

Е.Г. Климова, Н.В. Киланова

## Численные эксперименты по оценке эмиссии метана на основе системы усвоения данных о пассивной примеси в атмосфере Северного полушария

Институт вычислительных технологий СО РАН, г. Новосибирск

Поступила в редакцию 28.04.2006 г.

Предлагается методика усвоения данных в задаче оценивания концентрации и эмиссии пассивной примеси по данным наблюдений. Прогноз изменения полей концентрации примеси по времени дается с помощью полулагранжевой модели переноса и диффузии пассивной примеси, рассматриваемой для Северного полушария. Используемый в задаче оценивания полей концентрации и эмиссии пассивной примеси алгоритм усвоения данных основан на теории оптимальной фильтрации Калмана. При вычислении ковариационных матриц за основу берется предположение об эргодичности рассматриваемых случайных полей ошибок. В этом случае вероятностное осреднение заменяется на осреднение по времени.

Приведены результаты численных экспериментов с модельными данными о концентрации пассивной примеси на примере метана, и показана эффективность предлагаемых подходов к задаче усвоения.

### Введение

Задача усвоения результатов наблюдений является в настоящее время очень популярной при моделировании различных процессов в атмосфере, океане, водоемах и т.д. Проблема совместного учета данных наблюдений и прогностической модели решается на основе общего оптимизационного подхода с привлечением вариационной постановки либо теории оценивания. В первом случае разрабатывается метод усвоения, называемый в литературе 4DVAR, во втором — алгоритм усвоения, основанный на фильтре Калмана. В настоящей статье предлагается методика усвоения данных в задаче оценивания концентрации пассивной примеси. Прогноз изменения полей концентрации примеси по времени дается с помощью полулагранжевой модели переноса и диффузии пассивной примеси, рассматриваемой для Северного полушария.

Используемый в задаче оценивания полей концентрации пассивной примеси алгоритм усвоения данных основан на теории оптимальной фильтрации Калмана. Реализация алгоритма фильтра Калмана на ЭВМ в полной постановке невозможна, так как для современных глобальных моделей порядок ковариационных матриц достигает 1 млн. Одним из способов решения этой проблемы является использование упрощенных моделей для расчета матриц ковариаций ошибок прогноза. Такой алгоритм называют субоптимальным алгоритмом фильтра Калмана [1, 2]. Численные эксперименты по усвоению данных о пассивной примеси, в которых применялся субоптимальный алгоритм фильтра Калмана, описаны в [3, 4]. Вторым подходом к организации вычислений ковариационных матриц является подход,

основанный на предположении об эргодичности рассматриваемых случайных полей ошибок. В этом случае вероятностное осреднение можно заменить осреднением по времени [5].

### Усвоение данных наблюдений в задаче переноса и диффузии пассивной примеси

Предварительная оценка полей концентрации примеси дается с помощью модели переноса и диффузии пассивной примеси. Подробно данная модель описана в [3, 6]. Для решения уравнения переноса и диффузии применяется квазимонотонная полулагранжева схема. Изложим кратко суть этой схемы. Для начала к уравнению переноса и диффузии применяем метод расщепления по физическим процессам [7]. Согласно этому методу на каждом шаге по времени последовательно находится решение: а) задачи переноса примеси по траекториям, б) задачи турбулентной диффузии.

На первом этапе задача переноса примеси решается в лагранжевых координатах. При интерполяции из эйлеровых в лагранжевые координаты используется монотонизирующая процедура, подробно описанная в [8]. На втором этапе задача турбулентной диффузии рассматривается в эйлеровых координатах. Диффузионное уравнение аппроксимируется с помощью схемы Кранка–Николсона. К полученному разностному уравнению применяется метод расщепления по направлениям, для решения системы разностных уравнений используется метод факторизации.

Используемый в задаче оценивания полей концентрации пассивной примеси алгоритм усвоения

данных основан на теории оптимальной фильтрации Калмана. Постановка задачи оптимальной фильтрации подробно изложена в [9, 10], дискретный алгоритм фильтра Калмана в линейном случае в применении к задаче переноса и диффузии пассивной примеси описан в [3, 11, 12].

Основная сложность при реализации алгоритма фильтра Калмана возникает при вычислении матриц ковариаций ошибок прогноза из-за большого порядка этих матриц. Одним из решений этой вычислительной проблемы является применение субоптимальных алгоритмов фильтра Калмана. Это алгоритмы, в которых для расчета матриц ковариаций ошибок прогноза используются упрощенные модели [1, 2, 4, 13].

## Численные эксперименты

Нами рассматривался вариант субоптимального алгоритма в применении к задаче оценки поля эмиссии метана. Этот алгоритм основывался на предположении о том, что поля ошибок прогноза обладают свойством эргодичности. Для вычисления ковариаций ошибок прогноза использовалось уравнение для этих ошибок. Описание такого алгоритма и численные эксперименты по оценке поля концентрации приведены в [3].

В численных экспериментах «истинное» поле концентрации задавалось в виде

$$x_k^{tr} = A_{k-1}x_{k-1}^{tr} + \eta_{k-1}^{tr} + \varepsilon_{k-1}; \quad (1)$$

$$\eta_0^{tr} = \bar{\eta}, \quad (2)$$

где  $A_{k-1}$  – оператор модели;  $x_{k-1}^{tr}$  – «истинная» концентрация метана;  $\eta_{k-1}^{tr}$  – «истинная» эмиссия метана в момент времени  $t_{k-1}$ ;  $\varepsilon_{k-1}$  – случайный вектор «шумов» модели.

Прогноз концентрации по модели  $x_k^f$  (предварительная оценка поля концентрации) задавался следующим образом:

$$x_k^f = A_{k-1}x_{k-1}^f + \eta_{k-1}^f; \quad (3)$$

$$\eta_0^f = 0, \quad (4)$$

где  $\eta_{k-1}^f$  – эмиссия метана в момент времени  $t_{k-1}$ .

В моменты наблюдений моделировались данные наблюдений

$$y_k^0 = M_k x_k^{tr} + \xi_k, \quad (5)$$

где  $M_k$  – матрица, интерполирующая значение  $x_k^{tr}$  из узлов сетки в точки наблюдения;  $\xi_k$  – случайная величина, распределенная по нормальному закону с нулевым математическим ожиданием и дисперсией  $\sigma_0^2$ .

Были проведены следующие численные эксперименты по оценке эмиссии метана.

В эксперименте 1 начальное поле эмиссии задавалось нулевым, ошибка эмиссии задавалась как случайная величина с нулевым средним и среднеквадратической ошибкой, равной 10% от среднего значения эмиссии. В процессе усвоения данных о концентрации происходило восстановление поля эмиссии.

В эксперименте 2 проводилась оценка не самого значения эмиссии, а значения поправочного множителя в модели эмиссии. Предполагалось, что изменение поля эмиссии со временем можно представить в виде

$$\eta_k = \tilde{\eta}(1 + \delta\eta_k), \quad (6)$$

где  $\tilde{\eta}$  – фоновое значение эмиссии;  $\delta\eta_k$  – значение поправочного множителя в момент времени  $k$ . При этом

$$\delta\eta_{k+1} = \alpha\delta\eta_k + \sqrt{1-\alpha^2}\chi_k, \quad (7)$$

где  $\alpha = 0,95$ ;  $\chi_k$  – нормально распределенная случайная величина с нулевым математическим ожиданием и дисперсией 0,01. Такая модель для оценки эмиссии в процессе усвоения на основе фильтра Калмана предложена в [14].

В эксперименте 1 имеем систему уравнений для ошибок прогноза концентрации  $\Delta x_k$  и эмиссии  $\Delta\eta_k$ :

$$\Delta x_k = A_{k-1}\Delta x_{k-1} + \Delta\eta_{k-1} + \varepsilon_{k-1}; \quad (8)$$

$$\Delta\eta_k = \Delta\eta_{k-1}; \quad (9)$$

$$\Delta\eta_0 = \Delta x_0. \quad (10)$$

Оценка полей концентрации и эмиссии в момент усвоения рассчитывалась по следующим формулам:

$$x_k^a = x_k^f + \overline{\Delta x_k(\Delta x_k)^T} \left( M_k P_k^f M_k^T + R_k \right)^{-1} (y_k^0 - M_k x_k^f); \quad (11)$$

$$\eta_k^a = \eta_k^f + \overline{\Delta x_k(\Delta\eta_k)^T} \left( M_k P_k^f M_k^T + R_k \right)^{-1} (y_k^0 - M_k x_k^f). \quad (12)$$

При вычислении матрицы ковариации использовалось предположение, что вероятностное осреднение можно заменить осреднением по времени [5]:

$$P_k^f = \overline{\Delta x_k(\Delta x_k)^T} \cong \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \Delta x_i (\Delta x_i)^T. \quad (13)$$

Аналогично формуле (13) вычислялась матрица кроссковариаций ошибок концентрации и эмиссии. Здесь за основу также взято предположение о возможности замены вероятностного осреднения осреднением по времени:

$$\overline{\Delta x_k(\Delta\eta_k)^T} \cong \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \Delta x_i (\Delta\eta_i)^T. \quad (14)$$

Таким образом, по вычисленным ошибкам полей концентрации и эмиссии оценивались ковариации ошибок прогноза полей концентрации метана и кроссковариации ошибок концентрации и эмиссии, а затем производилась оценка по данным наблюдений поля концентрации по формуле (11) и поля эмиссии по формуле (12).

Для второго эксперимента начальная эмиссия задавалась следующим образом:

$$\eta_0^{tr} = \tilde{\eta}(1 + \delta\eta_0^{tr}), \quad (15)$$

$$\eta_0^f = \tilde{\eta}(1 + \delta\eta_0^f), \quad (16)$$

при этом для расчетов значения поправочных множителей взяты  $\delta\eta_0^{tr} = 0,1$ ,  $\delta\eta_0^f = 0,2$ . Между моментами усвоения изменение поправочных множителей вычислялось по формуле (7), а именно:

$$\delta\eta_{k+1}^{tr} = \alpha\delta\eta_k^{tr} + \sqrt{1-\alpha^2}\chi_k, \quad (17)$$

$$\delta\eta_{k+1}^f = \alpha\delta\eta_k^f + \sqrt{1-\alpha^2}\chi_k. \quad (18)$$

А в момент усвоения проводились вычисление концентрации по формуле (15) и вычисление поправочного множителя  $\delta\eta_k^a$ :

$$\delta\eta_k^a = \delta\eta_k^f + \overline{\Delta x_k(\Delta\delta\eta_k)^T(M_k P_k^f M_k^T + R_k)^{-1}(y_k^0 - M_k x_k^f)}, \quad (19)$$

где  $\Delta\delta\eta_k$  – вектор разности между поправочными множителями для прогноза эмиссии и действительной эмиссии на  $k$ -м шаге по времени:

$$\Delta\delta\eta_k = \delta\eta_k^{tr} - \delta\eta_k^f.$$

Таким образом, в формуле (19) по аналогии с (12) вычисляется матрица кроссковариаций ошибок концентрации и поправочного множителя эмиссии.

В численных экспериментах расчеты проводились на сетке  $2,5 \times 2,5^\circ$  по горизонтали и 15 уровням по вертикали, шаг по времени  $\Delta t = 15$  мин. Были использованы данные объективного анализа Гидрометеоцентра России о полях скорости ветра, температуры и давления за 1–3 августа 2002 г. и модельное распределение концентрации метана за август [15]. Расчеты проводились на 2 сут с усвоением каждые 12 ч, при этом данные наблюдений моделировались по формуле (5). Были использованы данные об орографии, размещенные на сайте [16]. Данные об эмиссии взяты из [17].

Для оценки параметра, характеризующего взаимодействие атмосферы с подстилающей поверхностью, в описании нижнего граничного условия для модели переноса и диффузии примеси нами был использован расчетный модуль параметризации приземного слоя, предоставленный В.А. Шлычковым.

На рис. 1, *a* представлены результаты первого численного эксперимента.

На рис. 1, *a* приведена относительная ошибка концентрации, полученной в процессе усвоения данных с помощью субоптимального алгоритма фильтра Калмана. Оценка поля эмиссии производится в процессе усвоения данных по формуле (12). «Истинное» значение эмиссии задается постоянным на каждом шаге по времени в каждой точке сетки на двух нижних уровнях по вертикали. По оси абсцисс отложены шаги по времени. На рис. 1, *b* приведена среднеквадратическая ошибка оценки эмиссии. Расчеты рис. 1 получены в результате первого численного эксперимента.

На рис. 2 представлены результаты второго численного эксперимента. На рис. 2, *a* приведена среднеквадратическая ошибка оценки концентрации, полученная при проведении эксперимента. На рис. 2, *b* показано изменение со временем среднеквадратической ошибки оценки эмиссии в эксперименте 2.

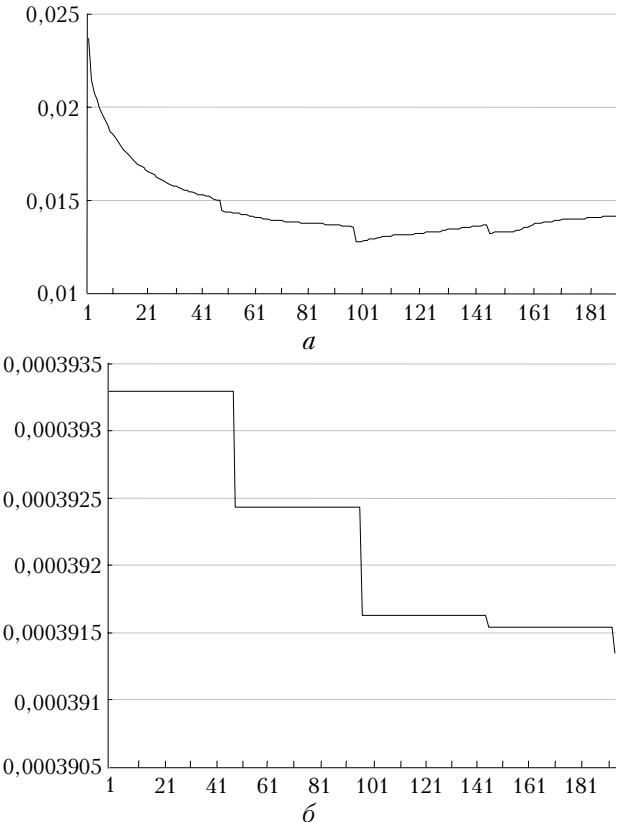


Рис. 1. Среднеквадратическая ошибка оценки концентрации метана, ppm (*a*) и эмиссии, ppm (*b*). Эксперимент 1

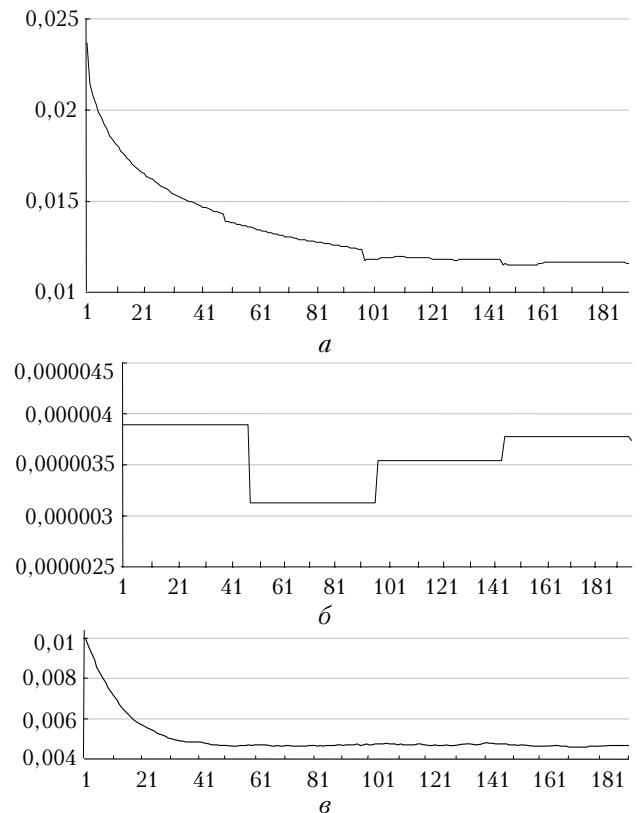


Рис. 2. Среднеквадратическая ошибка оценки концентрации, ppm (*a*), эмиссии, ppm (*b*), эксперимент 2, и поправочного множителя (*c*)

Рис. 2, в отражает поведение во времени среднеквадратической ошибки оценки поправочного множителя модели эмиссии.

Из рис. 2, б видно общее уменьшение среднеквадратической ошибки оценки эмиссии. Небольшие увеличения оценки после второго, третьего усвоений обусловлены колебаниями поправочного множителя.

Следует отметить, что общий уровень ошибки поля концентрации ниже во втором эксперименте, значение эмиссии ближе к «истине» в эксперименте 2.

## Заключение

Проведенные численные эксперименты позволяют сделать вывод о возможности осуществления оценки параметров модели, таких как эмиссия, в процедуре усвоения данных.

Работа поддержана грантом РФФИ № 04-05-64481.

1. Климова Е.Г. Упрощенные модели для расчета ковариационных матриц в алгоритме фильтра Калмана // Метеорол. и гидрол. 2000. № 6. С. 18–30.
2. Климова Е.Г. Численные эксперименты по усвоению метеорологических данных с помощью субоптимального фильтра Калмана // Метеорол. и гидрол. 2003. № 10. С. 54–67.
3. Климова Е.Г., Киланова Н.В. Усвоение данных наблюдений в задаче переноса и диффузии пассивной примеси // География и природные ресурсы. 2004. Спец. выпуск: Тр. Междунар. конф. ENVIRONIS-2004. Новосибирск, 2004. С. 175–180.
4. Todling R., Cohn S. Suboptimal schemes for atmospheric data assimilation based on the Kalman filter // Mon. Weather. Rev. 1996. V. 124. P. 2530–2557.
5. Сонечкин Д.М. Динамико-стохастический подход к задаче объективного анализа данных разнородных метео-

рологических наблюдений // Тр. Гидрометцентра СССР. 1976. Вып. 181. С. 54–76.

6. Марчук Г.И., Алоян А.Е. Глобальный перенос примеси в атмосфере // Изв. РАН. Физ. атмосф. и океана. 1995. Т. 31. № 5. С. 597–606.
7. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982. 319 с.
8. Bermejo R., Staniforth A. The conversion of semi-Lagrangian advection scheme to quasi-monotone scheme // Mon. Weather. Rev. 1992. V. 120. P. 2622–2632.
9. Jazwinski A.H. Stochastic processes and filtering theory. New York: Academic Press, 1970. 377 p.
10. Ghil M., Malanotte-Rizzoli P. Data assimilation in meteorology and oceanography // Advances in Geophysics. 1991. V. 33. P. 141–266.
11. Menard R., Cohn S.E., Chang L.-P., Lyster P.M. Assimilation of stratospheric chemical tracer observations using a Kalman filter. Part 1: Formulation // Mon. Weather. Rev. 2000. V. 128. P. 2654–2671.
12. Menard R., Chang L.-P. Assimilation of stratospheric chemical tracer observations using a Kalman filter. Part 2:  $\chi^2$ -validated results and analysis of variance and correlation dynamics // Mon. Weather. Rev. 2000. V. 128. P. 2672–2686.
13. Климова Е.Г. Модель для расчета ковариаций ошибок прогноза в алгоритме фильтра Калмана, основанная на полных уравнениях // Метеорол. и гидрол. 2001. № 11. С. 11–21.
14. Heemink A.W., Segers A.J. Modeling and prediction of environmental data in space time using Kalman filtering // Stochastic Environ. Res. and Risk Assessment. 2002. V. 16. P. 225–240.
15. Крупчников В.Н., Крылова А.И. Численное моделирование распределения метана по данным наблюдений на поверхности Земли // Оптика атмосф. и океана. 2000. Т. 13. № 6–7. С. 622–626.
16. <http://www.ngdc.noaa.gov/mgg/topo/topo.html>
17. Boden T.A., Kaiser D.P., Sepanski R.J., Stoss F.W. Trends'93: A Compendium of Data on Global Change. Tennessee, 1994. 1012 p.

### *E.G. Klimova, N.V. Kilanova. Numerical experiments on estimation of methane emission from the data assimilation system of the passive pollution in the Northern hemisphere atmosphere.*

The method of the data assimilation in the problem of estimation of concentration and emission of a passive pollution is offered. The forecast of change of concentration fields of pollution in time is given with the help of semi-Lagrangian model of a passive pollution advection for Northern hemisphere. The algorithm of the data assimilation used is based on the Kalman filter theory. The calculation of covariance matrixes is based on the assumption about ergodicity of considered random error fields. In this case probabilistic averaging is replaced with averaging on time.

Results of numerical experiments with the modeled data on concentration of methane are given. The efficiency of offered approaches to the data assimilation problem is presented.