

LINEÁRNA TRANSFORMÁCIA VSTUPNÝCH ÚDAJOV PRI PREDPOVEDI MAXIMÁLNYCH KONCENTRÁCIÍ PRÍZEMNÉHO OZÓNU POMOCOU NEURÓNOVÝCH SIETÍ

Martin Kremler

Summary

Surface ozone is one of the most serious problems of the regional air pollution over Europe. At present most of the European countries are involved in developing a European system for the forecasting of ozone episodes and real-time data exchange. The methodology for forecasting of the daily maximum surface ozone concentrations using simple artificial neural network and results for six Slovak stations are presented in the paper. First results showed that the model forecast of high concentrations was not satisfactory at some stations. Therefore six various linear transformations of input data (the maximum daily air temperature and the maximum daily ozone concentration of the previous day) are tested. Data from the period 1992 – 2001 were used. Lower uncertainties of the results have the neural models with linear transformations of input data than the models with transformations using sigmoide.

Key words: surface ozone, forecast, neural network

Abstrakt

Prízemný ozón je jedným z najväznejších 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 výsledky pre šesť slovenských staníc. Nakoľko prvé výsledky na niektorých staniaciach neboli uspokojivé pri predpovedi vysokých koncentrácií, v práci boli otestované viaceré lineárne transformácie vstupných údajov (maximálna denná teplota vzduchu a maximálna denná koncentrácia prízemného ozónu z predchádzajúceho dňa). Použité údaje boli z obdobia 1992 – 2001. Neurónové modely s lineárnou transformáciou vstupov majú oproti modelom s transformáciou vstupov pomocou sigmoidy nižšie hodnoty výsledných pravdepodobných chýb.

Kľúčové slová: prízemný ozón, predpoveď, neurónová sieť

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 koncentraciami ozónu) a výmeny dát v reálnom čase. Do iniciatívy sa zapojili mnohé štáty Európy, no Slovensko zatiaľ nie. Koncentrácie ozónu sú ovplyvňo-

vané koncentraciami prekurzorov (oxidy dusíka, oxid uhoľnatý, metán a iné), meteorologickými podmienkami a transportom ozónu a jeho prekurzorov v regionálnom i globálnom meradle.

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 Kal-

manových filtroch a modely na báze umelých neuronových sietí. Práve umelé neuronové siete majú schopnosť samoučenia sa v zmysle toho, že vedú optimalizovať predpovede na základe predchádzajúcich skúseností.

Umelá neuronová 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

$$a = w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_N x_N \quad (1)$$

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

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

Viacero neurónov navzájom pospájaných dráhami tvorí neuronovú sieť. Neuróny sú v nej často 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 neuronovej siete by sme mohli zapísať ako

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

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 neuronové modely. Predpoveď bola pre stanicu Prievidza. Prvé výsledky pre ďalších 6 slovenských staníc (Kremler, 2004) poukázali na to, že použité neuronové modely (s transformáciou vstupných údajov pomocou sigmoidy) nedokážu uspokojivo predpovedať vysoké koncentrácie ozónu. Bolo teda potrebné nejakým spôsobom modifikovať tieto modely. V tejto práci sú prezentované výsledky neuronových modelov so 6 rôznymi lineárnymi transformáciami vstupov pre rovnakých 6 staníc.

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 pozad'ové) a overiť na nich možnosti vylepšenia predpovede maximálnych koncentrácií prízemného ozónu pomocou neuronových 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. Jeden

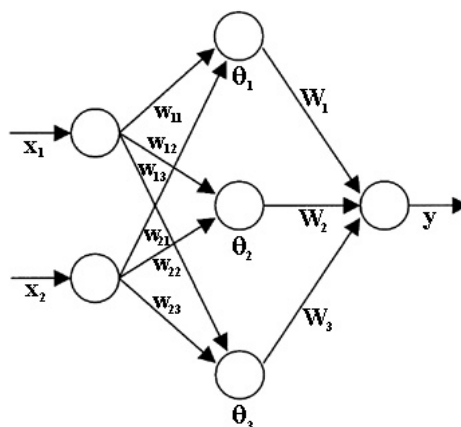
z použitých neurónových modelov (s tromi skrytými neurónmi) je na obrázku 1.

Nakoľko neurónová sieť potrebuje mať hodnoty vstupov z intervalu (0, 1), museli byť zvlášť teploty aj koncentrácie lineárne pretransformované. Použilo sa 6 rôznych kombinácií lineárnych transformácií vstupujúcich teplôt a koncentrácií.

Pre každú stanicu sa testovalo viacero modelov líšiacich sa počtom skrytých neurónov 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 predpove-

dať 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.



Obrázok 1 Neurónová sieť s dvomi vstupnými, tromi skrytými a jedným výstupným neurónom

Tabuľka 1 Počty vzorov na jednotlivých staniach (pv – celkový počet, p1 – počet vzorov použitých na tréning modelov, p2 – počet testovacích vzorov, p3 – počet vzorov na vyhodnotenie chyby najlepšieho predpovedného modelu

Kód stanice	Stanica	pv	p1	p2	p3
99111	Bratislava - Petržalka	3390	2300	390	700
11813	Bratislava - Koliba	1946	1200	400	346
11916	Chopok	1675	1000	340	335
11958	Kojšova hoľa	699	400	150	149
99404	Stará Lesná	3276	2203	357	716
99401	Topoľníky	2029	1300	385	344

Tabuľka 2 Výsledné pravdepodobné chyby neurónových modelov v ppb pre jednotlivé stanice a 6 rôznych lineárnych transformácií vstupných údajov

Stanica	1	2	3	4	5	6	Minimum
Bratislava - Koliba	6,30	6,18	6,26	6,27	6,29	6,28	6,18
Bratislava - Petržalka	6,07	5,98	6,02	6,14	5,99	6,07	5,98
Chopok	5,44	5,89	5,43	5,73	5,52	5,41	5,41
Kojšova hoľa	4,61	4,63	5,06	5,28	4,56	4,70	4,56
Stará Lesná	5,64	5,63	5,67	5,64	5,65	5,58	5,58
Topoľníky	5,43	5,70	5,46	5,88	5,65	5,55	5,43

Výsledky a diskusia

V tabuľke 2 sú výsledné pravdepodobné chyby neurónových predpovedných modelov pre každú stanicu a pre každú lineárnu transformáciu vstupov. Pokiaľ bolo pri niektorej stanici a transformácii na tretej skupine vzorov testovaných viac predpovedných modelov, je v tabuľke uvedená chyba najlepšieho z nich. Chyby sa pre jednotlivé stanice pohybujú od 4,56 ppb (Kojšova hoľa) do 6,18 ppb (Bratislava – Koliba). Pre každú stanicu sú hodnoty chýb 6 modelov líšiacich sa spôsobom lineárnej transformácie podobné. Preto v budúcich analýzach nebude potrebné skúšať viacero lineárnych transformácií vstupných údajov. Pokiaľ sa dosiahnuté výsledky porovnajú s výsledkami modelov využívajúcich k transformácii vstupov sigmoidu (Kremler, 2004), tak na všetkých staniach z porovnania vyjdú lepšie modely s lineárnou transformáciou.

Aj obrázok 2 s grafmi skutočných a modelmi predpovedaných maximálnych koncentrácií prízemného ozónu na staniach Bratislava – Petržalka a Stará Lesná svedčí v prospech aktuálne použitých modelov. Kým v ľavom stĺpci (modely s transformáciou vstupov pomocou sigmoidy) usporiadanie bodov v grafe pripomína hysteréznú krivku, či tvar sigmoidy, v pravom stĺpci (modely s lineárnou transformáciou) je usporiadanie

bodov bližšie k ideálnemu prípadu (body so súradnicami $y = x$). Z grafov tiež vidno čiastočné vylepšenie predpovede vyšších koncentrácií ozónu. Predtým model pre Bratislavu Petržalku ani raz nepredpovedal hodnotu vyššiu ako 50 ppb, pričom skutočné presiahli aj úroveň 90 ppb. Teraz model predpovedal maximálne hodnoty blízke sa 70 ppb.

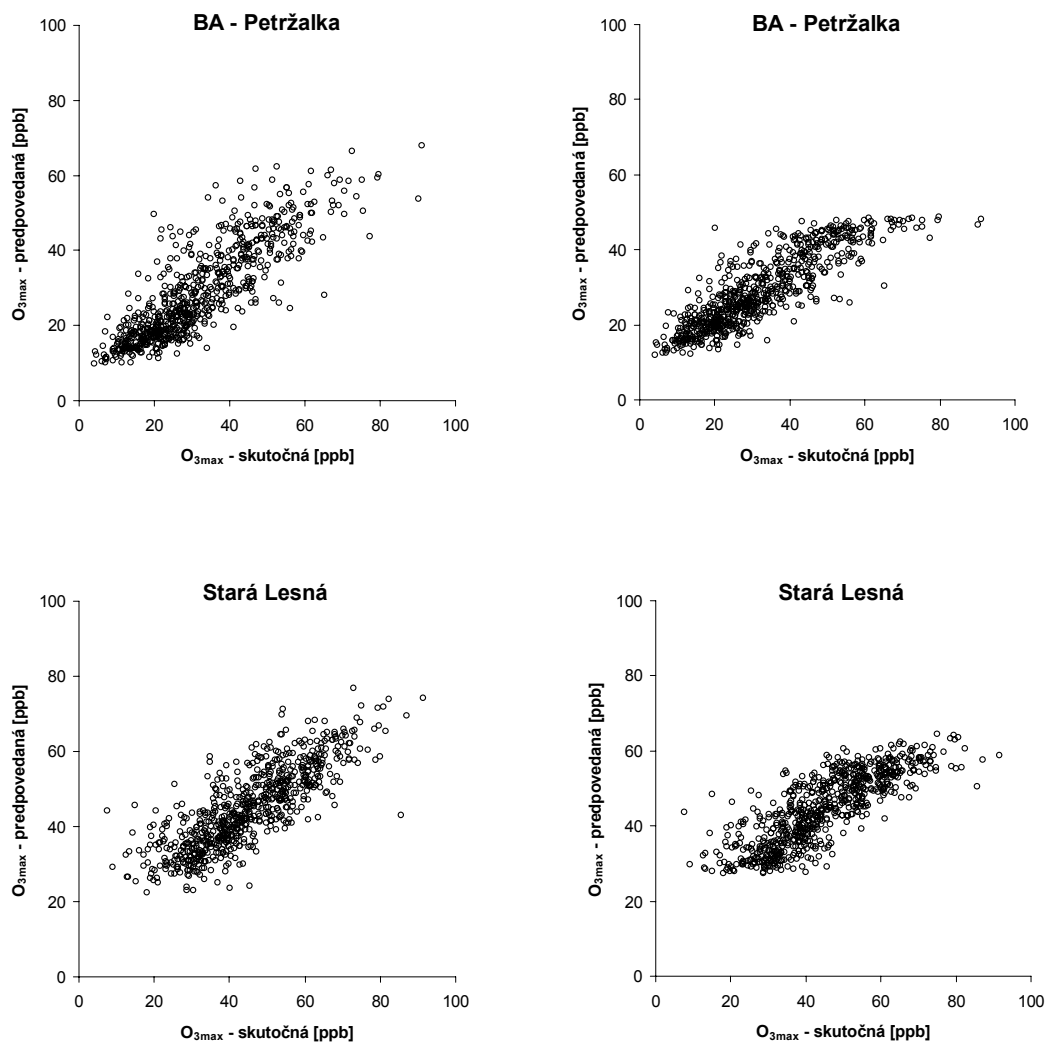
Na obrázku 3 sú grafy skutočných a modelmi predpovedaných koncentrácií ozónu na zvyšných 4 staniach (už len modely s lineárnou transformáciou vstupov).

Ešte výraznejšie vylepšenie predpovede vysokých koncentrácií ozónu by pravdepodobne sa mohlo dosiahnuť vtedy, pokiaľ by sa model trénoval len na údajoch z letného obdobia, kedy koncentrácie dosahujú vyššie hodnoty. Chcelo by to v takomto prípade asi pre každú stanicu postaviť dva modely, jeden pre zimný a druhý pre letný polrok.

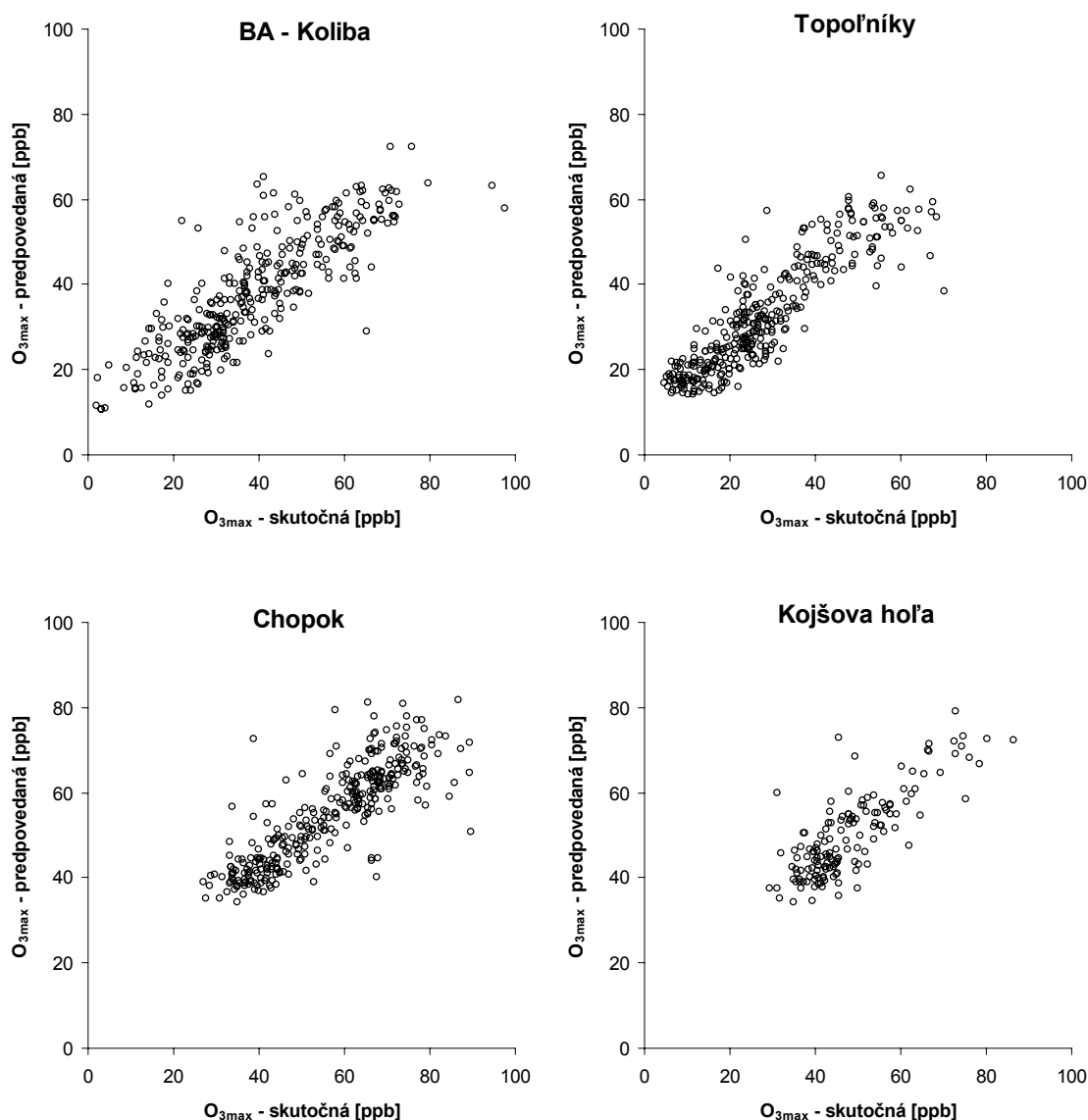
V budúcnosti by bolo ďalej dobré vyskúšať modely, do ktorých by vstupovali viaceré meteorologické prvky ovplyvňujúce koncentrácie ozónu a tiež testovať rôzne kombinácie týchto vstupov.

Pod'akovanie

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



Obrázok 2 Grafy porovnávajúce modelmi predpovedané maximálne koncentrácie O₃ so skutočnými. Vľavo modely s transformáciou pomocou sigmoidy, vpravo s lineárnou transformáciou



Obrázok 3 Grafy porovnávajúce modelmi predpovedané maximálne koncentrácie O_3 so skutočnými (modely s lineárnou transformáciou vstupných údajov).

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.
- Kremler, M., 2004: Predpoveď maximálnych koncentrácií prízemného ozónu pre vybrané stanice na Slovensku pomocou neurónových sietí. In: Bioklimatologické pracovné dni 2004, Viničky.