

ASIMILACE MATEMATICKÉHO MODELU S MĚŘENÝMI DATY PŘI ODHADECH ZNEČISTĚNÍ ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ

Petr PECHA, Ústav teorie informace a automatizace, AV ČR, Praha

Radek HOFMAN, absolvent FJFI ČVUT Praha, KM, softwarové inženýrství

V předkládaném článku navazujeme na předchozí stať [11], která se zabývá pravděpodobnostním přístupem k hodnocení následků mimořádných úniků škodlivin. Je podán přehled metod používaných při korekcích modelové předpovědi na základě pozorování (měření) v terénu. Metodiky takové asimilace jsou postupně ověřovány a zařazovány do vyvíjeného asimilačního subsystému programového systému HAVAR RP. Práce na problematice asimilace modelu s pozorováními mohly být iniciovány díky podpoře v rámci projektu 6/2003 (poskytovatel SÚJB) s tématem „Vývoj programového vybavení pro hodnocení radiologických důsledků vážných havárií“ (2003 – 2005). Nyní pokračuje vývoj v ÚTIA AV ČR za spolupráce s absolventy KM FJFI a hlavním cílem je vyvinout pokročilé adaptivní metody pro podporu krizového řízení, které využívají veškeré existující vstupní i výstupní informace modelu i měření.

1 Algoritmizace dějů: Cesta „od přírody k modelu“

Člověk dlouhodobě a systematicky prohlubuje svoje znalosti o přírodních procesech a snaží se o jejich formulaci pomocí matematického aparátu. Děje jsou pak popisovány konceptuálními schémata, která zavádějí zjednodušené modely skutečných procesů probíhajících v přírodě (diskretizace, linearizace). Zjednodušování je vynucováno jak nedostatkem znalostí o probíhajících procesech a jejich vzájemných interakcích, tak případnou nemožností najít analytické řešení problému nebo přílišnými nároky na výpočetní kapacitu přesahující rámec současných zařízení. Nicméně intenzivní výzkum a technický rozvoj mají za následek, že zjednodušené modely je možno postupně zpřesňovat [2]. Na základě tohoto trendu mají vědci tendenci při své jednostranné zahleděnosti preferovat zavádění idealizovaných modelů reálného světa (od mikrosvěta až po vesmír), které mají formu soustav diferenciálních rovnic s příslušnými počátečními a okrajovými podmínkami.

V minulosti byla obecně přijímána teze, že při dostatečné výpočetní kapacitě by bylo možno modely tak zpřesňovat a rozšiřovat jejich složitost, že by predikovaly chování jakéhokoliv systému. Důvěra v sílu matematické formulace vedla k přesvědčení, že příslušné mechanické výpočty nazývané **deterministické** modelování může dosáhnout libovolné přesnosti a neomezeného přibližování se k reálnému světu.

Nicméně vědecké znalosti se při svém formování vždy opíraly o experimentální pozorování, která postupně přinášela revoluční pohledy na popis skutečných procesů. Tak například zavedení kvantové mechaniky zcela překročilo stávající rámec chápání mikrosvěta částic. Celkově vůbec se ukázalo, že vzhledem k inherentním neurčitostem vstupních parametrů stochastického charakteru narážejí deterministické modely na zcela zásadní omezení pro jejich další detailnější použití [2] a přírodu mohou vystihnout jen do určité míry.

2 Procedura asimilace : Cesta „od modelu k realitě“

Předpokládejme existenci pokročilých modelů aktualizovaných nejnovějšími znalostmi v oboru. Současně jsme si vědomi, že v důsledku nesprávného nastavení vstupních parametrů může někdy dojít k natolik nepřesné predikci modelu, která může být horší než subjektivní

odhad rutinního experimentálního praktika vycházející z metody „nasliněného prstu“ pro určení základního směru větru. Oproti sebevědomému matematickému modeláři v tomto případě mají navrch příznivci postupů založených na procedurách obecně zvaných data mining, které jakoby obcházejí veškeré fyzikální modelování a spoléhají se výlučně na pozorování (měření). A tam, kde tato pozorování nejsou k dispozici, se použijí jednoduché metody matematické interpolace / extrapolace. Technika „data mining“ může být úspěšně používána v těch oblastech, pro které není k dispozici adekvátní model a je shromážděn dostatek informativních dat. Nicméně tyto postupy ignorují akumulaci znalostí vedoucí k třibení teorie a jejímu využití. Spoléhání se výlučně na pozorování v sobě nese nebezpečí chybných predikcí založených na špatných datech s malou vypovídající hodnotou a zatížených různými typy chyb měření.

Východiskem je syntéza obou na první pohled protikladných postupů (dokonce historicky zatížených určitou řevnivostí), která je označována jako procedura **asimilace** modelového odhadu s pozorováními (měřeními) v terénu. V nejobecnější definici je asimilace metoda hledající takovou reprezentaci modelu, která je maximálně konzistentní s pozorováními. Pod pojmem konzistentní reprezentace modelu je myšleno přiblížení se k realitě spočívající v optimální korekci původního počátečního odhadu (background field) měřeními. Přitom musí být brána v úvahu jak struktura chyb modelu tak struktura chyb měření (vstupují do procesu asimilace jako předem určené kovarianční matice chyb). Z hlediska modelu při asimilaci je zohledňována fyzikální znalost nazývaná apriorní informací modelu.

3 Trochu z historie

Hlavní oblastí rychlého rozvoje využívání asimilačních postupů byla a je meteorologie. V polovině minulého století se přešlo od manuálních interpolací pozorovaných hodnot do bodů výpočetní mříže k automatickým postupům tzv. **objektivní analýzy** realizované na výpočetním zařízení. Pro zajímavost, na počítačovém provedení objektivní analýzy pro jednodenní meteorologickou předpověď se podílel i J. von Neuman (na počítači ENIAC vyvinutém původně pro projekt Manhattan).

Předpovědní model je představován počáteční úlohou a meteorologie tudíž procedurou asimilace míní metodu, která z předchozích hodnot modelu a došlých měření provede objektivní analýzu, jejímž výsledkem jsou nové („lepší“) počáteční podmínky pro provedení modelové předpovědi v dalším časovém kroku. Problém generování meteorologických předpovědí má dva zásadní aspekty:

1. Principiální otázkou je, zda je vůbec možné modelovat meteorologické předpovědi. Otázky této tzv. „predictability“ [1, 9] souvisejí se samotnou povahou chaotického chování atmosféry. E. N. Lorenz již v r.1963 dokázal, že atmosféra, stejně jako jakýkoliv dynamický systém s nestabilitou, má konečný limit na délku předpověditelnosti. Ta byla vyhodnocena na zhruba 2 týdny, a to bez ohledu na to, že by byl k dispozici přesný model a jeho počáteční podmínky (měřená data) by byly známy téměř přesně. Atmosféra je chaotický systém, ve kterém chyby do něj vstupující mohou s časem narůstat¹. C. Leith pak charakterizuje asimilaci jako prostředek boje proti chaotické destrukci znalosti a jejímu obnovování na základě nových pozorování.

¹ E. N. Lorenz si při této příležitosti pohrává s otázkou: „Může mávnutí motýlího křídla v Brazílii následně vyvolat tornádo v Texasu?“. Jde zřejmě o parafrázi na „butterfly effect“ ze známé sci-fi povídky Raye Bradburyho, kdy nepatrná změna (zašlápnutí jednoho pravého motýla) při výletu do dávné minulosti způsobí viditelné změny při návratu do současného světa....

2. Složitost úlohy. Ve stěžejní literatuře [9] se uvádí, že počáteční podmínky meteorologického modelu musejí být inicializovány ve více než 10^6 bodech 3-D mříže, a sice hodnotami nejméně čtyř modelovaných veličin (dvě horizontální komponenty rychlosti větru, teplota, vlhkost).

Další praktické uplatnění našly asimilační techniky v šedesátých letech minulého století v rámci vojenského projektu kontroly trajektorie řízených střel. Neurčitosti parametrů povětrnostní situace vedly k odchylkám od trajektorií odhadovaných modelem letu. Na druhou stranu řídit let jen na základě sensorických měření naráželo na nemožnost získat dostatečné množství přesných měření, aby se dalo spolehnout jen na ně. Metoda asimilace bere v úvahu pozitivní rysy obou přístupů. Tam, kde je měření dostatek, upraví numerický model podle těchto hodnot. Tam, kde kvalitní pozorování chybějí, spolehne se na numerický model.

Asimilační postupy pronikají do různých oblastí, zvláště pak do disciplín nauk o Zemi, jako je již zmíněné atmosférické modelování a předpovědi, ale též geografie, oceánografie nebo hydrologie. Také v oblasti modelování šíření znečištění v životním prostředí byly nastoleny striktní požadavky na hlubší analýzu propagace neurčitostí vstupů modelem a na zvýšení stupně spolehlivosti odhadů. Tento trend dokumentuje evropský projekt RODOS (Real-time Online DecisiOn Suport system) podrobně lokalizovaný nedávno i v ČR, který si v oblasti asimilace vytknul ten nejširší a nejobecnější cíl, spočívající v asimilaci jak v reálném čase tak při pozdějších fázích nehod. Základní podmínkou je lokalizace systému na konkrétní podmínky té které země včetně online napojení na národní meteorologické a radiační sítě.

Tato komplikovanost spolu s volbou poněkud náročného UNIXového výpočetního prostředí vedlo ke složité implementaci a ovládání s velkými nároky na proškolení uživatele. Ukázalo se dále, že možnost rutinního nasazení takových obecných vše zahrnujících systémů je jednoznačně podmíněna pokračující podporou vývojových týmů (údržba, rozvoj, odstraňování potíží, podpora dříve deklarované celoevropské komunikace v případě jaderných nehod), tedy aby systém byl „živý“².

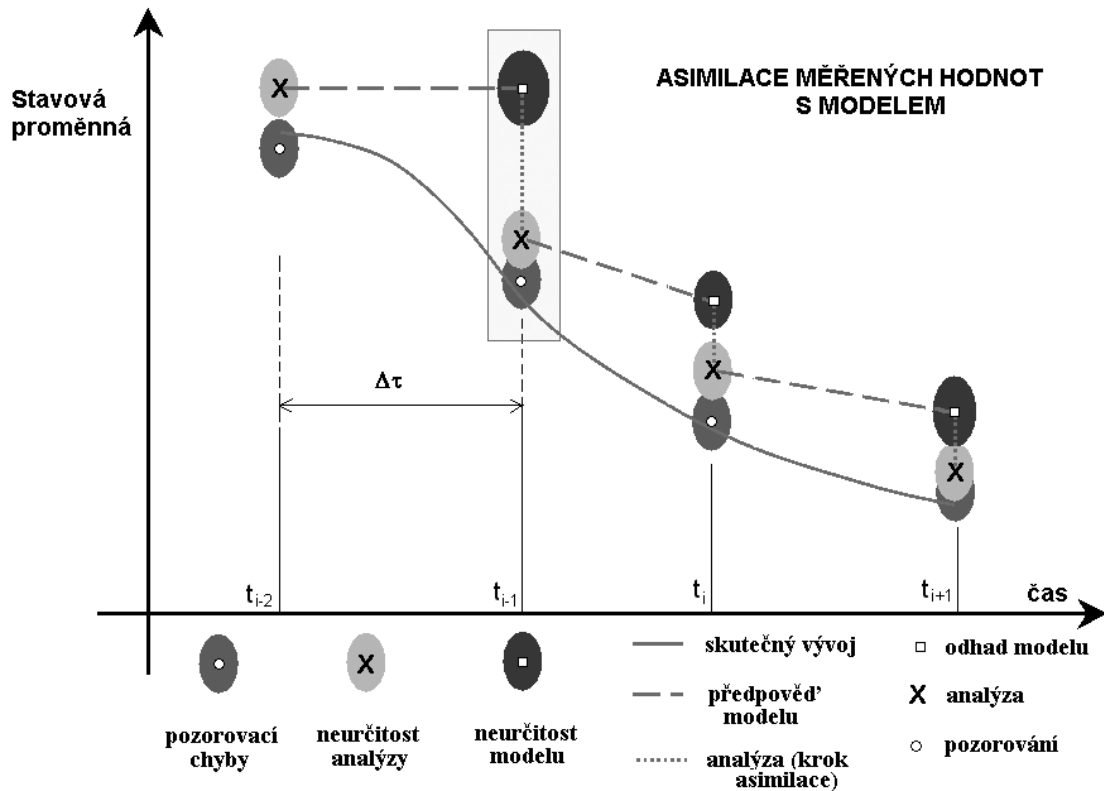
Nicméně v rámci prací mnoha předních evropských vývojových týmů na projektu RODOS bylo shromážděno obrovské aktuální know-how, ze kterého je možno vycházet resp. se minimálně poučit. Z oblasti asimilace v reálném čase to jsou například práce [14, 5], pro pozdější fáze nehody citujme alespoň [4, 13].

4 Objektivní analýza: prostředek boje s tendencí k chaotické destrukci znalosti

Skutečný stav systému je odhadován modelem a současně může být doplněn souborem pozorování (měření) diskrétních v prostoru i čase. V případě, že jsou k dispozici podrobná a spolehlivá měření, analýza (odhad skutečného stavu) se redukuje na interpolační úlohu. Obvykle však je problém poddimenzován ve smyslu existence omezeného počtu řídice a nepravidelně prostorově rozložených měření, navíc tyto hodnoty jsou zatíženy různými typy chyb. V tomto případě je nutné připojit k analýze určitou apriorní informaci o stavu systému. Modelováním stavu systému (konkrétně rozložením depozice radionuklidu I131 na zemském povrchu kolem zdroje úniku) a odhadem kovarianční struktury jeho chyb jsme se podrobněji zabývali v článku [11] předcházejícím těmto úvahám.

² Závěry v tomto odstavci vyjadřují subjektivní názory autora vyplývající z jeho intenzivní aktivní účasti na lokalizaci systému RODOS na podmínky ČR v období 1998 až 2005 (tyto aktivity dokumentuje více než 25 reportů deponovaných většinou na SÚJB)

Pesimista může charakterizovat situaci jako neutěšenou, kdy k nepřesnému modelu jsou asociována měření zatížená chybami. Proces asimilace však naopak spojuje přednosti obou typů informací a pozorování jsou vtělena do modelu stavu, jehož výhodou je respektování fyzikální znalosti a zákonitosti časového vývoje. Přitom jsou optimálním způsobem ošetřeny chyby. Celý proces budeme demonstrovat na nejvíce propracovaném asimilačním cyklu pro krátkodobé meteorologické předpovědi, který je znázorněn na obrázku 1.



Obr. 1 Asimilační cykly s uvažováním struktury chyb modelu i měření

Definujme dále stavové vektory:

$\mathbf{x}^b(t_{i-1})$, $\mathbf{x}^b(t_i)$ diskrétní popis stavu systému v čase t_{i-1} resp. v čase t_i generovaný modelem (index b značí obecně používané označování „background field“, též „první odhad“ modelu). Vektor má dimenzi N (počet uzlů výpočetní sítě – uvedeno dále).

$\mathbf{y}^p(t_{i-1})$ označujeme jako „vektor pozorování“ dimenze P , obvykle $P \ll N$. Představuje relevantní měření došlá k okamžiku t_{i-1} .

Dále definujme proceduru **objektivní analýzy** (značena dále indexem a) jako akci prováděnou v okamžiku t_{i-1} , kdy určitým způsobem (různě sofistikovaným s různou úrovní akceptance struktury chyb) proběhne syntéza hodnot stavu $\mathbf{x}^b(t_{i-1})$ s došlými měřeními vyjádřenými vektorem $\mathbf{y}^p(t_{i-1})$. Jinými slovy se provede korekce hodnot modelu měřeními. Zavedením obecného operátoru objektivní analýzy \hat{O} vyjádříme krok objektivní analýzy generování korigovaného odhadu $\mathbf{x}^a(t_{i-1})$ schématem:

$$\hat{O} [\mathbf{x}^b(t_{i-1}) ; \mathbf{y}^p(t_{i-1})] \Rightarrow \mathbf{x}^a(t_{i-1}) \quad (1)$$

Korigovaný (opravený) popis stavu systému $\mathbf{x}^a(t_{i-1})$ pro okamžik t_{i-1} nyní vstupuje jako počáteční podmínka pro krátkodobou předpověď do modelového odhadu (vyjádřeného nelineárním modelem Ψ) v dalším časovém kroku podle:

$$\mathbf{x}^b(t_i) = \Psi_{i-1} [\mathbf{x}^a(t_{i-1})] \quad (2)$$

Souhrnně řečeno, v důsledku již zmíněné nestability procesů probíhajících v atmosféře jsou krátkodobé předpovědi na konci časového intervalu i generovány modelem z počátečních podmínek $\mathbf{x}^a(t_{i-1})$, které jsou určovány podle schématu (1) na základě asimilace předpovědi v předchozím časovém kroku $i-1$ s přicházejícími pozorováními vztaženými obvykle k počátku intervalu $i-1$. Tento proces se opakuje v dalších časových cyklech, přičemž doba analýzy znamená vždy časový interval mezi dvěma následujícími procedurami objektivní analýzy.

Taková periodická procedura asimilace demonstruje konkrétní prostředek výše zmíněného boje proti vývojové tendenci k chaotické destrukci znalosti a k jejímu obnovování na základě nových pozorování.

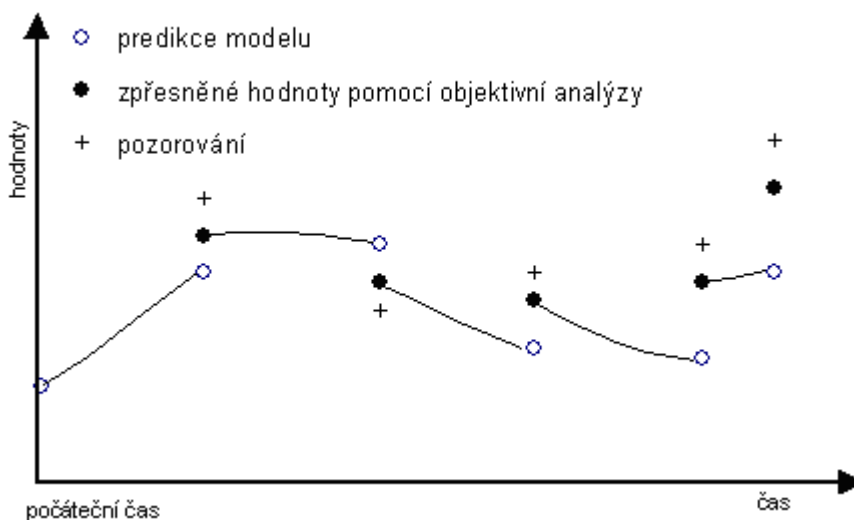
Meteorologická měření a předpovědi jsou hlavním vstupem do odhadů následků mimořádných úniků škodlivin do životního prostředí. Proto i příslušné kódy vyvíjené či implementované v ČR se musejí přizpůsobit zvyklostem české meteorologické služby a vytěžit z nich maximální informaci pro svoje potřeby. Podrobný obrázek o této nezbytné spolupráci podává například práce [15] nebo několik dalších reportů týkajících se lokalizace evropského systému RODOS na podmínky ČR. V Českém hydrometeorologickém ústavu je dvakrát za den (doba analýzy je zatím 12 hodin prováděná v časech 00 a 12 UTC) prováděna asimilace na kontinentální úrovni původního odhadu modelu s přicházejícími daty. Je použit předpovědní model ALADIN, přičemž rozměr úlohy a množství měřených dat jsou mimořádně rozsáhlé a objektivní analýza je realizovatelná pouze na superpočítači.

Kromě periodických operativních předpovědí počasí ČHMÚ přepracovává tyto informace pro další dílčí aktivity a odesílá je (případně online) do příslušných institucí. Pro účely monitorování radiologické situace se po každé analýze (každých 12 hodin) odesílá krátkodobá modelová předpověď na příštích 48 hodin, a to v několika formátech. Nejjednodušším jsou bodové předpovědi počasí pro lokality JE Temelína a Dukovan (hodinové sekvence předpovědí středních rychlosti větru, směru větru v referenční výšce, tříd stability atmosféry, středních hodinových průměrů předpokládaných srážek, případně výšek směšovací vrstvy). Pro detailnější modelování šíření znečištění na střední vzdálenosti jsou odesílána předpovědní meteorologická pole v textovém ASCII vyjádření na pravidelné mříži na oblasti zhruba 160 x 160 km kolem ETE i EDU ve formátech HIRLAM i ALADIN. Rutinně jsou k dispozici i předpovědní atmosférická pole pro velké (kontinentální) oblasti ve tvaru binárních dat v GRIB formátu. Podrobnější popis jednotlivých typů předpovědí je v [16, 8].

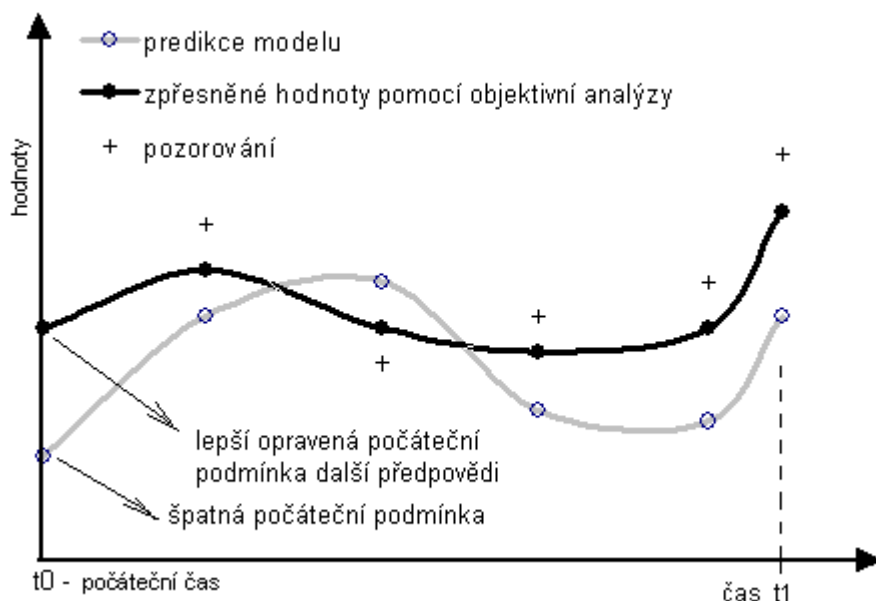
5 Asimilační schémata v oblasti šíření znečištění životním prostředím

Meteorologická pole jsou řídicími prvky při šíření znečištění, nicméně vlastní disperze a depozice škodlivin má svoje specifické rysy, které se musí projevit při volbě a aplikaci vlastních asimilačních procedur. V úvahu je třeba brát dynamiku úniku škodlivin a efekty zředování koncentrace příměsí ve vlečce, jejichž důsledkem jsou velké gradienty koncentrace znečištění. Další konkrétní úvahy vztáhneme k posuzování radiologických důsledků mimořádných radioaktivních úniků do atmosféry, pro které lze postulovat širokou paletu asimilačních scénářů v závislosti na otázkách typu:

- 1) Jsou modelové odhady konzistentní? V záporném případě a při existenci dostatku informativních měření se celý asimilační scénář a jeho příslušná objektivní analýza redukuje na *klasickou interpolaci* ve výpočtových bodech z pozorovaných hodnot.
- 2) Je k dispozici podrobná analýza chyb modelu i chyb měření?
- 3) Jakým způsobem jsou zpracovávána přicházející pozorování? *Sekvenční* postupy uvažují minulá měření až do okamžiku analýzy. Jsou zaváděny i postupy tzv. nesekvenční neboli *retrospektivní* asimilace, kdy mohou být brány v úvahu i budoucí pozorování vzhledem k době analýzy, což umožňuje zpětně provést upřesnění opakováním procedury analýzy. V obou případech existující pozorování mohou být akumulována buď v malých dávkách (případně jednotlivě) a aplikována přerušovaně („*intermitentní*“ asimilace, kdy model je skokově jednorázově korigován – sekvenční intermitentní schéma je použito na obrázku 2a) nebo mohou být použity *kontinuálně* v okamžiku jejich příchodu (uvnitř časového asimilačního okna), kdy časový průběh analýzy představuje hladká křivka (viz obrázek 2b). Pro kontinuální postup je užíván termín variační asimilace.



Obr. 2a Sekvenční intermitentní asimilační schéma



Obr. 2b *Kontinuální retrospektivní asimilační schéma pro 4D-Var variační metodu. Optimální oprava původní počáteční podmínky $\mathbf{x}^a(t_0)$ pro předpověď $\mathbf{x}^b(t_1) = \Psi_0[\mathbf{x}^a(t_0)]$*

Druhý bod je z hlediska optimální procedury analýzy nejdůležitější, protože čím sofistikovanější statistickou metodu chceme použít, tím podrobnější popis modelu a kovarianční struktury jeho chyb a chyb pozorování je třeba mít k dispozici. Hierarchii používaných asimilačních metod od jednoduchých technik po nejpokročilejší postupy (umožňující vytěžit nejkvalitnější informaci ve směru přibližování se k realitě) lze vyjádřit přístupy:

- M1 Běžné metody **klasické interpolace**. Jde o případ, kdy jakékoliv informace o chybách chybějí a model je konstruován na základě klasických interpolačních postupů (lokální polynommická interpolace, prokládání splajny).
- M2 **Minimalizační algoritmus** pro optimální fitování vektoru pozorování plochou imitující fyzikální znalost modelu (například gaussovskou plochou).
- M3 Interpolační schémata s **empirickým** expertním odhadem chyb. Prvním krůčkem směrem k respektování chyb je metoda **SCM** (Successive Correction Method – viz dále), kde bývá k dispozici alespoň rámcový expertní odhad poměru ε^2 disperzí chyb měření k chybám modelu.
- M4 **Statistické metody konstantní**. Je proveden počáteční odhad kovarianční struktury chyb modelu, přičemž v dalších časových krocích jsou chyby předpovědi považovány za stacionární. Významnými představiteli jsou metody optimální interpolace (OI) a variační prostorová metoda 3-D Var. Jsou používány různé modifikace obou postupů.
- M5 **Pokročilé asimilační techniky** respektující časový vývoj kovariancí chyb předpovědi. K základnímu aparátu patří různé varianty Kalmanova filtru EKF (Extended Kalman Filtering) a EnKF (Ensemble Kalman Filtering). Čtyřdimenzionální přiblížení 4D-Var je zobecněním 3D-Var pro pozorování rozložená v čase. Bayesovské metody (například Bayesian melding –[3]) využívají všechny apriorní informace o vstupech a výstupech modelu (včetně pozorování) a s využitím Bayesova teorému je kombinují do výsledných rozdělání hledaného výstupu.

6 Aplikace asimilačních postupů při odhadech následků mimořádných úniků radionuklidů

V současné době je vyvíjen asimilační subsystém spojený s programovým systémem HAVAR-RP pro odhady následků úniků škodlivin do životního prostředí. Jsou vyvíjeny a postupně testovány techniky asimilace dat od jednoduchých postupů ke složitějším a vhodnějším. Konečným cílem je implementace pokročilých metod zmíněných v předchozím odstavci pod označením M5. Předpokládá se, že dobré předpoklady k vyřešení tohoto složitého zadání poskytne úroveň znalostí existující v oddělení Adaptivních systémů ÚTIA, případně další podpora (téma je též náplní žádosti o grantovou podporu).

V následujících odstavcích stručně zmíníme metody již odladěné a zahrnuté do vyvíjeného asimilačního subsystému. Konkrétně se provádí modelování na polární výpočetní síti do vzdálenosti 100 km od zdroje znečištění. Prostor kolem zdroje je rozdělen na 80 pravidelných úhlových segmentů (paprsků) a 35 radiálních (neekvidistantních) pásem. Odhad modelované výstupní veličiny je tedy vyjádřen diskrétně vektorem \mathbf{x}^b dimenze $N = 80 \times 35 = 2\,800$. Tato rozměrnost indikuje náročnost uvažovaného problému asimilace.

Modelujeme šíření radioaktivního znečištění, přičemž je k počátku úniku k dispozici popis konkrétní meteorologické situace včetně její krátkodobé předpovědi na 48 hodin. Problém zúžíme na analýzu jediné výstupní proměnné, kterou bude depozice zvoleného radionuklidu na povrchu (jejího prostorového rozložení představovaného vektorem \mathbf{x}^b). Jak již bylo řečeno, relevantní měření došla k okamžiku analýzy (například odeznění průchodu radioaktivního mraku nad terénem) jsou vyjádřena vektorem pozorování \mathbf{y}^m dimenze P . Pro výsek z výpočetní polární mříže je situace znázorněna na obrázku 3.

Základní dílčí úlohou je interpolace a případná transformace (při nepřímých pozorováních) hodnot modelu z výpočetních uzlů do prostoru (pozic) pozorování, které jsou formálně vyjádřeny operátorem pozorování \hat{H} :

$$(\mathbf{x}^b)^p = \hat{H}(\mathbf{x}^b) \quad (3)$$

Zavedeme vektor inovací \mathbf{d} (přírůstky pozorování) dimenze P v bodech pozorování jako:

$$\mathbf{d} = \mathbf{y}^p - \hat{H}(\mathbf{x}^b) \quad (4)$$

Potom obecné schéma objektivní analýzy (1) lze pro určitý okamžik t_i konkretizovat jako:

$$\mathbf{x}^a(t_i) = \mathbf{x}^b(t_i) + \mathbf{W}_i \mathbf{d}(t_i) \quad (5)$$

Analýza je tedy získávána součtem inovací vážených váhovou maticí \mathbf{W} a prvního odhadu modelu. Váhová matice \mathbf{W} se určuje na základě statistického odhadu kovariancí chyb modelu i pozorování. Lze říci, že s propracovaností metody (od M1 směrem k M5) rostou i její nároky na detailnost analýzy kovarianční struktury chyb modelu i měření a tím i na konstrukci váhové matice \mathbf{W} . Označení váhové matice \mathbf{W} indexem i má zcela zásadní význam, protože to znamená, že pro pokročilé metodiky typu M5 se matice s časem mění a je nutné tuto časovou evoluci kovarianční struktury respektovat a modelovat (na rozdíl od stacionárních metod M1 až M4).

Poznámka ke konstrukci operátoru pozorování: Pro obecně nelineární operátor pozorování se provádí jeho linearizace podle schématu $\hat{H}(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) = \hat{H}(\mathbf{x}) + H\delta\mathbf{x}$, kde H je nyní matice $P \times N$, kterou budeme dále nazývat lineární operátor pozorování. V [9] je ukázáno, že to platí pro běžné úlohy, kdy první odhad modelu je dobrou aproximací skutečného stavu (první odhad plus malé přírůstky v důsledku pozorování).

Práce [6] se zabývá konkrétní konstrukcí operátoru pozorování na námi zvolené polární výpočetní síti. Ukázalo se, že v praxi bývá matice H často řídká, protože konstruovaná hodnota modelu v místě určitého měření je závislá hlavně na hodnotách modelu v několika málo okolních bodech (záleží na použitém interpolačním schématu). Například při použití bilineární interpolace a při uvažování pravoúhlé resp. „skoro“ pravoúhlé výpočetní sítě se hodnota modelu uvnitř dlaždice počítá pomocí hodnot v okolních čtyřech rozích, tzn. v každém řádku matice H jsou pouze 4 nenulové prvky. Navíc, čtenář možná vycítí další problém související s velkými gradienty výstupní veličiny (zvláště ve scénářích úniku škodlivin při nízké atmosférické disperzi) vzhledem ke kroku mříže. Úkol není zcela dořešen a je nutno mu věnovat další pozornost s ohledem na to, že operátor pozorování musí spolehlivě plnit dílčí interpolační / extrapolační funkce, které jsou základem a mnohonásobně vyvolávaným jádrem na všech stupních interpolačních technik, včetně případných dodatečných transformací při nepřímých pozorováních.

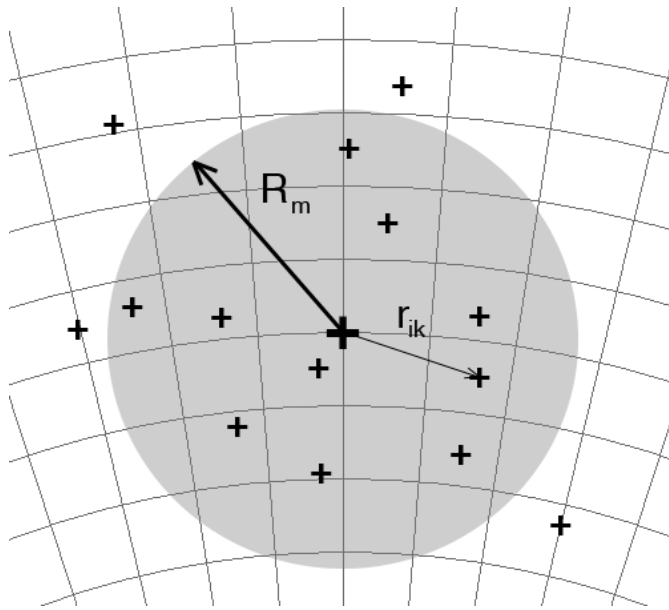
6.1 Klasická lokální interpolace.

Klasické interpolační techniky (forward interpolation) vycházejí ze znalosti hodnot měření y^p a jejich výsledkem je transformace pozorovaných hodnot do bodů určité sítě (například geografické, polární nebo rektangulární výpočtové sítě a pod). Tyto techniky jsou běžně používané například v oblastech nauky o Zemi, kdy je třeba vyjadřovat jisté prostorové kontinuuální veličiny ve formě mřížových dat (výškopis, typ zemského povrchu, půdní mapy, průběhy teplot, tlaků či znečištění a pod.) na pravidelné prostorové mříži. Nepravidelně rozptýlená měření jsou transformována na pravidelná mřížová data, která pak mohou být různými standardními digitálními modely GIS systémů zpracovávána a vizualizována. Transformace nejsou jednoznačně definovány, neboť výběr vhodné metody prostorové interpolace závisí na dalších vložených podmínkách (geometrických, statistických, fyzikálních a pod.).

Příslušné algoritmy se rozdělují na přesné a vyrovnávací. V prvním případě jsou zachovávány hodnoty v datových bodech, kde je jim přiřazena váha 1 (např. triangulace). Vyrovnávací algoritmy se snaží o hladší vyrovnání nezachovávající hodnoty v datových bodech (i v nich je váha < 1). Výsledná interpolace je však potom hladší s určitým (řízeným) stupněm vyrovnávání. Z mnoha technik vyrovnávání jmenujme alespoň polynomiální regresi. Často používanou technikou jsou vícerozměrné splajny. Klasická lokální polynomiální interpolace pro určení modelové hodnoty (t. zn. hledané i -té složky vektoru modelovaných hodnot) čistě z měřených hodnot je popsána vztahem (postupujeme podle obrázku 3):

$$x_i^a(u=0, v=0) = \sum_m \sum_n c_{mn} u^m v^n \quad m+n \leq M; \quad m, n \geq 0 \quad (6)$$

Zde v dílčí oblasti kolem určitého bodu výpočtové sítě i jsou definovány relativní lokální souřadnice (u, v) a je známa transformace mezi polárními a lokálními souřadnicemi.



- +** k-té pozorování kolem i (relativní číslování uvnitř kruhu vlivu R_m , $m = \text{číslo iterace}$)
- +** i-tý bod výpočtové sítě (bod analýzy)
- +** body polární sítě

Obr. 3 Vymezení oblasti vlivu při lokální interpolaci

Oblast zájmu je omezena na kruh s poloměrem R_i kolem bodu \underline{i} (v tomto bodě jsou relativní souřadnice rovny nule). Uvažujme celkem K_i pozorování $y^p(u_k, v_k)$, která leží uvnitř kruhu R_i , tedy $u_k^2 + v_k^2 \leq R_i^2$. Neznámé koeficienty c_{mn} se určí metodou nejmenších čtverců, kdy se minimalizuje kvadratický výraz:

$$I = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{K_i} \left[\sum_m \sum_n c_{mn} u_k^m v_k^n - y^p(u_k, v_k) \right]^2 \quad (7)$$

Poznamenejme, že pokud již existuje reprezentace kontinuální proměnné ve formě mřížových dat, lze potom formulovat úlohu opačnou, a sice nalézt funkci, která umožňuje s uspokojivou přesností určovat hodnoty z mřížových dat ve všech bodech prostoru. Tato funkce je realizována výše zmíněným operátorem pozorování podle vztahu (3). Pro polynomiální interpolaci se formálně počítá opět podle schémat (6) a (7) s tím rozdílem, že modelové hodnoty a pozorování jsou zaměněny.

Vztah (6) fakticky představuje nejjednodušší asimilační schéma pro situaci, kdy existují spolehlivá (bezchybná) měření hustě pokrývající terén, přičemž první odhad modelem není k dispozici.

Na interpolovanou hodnotu x_i^a (i-tou složku konstruovaného vektoru odhadu \mathbf{x}^a) je možno se dívat jako na výsledek objektivní analýzy, kde operátorem \hat{O} z obecného vztahu (1) je lokální interpolační schéma (6). Analogicky lze v tomto případě zredukovat obecné schéma objektivní analýzy (5) na tvar $\mathbf{x}^a = \hat{h}(\mathbf{y}^p)$. Zde zavádíme „operátor mříže“ \hat{h} transformující prostor pozorování do prostoru výpočtové mříže (tedy transformace opačná k operátoru pozorování \hat{H}).

6.2 Užití minimalizačních algoritmů založených na fitování měření vhodně volenou plochou odezvy

Jedná se o rozšíření zmíněného lokálního přístupu na celou doménu s využitím všech pozorování. Z řady možností (například globální polynomiální fitování nebo vícerozměrné splajny) jsme implementovali metodiku důsledně využívající apriorní modelovou znalost s přímou vazbou na gaussovský fyzikální model šíření vlečky znečištění. Jinými slovy to znamená, že výsledkovou plochu se pokoušíme optimálně nastavit na existující množinu pozorování (představovanou vektorem pozorování \mathbf{y}^p) skrze manipulaci tvaru plochy „povolené“ modelem. Tuto manipulaci provádí určitý minimalizační algoritmus pomocí grupy faktorů implementovaných do modelu.

Nutnou podmínkou takového postupu je užití pravděpodobnostní verze modelu šíření škodlivin životním prostředím. Výstupní veličinu Y (konkrétně zde náhodné hodnoty deponice I131 na diskretní polární síti) modelujeme pomocí Gaussova modelu vlečky škodlivin vyjádřeného schématem (podrobně [11]) :

$$Y = \mathfrak{R}^{\text{GPM}}(\mathbf{Z}); \quad \mathbf{Z} \equiv [Z_1, Z_2, Z_3, \dots, Z_M] \quad (8)$$

Do modelu vstupují stovky vstupních parametrů, z nichž pouze prvních M má náhodný charakter. Ostatním parametrům jsou implicitně přiřazeny jejich nominální (resp. „best estimate“) hodnoty. Ve schématu (8) figuruje vstupní náhodný vektor \mathbf{Z} dimenze M , jehož složkami jsou jednotlivé náhodné parametry Z_m . Zavedením formální transformace

$$Z_m = z_m^{\text{nom}} \times C_m \quad (9)$$

lze model parametrizovat pomocí bezrozměrných náhodných faktorů C s vyjádřením $Y = \mathfrak{R}^{\text{GPM}}(C_1, C_2, \dots, C_M)$. Rozsah fluktuací původních náhodných parametrů Z_m současně definuje omezení kladená na odpovídající rozsahy faktorů C_m . Na základě metody nejmenších čtverců zkonstruujeme funkci F představující součet čtverců odchylek modelu od měření přes všechna místa pozorování, vyjádřený jako skalární součin (označený složenými závorkami) :

$$F(c_1, \dots, c_M) = 1/P \cdot \{ [\mathbf{y}^p - \hat{H}(\mathbf{x}^b(c_1, \dots, c_M))] \cdot [\mathbf{y}^p - \hat{H}(\mathbf{x}^b(c_1, \dots, c_M))] \} \quad (10)$$

P je dimenze vektoru pozorování \mathbf{y}^p ; \mathbf{x}^b je diskretní reprezentace (na výpočetní polární mříži) výstupu modelu $\mathfrak{R}^{\text{GPM}}$ pro konkrétní sadu faktorů c_1, \dots, c_M . Konkrétní realizace c_m původního náhodného faktoru C_m jsou zde označovány malými písmeny. \hat{H} je operátor pozorování podle (3) transformující model do prostoru pozorování. Je zřejmé, že skalární součin lze stručněji zapsat pomocí vektoru inovací (4) jako $\{\mathbf{d} \cdot \mathbf{d}\}$.

Principem minimalizačních algoritmů je nalezení minima funkce F o M proměnných podle (10). Mnohonásobným vyvoláváním funkce F a srovnáváním jednotlivých iterací j je postupně generována a upřesňována nová grupa realizací faktorů $[c_1^{j+1}, \dots, c_M^{j+1}]$, přičemž s rostoucím počtem iterací by měly M -tice realizací náhodného vektoru \mathbf{C} konvergovat k optimální realizaci minimalizující funkci F , tedy :

$$[c_1^j, \dots, c_M^j] \Rightarrow [c_1^{\text{opt}}, \dots, c_M^{\text{opt}}] \quad (11)$$

Není cílem tohoto článku popisovat minimalizační algoritmy, které navíc jsou většinou dostupné v každé kvalitní knihovně podprogramů. Pouze poznamenejme, že byla úspěšně použita simplexová metoda přímého vyhledávání (autoři J.A. Nelder, R. Mead) implementovaná ve fortranovské knihovně IMSL (subrutina *BCPOL*) nebo v produktu

MATLAB (procedura *fminsearch*). Současně byla ověřena [6] i použitelnost pokročilejší Powellovy minimalizační metody ve spojitosti s fyzikálním Gaussovým modelem vlečky.

6.2.1 Aplikace minimalizačního algoritmu: „TWIN“ experiment

Problém získávání experimentálních dat z terénu je sám o sobě mimořádně metodicky složitý a technicky nákladný. Námi presentované matematické metody asimilace bez úzkého napojení na skutečné měřicí sítě se pohybují pouze v hypotetické oblasti. Nicméně optimisticky doufejme, že v budoucnu taková spolupráce modelování s experimentem se uskuteční. Testování asimilačních algoritmů pro jejich budoucí praktické nasazení však může ve velké míře pokračovat tím způsobem, že si měřená data nějak nasimulujeme. Ve světě je akceptován postup, kdy ke generování simulovaných měření je použit též fyzikální model, který používáme pro modelový odhad skutečného stavu systému. Znamená to, že zvolíme (případně náhodně vygenerujeme) sadu konkrétních faktorů $c_m^{\text{měř}}$, $m=1, \dots, M$ a spočteme analogicky s (8) sledované výstupní hodnoty podle schématu $\mathfrak{R}^{\text{GPM}}(c_1^{\text{měř}}, \dots, c_M^{\text{měř}})$. Pokud navíc tyto „měřené“ hodnoty jsou generovány přímo ve výpočtových uzlech, potom při správné funkci minimalizačního algoritmu by mělo dojít ke konvergenci k optimálním faktorům (a tím tedy k optimálnímu nastavení plochy odezvy na měřená data), které jsou nyní vyjádřeny simulovanými „měřeními“ podle:

$$[c_1^j, \dots, c_M^j]_{j \rightarrow \infty} \Rightarrow [c_1^{\text{opt}}, \dots, c_M^{\text{opt}}] \equiv [c_1^{\text{měř}}, \dots, c_M^{\text{měř}}] \quad (12)$$

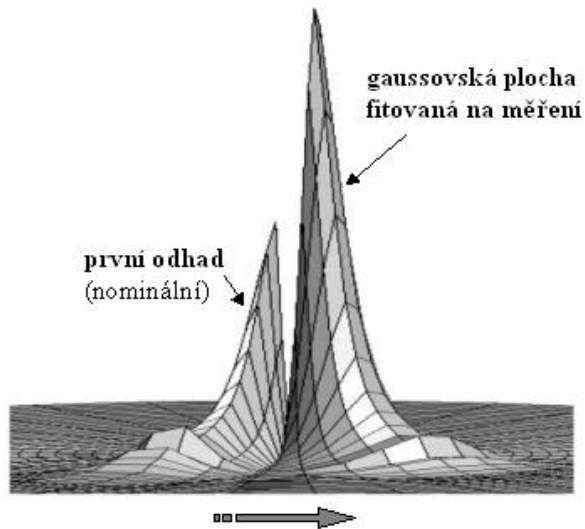
Počáteční odhad gaussovské plochy přímočarého šíření se postupně nastavuje na plochu vygenerovanou „měřeními“. Obě plochy se k sobě přibližují a zvýrazňují svoji vzájemnou podobnost („TWIN“ – dvojčata) až nakonec se zvětšujícím se počtem iteračních minimalizačních cyklů (téměř) splynou. Aby minimalizační algoritmus „nezabloudil“, musí se vyjít z „dobrého“ počátečního odhadu M-rozměrného vektoru faktorů C , což zabezpečíme volbou nulté iterace rovné nominálním hodnotám.

„TWIN“ experiment jsme prováděli pomocí kódu HAVAR-RP v jeho pravděpodobnostní verzi pro Gaussův model přímočarého šíření vlečky. Byly zvoleny 4 náhodné faktory, každý je sdružený s dílčím vstupním faktorem neurčitosti podle standardního schématu (9) a zajišťuje následující 4 základní manipulace s plochou odezvy modelu:

- Translace plochy výsledků ve vertikálním směru. Způsob zahrnutí do modelu pomocí neurčitosti uvolněné aktivity ze zdroje $Q = Q^{\text{nom}} \times C_1$.
- Komprese (dekomprese) v periferním směru y kolmém na směr šíření vlečky. Způsob zahrnutí do modelu pomocí neurčitosti horizontální disperse vlečky $\Sigma_y = \sigma_y^{\text{nom}} \times C_2$
- Otáčení plochy výsledků kolem počátku. Zahrnuto do modelu pomocí fluktuace kolem střední (nominální) hodnoty směru větru $\Phi = \varphi^{\text{nom}} + C_3 \times 2\pi/80$. C_3 má diskrétní rovnoměrné rozdělení na intervalu $< -5, +5 >$ (při rozdělení výpočetní polární růžice na 80 pravidelných úhlových sektorů)
- Změny longitudinálního gradientu plochy ve směru osy šíření vlečky. Zahrnuto do modelu pomocí neurčitosti hodnoty suché depozice $V_g = v_g^{\text{nom}} \times C_4$

Minimalizační algoritmus přímého vyhledávání (implementovaný v použitých standardních procedurách *BCPOL* nebo *fminsearch*) se ukázal jako robustní a stabilní, konvergence s relativní chybou 10^{-3} byla dosahována zhruba od dvousté iterace. Výsledky byly presentovány na konferenci [10]. Zde na obrázku 4 ilustrujeme počáteční stav představovaný prvním odhadem gaussovské plochy generované modelem $\mathfrak{R}^{\text{GPM}}(c_1^{\text{nom}}=1, c_2^{\text{nom}}=1, c_3^{\text{nom}}=0,$

$c_4^{\text{nom}}=1$), která se zhruba po 200 iteracích minimalizační procedury téměř přesně nastaví na plochu „měření“ předem simulovanou výpočtem \mathcal{R}^{GPM} ($c_1^{\text{měř}}=1.73$, $c_2^{\text{měř}}=1.51$, $c_3^{\text{měř}}=+4$, $c_4^{\text{měř}}=1.98$). Zde faktory $c_1^{\text{měř}}$, $c_2^{\text{měř}}$, $c_3^{\text{měř}}$, $c_4^{\text{měř}}$ jsme vhodně zvolili tak, aby výsledky bylo možno názorně ilustrovat. Poznamenejme ještě, že vektor pozorování \mathbf{y}^p byl zkonstruován tak, že z plochy „měření“ bylo odečteno celkem 33 hodnot (dimenze vektoru pozorování $P=33$), které pak vstupovaly do vyčíslování sumy nejmenších čtverců (10).



Obr. 4 „TWIN“ experiment – nastavení prvního (nominálního) odhadu na plochu „měření“.

6.2.2 Úskalí spojená s použitím minimalizačních metod pro realističtější segmentovaný Gaussův model

Segmentovaný model umožňuje zahrnout měnící se meteorologickou situaci během úniku. Podrobnější popis je v našem předchozím článku [11]. Dynamika úniku s trváním až několik desítek hodin je aproximována ekvivalentními hodinovými segmenty (ve smyslu bilance uvolňované aktivity radionuklidů). Pohyb každého hodinového segmentu („gaussovské kapky“) je modelován v jeho dalších hodinových fázích s využitím krátkodobých hodinových meteorologických předpovědí. Matematický model GPM^{seg} provádí simultánní výpočty pro všechny hodinové segmenty úniku a všechny jejich následné fáze posuvů odpovídající hodinovým meteorologickým předpovědím. Rozložení modelovaných výstupních veličin je potom dáno superpozicí pro všech S segmentů ve všech jejich T hodinových fázích. Odtud lze odhadnout, že trvání výpočtů bude minimálně $S \times T$ -krát delší než v případě přímočarého modelu, což bylo například u testované úlohy zhruba $50 \times$. Potom získat například 1000 náhodných realizací výstupních polí bude záležitostí několika hodin.

V současné době je testována reálnost užití minimalizačního algoritmu podle (10), kde $\mathbf{x}^b(C_1, \dots, C_M)$ je opět diskrétní reprezentace výstupu, tentokrát pro model $\mathcal{R}^{\text{GPM,seg}}(C_1, \dots, C_M)$. O komplikovanosti aplikace lze spekulovat i z hlediska nárůstu počtu stupňů volnosti, čímž miníme počet povolených nezávislých manipulací s tvarem plochy odezvy. Pokud u „TWIN“ experimentu jsme měli 4 stupně volnosti (tedy 4 faktory C_1 až C_4), u segmentované výsledkové po částech gaussovské ploše je situace podstatně složitější. Minimálně dva ze čtyř předchozích faktorů je nutné revidovat. Dále je nutné připojit alespoň jeden další náhodný faktor C_5 , kterým je střední unášivá rychlost \bar{U} jednotlivých gaussovských obláček (hodinových segmentů \underline{s} v jejich následných hodinových fázích \underline{t}). Způsob zahrnutí do modelu je proveden pomocí neurčitosti $\bar{U}(s,t) = \bar{u}^{\text{nom}}(s,t) \times C_5(s,t)$.

Revizi je nutno provést u faktoru C_1 , který se rozpadá na S faktorů C_{1s} ($s=1, \dots, S$), pokud předpokládáme nezávislost fluktuací uvolňované aktivity mezi jednotlivými segmenty úniku. Obdobně pokud fluktuace směru unášení gaussovských obláčků považujeme za nezávislé pro jednotlivé segmenty úniku, faktor C_3 by se rozpadnul tentokrát na $S+T$ faktorů. Ještě složitější situaci by vyvolal předpoklad, že fluktuace směru i střední rychlosti obláčků jsou vzájemně nezávislé. Počet stupňů volnosti by podstatně vzrostl a úvahy o realizovatelnosti takových megapostupů jsou namístě.

Čtenář se pak může ptát, proč jsme tedy těmto postupům věnovali tolik místa. Máme k tomu dva důvody. Předně v modelu může být obsažena velká systematická chyba. Lze si například snadno představit, že ve stresových situacích jaderných nehod dojde k záměně azimutu směru větru od obvyklé konvence „odkud fouká“ za „kam fouká“. V tomto případě bude první odhad modelu otočen až o 180° vzhledem k množině pozorovaných hodnot. Z takových neadekvátností se většina asimilačních postupů bude těžko vzpamatovávat, protože se u nich vychází z předpokladů o „dobrém“ modelu, kdy skutečný stav systému je dán superpozicí těchto „background“ hodnot a obecně malých přírůstků vektoru inovací podle (4). Avšak shora popisované postupy založené na minimalizaci střední kvadratické chyby nám pro tyto případy umožnily vyvinout rychlou proceduru tzv. „softwarového knoflíku“, pomocí něhož lze postupně interaktivně otáčet s modelem a najít jeho optimální výchozí orientaci vzhledem k množině pozorování na terénu, která považujeme za přesná. Nabízí se rozšíření této myšlenky na „víceúrovňový softwarový knoflík“ pro rychlé optimální nastavení disperze mraku, úrovně jeho aktivity a případného longitudinálního gradientu koncentrace aktivity.

Druhým důvodem k možnému použití minimalizačních postupů je jejich případná aplikace pro rychlé odhady situace při krátkodobých únicích aktivity v blízkém okolí zhruba do 20 km od zdroje.

6.3 Empirické metody: postupné korekce SCM (Successive Correction Method)

Nechť model poskytuje první odhad v bodech polární mříže \underline{i} a dále jsou k dispozici naměřené hodnoty \underline{k} (v lokálním měřítku viz obrázek 3). Indexem \underline{k} je označeno relativní číslování měření, které jsou k dispozici v okolí uvažovaného bodu analýzy \underline{i} uvnitř tzv. zóny vlivu (uvnitř kruhu s poloměrem R_m). Předpokládejme dále, že je k dispozici alespoň rámcový expertní odhad poměru ε^2 disperzí chyb měření k chybám modelu. Objektivní analýza metody SCM je vyjádřena iteračním cyklem v bodu mříže \underline{i} a začíná nultou iterací x_i^0 ztotožněnou s daným prvním odhadem (background), tedy $x_i^0 \equiv x_i^b$. Postupné upřesňování v dalších iteracích \underline{m} se děje podle:

$$x_i^{m+1} = x_i^m + \left(\sum_{k=1}^{K(im)} w_{ik}^m \cdot (y_k^p - x_k^m) \right) / \left(\sum_{k=1}^{K(im)} w_{ik}^m + \varepsilon^2 \right) \quad (13)$$

V m -té iteraci se berou v úvahu pozorování y_k^p ($k=1, \dots, K(i,m)$) ve sféře vlivu kolem bodu \underline{i} . Hodnoty x_k^m jsou hodnoty předchozí iterace přetransformované pomocí operátoru pozorování (3) z bodů výpočetní mříže do míst pozorování s relativním indexem \underline{k} . Vztah (13) představuje schéma objektivní analýzy metody SCM sloužící k iteračnímu upřesňování analýzy x_i^a , která v každém kroku je ztotožněna s novými hodnotami x_i^{m+1} . Schéma je založeno na empiricky volených vahách w_{ik}^m . V nich se mohou (ale také nemusí) odrážet určité fyzikální nebo statistické vlastnosti. V některých dílčích případech byly váhy w_{ik} odvozeny statisticky z dat, nicméně v meteorologii se tyto definují jako funkční závislosti, například :

$$w_{ik} = \frac{R_m^2 - r_{ik}^2}{R_m^2 + r_{ik}^2} \quad \text{pro } r_{ik} \leq R_m \quad \text{nebo } w_{ik} \approx \exp\left(-\frac{r_{ik}^2}{2 \cdot R_m^2}\right) \quad (14)$$

Tyto definice odpovídají intuitivní představě, že pozorováním bližším k analyzovanému bodu je dáována větší váha než pozorováním vzdáleným.

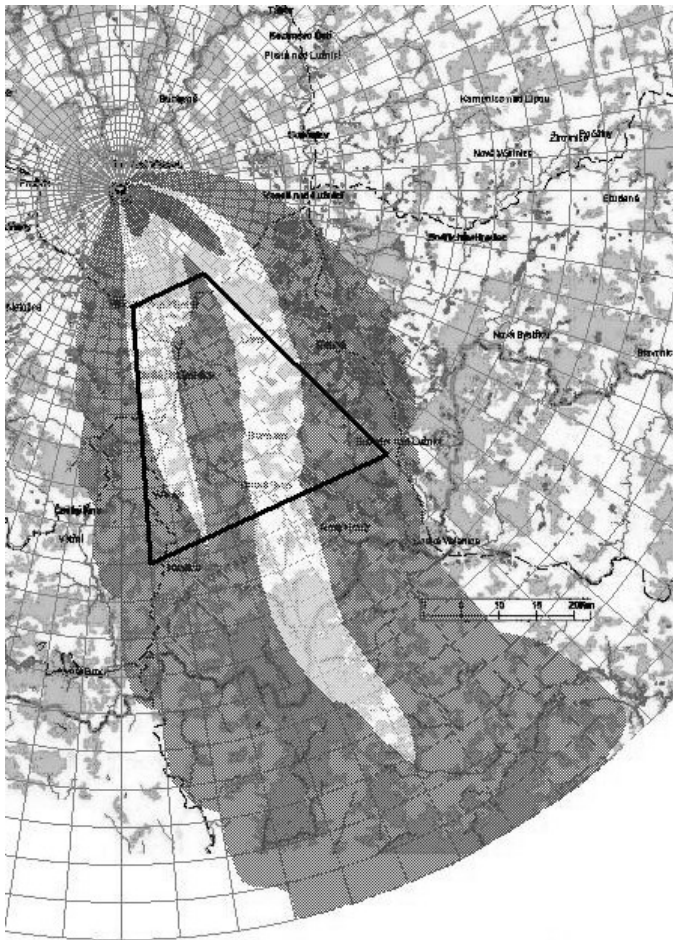
Metoda SCM byla testována na různých scénářích. Zde obrázek 5a se vztahuje ke scénáři *MELK- STEP II b*, který byl analyzován v rámci zadání pro společné česko-rakouské cvičení STEP II b a je podrobně zdokumentován pro kód HAVAR v [12].

Skutečná dynamika úniku byla rozdělena na 5 ekvivalentních segmentů úniku radioaktivity (z hlediska bilance aktivity), byly použity reálné meteorologické podmínky s identifikací “Case 2” ze dne 28.6.2002, 00:00 UTC. Výpočet proběhl s podrobným segmentovaným modelem $\mathfrak{R}^{\text{GPM,seg}}$ s následnou superpozicí výsledků příspěvku gaussovských obláčků všech segmentů ve všech jejich následných hodinových fázích. Na obrázku 5a je dále zvýrazněno i zvolené prostorové asimilační okno, v němž je provedena asimilace modelu s třemi měřeními zvolenými uvnitř. Hodnoty zvolených měření a modelové hodnoty depozice I131 jsou uvedeny v tabulce 1.

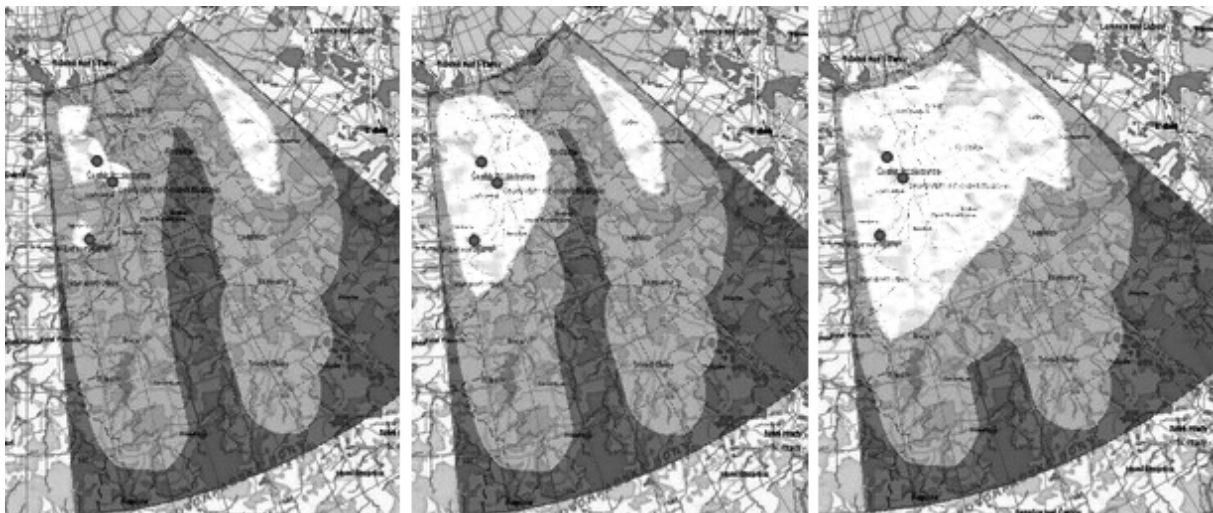
Tabulka 1

Číslo měření	Zeměpisná délka	Zeměpisná šířka	Hodnota měření [Bq/m ²]	Hodnota modelu (background) v místě měření [Bq/m ²]
1	14.456	48.989	1.620E+10	5.930E+09
2	14.474	48.974	1.300E+10	4.170E+09
3	14.450	48.933	9.840E+09	3.060E+09

Obrázek 5a ukazuje výsledky testování vlivu volby velikosti poloměru vlivu, odkud je zřejmé, jak měření při zvětšování poloměru vlivu za sebou „vytahují“ modelové hodnoty. Při $\varepsilon^2 \rightarrow 0$ se výsledky analýzy pomocí SCM v bodech měření přiklání k hodnotám zde měřeným. Vzhledem k empirické volbě w a ε^2 patří SCM k empirickým metodám, nicméně byla dlouhodobě úspěšně používána na superpočítačích v oblasti meteorologických předpovědí. Při srovnání SCM s metodou OI prováděné dále je poukázáno na omezení metody SCM, která pro vstupní neurčitosti lokálního charakteru není schopna respektovat fyzikální znalost modelu.



Obr. 5a. 2-D zobrazení izoplet I131 scénáře MELK- STEP II b na mapovém pozadí kolem JE Temelín. Je zobrazeno lichoběžníkové prostorové asimilační okno.



Obr. 5b. Asimilace tří měření s modelem podle SCM – závislost na volbě poloměru vlivu R_m (zleva $R_m = 1$ km, 5 km, 10 km).

6.4 Základní statistická metoda objektivní analýzy – optimální interpolace (OI)

Statistické metody potřebují detailnější analýzu struktury chyb modelu i chyb pozorování vyjádřené pomocí kovariančních matic chyb modelu a měření. Krok analýzy asimilačního cyklu metody OI hledá optimální hodnoty vektoru analýzy \mathbf{x}^a na základě kritéria minimalizace chyb procedury analýzy (1). Optimální oprava má v analogii se vztahem (5) tvar (viz např. [1,9]) :

$$\mathbf{x}^a = \mathbf{x}^b + W^{OI} \mathbf{d} \quad (15)$$

Vektor inovací \mathbf{d} je definován podle vztahu (4), přičemž operátor pozorování \hat{H} transformuje hodnoty modelu do pozic pozorování podle schématu (3). N-rozměrné vektory chyb \mathcal{E}^b odhadu modelem, chyb \mathcal{E}^a výsledné analýzy \mathbf{x}^a a P-rozměrný vektor chyb pozorování \mathcal{E}^p definujeme vztahy:

$$\mathcal{E}^b = \mathbf{x}^b - \mathbf{x}^s; \quad \mathcal{E}^a = \mathbf{x}^a - \mathbf{x}^s; \quad \mathcal{E}^p = \mathbf{y}^p - \hat{H}(\mathbf{x}^s)^p \quad (16)$$

Index s označuje skutečnou hodnotu, kterou odhadujeme. Ta je sice neznámá, nicméně lze zavést určité předpoklady o jejich statistických vlastnostech. Předně musí být modelové odhady i pozorování nevychýlené ve smyslu:

$$\hat{E}\{\mathcal{E}^b\} = 0 \quad \text{a} \quad \hat{E}\{\mathcal{E}^p\} = 0 \quad (17)$$

Kde $\hat{E}\{\dots\}$ je operátor střední hodnoty. Dále předpokládáme, že modelový odhad je „dobrou“ aproximací skutečného stavu, který je možné v tomto případě vyjádřit superpozicí *malých* přírůstků na modelový odhad. Přírůstek pozorování podle základního vztahu (4) je pak možno dále rozepsat (a dále provést linearizaci) podle:

$$\mathbf{d} = \mathbf{y}^p - \hat{H}(\mathbf{x}^b) = \mathbf{y}^p - \hat{H}(\mathbf{x}^s + [\mathbf{x}^b - \mathbf{x}^s]) = \mathbf{y}^p - \hat{H}(\mathbf{x}^s) - H(\mathbf{x}^b - \mathbf{x}^s) = \mathcal{E}^p - H\mathcal{E}^b \quad (18)$$

Zde zavádíme lineární operátor pozorování reprezentovaný maticí H , která transformuje modelový prostor do jeho odpovídajících hodnot v prostoru pozorování. Při určení kovarianční matice chyb procedury analýzy optimální interpolace vycházíme z druhého výrazu ve vztahu (16). Po dosazení \mathbf{x}^a ze vztahu (15) dojdeme k vyjádření chyb analýzy v termínech chyb modelu a chyb pozorování:

$$\mathcal{E}^a = \mathcal{E}^b + W^{OI} (\mathcal{E}^p - H\mathcal{E}^b) \quad (19)$$

Kovarianční matice chyby analýzy A^a se vyjádří jako součin vektoru analýzy a jeho transpozice jako $\mathcal{E}^a(\mathcal{E}^a)^T$. Bez dalších detailů uvedeme výsledný vztah pro optimální váhovou matici W^{OI} z (15) plynoucí z podmínky minimalizace chyby analýzy (podrobněji [1, 9]):

$$W^{OI} = BH^T (HBH^T + R)^{-1} \quad (20)$$

Horní indexy T a -1 po řadě označují operaci transponování a inverze. B značí kovarianční matici ($N \times N$) chyb modelu počítané jako střední hodnota $\hat{E}\{\mathcal{E}^b(\mathcal{E}^b)^T\}$, tedy s prvky $b_{ij} = \hat{E}\{e_i^b \cdot e_j^b\}$; e_i , e_j jsou složky vektoru chyb modelu. Tuto střední hodnotu lze odhadnout pomocí Monte Carlo procedury z velkého počtu K realizací modelu. Hodnota K musí být podstatně větší než je rozměr stavu, tedy řádově několik tisíc. Z důvodů efektivity je nutné užít metodu vzorkování LHS (Latin Hypercube Sampling) pro generování M -tic náhodných vstupních parametrů modelu $\{z_1^k, z_2^k, \dots, z_M^k\}_{k=1, \dots, K}$, pro $M=12$ podrobně v [10]. Postupným dosazováním těchto M -tic do modelu se získá zmíněných K náhodných realizací N -rozměrného vektoru \mathbf{x}^b (konkrétně pro produkt HAVAR RP řešeno v [11]). Teprve nyní trpělivému čtenáři je zřejmé, proč k pokročilým asimilačním postupům je nezbytná

pravděpodobností verze environmentálního modelu, kdy k popisu kovarianční struktury chyb modelu jsou použity výsledky analýzy neurčitosti. Tuto problematiku jsme podrobně rozebírali v předchozím v předchozím článku [11], kde je rozváděno i maticové schéma pro matici B .

Ve vztahu (20) značí R kovarianční matici ($P \times P$) chyb pozorování počítanou jako střední hodnota $\hat{E} \{ \mathcal{E}^p (\mathcal{E}^p)^T \}$. Optimální váhová matice je tedy podle (20) dána součinem kovariancí chyb modelu promítnutých do prostoru pozorování a inverzí součtu kovariance chyb modelu a pozorování. V našich testech jsme se kvalifikovanou konstrukcí matice R nezabývali. Vycházeli jsme z předpokladu nezávislosti měření, což vede k diagonální matici. Její prvky jsme variantně volili a ověřili základní vlastnost statistických postupů, že při zpřesňování měření se hodnoty analýzy přiklánějí k pozorováním (nebo naopak k modelovému odhadu při nekvalitních měřeních zatížených velkou chybou).

Jsou vyvíjeny nejrůznější postupy, jak se vyrovnat s mimořádným rozměrem matice B , kdy například u operačních numerických předpovědních meteorologických modelů NWP rozměr matice snadno dosahuje řádu 10^7 .

Zvládnutí statistické metody OI představuje současně první krok směrem k pokročilým metodám. Byla prokázána ekvivalence prostorové variační metody 3D-Var s OI. Vlastní numerický výpočet konkrétního scénáře může být vhodnější u první nebo druhé metody. Dalším důležitým zjištěním je fakt, že na metodu OI se lze dívat též jako na ekvivalentní redukovanou úlohu pro Kalmanův filtr pro případ stacionární kovarianční matice chyb modelu.

6.5 Přednosti užití statistických metod před empirickými postupy

Je třeba si uvědomit, že detailnost určování kovarianční struktury chyb modelu se zvyšuje s kvalitou analýzy neurčitostí modelu. V předchozím článku [11] jsme se touto tématikou podrobně zabývali, přičemž je tam uvedena grupa nejdůležitějších dvanácti vstupních parametrů modelu atmosférické disperze a depozice a je uveden podrobný postup generování příslušné kovarianční matice chyb pro výstupní veličinu depozice I131 na terénu představovanou vektorem \mathbf{x}^b dimenze $N = 2\,800$ (již zmíněný počet uzlů uvažované polární výpočetní mříže).

Ukázalo se, že ve zvolené grupě neurčitostí je nutné respektovat ještě další kvalitativní rys, kterým je rozlišení efektu vstupních parametrů na **lokální** a **globální** charakter. Jestliže zkoumáme vliv fluktuací jednotlivých parametrů na prostorovou závislost fluktuací depozice I131 na terénu, zjistíme, že například fluktuace (primární chyba v odhadu) celkové uniklé aktivity zjevně ovlivní depozici ve všech N bodech prostorové sítě v jednom směru (silná prostorová korelace). Naopak třeba neurčitost konstanty vymývání Λ (s^{-1}) se uplatní při lokálních atmosférických srážkách zase jen lokálně (resp. v určité podoblasti), přičemž například korelace s částí před clonou nedotčenou deštěm musí být nulové. Předností OI je, že takové rozlišení je implicitně obsaženo již v samotné kovarianční matici chyb modelu jako znalostní informace modelu.

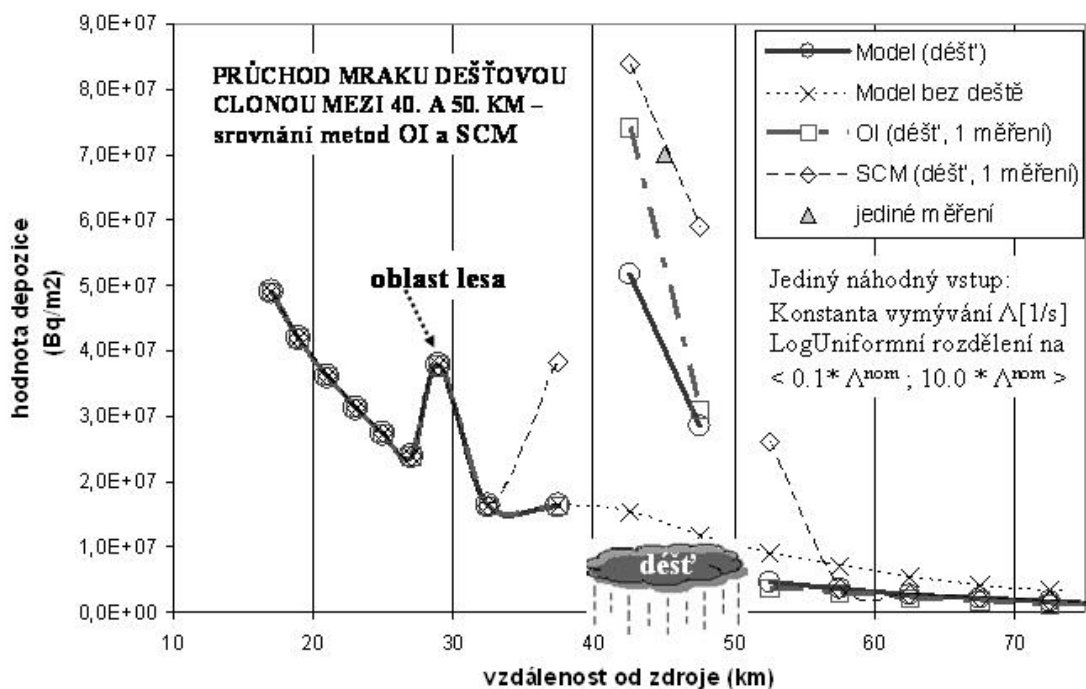
Ve svém důsledku může ignorance lokálního efektu obsažená v empirických asimilačních postupech vést až k jejich nepoužitelnosti. Pro ilustraci jsme vymysleli jednoduchý scénář, kdy uvažujeme přímočaré šíření vlečky škodlivin. Předpokládejme únik aktivity I131 $2.2 \cdot 10^{16}$ Bq z JE Temelín ve směru na Jindřichův Hradec, přičemž ve vzdálenosti mezi 40. a 50. kilometrem od zdroje se vyskytuje po celou dobu přechodu vlečky nad terénem dešťová clona s konstantní intenzitou 1 mm/hod. I další parametry meteorologické situace nechť jsou po

celou dobu neměnné (kategorie stability atmosféry D, disperzní formule SCK/CEN pro venkovský terén, střední rychlost větru $v_{10} = 1 \text{ m.s}^{-1}$). Výška úniku je 100 m. Pokud jsme uvažovali zmíněných 12 vstupních náhodných parametrů, namodelovali jsme i kovarianční matici označenou KM^2 . V našem scénáři, jehož účelem je ilustrovat lokální efekt, však uvažujeme pouze jediný náhodný vstupní parametr příslušný konstantě vymývání Λ (logaritmicke-rovnorné rozdělení, fluktuace v rozmezí jednoho řádu kolem nominální hodnoty). Ostatním vstupům přiřadíme jejich nominální hodnoty („best estimate“). Provedeme celé mnohonásobné modelování náhodného výstupu (depozice I131) pouze s náhodným Λ a určíme tak kromě jiného i kovarianční matici KM^1 , která nyní jako matice chyb modelu B vstupuje do vztahu (20) procedury OI. Dále nechť na terénu provedeme jediné měření depozice I131, a to v centru dešťové clony na kilometru 45. Hodnota naměřené depozice I131 nechť je $7.0E+7 \text{ Bq.m}^{-2}$.

Nyní provedeme asimilaci tohoto jediného měření s modelovou předpovědí, která je totožná s nominálním výpočtem s dešťovou clonou. Scénář je zobrazován ve výsledkovém subsystému produktu HAVAR-RP v 2-D na příslušném mapovém pozadí. Zde jsem vybrali jen některé dílčí výsledky pro depozici I131 pod osou mraku (směr Jindřichův Hradec), které jsou zobrazeny v jednorozměrných grafech 6a a 6b. Vstupem do asimilační procedury je modelová předpověď a zmíněné jediné měření (na obr. 6a jsou označeny jako ‘Model (dešť)’ resp. ikonkou ‘ Δ ’).

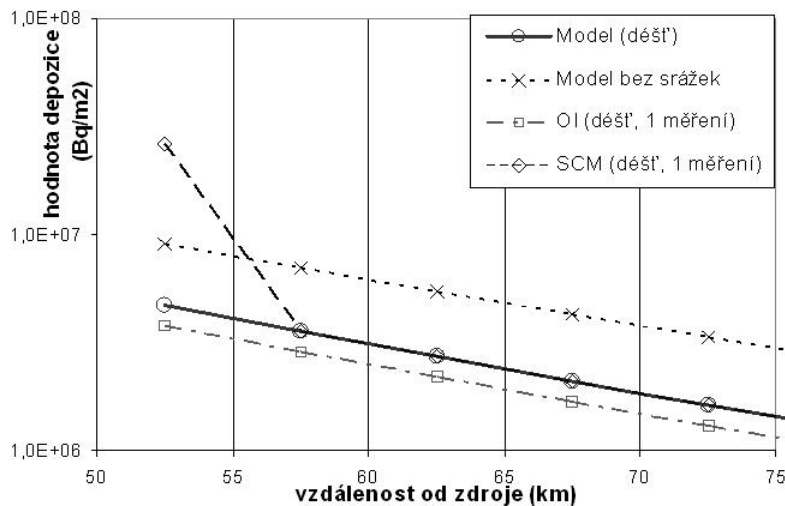
V modelové předpovědi je obsažena apriorní informace odrážející fyzikální zákonitosti. Mírně tím též tvar průběhu křivky ‘Model (dešť)’ ukazující pokles usazované aktivity vlivem primárního ochuzování vlečky v důsledku radioaktivního rozpadu, atmosférické disperze a mechanismů suchého vypadávání radionuklidu z přízemní vrstvy vzduchu, ke kterým v oblasti deště přistupuje dominantní mechanismus vymývání nuklidů z vlečky atmosférickými srážkami. Typickým důsledkem je fakt, že křivky koncentrace aktivity v přízemní vrstvě vzduchu a jejího časového integrálu nejsou v krajních bodech dešťové clony hladké a depozice v nich je nespojitá s charakteristickým skokem.

Přímočarý únik I-131 z ETE směr Jindřichův Hradec



Obr. 6a Výsledek asimilace provedené procedurou objektivní analýzy empirické jednorůchodové korekční metody SCM a statistické optimální interpolace OI.

Asimilaci jediného měření provedeného uprostřed dešťové clony s modelovou předpovědí (což je nominální výpočet s deštěm) jsme provedli dvojím způsobem, a to procedurou objektivní analýzy metody SCM (poloměr vlivu podle obrázku 3 byl zvolen 10 km) a dále statistickou metodou OI podle vzorců (15) a (20). Výsledky obou postupů jsou znázorněny na obrázku 6a. Na obrázku 6b je semilogaritmické zobrazení situace v oblasti za dešťovou clonou, které výrazněji ukazuje schopnost testovaných metod respektovat modelovou znalost.



Obr. 6b Semilogaritmická závislost podrobněji ilustrující schopnost obou metod respektovat modelovou znalost za dešťovou clonou.

Z provedeného rozboru je zřejmé, že empirická metoda SCM se řídí pouze vágně volenou sférou vlivu, přičemž s určitou vahou (závislou na distanci) „vytáhne“ hodnoty původního odhadu za měřeními (zde voleno měření s velkou přesností, tedy $\varepsilon^2 \rightarrow 0$) existujícími v oblasti vlivu. Takový mechanismus může být akceptovatelný v případě globálního efektu vstupních parametrů, nikoliv však v případě lokálního působení.

Je evidentní, že empirická interpolace SCM je „slepá“ k apriorní modelové znalosti a nesprávně modifikuje hodnoty modelu v některých částech, například v oblasti před a za dešťovou clonou. To je jednak fyzikální absurdita a jednak je porušena bilance aktivity I131 na terénu. Naproti tomu statistická metoda OI provádí korektní modifikace modelu a ve výsledné asimilaci je zjevně zachována apriorní fyzikální znalost modelu a bilance aktivity na terénu. To, že úvahy v tomto odstavci nejsou jen akademické, vyplývá z faktu, že atmosférické srážky během mimořádných úniků radioaktivity mají zcela dominantní vliv na distribuci aktivity na okolním terénu.

Literatura

- [1] Daley R.: Atmospheric data analysis. Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1991.
- [2] Drécourt J-P.: Data assimilation in hydrological modelling. Ph.D. Thesis, DHI Water&Environ. Dpt., June 2004.

- [3] Fuentes M., Raftery A. E : Model evaluation and spatial interpolation by Bayesian Combination of observations with outputs from numerical models. BIOMETRICS 61, 36-45, 2005.
- [4] Gering F., Muller H., ... : Assessment and evaluation of the radiological situation in the late phase of a nuclear accident. Rad. Prot. Dosimetry, Vol. 109, Nos.1-2, 2004.
- [5] Gering F., Müller H., Richter K. ... : Model description of the Deposition Monitoring Module (DEMM). RODOS PV 5.0. RODOS (RA5)-TN(02)03, 2002
- [6] Hofman R.: Zpřesnění matematického modelu na základě procedury asimilace s měřenými daty. Diplomová práce, ČVUT, FJFI KM -softwarové inženýrství, (květen 2006).
- [7] Housa L.: Pravděpodobnostní přístup posuzování závažnosti radioaktivních úniků do atmosféry. Diplomová práce, ČVUT, FJFI KM -softwarové inženýrství, (květen 2006).
- [8] Janoušek M., Kalibera J., Vondráčková H., (všichni ČHMÚ), Pecha P., Hanuš J. (všichni ÚTIA): Lokalizace modulu MATCH systému RODOS pro popis šíření radioaktivních exhalací na velké vzdálenosti s využitím předpovědních dat z meteorologického modelu ALADIN. Zpráva k projektu 6/2002-E03-2, spolupráce ČHMÚ- ÚTIA AV ČR, 2004.
- [9] Kalnay E. : Atmospheric modeling, data assimilation and predictability. Cambridge Univ. Press, 2003, ISBN 0-521-79179-0.
- [10] Pecha P., Pechová E.: Modelling of random activity concentration fields in air for purposes of probabilistic estimation of radiological burden. 10th Int. Conf. on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling. Ioannina, Greece, 2005, pp. 540-544.
- [11] Pecha P., Housa L.: Modely šíření znečištění životním prostředím – od deterministických odhadů k pravděpodobnostnímu hodnocení. Bezpečnost jaderné energie, 2006, v tisku.
- [12] Pechová E.: Calculations of radionuclide propagation prepared for joint Czech-Austrian workshop STEP II b – „Realistic Case Studies“. Workshop comparison, Viena, April 2003, EGP 5014-J-030152.
- [13] Richter K., Müller H., Gering F. : Model description of the Food Monitoring Module FoMM in RODOS PV 5.0. RODOS (RA5)-TN(02)02, Nov. 2002
- [14] Rojas-Palma C., Gering F., Muller H., ... : Data assimilation in the decision support system RODOS. Rad. Prot. Dosimetry, Vol. 10, No.1, 2003.
- [15] Vondráčková H., Janoušek M. (ČHMÚ), Pecha P., Hanuš J. (ÚTIA): Asimilace matematického modelování úniku radionuklidů s aktuálními meteorologickými vstupy. Zpráva k projektu 6/2002-E03-1, spolupráce ČHMÚ- ÚTIA AV ČR, 2003, 139 stran, deponováno na SÚJB.
- [16] Vondráčková H., Janoušek M. (ČHMÚ), Pecha P., Hanuš J. (ÚTIA): Lokalizace řetězu meteorologických rozptylových modelů systému RODOS pro lokality JE v ČR. Zpráva k projektu 6/2002-E03-1, spolupráce ČHMÚ- ÚTIA AV ČR, 2003.