



تعیین پارامترهای چشمه‌ی ناشناخته‌ی پخش جوی با استفاده از نرم‌افزار AERMOD و استنتاج بیزین همراه با زنجیره‌ی مارکوف مونت کارلو

احمد حقیقت‌طلب، احمدرضا ذوالفقاری*، عبدالحمید مینوچهر، حیدرعلی کیا
دانشکده مهندسی هسته‌ای، دانشگاه شهید بهشتی، صندوق پستی: ۱۹۸۳۹۶۳۱۱۳، تهران - ایران

چکیده: برخی از حوادث در نیروگاه‌ها و واحدهای صنعتی به نشت مواد پرتوزا و آلاینده‌ها در محیط منجر می‌شوند. وجود جریان باد سبب انتقال این مواد و آلاینده‌ها به مناطق دوردست می‌شود. در این مقاله با فرض دریافت و آشکارسازی آلاینده‌ها در یک منطقه به دنبال مدل‌سازی برای تخمین و پیدا کردن مکان حادثه و شدت آن می‌باشیم. برای مدل‌سازی فرایند فوق، نیازمند یک نرم‌افزار با توانایی محاسبه‌ی پخش در اتمسفر هستیم. لازم است علاوه بر نرم‌افزار پخش از روش‌های ریاضی برای استنتاج مکان و شدت چشمه استفاده شود. در این مقاله از نرم‌افزار AERMOD و استنتاج بیزین همراه با زنجیره‌ی مارکوف مونت کارلو استفاده شده است. استفاده از روش بیزین و زنجیره‌ی مارکوف مونت کارلو در این زمینه تازگی ندارد، اما نرم‌افزار AERMOD کد معتبری است که در سال‌های اخیر اعتبارسنجی شده و جهت مدل‌سازی پخش مواد معرفی شده است. در این نوشتار نرم‌افزار AERMOD با روش‌های ریاضی پیش‌گفته ترکیب و برای مکان‌یابی چشمه و تعیین قدرت آن استفاده شده است. برای اعتبارسنجی این روش، یک مثال ارزیابی شده که در آن با فرض دریافت اطلاعات آلاینده در یک منطقه، مکان و شدت چشمه، (دوباره) پیدا و تخمین زده شده و سپس با حل مسئله به صورت مستقیم به کمک نرم‌افزار AERMOD صحت آن ارزیابی شده است. نتایج محاسبه نشان داد که مکان چشمه به طور متوسط در محدوده‌ی ۷ کیلومتر با دقت حدود ۵ متر تخمین زده شد که بیان‌گر صحت و توانایی این الگوریتم است.

کلیدواژه‌ها: نرم‌افزار AERMOD، استنتاج بیزین، زنجیره‌ی مارکوف مونت کارلو، پخش جوی، چشمه ناشناخته

Atmospheric Dispersion Unknown Source Parameters Determination Using AERMOD and Bayesian Inference Along Markov Chain Monte Carlo

A. Haghghattalab, A.R. Zolfaghari*, A.H. Minouchehr, H.A. Kiya
Nuclear Engineering Faculty, Shahid Beheshti University, P.O.Box: 1983963113, Tehran - Iran

Abstract: Occurrence of hazardous accident in nuclear power plants and industrial units usually lead to release of radioactive materials and pollutants in environment. These materials and pollutants can be transported to a far downstream by the wind flow. In this paper, we implemented an atmospheric dispersion code to solve the inverse problem. Having received and detected the pollutants in one region, we may estimate the rate and location of the unknown source. For the modeling, one needs a model with ability of atmospheric dispersion calculation. Furthermore, it is required to implement a mathematical approach to infer the source location and the related rates. In this paper the AERMOD software and Bayesian inference along the Markov Chain Monte Carlo have been applied. Implementing, Bayesian approach and Markov Chain Monte Carlo for the aforementioned subject is not a new approach, but the AERMOD model coupled with the said methods is a new and well known regulatory software, and enhances the reliability of outcomes. To evaluate the method, an example is considered by defining pollutants concentration in a specific region and then obtaining the source location and intensity by a direct calculation. The result of the calculation estimates the average source location at a distance of 7km with an accuracy of 5m which is good enough to support the ability of the proposed algorithm.

Keywords: AERMOD Software, Bayesian Inference, Markov Chain Monte Carlo, Atmospheric Dispersion, Unknown Source



۱. مقدمه

در واحدهای صنعتی و نیروگاهی در حال کار عادی، معمولاً مقداری آلاینده و یا مواد پرتوزا در محیط رها می‌شود. به علت وجود باد و شرایط پویای جو، این مواد در منطقه پخش شده و در نهایت با توجه به نقطه‌ی رهاسازی و شدت خروج آلاینده‌ها، توزیعی از غلظت آن در محیط اطراف وجود خواهد داشت. الزامات زیست‌محیطی ایجاب می‌کند که غلظت آلاینده‌ها در محیط کم‌تر از یک مقدار معین باشد. علاوه بر رهاسازی آلاینده‌ها در حالت کار عادی، گاهی اوقات به علت بروز حادثه و عدم پاسخ‌گویی سیستم‌های ایمنی واحد صنعتی، مقدار قابل توجهی فراتر از مقدار مجاز مواد ناخواسته در جو رها شده و با توجه به شرایط جوی، دامنه‌ی آلودگی به مکان‌های دوردست که فاصله‌ی آن‌ها از محل حادثه بسیار زیاد است، گسترش می‌یابد. حال اگر در منطقه‌ای سیستم‌های آشکارسازی، آلاینده‌ها را آشکار نمایند، برای تصمیم‌گیری در خصوص امداد رسانی به مردم، لازم است مکان و قدرت چشمه‌ای که منجر به ایجاد آلودگی شده است، مشخص شود.

(دوباره) پیدا کردن حوادث منجر به پخش آلاینده‌های جوی به طور فزاینده‌ای در سال‌های اخیر مورد توجه قرار گرفته و از روش‌های مختلفی برای انجام آن استفاده شده است [۱، ۲، ۳، ۴]. آلن و همکارانش [۵، ۶] برای تعیین مشخصات مکان و نرخ رهاسازی چشمه و جهت باد از ترکیب الگوریتم بهینه‌سازی ژنتیک و یک مدل گیرنده‌ی وارونه و از مدل‌های پخش توده و پخش گاوسی استفاده کرده‌اند. جوهانسون و همکارانش [۷]، کاو و همکارانش [۸]، و نومان و همکارانش [۹] برای تعیین پارامترهای چشمه‌ی ناشناخته، از روش استنتاج بیزین و زنجیره‌ی مارکوف مونت کارلو استفاده کرده‌اند. مهم‌ترین وجه تمایز روش استنتاج بیزین این است که برای پارامترهای چشمه‌ی ناشناخته توابع احتمالی را تخمین می‌زند و نایقینی در پارامترهای تخمین‌زده مشخص است، ولی در روش‌های بهینه‌سازی برای یافتن حد نهایی تابع هدف، تقریب‌های نقطه‌ای پارامترها مشخص می‌شوند.

کیتز و همکارانش [۱۰] برای تعیین پارامترهای چشمه‌ی ناشناخته از معادله‌ی الحاقی پخش برای محاسبه‌ی غلظت آلاینده‌ها و استنتاج بیزین استفاده کرده‌اند. گیدو و همکارانش

[۱۱] از روش مونت کارلو برای پارامترهای چشمه‌ی ناشناخته نمونه‌برداری نموده و با مدل پخش گاوسی، غلظت آلاینده‌ها را محاسبه و در هر مرحله، نتایج شبیه‌سازی با نتایج اندازه‌گیری را مقایسه کرده‌اند. از آنجایی که هدف در چنین الگوریتم‌های تکرار شونده‌ای، بهینه کردن تابع خطا بین نتایج شبیه‌سازی و مشاهده‌ها است، تابع‌های خطای مختلفی معرفی و مقایسه‌ای بین نتایج آن‌ها صورت گرفته است.

امکان (دوباره) پیدا کردن حادثه با استفاده از داده‌های اندازه‌گیری وجود دارد. در یکی از روش‌ها داده‌ها و مدل‌های تخمینی از طریق استنتاج بیزین و زنجیره‌ی مارکوف مونت کارلو برای به دست آوردن پارامترهای چشمه ترکیب می‌شوند. این روش، داده‌های اندازه‌گیری را با مدل‌های پیش‌بینی ترکیب می‌کند و بهترین برآوردها از پارامترهای چشمه‌ی ناشناخته را ارائه می‌کند. این روش قابل کاربرد و تطبیق با هر گونه مدل پخش جوی است. هدف این مقاله استفاده از استنتاج بیزین همراه با زنجیره‌ی مارکوف مونت کارلو و مدل پخش گاوسی اصلاح شده برای تخمین مکان و قدرت چشمه‌ی ناشناخته‌ی پخش جوی مواد آلاینده است. در این مقاله برای محاسبه‌ی پخش جوی از نرم‌افزار AERMOD که یک نرم‌افزار تنظیمی^(۱) معتبر برای مدل‌سازی پخش جوی در محیط‌های مختلف است و اخیراً جای‌گزین نرم‌افزار ISC3 شده، استفاده شده است.

۲. مدل ترکیبی گاوسی و دوگاوسی برای پخش جوی

اگر فرض کنیم که در دستگاه مختصات دکارتی محور x منطبق بر جهت باد و چشمه در مبدأ مختصات است، غلظت آلاینده را می‌توان چنین بیان کرد

$$\bar{C} = \frac{Q}{\pi\sigma_y\sigma_z U} \text{Exp}\left\{-\left(\frac{y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right)\right\} \text{Exp}\left(-\lambda \frac{x}{U}\right) \quad (1)$$

که در آن، Q نرخ ماده‌ی خروجی از چشمه، U سرعت متوسط باد و σ_y و σ_z واریانس توزیع آلاینده در جهت‌های y و z و از پارامترهای مهم استفاده شده در مدل گاوسی هستند که به پایداری جو و فاصله از مبدأ آلاینده وابسته‌اند. با فرض همگن



- استفاده از یک روش پیشرفته برای تعیین مشخصات پارامترهای اساسی لایه‌های مرزی،
- بررسی مسیرهای پیچ و خم دار توده،
- استفاده از مدل‌های گاوسی و دو گاوسی در جهت‌های به ترتیب افقی و عمودی.

عملکرد این مدل با توجه به تفاهم نامهی آژانس حفاظت محیط زیست ایالات متحدهی آمریکا بررسی شده و به خاطر عملکرد قابل قبول و بهتر نسبت به بسیاری دیگر از مدل‌ها در سال ۲۰۰۱ به عنوان یک مدل تنظیمی معتبر جایگزین مدل ISC3 شده است [۱۲، ۱۳].

۳. مدل‌سازی و استنتاج بیزین

نظریه و مدل‌سازی بیزین به طور مبسوط به وسیلهی برنارد و همکارانش [۱۴] و گلمان و همکارانش [۱۵] ارایه شده است. با توجه به اهمیت موضوع، تعاریف و اصطلاح‌های به کار رفته در مدل‌سازی و استنتاج بیزین به طور مختصر بیان می‌شود. اگر M و D دو متغیر تصادفی باشند، آن‌گاه، $P(M)$ توزیع احتمال M ، $P(M, D)$ توزیع احتمال ترکیبی و $P(M | D)$ توزیع احتمال M است به شرطی که D اتفاق افتاده باشد. بین توزیع‌های فوق رابطه‌ی زیر برقرار است

$$P(M, D) = P(M | D)P(D) = P(D | M)P(M) \quad (۴)$$

اگر متغیرهای M و D مستقل از هم باشند، آن‌گاه

$$P(M, D) = P(M)P(D) \quad (۵)$$

با داشتن توزیع ترکیبی M و D ، توزیع احتمال $P(D)$ با انتگرال‌گیری بر روی M به صورت رابطه‌ی انتگرالی $P(D) = \int_{\Omega} P(dM, D)$ ، که در آن $M \in \Omega$ به دست می‌آید، که محاسبه‌ی آن در اکثر موارد بسیار مشکل و یا ناممکن است. اگر M یک متغیر تصادفی گسسته با مقادیر احتمالی M_1, \dots, M_n باشد، $P(D)$ از رابطه‌ی جمع به صورت $P(D) = \sum_{i=1}^n P(M = M_i, \dots, M_i)$ محاسبه می‌شود.

بودن خواص در جهت افقی، σ_x برابر σ_y است. اگر چشمه‌ی آلاینده در ارتفاع H قرار داشته باشد، با در نظر گرفتن زمین به عنوان یک انعکاس‌دهنده‌ی مواد آلاینده می‌توانیم از چشمه و تصویر آن نسبت به زمین استفاده کنیم. بدین ترتیب تغییرات آلاینده در سطح زمین برابر صفر و توزیع مواد چنین محاسبه می‌شود

$$\bar{C} = \frac{Q}{2\pi\sigma_z\sigma_y U} \text{Exp}\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left\{ \text{Exp}\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \text{Exp}\left[-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\} \text{Exp}\left(-\lambda \frac{x}{U}\right) \quad (۲)$$

اگر فرض کنیم که در هر لحظه مقداری ماده به صورت یک توده آزاد گردد و مرکز این توده توسط باد جابه‌جا شود و هم‌چنین توزیع مواد آلاینده در درون توده، گاوسی باشد، آن‌گاه به چنین وضعیتی، انتشار توده‌ای گاوسی می‌گوییم. بنابراین، معادله‌ی (۲) به صورت زیر در می‌آید

$$\bar{C}(x, y, z) = \frac{Q_{pf}}{(2\pi)^2 \sigma_y \sigma_z U} \text{Exp}\left\{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right\} \times \left\{ \text{Exp}\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right] - \text{Exp}\left[-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\} \text{Exp}\left(-\lambda \frac{x}{U}\right) \quad (۳)$$

در این مقاله برای مدل‌سازی پخش جوی از نرم‌افزار AERMOD، یک مدل توده‌ای پایدار گاوسی، استفاده شده است. این نرم‌افزار از الگوریتم‌های ارتقاء یافته‌ای استفاده می‌کند که عبارت‌اند از:

- محاسبه‌ی پراکندگی برای هر دو لایه‌ی مرزی هدایتی^(۲) و پایدار^(۳)،
- لحاظ نمودن اثر شناوری و افزایش ارتفاع توده در محاسبه‌ها،
- در نظر گرفتن نفوذ توده در وارونگی ارتفاع،
- محاسبه‌های مربوط به مقطع عمودی باد، دما و اغتشاش،
- محاسبه‌ی غلظت برای طیف وسیعی از گیرنده‌ها با ارتفاع‌های مختلف

- مدل‌سازی اثر ساختمان‌ها،



نواحی صرف می‌کند. متروپلیس - هستینگ مهم‌ترین الگوریتم زنجیره‌ی مارکوف مونت کارلو است.

این الگوریتم، یک زنجیره‌ی مارکوف از نمونه‌ها، برای به دست آوردن توزیع‌های احتمال پارامترهای ناشناخته‌ی مورد نظر تولید می‌کند. با وجود این‌که، الگوریتم‌های زنجیره‌ی مارکوف مونت کارلو در شاخه‌های زیادی از علوم مورد استفاده قرار می‌گیرند، ولی گسترده‌ترین کاربرد آن در استنتاج آماری بیزین است، که در آن توزیع هدف، توزیع ثانویه $P(M | D)$ است. در این مورد، متغیر M ممکن است پارامترهای ناشناخته‌ای از یک مدل را ارایه نماید که براساس داده‌های تجربی D قابل دسترس، برآورد شده باشند. اگر زنجیره‌ی مارکوف به اندازه‌ی کافی اجراء شود، توزیع مقادیر $M | D$ ثابت می‌شود و مستقل از نقطه‌ی شروع زنجیره، به توزیع ثانویه $P(M | D)$ می‌رسد [۱۸].

در این مقاله، الگوریتم متروپلیس - هستینگ به کار گرفته شده است. زنجیره‌ی مارکوف با یک مقدار M^0 که به طور تصادفی انتخاب شده است، شروع می‌شود. توالی M^1, M^2, \dots, M^n از این زنجیره، با یک توزیع پیشنهادی مناسب $q(M^* | M)$ برای تولید مقدار مناسب جدید M^* از مقدار قبلی تعیین می‌شود. یک انتخاب مناسب، که در عمل تطبیق پیدا می‌کند، این است که توزیع پیشنهادی $q(M^* | M)$ متقارن باشد، به طوری که $q(M | M^*) = q(M^* | M)$ بشود. این موضوع مربوط به الگوریتم اولیه‌ی ارایه شده به وسیله‌ی متروپلیس [۱۶] در سال ۱۹۵۳ بود، و شکل کلی آن برای توزیع نامتقارن به وسیله‌ی هستینگ [۱۹] ارایه شد. با تعیین M^1 در مرحله‌ی i ام زنجیره، مقدار پیشنهادی M^i به عنوان مقدار جدید M^{i+1} در زنجیره، با احتمال زیر پذیرفته می‌شود

$$A(M, M^*) = \min \left\{ \frac{p(M^* | D)q(M | M^*)}{p(M^i | D)q(M^* | M)} \right\} \\ = \min \left\{ \frac{p(D | M^*)p(M^*)q(M | M^*)}{p(D | M^i)p(M^i)q(M^* | M)} \right\} \quad (10)$$

و در غیر این صورت مقدار پیشنهادی M^i رد و مقدار جدید M^{i+1} برابر با مقدار قبلی، یعنی، $M^{i+1} = M^i$ قرار داده می‌شود. با استفاده از خاصیت تقارن $q(M | M^*) = q(M^* | M)$ و توزیع

۱.۳ نظریه‌ی بیز

نظریه‌ی بیز، با استفاده از عبارت‌های بخش قبل به صورت زیر بیان می‌شود

$$P(M | D) = \frac{P(D | M)P(M)}{P(D)} \propto P(D | M)P(M) \quad (6)$$

که در آن M معرف پارامترهای مدل و D معرف مقادیر هدف است. $P(M | D)$ بیان می‌دارد که چگونه مقادیر هدف به ترکیبی از پارامترهای یک مدل معین مرتبط و به نام تابع احتمال یا تابع هدف شناخته می‌شود. $P(M)$ معرف توزیع اولیه‌ی مقادیر ممکن M قبل از محاسبه‌ی مقادیر D است. $P(M | D)$ توزیع ثانویه‌ی مقادیر ممکن M است، مشروط بر این که مقادیر معینی از D اتفاق افتاده باشد. فرض بر این است که $P(D | M)$ و $P(M)$ هر دو شناخته شده‌اند. علامت تناسب بدین معنی است که نیازی به محاسبه‌ی انتگرال‌های پیچیده نیست. با داشتن توزیع ثانویه، مقادیر زیر را می‌توان محاسبه نمود

$$E(M | D) = \int_{\Omega} MP(dM, D) \quad (7)$$

$$\text{var}(M | D) = \int_{\Omega} (M - E(M | D))^2 P(dM, D) \quad (8)$$

$$\arg \max_M P(M | D) \quad (9)$$

که در آن‌ها یک پارامتر ناشناخته است و تابع احتمال یا راستی آزمایی $P(D | M)$ را بیشینه می‌کند.

۲.۳ زنجیره‌ی مارکوف مونت کارلو

زنجیره‌ی مارکوف مونت کارلو یکی از روش‌هایی است که تأثیر به‌سزایی در عملکرد و توسعه‌ی علوم و مهندسی دارد. این روش به وسیله‌ی متروپلیس و همکارانش [۱۶] و آلدریو و همکارانش [۱۷] توصیف شده است. زنجیره‌ی مارکوف مونت کارلو، الگوریتم‌های مؤثری برای نمونه‌برداری از توزیع‌های احتمال پیچیده، پیشنهاد می‌نماید. این روش برای موضوعاتی از قبیل حل مسایل وارونه، بازسازی تصویر، تعیین پارامترها و به‌طور عمومی‌تر برای استنتاج ثانویه‌ی بیزین مناسب است. این روشی برای تولید نمونه‌های $M(i)$ همراه با استخراج فضای حالت M با استفاده از سازوکار زنجیره‌ی مارکوف است. این سازوکار به گونه‌ای طراحی شده است، که این زنجیره، زمان بیشتری در مهم‌ترین



تمایزی بین داده‌های اندازه‌گیری و پارامترهای چشمه وجود ندارد و تمام آن‌ها به عنوان کمیت‌های تصادفی در نظر گرفته می‌شوند [۱].

$M = \{M_1, M_2, \dots, M_i, \dots, M_n\}$ پارامتر چشمه

$D = \{D_1, D_2, \dots, D_i, \dots, D_m\}$ داده‌های اندازه‌گیری یا مشاهده شده

$P(M | D)$ تعیین‌کننده‌ی توزیع احتمال شرطی پارامترهای چشمه (محل، شدت و ...) با فرض داده‌های اندازه‌گیری شده از سنسورهای نصب شده در محیط است؛ $P(M)$ توزیع اولیه‌ی پارامترهای چشمه است که به وسیله‌ی اطلاعات اولیه‌ی قابل دسترسی تعیین می‌شود؛ $P(D | M)$ تابع احتمال یا تابع راستی آزمایی است و در روش بیزین بسیار مهم است که باید به درستی و متناسب با هر مسئله تعیین شود. در ادامه نحوه‌ی تعیین تابع احتمال در مسئله‌ی بازیابی حادثه بیان می‌شود.

فرض کنید، $C^{(D)}(t)$ داده‌های مشاهده شده در سنسورها $C^{(M)}(t) = \{C_1^{(D)}, C_2^{(D)}, \dots, C_i^{(D)}, \dots, C_K^{(D)}\}$ در زمان t و $C^{(M)}(t) = \{C_1^{(M)}, C_2^{(M)}, \dots, C_i^{(M)}, \dots, C_K^{(M)}\}$ توزیع تخمینی در سنسورها باشد که با استفاده از یک مدل عددی به صورت مستقیم برای زمان t به دست آمده‌اند. می‌دانیم که هم اندازه‌گیری‌ها و هم شبیه‌سازی‌ها دارای خطا هستند، پس اگر $T^{(t)}$ مقدار واقعی غلظت در محل سنسورها در زمان t به صورت زیر باشد،

$$T^{(t)} = \{T_1^{(t)}, T_2^{(t)}, \dots, T_i^{(t)}, \dots, T_K^{(t)}\}$$

داده‌های مشاهده شده‌ی $C_i^{(D)}$ با مقادیر واقعی به صورت $C_i^{(D)} = C_i^{(M)} + \varepsilon_i^{(D)}$ مرتبط هستند، که $\varepsilon_i^{(D)}$ در آن خطاهای اندازه‌گیری به صورت گاوسی توزیع شده با میانگین صفر و انحراف معیار معین σ_D در زمان t هستند و به صورت $\varepsilon^{(D)} = \{\varepsilon_1^{(D)}, \varepsilon_2^{(D)}, \dots, \varepsilon_i^{(D)}, \dots, \varepsilon_K^{(D)}\}$ بیان می‌شوند. بنابراین داده‌های مشاهده شده را می‌توان به صورت $C_i^{(D)} \sim \text{Gau}(T_i^{(t)}, \sigma_D)$ نوشت. تابع احتمال مربوط به این صورت نوشته می‌شود

یکنواخت $P(M^i)$ و $P(M^*)$ معادله‌ی (۱۰) به صورت زیر درمی‌آید

$$A(M, M^*) = \min \left\{ 1, \frac{p(D | M^*)}{p(D | M^i)} \right\} \quad (11)$$

باید توجه داشت که تقسیم تابع $P(M^* | D)$ به $P(M | D)$ احتمال پذیرش را به صورت یک نسبت بیان می‌کند، پس برای شناخت توزیع ثانویه، نیازی به محاسبه‌ی ضریب بهنجار شده نیست. این موضوع، حسن اصلی این الگوریتم است، چون برای مسایل استنتاج بیزین، محاسبه‌ی ضریب بهنجار شده بسیار مشکل و حتی ناممکن است [۱۸].

علاوه بر این، وقتی که $q(M^* | M)$ یک تابع مقارن است، این نسبت ساده می‌شود و فقط به توزیع تابع احتمال بستگی دارد. به طور خلاصه، الگوریتم متروپلیس - هستینگ چنین است

-Initialize $M^{(e)}$

-For $i = 0$ to $N-1$ do

Sample $M^* \sim q(M^* | M^{(i)})$

Sample $u \sim U[0, 1]$

If $u < A(M^{(i)}, M^*) = \min \left\{ 1, \frac{p(M^*)q(M^{(i)} | M^*)}{p(M^{(i)})q(M^* | M^{(i)})} \right\}$ then

$M^{(i+1)} = M^*$

Else

$M^{(i+1)} = M^{(i)}$

End if

Next i

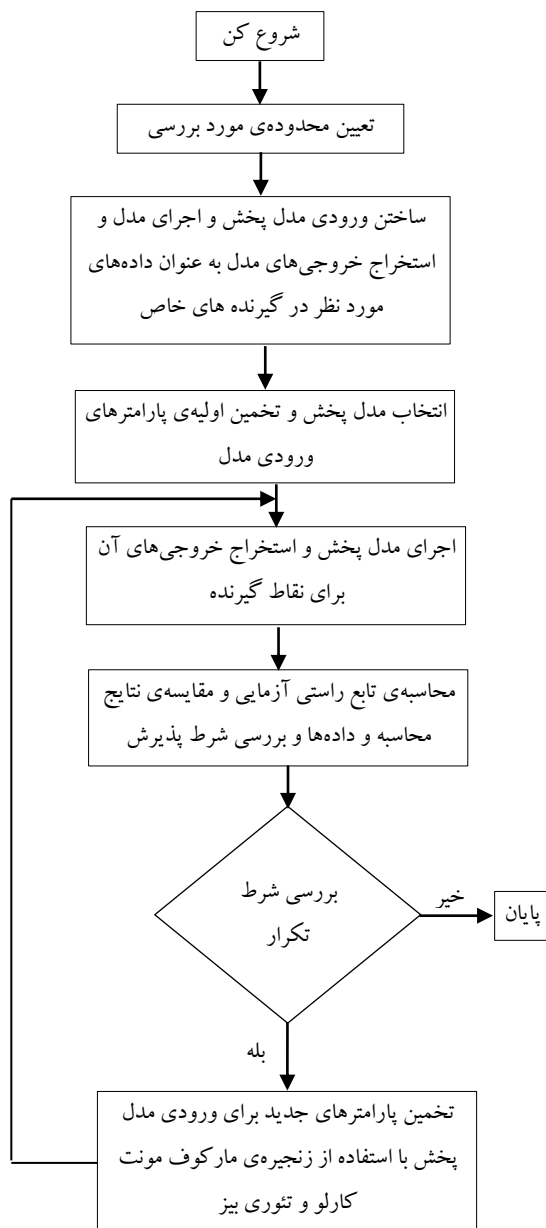
الگوریتم متروپلیس - هستینگ خیلی ساده است، ولی نیاز به مراقبت در طراحی توزیع $q(M^* | M)$ دارد [۱۷].

۴. روش محاسبه‌ی پارامترهای چشمه‌ی ناشناخته

با توجه به تعاریف بخش ۱.۳، نظریه‌ی بیز برای تعیین احتمال رخداد یک حادثه‌ی M به شرط رخداد یک حادثه‌ی دیگر D به کار می‌رود. در رابطه‌ی (۶)، $P(M | D)$ توزیع احتمال ثانویه نامیده می‌شود که بستگی به احتمال رخداد حادثه‌ی D دارد به شرطی که حادثه‌ی M اتفاق افتاده باشد. براساس نظریه‌ی بیز هیچ



مقدار هدف یا اندازه‌گیری شده، مقایسه می‌شود. یک عدد تصادفی u بین $[0, 1]$ تولید می‌شود. اگر در معادله‌ی (۱۱)، $u \leq A^i$ باشد، مقدار پیشنهادی پذیرفته می‌شود، یعنی $M^{i+1} = M^*$ قرار داده می‌شود و این روند ادامه می‌یابد. بنابراین هر نمونه از مقادیر پیشنهادی که این شرط را برآورده ننماید، رد می‌شود. بدین ترتیب، توزیع غلظت محاسبه شده، به سمت توزیع بهینه، همگرا می‌شود. برای انجام نمونه‌برداری و پذیرش نمونه‌ها از روش متروپلیس - هستینگ استفاده شده است. الگوریتم نوشته شده برای تعیین پارامترهای چشمه‌ی ناشناخته‌ی پخش جوی در شکل ۱ آمده است.



شکل ۱. الگوریتم تعیین پارامترهای چشمه‌ی ناشناخته‌ی پخش جوی.

$$P\left(C_i^{(D)} \mid T_i^{(t)}, M\right) \propto \exp \left\{ -\frac{\left[C_i^{(D)} - T_i^{(t)} \right]^2}{2\sigma_D^2} \right\} \quad (12)$$

به طور مشابه تابع احتمال داده‌های مدل را نیز می‌توان به صورت زیر نوشت

$$P\left(T_i^{(t)} \mid M\right) \propto \exp \left\{ -\frac{\left[T_i^{(t)}(M) - C_i^{(M)} \right]^2}{2\sigma_M^2} \right\} \quad (13)$$

اگر فرض کنیم خطای اندازه‌گیری و خطای مدل در هر سنسور و در هر زمان مستقل هستند، تابع احتمال را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$P(D|M) = \prod_{t=1}^n \prod_{i=1}^k P\left(C_i^{(D)}(t) \mid M\right) \propto \exp \left[-\sum_{t=1}^n \sum_{i=1}^k \frac{\left[C_i^{(M)}(t) - C_i^{(D)}(t) \right]^2}{2\left[\sigma_M^2 + \sigma_D^2 \right]} \right] \quad (14)$$

هدف، بیشینه نمودن مقدار تابع احتمال است. لذا، با در نظر گرفتن واریانس σ_D^2 و σ_M^2 ، می‌توان C_i^M را برای مقادیر مختلف M محاسبه، و تابع احتمال $P(D|M)$ را به دست آورد. در این مقاله برای محاسبه‌ی پخش، از نرم‌افزار AERMOD استفاده شده است که یک نرم‌افزار تنظیمی معتبر برای مدل‌سازی پخش جوی در محیط‌های مختلف است. با توجه به این که در این مقاله از کاهش آلاینده با زمان صرف نظر شده است، فرض کرده‌ایم که آلاینده‌ی مورد نظر را داریم است. زنجیره‌ی مارکوف با یک نمونه‌ی اولیه از M^0 که همان پارامترهای ناشناخته‌ی چشمه، ناشی از هر گونه آگاهی اولیه از مسئله است، آغاز می‌شود. در حالت کلی تکرار M ، یک مقدار پیشنهادی M^* از $q(M^* | M)$ برای هر کدام از ضریب‌های مورد نظر، نمونه‌برداری می‌شود. سپس C_i^M با استفاده از مدل پخش گاوسی، محاسبه و با



۵. نتایج محاسبات و ارزیابی روش

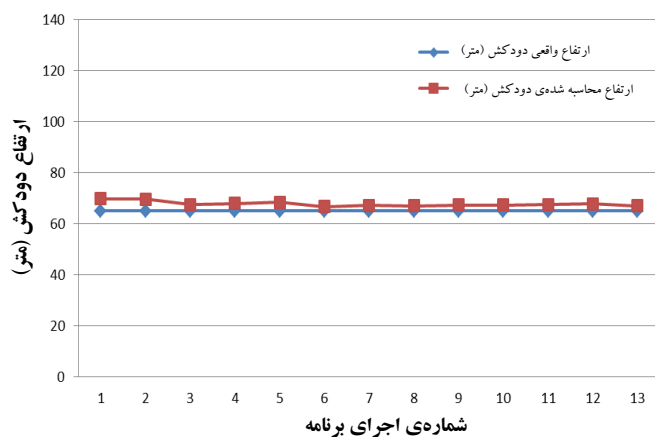
برای اعتبارسنجی روش، یک مثال ارزیابی شده است که در آن با فرض دریافت اطلاعات آلاینده در یک منطقه، مکان و شدت چشمه، (دوباره) پیدا و تخمین زده شده و سپس با حل مسئله به صورت مستقیم به کمک نرم‌افزار AERMOD صحت آن بررسی شده است. محدوده‌ی در نظر گرفته شده برای مدل‌سازی، ۷ کیلومتر در جهت محور Xها و ۳ کیلومتر در جهت محور Yها است. مختصات واقعی چشمه (۰،۰، ۰،۰، ۰،۰)، ارتفاع دودکش ۶۵ متر و شدت خروجی چشمه ۶۰۰ گرم بر ثانیه در نظر گرفته شده است. برای اجرا و پیاده‌سازی الگوریتم مورد نظر با استفاده از مقادیر فوق و داده‌های هواشناسی در دست، مدل پخش اجرا و نتایج خروجی غلظت در چند نقطه‌ی گیرنده‌ی فرضی استخراج شده است. حال فرض می‌کنیم که این خروجی‌ها همان داده‌های اندازه‌گیری شده به وسیله‌ی شبکه‌ی پایش محیطی هستند و با فرض ندانستن پارامترهای چشمه می‌خواهیم با استفاده از روش معکوس، پارامترهای ناشناخته‌ی چشمه‌ی مربوط به این داده‌های هدف را پیدا کنیم. به عبارت دیگر هدف پیدا کردن هم‌زمان چهار پارامتر ناشناخته از چشمه یعنی مختصات X، Y و ارتفاع دودکش (مکان چشمه) و شدت چشمه است، که کار بسیار مشکلی است. هر قدر تعداد پارامترهای ناشناخته کم‌تر باشد تعیین آن‌ها به همان اندازه ساده‌تر می‌شود. برنامه‌ی نوشته شده با تعداد تکرار متفاوت، ۱۳ بار اجرا شده است. مقادیر به دست آمده از این روش، همراه با مقادیر واقعی مشخصه‌های چشمه در جدول ۱ و شکل‌های ۲ تا ۴ داده شده است. مشاهده می‌شود که مقادیر محاسبه شده در مقایسه با مقادیر واقعی دقت قابل قبولی دارند. مشابه این مسئله به وسیله‌ی کیتز [۱۰] برای یک چشمه با نرخ کم‌تر و با استفاده از روش الحاقی برای پخش به جای استفاده از مدل پخش به کار گرفته شده در AERMOD مورد بحث و بررسی قرار گرفته است. دقت پارامتر شدت چشمه‌ی محاسبه شده در این روش با دقت مرجع در جدول ۲ مقایسه شده است. ملاحظه می‌شود که مرتبه‌ی خطاها قابل مقایسه است.

جدول ۱. مقادیر پارامترهای محاسبه شده و مقایسه‌ی آن‌ها با مقادیر واقعی

شماره‌ی اجرای برنامه	مکان X (متر)	مکان Y (متر)	ارتفاع دودکش (متر)	شدت چشمه (g/sec)
۱	۴،۹۳	۶،۳۱	۶۹،۸۲	۷۳۷،۴۰
۲	-۲،۲۲	-۵،۷۱	۶۹،۶۳	۶۹۰،۷۰
۳	-۵،۶۴	-۸،۴۳	۶۷،۴۳	۶۷۳،۴۰
۴	-۶،۴۳	۶،۷۱	۶۷،۹۸	۶۸۱،۰۰
۵	-۱۵،۵۲	-۵،۵۵	۶۸،۳۸	۶۶۴،۷۰
۶	۷،۶۸	-۴،۷۳	۶۶،۷۸	۶۶۵،۰۰
۷	-۶،۴۲	۲،۵۲	۶۷،۲۳	۶۶۷،۲۰
۸	-۵،۴۸	-۹،۷۷	۶۷،۰۴	۶۵۸،۰۰
۹	-۸،۳	-۷،۴۶	۶۷،۳۷	۶۶۱،۵۰
۱۰	-۷،۴۹	-۳،۱۴	۶۷،۳۵	۶۶۴،۴۰
۱۱	-۱۱،۹۸	-۳،۹۷	۶۷،۴۹	۶۶۴،۲۰
۱۲	-۱۵،۰۳	۱،۶۴	۶۷،۷۹	۶۶۶،۶۰
۱۳	-۳،۰۰	۱۵،۷۲	۶۷،۰۳	۶۶۳،۹۰
مقدار میانگین	-۵،۷۶	-۱،۲۲	۶۷،۷۹	۶۷۳،۶۹
مقدار واقعی	۰،۰	۰،۰	۶۵،۰۰	۶۰۰



شکل ۲. رابطه بین مکان‌های محاسبه شده‌ی X و Y، و موقعیت واقعی چشمه، و اجراهای مختلف برنامه.



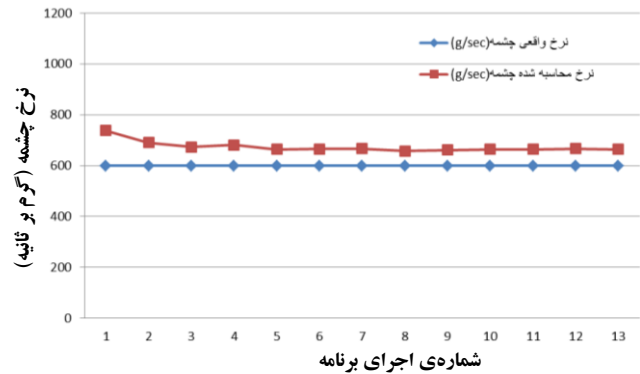
شکل ۳. رابطه‌ی بین ارتفاع محاسبه شده‌ی دودکش و موقعیت واقعی آن، و اجراهای مختلف برنامه.

**پی‌نوشت‌ها:**

۱. Regulatory
۲. Convective Boundary Layer
۳. Stable Boundary Layer

منابع:

1. S. Guo, R. Yang, H. Zhang, W. Weng, W. Fan, Source identification for unsteady atmospheric dispersion of hazardous materials using Markov Chain Monte Carlo method, International Journal of Heat and Mass Transfer, 52 (2009) 3955–3962.
2. B. Kosovic, R. Belles, F.K. Chow, L.D. Monache, K. Dyer, L. Glascoe, W. Hanley, G. Johannesson, S. Larsen, G. Loosmore, J.K. Lvndqvist, A. Mirin, S. Nevman, J. Nitao, R. Serban, G. Sugiyama, R. Aines, Dynamic data-driven event reconstruction for atmospheric releases, UCRL-TR-229417 (2007).
3. K. Shankar Rao, Source estimation methods for atmospheric dispersion, Atmospheric Environment, 41 (2007) 6964-6973.
4. Joo Yeon Kim, Han-Ki Jang, Jai Ki Lee, Source reconstruction of unknown model parameters in atmospheric dispersion using dynamic bayesian inference, Progres in Nuclear Science and Technology, 1 (2011) 460-463.
5. C.T. Allen, S.E. Haupt, G.S. Young, Source characterization with a genetic algorithm coupled dispersion backward model in corporating SCIPUFF, Journal of Applied Meteorology, 41 (2007) 465-479.
6. C.T. Allen, G.S. Young, S.E. Haupt, Improving pollutant source characterization by better estimating wind direction with a genetic algorithm, Atmospheric Environment, 41 (2007) 2283-2289.
7. G. Johannesson, B. Hanley, J. Nitao, Dynamic Bayesian models via Monte Carlo-an introduction with examples, Lawrence Livermore National Laboratory, UCRL-TR-207173 (2004).



شکل ۴. رابطه بین شدت خروجی محاسبه شده‌ی چشمه و شدت واقعی آن، و اجراهای مختلف برنامه.

جدول ۲. مقایسه‌ی دقت محاسبه با دقت روش استفاده شده به وسیله‌ی کیتز

مرجع [۱۰]	مقاله‌ی حاضر	پارامتر
شدت چشمه (g/sec)	شدت چشمه (g/sec)	مقدار واقعی
۳,۷۸	۶۰۰	مقدار میانگین محاسبه شده
۳,۱۴۱	۶۷۳,۶۹	خطای نسبی
۱۶,۹٪	۱۲,۲۸٪	

۶. بحث و نتیجه‌گیری

نتایج به دست آمده از این الگوریتم حاکی از آن است که روش قابل قبول بوده و می‌تواند برای (دوباره) پیدا کردن حادثه و تعیین پارامترهای چشمه ناشناخته‌ی پخش جوی به کار گرفته شود. با به کارگیری این روش، با استفاده از داده‌های تجربی، می‌توان پارامترهای مورد نیاز مدل‌های پخش را یافت و هم‌چنین می‌توان مدل‌های محاسباتی پخش را بهینه نمود. این روش قابل استفاده و سازگار با هر گونه مدل پخش جوی است و در صورت داشتن مدل پخش مناسب، برای به کارگیری در کاربردهای پاسخ اضطراری عملیاتی نیز مناسب است. در این مقاله در الگوریتم به کار گرفته شده به جای مدل پخش معمولی از مدلی استفاده شد که توزیع غلظت آلاینده‌ها را برای هر دو لایه‌ی مرزی هدایتی و پایدار مشخص می‌سازد، نفوذ توده را در وارونگی ارتفاع، و اثر ساختمان‌ها را به خوبی در کنار به کارگیری یک روش پیشرفته برای تعیین پارامترهای لایه‌های مرزی مورد توجه قرار می‌دهد و در جهت افقی از مدل گاوسی و در جهت عمودی از مدل دوگاوسی استفاده می‌کند. خصوصیات ذکر شده، ویژگی‌های بارز کد AEROMOD هستند که در این مقاله به روش‌های ریاضی استخراج بیزین همراه با زنجیره‌ی مارکوف مونت کارلو الحاق شده‌اند.



8. F.K. Chow, B. Kosovic, S.T. Chan, Source inversion for contaminant plume dispersion in urban environments using building-resolving simulations, Int. 6th Symposium on the Urban Environment, American Meteorological Society (2006).
9. S. Neumann, L. Glascoe, B. Kosovic, K. Dyer, W. Hanley, J. Nitao, Event reconstruction for atmospheric releases employing urban puff model UDM with stochastic inversion methodology, 6th Symposium on the Urban Environment, American Meteorological Society, GA (2006).
10. A. Keats, E. Yee, F. Lien, Bayesian inference for source determination with applications to a complex urban environment, Atmospheric Environment, 41 (2007) 465-479.
11. G. Cervone, P. Franzese, Monte Carlo source detection of atmospheric emissions and error functions analysis, Computers & Geosciences, 36 (2010) 902-909.
12. A.J. Cimorelli, S.G. Perry¹, A. Venkatram, J.C. Weil, R.J.R.B. Wilson, R.F. Lee, Warren D. Peters, W. Brode, J.O. Pauimer, AERMOD: Description of model formulation, EPA 454/R-02-002d, (2002).
13. U.S. Environmental Protection Agency, Office of Air Quality Planning and Standards, Research Triangle Park, North Carolina 27711, User's guide for the AERMOD meteorological preprocessor (AERMET), EPA-454/B-03-002 (2004).
14. J.M. Bernardo, A.F.M. Smith, Bayesian Theory, Wiley (1994).
15. A. Gelman, J.B. Carlin, H.S. Stern, D.B. Rubin, Bayesian data analysis (second edition), Boca Raton, Florida: Chapman and Hall/CRC (2004).
16. N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, E. Teller, Equation of state calculations by fast computing machines, J. Chem. Phys, 21 (1953) 1087-1092.
17. C. Andrieu, N. De Freitas, A. Doucent, M.I. Jordan, An introduction to MCMC for machine learning, Machine Learning, 50 (2003) 5-43.
18. W.R. Gilks, S. Richardson, D.G. Spiegelhalter, Markov chain Monte Carlo in practice, Chapman and Hall, London, UK (1996).
19. W.K. Hastings, Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications, Biometrika, 57(1) (1970) 97-109.