



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská



Lineární inverzní modely radiálních úniků s apriorní informací o poměrech uniklých látek

Linear inverse models of radiological releases with prior information on species ratios

Bakalářská práce

Autor: **Václav Lamich**
Vedoucí práce: **Ing. Ondřej Tichý, Ph.D.**
Akademický rok: 2019/2020

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Student:	Václav Lamich
Studijní program:	Aplikace přírodních věd
Obor:	Matematické inženýrství
Zaměření:	Aplikované matematicko-stochastické metody
Název práce (česky):	Lineární inverzní modely radiačních úniků s apriorní informací o poměrech uniklých látek
Název práce (anglicky):	Linear inverse models of radiological releases with prior information on species ratios

Pokyny pro vypracování:

1. Seznamte se se základní formulací lineární inverzní úlohy v kontextu radiačních atmosférických úniků.
2. Prostudujte základní formulaci úlohy pomocí optimalizační formulace, následně pak rozšířenou formulaci úlohy vedoucí na iterativní algoritmy s úpravou kovariančních matic v každém kroku (viz literatura).
3. Prostudujte základní formulaci úlohy jako pravděpodobnostního modelu s neznámými parametry.
4. Navrhněte zahrnutí znalosti o poměrech jednotlivých uniklých prvků do odhadovací úlohy pro optimalizační formulaci.
5. Odvozené algoritmy experimentálně ověřte.

Doporučená literatura:

1. 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.
2. 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.
3. M. Grant, S. Boyd, Graph implementations for nonsmooth convex programs. Lecture Notes in Control and Information Sciences, Springer-Verlag Ltd, 2008, 95–110.
4. S. Eckhardt, A. J. Prata, P. Seibert, K. Stebel, A. Stohl, Estimation of the vertical profile of sulfur dioxide injection into the atmosphere by a volcanic eruption using satellite column measurements and inverse transport modeling. Atmospheric Chemistry and Physics 8, 2008, 3881–3897.
5. O. Tichý, V. Šmídl, R. Hofman, N. Evangeliou, Source term estimation of multi-specie atmospheric release of radiation from gamma dose rates. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society 144, 2018, 2781–2797.
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, AV ČR, v.v.i., Pod Vodárenskou věží 1143/4, 182 00 Praha 8-Libeň

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

.....
B
garant oboru
P. Hlaváček
.....
vedoucí katedry



.....
děkan

Poděkování:

Chtěl bych zde poděkovat především svému školiteli doktoru Ondřeji Tichému za pečlivost, ochotu, vstřícnost a odborné i lidské zázemí při vedení mé bakalářské práce.

Čestné prohlášení:

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

V Praze dne 24. července 2020

Václav Lamich

Název práce:

Lineární inverzní modely radiačních úniků s apriorní informací o poměrech uniklých látek

Autor: Václav Lamich

Obor: Aplikované matematicko-stochastické metody

Druh práce: Bakalářská práce

Vedoucí práce: Ing. Ondřej Tichý, Ph.D., Ústav teorie informace a automatizace AV ČR, v.v.i.

Abstrakt: Určení zdrojového členu náhlého úniku radioaktivního materiálu do atmosféry je klíčové při vyhodnocování rizik a následků s únikem spojených. Informace o zdrojovém členu jsou často neurčitě a úloha spojená s určením zdrojového členu špatně podmíněna. Kombinací naměřených dat s atmosférickým transportním modelem a lineárním inverzním modelem je jedním z možných přístupů k této problematice. V této práci předpokládáme znalost apriorních informací o zdroji, z nichž pro nás nejdůležitější je informace o poměrech jednotlivých radionuklidů ve zdrojovém členu, kterými lineární inverzní úlohu regularizujeme. Tuto informaci jsme přidali do iteračního optimalizačního přístupu a vytvořili nový přístup k dané problematice. Na sadě syntetických a realistických dat porovnááme jednotlivé přístupy a sledujeme chování jednotlivých algoritmů za různých podmínek ve snaze určit, který z algoritmů bude nejvhodnější pro danou situaci.

Klíčová slova: atmosférická disperze, inverzní modelování, poměry radionuklidů, regularizace, určení zdrojového členu

Title:

Linear inverse models of radiological releases with prior information on species ratios

Author: Václav Lamich

Abstract: Determination of the source term of an accidental release of radioactive material into the atmosphere is crucial for evaluating risks and consequences associated with the release. Information about source term is often vague and the task associated with determination of the source term is typically poorly conditioned. Combination of measured data with the atmospheric transport model and the linear inverse model is one of the possible approach to solve this issue. In this work, we assume knowledge of a priori information on ratios of radionuclides in the source term. This information is used for regularization of the linear inverse problem. We added a priori information on ratios of radionuclides to the iterative optimisation approach and created new approach to the problem matter. On sets of synthetic and realistic data, we compare individual algorithms and we study the behavior of individual algorithms under different conditions in order to determine the performance of algorithms in the particular situation.

Key words: atmospheric dispersion, inverse modeling, ratios of radionuclides, regularization, source term estimation

Obsah

Úvod	8
1 Inverzní úloha v atmosférickém modelování	9
1.1 Atmosférické modely	9
1.1.1 Gaussovské modely	10
1.1.2 Eulerovské modely	10
1.1.3 Lagrangeovské modely	11
1.2 Inverzní model	11
1.3 Poměry uniklých látek	12
1.3.1 Inverzní modelování nechtěných úniků pomocí měření radiačních dávek	12
1.4 Optimalizační přístup	13
1.4.1 Metody gradientů	13
1.4.2 Meta-heuristické metody	14
1.5 Bayesovský přístup	15
1.5.1 Markovovy řetězce Monte Carlo	16
1.5.2 Sekvenční Monte Carlo	17
1.5.3 Diferenční evoluce Monte Carlo	18
1.5.4 Expanze polynomického chaosu	18
2 Modely	19
2.1 Optimalizační modely	19
2.1.1 Regularizace	19
2.1.2 Optimalizace s podmínkou	21
2.1.3 Iterační optimalizace	22
2.1.4 Modely s předpokladem hladkosti řešení	23
2.1.5 Modely s poměry	24
2.2 Bayesovské modely	24
2.2.1 Souvislost optimalizačního a Bayesovského přístupu	24
2.2.2 Bayesovská formulace lineárního inverzního problému	25
2.2.3 Variační Bayesovské řešení	27
3 Experimenty	29
3.0.1 Generování syntetických dat	29
3.1 Optimalizace se syntetickými daty	29
3.2 Porovnání optimalizačního a Bayesovského přístupu	31
3.3 Chování optimalizačního a Bayesovského přístupu pro různá α	34
3.4 Experiment s realistickými daty	36

3.5	Porovnání optimalizačního a Bayesovského přístupu pro realistická data	39
3.6	Chování optimalizačního a Bayesovského přístupu pro různá α a realistická data	41
	Závěr	44

Úvod

Nechtěný únik nebezpečného materiálu do atmosféry je pro dnešní svět stále hrozbou [1]. Takový únik může, ale také nemusí mít přímé dopady na zdraví a život veřejnosti. Určení zdroje úniku je proto klíčové během krizových situací a bylo tedy vyvinuto značné úsilí na nalezení metod a způsobů, jak zjistit lokaci a časový průběh úniku. Jedním z možných přístupů k této problematice je kombinování atmosférických modelů s daty naměřenými ze stanic rozmístěných po Zeměkouli [2]. Tyto stanice jsou většinou první, které na podobný únik upozorní a v případě radiačního úniku jsou jimi naměřené koncentrace atmosférické aktivity klíčové pro úspěšné určení zdroje úniku. K zpřesnění jsou potřeba další dodatečné informace z nichž jednou může být informace o poměrech radionuklidů. Atmosférické modely poté předpovídají další rozšíření látky a jsou důležité pro rychlou a efektivní pomoc zasaženým regionům [15]. Při situacích, kdy je třeba okamžité odpovědi na vzniklou situaci, je nejčastěji používáno měření gama dávek. Radioaktivní nebo nebezpečný materiál, který unikne z místa jeho zdroje po nehodě má časový průběh a budeme ho označovat jako zdrojový člen. Problém určení zdrojového členu je špatně podmíněn vzhledem ke kumulaci neurčitostí z měření, atmosférických modelů a meteorologických dat.

Naším cílem bude pomocí lineárního inverzního modelu, co nejpřesněji určit zdrojový člen. Budeme se toho snažit dosáhnout kombinací atmosférického transportního modelu s naměřenými daty. Existuje řada algoritmů, které tento problém řeší. My se zaměříme na úzkou skupinu algoritmů s předpokladem znalosti poměrů jednotlivých nuklidů a budeme snažit určit, jak si který algoritmus stojí za různých podmínek, které mohou simulovat vzniklé situace. Za účelem dalšího zpřesnění dodáme algoritmům různé dodatečné informace a budeme pozorovat, jak se chovají. Provedeme několik experimentů, které se toto chování pokusí zachytit a demonstrovat.

Kapitola 1

Inverzní úloha v atmosférickém modelování

1.1 Atmosférické modely

V této kapitole shrneme hlavní využívané přístupy v atmosférickém modelování dle [4], pro detailnější popis odkazujeme čtenáře na [4] a reference v tomto článku uvedené.

Přenos radionuklidů atmosférou je většinou nejrychlejší způsob jejich šíření. Zasáhne také mnohdy největší oblast a potencionálně může ohrozit největší skupinu lidí. Tento přenos je ovlivněn z velké části větrem, turbulentní difúzí, radioaktivním rozpadem, rychlostí depozice a také chemickými a fyzikálními procesy, které se odehrávají v pohybujícím se oblaku radionuklidů. Všechny tyto procesy jsou popsány atmosférickou transportní rovnicí,

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -v\nabla c + \nabla K \nabla c + E + R + D \quad (1.1)$$

kde c značí koncentraci, v je vektor větru a K je matice turbulentních difúzních koeficientů. První výraz na pravé straně tedy popisuje přenos a druhý turbulentní difúzi. E jsou emise, R chemické reakce a D depozice. Chemické reakce a depozice jsou buď vypočítány pomocí simulace nebo parametrizovány pomocí jednoduché rovnice.

Velikost oblasti, kterou si přejeme namodelovat určuje, jaký atmosférický model budeme chtít využít. Při délce strany oblasti od 1 do 10 kilometrů se dá numerický model zjednodušit předpokladem homogenního a stacionárního větrného pole. Tento předpoklad sníží potřebnou výpočetní kapacitu, ale také se může stát významným zdrojem chyb. Při větší škále už meteorologickou situaci musíme zahrnout a s tím také rostou nároky na výpočetní kapacitu. Na globální škále poté musíme dělat kompromis mezi sofistikovaným fyzikálním modelem a proveditelnými výpočetními nároky.

Meteorologická data jsou pro modelování atmosférického transportu zcela zásadní. Numerické modely předpovědi počasí jsou proto párovány s modely atmosférické disperze. Existují dva hlavní druhy párování těchto modelů a to offline a online. Offline párování používá již předzpracovaná meteorologická pole jako vstupní data a je proto méně výpočetně náročné. Z tohoto důvodu této metody využívají hlavně lidé v operační praxi. Online párování simuluje meteorologickou situaci s atmosférickým rozptylem současně [6] a proto je náročnější na výpočetní kapacitu. Výhodou však je větší přesnost modelu za komplexních meteorologických podmínek. Online párování se dále dělí na online integrované modely, kde meteorologické a disperzní modely mají stejnou mřížku, numerická schémata a také stejný časový

krok a tudíž interpolace není nutná a online přístupové modely, které nemusejí mít stejnou mřížku, ale sdílejí spolu data v určitých intervalech. Přesnost disperzních modelů závisí na přesnosti párovaných numerických modelech předpovědi počasí, které mohou být regionální nebo globální. Regionální mají často lepší prostorové rozlišení a nejsou hydrostatické na rozdíl od globálních.

Emise jsou nutným vstupem pro disperzní modely. Pro tyto modely jsou emisní data počáteční nebo okrajovou podmínkou. V klasickém přístupu k disperznímu modelování předpokládáme, že emisní data známe. V komplexnějších situacích jako jsou radiační havárie, či např. uvolňování radionuklidů při velkých požárech, se stává neurčitost překážkou pro úspěšné disperzní modelování.

Depozice je proces při kterém jsou radionuklidy zachyceny na vegetaci, zemském povrchu nebo vodních plochách. Radionuklidy se poté kumulují v suchozemských nebo mořských ekosystémech. Depozice se dělí na suchou a vlhkou. Suchá depozice je řízená turbulentní difúzí a gravitačním usazováním. Obvykle ji charakterizujeme pomocí rychlosti depozice neboli poměrem toku povrchové depozice ku atmosférické koncentraci. Pro přesnou a detailní parametrizaci tohoto procesu potřebujeme data, která jsou dostupná pouze vzácně a proto se často v disperzních modelech používá konstantní hodnota rychlosti depozice. Vlhká depozice je komplexní proces, který významně přispívá k neurčitostem v disperzním modelu. Zvláště v případech, kdy mají radionuklidy dobrou rozpustnost ve vodě jako jódové a césiové aerosoly. Disperzní modely, proto často místo komplexních schémat vlhké depozice, používají odhad založen na koeficientu vyplachování, který závisí na empirických konstantách pro plyny a částice a na úhrnu srážek.

1.1.1 Gaussovské modely

Při předpokladu jediného zdrojového členu za homogenního, stacionárního větru a intenzity turbulence se dá atmosférická transportní rovnice (1.1) vyřešit analyticky, čímž se získá pole koncentrací s normálním rozdělením [7]. Na tomto jsou založeny Gaussovské modely, které nám poskytují dobré výsledky na lokální prostorové doméně. Pro Gaussovský model vyžadujeme meteorologická data pro jediný zdrojový člen a předpokládáme homogenní a stacionární počasí. Tudíž data pozorovaná v monitorovacích stanicích mohou být použita pro retrospektivní simulaci, zatímco numerické modely předpovědi počasí jsou použita pro předpověď rozptylu.

Gaussovský model předpokládá dvou dimenzionální normální rozdělení koncentrací pro příčný a vertikální směr, centrované okolo osy po větru od zdrojového členu. Klíčové parametry pro tento model jsou laterální a vertikální intenzity turbulence, které definují šíření dvou dimenzionálního normálního rozdělení. Při vyšší intenzitě laterální turbulence se sníží nejvyšší bod povrchové koncentrace ve směru šíření, ale postižená oblast se zvětší. Pokud je vyšší intenzita vertikální turbulence může se povrchová koncentrace zvýšit nebo snížit. Tyto parametry často odhadujeme pomocí empirických hodnot.

Hlavní výhodou Gaussovských modelů je jejich rychlost a malá potřeba vstupních dat. Tyto modely mohou fungovat bez přístupu k gridovým meteorologickým datům jako jsou numerické modely předpovědi počasí. Díky tomu mohou být tyto modely propočteny i na přenosných zařízeních a s pouze několika vstupními parametry. Jsou tedy často používány při stavech nouze, kdy je potřeba rychlých rozhodnutí. Za tuto výhodu ovšem platí přesností omezenou na plochu o hraně několika desítek kilometrů. Za komplexních podmínek je jejich přesnost taktéž omezena.

1.1.2 Eulerovské modely

Eulerovské modely jsou založeny na matematickém řešení atmosférické transportní rovnice (1.1) s příslušnými počátečními a okrajovými podmínkami. Eulerovský model je soustava parciálních diferenciálních rovnic druhého řádu s nezávislými proměnnými prostoru x, y, z a času t [8]. Vyřešení těchto rovnic nám poskytne časoprostorovou změnu koncentrací radionuklidů. Avšak atmosférická transportní

rovnice (1.1) se kvůli prostorové a časové variabilitě rychlosti větru a turbulence nedá vyřešit analyticky. Bylo tedy vyvinuto několik numerických metod, jak tuto soustavu rovnic vyřešit. Nejčastěji je používána takzvaná metoda přímek, která se skládá ze dvou návazných kroků. Prvním je prostorová diskretizace, která poté vede na počáteční úlohu pro soustavu obyčejných diferenciálních rovnic. Tuto soustavu lze řešit několika integračními metodami z nichž nejčastěji používány jsou implicitní a explicitní Eulerova integrační metoda a Rungeova-Kuttova metoda. Řešení třídimenzionálního Eulerova modelu má však vysoké časové nároky. Za účelem zkrácení potřebného času a zachování určité přesnosti je používáno několik metod. Nejeftivnější jsou paralerizace a adaptivní síťování.

1.1.3 Lagrangeovské modely

Langrangeovský částicový disperzní model využívá stochastického přístupu k řešení atmosférické transportní rovnice (1.1). Závislými proměnnými jsou v této metodě souřadnice částic uniklého materiálu. Každá částice reprezentuje část z celkového objemu uniklého materiálu.

Langrangeovský model je soustava stochastických obyčejných diferenciálních rovnic prvního řádu, která popisuje pohyb mnoha částic. Rychlost částice je definována sumami turbulentní difúze a advekce. Rychlost advekce získáváme z větrného pole párovaného numerického modelu předpovědi počasí.

Primární výstup Langrangeovského modelu je vzorec prostorového znečištění popsany pomocí soustavy souřadnic částic v každém časovém úseku. Pole koncentrací se poté získá spočtením hustoty na specifické mřížce jako suma celkového uniklého materiálu reprezentovaná všemi částicemi v rámci nějakého objemu. Větší množství částic umožňuje použití jemnějšího rozlišení mřížky. Protože koncentrace v tomto modelu není závislou proměnou, stává se řešení komplexních chemických mechanismů poměrně náročné.

Výpočetní nároky jsou závislé na počtu částic pro které jsou trajektorie počítány, ale už spočtení několika trajektorií nám dodá informaci o směru disperze a to dokonce i na větších škálách. Běžnou praxí je spočtení deterministických trajektorií uvažováním pouze větru na velké škále a zanedbáním turbulentní difúze [9]. Takto nezískáme koncentrační diagnostiku, ale bez nákladného řešení Eulerovského modelu či Langrangeovského modelu s mnoha částicemi získáme rychlou informaci o rozptylu. Další výhodou je, že inverzní problém, při kterém se snažíme identifikovat lokaci zdroje, se dá formulovat velmi jednoduše a to s použitím zpětných trajektorií.

1.2 Inverzní model

Inverzní modelování je formální přístup k odhadnutí neurčitých parametrů, pokud máme nějaká relevantní měření. V atmosférickém modelování se úspěšně používá k odhadnutí zdrojového členu úniku s danými měřeními a poskytuje nám hypotézu o zdrojovém členu úniku. Základem tohoto přístupu je systematické porovnávání výsledků simulací založených na různých hypotézách s naměřenými daty. Obvykle pracujeme s mnoha zdrojovými členy a měřeními najednou. Necht' $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_n]^T$ je neznámý vektor zdrojového členu a $\mathbf{y} = [y_1, \dots, y_p]^T$ je vektor měření. Předpokládáme, že vektor \mathbf{y} se dá vysvětlit pomocí lineárního modelu

$$\mathbf{y} = \mathbf{M}\mathbf{x},$$

(1.2)

kde \mathbf{M} je matice zdroj-receptorové senzitivity daná atmosférickým modelem [5]. Zdroj-receptorová senzitivita popisuje citlivost zdrojového členu k měření. Při předpokladu lineárního modelu platí následující

rovnice: $m_{i,j} = y_i/x_i$. Výsledná matice \mathbf{M} , poté vypadá takto: $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{p \times n}$. Cílem inverzního modelu je nalézt takové \mathbf{x} , aby reziduum $\|\mathbf{y} - \mathbf{M}\mathbf{x}\|_2^2$ bylo minimální, což je vlastně metoda nejmenších čtverců. Dostat toto reziduum na nulu je pro reálná data nerealistické a to kvůli chybám, které obsahuje \mathbf{y} a \mathbf{M} . Tyto chyby, ale můžeme vyčíslit, předpokládat jejich rozdělení a zacházet s nimi jako se statisticky konzistentní veličinou.

1.3 Poměry uniklých látek

Vliv chyb, které obsahuje matice \mathbf{M} a vektor \mathbf{y} se budeme snažit, co nejvíce potlačit a to dodáním více informací a dalším měřením. Měření koncentrací atmosferické aktivity je pro nás nejužitečnější. Tyto koncentrace se dají změřit pro každý nuklid. Nevýhodou je, že měření musí probíhat po určité časovou periodu, typicky několik hodin ba i několik dní a je tak nevyužitelné pro systémy okamžité reakce.

Měření povrchové aktivity je dalším způsobem, jak získat více informací. Povrchová aktivita se měří pomocí radioaktivního spadu každého nuklidu, který integrujeme přes časovou periodu. Tento způsob se díky jeho dostupnosti, nejčastěji využívá v případech, kdy je potřeba rapidní reakce [33]. Nicméně pro inverzní metodu je tento přístup poněkud náročný, jelikož data, která získáme jsou sumou všech příspěvků všech nuklidů, které tvoří radioaktivní oblak a radioaktivní depozici [11].

V případě, kdy máme multi-nuklidový zdroj, je předpoklad o poměrech jednotlivých nuklidů důležitý např. jako omezující podmínka inverzního problému [11], [33]. Tento předpoklad lze získat například analýzou nuklidové kompozice aktivní jaderné elektrárny. Metodologie včlenění těchto informací do inverzních metod je stále otevřený problém.

Jedním z možných přístupů k tomuto problému je použít interval poměrů místo přesného poměru. Takto omezíme optimalizační problém formou bariérové protekční funkce [11].

1.3.1 Inverzní modelování nechtěných úniků pomocí měření radiačních dávek

V této sekci shrneme hlavní využívané přístupy v inverzním modelování pomocí měření radiačních dávek dle [11], pro detailnější popis odkazujeme čtenáře na [11] a reference v tomto článku uvedené.

Proměnná "okolní radiační dávka" v sobě zahrnuje různé informace. Jedná se o sumu všech příspěvků všech radionuklidů, které emitují gama záření, ať už ve vzduchu nebo jako spad.

$$D_{okol} = \sum_{n=1}^M D_{oblak_n} + \sum_{n=1}^M D_{depozit_n} \quad (1.3)$$

D_{okol} je okolní radiační dávka, D_{oblak_n} je příspěvek n-tého radionuklidu z radioaktivního oblaku, $D_{depozit_n}$ je příspěvek n-tého radionuklidu z depozitované radiace a M je počet gama vysílačů.

Ideální situace, při které se měří okolní radiační dávka kontaminované vzduchové masy, která přechází přes monitorovací stanici může vypadat následovně. Když je oblak přímo nad monitorovací stanicí, radiační dávka vzroste a dosáhne určitého maxima. Oblak se posouvá dále a radiační dávka klesá. Radiační dávka poté, co oblak prošel je na hodnotách vyšších než před jeho příchodem. Tento rozdíl pramení z depozit, které se zformovali během průchodu oblaku. V tomto bodě je dočasný vývoj radiačních dávek tvořen hlavně radioaktivním rozpadem radionuklidů, které tvoří depozit. Radiační dávky se postupem času snižují a naměřený signál radiačních dávek se snižuje kvůli isotopickému složení depozitu.

U nehod jaderných elektráren je hlavní část signálu radiační dávky tvořena několika radionuklidy. Tyto relevantní radionuklidy mohou být identifikovány užitím dalších typů měření, provedených v okolním prostředí nebo použitím hlavního inventáře poškozeného zařízení. Počet neznámých parametrů je

snížen redukováním kompozice zdrojového členu na seznam radionuklidů. Příspěvky těchto hlavních radionuklidů se musejí rozlišit pouze na základě informací obsažených v měřeních radiačních dávek. Dočasný vývoj signálu obsahuje kvůli radioaktivnímu rozpadu nepřímé informace o isotopickém složení emisí. Je nezbytně nutné, aby byli poločasy rozpadu vybraných radionuklidů dostatečně rozdílné, tak aby inverzní proces dokázal rozlišit jejich příspěvky k signálu radiačních dávek. Z fyzikálního pohledu jsou vypuštěny rozličné radionuklidy současně v proporcích, které závisejí na jejich fyzikálně-chemických vlastnostech. Inverzní problém může být podmíněn vynucováním realistických proporcí vypuštěných radionuklidů. Například míra uvolňování radionuklidu i ve vztahu k radionuklidu j může být donucena v každém časovém kroku t k respektování následující proporce:

$$\frac{1}{b_i} \leq \frac{\sigma_j(t)}{\sigma_i(t)} \leq a_i, \quad (1.4)$$

kde a_i a b_i jsou limitní hodnoty izotopických vztahů. σ je vektor zdrojového členu. σ zahrnuje časový vývoj míry uvolňování pro každý radionuklid. a_i a b_i mohou být odhadnuty díky inventáři jádra poškozeného reaktoru a měřením koncentrací a povrchovým aktivitám. Toto ohraničení může být více, či méně flexibilní na základě znalosti o emisích.

1.4 Optimalizační přístup

V této sekci řešíme problém (1.2) s podmínkou (1.4) a představíme zde hlavní využívané přístupy v optimalizaci dle [15], pro detailnější popis odkazujeme čtenáře na [15] a reference v tomto článku uvedené.

Optimalizační přístup se snaží nalézt kombinaci parametrů, která minimalizuje nákladovou/účelovou funkci J . Tato funkce má mnoho podob, ale nejčastěji je odvozena ze sumy kvadrátů rozdílů mezi predikovanými C_r a pozorovanými D_r koncentracemi. Predikované hodnoty obdržíme z atmosférického transportního modelu a pozorované z umístěných senzorů. Předpokládáme, že kombinace parametrů, která produkuje nejmenší rozdíl je optimální odhad zdrojového členu. Mnoho optimalizačních technik používá iterativní proces, kde účelová funkce J je minimalizována použitím různých pravidel, která v každé iteraci poskytnou nový vylepšený odhad hledaných parametrů.

Hlavní cíl výzkumu optimalizačního přístupu se snažil hodnotit výkon existujících algoritmů v optimalizování nákladových funkcí, avšak různé metody také prozkoumaly rozdílné nákladové funkce a užití lepších počátečních odhadů. Rozmanité metody byly ve výzkumu použity pro optimalizaci účelové funkce jako třeba metody gradientů [16], metody přímého hledání [17], inteligentní optimalizační metody [18], [19].

1.4.1 Metody gradientů

1.4.1.1 Metoda nejmenších čtverců

Cílem odhadu pomocí nejmenších čtverců je minimalizovat sumu čtverců reziduí mezi pozorovanými koncentracemi D_r a predikovanými koncentracemi C_r pro celkový počet senzorů N . Nákladová funkce se dá zapsat takto:

$$J = \sum_{r=1}^N (C_r - D_r)^2. \quad (1.5)$$

Metoda nejmenších čtverců je aplikovatelná pouze na příliš determinovaný inverzní problém. Iterativní minimalizace nákladové funkce J vyžaduje počáteční odhad zdrojového členu. Jelikož není optimalizační

metoda nejmenších čtverců globální optimalizační technikou, je z velké části závislá na dobrém počátečním odhadu, jinak může uvíznout v lokálním minimu a dovést nás k špatnému řešení kvůli nelineárnosti prostoru řešení.

1.4.1.2 Re-normalizace

Re-normalizace nebo regularizovaná metoda nejmenší čtverců je strategie lineární asimilace koncentračních měření, která identifikuje neznámé úniky [20]. Tato metoda využívá přirozené statistiky poskytované geometrií monitorovacích sítí. Tyto statistiky jsou vyjádřeny ve formě váhové funkce odvozené z kritéria minimální entropie. Toto kritérium zabraňuje nadhodnocení dostupných informací. Váhové funkce slouží jako apriorní informace o úniku, který je zjevný monitorovací sítí a poskytují regularizaci limitující algoritmem prohledávaný prostor a také počáteční odhad.

1.4.1.3 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno algoritmus (BFGS)

BFGS algoritmus [21] je jednou z nejpoužívanějších kvazi-Newtonových optimalizačních technik [22]. Metoda je používána k rychlému hledání extrémů funkce. Je podobná Newtonově metodě, ale inverzní Hessián je aproximován přímo, což výrazně redukuje výpočetní nároky. Sám o sobě by měl algoritmus potíže s určením zdrojového členu, jelikož může uvíznout v lokálním minimu. V rámci překonání tohoto problému byly použity inverzní atmosférické transportní modely k vygenerování vhodného počátečního odhadu.

1.4.2 Meta-heuristické metody

Meta-heuristické optimalizační algoritmy benefitují z jejich výkonu při globálním hledání ve snaze vyhnout se uvíznutí v lokálním minimu. Následující algoritmy užívají různé metody k iteraci až do konvergence k řešení, založené na vyhodnocení nákladové funkce J . Metody se liší způsoby, jakými upravují parametry k nalezení lepšího řešení.

1.4.2.1 Metoda hledání vzorců

Metoda hledání vzorců je jedna ze základních optimalizačních metod. Skládá se z dvou jednoduchých kroků. V prvním kroku definujeme teoretické parametry (sílu zdrojového členu Q a souřadnice x, y) a jejich počáteční hodnoty. V druhém kroku algoritmus odlišuje každý parametr zvyšováním či snižováním jejich hodnot z jejich současného bodu aplikováním konstantního faktoru, známého jako směr pohybu osy. Nákladová funkce je poté vypočítána pro nové hodnoty parametrů. Pokud nezaznamenáme zvýšení či snížení hodnoty nákladové funkce v porovnání s hodnotou pro předchozí set parametrů je délka kroku snížena na polovinu a proces se opakuje dokud nejsou dosažena kritéria pro ukončení [23].

1.4.2.2 Simulované temperování

Algoritmus simulovaného temperování je globální optimalizační algoritmus [24]. Je založen na analogii s termodynamikou. Speciálně s procesem ohříváním a kontrolovaným ochlazením materiálu za účelem redukování defektů. Tento proces přímo závisí na termodynamické energii E . Cílem je přivést systém z jeho počátečního stavu do konvergentního stavu ve kterém systém využívá minimum energie. Pravidlo pro akceptování změny stavu je založeno na Boltzmannově pravděpodobnostním rozdělení [18].

$$R \sim u(0, 1) < \exp\left(-\frac{E_n - E_{n-1}}{T_n}\right) \quad (1.6)$$

R je zde náhodné číslo z uniformního rozdělení u mezi nulou a jedničkou. E_n je energie systému (podobně jako nákladová funkce) a T_n je teplota nebo parametr ochlazování. Toto umožňuje algoritmu občasně přijmout parametry, které zvyšují E_n . Díky tomu je algoritmus schopen uniknout z lokálního minima. Algoritmus opakuje generování nových parametrů náhodně, dokud nezkonverguje k řešení. Během simulace je T_n sníženo za účelem vylepšení chování konvergence systému.

1.4.2.3 Genetický algoritmus

Genetický algoritmus je populární globální optimalizační technikou. Je klasifikován jako jedna z metod optimalizace umělé inteligence. Podobně jako většina optimalizačních technik i genetický algoritmus je založen na iterování. Hlavním rozdílem tohoto algoritmu je pozměňování odhadovaných parametrů k vygenerování nových kandidátů na řešení. Tento přístup je inspirován procesem přirozené evoluce. Proces genetického algoritmu se dá shrnout do následujících bodů.

1. Inicializace: Náhodná populace kandidátů na řešení nazývaná chromozomy je vygenerována.
2. Selektce: K měření kvality řešení je vyhodnocena nákladová funkce.
3. Páření: Řešení vysoké kvality jsou spolu "spářeny", za účelem vygenerování nových odhadů parametrů, čímž vytvoří druhou generaci řešení, která obsahuje vyšší kvalitu chromozomů než předchozí generace.
4. Mutace: Stejně jako u evoluce je určitý výběr chromozomů zmutován za účelem vygenerování více nových řešení.
5. Dostáváme konvergenci nebo ukončení, za nějaké podmínky.
6. Opakování druhého až pátého kroku.

1.5 Bayesovský přístup

V této sekci shrneme hlavní využívané Bayesovské přístupy dle [15], pro detailnější popis odkazujeme čtenáře na [15] a reference v tomto článku uvedené.

Bayesovské metody umožňují, aby byla do problému vzata v úvahu pravděpodobnost. Díky tomu můžeme do vstupních dat zahrnout neurčitosti. Dalším způsobem, jak využít Bayesovský přístup není jen hledání jednoho optimálního řešení, ale získání hustoty rozdělení pravděpodobnosti odhadovaných zdrojových parametrů. V tomto případě je zdrojový člen definován sadou parametrů, které nás zajímají. Stochastické vzorkování je jednou z možností, kterou se vyhodnotí aposteriorní rozdělení pravděpodobnosti těchto parametrů, za účelem popsání těchto parametrů zdrojového členu a jejich neurčitostí. Cílem je hledat nejpravděpodobnější parametr zdrojového členu za podmínek aposteriorní pravděpodobnosti. Bayesovo pravidlo odhaduje pravděpodobnost hypotézy nebo pravdivého výpočtu aposteriorního rozdělení, při dodání normalizační konstanty modelu pozorování:

$$\text{aposteriorní rozdělení} \propto \frac{\text{apriorní rozdělení} \times \text{model pozorování}}{\text{normalizační konstanta modelu pozorování}} \rightarrow P(\theta | D, M, I) \quad (1.7)$$

$$\text{aposteriorní rozdělení} \propto \frac{P(\theta | I) \times P(D | \theta, M, I)}{P(D | M, I)} \quad (1.8)$$

kde tato rovnice odhaduje pravděpodobnost hypotézy θ jako pravdivou, za předpokladu dat D , modelu M a apriorní informace I . Apriorní rozdělení $P(\theta | I)$ vyjadřuje stav znalosti θ před znalostí dat D .

Pravděpodobnostní funkce $P(D | \theta, M, I)$ je model pozorování, který popisuje pravděpodobnost dat D , za předpokladu, že hypotéza θ je pravdivá. Je známa také jako vzorkovací distribuce, když je na ni pohlíženo jako na funkci dat. Aposteriorní rozdělení $P(\theta | D, M, I)$ je celé řešení k problému výpočtu aposteriorního rozdělení a vyjadřuje pravděpodobnost θ vzhledem k danému D . Cílem je provést odvození parametrů, které definují θ a aposteriorní rozdělení vyjadřuje kompletní znalost těchto parametrů vzhledem ke všem dostupným datům.

$P(D | M, I)$ je normalizační konstanta hustoty $P(D | \theta, M, I)$. Při aplikaci na hledání zdrojového členu je hypotéza θ odvozená sada parametrů, které popisují zdrojový člen. Data D jsou změřené koncentrace ze sensorů. Model M je nějaký atmosférický transportní model a apriorní informace I může být jakákoliv informace relevantní k problému. Při uvažování pouze jednoho zdrojového členu můžeme zanedbat normalizační konstantu hustoty $P(D | \theta, M, I)$ a dostaneme pak:

$$\text{aposteriorní rozdělení} \propto \text{apriorní rozdělení} \times \text{model pozorování} \rightarrow P(\theta | D, M, I) \propto P(\theta | I) \times P(D | \theta, M, I). \quad (1.9)$$

Pomocí modelu pozorování je kvantifikována pravděpodobnost diskrepance mezi naměřenými a predikovanými koncentracemi v každém senzoru. Predikce se tvoří vložení odvozených parametrů do atmosférického transportního modelu. Apriorní pravděpodobnost je použita k zahrnutí informací o parametrech zdrojového členu, které známe ještě před jakoukoliv detekcí. Často nepředpokládáme žádnou apriorní informaci a proto často přiřazujeme uniformní rozdělení. Aposteriorní pravděpodobnost parametrů je poté proporcionalní k modelu pozorování. Po proběhnutí výpočtu aposteriorního rozdělení v sekvenčním procesu je apriorní nastavena jako aposteriorní předchozí iterace.

Monte Carlo vzorkovací metody spolu s variačními metodami jsou používány k určení přesného odhadu aposteriorní hustoty rozdělení pravděpodobnosti parametru zdrojového členu θ . Odhad a neurčitosti parametru se dají určit ze statistiky aposteriorního rozdělení, běžně ze střední a standardní odchylky. V prostoru s vysokou dimenzí je mnoho parametrů odvozeno a výpočetní nároky rostou exponenciálně. Z tohoto důvodu jsou používány účinné vzorkovací techniky jako Markovovy řetězce Monte Carlo a sekvenční Monte Carlo. Sekvenční aspekt umožňuje aktualizovat data při jejich obdržení, čímž je tato technika více použitelná pro dynamické oblaky.

1.5.1 Markovovy řetězce Monte Carlo

Metody Markovových řetězců Monte Carlo jsou používány k efektivnímu vzorkování z pravděpodobnostních rozdělení. Dosahujeme toho konstrukcí Markovova řetězce s požadovaným rozdělením ekvivalentním k jeho rovnovážnému rozdělení [25]. Markovův řetězec je vytvořen s počátečním náhodným nebo informovaným výchozím bodem, tam kde nové výpočty aposteriorního rozdělení jsou vytaženy z aktuálního článku v řetězci. Pravděpodobnost aktuálního výpočtu aposteriorního rozdělení je vyhodnocena a založena na kritériu přijmutí a je buď odmítnuta nebo přijata jako další článek v Markovově řetězci. Několik technik bylo navrženo, aby generovalo a přijímalo nové výpočty aposteriorního rozdělení. Nejpopulárnější z nich je algoritmus Metropolis-Hastings [26], který je popsán následujícími kroky.

- **Krok 1** Inicializace: Navržení výchozího odhadu parametru zdrojového členu θ_1
- **For** $i = 1 : N$
- **Krok 2** Návrh: Generace nového odhadu θ^* . Vzorkování z navrženého rozdělení $q(\cdot)$: $\theta^* \sim q(\theta^* | \theta_i)$
- **Krok 3** Ohodnocení pravděpodobnosti přijetí: $\alpha = \frac{P(\theta^* | D, M, I) q(\theta_i | \theta^*)}{P(\theta_i | D, M, I) q(\theta^* | \theta_i)}$

- **Krok 4** Přijetí nebo zamítnutí nových parametrů Markovova řetězce: $\theta_{i+1} = \begin{cases} \theta^* & \text{když } \alpha \geq u(0, 1), \\ \theta_i & \text{jinak,} \end{cases}$

kde u reprezentuje uniformní rozdělení. Inicializační proces zahrnuje vybírání počátečního odhadu parametrů zdrojového členu. Ten by měl být založen na apriorní informaci, jelikož může mít výrazný vliv na konvergenci algoritmu. Následující návrh je generován vzorkováním z konce předchozího článku v Markovově řetězci. Nejpopulárnější technikou je náhodná procházka, ale byly navrženy i informovanější techniky. Během třetího kroku je pravděpodobnost přijetí návrhu spočtena na základě aposteriorního rozdělení a navržené hustoty předchozího odhadu. Ve čtvrtém kroku se rozhodne, zda je nebo není přijata jako další článek v Markovově řetězci na základě jejího porovnání s náhodným číslem.

1.5.2 Sekvenční Monte Carlo

Sekvenční Monte Carlo je další technika používaná pro efektivní vzorkování. Na rozdíl od Markovových řetězců Monte Carlo je tato metoda ze své podstaty paralelní, což umožňuje všem návrhům Monte Carla být generovány a hodnoceny současně [27]. Z tohoto důvodu je považována za efektivnější vzhledem k výpočetním nárokům než Markovovy řetězce Monte Carlo. Sekvenční Monte Carlo také dobře konverguje. Dalším benefitem je sekvenční povaha, dovolující novým datům se zapojit do algoritmu hned, jak jsou dostupná [27]. Populární sekvenční Monte Carlo metoda používá důležitostní vzorkování. To zahrnuje vzetí určitého počtu vzorků z aktuálního odhadu parametrů zdrojového členu, jejich zvážení a užití těchto vah k vytvoření nového aposteriorního rozdělení, ze kterého jsou taženy nové vzorky. Tyto kroky zde načrtneme:

- **Krok 1** Inicializace: Návrh počátečního důležitostního vzorku: $\Theta_{1:t_0} = \{\theta_{1:t_0}^{(i)}, w_{1:t_0}^{(i)} : i = 1, \dots, N\}$
- **For** $t = t_0 : T$
 - **Krok 2** Návrh: Generace nového odhadu. Vzorkování z navržené distribuce $q(\cdot)$:
 - **For** $i = 1 : N$ vzorkuj
 - $\theta_{1:t}^{*(i)} \sim q_t(\theta_{1:t}^* = q_t(\theta_t^* | \theta_{1:t-1}^*)q_t(\theta_{1:t-1}^*))$
 - **Krok 3** Aktualizování důležitostních vah:
 - **For** $i = 1 : N$, ohodnot' důležitostní váhy
 - $w_{1:t}^{*(i)} \propto \frac{\pi_t(\theta_{1:t}^{*(i)})}{q_t(\theta_{1:t}^{*(i)})} \propto \frac{P(D_t | \theta_{1:t}^{*(i)}, M, I) P(\theta_t^* | \theta_{1:t-1}^*) \pi_{t-1}(\theta_{1:t-1}^{*(i)})}{q_t(\theta_t^* | \theta_{1:t-1}^*) q_t(\theta_{1:t-1}^{*(i)})}$
 - **Krok 4** Normalizace vah:
 - Necht' $\theta_{1:t}^{(i)} = \theta_{1:t}^{*(i)}$ a $w_{1:t}^{(i)} = \frac{w_{1:t}^{*(i)}}{\sum_{j=1}^N w_{1:t}^{*(j)}}$
 - **Krok 5** Aproximace aposteriorního rozdělení:
 - $\pi(\theta_t) \simeq \sum_{i=1}^N w_t^i \delta(\theta_t - \theta_t^i)$

1.5.3 Diferenční evoluce Monte Carlo

Diferenční evoluce Monte Carlo je kombinace diferenční evoluce a Bayesovských metod Markovových řetězců Monte Carlo. Je to vlastně Bayesovská verze genetického algoritmu uváděného výše. Metoda je populačním Markovovým řetězcem Monte Carlo, kde více Markovových řetězců běží paralelně. Proces selekce je založen na Metropolisově kritériu přijetí a hlavní rozdíl je v generaci nových návrhů skokem. Namísto naladěné náhodné procházky nebo multivarietního normálního rozdělení používá diferenční evoluce Monte Carlo více řetězců k adaptivnímu určení navrženého skoku na základě jejich difference [28].

1.5.4 Expanze polynomického chaosu

Expanze polynomického chaosu vzešla z rozšíření myšlenky homogenního chaosu rozvinuté Wienerem [29]. Tato metoda není založena na vzorkování. Hlavní princip tohoto přístupu při řešení inverzního problému je rozšířit náhodné proměnné použitím polynomických funkcí báze. Vhodně zvolený polynom rychle konverguje k řešení a posterioriornímu pravděpodobnostnímu rozdělení.

Kapitola 2

Modely

2.1 Optimalizační modely

Inverzní problém se dá přeformulovat jako optimalizační problém. Budeme tedy řešit minimalizaci kvadratické normy $\|\mathbf{y} - \mathbf{M}\mathbf{x}\|_2^2$. Tato formulace však často přináší velmi špatné výsledky v důsledku špatně podmíněné matice \mathbf{M} . Z toho důvodu budeme využívat dodatečných podmínek a předpokladů. Úlohu tedy budeme regularizovat, abychom získali, co nejlepší výsledky.

2.1.1 Regularizace

Častým problémem je špatná podmíněnost úlohy, která nám zabraňuje nalézt stabilní řešení bez dodatečných předpokladů. Musíme tedy úlohu regularizovat. To znamená, že do úlohy přidáme dodatečné informace a podmínky, které povedou k lepší řešitelnosti úlohy a přesnějším výsledkům.

Máme tedy vektor měření \mathbf{y} o velikosti p a matici zdroj-receptorové senzitivity \mathbf{M} o velikosti $p \times n$, z nichž za předpokladu funkčnosti lineárního modelu (1.2) získáme zdrojový člen \mathbf{x} o velikosti n . Toho dosahujeme minimalizací nákladové funkce J_1 :

$$\mathbf{x}^* = \arg \min_{\mathbf{x}} J_1, \quad (2.1)$$

kde

$$J_1 = (\mathbf{y} - \mathbf{M}\mathbf{x})^T \sigma_0^{-2} (\mathbf{y} - \mathbf{M}\mathbf{x}). \quad (2.2)$$

J_1 měří rozdíly mezi hodnotami, které dostaneme z modelu a hodnotami pozorovanými, kde σ_0 je standardní chyba pozorování.

Takto definovaný problém je vlastně problém nejmenších čtverců. Metoda nejmenších čtverců je ovšem příliš slabá na to, aby si poradila s špatně podmíněnou maticí \mathbf{M} . V grafu 2.1 ukazujeme odhad zdrojového členu metodou nejmenších čtverců na datech definovaných v 3.0.1.

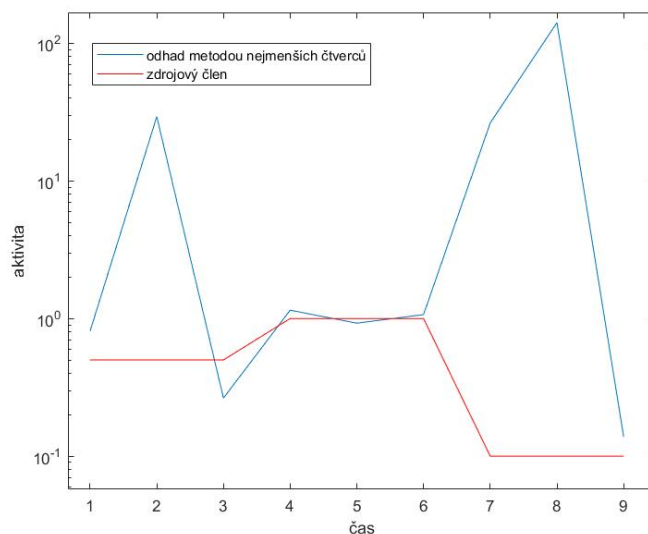
Tento problém vyřešíme dodáním další podmínky. Ukazuje se, že jednoduchou Tichonovovou regularizací lze získat užitečné řešení pro inverzi [10]. Inverze je poté provedena minimalizací funkce J , kde

$$J = J_1 + J_2, \quad (2.3)$$

kde

$$J_2 = \mathbf{x}^T \text{diag}(\sigma_x^{-2}) \mathbf{x}. \quad (2.4)$$

J_2 měří odchylku od apriorních hodnot. σ_x^{-2} je její neurčitost vyjádřená jako vektor standardních chyb a požaduje, aby řešení bylo řídké. Přičtením J_2 jsme tedy přidali podmínku řídkosti, která potlačuje ojedinělé hodnoty v řešení \mathbf{x}^* .



Obrázek 2.1: Odhad metodou nejmenších čtverců

Dodáním další podmínky dále zpřesníme řešení. Rozumným předpokladem se jeví podmínka na hladkost řešení. Tu zajistíme přičtením J_3 k nákladové funkci J . Dostaneme

$$\mathbf{x}^* = \arg \min_{\mathbf{x}} J, \quad (2.5)$$

$$J = J_1 + J_2 + J_3, \quad (2.6)$$

kde J_3 vypadá následovně:

$$J_3 = (D\mathbf{x})^T D\mathbf{x}. \quad (2.7)$$

Jelikož se jedná o diskrétní derivaci, pak matice D může vypadat takto:

$$D_{n,n} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

J_3 tedy reprezentuje deviaci aposteriorního profilu od hladkosti.

Minimalizace J vede na lineární systém rovnic o velikosti n , který se dá velmi rychle vyřešit za použití standardních nástrojů lineární algebry. Jelikož toto je analytické řešení, můžeme si být jisti, že nalezneme globální minimum J [10].

Další cesta, jak úlohu regularizovat je využít informací o poměrech uniklých látek, což je hlavním přínosem této práce, pokud jsou k dispozici. Předpokládáme, že počet druhů nuklidů je m a počet časových bodů je q . Předpokládáme tedy, že kompozice zdrojového členu \mathbf{x} , kde poměry aktivit každého z druhů nuklidů jsou uloženy ve sloupci vektoru, vypadá takto: $\mathbf{x} = [\mathbf{x}_1^T, \dots, \mathbf{x}_m^T]^T$. Necht' tedy $n = mq$ a k -tý prvek vektoru \mathbf{x} je $x_k = [x_{k,1}, \dots, x_{k,q}]^T$ pro každé $k = 1, \dots, m$. Sensory měří pouze sumu všech příspěvků různých druhů nuklidů. Separace těchto druhů dosáhneme pouze z jejich různého chování při atmosferickém transportu nebo z jejich rozdílného poločasu rozpadu. Tyto efekty jsou reflektovány

zdroj-receptorovou maticí, ale jsou velmi slabé. Vztah mezi k -tým a m -tým prvkem lze vyjádřit v každém časovém kroku t podobně jako [11] následujícím způsobem:

$$a_{k,t} \leq \frac{x_{k,t}}{x_{m,t}} \leq b_{k,t}, \forall k = 1, \dots, m-1, \forall t = 1, \dots, q, \quad (2.8)$$

kde $a_{k,t}$ a $b_{k,t}$ jsou známé hranice poměrů. Tyto hranice mohou být závislé na čase a nebo celou dobu úniku konstantní. Záleží na dostupných informacích.

Z fyzikální roviny úlohy, lze také předpokládat, že vektor řešení \mathbf{x} bude splňovat $\mathbf{x} \geq 0$. Tuto podmínku lze vynutit přímo a nebo iteračně, což popíšeme v dalších sekcích.

2.1.2 Optimalizace s podmínkou

Jelikož optimalizační problém popsán rovnicí (2.1) je konvexní, využíváme k řešení tohoto problému CVX toolbox [12], což je Matlabovský toolbox, ve kterém může být rovnice (2.1) implementována a vyřešena. Nejjednodušším optimalizačním modelem, se kterým jsme pracovali je tento:

$$\mathbf{x}^* = \operatorname{argmin}_{\mathbf{x}} \{\|\mathbf{y} - \mathbf{M}\mathbf{x}\|_2^2\}. \quad (2.9)$$

Můžeme si všimnout, že zde chybí podmínka $\mathbf{x} \geq 0$, což jak předpokládáme bude mít negativní vliv na výsledky.

Dalším modelem je tento:

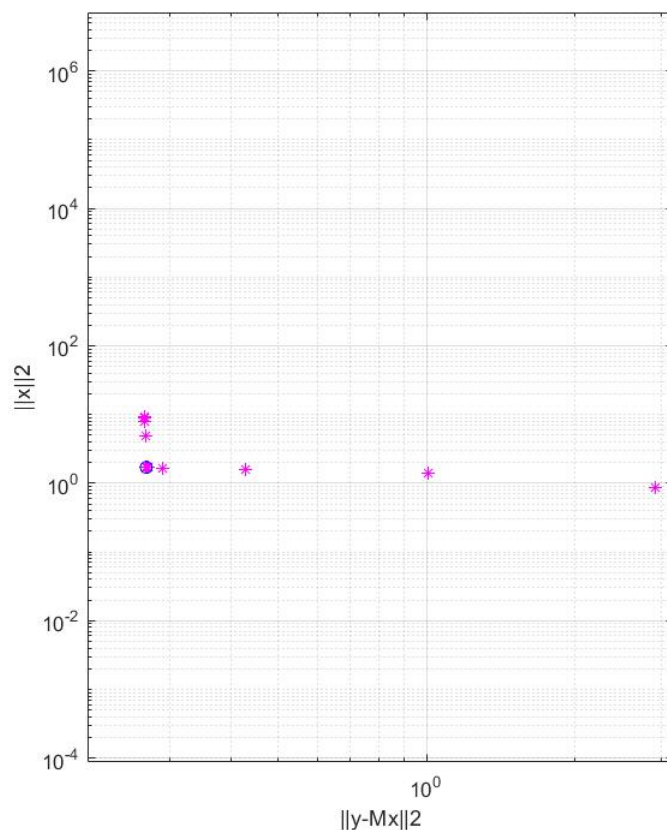
$$\mathbf{x}^* = \operatorname{argmin}_{\mathbf{x}} \{\|\mathbf{y} - \mathbf{M}\mathbf{x}\|_2^2\} \text{ subject to } \mathbf{x} \geq 0. \quad (2.10)$$

Zde již figuruje předpoklad na kladnost řešení, který se projeví na kvalitě výsledků.

Další logická podmínka, kterou můžeme klást na řešení je Tichonovova regularizace (2.4). Model bude poté vypadat následovně:

$$\mathbf{x}^* = \operatorname{argmin}_{\mathbf{x}} \{\|\mathbf{y} - \mathbf{M}\mathbf{x}\|_2^2 + \alpha \|\mathbf{x}\|_2\}, \text{ subject to } \mathbf{x} \geq 0. \quad (2.11)$$

Parametr α nám zde umožňuje přidat Tichonovově regularizaci určitou váhu. Řešení pak silně závisí na správném zvolení parametru α . Pomocí techniky L-křivky 2.2 se dá nalézt ideální váha tohoto parametru [34]. Jedná se o graf na jehož ose y nalezneme euklidovskou normu $\|\mathbf{y} - \mathbf{M}\mathbf{x}\|_2$ a na ose x euklidovskou normu $\|\mathbf{x}\|_2$. Ideální váha se nachází ve zlomu grafu, od čehož se odvíjí název L-křivka. Tato váha je v grafu 2.2 označena modrým kolečkem.



Obrázek 2.2: L-křivka

Další metodou nalezení ideální váhy α je například metoda Cross-validace [35].

Také se zde opět objevuje předpoklad kladnosti řešení. Tento předpoklad můžeme vynutit také iteračně a nikoliv pevnou podmínkou.

2.1.3 Iterační optimalizace

V podstatě se jedná o identický model jako (2.11) s tím rozdílem, že podmínku $x \geq 0$ si vynucujeme iteračním algoritmem a nikoliv pevnou podmínkou. Podobně jako [32] navrhne iterativní algoritmus, který bude potlačovat negativní části řešení. Algoritmus opakuje inverzi a redukuje standardní chybové hodnoty těch prvků zdrojového členu, které jsou negativní, čímž stahuje řešení blíže k apriorním hodnotám. Tato procedura se iteruje dokud není suma negativních řešení menší než jedna promile nebo námi zadaný maximální počet iterací. Tato technika rychle konverguje a prvky, které byly nejdříve negativní mohou změnit znaménko. Následující pseudo-kód tento algoritmus reprezentuje.

```

y, M,  $\alpha$ ,
B=In $\alpha$ 
 $x_{neg} = 0$ 
 $x_{pos} = 0$ 
while  $x_{neg}/x_{pos} < 0.001$  or  $iter > 50$  do
    CVXbegin
     $\min \|y - Mx\|_2^2 + x^T Bx$ 
    CVXend
    for  $j = 1$  to  $n$  do
        if  $x(j) < 0$  then
             $x_{neg} = x_{neg} + x(j)$ 
             $B(j, j) = 0.5B(j, j)$ 
        else
             $x_{pos} = x_{pos} + x(j)$ 
             $B(j, j) = \min(1.1B(j, j), \alpha)$ 
        end
    end
end

```

Algoritmus 1: Iterační algoritmus

\mathbf{y} je vektor pozorování a \mathbf{M} je matice zdroj-receptorové senzitivity. α je váha, kterou přikládáme podmínce řídkosti. I_n je identická matice a tím pádem je B matice, která obsahuje pouze prvky α na diagonále. x_{neg} a x_{pos} jsou sumy všech pozitivních a negativních řešení. Dokud nejsou splněny námi zadané podmínky probíhá while cyklus. V cyklu proběhne minimalizace pomocí CVX, kde člen $\mathbf{x}^T B\mathbf{x}$ má stejnou funkci jako člen $\alpha\|\mathbf{x}\|_2$ v (2.11). Je to podmínka řídkosti. Po této minimalizaci probíhá for cyklus, který vezme popořadě všechny prvky hledaného vektoru \mathbf{x} a pokud jsou negativní, pak matici B na příslušném místě zmenší o polovinu. V opačném případě dosadí na příslušné místo v matici B číslo o 10% větší nebo parametr α . Z těchto dvou si vybere to menší. Tímto docílíme toho, že negativní části řešení se budou blížit nule a pozitivní části se budou naopak zvětšovat.

Takto navržený algoritmus, ale nemusí nikdy dojít k námi požadované přesnosti. Obecně se tak stane pokud z minimalizace pomocí CVX dostaneme extrémně špatné řešení, které je hluboko po nulou. To se stává v místech, kde je matice \mathbf{M} velmi špatně podmíněná a algoritmus není schopen toto vyřešit. Toto je poté výrazným zdrojem chyb. Potřebujeme tedy přidat do algoritmu další podmínku a to například podmínku hladkosti.

2.1.4 Modely s předpokladem hladkosti řešení

Pro lepší odhad zdrojového členu jsme zavedli model, který zohledňuje předpoklad hladkosti. Model vypadá následovně:

$$\mathbf{x}^* = \arg \min_{\mathbf{x}} \{ \|y - M\mathbf{x}\|_2^2 + \alpha\|\mathbf{x}\|_2 + \beta\|D\mathbf{x}\|_2 \}, \text{ subject to } \mathbf{x} \geq 0. \quad (2.12)$$

β je zde váha, kterou přikládáme hladkosti. Naším cílem zde není ladit vzájemně váhy α a β . Namísto toho použijeme rozumný a heuristikami (L-křivka) podložený nástřel, který použijeme pro další srovnání a výpočty. Řešení tohoto modelu je tedy řídké, hladké a větší než nula o což jsme se pokoušeli. Opět nemusíme podmínku positivity vynucovat přímo, ale pomocí iteračního algoritmu, kde do minimalizace pomocí CVX přidáme člen $\beta\|D\mathbf{x}\|_2$.

2.1.5 Modely s poměry

Hlavním přínosem této práce je, že jsme se k předchozím modelům pokusili přidat informaci o poměrech jednotlivých druhů nuklidů nebo informaci o tom z jakého intervalu uvedené poměry jsou. Právě tuto obecnější informaci jsme zde použili. Takto definované modely by měli být podle naší úvahy přesnější, protože přidáváme fyzikální informaci o úniku.

$$\mathbf{x}^* = \arg \min_{\mathbf{x}} \{\|\mathbf{y} - \mathbf{M}\mathbf{x}\|_2^2 + \alpha\|\mathbf{x}\|_2 + \beta\|D\mathbf{x}\|_2\}, \text{ subject to } \mathbf{x} \geq 0, \quad a_{k,t} \leq \frac{x_{k,t}}{x_{m,t}} \leq b_{k,t}, \forall k, \forall j, \quad (2.13)$$

$a_{k,t}$ a $b_{k,t}$ jsou hranice zmíněného intervalu pro každý druh nuklidu a každý časový krok. Tato podmínka lze přidat i do iteračního algoritmu následujícím způsobem.

```

y, M,  $\alpha$ ,  $\beta$ 
B =  $I_n \alpha$ 
 $x_{neg} = 0$ 
 $x_{pos} = 0$ 
while  $x_{neg}/x_{pos} < 0.001$  or  $iter > 50$  do
    CVXbegin
     $\min \|\mathbf{y} - \mathbf{M}\mathbf{x}\|_2^2 + \mathbf{x}^T \mathbf{B}\mathbf{x} + \beta\|D\mathbf{x}\|_2$ 
    subject to  $a_{k,t} \leq \frac{x_{k,t}}{x_{m,t}} \leq b_{k,t}, \forall k, \forall j$ 
    CVXend
    for  $j = 1$  to  $n$  {
        if  $x(j) < 0$  then
             $x_{neg} = x_{neg} + \mathbf{x}(j)$ 
             $B(j, j) = 0.5B(j, j)$ 
        else
             $x_{pos} = x_{pos} + \mathbf{x}(j)$ 
             $B(j, j) = \min(1.1B(j, j), \alpha)$ 
        end
    end
end

```

Algoritmus 2: Iterační algoritmus s poměry z intervalu

Takto regularizovaný iterační algoritmus odhaduje zdrojový člen daleko lépe než Algoritmus 1 popsaný výše.

2.2 Bayesovské modely

2.2.1 Souvislost optimalizačního a Bayesovského přístupu

V této kapitole shrneme hlavní metody Bayesovského přístupu dle [13], pro detailnější popis odkazujeme čtenáře na [13] a reference v tomto článku uvedené.

Minimalizační problém optimalizačního přístupu se dá zapsat také jako: $\mathbf{x}^* = \arg \min_{\mathbf{x}} J$. Tento problém lze také vyjádřit jako maximální odhad ve smyslu následujícího pravděpodobnostního modelu:

$$P(\mathbf{y} | \mathbf{x}) = \mathcal{N}(\mathbf{M}\mathbf{x}, \sigma_0^2 I_p) \propto e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{M}\mathbf{x})^T \sigma_0^{-2}(\mathbf{y} - \mathbf{M}\mathbf{x})}, \quad (2.14)$$

$$P(\mathbf{x}) = \mathcal{N}(0, \text{diag}(\sigma_x^2)) \propto e^{-\frac{1}{2}\mathbf{x}^T \text{diag}(\sigma_x^{-2})\mathbf{x}}, \quad (2.15)$$

kde \mathcal{N} označuje Gaussovo, tedy normální pravděpodobnostní rozdělení s danou střední hodnotou a rozptylem. I_p označuje identickou matici $p \times p$ a symbol \propto představuje rovnost až po normalizační konstantu.

Zlogaritmováním podmíněné pravděpodobnosti $P(y | x)$ dostaneme výraz

$$\log P(\mathbf{y} | \mathbf{x}) = -\frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{M}\mathbf{x})^T \sigma_0^{-2}(\mathbf{y} - \mathbf{M}\mathbf{x}) + c, \quad (2.16)$$

kde c je konstanta nezávislá na \mathbf{x} . Vidíme, že tento výraz není nic jiného než $\log P(\mathbf{y} | \mathbf{x}) = -\frac{1}{2}J + c$ a že minimalizace funkce J při optimalizačním přístupu a maximalizace $\log P(\mathbf{y} | \mathbf{x})$ jsou ekvivalentní.

2.2.2 Bayesovská formulace lineárního inverzního problému

Při této formulaci předpokládáme, že informace o poměrech uniklých látek se dá zahrnout do kovarianční matice.

Nechť $\omega^{-1} = \sigma_0^2$. Poté

$$P(\mathbf{y} | \mathbf{x}, \omega) = \mathcal{N}(\mathbf{M}\mathbf{x}, \omega^{-1}I_p). \quad (2.17)$$

Parametr ω je považován za neznámý a tudíž se ho pokusíme odhadnout. Definujeme jeho pravděpodobnostní rozdělení jako $P(\omega) = \mathcal{G}(\vartheta_0, \rho_0)$, podobně jako [14]. ϑ_0, ρ_0 jsou konstanty, které doporučujeme nastavit jako 10^{-10} kvůli numerické stabilitě úlohy. \mathcal{G} označuje Gamma rozdělení.

Model je založen na speciální roli posledního podvektoru x_m vektoru \mathbf{x} . Tento podvektor je modelován nezávisle. Používáme předpoklad hladkosti a řidkosti.

$$P(x_{m,t} | x_{m-1,t}) = \mathcal{N}^{tr}(l_{m,t}x_{m,t-1}, \nu_t^{-1}, [0, \infty]), \quad (2.18)$$

$$P(l_{m,t} | \psi_{m,t}) = \mathcal{N}(l_0, \psi_{m,t}^{-1}) \quad (2.19)$$

$$P(\psi_{m,t}) = \mathcal{G}(\xi_0, \eta_0), t = 2, \dots, q, \quad (2.20)$$

$$P(\vartheta_t) = \mathcal{G}(\alpha_0, \beta_0), t = 1, \dots, q, \quad (2.21)$$

kde $l_{m,t}, \vartheta_t$ a $\psi_{m,t}$ jsou odhadnuty z dat. Jelikož $x_{m,t}$ závisí na $x_{m,t-1}$ vyhovuje rovnice (2.18) pouze pro $t = 2, \dots, q$ a pro $t = 1$ předpokládáme $P(x_{m,1}) = \mathcal{N}^{tr}(0, \vartheta_1^{-1}, [0, \infty])$.

\mathcal{N}^{tr} označuje zkrácené normální rozdělení definované na intervalu $[a, b]$ jako

$$\mathcal{N}^{tr}(\mu, \sigma, [a, b]) = \frac{\sqrt{2} \exp(-\frac{1}{2\sigma}(x - \mu)^2)}{\sqrt{\pi\sigma}(\text{erf}(\beta) - \text{erf}(\alpha))} \chi_{[a,b]}(x), \quad (2.22)$$

kde $\alpha = \frac{a-\mu}{\sqrt{2\sigma}}, \beta = \frac{b-\mu}{\sqrt{2\sigma}}$, funkce $\chi_{[a,b]}(x)$ je charakteristickou funkcí intervalu $[a, b]$ definovaná jako

$$\chi_{[a,b]}(x) = \begin{cases} 1 & \text{když } x \in [a, b], \\ 0 & \text{jinak,} \end{cases} \quad \text{a erf je chybová funkce definovaná jako } \text{erf}(t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^t e^{-u^2} du.$$

Momenty zkráceného normálního rozdělení jsou

$$\langle x \rangle = \mu - \sqrt{\sigma} \frac{\sqrt{2}[\exp(-\beta^2) - \exp(-\alpha^2)]}{\sqrt{\pi}(\text{erf}(\beta) - \text{erf}(\alpha))} \quad (2.23)$$

$$\langle x^2 \rangle = \sigma + \mu\hat{x} - \sqrt{\sigma} \frac{\sqrt{2}[b \exp(-\beta^2) - a \exp(-\alpha^2)]}{\sqrt{\pi}(\text{erf}(\beta) - \text{erf}(\alpha))} \quad (2.24)$$

Model v podstatě říká, že dva po sobě jdoucí prvky jsou vztaženy k sobě pomocí neznámého parametru l_m a známe pouze l_0 . Předpokládáme, že $l_0 = 1$ pro co nejhladší řešení a ξ_0, η_0 zvolíme jako 10^{-2} . Konstanty α_0 a β_0 zvolíme jako 10^{-10} . Zbývající podvektory vektoru \mathbf{x} namodelujeme pomocí lineárního modelu korelace. Vynásobením rovnice (2.8) výrazem $x_{m,t}$ dostaneme následující rovnici:

$$x_{k,t} = l_{k,t}x_{m,t}, \quad a_{k,t} < l_{k,t} < b_{k,t}, \quad (2.25)$$

kde $l_{k,t}$ je koeficient regrese. Abychom dovolili modelu nepřesnost zavedeme následující pravděpodobnostní model.

$$P(x_{k,t} | x_{m,t}) = \mathcal{N}^{tr}(l_{k,t}x_{m,t}, \vartheta_t^{-1}, [0, \infty]), \quad (2.26)$$

$$P(l_{k,t} | \psi_{k,t}) = \mathcal{N}^{tr}(0, \psi_{k,t}^{-1}, [a_{k,t}, b_{k,t}]), \quad (2.27)$$

$$P(\psi_{k,t}) = \mathcal{G}(\kappa_0, \nu_0), \quad (2.28)$$

pro $t = 1, \dots, q, k = 1, \dots, m - 1$, kde $l_{k,t}, \vartheta_t$ a $\Psi_{k,t}$ budou odhadnuty z dat. Konstanty κ_0, ν_0 opět doporučujeme zvolit jako 10^{-10} .

Spojením rovnic (2.18) a (2.26) můžeme zapsat model pomocí vektoru $\mathbf{x}, \mathbf{x} = [x_1^T, \dots, x_m^T]^T$.

$$P(\mathbf{x} | \Omega) = \mathcal{N}^{tr}(0, \Omega^{-1}, [0, \infty]), \quad (2.29)$$

kde Ω označuje matici přesnosti. Matice přesnosti má specifický tvar: $\Omega = L\Upsilon L^T$, kde L je dolní trojúhelníková matice s následující strukturou:

$$L = \left(\begin{array}{c|c|c|c|c} I_t & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & I_t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & I_t & 0 \\ \hline L_1 & L_2 & \cdots & L_{m-1} & L_m \end{array} \right),$$

kde submatice $L_k, k = 1, \dots, m - 1$, jsou složeny z neznámých koeficientů regrese takto:

$$L_k = \begin{pmatrix} -l_{k,1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -l_{k,2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -l_{k,q} \end{pmatrix}, k = 1, \dots, m - 1 \quad (2.30)$$

a submatice L_m vypadá takto:

$$L_m = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -l_{m,1} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & -l_{m,q-1} & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.31)$$

Matice Υ je diagonální s kladnými hodnotami na diagonále. Podobně jako v modelu matice L se snažíme matici Υ provázat s m -tým prvkem. Předpokládáme blokovou strukturu následujícím způsobem:

$$\Upsilon = \left(\begin{array}{c|c|c|c} \Upsilon_m & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Upsilon_m & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \Upsilon_m \end{array} \right), \quad (2.32)$$

kde Υ_m je diagonální matice dimenze q s diagonálou ν_1, \dots, ν_q .

2.2.3 Variační Bayesovské řešení

Neznámé parametry modelu se budeme snažit aproximovat pomocí variační Bayesovské metodologie [30], kde pravděpodobnostní rozdělení jsou předpokládána ve specifické formě podmíněné nezávislosti:

$$P(\mathbf{x}, v_t, l_{k,t}, \psi_{k,t}, \omega | \mathbf{y}) \approx P(\mathbf{x} | \mathbf{y})P(v_t | \mathbf{y})P(l_{k,t} | \mathbf{y})P(\psi_{k,t} | \mathbf{y})P(\omega | \mathbf{y}). \quad (2.33)$$

Nejlepší možná aproximace lze získat pomocí minimalizace Kullbackovi-Leiberovi divergence [31]. Tato minimalizace jednoznačně určuje tvar posteriorních rozdělení jako

$$\tilde{P}(\mathbf{x} | \mathbf{y}) = \mathcal{N}^{tr}(\mu_{\mathbf{x}}, \Sigma_{\mathbf{x}}, [0, +\infty]), \quad (2.34)$$

$$\tilde{P}(v_t | \mathbf{y}) = \mathcal{G}(\alpha_t, \beta_t), t = 1, \dots, q, \quad (2.35)$$

$$\tilde{P}(l_{m,t} | \mathbf{y}) = \mathcal{N}(\mu_{l_{m,t}}, \Sigma_{l_{m,t}}, t = 1, \dots, q-1, \quad (2.36)$$

$$\tilde{P}(\psi_{m,t} | \mathbf{y}) = \mathcal{G}(\xi_{m,t}, \eta_{m,t}), t = 1, \dots, q-1, \quad (2.37)$$

$$\tilde{P}(l_{k,t} | \mathbf{y}) = \mathcal{N}^{tr}(\mu_{l_{k,t}}, \Sigma_{l_{k,t}}, [a_{k,t}, b_{k,t}]), t = 1, \dots, q, \quad (2.38)$$

$$\tilde{P}(\psi_{k,t} | \mathbf{y}) = \mathcal{G}(\kappa_{k,t}, \nu_{k,t}), t = 1, \dots, q, \quad (2.39)$$

$$\tilde{P}(\omega | \mathbf{y}) = \mathcal{G}(\vartheta, \rho), \quad (2.40)$$

pro $k = 1, \dots, m-1$, kde tvarovací parametry $\mu_{\mathbf{x}}, \Sigma_{\mathbf{x}}, \alpha_t, \beta_t, \mu_{l_{m,t}}, \Sigma_{l_{m,t}}, \xi_{m,t}, \eta_{m,t}, \mu_{l_{k,t}}, \Sigma_{l_{k,t}}, \kappa_{k,t}, \nu_{k,t}, \vartheta, \rho$ jsou zavedeny následujícím způsobem:

$$\Sigma_{\mathbf{x}} = \left(\langle \omega \rangle \mathbf{M}^T \mathbf{M} + \langle L \Upsilon L^T \rangle \right)^{-1}, \quad (2.41)$$

$$\mu_{\mathbf{x}} = \Sigma_{\mathbf{x}} \left(\langle \omega \rangle \mathbf{M}^T \mathbf{y} \right), \quad (2.42)$$

$$\alpha = \alpha_0 + \frac{1}{2} \mathbf{1}_{q,1}, \quad (2.43)$$

$$\beta = \beta_0 + \frac{1}{2} \text{diag} \left(\langle L_m^T \mathbf{x}_m \mathbf{x}_m^T L_m \rangle + \frac{1}{\delta} \sum_{k=1}^{m-1} \langle L_k^T \mathbf{x}_k \mathbf{x}_k^T L_k \rangle \right), \quad (2.44)$$

$$\Sigma_{l_{m,t}} = \left(\langle v_{q(m-1)+t} \rangle \langle x_{q(m-1)+t} x_{q(m-1)+t} \rangle + \text{diag} \left(\langle \psi_{m,t} \rangle \right) \right)^{-1}, \quad (2.45)$$

$$\mu_{l_{m,t}} = \Sigma_{l_{m,t}} \left(\langle x_{q(m-1)+t+1} x_{q(m-1)+t} \rangle \times \langle v_{q(m-1)+t} \rangle + l_0 \text{diag} \left(\langle \psi_{m,t} \rangle \right) \right), \quad (2.46)$$

$$\xi_{m,t} = \xi_0 + \frac{1}{2}, t = 1, \dots, q-1, \quad (2.47)$$

$$\eta_{m,t} = \eta_0 + \frac{1}{2} \langle l_{m,t}^2 \rangle - l_0 \langle l_{m,t} \rangle + \frac{1}{2} l_0^2, \quad (2.48)$$

$$\Sigma_{l_{k,t}} = \left(\langle v_{q(k-1)+t} \rangle \langle x_{q(k-1)+t} x_{q(k-1)+t} \rangle + \text{diag} \left(\langle \psi_{k,t} \rangle \right) \right)^{-1}, \quad (2.49)$$

$$\mu_{l_{k,t}} = \Sigma_{l_{k,t}} \left(\langle v_{q(k-1)+t} \rangle \langle x_{q(k-1)+t} x_{q(m-1)+t} \rangle \right), \quad (2.50)$$

$$\kappa_{k,t} = \kappa_0 + \frac{1}{2}, t = 1, \dots, q, \quad (2.51)$$

$$\nu_{k,t} = \nu_0 + \frac{1}{2} \langle l_{k,t}^2 \rangle, k = 1, \dots, (m-1), \quad (2.52)$$

$$\vartheta = \vartheta_0 + \frac{P}{2}, \quad (2.53)$$

$$\rho = \rho_0 + \frac{1}{2} \text{tr}(\langle \mathbf{x}\mathbf{x}^T \rangle \mathbf{M}^T \mathbf{M}) - \mathbf{y}^T \mathbf{M} \langle \mathbf{x} \rangle + \frac{1}{2} \mathbf{y}^T \mathbf{y}. \quad (2.54)$$

Požadované momenty Gamma rozdělení jsou:

$$\langle \Upsilon \rangle = \text{diag}((\alpha \circ \beta^{-1}), \dots, (\alpha \circ \beta^{-1})), \quad (2.55)$$

$$\langle \psi_{m,t} \rangle = \frac{\xi_{m,t}}{\eta_{m,t}}, t = 1, \dots, q, \quad (2.56)$$

$$\langle \psi_{k,t} \rangle = \frac{\kappa_{k,t}}{\nu_{k,t}}, k = 1, \dots, m-1, t = 1, \dots, q \quad (2.57)$$

$$\langle \omega \rangle = \frac{\vartheta}{\rho}, \quad (2.58)$$

kde symbol \circ značí Hadamardův součin. Momenty tvořící L_m jsou spočteny následovně:

$$\langle l_{m,t} \rangle = \mu_{l_{m,t}}, \quad (2.59)$$

$$\langle l_{m,t}^2 \rangle = \mu_{l_{m,t}}^2 + \Sigma_{l_{m,t}}, \quad (2.60)$$

a momenty $\langle \mathbf{x} \rangle, \langle \mathbf{x}\mathbf{x}^T \rangle, \langle l_{k,t} \rangle, \langle l_{k,t}^2 \rangle, k = 1, \dots, m-1$, jsou spočteny v souladu se zkráceným normálním rozdělením (2.22).

Tvarovací parametry $\mu_{\mathbf{x}}, \Sigma_{\mathbf{x}}, \alpha_t, \beta_t, \mu_{l_{m,t}}, \Sigma_{l_{m,t}}, \xi_{m,t}, \eta_{m,t}, \mu_{l_{k,t}}, \Sigma_{l_{k,t}}, \kappa_{k,t}, \nu_{k,t}, \vartheta, \rho$ spolu se standardními momenty tvoří soustavu implicitních rovnic, které je třeba řešit iterativně. Pravděpodobnostní rozdělení, které se iterativně vyhodnocuje jako první je 2.34, kde $\langle L \rangle$ a $\langle \Upsilon \rangle$ nastavíme jako identické matice a $\langle \omega \rangle = \frac{1}{\max \mathbf{M}^T \mathbf{M}}$.

Kapitola 3

Experimenty

Veškeré experimenty byly provedeny v softwaru Matlab.

V této kapitole provedeme řadu experimentů s různými podmínkami a budeme se snažit ukázat, že zahrnutím znalosti o poměrech jednotlivých uniklých prvků do úlohy pro optimalizační formulaci má smysl. Očekáváme, že přidáním podmínky na poměry dosáhneme lepších výsledků než bez ní. O stejnou věc se pokusíme i pro bayesovskou formulaci problému.

3.0.1 Generování syntetických dat

Nejprve budeme používat syntetická data, která si vygenerujeme následujícím způsobem. Nejprve si zvolíme, jak bude vypadat zdrojový člen x_{true} . Aby se nám s ním lépe pracovalo, budeme mít tři konstantní úseky u nichž předpokládáme znalost poměru aktivit. Konkrétní volba byla taková to:

$$x_{true} = [0,5 \quad 0,5 \quad 0,5 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 0,1 \quad 0,1 \quad 0,1]^T. \quad (3.1)$$

Generování poté probíhá následovně:

$$y = Mx_{true} + e, \quad (3.2)$$

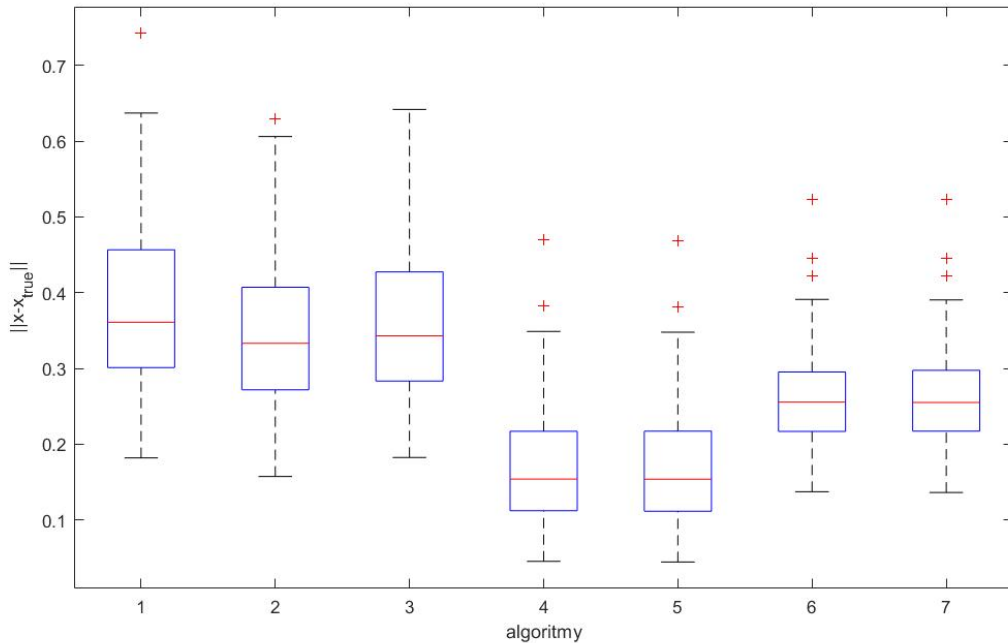
kde $e \in \mathbb{R}^{20 \times 1}$ má funkci šumu. Jedná se o vektor náhodně generovaných čísel z normálního rozdělení, který je vynásoben koeficientem 0,3. $M \in \mathbb{R}^{20 \times 9}$ je matice zdroj-receptorové senzitivity, která je opět složena z náhodně generovaných čísel z normálního rozdělení. V matici M jsme také vynulovali všechny prvky menší než 0,8 a druhý, sedmý a osmý sloupec jsme násobily koeficientem 0,001, abychom dosáhli špatné podmíněnosti matice. Tyto sloupce jsme zvolili, tak aby jeden odpovídal vždy jednomu druhu nuklidu. $y \in \mathbb{R}^{20 \times 1}$ reprezentuje vektor měření. Rovnici (3.2) jsme nechali proběhnout pro 100 různých šumů e a získali jsme tak sadu dat, složenou ze sta různých vektorů měření y se kterou jsme dále pracovali.

3.1 Optimalizace se syntetickými daty

V této sekci porovnáme 7 rozdílných modelů, které jsou variacemi na (2.12). Ve všech používáme podmínku řídkosti (2.4), které přiřazujeme váhu $\alpha = 10^{-2}$ a podmínku hladkosti (2.7), které přiřazujeme váhu $\beta = 10^{-1}$. Drobné změny těchto hodnot, případně změny intervalu, nemění nijak zásadně výsledky dosažené v této práci.

U všech modelů jsme posuzovali jejich výsledky na základě jejich rozdílu od skutečného zdrojového členu v Euklidovské normě. Tedy $\|x_{true} - x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^9 (x_{true_i} - x_i)^2}$. Tyto výsledky jsme si poté zobrazili

pomocí funkce boxplot. Boxplot je přehledný způsob zobrazení souboru dat. Červená čára označuje medián, spodní modrá označuje 25. percentil a vrchní modrá 75. percentil. Tyto tři čáry tvoří box, který nám ukazuje, kde se koncentruje většina dat. Spodní a vrchní černá jsou nejextrémnější data, neboli minimum a maximum. Červeným křížkem jsou označena data, která leží od jejich nejbližší modré čáry dále než 1,5 násobek vzdálenosti mezi modrými čarami, tedy 25. a 75. percentilem.



Obrázek 3.1: Optimalizace se syntetickými daty

V grafu 3.1 očísujeme námi použité algoritmy a vytvoříme zde seznam popisující jejich vlastnosti v rámci zachování přehlednosti.

- Algoritmus 1: bez podmínky positivity
- Algoritmus 2: s podmínkou pevné positivity
- Algoritmus 3: s podmínkou iterační positivity
- Algoritmus 4: s podmínkou pevné positivity a podmínkou pevných poměrů
- Algoritmus 5: s podmínkou iterační positivity a podmínkou pevných poměrů
- Algoritmus 6: s podmínkou pevné positivity a poměry z intervalu
- Algoritmus 7: s podmínkou iterační positivity a poměry z intervalu

Prvním modelem, který je označen jedničkou na ose y, je nejzákladnější model.

$$\mathbf{x}^* = \operatorname{argmin}_{\mathbf{x}} \{ \|\mathbf{y} - \mathbf{M}\mathbf{x}\|_2^2 + \alpha \|\mathbf{x}\|_2 + \beta \|D\mathbf{x}\|_2 \} \quad (3.3)$$

V tomto modelu jsme nepoužili podmínku positivity a můžeme si všimnout, že dopadl nejhůře.

Druhým a třetím modelem, které jsou označeny dvojkou a trojkou na ose y, jsou stejné modely jako (3.3) s tím rozdílem, že tentokrát jsme již použili podmínku positivity, kterou jsme u dvojky vynutili napevno, stejně jako u (2.12) a u trojky iterativně. Vidíme, že druhý dopadl o trochu lépe než třetí a že oba dva dopadly lépe než (3.3). Z toho si vyvozujeme, že předpoklad positivity rozhodně smysl má a projeví se ve výsledcích.

Čtvrtý a pátý model, které jsou označeny čtyřkou a pětkou, jsou modely, ve kterých jsme použili předpoklad o poměrech mezi jednotlivými nuklidy následujícím for cyklem.

```
for  $i = 1$  to 3 do
  |  $x(i) = \text{poměr1} \cdot x(i + 3)$ 
  |  $x(i) = \text{poměr2} \cdot x(i + 6)$ 
end
```

V našem případě byl $\text{poměr1} = 0,5$ a $\text{poměr2} = 5$. Čtvrtý model vynucoval pozitivitu pevně, zatímco pátý iterativně. Vidíme, že jejich výsledky jsou téměř identické, ale můžeme si povšimnout rozdílu mezi zbylými modely. Modely s pevnými poměry mezi jednotlivými nuklidy dopadly zdaleka nejlépe a můžeme říci, že přidání poměrů do inverzní úlohy způsobí zlepšení výsledků na syntetických datech.

Šestý a sedmý model, které jsou označeny šestkou a sedmičkou, jsou modely, kde jsme opět dodali informaci o poměrech mezi jednotlivými nuklidy, ale tentokrát je tato informace méně přesná. Pomocí následujícího for cyklu jsme stanovili, že poměr pochází z intervalu, jehož spodní hranice je o 30% menší než skutečný poměr a horní hranice je o 30% větší než skutečný poměr.

```
for  $i = 1$  to 3 do
  |  $0,7 \cdot \text{poměr1} \cdot x(i + 3) \leq x(i) \leq 1,3 \cdot \text{poměr1} \cdot x(i + 3)$ 
  |  $0,7 \cdot \text{poměr2} \cdot x(i + 6) \leq x(i) \leq 1,3 \cdot \text{poměr2} \cdot x(i + 6)$ 
end
```

Opět byl $\text{poměr1} = 0,5$ a $\text{poměr2} = 5$. Šestý model vynucoval pozitivitu pevně a sedmý iterativně. Znovu nevidíme valného rozdílu mezi těmito dvěma modely. Na výsledcích nicméně vidíme, že si modely vedly lépe, než modely 1, 2 a 3, ve kterých nebyla zahrnuta informace o poměrech a zároveň si vedly hůře než modely 4, 5, ve kterých jsme použily pevné poměry.

Ukázali jsme tedy, že zahrnutí informace o poměrech do minimalizační úlohy má smysl i kdyby tato informace nebyla přesná nýbrž pouze z nějakého intervalu. V tomto experimentu jsme si také opakovaně všimli, že při použití informace o poměrech, nebyl rozdíl mezi podmínkou positivity zahrnutou pevně nebo iterativně. Modely totiž dopadli velice podobně, takže budeme jejich rozdíl dále studovat a to v experimentu následujícím.

3.2 Porovnání optimalizačního a Bayesovského přístupu

V tomto experimentu budeme hledat rozdíl mezi algoritmy používající pevné pozitivitu a iterativní pozitivitu. Pro porovnání do něj také zahrneme variační Bayesovskou metodologii. Používáme referenční implementaci algoritmu z [13]. Používáme podmínku řídkosti (2.4), které přiřazujeme váhu $\alpha = 10^{-1}$ a podmínku hladkosti (2.7), které přiřazujeme váhu $\beta = 10^{-1}$. Model pevné positivity vypadá jako (2.13) a iterativní jako Algoritmus 2 z sekce 2.1.5.

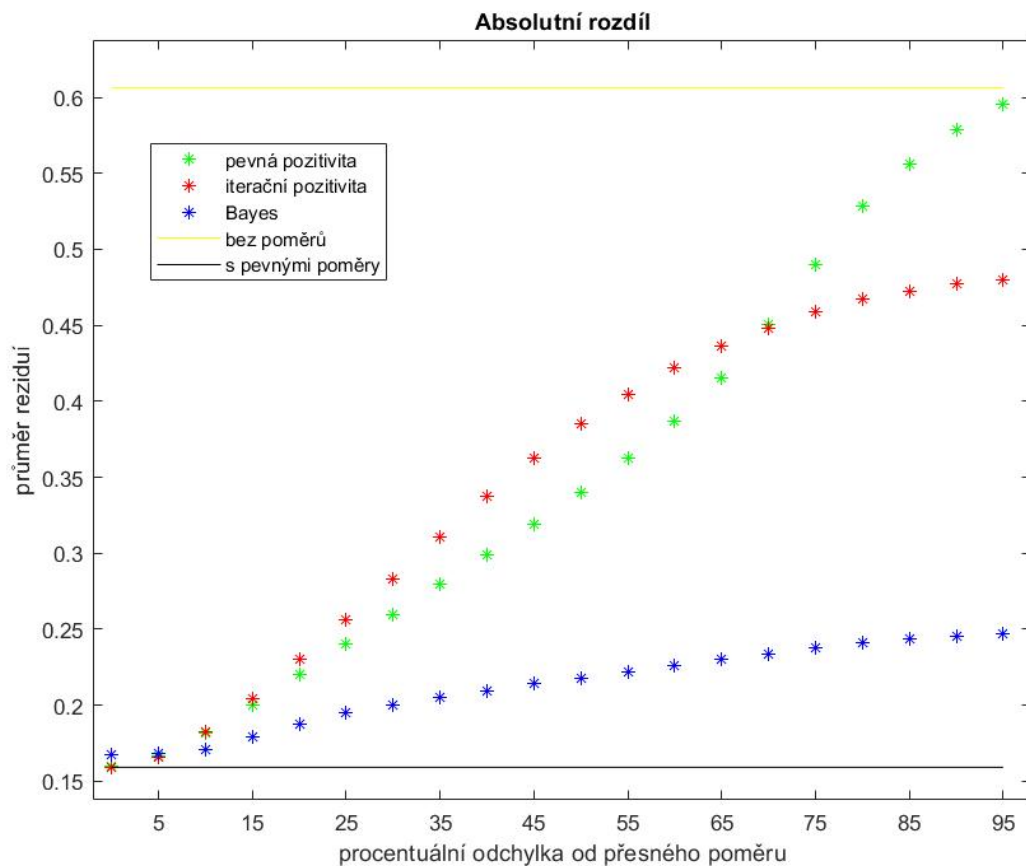
Tyto tři modely jsme opakovaně počítali pro různé intervaly. První propočítání je s pevným poměrem. V každém dalším jsme přidali (resp. ubrali) 5% k horní (resp. spodní) hranici intervalu, ze které byl poměr. Toto ilustruje následující for cyklus.

```

for  $j = 0$  to 19 do
  for  $i = 1$  to 3 do
     $(1 - ((j) \cdot 0.05)) \cdot \text{poměr1} \cdot x(i + 3) \leq x(i) \leq (1 + ((j) \cdot 0.05)) \cdot \text{poměr1} \cdot x(i + 3)$ 
     $(1 - ((j) \cdot 0.05)) \cdot \text{poměr2} \cdot x(i + 6) \leq x(i) \leq (1 + ((j) \cdot 0.05)) \cdot \text{poměr2} \cdot x(i + 6)$ 
  end
end

```

Výsledky jsme opět odčítali od skutečného zdrojového členu v normě, tedy $\|x_{true} - x\|$. Tyto výsledky jsme nezobrazovali pomocí boxplotu, ale jako prostý průměr, kvůli lepší přehlednosti.



Obrázek 3.2: Porovnání optimalizačního a Bayesovského přístupu pro syntetická data

Žlutá linie v grafu 3.2 je stejný model jako (2.13) bez jakékoliv informace o poměrech. Zařadili jsme ho do experimentu z důvodu přehlednosti. Uvidíme díky němu, zda je vždy model s poměry z intervalu lepší než ten bez něj a popřípadě při jakém prodloužení intervalu už není. Černá linie naopak představuje model s pevnými poměry.

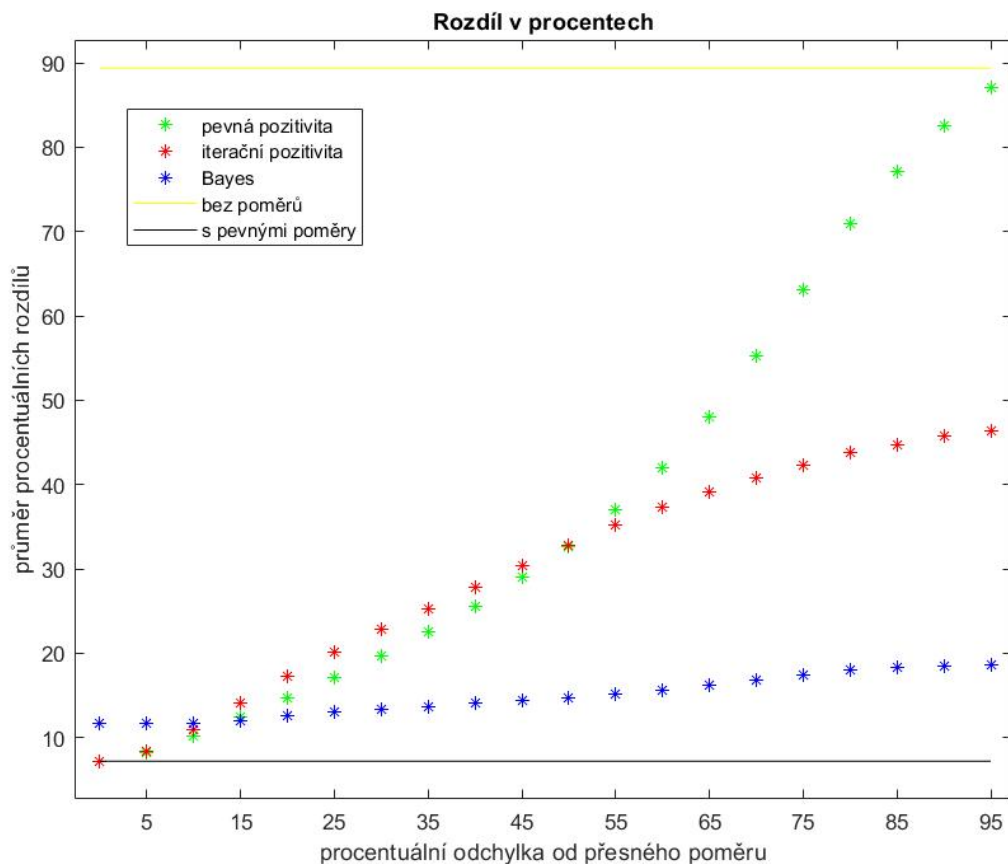
Na ose y vidíme průměrnou hodnotu sta rozdílů vypočítaných hodnot od skutečného zdrojového členu v normě. Na ose x vidíme procentuální odchylku od přesného poměru, kdy 0 odpovídá pevným poměrům. 5 odpovídá 5% prodloužení intervalu na obou stranách, 15 odpovídá 15% prodloužení atd.

Z grafu 3.2 jasně vidíme, že při pevných poměrech není rozdíl mezi pozitivitou vynucenou pevně a iterativně. Bayesovský model si vede hůře než předchozí dva a vede si hůře i při prvním roztažení o 5% na obou stranách intervalu. Od této chvíle už Bayesovský model jasně vítězí a stoupá pouze nepatrně. Při

roztážení o 95% na obou stranách intervalu dojde zhruba do čtvrtiny vzdálenosti mezi černou a žlutou linií.

Iterativní pozitivita a pevná pozitivita se nám jeví téměř totožně do prodloužení o 10%. Při prodloužení o 15% začne mít iterativní pozitivita viditelně horší výsledky než pevná pozitivita a to až do prodloužení o 70% na obou stranách intervalu, kdy začne mít lepší výsledky než pevná pozitivita. Graf pevné positivity od tohoto prodloužení stále poměrně prudce stoupá, ale nedosáhne žluté linie. To ovšem není automatická záležitost. Při pokusech s lépe podmíněnou maticí jsme zaznamenali překročení této linie jak pevnou tak iterační pozitivitou, což je velice zajímavé, protože původně jsme očekávali, že žádný z algoritmů tuto linii nepřekročí, protože jsme předpokládali, že model s nějakou informací navíc si povede lépe než ten bez této informace.

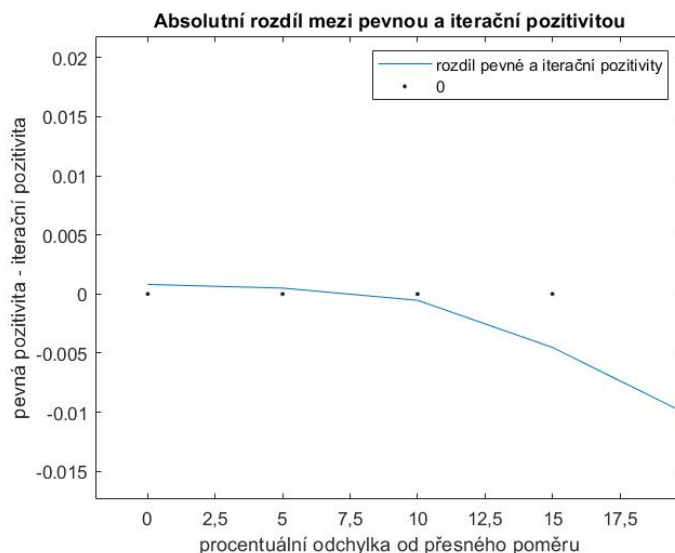
Z obavy, aby nějaká složka nalezeného vektoru x , příliš nedominovala a nezkreslovala tak výsledky, jsme se rozhodli provést stejný experiment ovšem s rozdílnou metodikou zaznamenávání výsledků. Tentokrát jsme podívali vždy na konkrétní prvek námi nalezeného vektoru a porovnali ho se skutečným zdrojovým vektorem a zaznamenali, jak se liší procentuálně. Toto jsme zaznamenali pro každý prvek výsledného vektoru a zprůměrovali. Dostali jsme tedy o kolik procent se průměrně lišil námi nalezený vektor od skutečného zdrojového členu. Odstranili jsme tak možnost, že by výsledky zkreslovala jedna dominantní složka. Výsledky si můžeme prohlédnout na grafu 3.3.



Obrázek 3.3: Procentuální rozdíl mezi optimalizací a Bayesovským algoritmem pro syntetická data

Vidíme na něm, že poměrně dobře kopíruje chování algoritmů z 3.2, až na drobné rozdíly, jako jsou místa, kdy začne některý z algoritmů vítězit nad druhým.

Abychom si mohli lépe prohlédnout rozdíl mezi pevnou a iterační pozitivitou do 2. prodloužení, rozhodli jsme se jejich výsledky od sebe odečíst. Výsledný graf vidíme v 3.4.



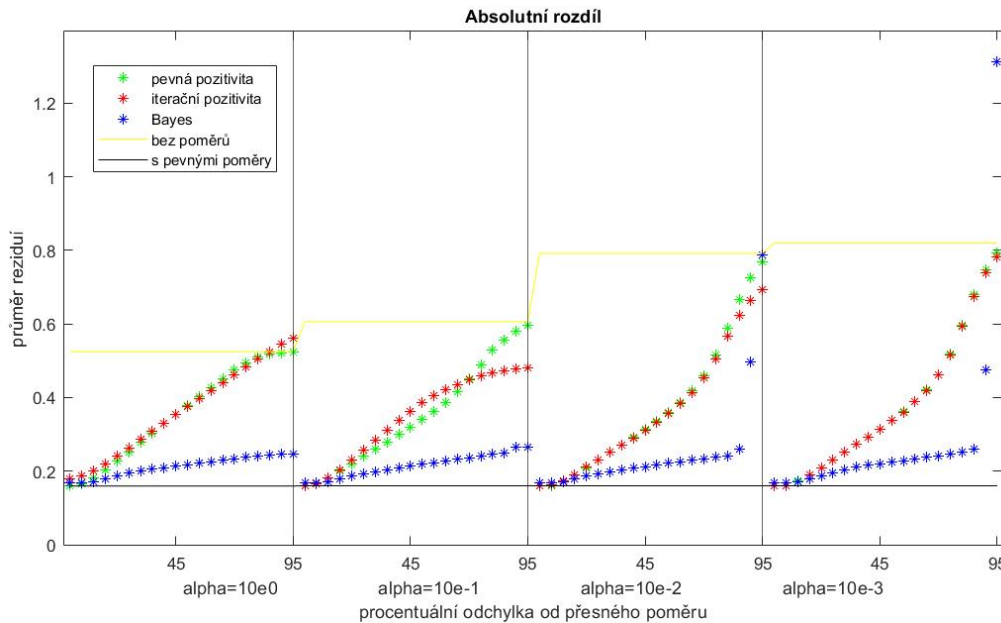
Obrázek 3.4: Rozdíl mezi pevnou a iterační pozitivitou

Z grafu 3.4 můžeme vyčíst, že při pevném poměru a prvním prodloužení je lepší pevná pozitivita a při 2. prodloužení je na tom lépe iterační algoritmus. Nalezli jsme tedy rozdíl mezi těmito dvěma přístupy. Proti iterativnímu přístupu mluví jeho pomalost. Jeho vypočtení trvalo násobně déle, jak oproti Bayesovskému přístupu, tak oproti algoritmu s pevnou pozitivitou. Naproti tomu je iterační přístup robustnější i pro velké intervaly, což může vykoupit jeho časovou náročnost.

3.3 Chování optimalizačního a Bayesovského přístupu pro různá α

Dále nás bude zajímat jestli se změní námi pozorované chování Bayesovského algoritmu a optimalizačních algoritmů s pevnou či iterační pozitivitou, při změně váhy α , kterou přikládáme Tichonovově regularizaci neboli řídkosti (2.4). Podmínce hladkosti přiřadíme váhu $\beta = 10^{-1}$, protože za takovéto volby β pro naše syntetická data, jsme dosahovali lepší přesnosti než pro jiné volby. Vyšší volby kladli moc velký důraz na hladkost, zatímco nižší moc malý.

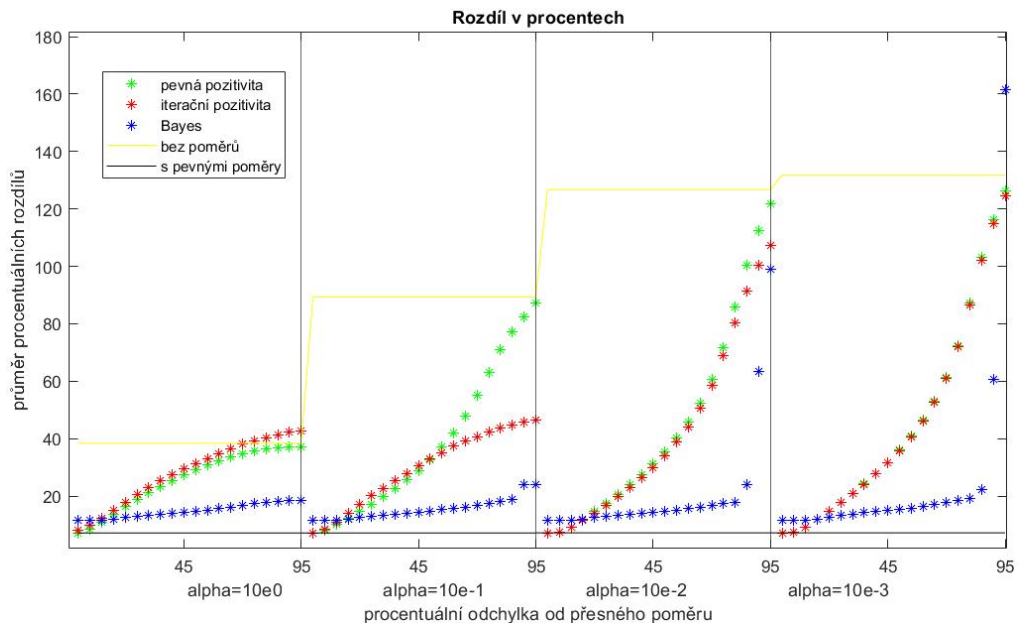
Naše modely budou stejné jako v předchozí sekci a budeme také používat stejné metody zaznamenávání výsledků. Totožné bude také prodlužování intervalů. Budeme zobrazovat výsledky pro různé α do stejného grafu. Žlutá a černá linie bude mít stejnou funkci jako v předchozí sekci a každá z nich bude propočítána pro konkrétní α , tudíž uvidíme několik skoků.



Obrázek 3.5: Porovnání optimalizačního a Bayesovského přístupu pro různá α a syntetická data

Na 3.5 pozorujeme čtveřici grafů zapracované do jednoho. První graf zleva počítal s $\alpha = 10^0$, druhý zleva s $\alpha = 10^{-1}$, třetí zleva s $\alpha = 10^{-2}$ a graf úplně vpravo s $\alpha = 10^{-3}$. Můžeme si povšimnout, že nejmenší průměr reziduí obecně nastal pro $\alpha = 10^0$ a $\alpha = 10^{-1}$, kdy iterační pozitivita se chová lépe pro $\alpha = 10^{-1}$, kde s prodlužováním intervalu začne zpomalovat svůj růst a končí s lepším výsledkem než pevná pozitivita a iterační pozitivita pro $\alpha = 10^0$, zatímco u pevné pozitivity je tento trend opačný. Pro $\alpha = 10^0$ zpomalí pevná pozitivita svůj růst těsně před koncem a pro $\alpha = 10^{-1}$ dopadne naopak hůře. U $\alpha = 10^{-2}$ pozorujeme u obou pozitivit prudší růst, kde ale vítězí iterační pozitivita, zatímco pro $\alpha = 10^{-3}$ se oba algoritmy drží na téměř totožných hodnotách.

Bayesovský algoritmus má výborné výsledky jak pro $\alpha = 10^0$, tak pro $\alpha = 10^{-1}$, kde pozorujeme pouze pozvolný nárůst s natahujícím se intervalem, ze kterého jsou poměry. Zajímavé ovšem je chování Bayesovského algoritmu pro $\alpha = 10^{-2}$ a $\alpha = 10^{-3}$, kde při posledních dvou prodlouženích o 90% a o 95% dojde k prudkému zhoršení výsledků. Náznak tohoto pozorujeme i u $\alpha = 10^{-1}$. U $\alpha = 10^{-2}$ se dostane na úroveň optimalizace s pevnou pozitivitou a u $\alpha = 10^{-3}$ dokonce ještě daleko výše. Překoná tak žlutou linii zobrazující výsledky bez poměrů skoro o dvojnásobek její hladiny pro $\alpha = 10^{-3}$. Zdá se, že se Bayesovský algoritmus dostal do nějakého lokálního optima, ze kterého se nedokázal vyprostit a přestává, tak být spolehlivý.



Obrázek 3.6: Procentuální rozdíl mezi optimalizací a Bayesovským algoritmem pro syntetická data a různá α

Abychom se ujistili, že výsledky nezakresluje jedna dominantní složka, rozhodli jsme se provést stejný experiment, při kterém ale zaznamenáváme průměrné procentuální odchylky od skutečného zdrojového členu, který vidíme zde 3.6. Jak vidíme, tak chování všech algoritmů poměrně pěkně odpovídá grafu 3.5. Je zde lépe vidět odskok posledních dvou výsledků Bayesovského algoritmu pro $\alpha = 10^{-1}$.

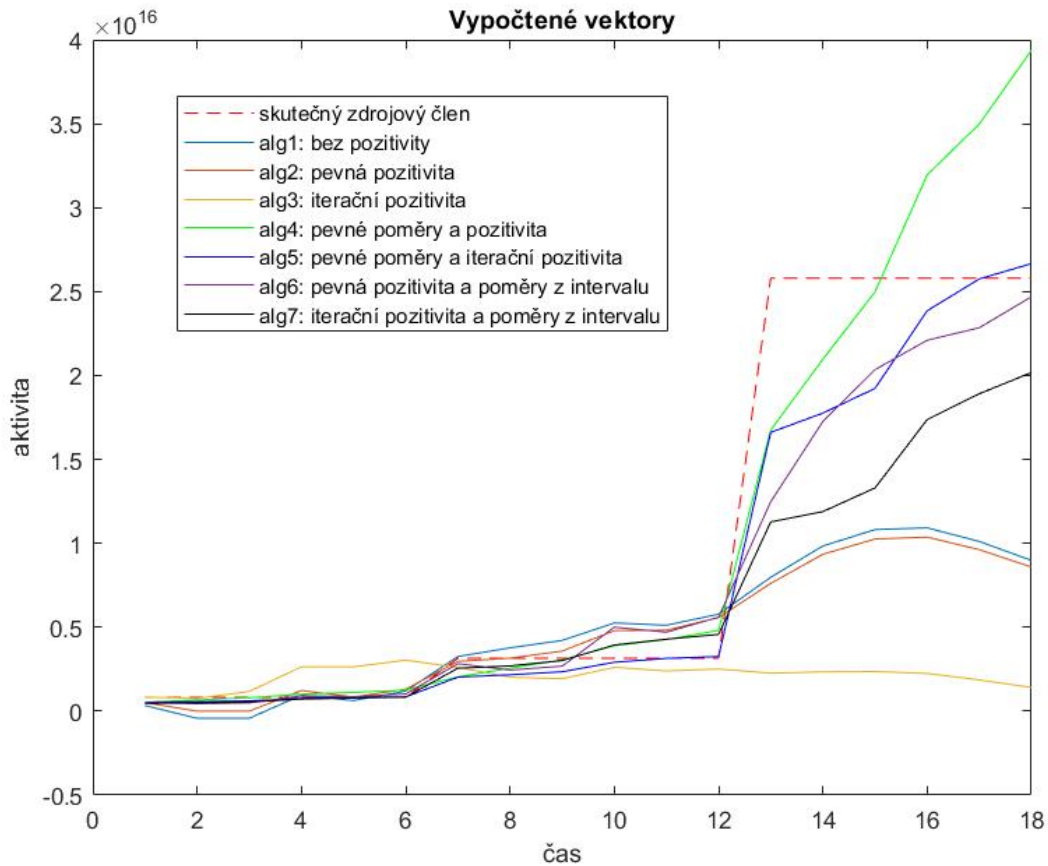
Zjistili jsme, že pro naše syntetická data lépe fungují větší hodnoty váhy pro řídkost (2.4). Také jsme si povšimli, že při natahování intervalů ze kterých bereme poměry jednotlivých nuklidů, se přesnost jednotlivých algoritmů může měnit a že každý funguje pro jiná prodloužení jinak přesně. Nyní se podíváme na realistická data.

3.4 Experiment s realistickými daty

Budeme používat data ze simulovaného úniku směsi radionuklidů z jaderné elektrárny. Tento únik byl složen z Cesia 137, Jódu 131 a Xenonu 133. Jako atmosférický transportní model byl použit Langrangovský částicový disperzní model FLEXPART, který byl řízen meteorologickými poli ECMWF Era-Interim s horizontálním rozlišením $0,5^\circ$ pro matici zdroj-receptorové senzitivity a $0,25^\circ$ pro vektor měření. Prostorové rozlišení modelu bylo přibližně 10×10 km. Tento hypotetický únik byl simulován z jaderné elektrárny Temelín. Jako síť receptorů uvažujeme rakouskou síť monitorující radiaci, skládající se z více než 300 receptorů. Ty poskytly data o gama dávkách z oblaku a depozici za hodinu. Senzory měřily pouze gama dávky a tudíž nebyly schopné rozlišit jednotlivé příspěvky radionuklidů. Separace nuklidů mohlo být dosaženo pouze z rozdílných poločasů rozpadu a rozdílných vlastností při atmosférickém transportu, které jsou reflektovány v zdroj-receptorové matici. Tyto efekty jsou ale velmi slabé a problém separace nuklidů je tak velmi špatně podmíněn.

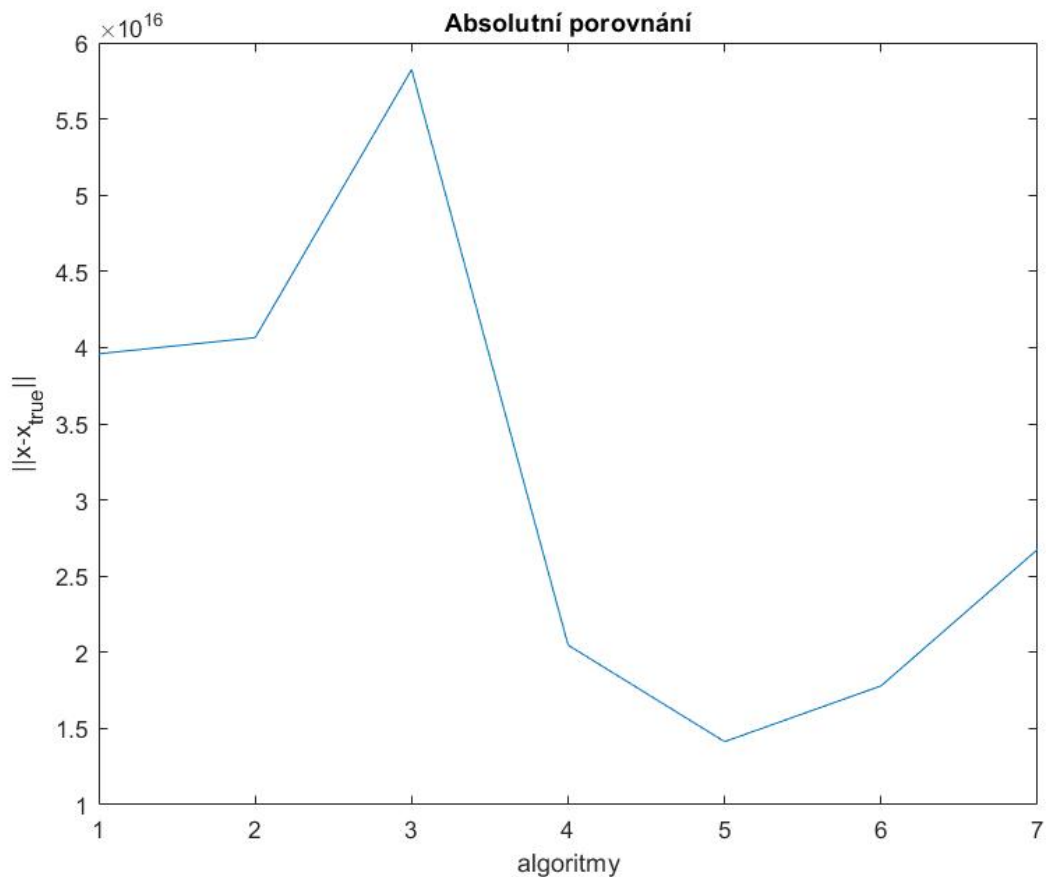
Experiment 3.1 nyní provedeme znovu, ale tentokrát s realistickými daty. Porovnáváme opět 7 rozdílných modelů, které jsou variacemi na (2.12). Podmínce řídkosti (2.4) přiřazujeme váhu $\alpha = 10^{-2}$ a podmínce hladkosti (2.7) přiřazujeme váhu $\beta = 10^{-1}$. První model je prost podmínky positivity, druhý

model ji obsahuje a jedná se o pevnou pozitivitu, třetí model pracuje s iterační pozitivitou. Čtvrtý a pátý model obsahují informaci o pevných poměrech a čtvrtý pracuje s pevnou pozitivitou, zatímco pátý model pracuje s iterační pozitivitou. Šestý a sedmý model pracují s poměry z intervalu, který vznikl podobně jako v 3.1. Takto očíslované budou také v 3.8



Obrázek 3.7: Výsledné zdrojové členy optimalizace pro realistická data

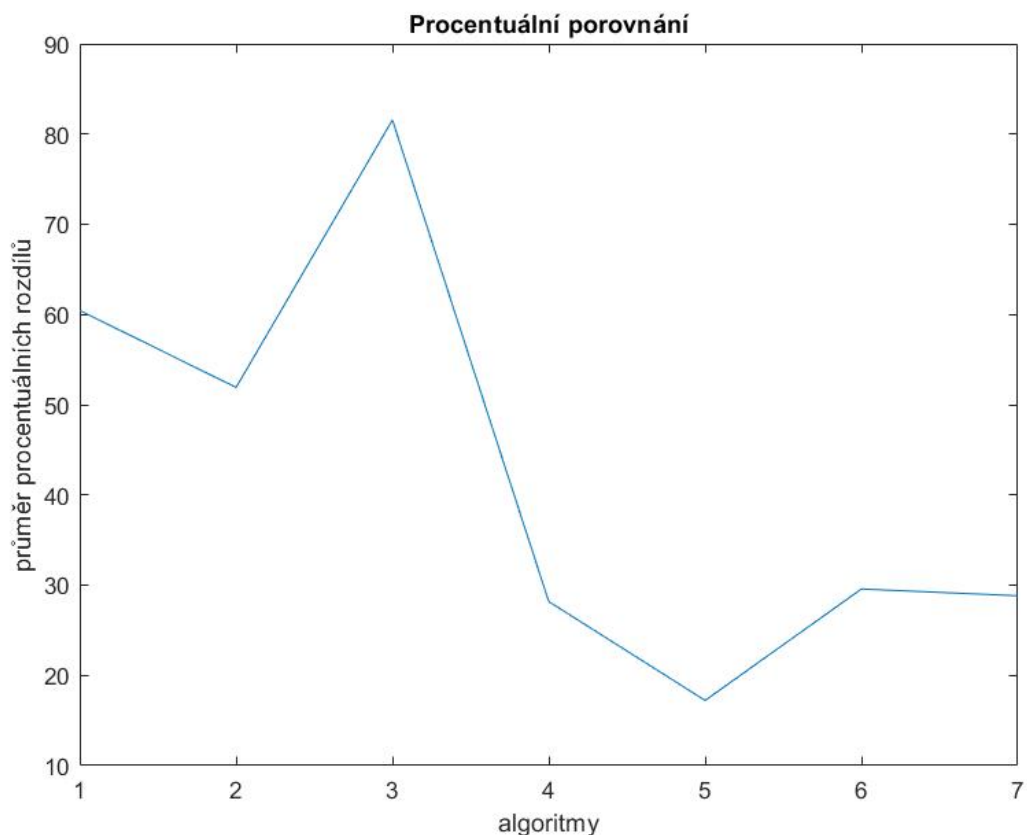
V grafu 3.7 vidíme výsledky jednotlivých modelů oproti skutečnému zdrojovému členu. Na první pohled můžeme říci, že nejhůře dopadl model s iterační pozitivitou bez informace o poměrech a také lze říci, že model bez pozitivity a s pevnou pozitivitou se od sebe příliš neliší. O moc více, ale z tohoto grafu nedostaneme, proto jsme se rozhodli sestavit graf, kde porovnáme rezidua jednotlivých modelů. Vidíme ho zde 3.8.



Obrázek 3.8: Optimalizační přístup pro realistická data

Z grafu je vidět, že model bez pozitivity a s pevnou pozitivitou jsou na velice podobné hodnotě. Třetí model s iterační pozitivitou je jasným poraženým v tomto porovnání. Čtvrtý model s pevnou pozitivitou a poměry a pátý model s iterační pozitivitou a pevnými poměry mají o dost lepší hodnoty oproti předchozím algoritmům. Výsledky pátého modelu jsou v absolutním porovnání nejlepší. Šestý a sedmý model mají celkem podobné hodnoty jako čtvrtý a pátý, a to i přes to, že jejich informace o poměrech uniklých látek byla z intervalu roztaženého o 30% na obou stranách.

V tomto grafu 3.8 je několik poměrně zvláštních výsledků. Za prvé si vede model bez pozitivity lépe než modely 2 a 3, které podmínku pozitivity obsahují. Dále má čtvrtý model s pevnými poměry a pozitivitou horší výsledek, než šestý model, který rovněž obsahuje pevnou pozitivitu, ale má méně kvalitní informaci o poměrech. Za účelem přesnější představy o chování algoritmů jsme provedli také procentuální porovnání, které vidíme na grafu 3.9.



Obrázek 3.9: Procentuální rozdíly optimalizačního přístupu pro realistická data

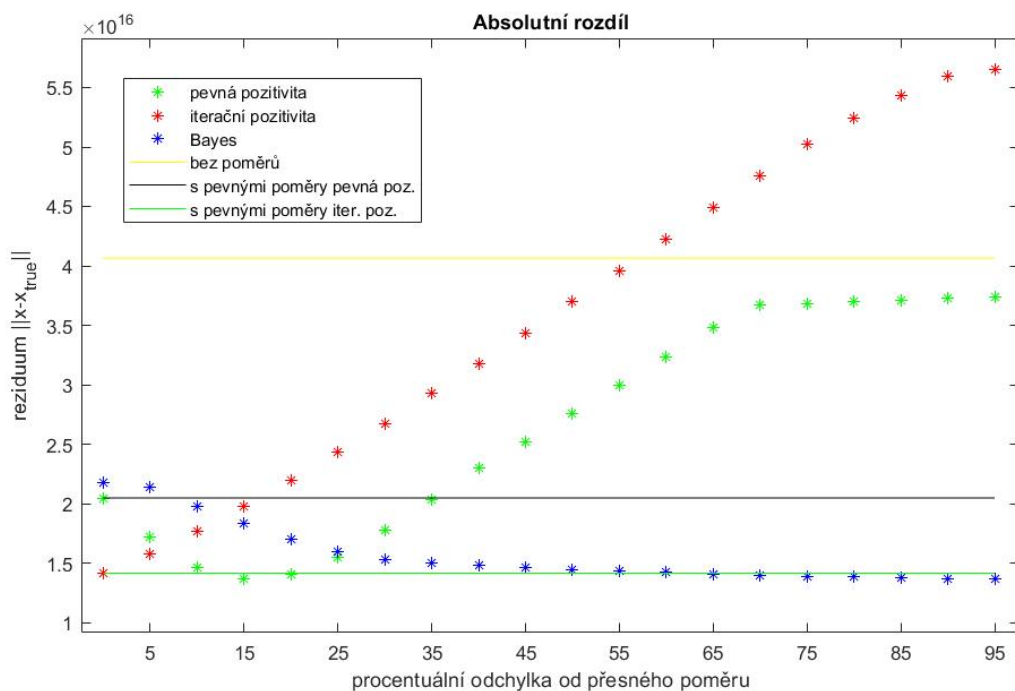
Z grafu procentuálního porovnání zjišťujeme, že některé zvláštní chování jednotlivých modelů viditelné na 3.8 lze vysvětlit dominancí některé ze složek výsledných vektorů. Povšimneme si, že druhý model má v procentuálním porovnání lepší výsledek než první, avšak třetí model s iterační pozitivitou má opět nejhorší výsledek. Čtvrtý algoritmus má lepší výsledek než modely 6 a 7 i když to téměř nelze postřehnout. Pátý algoritmus s pevnými poměry a iterační pozitivitou má i v procentuálním porovnání nejlepší výsledek. Šestý a sedmý model měli v absolutním porovnání poměrně rozdílné výsledky, ty jsou ale v procentuálním porovnání smazány.

3.5 Porovnání optimalizačního a Bayesovského přístupu pro realistická data

Dále budeme hledat rozdíly mezi algoritmy používající pevné a iterativní positivity a Bayesovským algoritmem. V podstatě provedeme stejný experiment jako v sekci 3.2 na realistických datech. Opět budeme používat podmínku hladkosti s vahou $\beta = 10^{-1}$ a podmínku řídkosti s vahou $\alpha = 10^{-1}$. Bayesovský algoritmus je referenční implementací algoritmu z [13]. Znovu budeme natahovat intervaly, ze kterých jsou poměry uniklých látek viz. 3.2 a pozorovat chování jednotlivých algoritmů.

V předchozích experimentech jsme používali žlutou a černou linii, které nám ukazovali výsledky z algoritmů, které buď obsahovali informaci o pevných poměrech nebo neměli žádnou informaci o těchto poměrech. Tyto algoritmy používali pevnou pozitivitu. Iterační jsme nezobrazovali, protože pro pevné

poměry byli výsledky téměř totožné, zatímco algoritmus bez informace o poměrech měl výsledky natolik špatné, že při jejich zobrazení nebylo v grafu nic vidět. Nyní zavedeme zelenou linii, která představuje právě algoritmus s pevnými poměry a iterační pozitivitou, jelikož pro realistická data má smysl ji zobrazit.

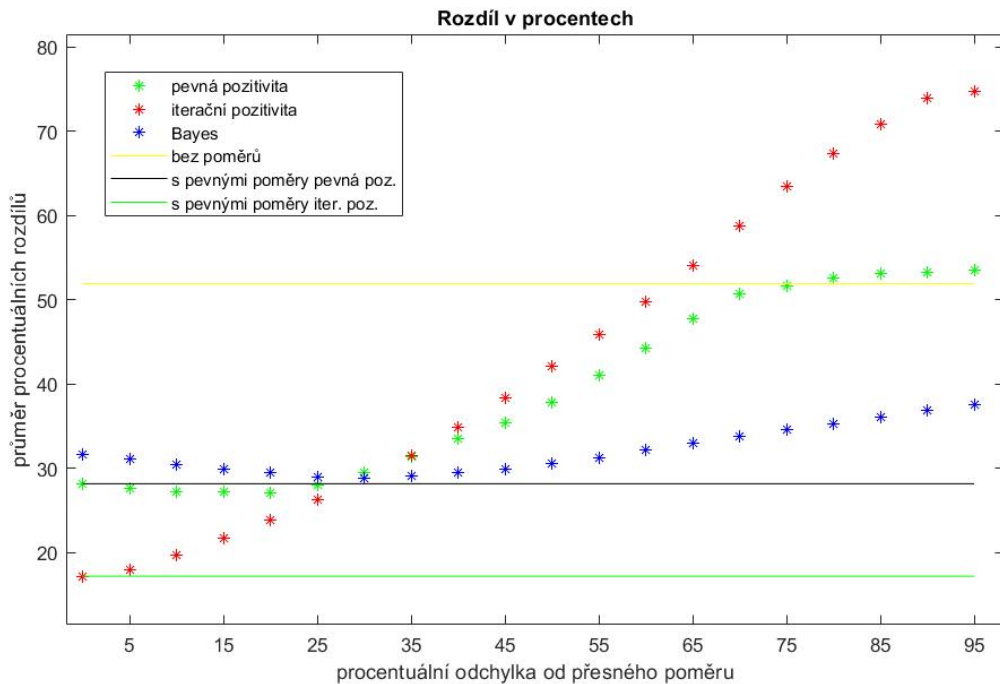


Obrázek 3.10: Porovnání optimalizačního a Bayesovského přístupu pro realistická data

V grafu 3.10 lze pozorovat, proč jsme se tak rozhodli. Graf iterační pozitivity začíná níže než graf pevné pozitivity, ale pouze do prvního prodloužení o 5%. Graf iterační pozitivity si drží stálý úhel stoupání a až při posledních třech prodlouženích začne svůj růst zpomalovat.

Graf pevné pozitivity se ovšem chová poměrně zvláštně. Pro pevné poměry má horší výsledky než pro prodloužené intervaly a to až do prodloužení o 30%. Do prodloužení o 15% klesá a od té doby už stoupá podobně rychle jako graf iterační pozitivity a to až do prodloužení o 70%, kdy se jeho růst výrazně zpomalí. Výsledek pro prodloužení hranic intervalu o 30% má lepší výsledek než algoritmus s pevnými poměry, což odpovídá výsledkům z 3.8, kde 6. a 7. model měli stejně prodloužený interval.

Chování Bayesovského algoritmu je na první pohled trochu zvláštní. Pro pevné poměry má nejhorší výsledek a od té doby se jeho výsledky pouze zlepšují navzdory horším informacím o poměrech. Je nutno si však uvědomit, že data obsahují šum, který přesné řešení s pevnými poměry vychýlí a pokud tedy dáme algoritmu větší flexibilitu, například možnost vybrat si z nějakého intervalu, může se dobat lepšího výsledku než s pevnými poměry. Nezapomínejme také, že jsme zobrazovali rezidua $\|x - x_{true}\|$, tudíž mohl být výsledek zkreslen dominantní složkou výsledného vektoru.



Obrázek 3.11: Procentuální rozdíl mezi optimalizací a Bayesovským algoritmem pro realistická data

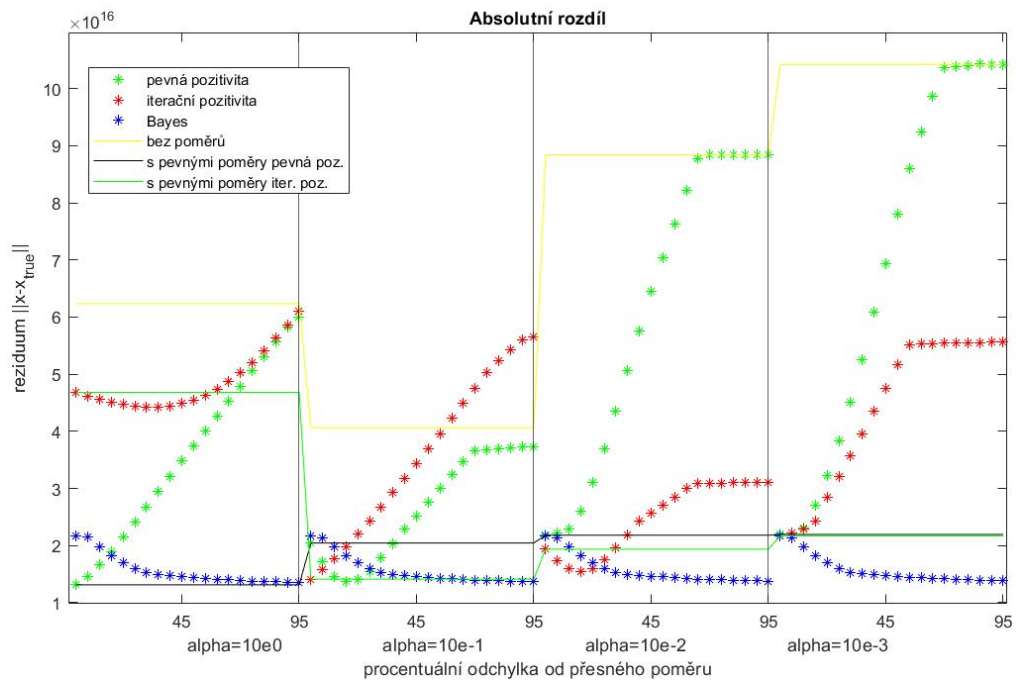
Graf 3.11 zobrazuje průměry procentuálních rozdílů mezi našimi výsledky a skutečným zdrojovým členem. Iterační pozitivita se chová stejně jako v 3.10 a nebudeme ji proto dále komentovat.

Graf pevné pozitivity naproti tomu vypadá daleko lépe, když pozorujeme průměr procentuálních rozdílů. Sice z počátku lehce klesá, ale drží se okolo úrovně černé linie a při prodloužení o 30% je již nad ní a stále roste. Od prodloužení o 75% se poté drží úrovně žluté linie, což by odpovídalo naší původní představě o tom, jak se budou algoritmy chovat za zhoršujících se podmínek.

Bayesovský algoritmus také vypadá lépe. Sice se do prodloužení o 35% klesá, ale zato je to velice pomalé klesání a od tohoto prodloužení už jenom roste a pro prodloužení o 95% má horší výsledky, než pro pevné poměry, což při zobrazování reziduí vidět nebylo.

3.6 Chování optimalizačního a Bayesovského přístupu pro různá α a realistická data

Stejně jako pro syntetická data budeme nyní pozorovat, jak se mění chování Bayesovského a optimalizačních algoritmů při změně váhy α pro podmínku řídkosti (2.4). Podmínce hladkosti přiřadíme váhu $\beta = 10^{-1}$, tedy stejnou jako při experimentu se syntetickými daty. Modely budou seřazeny stejně jako v sekci 3.3. Opět zde figuruje černá, žlutá a zelená linie viz. předchozí sekce.



Obrázek 3.12: Porovnání optimalizačního a Bayesovského přístupu pro různá α a realistická data

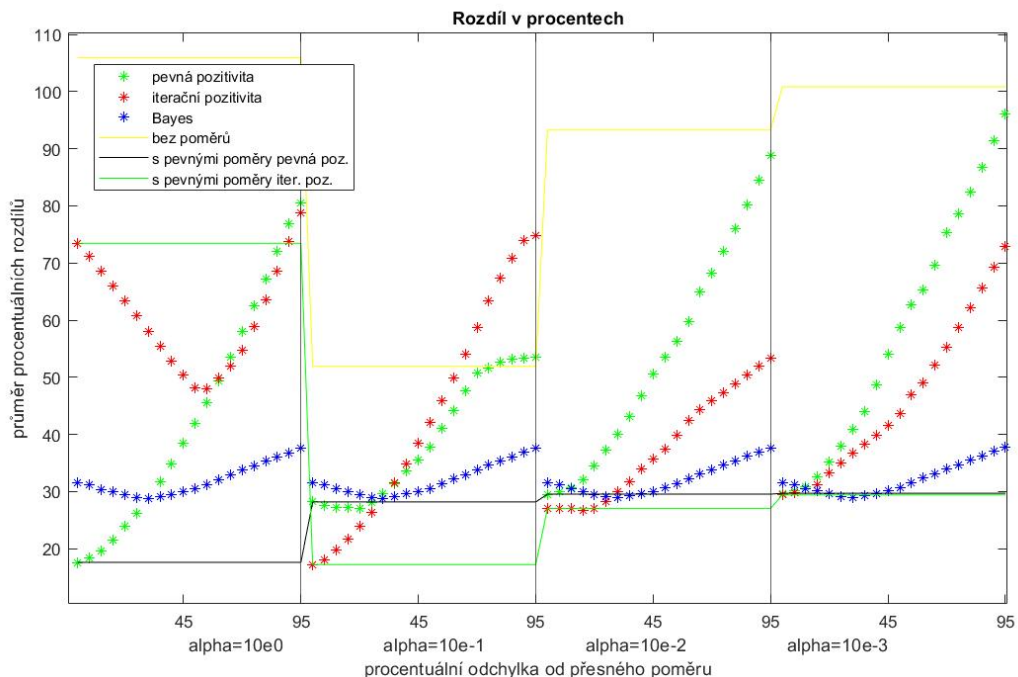
Z grafu 3.12 vidíme, že pro libovolné α dosahuje nejlepších výsledků právě Bayesovský algoritmus. Pro pevné poměry z něj dostaneme nejhorší výsledek. Poté se s roztahováním intervalu jeho rezidua stále zmenšují. Pro různé α u tohoto algoritmu nenastávají žádné výrazné změny, proto ho již nebudeme dále komentovat.

Pro $\alpha = 10^0$ (1. zleva) dosahuje algoritmus s pevnou pozitivitou daleko lepších výsledků než algoritmus s pozitivitou iterační. Pro první dvě prodloužení je lepší než Bayesovský algoritmus. Algoritmus s iterační pozitivitou má poměrně špatné výsledky hned z počátku, nicméně po jisté době se dostane na stejnou úroveň jako algoritmus s pevnou pozitivitou.

$\alpha = 10^{-1}$ (2. zleva) jsme popisovali v předchozí sekci. Pro $\alpha = 10^{-2}$ (3. zleva) dosahuje lepších výsledků model s iterační pozitivitou a je to jeho nejlepší výsledek ze všech voleb α . Pozorujeme u něj klesání pro prvních pár prodloužení, kterého jsme si mohli povšimnout i pro $\alpha = 10^0$. Po tomto úvodním klesání začne stoupat a od jistého prodloužení se drží na konstantní úrovni.

Algoritmus s pevnou pozitivitou je pro $\alpha = 10^{-2}$ a $\alpha = 10^{-3}$ (1. zprava) modelem s nejhoršími výsledky. Pro pevné poměry je jeho výsledek na podobné úrovni jako pro zbylé dva modely, avšak poté prudce roste než dosáhne žluté linie, kde začne být jeho průběh konstantní. Pro $\alpha = 10^{-3}$ (1. zprava) je průběh algoritmu s iterační pozitivitou podobný tomu s pevnou pozitivitou s tím rozdílem, že přestane růst dříve a má lepší výsledky.

Nyní se podíváme na procentuální rozdíly mezi jednotlivými algoritmy v grafu 3.13.



Obrázek 3.13: Procentuální rozdíl mezi optimalizací a Bayesovským algoritmem pro realistická data a různá α

Graf pro $\alpha = 10^{-1}$ (2. zleva) jsme komentovali v předchozí sekci a tudíž ho vynecháme. Bayesovský algoritmus má opět stejný průběh pro libovolnou volbu α . Z počátku klesá a od jistého prodloužení začíná růst.

V grafu 3.13 pro $\alpha = 10^0$ (1. zleva) vidíme podobné chování jako v 3.12. Pevná pozitivita je zpočátku daleko lepší, ale poté se dostane na stejnou úroveň jako iterační pozitivita. Iterační pozitivita má zpočátku špatné výsledky, které se do jistého prodloužení zlepšují a poté opět zhoršují. Zajímavé je, že dosahuje stejných výsledků pro pevné poměry i pro poměry z intervalu prodlouženého o 90% na obou stranách.

Pro $\alpha = 10^{-2}$ a $\alpha = 10^{-3}$ dosahuje lepších výsledků algoritmus s iterační pozitivitou. Ten je pro $\alpha = 10^{-2}$ konstantní a poté začíná růst. Algoritmus s pevnou pozitivitou pro $\alpha = 10^{-2}$ a $\alpha = 10^{-3}$ a algoritmus pro iterační pozitivitu pro $\alpha = 10^{-3}$ začínají na poměrně dobrých výsledcích a od té chvíle se už pouze zhoršují.

Závěr

Pomocí lineárního inverzního modelu a kombinováním atmosférického transportního modelu a naměřených dat jsme se snažili, co nejpřesněji určit zdrojový člen. Úloha byla kvůli neurčitostem velice špatně podmíněná a standardní postupy jako například metoda nejmenších čtverců pro ni selhávaly. Tyto překážky jsme se snažili odstranit regularizací úlohy, tzn. přidáním různých podmínek a dodatečných informací jako například informací o poměrech jednotlivých nuklidů ve zdrojovém členu. Kombinovali jsme v této problematice používané přístupy s různými regularizacemi a testovali chování jednotlivých algoritmů. Také jsme vytvořili nový přístup k této problematice, jímž je iterační optimalizační přístup s informací o poměrech jednotlivých radionuklidů.

Provedli jsme experiment, při kterém jsme aplikovali různé přístupy na sadu syntetických a realistických (takzvaný twin experiment) dat. Optimalizační algoritmy byly citlivé na volbu jednotlivých parametrů a při jejich změně se výsledky mohly podstatně měnit, nicméně obecně si algoritmy s pevnou a iterační pozitivitou si vedly lépe pro pevné poměry, zatímco pro rozvolněnější poměry dominoval Bayesovský algoritmus. Algoritmus s iterační pozitivitou bez informace o poměrech měl poměrně špatné výsledky a byl výpočetně náročný, avšak s přidanou informací o poměrech dosahoval většinou lepších výsledků než algoritmus s pevnou pozitivitou a to hlavně pro realistická data.

Dalším logickým směrem, kterým bychom se mohli ubírat je aplikace těchto přístupů na reálná data. Při aplikaci na reálná data by tedy bylo pro volbu algoritmu zásadní, jakou informaci o poměrech bychom měli k dispozici. Také by bylo potřeba najít vhodnou kombinaci vah jednotlivých regularizačních členů, která by nám poskytovala nejlepší výsledky.

Literatura

- [1] Yasunari, T.J., Stohl, A., Hayano, R.S., Burkhart, J.F., Eckhardt, S., Yasunari, T. *Cesium-137 deposition and contamination of Japanese soils due to the Fukushima nuclear accident*, Proc. Natl. Acad. Sci. 108 (49) (2011) 19530–19534.
- [2] Nisbet, E. and Weiss, R. (2010) *Top-down versus bottom-up*. Science, 328(5983), 1241–1243.
- [3] Becker, J., Preusser, T., Rumpf, M.: *PDE methods in flow simulation post processing*. Computing and Visualization in Science, 3(3):159-167, 2000.
- [4] Leelőssy, Á., Lagzi, I., Kovács, A. and Mészáros, R. (2018) *A review of numerical models to predict the atmospheric dispersion of radionuclides*. Journal of environmental radioactivity, 182, 20–33.
- [5] Seibert, P. and Frank, A. (2004) *Source-receptor matrix calculation with a Lagrangian particle dispersion model in backward mode*. Atmospheric Chemistry and Physics, 4(1), 51–63.
- [6] Baklanov, A., Schlünzen, K., Suppan, P., Baldasano, J., Brunner, D., Aksoyoglu, S., Carmichael, G., Douros, J., Flemming, J., Forkel, R., Galmarini, S., Gauss, M., Grell, G., Hirtl, M., Joffre, S., Jorba, O., Kaas, E., Kaasik, M., Kallos, G., Kong, X., Korsholm, U., Kurganskiy, A., Kushta, J., Lohmann, U., Mahura, A., Manders-Groot, A., Maurizi, A., Moussiopoulos, N., Rao, S.T., Savage, N., Seigneur, C., Sokhi, R.S., Solazzo, E., Solomos, S., Sørensen, B., Tsegas, G., Vignati, E., Vogel, B., Zhang, Y., 2014. *Online coupled regional meteorology chemistry models in Europe: current status and prospects*. Atmos. Chem. Phys. 14, 317–398. <http://dx.doi.org/10.5194/acp-14-317-2014>.
- [7] Stockie, J.M., 2011. *The mathematics of atmospheric dispersion modeling*. SIAM Rev. 53, 349–372. <http://dx.doi.org/10.1137/10080991X>.
- [8] Collett, R.S., Oduyemi, K., 1997. *Air quality modelling: a technical review of mathematical approaches*. Mater. Apps 4, 235–246. <http://dx.doi.org/10.1017/S1350482797000455>.
- [9] Neroda, A.S., Mishukov, V.F., Goryachev, V.A., Simonenkov, D.V., Goncharova, A.A., 2014. *Radioactive isotopes in atmospheric aerosols over Russia and the sea of Japan following nuclear accident at Fukushima nr. 1 daiichi nuclear power station in March 2011*. Environ. Sci. Pollut. Res. 21, 5669–5677. <http://dx.doi.org/10.1007/s11356-013-2472-5>.
- [10] Seibert, P.: *Inverse modelling of sulfur emissions in Europe based on trajectories*, In: Inverse Methods in: Global Biogeochemical Cycles, edited by: Kasibhatla, P., Heimann, M., Rayner, P., Mahowald, N., Prinn, R. G., and Hartley, D. E., 147–154, Geophysical Monograph 114, American Geophysical Union, ISBN 0-87590-097-6, 2000.
- [11] Saunier, O., Mathieu, A., Didier, D., Tombette, M., Quélo, D., Winiarek, V. and Bocquet, M. (2013) *An inverse modeling method to assess the source term of the Fukushima nuclear power plant accident using gamma dose rate observations*. Atmospheric Chemistry and Physics, 13(22), 11403–11421.

- [12] Grant, M. and Boyd, S. (2014) *CVX: Matlab software for disciplined convex programming*. version 2.1. <http://cvxr.com/cvx>.
- [13] Tichý O, Šmídl V, Hofman R, Evangeliou N. *Source term estimation of multi-specie atmospheric release of radiation from gamma dose rates*. Q J R Meteorol Soc. 2018;1–17. <https://doi.org/10.1002/qj.3403>
- [14] Winiarek, V., Vira, J., Bocquet, M., Sofiev, M. and Saunier, O. (2011) *Towards the operational estimation of a radiological plume using data assimilation after a radiological accidental atmospheric release*. Atmospheric environment, 45(17), 2944–2955.
- [15] Hutchinson, M., Oh, H., Chen, W.H. *A review of source term estimation methods for atmospheric dispersion events using static or mobile sensors* Information Fusion 36 (2017) 130–148
- [16] Singh, S.K., Rani, R., *A least-squares inversion technique for identification of a point release: application to fusion field trials* 2007, Atmos. Environ. 92 (2014) 104–117 .
- [17] Zheng, X., Chen, Z. *Back-calculation of the strength and location of hazardous materials releases using the pattern search method*, J. Hazard. Mater. 183 (1) (2010) 474–481 .
- [18] Thomson, L.C., Hirst, B., Gibson, G., Gillespie, S., Jonathan, P., Skeldon, K.D., Padgett, M.J. *An improved algorithm for locating a gas source using inverse methods*, Atmos. Environ. 41 (6) (2007) 1128–1134 .
- [19] Allen, C.T., Haupt, S.E., Young, G.S. *Source characterization with a genetic algorithm-coupled dispersion-backward model incorporating scipuff*, J. Appl. Meteor. Climatol. 46 (3) (2007) 273–287
- [20] Issartel, J.P. *Rebuilding sources of linear tracers after atmospheric concentration measurements*, Atmos. Chem. Phys. 3 (2003) 2111–2125 .
- [21] Broyden, C.G. *The convergence of a class of doublerank minimization algorithms: 2. the new algorithm*, IMA J. Appl. Math. 6 (3) (1970) 222–231, doi: 10. 1093/imamat/6.3.222 . URL: <http://imamat.oxfordjournals.org/content/6/3/222>. abstract .
- [22] Shanno, D.F. *Conditioning of quasi-Newton methods for function minimization*, Math. Comput. 24 (111) (1970) 647–656 .
- [23] Davidon, W.C. *Variable metric method for minimization*, SIAM J. Optim. 1 (1) (1991) 1–17 .
- [24] Kirkpatrick, S. *Optimization by simulated annealing: quantitative studies*, J. Stat. Phys. 34 (5–6) (1984) 975–986 .
- [25] Gilks, W.R. *Markov Chain Monte Carlo*, Wiley Online Library, 2005 .
- [26] Metropolis, N., Rosenbluth, A.W., Rosenbluth, M.N., Teller, A.H., Teller, E. (1953) *Equation of state calculations by fast computing machines*, J. Chem. Phys. 21 (6) 1087–1092 .
- [27] Doucet, A., De Freitas, N., Gordon, N. (2001) *An introduction to sequential Monte Carlo methods*, in: *Sequential Monte Carlo Methods in Practice*, Springer, pp. 3–14 .
- [28] Robins, P., Rapley, V., Green, N. (2009) *Realtime sequential inference of static parameters with expensive likelihood calculations*, J. R. Stat. Soc. 58 (5) 641–662 .
- [29] Wiener, N. *The homogeneous chaos*, Am. J. Math. 60 (4) (1938) 897–936 .

- [30] Šmíd, V., Quinn, A. (2006) *The Variational Bayes Method in Signal Processing*. Springer.
- [31] Kullback, S., Leibler, R. (1951) *On information and sufficiency*. Annals of Mathematical Statistics, 22(1), 79–86.
- [32] Eckhardt, S., Prata, A.J., Seibert, P., Stebel, K., Stohl, A., (2008) *Estimation of the vertical profile of sulfur dioxide injection into the atmosphere by a volcanic eruption using satellite column measurements and inverse transport modeling*, Atmospheric Chemistry and Physics 8, 14 , pp. 3881–3897.
- [33] Katata, G., Ota, M., Terada, H., Chino, M., Nagai, H. (2012) *Atmospheric discharge and dispersion of radionuclides during the Fukushima Dai-ichi nuclear power plant accident. Part I: Source term estimation and local-scale atmospheric dispersion in early phase of the accident*, Journal of Environmental Radioactivity, 109, 103–113
- [34] Hansen, P. Ch., O’Leary, D. P. (1993) *The use of the L-curve in the regularization of discrete ill-posed problems* SIAM J. Sci. Comput., 14(6), 1487–1503
- [35] Browne, M. W. (2000) *Cross-Validation Methods*, Journal of Mathematical Psychology, 0022-2496, <https://doi.org/10.1006/jmps.1999.1279>,