametry jsou použity z tabulky 4.1.

Porovnání jsem udělal tak, že jsem 30× nageneroval matici M a pro každou jsem namodeloval \mathbf{x} , jak pro omezený, tak i neomezený algoritmus a porovnával jsem \mathbf{x} s \mathbf{x}_{true} pomocí tzv. mean absolute error (MAE), který je definován jako:

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |x_{\text{true}_i} - x_i|. \quad (4.10)$$

Na grafu 4.4 vidíme odchylky \mathbf{x} od \mathbf{x}_{true} pro 30 různých matic M . Statisticky můžeme říci, že pro omezený model s množinou pro $x \in [0, 2]$ je rozdíl od skutečného úniku menší.



Obrázek 4.4: Graf odchylek pro omezený a neomezený model

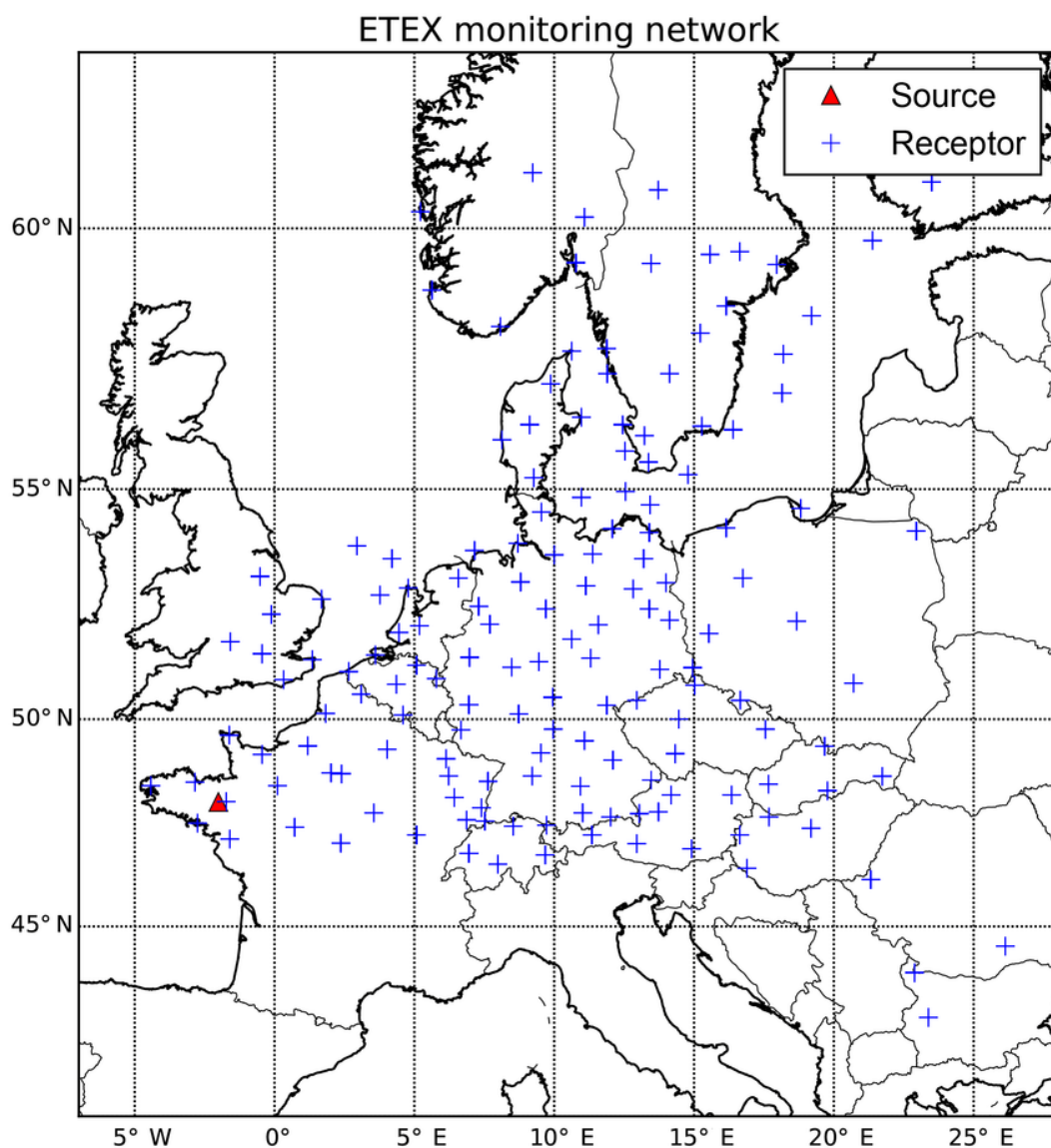
4.2 Experiment ETEX

Evropský sledovací experiment (ETEX) [11] se konal v Bretani ve Francii v roce 1994. Během ETEXu byly provedeny dva experimenty. My se zde zaměříme pouze na data z prvního experimentu (ETEX-I), pro které modely atmosférické disperze obecně fungovaly mnohem lépe než u druhého experimentu. Během ETEX-I bylo vypouštěno celkem 340 kg perfluormethylcyklohexanu (PMCH) konstantní rychlostí po dobu téměř 12 hodin. PMCH je téměř inertní v atmosféře a nedochází k depozici za

sucha ani k depozici za mokra a je proto vhodný pro testování modelů, které byly popsány v kapitole 1.1, zvládnou atmosférickou disperzi. Koncentrace uvolňovaného PMCH byla monitorovány po celé Evropě pomocí sítě 168 měřicích stanic s intervalem vzorkování 3 h po dobu 72 h. Místa úniku zdroje a umístění stanic jsou znázorněny na obrázku 4.5.

Pro konstrukci matice SRS M jsme použili Lagrangeův model (kapitola 1.4) disperze částic FLEX-PART 8.1. Předpokládalo se, že místo úniku bylo známé, a že k úniku PMCH došlo během 5-denního období, ale zdrojový člen x není znám.

Za 5 dní se provedlo 120 výpočtů (za každou hodinu). Každou hodinu se také simulovaly koncentrace na všech měřicích stanicích. Reálně bylo celkem provedeno 3102 měření. Matice SRS M , která má rozměry 3102×120 , byla spolu s vektorem $y \in \mathbb{R}^{3102}$, k rekonstrukci zdrojového členu $x \in \mathbb{R}^{120}$. Rekonstruovaný zdrojový člen lze poté porovnat se známým skutečným zdrojovým členem, aby se následně vyhodnotil model, který zrekonstruoval x .



Obrázek 4.5: Mapa zdroje úniku (červený trojúhelník) a síť měřicích stanic (modré křížky), převzato z [11]

4.2.1 Implementace LS-APC

Pojďme se nyní podívat na to nejdůležitější v mé práci a k čemu toto celé směřovalo, a sice k tomu, že aplikujeme náš algoritmus LS-APC na reálná data modelu M a měření y experimentu ETEX, a porovnáme ho se skutečným únikem látky PMCH. Po správném naškálování dat $y = y./\max(y)$ a $M = M./\max(y)$ vypadá časový odhad úniku PMCH do atmosféry takto viz. obrázky 4.6. Na těchto grafech vidíme rozdíl odhadu s omezením a omezením zdola. V modelu s omezením jsme odhadli definiční obor úniku $[0, 50]$ kg/h.

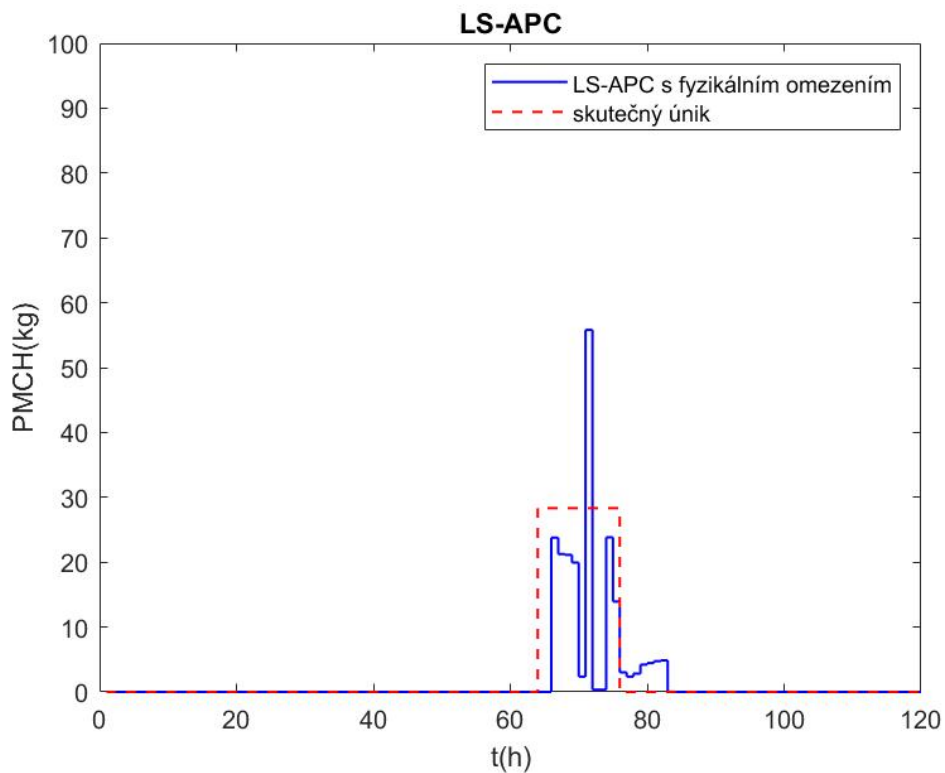
Kvalitu modelu s omezením a omezením zdola můžeme také porovnat pomocí MAE. $MAE_{[0,50]} = 1,9$ a $MAE_{(0,\infty)} = 2,25$.

Na obrázcích 4.7 vidíme odhadovaný parametr řídkosti ∇ a parametr hladkosti \mathbb{L} .

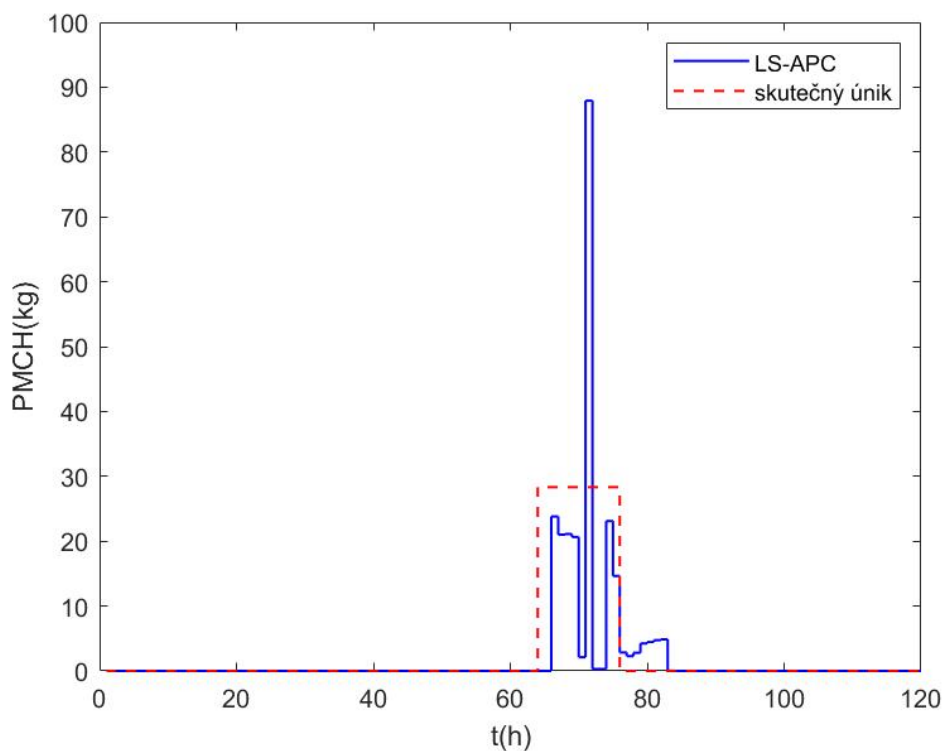
4.2.2 Aproximace křížových prvků \mathbf{xx}^T

Na závěr se podíváme na to, jak vyjde odhad úniku látky ze zdroje při příliš hrubé aproximaci nediagonálních prvků druhého momentu odhadovaného parametru x . Při použití aproximace 3.45 vyjde odhad zdrojového členu velmi špatně 4.8.

Tento špatný odhad, který odhaduje, že látka uniká hned od začátku, je způsobený výslednou maticí atmosferického modelu M , která je špatně podmíněná. Koncentrace v těchto časech je na všech místech měřících laboratoří blízká nule viz. obrázek 4.9.

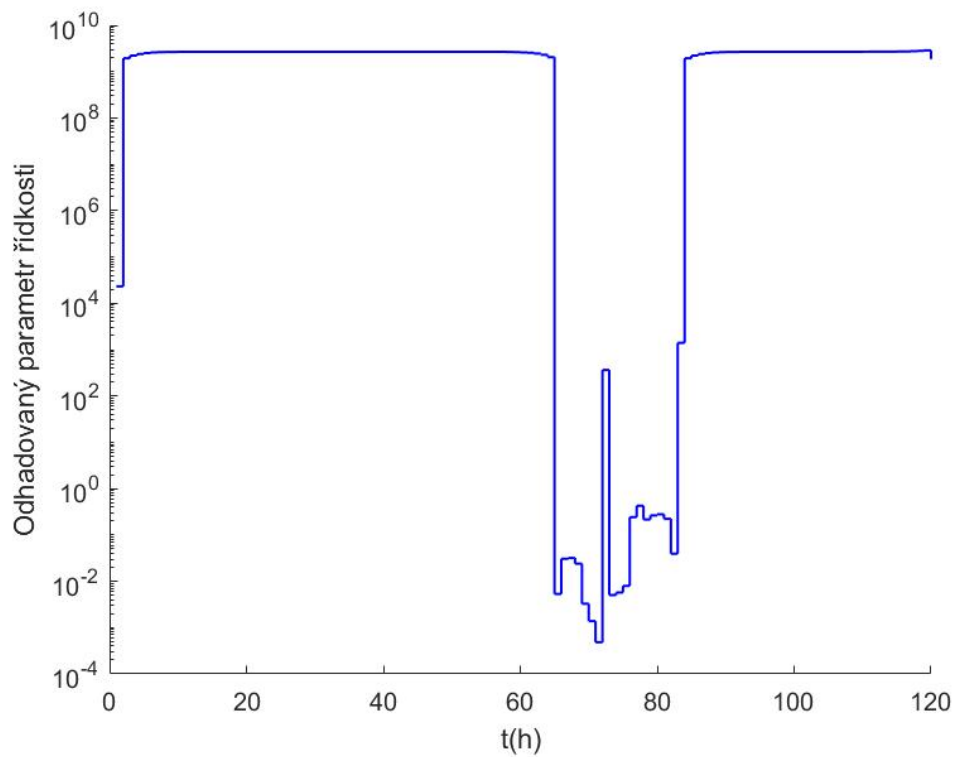


(a) Výsledek algoritmu LS-APC s fyzikálním omezením pro experiment ETEX

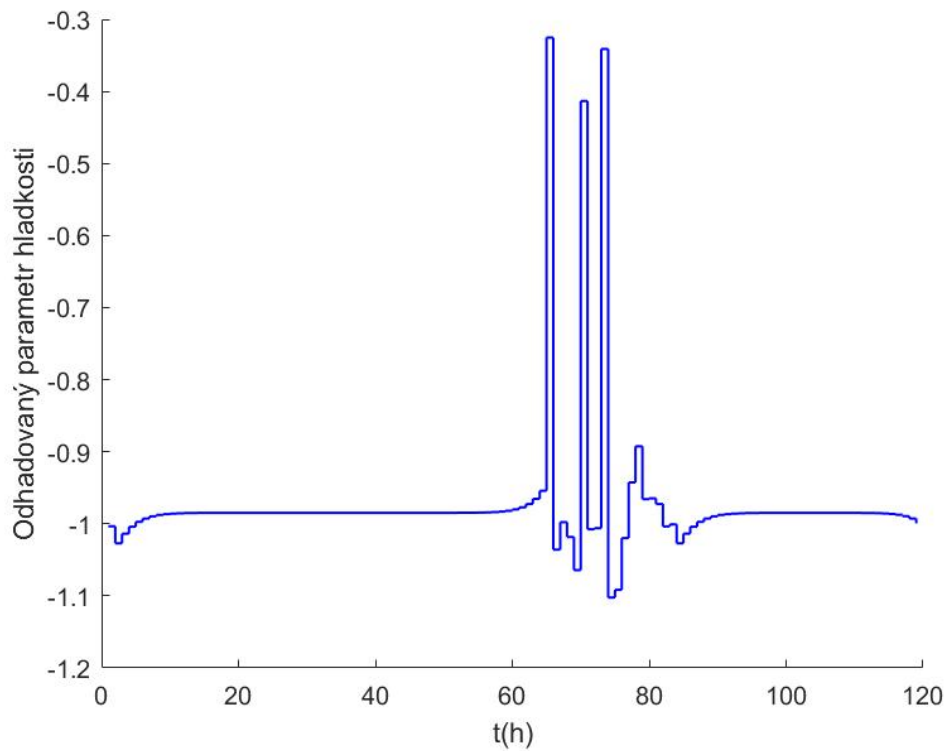


(b) Výsledek algoritmu LS-APC pro experiment ETEX

Obrázek 4.6: Porovnání odhadnutých úniků ze zdroje experimentu ETEX se skutečným únikem

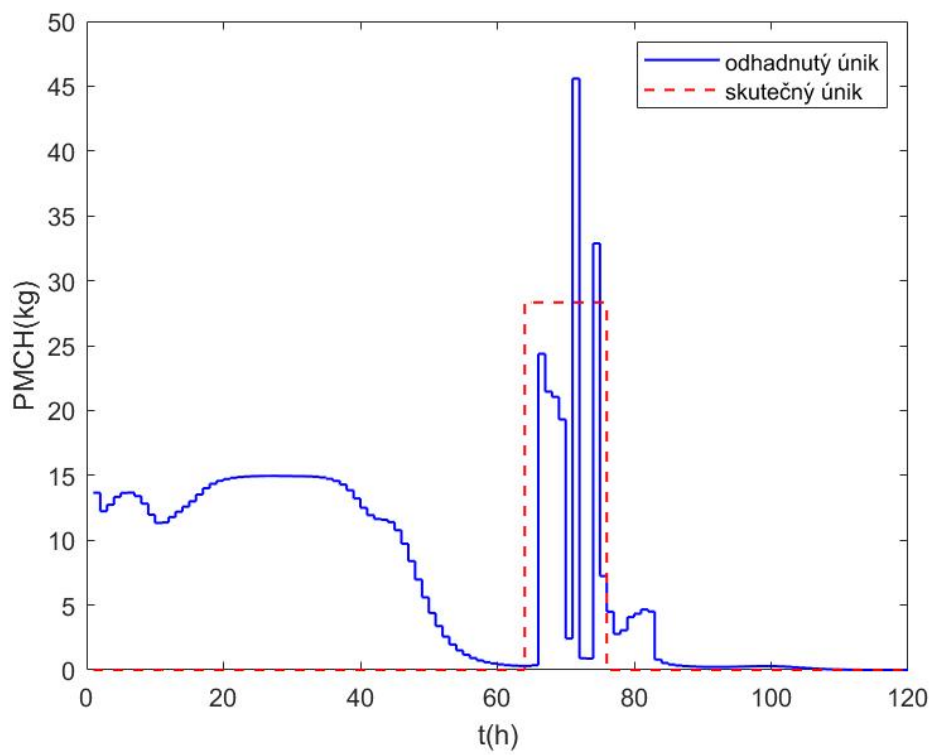


(a) Odhadovaný parametr řidkosti ∇

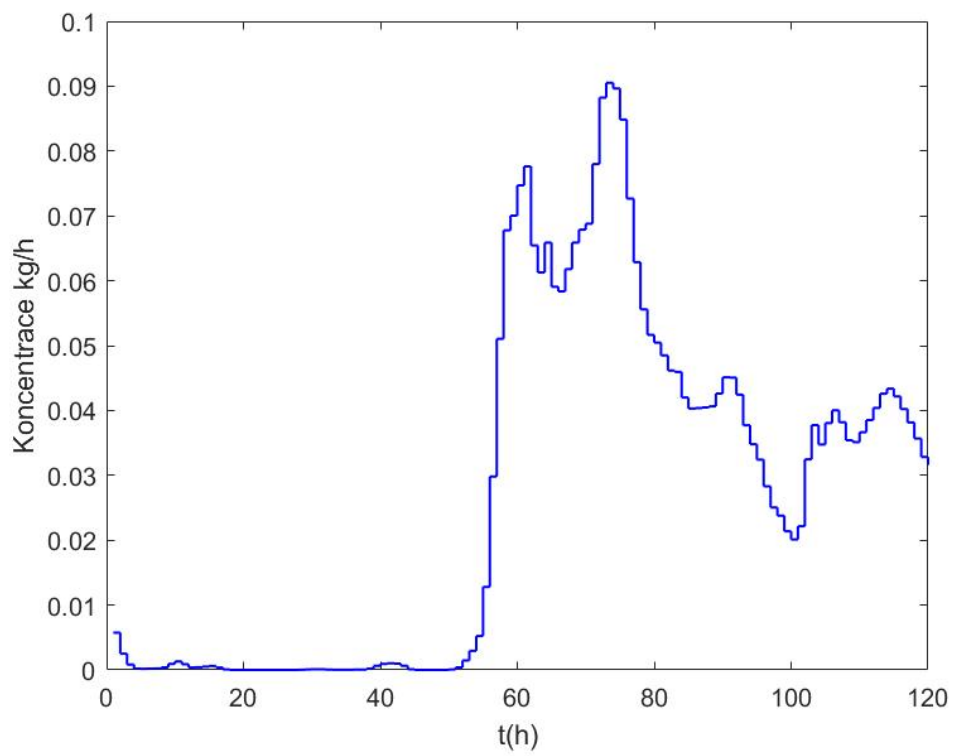


(b) Odhadovaný parametr hladkosti \mathbb{L}

Obrázek 4.7: Odhadované parametry algoritmu LS-APC



Obrázek 4.8: Odhad zdrojového členu s použitím hrubé aproximace



Obrázek 4.9: Tento graf zobrazuje součet sloupců matice M , tzn. součet koncentrace látky na všech senzorech dohromady v čase t

Závěr

V mé bakalářské práci bylo hlavním motivem nalézt průběh zdrojového členu, neboli únik látky z nějakého místa závislý na čase. Cílem bylo nastudovat model, jehož řešení je nalezeno Bayesovskou metodou. Celou práci jsem rozdělil do 3 částí. V první kapitole mé práce jsem se seznámil s atmosferickým modelováním, modelováním atmosferické disperze a s matematickými modely, které se nejčastěji používají, jako například Gaussův nebo Lagrangeův model. Na základě jejich vlastností jsem porovnával pro jakou situaci se jaký model používá.

V druhé části (kapitola 2 a 3) jsem se seznámil s inverzním modelem a s metodami, které ho řeší. Zaměřil jsem se na variační Bayesovskou metodu a spočítal jsem vhodný pravděpodobnostní model.

V poslední části jsem svůj model nejprve aplikoval na syntetická data, abych potvrdil, nebo vyvrátil jeho správnost. Tam se ukázalo, že na relativně klidných datech můj algoritmus odhaduje skutečný únik velmi přesně. Diskutoval jsem jednotlivé hlavní prvky algoritmu LS-APC, které jsou pro výpočet průběhu úniku látky ze zdroje klíčové, jako jsou řídkost, hladkost nebo fyzikální omezení. A na závěr jsem tento svůj model otestoval na reálných datech experimentu ETEX, jehož úkolem bylo nalézt nejbližší tvar funkce úniku závislé čase ke skutečnému úniku látky PMCH.

Porovnal jsem také skutečný LS-APC model s mým upraveným modelem LS-APC s fyzikálním omezením, který má omezenou množinu hodnot úniku za jednotku času. Pomocí veličiny MAE vyšlo, že můj upravený model přesněji odhaduje skutečný únik než klasický model, za předpokladu znalosti maximálního množství uniklé látky za jednotku času.

Literatura

- [1] YASUNARI, Tepei J and STOHL, Andreas and HAYANO, Ryugo S and BURKHART, John F and ECKHARDT, Sabine and YASUNARI, Tetsuzo. *Cesium-137 deposition and contamination of Japanese soils due to the Fukushima nuclear accident*. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2011, 108.49: 19530-19534.
- [2] ŠMÍDL, Václav and QUINN, Anthony. *The variational Bayes method in signal processing*. Springer Science & Business Media, 2006.
- [3] GOLUBNICHIIY, Artem a NEDELINA, Darya. *Review and analysis of the modelling of the atmospheric air pollution for urban air basins*. Bulletin of Eurasian Science, 2015, 7.5: 120-120.
- [4] STOHL, A. and FORSTER, C. and FRANK, A. and SEIBERT, P. and WOTAWA, G. *Technical note: The Lagrangian particle dispersion model FLEXPART version 6.2*. Atmos. Chem. Phys., 5, 2461–2474, doi:10.5194/acp-5-2461-2005, 2005.
- [5] THOMSON, DJ. *Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows*. Journal of fluid mechanics, 1987, 180: 529-556.
- [6] ZANNETTI, Paolo. *Eulerian Dispersion Models*. In: Air Pollution Modeling. Springer, Boston, MA, 1990. p. 107-139.
- [7] TICHÝ, Ondřej a ŠMÍDL, Václav a ŠINDELÁŘOVÁ, Kateřina a STOHL, Andreas. *Bayesian inverse modeling and source location of an unintended 131 I release in Europe in the fall of 2011*. Atmospheric Chemistry and Physics, 2017, 17.20: 12677-12696.
- [8] POLLAK, Adam J and HAGHIGHI, Kobra and KUNDURI, Swati and ARVANITIS, Demetrios A and BIDWELL, Philip A and LIU, Guan-Sheng and SINGH, Vivek P and GONZALEZ, David J and SANODOU, Despina and WILEY, Sandra E and others. *Phosphorylation of serine96 of histidine-rich calcium-binding protein by the Fam20C kinase functions to prevent cardiac arrhythmia*. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2017, 114.34: 9098-9103.
- [9] SEIBERT, Petra and KRISTIANSEN, Nina I and RICHTER, Andreas and ECKHARDT, Sabine and PRATA, Alfred J and STOHL, Andreas. *Uncertainties in the inverse modelling of sulphur dioxide eruption profiles*. Geomatics, Natural Hazards and Risk, 2011, 2.3: 201-216.
- [10] NĚMEC, Daniel. *Bayesiánská analýza*. 2011. Masarykova Univerzita, Ekonomicko-správní fakulta. 14–15.
- [11] TICHÝ, Ondřej a ŠMÍDL, Václav a HOFMAN, Radek a STOHL, Andreas. *LS-APC v1.0: a tuning-free method for the linear inverse problem and its application to source-term determination*. Geosci. Model Dev., 9, 4297–4311, 2016.

- [12] KOVÁŘ, Jan a VAN DER MEER, Niels. *Zápisky z míry a pravděpodobnosti*. Praha, 2020. Vysokoškolská skripta. Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT v Praze.
- [13] TICHÝ, Ondřej a ULRYCH, Lukáš a ŠMÍDL, Václav a EVANGELIOU, Nikolaos a STOHL, Andreas. *On the tuning of atmospheric inverse methods: comparisons with the European Tracer Experiment (ETEX) and Chernobyl datasets using the atmospheric transport model FLEXPART*. *Geoscientific Model Development*, 13, 5917–5934, <https://doi.org/10.5194/gmd-13-5917-2020>, 2020.
- [14] ECKHARDT J and PRATA AJ and SEIBERT P and STEBEL K and STOHL A. *Estimation of the vertical profile of sulfur dioxide injection into the atmosphere by a volcanic eruption using satellite column measurements and inverse transport modeling* *Atmos. Chem. Phys.*, 8, 3881–3897, <https://doi.org/10.5194/acp-8-3881-2008>, 2008.
- [15] BEYCHOK, MILTON R. *Fundamentals of stack gas dispersion*. Los Angeles, 2005. American Institute of Chemical Engineers. ISBN 0-9644588-0-2
- [16] HOLMES, Nicholas S. and MORAWSKA, Lidia. *A review of dispersion modelling and its application to the dispersion of particles: an overview of different dispersion models available*. *Atmospheric environment*, 2006, 40.30: 5902-5928.
- [17] SEINFELD, John H. and PANDIS, Spyros N. *Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change*. John Wiley & Sons, 2016.