PREDPOVEĎ MAXIMÁLNYCH KONCENTRÁCIÍ PRÍZEMNÉHO OZÓNU PRE VYBRANÉ STANICE NA SLOVENSKU POMOCOU NEURÓNOVÝCH SIETÍ
FORECAST OF MAXIMAL SURFACE OZONE CONCENTRATIONS FOR SELECTED STATIONS IN SLOVAKIA USING NEURAL NETWORKS

Kremler Martin

Univerzita Komenského v Bratislave

Abstract

Surface ozone is one of the most serious problems of the regional air pollution over Europe. At present the most of European countries are developing European system for forecasting of ozone episodes and real-time data exchange. Methodology for forecasting of the daily maximum surface ozone concentrations using simple artificial neural network and first preliminary results for six Slovak stations are presented in the paper. Data from the period 1992 – 2001 were used. Two inputs (maximum daily air temperatures and maximum daily ozone concentrations of the previous day) entered to neural network models. Uncertainties of the models results range from 4,97 to 6,73 ppb. The models don't forecast high values of ozone concentrations satisfyingly on some stations.

Key words: surface ozone, forecast, neural network

Úvod

V troposfére sa nachádza asi 10% z celkového množstva ozónu. Troposférický (prízemný) ozón má vo vyšších koncentráciách nepriaznivé účinky na ľudské zdravie i vegetáciu, preto sa na rozdiel od stratosférického radí ku škodlivinám. V posledných desaťročiach jeho koncentrácie značne vzrástli na celej severnej pologuli, čím sa stal jedným z najvýznamnejších problémov regionálneho znečistenia ovzdušia. Je mu preto venovaná značná pozornosť.

Pod vedením Európskej agentúry pre životné prostredie sa rozvíja európsky systém krátkodobej predpovede ozónových epizód (obdobia s vysokými koncentráciami ozónu) a výmeny dát v reálnom čase. Do iniciatívy sa zapojili mnohé štáty Európy, no Slovensko zatiaľ nie. Koncentrácie ozónu sú ovplyvňované prekurzormi (oxidy dusíka, oxid uhoľnatý, metán a iné) a meteorologickými podmienkami.

Predpovede koncentrácií prízemného ozónu sú založené na empirických, štatistických a kauzálnych modeloch (ich súčasťou je aj chemický model) alebo na ich kombinácii. V štatistických modeloch je predpoveď vytvorená z aktuálne nameraných hodnôt koncentrácií ozónu v kombinácii so štatistickou informáciou o najpravdepodobnejšom vývoji koncentrácií pri predpovedaných meteorologických podmienkach. Štatistická informácia sa získava z databázy meraní z niekoľkých rokov. K týmto modelom patria jednoduché regresné modely,

modely založené na klasifikačných stromoch, modely založené na Kalmanových filtroch a modely na báze umelých neurónových sietí. Práve umelé neurónové siete majú schopnosť samoučenia sa v zmysle toho, že vedia optimalizovať predpovede na základe predchádzajúcich skúseností.

Umelá neurónová sieť je sústava umelých neurónov, ktoré napodobňujú činnosť skutočných živočíšnych neurónov (Gurney, 1996). Do neurónu vstupujú signály viacerými dráhami s rôznou vodivosťou. Dráhy sú očíslované indexom i (1, 2, ... N). Vodivosť je zohľadnená váhou w_i, priradenou ku každej dráhe. Signál x_i, vstupujúci do dráhy, sa teda po prechode ňou zmení na $w_i x_i$. Takto zmenené signály vstupujú do neurónu, ktorý ich spočíta

$$a = w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_N x_N \qquad (1)$$

Tejto sume sa hovorí aktivácia. Neurón má istý prah citlivosti Θ. Keď aktivácia je vyššia ako tento prah, neurón ďalšou dráhou vyšle von signál, v opačnom prípade signál nevyšle. Toto sa v umelom neuróne deje pomocou tzv. aktivačnej funkcie, ktorá má približne tvar schodu. Vhodnou aktivačnou funkciou je sigmoida, výstupný signál y má potom tvar

$$y = f(a - \Theta) = \frac{1}{1 + e^{-(a-\Theta)}} \qquad (2)$$

Viacero neurónov navzájom pospájaných dráhami tvorí neurónovú sieť. Príklad takejto siete je na obrázku 1. Neuróny sú v nej rozčlenené do troch vrstiev: vstupnej, skrytej a výstupnej. Vo vstupnej vrstve je presne toľko neurónov, koľko je vstupných veličín. Vstupné neuróny majú za úlohu len odosielať dráhami nezmenené vstupné hodnoty ku skrytým neurónom. Tie sú už „plnohodnotnými“ neurónmi, pracujú presne ako, bolo popísané vyššie a signály po „spracovaní“ posielajú do poslednej – výstupnej vrstvy. Výstupné neuróny sa líšia od skrytých len tým, že prahy citlivostí majú stále rovné nule. Ak by sme mali N vstupných, M skrytých a 1 výstupný neurón, váhy dráh medzi vstupnými a skrytými neurónmi by sme označili w_{ij}, prahy citlivostí skrytých neurónov θ_j a váhy dráh medzi skrytými a výstupným neurónom W_j, výstup z neurónovej siete by sme mohli zapísať ako

$$y = f\left[\sum_{j=1}^{M} W_j f\left(\sum_{i=1}^{N} w_{ij} x_i - \theta_j\right)\right] \qquad (3)$$

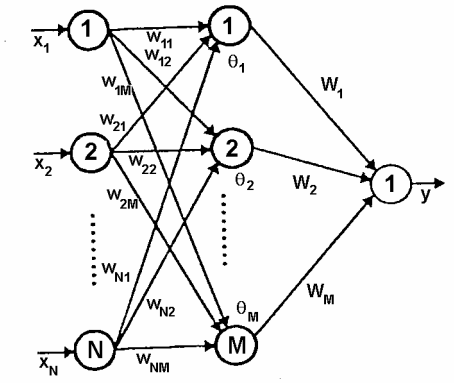
kde f je aktivačná funkcia a je ňou sigmoida (podobne ako pri 1 neuróne).

Aby bola sieť schopná niečo riešiť, musí najprv prejsť procesom učenia alebo tréningu. Vtedy sa jej predkladajú vzory (N-tica vstupov spolu so želaným správnym riešením). Sieť sa snaží nastaviť si hodnoty váh a prahov tak, aby jej výstupy boli čo najbližšie k želaným.

Najvhodnejší počet skrytých neurónov sa nedá dopredu určiť, preto sa musí postaviť niekoľko modelov líšiacich sa práve počtom skrytých neurónov. Všetky siete sa potom trénujú na rovnakej skupine vzorov. Po tréningu, keď už majú siete zafixované hodnoty váh a prahov, sa

preskúšajú na testovacej skupine vzorov, s ktorou sa počas učenia nestretli. Sieť, ktorá najlepšie obstojí, sa potom používa na riešenie ostrých úloh.

V práci (Valach a Kremler, 2003) boli po prvýkrát na Slovensku použité k predpovedi maximálnych koncentrácií prízemného ozónu neurónové modely. Predpoveď bola pre stanicu Prievidza. V tomto príspevku sú prezentované prvé výsledky pre ďalšie slovenské stanice.



Obrázok 1 Neurónová sieť s N vstupnými, M skrytými a jedným výstupným neurónom

Údaje a metodika

V práci boli použité údaje z obdobia 1992-2001 zo 6 staníc merajúcich koncentrácie prízemného ozónu: Starej Lesnej, Chopku, Kojšovej hole, Topoľníkov, Bratislavy Koliby a Petržalky. Snahou bolo vybrať rôzne typy staníc, čo do nadmorskej výšky (sú medzi nimi zastúpené horské, podhorské, nížinné stanice) i čo do miery znečistenia ovzdušia v danej oblasti (typicky mestské, prímestské, vidiecke a pozaďové) a overiť na nich možnosť predpovede maximálnych koncentrácií prízemného ozónu pomocou neurónových sietí.

Do modelov vstupovali hodnoty maximálnych denných teplôt vzduchu z daného dňa a maximálne denné koncentrácie ozónu z predchádzajúceho dňa. Modely mali teda dva vstupné a jeden výstupný neurón.

Nakoľko neurónová sieť potrebuje mať hodnoty vstupov z intervalu (0, 1), museli byť zvlášť teploty aj koncentrácie pretransformované pomocou sigmoidy. Jej tvar bol volený tak, aby hodnoty medzi dolným a horným kvartilom ležali po transformácii medzi 0,25 a 0,75.

Pre každú stanicu sa testovalo viacero modelov líšiacich sa počtom skrytých neurónov (1-22) a v každom z nich bolo potrebné nájsť optimálny počet učiacich cyklov (počas jedného cyklu prejde model raz všetky tréningové vzory). Týchto cyklov muselo byť rádovo stovky až tisíce, kým sieť dokázala predpovedať koncentrácie ozónu s dostatočnou presnosťou. Preto bol proces hľadania optimálneho neurónového modelu pre každú stanicu dosť náročný na strojový čas.

Nakoľko niektoré stanice nemerali ozón počas celého spomínaného obdobia a na všetkých sa vyskytli rôzne dlhé výpadky v meraniach, celkové počty vzorov - dni s oboma vstupnými údajmi aj želaným výstupom (maximálna koncentrácia ozónu v danom dni) pre jednotlivé stanice sa dosť líšia, ako vidno z tabuľky 1. Tiež sú v nej aj počty vzorov pre tréning sietí, testovanie a výber najvhodnejšej a nakoniec počet vzorov na vyhodnotenie chyby najlepšieho modelu spolu s počtom jeho skrytých neurónov a výslednou chybou.

Tabuľka 1 Počty vzorov na jednotlivých staniciach (cp – celkový počet, tren – počet vzorov použitých na tréning modelov, test – počet testovacích vzorov, pred – počet vzorov na vyhodnotenie chyby najlepšieho predpovedného modelu), počty skrytých neurónov (M) výsledných modelov a ich pravdepodobné chyby v ppb

Stanica	cp	tren	test	pred	M	chyba
Bratislava - Koliba	1946	1200	400	346	6	+/- 6,73
Bratislava - Petržalka	3390	2300	390	700	7	+/- 6,31
Chopok	1675	1000	340	335	2	+/- 5,84
Kojšova hoľa	699	400	150	149	4	+/- 4,97
Stará Lesná	3276	2203	357	716	6	+/- 5,82
Topoľníky	2029	1300	385	344	2	+/- 5,47

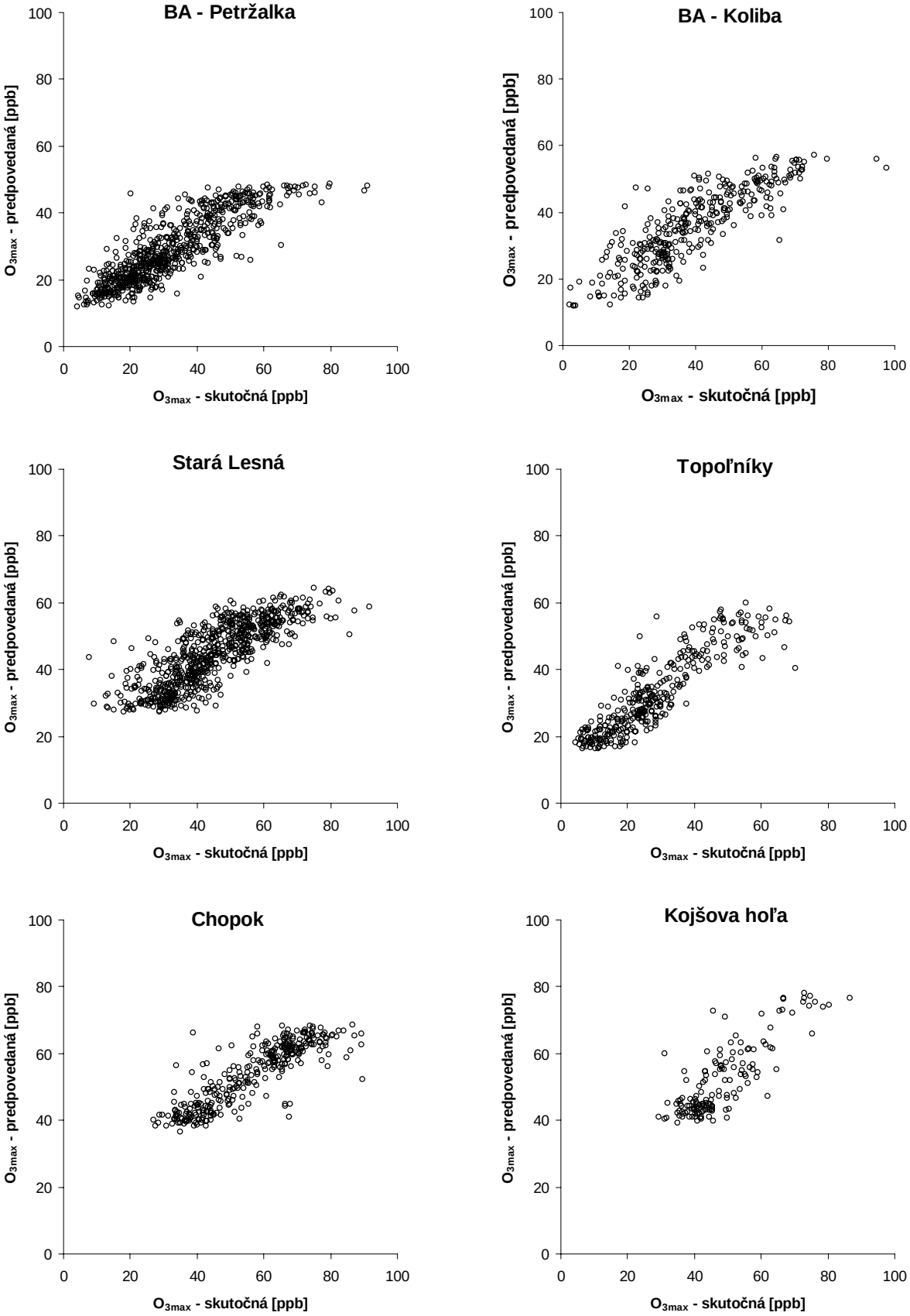
Výsledky a diskusia

Pravdepodobné chyby výsledných predpovedných neurónových modelov sa na jednotlivých staniciach pohybujú od 4,97 (Kojšova hoľa) do 6,73 ppb (Bratislava – Koliba). Porovnateľnú chybu (5,76 ppb) mal aj model s dvoma vstupmi v Prievidzi (Valach a Kremler, 2003).

Na obrázku 2 sú pre všetkých 6 grafy, v ktorých sú porovnané skutočné a modelmi predpovedané maximálne koncentrácie ozónu. Aj keď pravdepodobné chyby modelov nie sú veľké, z grafov je vidno, že na niektorých staniciach modely neuspokojivo predpovedajú vysoké alebo nízke hodnoty koncentrácií (vysoké sú podhodnocované a nízke nadhodnocované). Ako najhorší sa javí model pre Bratislavu Petržalku, ktorý ani raz nepredpovedal hodnotu vyššiu ako 50 ppb, pričom skutočné presiahli aj úroveň 90 ppb.

Kvôli tejto skutočnosti nebol pre Petržalku na tretej skupine vzorov vyskúšaný len jeden víťazný model, ale viacero s rôznymi počtami skrytých neurónov, či s niektorým iným nebudú dosiahnuté lepšie výsledky. No tvar grafu (rozloženie predpovedaných voči skutočným hodnotám) bol pri všetkých modeloch skoro rovnaký. Počet skrytých neurónov od 2 do 12 teda ovplyvňuje úspešnosť modelu (aspoň pri Petržalke) len málo. Neuvažujeme samozrejme modely s jedným skrytým neurónom, tie mali oproti ostatným oveľa vyššie chyby a z grafov bolo zrejmé, že nedokážu riešiť tento typ úloh.

Nie dobrá predpoveď nízkych a vysokých koncentrácií možno súvisí so spôsobom transformácie údajov pomocou sigmoidy. Bude potrebné otestovať, či zmena jej tvaru



Obrázok 2 Grafy porovnávajúce modelmi predpovedané maximálne koncentrácie O_3 so skutočnými

ovplyvní rozloženie bodov v grafe. Prípadne by sa mohla na transformáciu vstupov vyskúšať aj iná funkcia.

Odhliadnuc od extrémnych hodnôt, tieto prvé výsledky podporujú tvrdenie, že neurónové modely sa do budúcnosti javia ako vhodný nástroj na predpoveď maximálnych koncentrácií prízemného ozónu. V ďalšej etape by bolo dobré vyskúšať modely, do ktorých by vstupovali viaceré meteorologické prvky ovplyvňujúce koncentrácie ozónu a tiež testovať rôzne kombinácie týchto vstupov. Lepšie výsledky by mohli dať modely, ak by sme sa sústredili len na letné obdobia, kedy koncentrácie dosahujú vyššie hodnoty.

Poďakovanie

Práca bola vypracovaná v rámci projektu VEGA 1/1043/04. Autor ďakuje grantovej agentúre VEGA za podporu výskumu.

Súhrn

Prízemný ozón je jedným z najvážnejších problémov znečistenia ovzdušia nad Európou. V súčasnosti sú mnohé európske krajiny zapojené do programu vyvíjajúceho európsky systém na výmenu ozónových údajov v reálnom čase a predpoveď ozónových epizód. V príspevku je prezentovaná metodika predpovede maximálnych denných koncentrácií prízemného ozónu pomocou jednoduchej umelej neurónovej siete a prvé predbežné výsledky pre šesť slovenských staníc. V práci boli použité údaje z obdobia 1992 – 2001. Do neurónových modelov vstupovali dva vstupy: maximálna denná teplota vzduchu a maximálna denná koncentrácia prízemného ozónu z predchádzajúceho dňa. Pravdepodobné chyby modelových výstupov sa pohybovali od 4,97 do 6,73 ppb. Na niektorých staniciach modely neuspokojivo predpovedajú vysoké hodnoty koncentrácií.

Kľúčové slová: prízemný ozón, predpoveď, neurónová sieť

Literatúra

Gurney K. (1996), An Introduction to Neural Networks. UCL Press, London.

Valach F. (2002), Umelá neurónová sieť - príklad použitia. Zb. ref. 16. Celoštátny slnečný seminár v Turčianskych Tepliciach, pp. 287-292.

Valach, F. - Kremler, M., 2003: Koncentrácie prízemného ozónu modelované neurónovou sieťou. In: Bioklimatologické pracovné dni 2003, Račkova dolina.

Kontaktná adresa: RNDr. Martin Kremler, Oddelenie meteorológie a klimatológie, Katedra astronómie, fyziky Zeme, a meteorológie FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava, tel.: 02/602 95 216, e-mail: kremler@fmph.uniba.sk