

# KONCENTRÁCIE PRÍZEMNÉHO OZÓNU MODELOVANÉ NEURÓNNOU SIEŤOU SURFACE OZONE CONCENTRATIONS MODELLED BY NEURAL NETWORK

Fridrich VALACH

Geomagnetické Observatórium GFÚ SAV Hurbanovo, Slovenská republika

Martin KREMLER

Univerzita Komenského, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Bratislava, Slovenská republika

## Abstract

Currently surface ozone is the most serious regional problem of air pollution over Europe. European countries have paid fair attention to this harmful pollutant. The continuous surface ozone monitoring in Slovakia started in 1992. Methodology for forecasting the daily maxima of surface ozone concentrations, based on a simple neural network, is presented in the paper. The model is done for the ozone station Prievidza. The data registered during years 1992-2001 were used here. Neural network is an I/O system. It needs a set of input parameters to enter the network. The output is expected to be the wanted daily maximum of surface ozone concentration. Two version of NN model were realized. The first one takes the daily maximum of ozone concentration in the previous day and the maximum of the air temperature in the given day for inputs. The second one takes into account one more input parameter – relative air moisture at 2:00 p.m. in the given day. The models produce results with the uncertainty of  $\pm 5.76$  ppb and  $\pm 5.52$  ppb, respectively.

**Key words:** Artificial neural network, Surface ozone.

## Úvod

Umelá neurónová sieť bola spočiatku vytvorená pre potreby výskumu umelej inteligencie a pre teóriu učenia v psychológii. Dnes nachádza široké uplatnenie aj v iných vedách. Veľmi používanou je v geomagnetizme pri hľadaní možností predpovedať geomagnetickú aktivitu z parametrov slnečného vetra a v podobných úlohách (Jankovičová a kol., 2001, Jankovičová a kol., 2002; Valach a kol., 2000; Valach & Jankovičová, 2001). V predkladanom príspevku sa pokúšame vysvetliť, ako funguje umelá neurónová sieť a na jednoduchom príklade modelovania maximálnych koncentrácií prízemného ozónu ukážeme jej praktické použitie.

Vzhľadom na interdisciplinárny charakter problematiky neurónovej siete je v príspevku občas použitý menej formálny jazyk, nie však na úkor potrebnej exaktnosti.

**Umelý neurón:** Umelá neurónová sieť je sústava umelých neurónov, ktoré napodobňujú činnosť skutočných živočíšnych neurónov (Gurney, 1996). Signály vstupujú do neurónu dráhami (obr.1), pričom každej z týchto dráh je priradené číslo  $w_i$ , nazývané váha. Indexom  $i=1, \dots, N$  sú indexované dráhy,  $N$  je počet dráh. Váha charakterizuje vodivosť príslušnej dráhy. Signál  $x_i$ , ktorý vstupuje do dráhy sa prechodom dráhou mení na  $w_i x_i$ . Takto zmenené signály vstupujú do neurónu, ktorý z nich najprv spraví sumu

$$a = w_1 x_1 + w_2 x_2 + w_3 x_3 + \dots + w_N x_N \quad (1)$$

Suma  $a$  sa nazýva aktivácia. Neurón má istú prahovú hodnotu, resp. prah citlivosti  $\Theta$ . Keď Aktivácia prekročí tento prah, neurón ďalšou dráhou vyšle signál, v opačnom prípade sa signál nevyšle. Táto činnosť sa v umelom neuróne realizuje pomocou tzv. aktivačnej funkcie, ktorá má približne tvar schodu. Vhodnou aktivačnou funkciou je sigmoida

$$y = f(a - \Theta) = 1 / \{1 + \exp[-(a - \Theta)]\} \quad (2)$$

**Sieť umelých neurónov:** Jednotlivé neuróny môžu byť navzájom pospájané dráhami, čím vytvoria neurónovú sieť. Jednoduchý model neurónovej siete, akú sme použili v práci, je znázornený na obrázkoch 3a,b. Skladá sa z troch vrstiev neurónov: vstupnej, tzv. skrytej a výstupnej vrstvy.

Nech počet vstupných neurónov je  $N$ . Nimi do siete vstupuje súčasne  $N$  vstupných hodnôt (t.j. je toľko vstupných neurónov, koľko je vstupných veličín). Vstupné neuróny vstupné hodnoty nemenia, len ich pošlú dráhami ku skrytým neurónom.

Skrytá vrstva obsahuje istý počet tzv. skrytých neurónov. Ich počet, o ktorom zatiaľ ešte nehovoríme, označme  $H$ . Skryté neuróny vykonávajú všetky činnosti, ktoré boli popisované v predošlej kapitole. Váhy medzi vrstvou vstupnou a skrytou označme  $w_{nh}$  ( $n=1,\dots,N; h=1,\dots,H$ ) a prahy citlivosti skrytých neurónov sú pre  $H$ -ty skrytý neurón označené  $t_h$ .

V oboch našich modeloch siete je výstupná vrstva reprezentovaná jediným neurónom - budeme mať na výstupe jediná veličinu  $y$ . Výstupný neurón funguje tak ako bolo opísané v predošlej kapitole.

Váhy medzi skrytou vrstvou a výstupným neurónom označme  $W_h$  a prah citlivosti výstupného neurónu má stálu hodnotu 0.

V procese učenia siete predkladáme sieti vzory (riešené úlohy). Ide o  $N$ -tice vstupov spoločne so želaným správnym riešením, ktoré očakávame na výstupe. Sieť sa snaží prispôbiť veľkosti váh a prahov citlivosti tak, aby dokázala produkovať výstupy blízke želaným.

Výstup z neurónovej siete sa dá zapísať ako

$$y = f \left\{ \sum_{h=1}^H W_h \cdot f \left[ \sum_{i=1}^N w_{ih} x_i + t_h \right] \right\} \quad (3)$$

Algoritmov na realizovanie učenia je viacero. Jeden z možných algoritmov, ktorý sa zakladá na zovšeobecnenom delta pravidle, pričom je použitý aj zotrvačný člen (Gurney, 1996) sa dá nájsť v práci (Valach, 2002).

**Aký je vhodný počet skrytých neurónov?** O vhodnom počte neurónov v skrytej vrstve rozhodneme nasledujúcim spôsobom. Postavíme viacero neurónových sietí, každú s iným počtom skrytých neurónov. Každú z nich budeme na nejakej zbierke vzorov (riešených príkladov) učiť riešiť úlohy. Budú to úlohy jedného typu, v ktorých platia rovnaké zákonitosti. Neurónová sieť sa bude snažiť tieto zákonitosti v predkladaných riešených úlohách zistiť a zovšeobecniť ich. Platí pravidlo, že čím viacej neurónov v skrytej vrstve sieť má, tým ľahšie sa naučí riešenia tréningových úloh (Ľahšie sa ich “nabífuje”). To však ešte neznamená, že dokáže aj lepšie pochopiť (zovšeobecniť), čo sa naučila. Preto musíme nejaké riešené úlohy (vzory) rezervovať na to, aby sme pomocou nich zistili, ktorá sieť najlepšie “pochopila” zákonitosti. S týmito úlohami sa sieť v procese tréningu nesmie stretnúť. Až natrénovanú sieť (s fixovanými hodnotami váh a prahov) preskúšame na týchto testovacích úlohách. Sieť, ktorá v teste najlepšie obstojí, budeme považovať za najdôveryhodnejšiu. A túto budeme ako nášho “najlepšieho žiaka” používať na riešenie ostrých - skutočných úloh, napríklad na predpovedanie geomagnetickej aktivity alebo modelovanie maximálnych koncentrácií prízemného ozónu na stanici Prievidza.

**Prízemný ozón:** V súčasnej dobe sa prízemný ozón stáva veľmi závažným problémom znečistenia životného prostredia v Európe (Kremler, 2002). Európske krajiny mu venujú značnú pozornosť. Napriek tomu, že v atmosfére je ozón len stopovým plynom, hrá dôležitú rolu. Absorbuje veľkú časť UV žiarenia. Má dôležité postavenie v chemizme troposféry - je primárnym zdrojom radikálu OH (Závodský, 2001). V neposlednom rade hrá závažnú úlohu v skleníkovom jave.

Prízemný ozón je nebezpečnou škodlivinou. Vysoké koncentrácie prízemného ozónu majú škodlivé účinky na zdravie ľudí, zvierat aj rastlínstva (Baird, 1999). Ozón okrem toho znižuje aj životnosť niektorých materiálov.

Nepretržité monitorovanie prízemného ozónu na Slovensku sa začalo v roku 1992. Slovenský hydrometeorologický ústav vtedy vybudoval v reálnom čase pracujúci monitorovací systém pre znečistenie ovzdušia. Počas obdobia od roku 1992 merania prebiehali na 28 staniciach.

### **Materiál a metódy**

**Použité údaje:** V práci sme použili údaje z obdobia 1992-2001. Maximálne koncentrácie ozónu sú zo stanice merajúcej znečistenie ovzdušia a maximálna denná teplota vzduchu a relatívna vlhkosť vzduchu o 14. hodine (stredného miestneho času) sú z klimatologickej stanice v Prievidzi.

Všetky údaje, s ohľadom na potreby neurónovej siete, boli pretransformované na interval (0, 1). Ako transformačnú funkciu sme použili sigmoidu, pričom jej tvar (umiestnenie a strmosť "schodu") sme volili tak, aby hodnoty medzi dolným a horným kvartilom po pretransformovaní ležali v intervale (0,25 - 0,75). Samozrejme, týmto postupom boli pretransformované zvlášť koncentrácie ozónu, zvlášť teploty a zvlášť vlhkosti.

**Navrhnuté modely:** Navrhli sme dva modely. Podľa prvého maximálna koncentrácia prízemného ozónu v danom dni je funkciou dvoch vstupných veličín: maximálnej koncentrácie v predchádzajúcom dni a maximálnej teploty v danom dni. (Neurónová sieť bude mať dva vstupné a jeden výstupný neurón.) Druhý model uvažuje aj tretí vstup – relatívnu vlhkosť vzduchu v daný deň. (Neurónová sieť bude mať tri vstupné a jeden výstupný neurón.)

**Príprava vzorov:** Pre obidva modely sme z dostupných dát pripravili po 1928 vzorov. Náhodným výberom sme ich rozdelili do troch skupín. Prvá skupina, 1300 vzorov, bola použitá na tréningovanie siete. Druhú skupinu, 314 vzorov, sme použili na výber najlepšej siete, t.j. siete s najvhodnejším počtom neurónov v skrytej vrstve. Na poslednej skupine 314 vzorov demonštrujeme úspešnosť modelov.

**Tréning sietí a hľadanie najlepšej siete:** Vytvorili sme neurónové siete s počtami skrytých neurónov  $H=1, 2, 3, \dots, 8$  a učili sme ich riešiť tréningové úlohy. Úlohy sme sieti predkladali v náhodnom poradí znova a znova. Po istom rozumnom počte takýchto cyklov sme zisťovali chybu, ako sa líšia správne odpovede od tých, čo dáva sieť. Výsledky sú ukázané na obrázkoch 2a,b.

Z obrázkov sme odhadli vhodný počet  $H = 7$  pre prvý model a  $H = 4$  pre druhý model. Pre tieto hodnoty  $H$  sú už chyby malé a s narastaním  $H$  sa už podstatne nezlepšujú.

Schémy neurónových sietí, ktoré boli v práci použité, sú na obr. 3a,b.

### **Výsledky a diskusia**

Vybraným najlepším sieťam s  $H = 7$  pre prvý model a  $H = 4$  pre druhý model bolo predložených posledných 314 demonštračných vzorov. Porovnanie skutočných hodnôt maximálnych koncentrácií prízemného ozónu s hodnotami, ktoré boli určené sieťami, sú na obrázkoch 4a,b. Pre prvý model, v ktorom sú uvažované dve vstupné veličiny, je chyba medzi želanými a sieťou určenými koncentraciami +/- 5,76 ppb a pre druhý model s tromi vstupmi je chyba +/- 5,52 ppb.

Koncentrácie prízemného ozónu sú silno závislé od lokality (Kremler, 2002). Preto taká procedúra, akú sme prezentovali v predloženej práci, sa musí urobiť pre každú jednotlivú ozónovú stanicu zvlášť.

#### Pod'akovanie

Táto práca bola vypracovaná v rámci projektov VEGA 2/2009/22 a 1/8256/01.

#### Súhrn

V súčasnosti je prízemný ozón najväčším regionálnym problémom znečistenia ovzdušia nad Európou. Tejto škodlivine venujú európske krajiny značnú pozornosť. Na Slovensku sa nepretržité merania prízemného ozónu začali v roku 1992. V príspevku prezentujeme metodiku predpovede maximálnych denných koncentrácií prízemného ozónu, využívajúcu jednoduchú neurónovú sieť. Model je spravený pre ozónovú stanicu Prievidza a použité údaje sú z obdobia rokov 1992 až 2001. Neurónová sieť je I/O systém. Potrebujeme pre ňu mať sadu vstupných parametrov. Na výstupe siete ako výstupnú veličinu očakávame denné maximá koncentrácie prízemného ozónu. Realizovali sme dve verzie neurónovej siete. V prvej verzii sme na vstupy siete privádzali koncentrácie ozónu v predchádzajúcom dni a maximálnu dennú teplotu v príslušnom dni. V druhej verzii sme na vstup privádzali ešte aj relatívnu vlhkosť vzduchu o 14:00 hodine v príslušnom dni. Modely dávajú výsledky s presnosťou  $\pm 5.76$  ppb a  $\pm 5.52$  ppb.

**Kľúčové slová:** Umelá neurónová sieť, prízemný ozón.

#### Literatúra

**Baird C. (1999)**, Environmental Chemistry. New York, Freeman, 557.

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

**Jankovičová D., Dolinský P., Valach F., Vörös Z. (2001)**, Neural Network Based Nonlinear Determination of the AE Index. Contributions to Geophysics and Geodesy, Vol.31, No.1, pp.343-346.

**Jankovičová D., Dolinský P., Valach F., Vörös Z. (2002)**, Neural Network Based Nonlinear Prediction of Magnetic Storms. Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics, Vol.64, pp.651-656.

**Kremler M. (2002)**, Daily and Annual Course of Surface Ozone Concentrations on Slovak Monitoring Stations. In: Meteorologický časopis (Meteorological Journal), Slovak Hydrometeorological Institute, Bratislava, Vol.5, No.1, pp. 29-36.

**Závodský D. (2001)**, Expected Trends of Ground Level Ozone Concentrations over Slovakia, In: Acta meteorologica Universitatis Comenianae, Bratislava, FMFI UK, XXX, pp. 1-17.

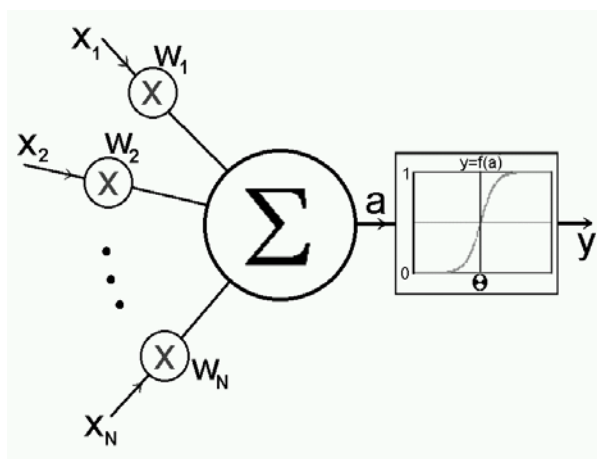
**Valach F., Jankovičová D., Dolinský P., Túnyi I., Kaplík P. (2000)**, Neurónové siete a štúdium tektonickej aktivity na základe geomagnetických dát. Zb. ref. z konferencie Bioklimatológia a životné prostredie, Košice, CD-ROM.

**Valach F., Jankovičová D. (2001)**, Electromagnetic transfer functions, tectonic activity and neural networks. Contributions to Geophysics and Geodesy, Vol.31, No.1, pp.339-342.

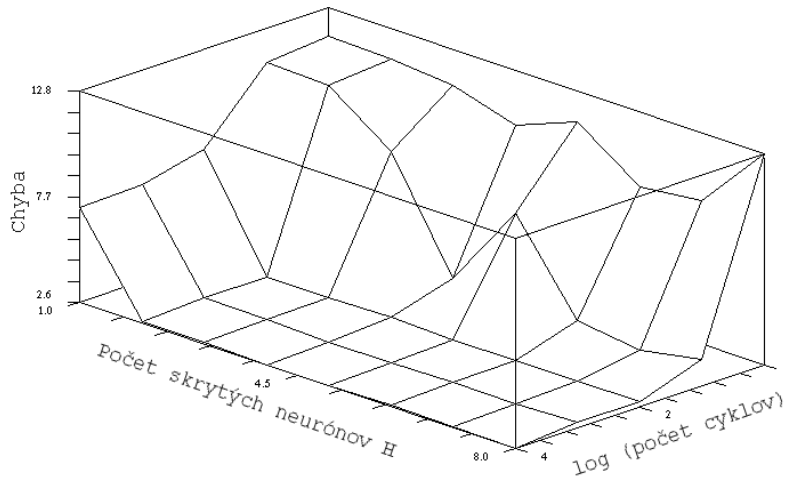
**Valach F. (2002)**, Umelá neurónová sieť - príklad použitia. Zb. ref. 16. Celoštátny slnečný seminár v Turčianskych Tepliciach, pp. 287-292.

**Kontaktná adresa:** Mgr. Fridrich Valach, PhD., Geomagnetické observatórium GFÚ SAV, 947 01 Hurbanovo  
Telefón: 035/7602211 Fax: 035/7602494 e-mail: fridrich@geomag.sk

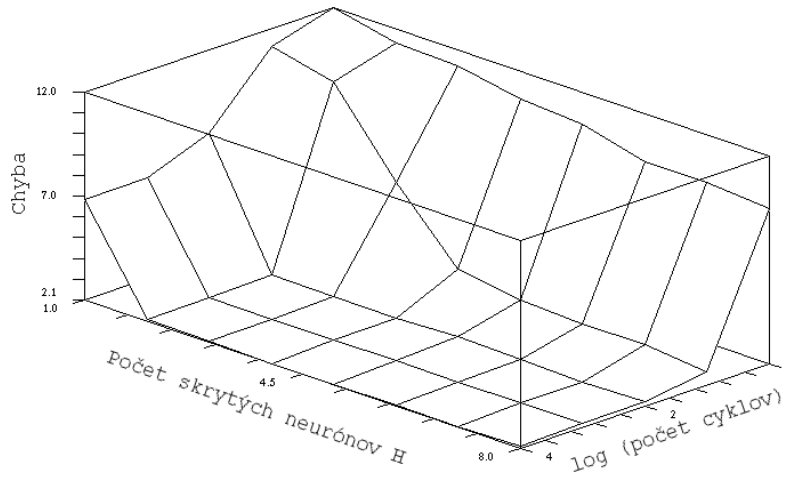
#### Obrázková príloha:



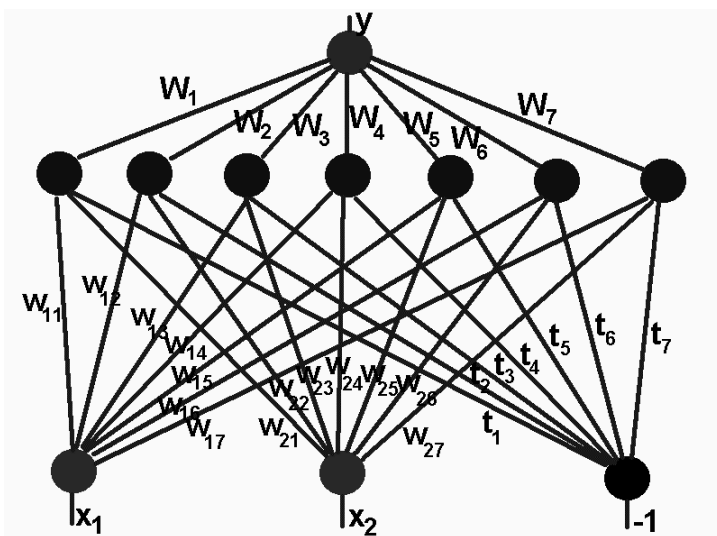
Obr. 1 Schéma činnosti umelého neurónu.



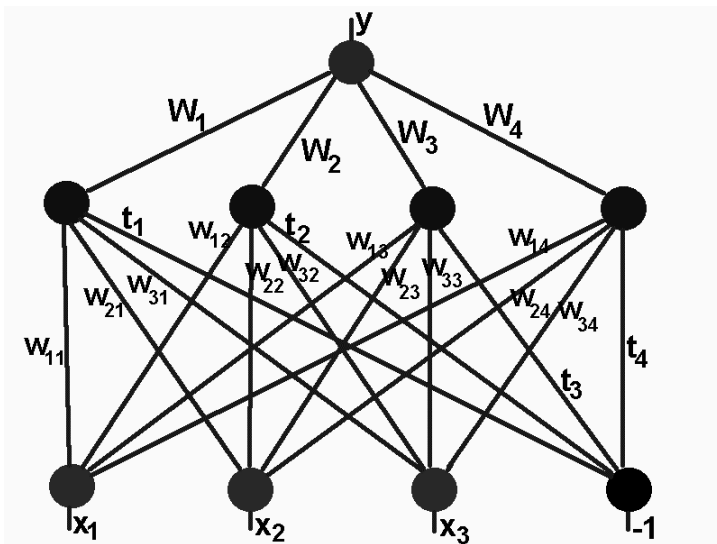
**Obr. 2a** Chyba, o akú sa líšia výstupy neurónovej siete od želaných hodnôt výstupov, ako funkcia počtu skrytých neurónov a počtu učiacich cyklov - prvý model. (3D-graf)



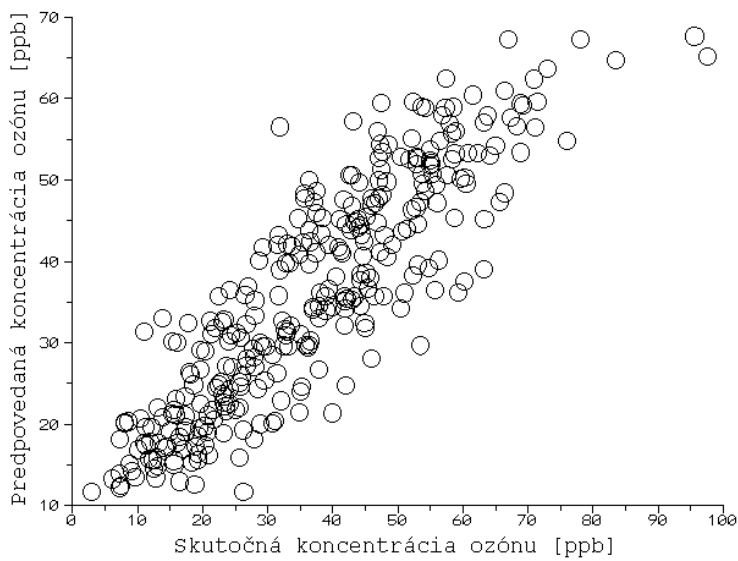
**Obr. 2b** Chyba, o akú sa líšia výstupy neurónovej siete od želaných hodnôt výstupov, ako funkcia počtu skrytých neurónov a počtu učiacich cyklov - druhý model. (3D-graf)



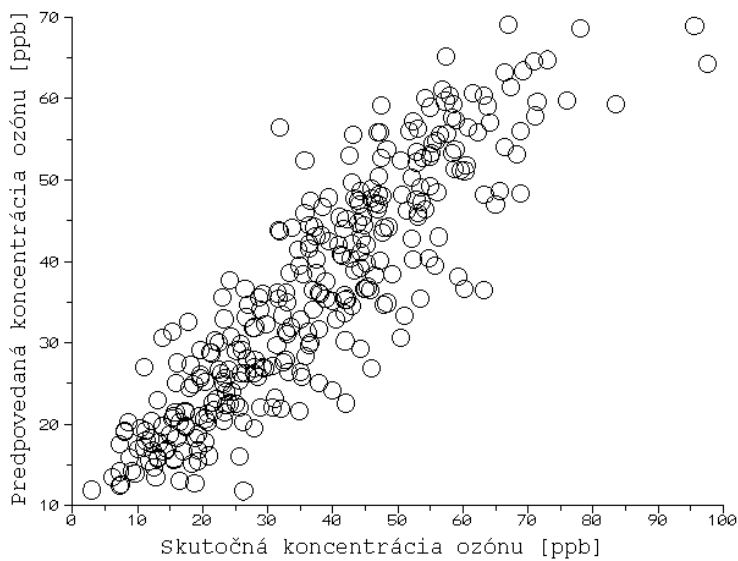
**Obr. 3a** Schéma neurónovej siete s počtom skrytých neurónov  $H=7$  pre prvý model s dvomi vstupmi.



**Obr. 3b** Schéma neurónovej siete s počtom skrytých neurónov  $H=4$  pre druhý model s tromi vstupmi..



**Obr. 4a** Porovnanie výstupov neurónovej siete (predpovedaných hodnôt maxim koncentrácie prízemného ozónu) so skutočnými maximálnymi hodnotami koncentrácií prízemného ozónu - prvý model.



**Obr. 4b** Porovnanie výstupov neurónovej siete (predpovedaných hodnôt maxim koncentrácie prízemného ozónu) so skutočnými maximálnymi hodnotami koncentrácií prízemného ozónu - druhý model.