

МЕТОД УСВОЕНИЯ ДАННЫХ ДЛЯ ЗАДАЧИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПАССИВНОЙ ПРИМЕСИ В АТМОСФЕРЕ, ОСНОВАННЫЙ НА ДИНАМИКО-СТОХАСТИЧЕСКОМ ПОДХОДЕ

Марина Владимировна Платонова

Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, 630090, Россия, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 2, магистрант, тел. (996)382-07-29, e-mail: gumoznaya@gmail.com

Екатерина Георгиевна Климова

Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090, Россия, г. Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 6, доктор физико-математических наук, доцент, старший научный сотрудник, тел. (383)332-42-57, e-mail: klimova@ict.nsc.ru

В данной работе рассмотрена методика усвоения данных для задачи распространения концентрации пассивной примеси в атмосфере. Описаны классические подходы к решению подобных задач, выделены особенности применения алгоритмов, их минусы и плюсы.

Рассмотрены два алгоритма: ансамблевого фильтра Калмана и ансамблевого сглаживания Калмана. Рассмотрены различные способы улучшения сходимости этих алгоритмов, такие как локализация и увеличивающий множитель.

Ключевые слова: усвоение данных, ансамблевый фильтр Калмана, ансамблевое сглаживание Калмана, увеличивающий множитель, прогнозирование, перенос и диффузия, концентрация пассивной примеси, локализация, оценка, модель.

DATA ASSIMILATION METHOD FOR THE TASK OF PASSIVE IMPURITY PROPAGATION IN THE ATMOSPHERE BASED ON A DYNAMIC-STOCHASTIC APPROACH

Marina V. Platonova

Novosibirsk National Research State University, 2, Pirogova St., Novosibirsk, 630073, Russia, Graduate, phone: (996)382-07-29, e-mail: gumoznaya@gmail.com

Ekaterina G. Klimova

Institute of Computing Technology SB RAS, 6, Prospect Akademik Lavrentiev St., Novosibirsk, 630090, Russia, D. Sc., Senior Researcher, phone: (383)332-42-57, e-mail: klimova@ict.nsc.ru

In this paper, we consider the method of data assimilation for the problem the propagation of the concentration a passive impurity in the atmosphere. Classical approaches to solving such problems are described, features of the application of algorithms, their minuses and pros. Two algorithms are considered: the ensemble Kalman filter and the ensemble Kalmans moother. Various ways to improve the convergence of these algorithms, such as localization and inflation factor, are considered.

Key words: data assimilation, ensemble Kalman filter, ensemble Kalman smoother, inflation factor, forecasting, transfer and diffusion, concentration of passive admixture, localization, assessment, model.

Введение

Под усвоением данных принято понимать совместное использование наблюдений и математической модели для оценки состояния окружающей среды. В работе рассмотрена методика усвоения данных для задачи распространения пассивной примеси в атмосфере. Описаны классические подходы к решению подобных задач, выделены особенности применения алгоритмов, их минусы и плюсы. Рассмотрены два алгоритма: ансамблевый фильтр Калмана и ансамблевое сглаживание Калмана. Получены результаты сравнительного анализа этих алгоритмов. Рассмотрено влияние различных значений входящих параметров алгоритмов на получаемые результаты.

1. Ансамблевый фильтр Калмана, ансамблевое сглаживание Калмана
Будем рассматривать линейную модель системы:

$$x_{n+1}^f = A_n x_n^a,$$

где A_n – оператор модели;

x_{n+1}^f – модельный прогноз состояния системы;

x_n^a – найденная оценка,

n – номер шага по времени.

Наблюдения представим в следующем виде:

$$y_n = x_n^t + \varepsilon_n,$$

где y_n – вектор наблюдений;

ε_n – вектор ошибок наблюдений, являющийся гауссовской случайной переменной.

Будем считать x_n^t «истинным» состоянием системы [1]. Задается ансамбль значений моделируемой переменной в начальный момент времени. Тогда для каждого элемента ансамбля производится шаг прогноза и шаг анализа. Сам ансамблевый фильтр Калмана (ЕпФК) состоит из двух шагов [2]:

шаг прогноза: $x_{n+1}^{F(i)} = A_n x_n^{A(i)}$;

шаг анализа: $x_n^{A(i)} = x_{n+1}^{F(i)} + K_n (y_n^{(i)} - H x_{n+1}^{F(i)})$,

где номер элемента ансамбля $i = 1 \dots k$;

k – количество ансамблей.

Матрица K_n – матрица усиления, она задается формулой:

$$K_n = P_n^F H^T (H P_n^F H^T + R)^{-1},$$

где $P_{n+1}^F = \frac{1}{k-1} \sum_{i=1}^k (x_{n+1}^{F(i)} - \bar{x}_{n+1}^F)(x_{n+1}^{F(i)} - \bar{x}_{n+1}^F)^T$ – матрица ковариаций ошибок прогноза;

$$\bar{x}_{n+1}^F = \frac{\sum_{i=1}^k x_{n+1}^{F(i)}}{k} - \text{среднее значение прогноза вектора состояния};$$

$$R = \varepsilon \cdot \varepsilon^T - \text{матрица ковариаций ошибок наблюдений.}$$

При этом среднее по ансамблю значение вектора состояния системы является оптимальной оценкой в задачи фильтрации. Она достигается при минимуме следа матрицы ковариаций ошибок [2]:

$$P_n^A = \frac{1}{k-1} \sum_{i=1}^k (x_{n+1}^{A(i)} - \bar{x}_{n+1}^A)(x_{n+1}^{A(i)} - \bar{x}_{n+1}^A)^T.$$

Задача ансамблевого сглаживания заключается в получении оптимальной оценки в некотором временном интервале, при наличии данных в этом интервале. Причем состояние на шаге n оценивается по данным на временных шагах с номерами больше n . Как показано в работе [3], при наличии гауссовского распределения у ошибок наблюдения и отсутствии корреляции между ошибками наблюдения и прогноза, алгоритм позволяет получать оценку состояния системы по мере поступления данных. Обозначим через $A_{EnKF}(x, t_i)$ ансамбль оценок состояния системы, полученный после применения алгоритма фильтрации для шага времени t_i ; а через $A_{EnKS}(x, t_i)$ – ансамбль оценок, получаемый в алгоритме сглаживания для шага времени t_i . После применения алгоритма сглаживания полученный результат можно представить в виде:

$$A_{EnKS}(x, t_i) = \prod_{j=k}^{k+1} X_j A_{EnKF},$$

где X_j – матрицы коэффициентов, вычисляемые для каждого шага по времени:

$$X_j = I + S_j^T C_j^{-1} D_j'; \quad D_j' = \overline{y_j} - H \overline{x_j^F}; \quad C_j = S_j S_j^T + (N-1) * R_j,$$

$\overline{y_j}$ – вектор наблюдений в момент времени j ;

S_j – матрица отклонений от среднего для ансамбля;

R_j – матрица ковариаций ошибок наблюдений [3, 4].

В данной работе алгоритм усвоения данных рассматривался для задачи с неизвестным параметром. Для решения данной задачи вводим расширенный вектор состояния системы: $x = \begin{pmatrix} \tilde{x} \\ g \end{pmatrix}$, который содержит информацию о концентрации пассивной примеси и эмиссии. Будем использовать расширенный ансамблевый фильтр Калмана [5]:

шаг прогноза: $x_{n+1}^f = Ax_n^a$,

шаг анализа: $x^a = x^f + K_x(Y - Hx^f)$; $g^a = g^f + K_g(Y - Hx^f)$;

$K_x = P_{xx}(P_{xx} + R)^{-1}$; $K_g = P_{gx}(P_{xx} + R)^{-1}$; P_{gx} – кроссковариационные матрицы.

Маленький размер выборки является причиной низкой точности оценки, могут существовать ложные ковариации или появиться расходимость алгоритма. Важными элементами корректировки данных алгоритмов являются увеличивающий множитель и локализация. Выборки небольших размеров являются причиной появления ложных ковариаций. Локализация состоит в поэлементном умножении матрицы на функцию от расстояния:

$$P_{i,j} = P_{i,j} \circ e^{-|i-j|^2/2L^2},$$

где $P_{i,j}$ – элемент матрицы ковариации.

Здесь L – масштаб локализации, который подбирается исходя из размеров сетки по пространству.

Другая проблема возникает, когда теоретическая ошибка оценки (след матрицы ковариаций) и реальная не совпадают. В таком случае прибегают к помощи увеличивающего множителя (inflation factor [6]). Ниже представлен классический вариант увеличивающего множителя – мультипликативный:

$$P = P \cdot \alpha^2,$$

где α – постоянный коэффициент, который берется близким к единице (часто используют значения 1,1; 1,04). В таком случае на каждом шаге по времени матрица ковариаций ошибок оценки умножается на заранее подобранную константу.

Другой подход к заданию коэффициента увеличивающего множителя – адаптивный [7]. В этом случае на каждом шаге по времени вычисляется коэффициент увеличивающего множителя Δ по формуле [8]:

$$\Delta = \frac{d^T d - \text{trace}(R)}{\text{trace}(HPH)}; \quad d = \overline{y_j} - H \overline{x_j^f},$$

где $\text{trace}(\dots)$ след матрицы, d – вектор невязок.

Основной задачей увеличивающего множителя является предотвращение расходимости алгоритма. Величину увеличивающего множителя принято ограничивать [9]: $0,9 \leq \alpha \leq 1,5$. Для того чтобы сгладить значения по времени предлагается использовать формулу: $\Delta_i = k\Delta_{i-1} + (1-k)\Delta_i$, где $k = 0,05$.

В данной работе рассматривается способ вычисления увеличивающего множителя, состоящий в осреднении вектора невязок по времени. Осреднение производилось на некотором временно интервале, который выбирался, исходя из параметров эксперимента.

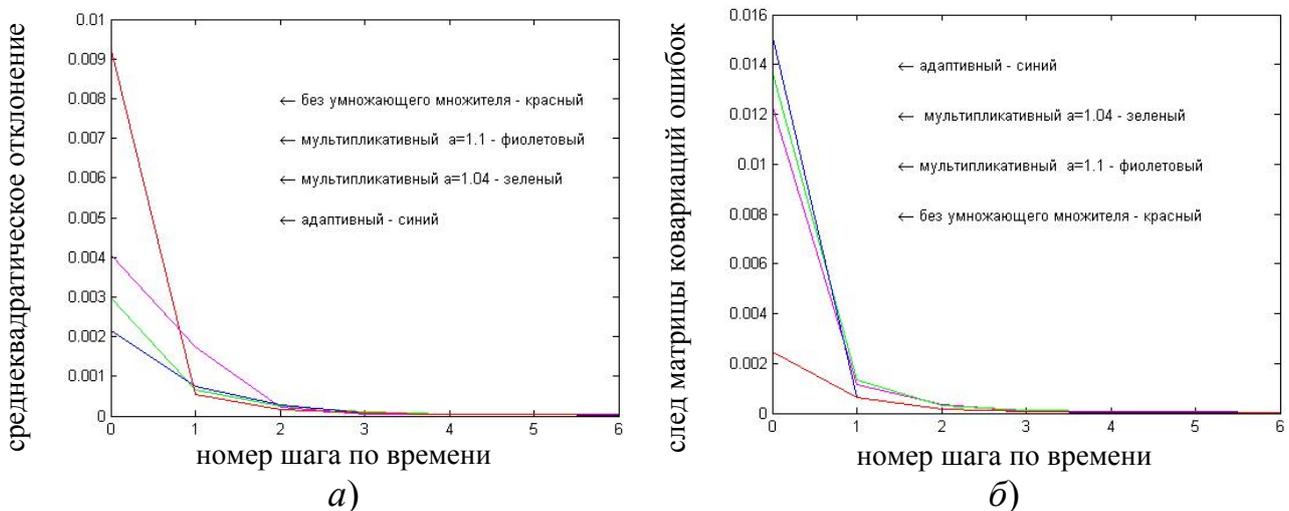
2. Численные эксперименты

С использованием рассматриваемых методов были проведены численные эксперименты с моделью переноса-диффузии пассивной примеси. Использовался метод расщепления задачи по физическим процессам. Решение уравнения переноса находилось с помощью полулагранжева метода. Уравнение диффузии решалось с помощью циклической прогонки. Во всех экспериментах область определения: $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq t \leq 1$. В качестве граничного условия было взято условие периодичности $q(0,t) = q(1,t)$. Эмиссия была задана

$$g(x,t) = \begin{cases} 0,1 & \text{при } 0,2 \leq x \leq 0,5; \\ 0 & \text{иначе.} \end{cases}$$

Для оценки качества работы алгоритмов были рассмотрены следующие параметры [10]: след матрицы ковариаций ошибок оценки и среднеквадратическая ошибка оценки, которая считалась следующим образом: $rms_n = \left\| x_n^t - x_n^a \right\|^2$, в качестве нормы берется вторая норма вектора, x^t – реальное состояние системы, x^a – получаемая оценка.

Результаты численных экспериментов приведены на рисунке для алгоритма оценки эмиссии пассивной примеси с применением различных увеличивающих множителей.



Результаты численных экспериментов для алгоритма оценки эмиссии пассивной примеси:

а) график среднеквадратического отклонения оценки эмиссии; б) график следа матрицы ковариаций ошибок оценок эмиссии

На рисунке различными цветами изображены результаты, полученные при использовании мультипликативного увеличивающего множителя ($\alpha = 1,1$ –

фиолетовый, $\alpha = 1,04$ – зеленый), результаты адаптивного подхода – синим, а результаты без использования увеличивающего множителя – красным. По горизонтальной оси отложен номер шага по времени. Все эксперименты проводились с ансамблями размером 150 элементов. Сетка по пространству была размером 100 узлов. Сетка по времени была размером 100 шагов, на графике представлены результаты первых шести шагов.

Самым действенным способом предотвратить расходимость алгоритма является адаптивный способ вычисления увеличивающего множителя. Среди графиков следа матрицы ковариаций ошибок самым высоким ростом следа отмечается график, полученный при реализации адаптивного подхода. На графике среднеквадратической ошибки оценки заметим, что данный вывод подтверждается самым быстрым падением значения отклонения при применении адаптивного увеличивающего множителя, что дает меньшую ошибку в получаемой оценке.

Заключение

В работе рассмотрены различные подходы к применению ансамблевого фильтра Калмана и ансамблевого сглаживания в задаче оценивания концентрации пассивной примеси. Проведен сравнительный анализ различных подходов к улучшению сходимости, таких как применение увеличивающего множителя и использование локализации. Выполнен сравнительный анализ разных подходов к вычислению коэффициента увеличивающего множителя. Сравнение результатов работы алгоритмов при различных значениях увеличивающего множителя показало, что наилучший способ – адаптивный. При использовании адаптивного способа вычисления увеличивающего множителя получается более точная оценка параметра системы.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Carrassi A., Bocquet M., Bertino L., Evensen G. Data assimilation in the geosciences: An overview of methods, issuers and perspectives // Wiley interdisciplinary reviews: Climate Change. 2018. V. 131, Issue5, e535, doi: 10.1002/wcc535.
2. Evensen, G., P.J. van Leeuwen An ensemble Kalman smoother for nonlinear dynamics // Monthly Weather Review. 2000. V. 128. P. 1852-1867.
3. Klimova, E. A suboptimal data assimilation algorithm based on the ensemble Kalman filter // Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society. 2012. V. 138, P. 2079-2085.
4. Klimova E. G. Application of ensemble Kalman filter in environment data assimilation // IOP Conference Series: Earth and Environmental Science. – Vol. 211 (2018) 012049 .– doi:10.1088/1755-1315/211/1/012049.
5. Evensen, G. Data assimilation. The ensemble Kalman filter. Berlin Heideberg: Springer-Verlag, 2009. 307 p.
6. Houtekamer, H.L. Zhang, F. Review of the ensemble Kalman filter for atmospheric data assimilation // Monthly Weather Review. 2016. V. 144. P. 4489-4532.
7. Jazwinski, A. H. Stochastic processes and filtering theory. New York: Academic Press, 1970. 376 p.

8. Feng L., P.I.Palmer, H.Bosch, and S.Dance Estimating surface CO₂ fluxes from spaceborne CO₂ dry air mole fraction observations using an ensemble Kalman filter // Atmospheric chemistry and physics. 2009. V. 9. P. 2619-2633.
9. Feng L. et al. Consistent regional fluxes of CH₄ and CO₂ inferred from GOSAT proxy XCH₄:XCO₂ retrievals, 2010-2014 // Atmospheric chemistry and physics. 2017. V. 17. P. 4781-4797.
10. Климова Е. Г. Стохастический ансамблевый фильтр Калмана с трансформацией ансамбля возмущений // Сибирский журнал вычислительной математики. – 2019. – Т. 22, № 1. С. 27–40.

© М. В. Платонова, Е. Г. Климова, 2019