

УДК 551.509.313

Применение алгоритма ансамблевого сглаживания Калмана в задаче обратного моделирования для моделей переноса и диффузии*

Е.Г. Климова

Федеральный исследовательский центр информационных и вычислительных технологий, просп. Акад. Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090

E-mail: klimova@ict.nsc.ru

Английская версия этой статьи печатается в журнале “Numerical Analysis and Applications” № 3, Vol. 17, 2024.

Климова Е.Г. Применение алгоритма ансамблевого сглаживания Калмана в задаче обратного моделирования для моделей переноса и диффузии // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2024. — Т. 27, № 3. — С. 287–301.

Изучение распространения в пространстве и времени парниковых газов, а также оценка потоков с поверхности Земли этих газов с помощью системы усвоения данных представляет собой актуальную задачу мониторинга состояния окружающей среды. Одним из подходов к оценке потоков парниковых газов является подход, основанный на предположении, что потоки постоянны в заданной подобласти и на заданном временном интервале (порядка недели). Это обусловлено как необходимостью эффективной реализации алгоритма, так и свойствами используемых в таких задачах данных наблюдений.

Современные задачи оценки потоков парниковых газов с поверхности Земли имеют большую размерность, поэтому обычно рассматривается вариант, в котором оцениваемой переменной являются потоки, а модель переноса и диффузии входит в оператор наблюдения. При этом возникает проблема использования больших окон усвоения, в пределах которых оцениваются значения потоков на нескольких временных интервалах.

В работе рассматривается алгоритм оценки потоков по данным наблюдений из заданного временного интервала. Алгоритм является вариантом алгоритма ансамблевого сглаживания, широко применяемого в таких задачах. Показано, что при использовании окна усвоения, в котором происходит оценка значений потоков для нескольких временных интервалов, алгоритм может становиться неустойчивым, при этом нарушается условие наблюдаемости.

DOI: 10.15372/SJNM20240303

EDN: UKBWAG

Ключевые слова: усвоение данных, потоки парниковых газов, ансамблевое сглаживание Калмана.

Klimova E.G. Application of the ensemble Kalman smoothing in the inverse modeling for transport and diffusion models // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2024. — Vol. 27, № 3. — P. 287–301.

The study of the spread of greenhouse gases in space and time, as well as the assessment of fluxes from the Earth's surface of these gases using a data assimilation system is an urgent task of monitoring the state of the environment. One of the approaches to estimating greenhouse gas fluxes is an approach based on the assumption that fluxes are constant in a given subdomain and over a given time interval (on the order of a week). This is due to both the need for an effective implementation of the algorithm and the properties of the observational data used in such problems.

Modern problems of estimating greenhouse gas fluxes from the Earth's surface have a large dimension, therefore, a variant is usually considered in which the estimated variable is fluxes, and the transport and diffusion model is included in the observation operator. At the same time, there is a problem of using large assimilation windows, within which the flow values are estimated at several time intervals.

*Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для Федерального исследовательского центра информационных и вычислительных технологий.

The paper considers an algorithm for estimating fluxes based on observations from a given time interval. The algorithm is a variant of the ensemble smoothing algorithm, widely used in such problems. It is shown that when using the assimilation window, in which the flow values are estimated for several time intervals, the algorithm can become unstable, while the observability condition is violated.

Keywords: *data assimilation, greenhouse gases fluxes, ensemble Kalman smoother.*

1. Введение

Современное исследование окружающей среды включает в себя моделирование процессов с привлечением математических моделей прогноза погоды и климата, а также моделей распространения примеси в атмосфере. Оценка состояния окружающей среды по данным наблюдений является одной из наиболее актуальных задач в настоящее время. Такая оценка производится на основе систем усвоения данных. Под усвоением данных будем понимать совместный учет данных наблюдений и математической модели для наиболее точной оценки пространственно-временного распределения исследуемых величин [15, 18].

С точки зрения математической постановки задачи усвоения данных существуют вариационный подход и подход, основанный на теории оценивания (фильтр Калмана, алгоритмы сглаживания [15, 18]). В настоящей статье рассматривается второй подход к задаче усвоения данных.

В случае, когда рассматриваются линейная модель и линейный оператор наблюдений и имеются данные наблюдений на заданном временном интервале, задача оптимальной оценки в конце этого интервала называется задачей фильтрации. Решением этой задачи является фильтр Калмана [13]. Если оптимальная оценка ищется в заданном временном интервале, такая задача называется задачей сглаживания [13]. При условии линейности модели прогноза и оператора наблюдений эта задача эквивалентна задаче усвоения данных в вариационной постановке (4DVAR) [13, 18].

В работе [8] было предложено применение метода Монте-Карло для решения задач фильтрации и сглаживания (так называемые алгоритмы ансамблевой фильтрации и ансамблевого сглаживания). В этих алгоритмах используется выборка (ансамбль) прогнозов и наблюдений для аппроксимации ковариационных матриц [8]. В [8] предлагается алгоритм, называемый ансамблевым сглаживанием Калмана, в котором оценка осуществляется последовательно по мере поступления данных, как в фильтре Калмана, но при этом оцениваются значения из некоторого временного интервала.

Изучение распространения в пространстве и времени парниковых газов, а также оценка потоков с поверхности Земли этих газов представляет собой одну из актуальных задач мониторинга состояния окружающей среды. Для решения этой задачи принято использовать системы усвоения данных [5].

Современные задачи оценки потоков парниковых газов с поверхности Земли имеют большую размерность, поэтому обычно рассматривается вариант, в котором оцениваемой переменной являются потоки, а модель переноса и диффузии входит в оператор наблюдения. Следуя [6, 18], будем называть такой подход к оценке потоков задачей обратного моделирования. Задача обратного моделирования является более общей по отношению к задаче усвоения данных и состоит в поиске оптимальной оценки искомой величины по данным наблюдений, при этом предполагается, что известна модель, связывающая наблюдаемые и оцениваемые переменные. В качестве примера можно выделить серию

работ, проводимых международным коллективом авторов [9–12]. В этих работах оцениваемой переменной является поток парникового газа CO_2 с поверхности Земли, при этом используются спутниковые данные наблюдений о концентрации парниковых газов. Проводится разбиение поверхности Земли на участки равной площади (1000 км на 1000 км) и предполагается, что требуется оценить среднее по подобласти значение потока. Кроме того, оценивается среднее за заданный временной промежуток (8 дней) значение. Оценка значений средних по подобластям потоков по данным наблюдений для заданного временного интервала и прогнозу производится по стандартной формуле фильтра Калмана [13]. Для оценки значений на одном временном промежутке используются данные как из этого промежутка, так и нескольких последующих. Поэтому фактически при этом реализуется ансамблевое сглаживание Калмана [8].

Для получения оптимальной оценки в алгоритмах ансамблевого сглаживания Калмана и ансамблевого фильтра Калмана существенно как можно более точное задание среднеквадратических ошибок наблюдений, а также других параметров, таких как наличие систематической ошибки, что свойственно спутниковым данным. Кроме того, для достижения высокой точности оценки требуется знание первого приближения (априорной информации), что в случае задачи оценки потоков является отдельной проблемой. Важным при оценке потоков парниковых газов в процедуре усвоения, основанной на ансамблевом сглаживании, является выбор окна усвоения. Окном усвоения называется промежуток времени, в пределах которого используются данные наблюдений для вычисления оценки. В [5] рассматривается подход к задаче оценки потоков, основанный на вариационных принципах. При этом отмечается, что на устойчивость алгоритма влияет так называемая “матрица информации”. Ее вид зависит от оператора наблюдений, который, в свою очередь, зависит от величины окна усвоения. В теории оценивания также рассматривается матрица информации. Невырожденность этой матрицы является условием наблюдаемости системы и, в свою очередь, устойчивости процедуры оптимальной фильтрации [1, 13]. Поскольку задача оценки потоков решается для больших временных промежутков, в пределах года и более, то использование большого окна усвоения применяется в большинстве таких работ. При этом оцениваются средние значения за некоторый временной период, например за месяц [6] или 8 дней [9–11]. Между тем, использование в этих задачах окон усвоения, в пределах которых оцениваются значения потоков для нескольких временных интервалов, может приводить к неустойчивости алгоритма. В [16] отмечается, что увеличение окна усвоения не улучшает результат оценки потоков парниковых газов по спутниковым данным.

Таким образом, требуется проведение исследования свойств алгоритма ансамблевого сглаживания Калмана, в частности, выполнения условия наблюдаемости. Этой проблеме посвящена настоящая статья. В статье рассматривается алгоритм оценки потоков по данным наблюдений из заданного временного интервала. Алгоритм является вариантом алгоритма ансамблевого сглаживания, широко применяемого в таких задачах. Показано, что при рассмотрении алгоритма, в котором оцениваются значения потоков для нескольких временных интервалов (среднее значение для этих интервалов), нарушается свойство наблюдаемости, при этом алгоритм может становиться неустойчивым. Приводятся результаты модельных численных экспериментов с одномерной моделью переноса и диффузии пассивной примеси. При реализации алгоритма применяется эффективный локальный алгоритм, использующий разработанные ранее ансамблевые алгоритмы фильтрации и сглаживания [3, 4].

Проведенное в настоящей работе исследование свойств метода ансамблевого сглаживания планируется в дальнейшем использовать при разработке системы усвоения

данных, основанной на ансамблевом подходе, для оценки потоков парниковых газов с поверхности Земли.

В пункте 2 статьи содержится описание алгоритма ансамблевого сглаживания Калмана. Пункт 3 посвящен алгоритму, в котором оцениваемой переменной является поток парниковых газов с поверхности Земли, а модель распространения парникового газа в пространстве и времени входит в оператор наблюдений. Пункт 4 посвящен исследованию проблемы наблюдаемости в задаче оценки потоков парниковых газов, использующей ансамблевое сглаживание, в п. 5 приводятся результаты модельных численных экспериментов. Пункт 6 содержит заключительные выводы.

2. Алгоритм ансамблевого сглаживания Калмана

Предположим, что “истинное” состояние интересующего нас процесса может быть представлено в виде динамико-стохастической системы

$$z_{k+1}^\top = A_k(z_k^\top) + \eta_k^\top.$$

Предположим также, что известны данные наблюдений y_k^0 , представляющие собой вектор размерности d :

$$y_k^0 = H_k(z_k^\top) + \varepsilon_k^0.$$

В этих формулах z_k^\top — вектор размерности p , k — номер шага по времени модели, η_k^\top и ε_k^0 — случайные ошибки прогноза и наблюдений соответственно, A_k — оператор модели, H_k — оператор, переводящий прогнозируемые переменные в наблюдаемые (оператор наблюдений), ε_k^0 и η_k^\top — гауссовские случайные величины: $E[\varepsilon_k^0 (\varepsilon_k^0)^\top] = R_k$, $E[\eta_k^\top (\eta_k^\top)^\top] = Q_k$. Символом E обозначена операция теоретико-вероятностного осреднения.

При оценке значения вектора z по данным наблюдений в один момент времени для решения задачи может быть применен фильтр Калмана [13]. Формулы фильтра Калмана имеют вид

$$z_{k+1}^f = A_k z_k^f, \quad (1)$$

$$z_k^a = z_k^f + K_k [y_k^0 - H_k z_k^f], \quad (2)$$

$$K_k = P_k^f H_k^\top (H_k P_k^f H_k^\top + R_k)^{-1}.$$

В этих формулах z_k^f , z_k^a — значения прогноза и анализа соответственно. Отметим, что в задачах усвоения данных прогнозом называется шаг алгоритма (1) (при этом принято использовать индекс “ f ”), анализом — шаг алгоритма (2) (при этом используется индекс “ a ”). P_k^f , R_k — матрицы ковариаций ошибок прогноза и наблюдений соответственно [13].

Если для вычисления матрицы P_k^f используется ансамбль прогнозов, получим алгоритм, называемый ансамблевым фильтром Калмана [8]. При этом ансамблем называют выборку, состоящую из прогнозов по заданному набору случайных полей. Если рассматривается задача оценки значения на некотором временном интервале, применяется алгоритм ансамблевого сглаживания. Одним из вариантов реализации этого алгоритма по данным за несколько моментов времени является алгоритм ансамблевого сглаживания Калмана [8].

Алгоритм ансамблевого сглаживания Калмана, предложенный в [8], состоит в следующем. Пусть имеются данные наблюдений в моменты времени $\{i(1), \dots, i(L)\}$. Обозначим ансамбль значений размерности N переменной z в начальный момент времени t_0 через $Z_0 = [z_0^1, \dots, z_0^N]$. Ансамбль прогнозов к моменту наблюдений $i(1)$ $\tilde{Z}_{i(1)}^f = [Z_0, Z_1^f, \dots, Z_{i(1)}^f]^\top$. Оценка по данным наблюдений в момент времени $i(1)$ осуществляется по формуле шага анализа фильтра Калмана (2)

$$\tilde{Z}_{i(1)}^a = \tilde{Z}_{i(1)}^f + K_{i(1)} \left[y_0^{i(1)} - H_{i(1)} \left(\tilde{Z}_{i(1)}^f \right) \right], \quad (3)$$

$$K_{i(1)} = D \tilde{Z}_{i(1)}^f \left(H_{i(1)} D \tilde{Z}_{i(1)}^f \right)^\top \left[H_{i(1)} D \tilde{Z}_{i(1)}^f \left(H_{i(1)} D \tilde{Z}_{i(1)}^f \right)^\top + R_{i(1)} \right]^{-1}.$$

В этих формулах $H_{i(1)}$ — оператор наблюдений, $R_{i(1)}$ — соответствующая матрица ковариаций ошибок наблюдений. Для вычисления матрицы $K_{i(1)}$ ковариационная матрица ошибок прогноза оценивается по ансамблю $D \tilde{Z}_{i(1)}^f$ (ансамбль отклонений $\tilde{Z}_{i(1)}^f$ от среднего по ансамблю значения, нормированный на $\sqrt{N-1}$) [8].

Важно подчеркнуть, что для анализа по данным $y_0^{i(1)}$ к значениям первого приближения (элементы вектора $\tilde{Z}_{i(1)}^f$) добавляется соответствующий элемент вектора $D \tilde{Z}_{i(1)}^f$, умноженный на $\left(H_{i(1)} D \tilde{Z}_{i(1)}^f \right)^\top \left[H_{i(1)} D \tilde{Z}_{i(1)}^f \left(H_{i(1)} D \tilde{Z}_{i(1)}^f \right)^\top + R_{i(1)} \right]^{-1} v \left[y_0^{i(1)} - H_{i(1)} \tilde{Z}_{i(1)}^f \right]$. Последний множитель считается один раз (так как $H_{i(1)}$ соответствует данным в момент времени $i(1)$), а затем проводится вычисление компонентов вектора $\tilde{Z}_{i(1)}^a$ с использованием ансамбля возмущений $D \tilde{Z}_{i(1)}^f$, т. е. весовой множитель домножается на компонент вектора $D \tilde{Z}_{i(1)}^f$, соответствующий конкретному моменту времени, для оценки компонента $\tilde{Z}_{i(1)}^a$, соответствующего этому моменту.

Пусть имеется прогноз к моменту времени $i(j)$: $\tilde{Z}_{i(j)}^f = [Z_{i(j-1)}^a, Z_{i(j-1)+1}^f, \dots, Z_{i(j)}^f]^\top$. Оценка по данным в момент времени $i(j)$ производится по формуле, аналогичной формуле (3). Алгоритм подробно описан в монографии [8].

В работах [3, 4] предложена модификация описанного выше алгоритма, при которой он становится локальным и более эффективным с вычислительной точки зрения. В работе [3] предложен локальный эффективный алгоритм реализации ансамблевого фильтра Калмана (ансамблевый π -алгоритм). Он является аналогом алгоритма LETKF (Local Ensemble Transform Kalman Filter — вариант ансамблевого фильтра Калмана, очень популярный в настоящее время) [14]. При этом ансамблевый π -алгоритм предназначен для реализации стохастического фильтра, в то время как LETKF является детерминированным фильтром [15]. Стохастическим называется ансамблевый фильтр Калмана, в котором вычисляется ансамбль оценок на шаге анализа (2) по ансамблю прогнозов. В детерминированном ансамблевом фильтре Калмана оценка (2) вычисляется для среднего по ансамблю значения, а затем вычисляется ансамбль возмущений [8, 15]. Это различие может влиять на свойства алгоритма [15, 17].

В работе [4] рассматривается обобщение ансамблевого π -алгоритма на случай ансамблевого сглаживания. В этом алгоритме шаг анализа вычисляется только для среднего по выборке значения, элементы ансамбля анализов вычисляются добавлением к среднему значению ансамбля возмущений. Кроме того, для вычисления ковариационной матрицы ошибок анализа используется матрица трансформаций, что делает его более эффективным с вычислительной точки зрения (т. к. размерность матрицы трансформаций

порядка размерности ансамбля). Алгоритм является локальным в том смысле, что оценка на шаге анализа может проводиться для каждого узла сетки независимо. Это связано со свойствами матрицы трансформаций. Отметим, что в алгоритме фильтра Калмана в общем случае оценка осуществляется для всех узлов сетки одновременно, что затрудняет практическую реализацию алгоритма для задач большой размерности. Более подробно алгоритм изложен в работе [4].

3. Задача оценки потоков парниковых газов с поверхности Земли по данным наблюдений о концентрации

Рассмотрим применение описанного в предыдущем пункте алгоритма ансамблевого сглаживания Калмана в случае, когда производится оценка потоков парниковых газов с поверхности Земли, а модель переноса и диффузии входит в оператор наблюдений.

Пусть оценка производится для среднего на заданном временном интервале (порядка недели) значения потока по данным из этого интервала. При работе с реальными данными, например спутниковыми, для оценки значений в заданный момент времени используются данные из интервала ± 3 часа. Все данные считаются относящимися к этому моменту времени. В таком случае для вычисления невязки (данные минус прогноз в формуле (2)) используется прогноз по модели с предыдущего момента оценки (анализа) до момента наблюдения.

Если для оценки потоков используются данные из большого временного интервала, применяется алгоритм ансамблевого сглаживания. Рассмотрим вариант оценки потоков в заданном временном интервале и нескольких предыдущих по данным из этих интервалов. В реальных экспериментах — это несколько временных интервалов (порядка недели). В пределах каждого интервала оценивается среднее значение потока, при этом рассматривается n временных интервалов $\{k(j-1), k(j)\}$ от момента времени $k(0)$ до момента времени $k(n)$. Данные берутся из интервала $\{k(n-1), k(n)\}$, и оцениваются средние значения потоков на интервале $\{k(n-1), k(n)\}$ и $(n-1)$ предыдущих временных интервалах, т. е. рассматривается вектор потоков $\tilde{\phi} = [\phi_1^f, \dots, \phi_n^f]$, где ϕ_j^f — значение потока на временном интервале $\{k(j-1), k(j)\}$.

В случае, когда оцениваемой переменной является поток, прогнозируемая переменная $z = \tilde{\phi}$ и уравнение шага прогноза имеет вид $\tilde{\phi}_j^f = \tilde{\phi}_{j-1}^a$, где $\tilde{\phi}_{j-1}^a$ — значение анализа в момент времени $k(j-1)$, т. е. считается, что в промежутках между шагами анализа поток не меняется.

Связь данных на интервале $\{k(n-1), k(n)\}$ со всем вектором потоков $\tilde{\phi}$ осуществляется через оператор наблюдений \hat{H} . Будем считать, что на интервале $\{k(n-1), k(n)\}$ известен вектор данных наблюдений y , состоящий из L подвекторов, соответствующих моментам наблюдения $\{i(l), l = 1, \dots, L\}$, тогда $y = \hat{H}(\tilde{\phi}) + \epsilon$ (ϵ — случайная ошибка наблюдений с нулевым средним и заданной ковариационной матрицей).

Данные наблюдений в момент времени $i(l)$ представим в виде

$$y_0^l = H_l(\tilde{\phi}_t^l) + \epsilon_0^l,$$

где $\tilde{\phi}_t^l$ — “истинное” значение вектора потоков, H_l включает в себя интерполяцию в точку наблюдений по пространству (оператор H_l^{int}), а также изменение переменной по времени (оператор H_l^f , при этом используется модель переноса и диффузии): $H_l = H_l^{\text{int}} H_l^f$, т. е. оператор наблюдений связывает значения измерений о концентрации и оцениваемую переменную, которой является поток.

Будем представлять конечно-разностный аналог уравнения переноса и диффузии в виде

$$q_{k+1}^f = F_k q_k^f + \phi_k^f, \quad (4)$$

где k — номер шага по времени модели, F_k — конечно-разностный аналог оператора переноса и диффузии, q_k^f — концентрация парникового газа, ϕ_k^f — поток (векторы размерности p).

Вычисление значения концентрации в момент времени $k(j)$ по значениям в момент времени $k(j-1)$ формально можно записать как

$$q_{k(j)}^f = \left(\prod_{i=1}^m F_i \right) q_{k(j-1)}^f + \sum_{j=1}^m \left[\prod_{l=j+1}^m F_{k(j)+(j+1)-l} \right] \phi_j^f,$$

где $q_{k(j-1)}^f, q_{k(j)}^f$ — значения концентрации в моменты времени $k(j-1), k(j)$ соответственно, m — количество временных шагов модели на временном интервале между шагами анализа $\{k(j-1), k(j)\}$, при $m > i(j)$ $\prod_{l=m}^{k(j)} F_l = I$.

Или в более компактном виде

$$q_{k(j)}^f = \tilde{F}_{0,j} q_{k(j-1)}^f + \tilde{F}_{1,j} \phi_j^f, \quad (5)$$

где $\tilde{F}_{0,j} = \prod_{i=1}^m F_i$, $\tilde{F}_{1,j} = \sum_{j=1}^m \prod_{l=j+1}^m F_{k(j)+(j+1)-l}$.

Рассмотрим алгоритм ансамблевого сглаживания Калмана, описанный в предыдущем пункте. Пусть известны на шаге прогноза значения потоков $\tilde{\phi}_{k(n)}^f = [\phi_1^f, \dots, \phi_n^f]$ для n временных интервалов. Будем оценивать вектор $\tilde{\phi}_{i(n)}^f$ по данным в моменты времени из интервала $\{k(n-1), k(n)\}$.

Оператор наблюдений, связывающий данные и прогноз, включает в себя прогноз по модели переноса и диффузии от момента предыдущей оценки до начала следующего временного интервала и прогноз внутри интервала до времени наблюдения. Исходя из общей формулы (5), к моменту времени $k(n-1)$

$$q_{k(n-1)}^f = \tilde{F} q_{k(0)}^f + [H_1, \dots, H_{n-1}] [\phi_{i(1)}^f, \dots, \phi_{i(n-1)}^f]^\top,$$

где \tilde{F} — оператор при значении концентрации в момент времени $k(0)$, $[H_1, \dots, H_{n-1}]$ — операторы при компонентах вектора потоков $[\phi_1^f, \dots, \phi_{n-1}^f]$ (матрицы размерности p). Тогда к моменту времени наблюдения $i(l)$

$$q_{i(l)}^f = \tilde{F}_{0,l} q_{k(n-1)}^f + \tilde{F}_{1,l} \phi_n = \tilde{F}_{0,l} \tilde{F} q_{k(0)}^f + [\tilde{F}_{0,l} H_1, \dots, \tilde{F}_{0,l} H_{n-1}, \tilde{F}_{1,l} H_n] [\phi_1^f, \dots, \phi_{n-1}^f, \phi_n^f]^\top,$$

где $H_n = I$ (единичная матрица), $\tilde{F}_{0,l}$ — оператор при значении концентрации в момент времени $k(n-1)$, $\tilde{F}_{1,l}$ — оператор при n -й компоненте вектора потоков ϕ_n .

Формально мы можем использовать формулу (3). Отметим, что эта формула записана для ансамбля анализов. Для среднего по ансамблю значения формула будет выглядеть аналогично. Если вычисляется оценка вектора $\tilde{\phi}_{k(n)}^a$ по данным в момент времени $i(l)$, то оператор наблюдений можно представить в виде

$$\hat{H}_l(\tilde{\phi}_{k(n)}^f) = H_l^{\text{int}} [\tilde{F}_{0,l} H_1, \dots, \tilde{F}_{0,l} H_{n-1}, \tilde{F}_{1,l} H_n] \tilde{\phi}_{k(n)}^f + \tilde{F}_{0,l} \tilde{F} q_{k(0)}^f, \quad (6)$$

или

$$\hat{H}_l(\tilde{\phi}_{k(n)}^f) = \tilde{H}_l \tilde{\phi}_{k(n)}^f + H_0 q_{k(0)}^f, \quad (7)$$

где $\tilde{H}_l = H_l^{\text{int}}[\tilde{F}_{0,l}H_1, \dots, \tilde{F}_{0,l}H_{n-1}, \tilde{F}_{1,l}H_n]$, $H_0 = \tilde{F}_{0,l}\tilde{F}$. Если на интервале $\{k(n-1), k(n)\}$ есть L векторов данных наблюдений, то оператор наблюдений \hat{H} будет иметь вид

$$\hat{H} = [\hat{H}_1, \dots, \hat{H}_L]^\top.$$

4. Выполнение условия наблюдаемости в алгоритме оценки потоков парниковых газов по данным о концентрации

В процедуре усвоения данных на результат в заданный момент времени влияют значения, полученные в предыдущие моменты времени. Важным условием получения оптимальной оценки является устойчивость алгоритма по времени. В [7] отмечается, что устойчивость алгоритма фильтра Калмана зависит от выполнения так называемого условия наблюдаемости. Ансамблевый фильтр Калмана является вариантом приближенного решения задачи оптимальной фильтрации. Как отмечено в [8], оценка, полученная в алгоритме ансамблевого сглаживания Калмана в заданный момент времени по данным наблюдений в этот же момент времени, совпадает с оценкой ансамблевого фильтра Калмана. Рассмотрим выполнение условия наблюдаемости в случае применения алгоритма ансамблевого сглаживания Калмана к задаче оценки потоков с поверхности Земли парниковых газов.

Пусть требуется оценить вектор $\tilde{\phi} = [\phi_1, \dots, \phi_n]$ по данным наблюдений y_0 в заданный момент времени. Данные наблюдений представим в виде $y_0 = \tilde{H}\tilde{\phi} + \varepsilon_0$, где ε_0 — случайная ошибка наблюдений с нулевым математическим ожиданием и ковариационной матрицей R . Тогда линейная несмещенная оценка с минимальной дисперсией (гауссовско-марковская) имеет вид $\tilde{\phi} = (\tilde{H}^\top R^{-1} \tilde{H})^{-1} \tilde{H}^\top R^{-1} y_0$. Для существования этой оценки матрица $M = \tilde{H}^\top R^{-1} \tilde{H}$ должна быть невырожденной [1, 13]. Это условие называется условием наблюдаемости, а матрица M — матрицей информации [1, 13].

В случае, если $y_0 = \tilde{H}\tilde{\phi} + (H_0 q_0 + \varepsilon_0)$, задачу оценки $\tilde{\phi}$ можно представить в виде $y_0 - H_0 q_0 = \tilde{H}\tilde{\phi} + \varepsilon_0$. Для получения оценки также требуется невырожденность матрицы M .

Применение алгоритма ансамблевого сглаживания Калмана эквивалентно поиску вектора $\tilde{\phi} = [\phi_1, \dots, \phi_n]$, доставляющего минимум функционалу [8, 13]

$$J = \frac{1}{2}(\tilde{\phi} - \tilde{\phi}_0)^\top P_0^{-1}(\tilde{\phi} - \tilde{\phi}_0) + \frac{1}{2}[y_0 - \hat{H}(\tilde{\phi})]^\top R^{-1}[y_0 - \hat{H}(\tilde{\phi})],$$

$\tilde{\phi}_0$ — априорное значение оцениваемой величины.

Если $P_0^{-1} \neq 0$, т. е. известна априорная информация $\tilde{\phi}_0$, то оценка будет иметь вид

$$\tilde{\phi} = (P_0^{-1} + M)^{-1} (M^\top R^{-1} y_0 + P_0^{-1} \tilde{\phi}_0),$$

где $M = \tilde{H}^\top R^{-1} \tilde{H}$. Если предположить, что $P_0^{-1} = 0$, то для решения задачи требуется, чтобы выполнялось условие $M > 0$ [1, 13]. Это условие является частным случаем условия наблюдаемости [1, 13]. В общем случае рассматривается минимум функционала при выполнении условия, такого что по времени переменная удовлетворяет прогностическому уравнению. В нашем частном случае предполагается, что прогностический оператор равен единичному.

Как видно из приведенной выше формулы, наличие априорной информации может улучшить обусловленность матрицы $(P_0^{-1} + M)$.

Рассмотрим задачу оценки потоков парниковых газов на n временных интервалах по данным в момент времени $i(l)$ из интервала $\{k(n-1), k(n)\}$. Как показано в предыдущем пункте, при этом $\tilde{H}_l(\tilde{\phi}) = \tilde{H}_l\tilde{\phi} + H^0q_0$ (индексы f опущены). Тогда на точность оценки влияют свойства оператора $M_l = \tilde{H}_l^\top R_l^{-1} \tilde{H}_l$. Для удобства изложения далее индексы “ f ” опущены. Матрица M_l имеет вид

$$M_l = \begin{pmatrix} \tilde{H}_l^{1,T} B_l \tilde{H}_l^1 & \dots & \tilde{H}_l^{1,T} B_l \tilde{H}_l^{n-1} & \tilde{H}_l^{1,T} B_l \tilde{H}_l^n \\ \tilde{H}_l^{2,T} B_l \tilde{H}_l^1 & \dots & \tilde{H}_l^{2,T} B_l \tilde{H}_l^{n-1} & \tilde{H}_l^{2,T} B_l \tilde{H}_l^n \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \tilde{H}_l^{n,T} B_l \tilde{H}_l^1 & \dots & \tilde{H}_l^{n,T} B_l \tilde{H}_l^{n-1} & \tilde{H}_l^{n,T} B_l \tilde{H}_l^n \end{pmatrix}.$$

В этой формуле $B_l = H^{\text{int},\top} R_l^{-1} H^{\text{int}}$, $\tilde{H}_l^i = \tilde{F}_{0,l} H_i$ для $i = 1, \dots, n-1$, $\tilde{H}_n = \tilde{F}_{1,l} H_n$, $H_n = I$. Элементы матрицы M_l получаются после подстановки в формулу матриц \tilde{H}_l из (7). Матрица M_l состоит из блоков размерности $(p \times p)$, оператор H^{int} имеет размерность $(p \times d)$.

Рассмотрим два последних столбца матрицы M_l , обозначим их S_{n-1} и S_n . Элементы S_{n-1} получаются путем умножения элементов S_n справа на $C = \tilde{F}_{1,l}^{-1} \tilde{F}_{0,l} H_{n-1}$. Для осуществления этой операции требуется невырожденность оператора $\tilde{F}_{1,l}$. Отметим, что вид этого оператора аналогичен оператору $\tilde{F}_{1,j}$ из формулы (5). Если существует оператор, обратный к $\tilde{F}_{1,l}$, можно подобрать ненулевой собственный вектор матрицы M_l , соответствующий собственному числу, равному 0 [2].

Рассмотрим блочный вектор $c = [0, \dots, 0, g, -\lambda g]^\top$ (первые $(n-2)$ значения представляют собой нулевые подвекторы), где g — собственный вектор матрицы C . Тогда вектор c будет собственным вектором матрицы M_l , соответствующим нулевому собственному значению. Действительно, при умножении j -й строки блоков матрицы M_l на вектор c получим $S_{n-1}^j g - \lambda S_n^j g = S_n^j C g - \lambda S_n^j g = 0$ (S_{n-1}^j , S_n^j — j -е элементы столбцов S_{n-1} и S_n), т. е. матрица M_l вырождена.

Из вышесказанного следует, что в случае, если оцениваемая величина ϕ является переменной на заданном временном интервале, матрица M_l будет вырождена, т. е. нарушается условие наблюдаемости [1, 13]. В свою очередь, это может привести к неустойчивости процедуры оценки [7].

Если производится оценка по всем данным $\mathbf{y} = [y_Q^1, \dots, y_Q^L]$ и соответствующая матрица R блочно-диагональная, то $M = \text{diag}\{\tilde{H}_1^\top R_1^{-1} \tilde{H}_1, \dots, \tilde{H}_L^\top R_L^{-1} \tilde{H}_L\}$, где \tilde{H}_l — оператор наблюдений, R_l — блок матрицы R , соответствующий l -у вектору наблюдений. Аналогично предыдущим выкладкам можно показать, что данная матрица также будет вырождена в случае, если оцениваемая величина ϕ является переменной на заданном временном интервале.

Таким образом, при использовании в рассматриваемой задаче оценки потоков больших окон усвоения, в пределах которых оценивается поток на нескольких временных интервалах, возникает проблема устойчивости алгоритма оценивания. Соответственно, более правильным является оценивание на временных интервалах, в пределах которых вычисляется среднее значение потока.

5. Численные эксперименты с одномерной моделью переноса и диффузии

Численные эксперименты проводились с 1-мерной моделью переноса и диффузии пассивной примеси. Рассматривалось следующее уравнение:

$$\frac{\partial \hat{q}}{\partial t} + u \frac{\partial \hat{q}}{\partial x} = k^2 \frac{\partial^2 \hat{q}}{\partial x^2} + \hat{\phi}(x, t),$$

где \hat{q} — прогнозируемая переменная, $\hat{\phi}(x, t)$ — неизвестный источник пассивной примеси. Для решения уравнения применялся полулагранжев метод, при этом бралась неявная схема по времени и схема центральных разностей по пространству. Для решения конечно-разностного аналога уравнения диффузии использовался метод циклической прогонки. Уравнение решалось на отрезке $(0, 1)$, при этом рассматривались периодические граничные условия. Задавалось 240 узлов сетки, $u = 1$, $k^2 = 0.6 \times 10^{-3}$. Рассматривался конечно-разностный аналог этого уравнения в виде (4).

Были проведены следующие численные эксперименты с модельными данными. В начальный момент времени истинное значение концентрации задавалось в виде дискретного аналога функции $\sin(x)$, начальное значение эмиссии бралось в виде дискретного аналога функции $\phi_0(x)$, где

$$\phi_0(x) = \begin{cases} 0.1, & 0.375 \leq x \leq 0.625, \\ 0, & 0.375 > x \wedge x > 0.625. \end{cases} \quad (8)$$

Заданные начальные значения q_0 , ϕ_0 считались “истинными”. Для получения начальных данных для прогноза по модели q_0^d , ϕ_0^d к “истинным” начальным данным добавлялось возмущение $q_0^d = q_0^\top + \delta$, $\delta \sim N(0, s_0)$, $\phi_0^d = \phi_0^\top + \delta_\phi$, $\delta_\phi \sim N(0, dg_0)$. Через $N(a, b)$ обозначена случайная величина, распределенная по нормальному закону с математическим ожиданием, равным a , и дисперсией, равной b . После задания начальных значений “истинных” концентрации и потока и начальных значений концентрации и потока для прогноза был проведен расчет на 100 шагов по времени. Полученное значение концентрации бралось в качестве начального значения для проведения экспериментов по усвоению данных.

Для организации численных экспериментов задавались: ансамбль начальных полей $q_0^n = q_0^d + \delta^n$, $\delta^n \sim N(0, s_0)$, $n = 1, \dots, N_{\text{ens}}$; $\phi_0^n = \phi_0^d + \delta_\phi^n$, $\delta_\phi^n \sim N(0, dg_0)$, $n = 1, \dots, N_{\text{ens}}$; наблюдения $y_0 = q_0^\top + \delta_0$; $\delta_0 \sim N(0, \varepsilon_0)$; ансамбль наблюдений с возмущениями $y_0^n = y_0 + \delta_0^n$, $\delta_0^n \sim N(0, \varepsilon_0)$, $n = 1, \dots, N_{\text{ens}}$. Через N_{ens} обозначено число элементов ансамбля. Данные наблюдений считались известными во всей области интегрирования. Во всех численных экспериментах рассматривался вариант $R = \varepsilon_0^2 I$.

При проведении численных экспериментов считалось, что данные наблюдений имеются во всех узлах сетки рассматриваемой области.

Были проведены численные эксперименты с модельными данными для различных окон усвоения. Для оценки потока использовался метод ансамблевого сглаживания Калмана, описанный в предыдущих пунктах. В экспериментах “истинное” значение потока задавалось зависящим от времени. В течение всего временного интервала каждые 20 шагов по времени “истинное” значение (8) умножалось на множитель $\alpha = (1 + 1.5 \times 20/N_t)$, где $N_t = 500$ — общее количество временных шагов.

Рассматривались следующие значения параметров: $s_0 = \varepsilon_0 = 0.01$, $dg_0 = 0.01$, $N_{\text{ens}} = 100$. Бралось различные окна усвоения, т.е. оценка проводилась по данным из временного интервала в dt шагов по времени, $dt = \{1, 10, 20, 30, 40\}$.

Было проведено две серии численных экспериментов. В первой серии начальное значение потока считалось неизвестным и задавалось равным нулю. Во второй серии к истинному значению потока добавлялось возмущение, и полученное значение бралось в качестве начального значения потока. Точность оценки определялась сравнением с “истинным” значением и вычислением среднеквадратической ошибки. Результаты этих экспериментов приведены на рисунках 1 и 2 (первая серия экспериментов), рис. 3 и рис. 4 (вторая серия экспериментов). На этих рисунках приведено поведение по времени среднеквадратической ошибки оценки потока при различных значениях окна усвоения для временного интервала 160 шагов по времени.

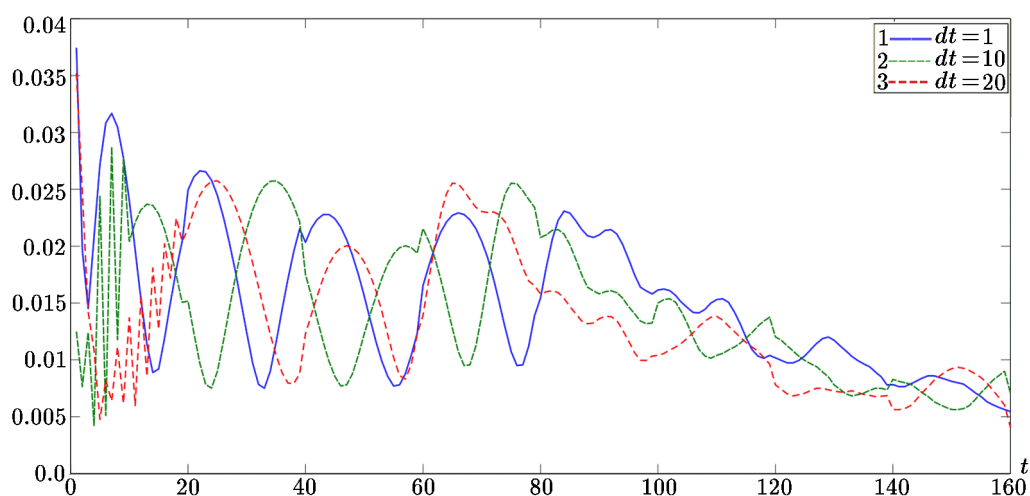


Рис. 1. Среднеквадратическая ошибка при разных значениях окна усвоения $dt = \{1, 10, 20\}$. Начальное значение потока равно нулю

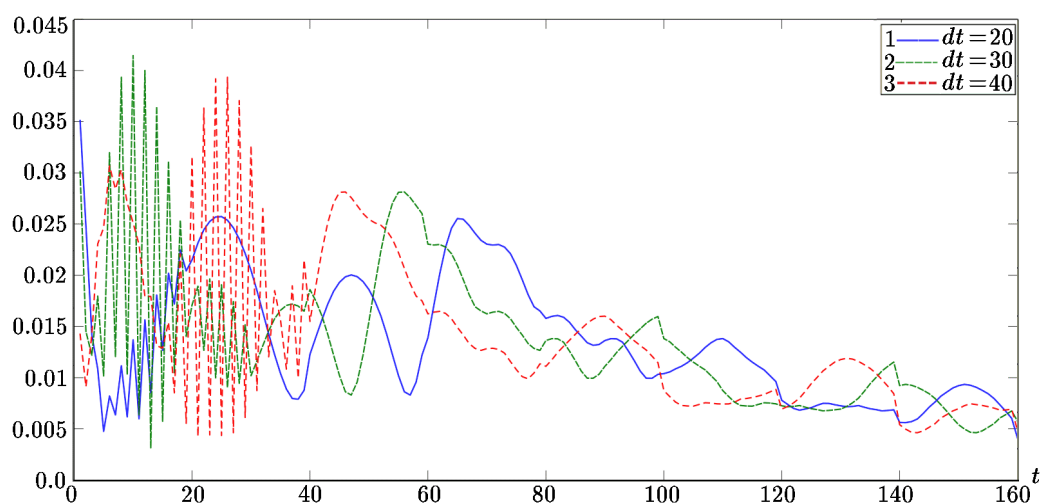


Рис. 2. Среднеквадратическая ошибка при разных значениях окна усвоения $dt = \{20, 30, 40\}$. Начальное значение потока равно нулю

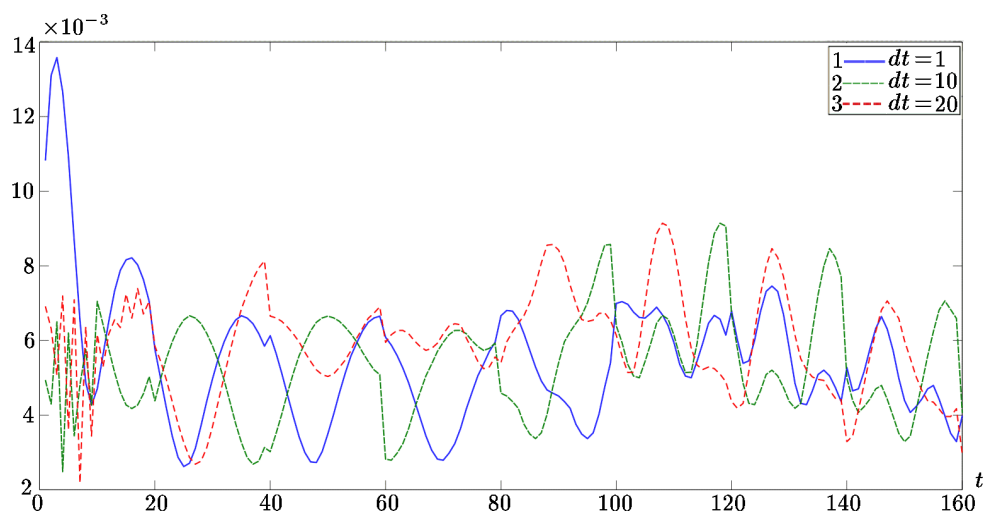


Рис. 3. Среднеквадратическая ошибка при разных значениях окна усвоения $dt = \{1, 10, 20\}$. Начальное значение потока задается отличным от нуля

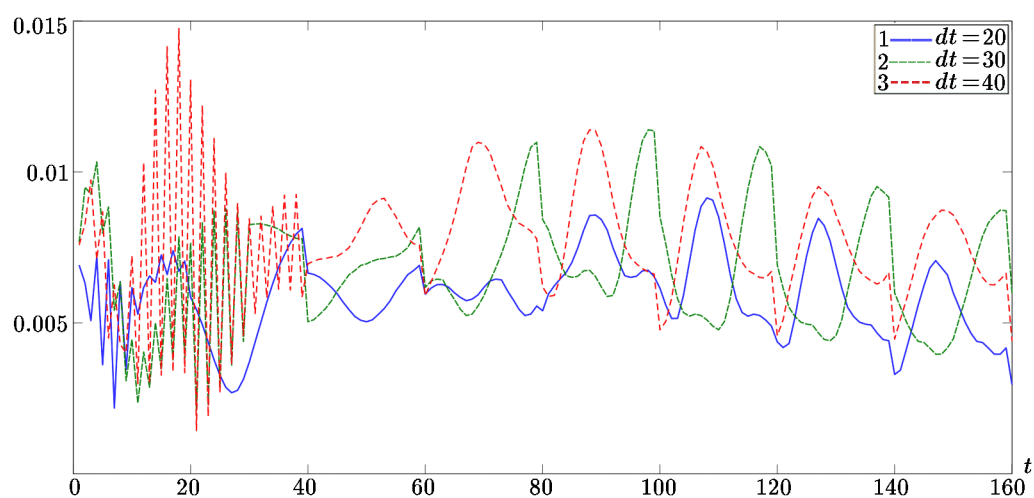


Рис. 4. Среднеквадратическая ошибка при разных значениях окна усвоения $dt = \{20, 30, 40\}$. Начальное значение потока задается отличным от нуля

Как видно из рисунков, поведение среднеквадратической ошибки существенно зависит от того, известна ли нам информация о начальных значениях потоков. При отсутствии такой информации в первые 40–50 шагов по времени имеет место сильный рост ошибки, затем процесс становится более стабильным. Что касается влияния окна усвоения, то при $dt > 20$ в среднем величина ошибки больше и поведение менее стабильное, чем при $dt \leq 20$. При этом использование алгоритма сглаживания ($dt > 1$) позволяет получить более точную оценку в случае $dt \leq 20$. Отметим, что поток задается меняющимся каждые 20 шагов по времени.

Таким образом, как видно из рисунков, предпочтительнее использовать окно усвоения, в пределах которого значение потока не меняется.

6. Заключение

Задача оценки потоков парниковых газов с поверхности Земли в настоящее время решается с помощью систем усвоения данных. При этом используются модели распространения примеси в атмосфере и метеорологические поля скорости ветра, температуры и т. д. для моделирования переноса и диффузии парниковых газов. В качестве математической постановки задачи одним из популярных алгоритмов является ансамблевый фильтр Калмана. При больших окнах усвоения рассматривается алгоритм ансамблевого сглаживания Калмана.

В статье рассматривается подход к задаче, в котором потоки являются оцениваемой переменной, а модель переноса и диффузии входит в оператор наблюдений. При этом используется алгоритм ансамблевого сглаживания Калмана и проводится анализ свойств наблюдаемости данного алгоритма. Показано, что при использовании окна усвоения, в пределах которого производится оценка значений потоков на нескольких временных интервалах, нарушается свойство наблюдаемости и алгоритм может становиться неустойчивым. Этот вывод подтверждается модельными численными экспериментами с одномерной моделью переноса и диффузии пассивной примеси.

Благодарности. Автор выражает благодарность рецензенту за внимательное прочтение рукописи и полезные замечания и комментарии.

Литература

1. **Браммер К., Зиффлинг Г.** Фильтр Калмана–Бьюси. — М.: Наука, 1982.
2. **Беллман Р.** Введение в теорию матриц. — М.: Наука, 1969. Перевод: Bellman R. Introduction to matrix analysis. — New York, Toronto, London: McGraw-Hill Book Company, 1960.
3. **Климова Е.Г.** Стохастический ансамблевый фильтр Калмана с трансформацией ансамбля возмущений // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2019. — Т. 22, № 1. — С. 27–40. Перевод: Klimova E.G. The Kalman stochastic ensemble filter with transformation of perturbation ensemble // Numerical Analysis and Applications. — 2019. — Vol. 12, № 1. — P. 26–36.
4. **Климова Е.Г.** Экономичный алгоритм стохастического ансамблевого сглаживания // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2020. — Т. 23, № 4. — С. 381–394. Перевод: Klimova E.G. An efficient algorithm for stochastic ensemble smoothing // Numerical Analysis and Applications. — 2020. — Vol. 13, № 4. — P. 321–331.
5. **Bocquet M., Elbern H., Eskes H. et al.** Data assimilation in atmospheric chemistry models: current status and future prospects for coupled chemistry meteorology models // Atmos. Chem. Phys. Discuss. — 2014. — Vol. 14. — P. 32233–32323. — DOI:10.5194/acpd-14-32233-2014.
6. **Bruhwyler L.M.P., Michalak A.M., Peters W., Baker D.F., and Tanset P.** An improved Kalman smoother for atmospheric inversions // Atmospheric Chemistry and Physics. — 2005. — Vol. 5. — P. 2691–2702.
7. **Cohn S.E., Dee D.P.** Observability of discretized partial differential equations // SIAM J. Numer. Anal. — 1988. — Vol. 3. — P. 586–617.
8. **Evensen G.** Data Assimilation. The Ensemble Kalman Filter. — Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2009.
9. **Feng L., Palmer P.I., Bosch H., and Dance S.** Estimating surface CO₂ fluxes from spaceborne CO₂ dry air mole fraction observations using an ensemble Kalman filter // Atmospheric Chemistry and Physics. — 2009. — Vol. 9. — P. 2619–2633.

10. **Feng L., Palmer P.I., Bosch H. et al.** Consistent regional fluxes of CH₄ and CO₂ inferred from GOSAT proxy XCH₄: XCO₂ retrievals, 2010–2014 // Atmospheric Chemistry and Physics. — 2017. — Vol. 17. — P. 4781–4797.
11. **Feng L., Palmer P.I., Parker R.J. et al.** Estimates of European uptake of CO₂ inferred from GOSAT XCO₂ retrievals: sensitivity to measurement bias inside and outside // Atmospheric Chemistry and Physics. — 2016. — Vol. 16. — P. 1289–1302.
12. **Fraser A., Palmer P.I., Feng L. et al.** Estimating regional fluxes of CO₂ and CH₄ using space-borne observations of XCH₄: XCO₂ // Atmospheric Chemistry and Physics. — 2014. — Vol. 14. — P. 12883–12895.
13. **Jazwinski A.H.** Stochastic Processes and Filtering Theory. — New York: Academic Press, 1970.
14. **Hunt B.R., Kostelich E.J., and Szunyogh I.** Efficient data assimilation for spatiotemporal chaos: A local ensemble transform Kalman filter // Physica D: Nonlinear Phenomena. — 2007. — Vol. 230. — P. 112–126.
15. **Houtekamer H.L., Zhang F.** Review of the ensemble Kalman filter for atmospheric data assimilation // Monthly Weather Review. — 2016. — Vol. 144. — P. 4489–4532.
16. **Kang J., Kalnay E., Miyoshi T., Liu J., and Fung I.** Estimating of surface carbon fluxes with an advanced data assimilation methodology // J. Geophysical Research. — 2012. — Vol. 117. — Article № D24101. — DOI:10.1029/2012JD018259.
17. **Klimova E.G.** Bayesian approach to data assimilation based on ensembles of forecasts and observations // IOP Conf. Series: Earth and Environmental Science. — 2019. — DOI: 10.1088/1755-1315/386/1/012038.
18. **Nakamura G., Potthast R.** Inverse Modeling. — 2015. — DOI: 10.1088/978-0-7503-1218-9.

Поступила в редакцию 20 марта 2023 г.

После исправления 11 декабря 2023 г.

Принята к печати 19 апреля 2024 г.

Литература в транслитерации

1. **Brammer K., Ziffeling G.** Fil'tr Kalmana–B'yusi. — M.: Nauka, 1982.
2. **Bellman R.** Vvedenie v teoriyu matric. — M.: Nauka, 1969. Perevod: Bellman R. Introduction to matrix analysis. — New York, Toronto, London: McGraw-Hill Book Company, 1960.
3. **Klimova E.G.** Stokhasticheskii ansamblevyyi fil'tr Kalmana s transformaciei ansamblya vozmuschenii // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie. — Novosibirsk, 2019. — T. 22, № 1. — S. 27–40. Perevod: Klimova E.G. The Kalman stochastic ensemble filter with transformation of perturbation ensemble // Numerical Analysis and Applications. — 2019. — Vol. 12, № 1. — P. 26–36.
4. **Klimova E.G.** Ekonomichnyi algoritm stokhasticheskogo ansamblevogo sglazhivaniya // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie. — Novosibirsk, 2020. — T. 23, № 4. — S. 381–394. Perevod: Klimova E.G. An efficient algorithm for stochastic ensemble smoothing // Numerical Analysis and Applications. — 2020. — Vol. 13, № 4. — P. 321–331.
5. **Bocquet M., Elbern H., Eskes H. et al.** Data assimilation in atmospheric chemistry models: current status and future prospects for coupled chemistry meteorology models // Atmos. Chem. Phys. Discuss. — 2014. — Vol. 14. — P. 32233–32323. — DOI:10.5194/acpd-14-32233-2014.
6. **Bruhwyler L.M.P., Michalak A.M., Peters W., Baker D.F., and Tanset P.** An improved Kalman smoother for atmospheric inversions // Atmospheric Chemistry and Physics. — 2005. — Vol. 5. — P. 2691–2702.

7. **Cohn S.E., Dee D.P.** Observability of discretized partial differential equations // SIAM J. Numer. Anal. — 1988. — Vol. 3. — P. 586–617.
8. **Evensen G.** Data Assimilation. The Ensemble Kalman Filter. — Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2009.
9. **Feng L., Palmer P.I., Bosch H., and Dance S.** Estimating surface CO₂ fluxes from space-borne CO₂ dry air mole fraction observations using an ensemble Kalman filter // Atmospheric Chemistry and Physics. — 2009. — Vol. 9. — P. 2619–2633.
10. **Feng L., Palmer P.I., Bosch H. et al.** Consistent regional fluxes of CH₄ and CO₂ inferred from GOSAT proxy XCH₄: XCO₂ retrievals, 2010–2014 // Atmospheric Chemistry and Physics. — 2017. — Vol. 17. — P. 4781–4797.
11. **Feng L., Palmer P.I., Parker R.J. et al.** Estimates of European uptake of CO₂ inferred from GOSAT XCO₂ retrievals: sensitivity to measurement bias inside and outside // Atmospheric Chemistry and Physics. — 2016. — Vol. 16. — P. 1289–1302.
12. **Fraser A., Palmer P.I., Feng L. et al.** Estimating regional fluxes of CO₂ and CH₄ using space-borne observations of XCH₄: XCO₂ // Atmospheric Chemistry and Physics. — 2014. — Vol. 14. — P. 12883–12895.
13. **Jazwinski A.H.** Stochastic Processes and Filtering Theory. — New York: Academic Press, 1970.
14. **Hunt B.R., Kostelich E.J., and Szunyogh I.** Efficient data assimilation for spatiotemporal chaos: A local ensemble transform Kalman filter // Physica D: Nonlinear Phenomena. — 2007. — Vol. 230. — P. 112–126.
15. **Houtekamer H.L., Zhang F.** Review of the ensemble Kalman filter for atmospheric data assimilation // Monthly Weather Review. — 2016. — Vol. 144. — P. 4489–4532.
16. **Kang J., Kalnay E., Miyoshi T., Liu J., and Fung I.** Estimating of surface carbon fluxes with an advanced data assimilation methodology // J. Geophysical Research. — 2012. — Vol. 117. — Article № D24101. — DOI:10.1029/2012JD018259.
17. **Klimova E.G.** Bayesian approach to data assimilation based on ensembles of forecasts and observations // IOP Conf. Series: Earth and Environmental Science. — 2019. — DOI: 10.1088/1755-1315/386/1/012038.
18. **Nakamura G., Potthast R.** Inverse Modeling. — 2015. — DOI: 10.1088/978-0-7503-1218-9.

