

Постановка и обработка ансамблевых численных экспериментов с моделями Земной системы

А.В. Елисеев

Физический факультет Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова

Институт физики атмосферы им. А.М Обухова РАН

План

Мотивация

Источники неопределённости модельных прогнозов

Методы построения ансамблевых численных экспериментов

Методы обработки ансамблевых численных экспериментов

«Подводные камни»

Примеры ансамблевых расчётов

Выводы

План

Мотивация

Источники неопределённости модельных прогнозов

Методы построения ансамблевых численных экспериментов

Методы обработки ансамблевых численных экспериментов

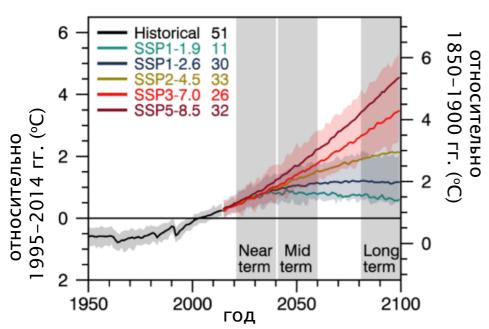
«Подводные камни»

Примеры ансамблевых расчётов

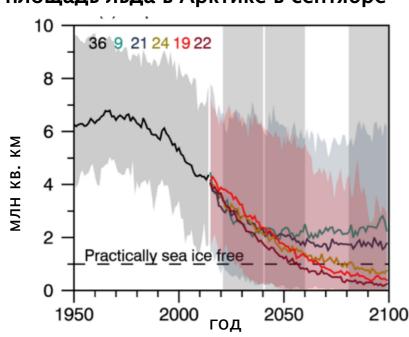
Выводы

Мотивация: межмодельный разброс в оценках изменения климата в XXI веке (ОД6 РГ МГЭИК)

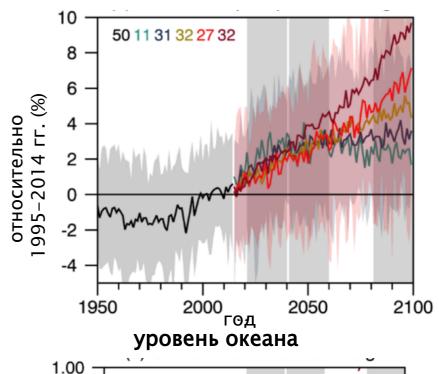
изменение приземной температуры

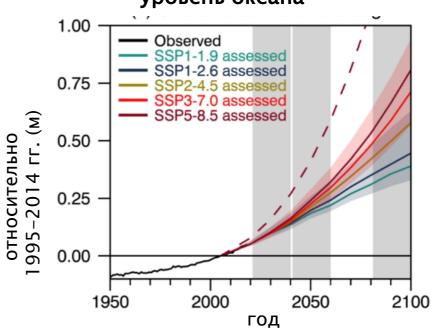


площадь льда в Арктике в сентябре



количество осадков над сушей





Таким образом,

- Современные модели характеризуются заметным разбросом в оценках будущих изменениях климата даже при заданном сценарии внешнего воздействия на Земную климатическую систему.
- Предполагая взаиную независимость ошибок отдельных моделей, можно объединить эти модели (или отдельные расчёты с одной и той же моделью) в статистический ансамбль. При этом отдельные модели или расчёты реализации внутри этого ансамбля.

Мотивация: среднеквадратичная ошибка для среднего по ансамблю лучше согласуется с наблюдениями даже по сравнению с "лучшей" моделью [Reichler, Kim, 2008]



«Хор не фальшивит...»

'... статистический ансамбль состояний системы атмосфера-океан-деятельный слой суши в интервал времени длиной в несколько десятилетий называется климатом'
[Монин, 1986]

Ансамблевый подход согласуется с таким определением климата

План

Мотивация

Источники неопределённости модельных прогнозов

Методы построения ансамблевых численных экспериментов

Методы обработки ансамблевых численных экспериментов

«Подводные камни»

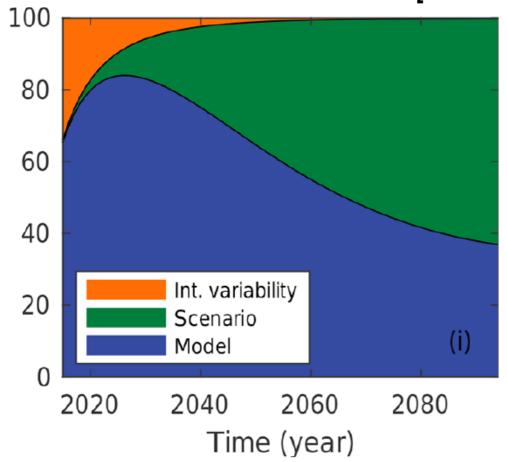
Примеры ансамблевых расчётов

Выводы

- Естественная изменчивость климата (задание начальных условий).
- Неопределённость сценариев внешних воздействий.
- Неточность значений управляющих параметров модели. пеопре
- Структурная неопределённость модели.

у неопределённость моделей

Вклад в неопределённость оценок изменения климата XXI века, CMIP6 [Lehner et al., 2020]



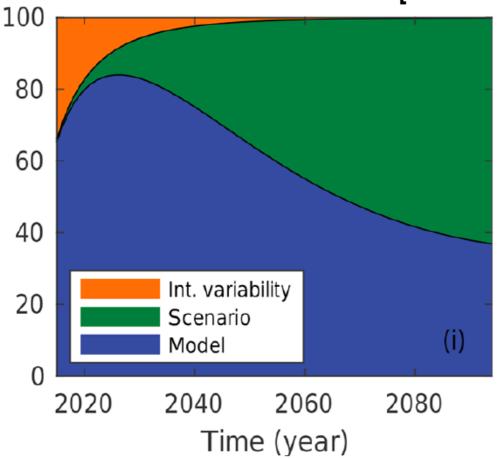
случайная составляющая

детерминированная составляющая

- Естественная изменчивость климата (задание начальных условий).
- Неопределенность сценариев внешних воздействии.
- Неточность значений управляющих параметров модели.
- Структурная неопределённость модели.

неопределённость моделей

Вклад в неопределённость оценок изменения климата XXI века, CMIP6 [Lehner et al., 2020]



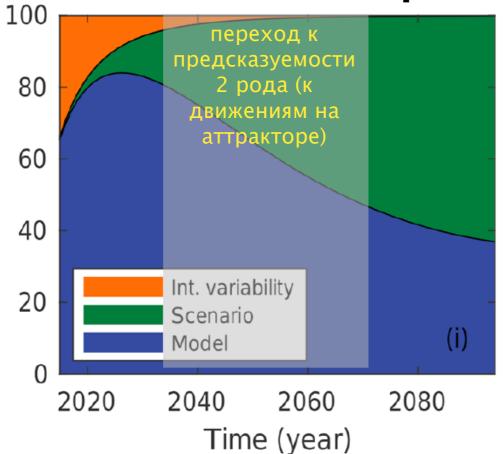
случайная составляющая

детерминированная составляющая

- Естественная изменчивость климата (задание начальных условий).
- Неопределенность сценариев внешних воздеиствии.
- Неточность значений управляющих параметров модели.
- Структурная неопределённость модели.

неопределённость моделей

Вклад в неопределённость оценок изменения климата XXI века, CMIP6 [Lehner et al., 2020]



случайная составляющая

детерминированная составляющая

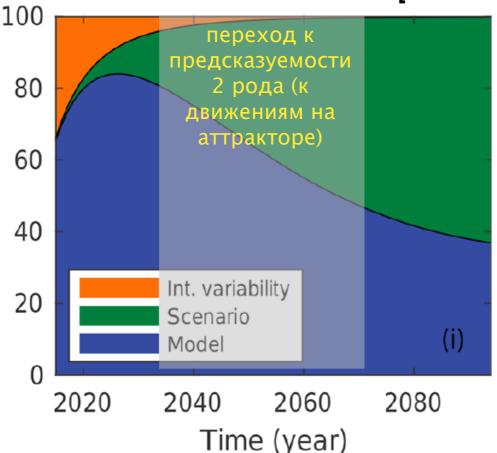
– Естественная изменчивость климата (задание начальных условий).



- Неопределенность сценариев внешних воздеиствии.
- Неточность значений управляющих параметров модели.
- Структурная неопределённость модели.

неопределённость моделей

Вклад в неопределённость оценок изменения климата XXI века, CMIP6 [Lehner et al., 2020]



При выделении для каждой модели для переменного Y среднего по ансамблю E(Y) и отклонения от него Y':

$$Y(t) = E(Y)(t) + Y'(t)$$

$$E(Y')(t) \approx 0$$

E(Y)(t) – детерминированный вынужденный сигнал Y'(t) – естественная изменчивость (но E(Y')(t) = 0 только при бесконечно большом ансамбле и бесконечно длинных вычислениях)

Структура аттрактора зависит от внешних условий

План

Мотивация

Источники неопределённости модельных прогнозов

Методы построения ансамблевых численных экспериментов

Методы обработки ансамблевых численных экспериментов

«Подводные камни»

Примеры ансамблевых расчётов

Выводы

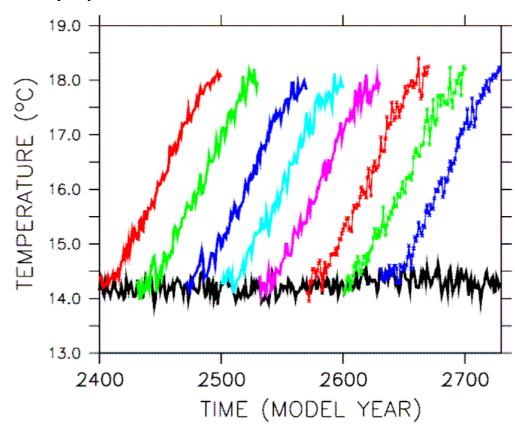
Построение ансамблевых климатических оценок 1. Естественная изменчивость климата (1)

Выбор начальных условий интегрирования; должны быть согласованы как с динамикой модели, так и со знаниями о соответствующем временном периоде.

Как правило, выбираются случайным образом из равновесного численного эксперимента с граничными условиями, соответствующими началу интегрирования

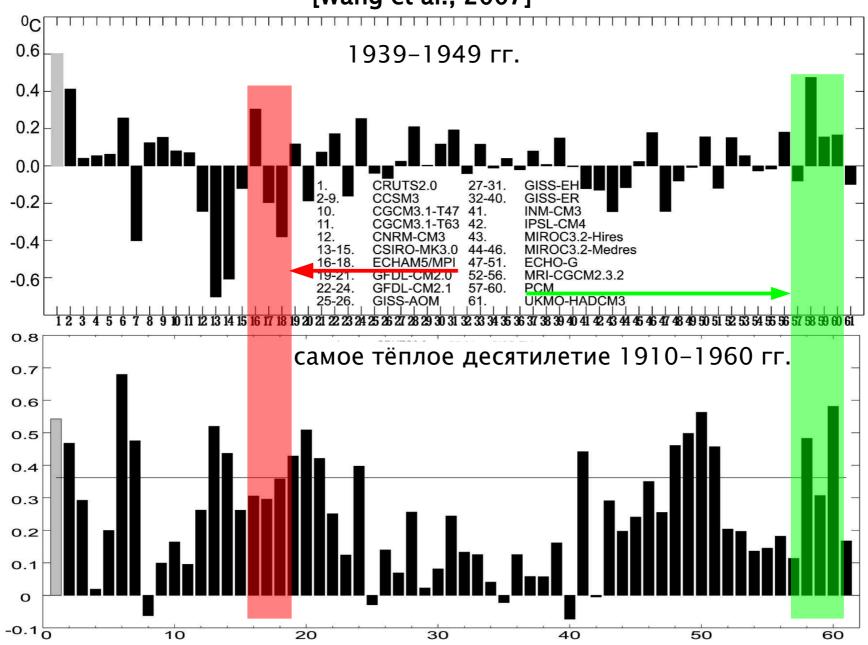
(СМІР5/6 – доиндустриальный контрольный расчёт, условия 1850 г.)

Постановка ансамблевого численного эксперимента с КСМ с разными начальными условиями [Park et al., 2009]



Построение ансамблевых климатических оценок 1. Естественная изменчивость климата (2)

Воспроизведение аномалий температуры над сушей 60-90°с.ш., СМІРЗ [Wang et al., 2007]



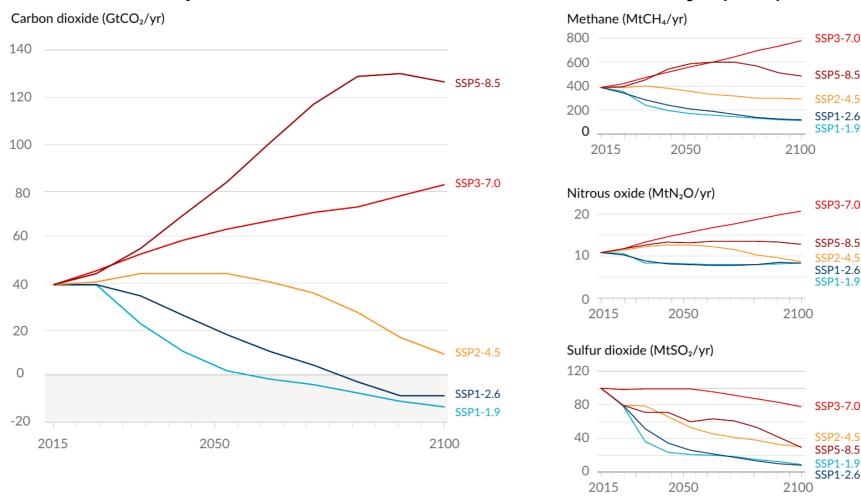
Построение ансамблевых расчётов.

2. Неопределённость сценариев внешних воздействий

Расчёты с различными сценариями.

Вероятность реализации каждого из сценариев неизвестна

Сценарии СМІР6 - Shared Socioeconomic Pathways (SSP)

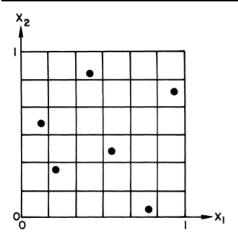


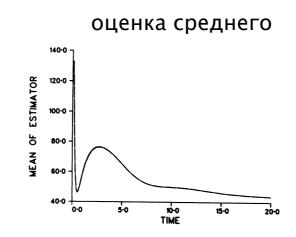
Построение ансамблевых климатических оценок. 3. Параметрическая неопределённость

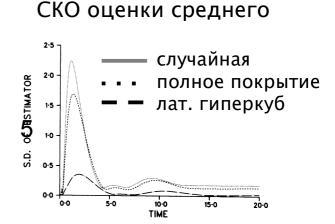
Ансамбли с различными значениями параметров

Выборки по разным параметрам должны быть взаимно некоррелированны

- <u>Латинский гиперкуб</u> [MacKay et al., 1979; Stein, 1987]







– <u>Метод Монте-Карло</u>

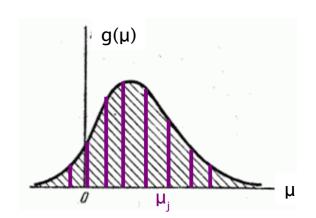
Для параметра μ с ФРВ $g(\mu)$ строится выборка $\mu_1, \mu_2, ..., \mu_{Nmem}$

Для любой переменной f стастистика

$$E(f)=\int_0^1 f \ g(\mu) \ d\mu=\Sigma_j \ f_j \ w_j,$$
 w_j – вероятность $\mu\in [\ \mu_{j-1},\ \mu_j]$

+ : гибкость и вычислительная эффективность

- : требует знания ФРВ



Построение ансамблевых климатических оценок. 4. Структурная неопределённость

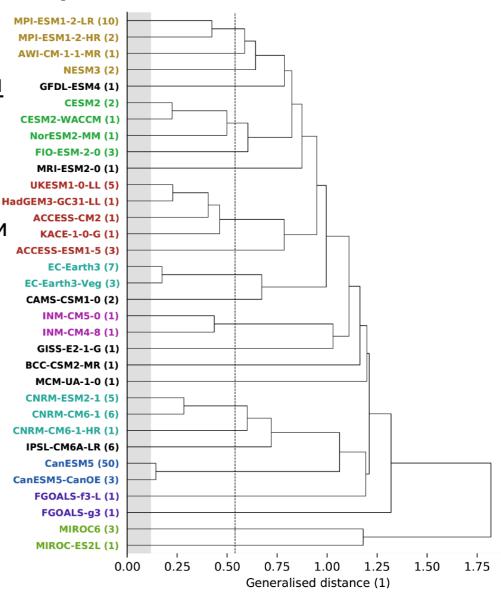
– Эксперименты с различными моделями при идентичных условиях (CMIP5/6 – ensemble of oppportunity):

+: Строгая (но неполная) оценка структурной неопределённости

-: Взаимная корреляция между моделями (копирование кода, настройка по идентичным данным); Нельзя быть уверенным в полном заполнении фазового пространства

– <u>Эксперименты с различными версиями</u> одной и той же модели:

- +: Простота интерпретации
- -: Ещё меньшая уверенность в полноте заполнения фазового пространства.



Статистическое "генетическое" древо моделей CMIP6 [Brunner et al., 2020]

План

Мотивация

Источники неопределённости модельных прогнозов

Методы построения ансамблевых численных экспериментов

Методы обработки ансамблевых численных экспериментов

«Подводные камни»

Примеры ансамблевых расчётов

Выводы

Построение ансамблевых климатических оценок. 4. Размер ансамбля

Построение ансамблевых климатических оценок. 4. Размер ансамбля

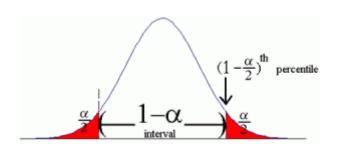
Размер ансамбля для разных начальных условий и переменной с нормальным распределением [Wehner, 2000]: не менее чем

$$n = \frac{Z_{\alpha}^2 \sigma^2}{E^2}$$

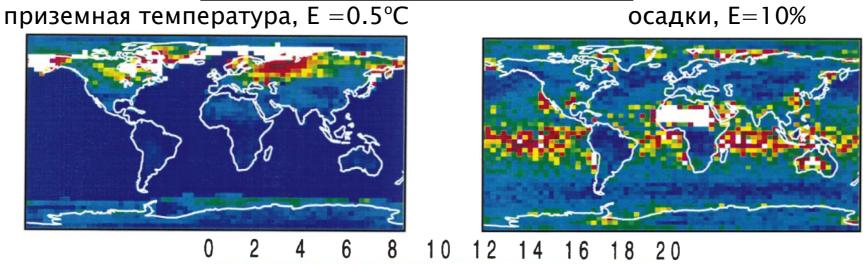
 Z_{α} – площадь под (1- α)-"хвостом" ФРВ

 σ^2 – СКО переменной

Е - допустимая ошибка



Минимальный размер ансамбля для средних за декабрь-февраль 1979-1988 гг. (LLNL GCM, эксперименты с предписанной ТПО) [Wehner, 2000]



Обработка ансамблевых численных экспериментов

- Реалистичность отдельных реализаций в ансамбле
- Статистическая обработка результатов

Обработка ансамблевых численных экспериментов

- Реалистичность отдельных реализаций в ансамбле
- Статистическая обработка результатов

Ансамблевое осреднение

Для любой переменной Y обусловленная данными D ансамблевая статистика

- среднее

$$E(Y \mid D) = \sum Y_k W_k,$$

- ансамблевое (межмодельное) среднеквадратическое отклонение (СКО)

$$\sigma(Y \mid D) = \{ \Sigma [\sigma_k^2 + Y_k^2] w_k - E(Y \mid D)^2 \}^{1/2},$$

где Y_k – значение Y для реализации M_k , σ_k – межгодовое СКО для реализации M_k , $k\!=\!1,\!2,\!...,\!N_{mem}$.

Обработка ансамблевых численных экспериментов

- Реалистичность отдельных реализаций в ансамбле
- Статистическая обработка результатов

Ансамблевое осреднение

Для любой переменной Y обусловленная данными D ансамблевая статистика

- среднее

$$E(\ Y \mid D\) = \Sigma\ Y_k w_k,$$
 характеристика качества модели

ансамблевое (межмодельное) среднеквадратическое отклонение (СКО)

$$\sigma(Y \mid D) = \{ \Sigma [\sigma_k^2 + Y_k^2] w_k - E(Y \mid D)^2 \}^{1/2},$$

где Y_k – значение Y для реализации M_k , σ_k – межгодовое СКО для реализации M_k , $k\!=\!1,2,...,N_{mem}$.

Обработка ансамблевых численных экспериментов: веса

$$\Sigma_k w_k = 1$$

– Обычное среднее:

$$\mathbf{w}_{k} = 1 / \mathbf{N}_{mem}$$
.

Все модели считаются одинаково достоверными

- Оптимальные веса:

$$W_k \Rightarrow min RMS(Y_k; D)$$

Минимизируется RMS отклонения от данных наблюдений (включая влияние начальных условий)

- **Байесово среднее** [Hoeting et al., 1999; Leroy, 1998]:

$$W_k \sim P(M_k \mid D)$$

Максимизируется вероятность «правильности» модели в сравнении с эталонными данными

Характеристики для вычисления байесовых весов

Современное состояние:

- +: Правильные начальные условия для будущих изменений. Доступность данных.
- -: Лучшее воспроизведение современного состояния не гарантирует корректности отклика при внешнем воздействии.

Характеристики современной изменчивости:

- +: Учёт естественной изменчивости. Относительная доступность данных (тем меньше, чем больший временной масштаб исследуется).
- -: Нет прямой связи между воспроизведением изменчивости и корректностью отклика при внешнем воздействии.

Коэффициенты тренда для современного периода:

- +: Учёт отклика на воздействие. Относительная доступность данных.
- -: Необходимы предположения о доли отклика на воздействие в общем сигнале и о линейности отклика в будущем.

Изменения климата в палеоэпохи:

- +: Учёт внешних воздействий.
- -: Низкое качество данных о воздействиях и об отклике. Возможная зависимость коэффициента чувствительности от состояния.

Согласие между моделями [Tebaldi et al., 2004, 2005]:

- +: Легкость использования.
- -: Неучёт систематических ошибок, общих для всего ансамбля

Взаимная зависимость между моделями:

- +: Коррекция размера ансамбля на зависимость между моделями.
- -: Возможно ухудшение ансамблевой статистики в из-за подавления сигнала от моделей, хорошо согласуббщися с наблюдениями (и друг с другом).

Интерпретация неопределённости

Частотная (прогноз погоды и прогноз вплоть до декадного):

Байесовая (вековой и более длительный масштаб):

Прямое сравнение с наблюдениями затруднено или невозможно.

Мера неопределённости современных знаний

Связь с информационной энтропией

Информационная энтропия:

$$H = - \sum_{k} p_{k} \log_{2} p_{k}$$

 p_k – вероятность системы быть в состоянии 'k' (или вероятность реализации модели M_k или соответствующим образом пронумерованного расчёта)

1.
$$p_{k0} = 1$$
, $p_k = 0$ if $k \neq k_0$
2. $p_k \equiv 1/N_{mem}$

$$H = H_{min} = 0$$

$$H = H_{max} = log_2 N_{mem}$$

Для байесовской интерпретации вероятности

$$\int_{k}^{\infty} w_{k}.$$

Нормированная информационная энтропия

$$h = H / H_{max}$$

(указывает насколько "полезно" байесово взвешивание)

План

Мотивация

Источники неопределённости модельных прогнозов

Методы построения ансамблевых численных экспериментов

Методы обработки ансамблевых численных экспериментов

«Подводные камни»

Примеры ансамблевых расчётов

Выводы

Осреднение со взвешиванием. Математика [Weigel et al., 2010] (1)

Будущее изменение х:

$$\Delta x = \Delta \mu + \nu_{x}$$

 $\Delta \mu$ – вынужденный (потенциально предсказуемый) сигнал, $\nu_{_{\chi}}$ – естественная изменчивость.

Для модели М:

$$\Delta y_{M} = \Delta \mu + v_{M} + \epsilon_{M}$$

 $\epsilon_{\rm M}$ – систематическая ошибка (bias; ошибка, которая не исчезает при бесконечном удлинении ряда).

Предположения:

- 1. $E(v_{\downarrow}) = E(v_{M}) = E(\epsilon_{M}) = 0$.
- 2. V_x , V_M и ϵ_M статистически независимы.
- 3. v_x and v_M реализации одного и того же стохастического процесса с СКО σ_v .

Метрика качества модели:

$$S_{M} = \langle (\Delta y_{M} - \Delta x)^{2} \rangle$$
.

Вне зависимости от типа взвешивания можно показать, что при $N_{_{mem}} \to \infty$

$$\Delta y_M \rightarrow \Delta \mu$$

 $S_m \rightarrow \sigma_v^2$.

Осреднение со взвешиванием. Математика [Weigel et al., 2010] (2)

Пусть
$$N_{mem} = 2$$

Осреднение с однородным

взвешиванием (
$$w = 1 / N_{mem} = 1/2$$
):

$$\Delta y^{\text{(eq)}} = \Delta x + (\epsilon_{M1} + \epsilon_{M2}) / 2,$$

$$S^{\text{(eq)}} = \sigma_{\text{M1}}^{2} \; (\; 1 \; + \; r^{2} \;) \; / \; 4. \label{eq:Seq}$$

$$r = \sigma_{M2} / \sigma_{M1}$$

Если
$$0 < r < 1$$
, то $S^{(eq)} < (S_1 + S_2) / 2$.

Если
$$r > 3^{-1/2}$$
, то $S^{(eq)} < S_1$, S_2 .

Осреднение с "оптимальными" весами:

$$\Delta y(w) = w \Delta y_1 + (1 - w) \Delta y_2.$$

Beca оптимальны ($S^{(w)} = min$) при

$$w = w^{(opt)} = r^2 / (1 + r^2),$$

Если $r \rightarrow 1$, то $w^{(opt)} \rightarrow \frac{1}{2}$.

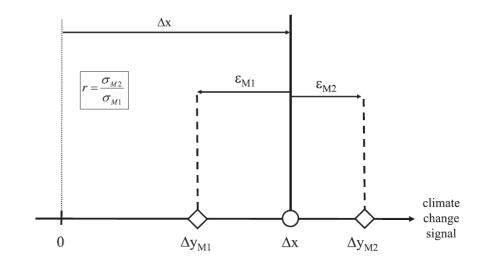
И

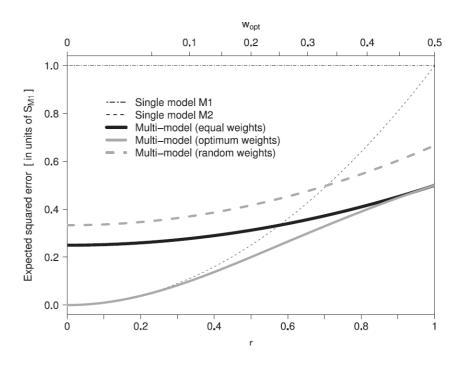
$$S^{(opt)} = \sigma_{_{\!M\, 1}}^{ 2}\,r^2$$
 / ($1\,+\,r^2$) \leq $S^{(eq)}.$

(равенство только при r = 1).

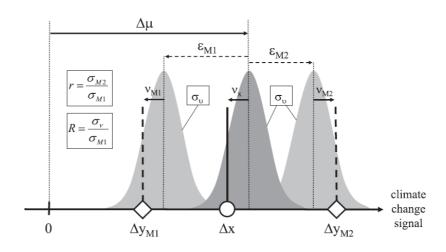
Осреднение со случайными весами:

$$\overline{S^{(rand)}} = \int_0^1 S^{(w)} dw = \sigma_{M1}^2 (1 + r^2) / 3 \ge S^{(eq)}$$
.





Осреднение со взвешиванием. Математика [Weigel et al., 2010] (3). Влияние естественной изменчивости



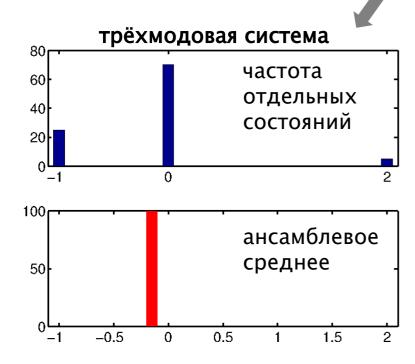
$$\mathbf{w}^{(\text{opt})} = (\mathbf{r}^2 + \mathbf{R}^2) / (\mathbf{1} + \mathbf{r}^2 + \mathbf{R}^2).$$

Если R
$$>>$$
 r, R $>>$ 1, то
$$\label{eq:work} \mathbf{w}^{(\text{opt})} = \mathbf{1},$$

и веса сильно неоптимальны – см. пример при r=1.

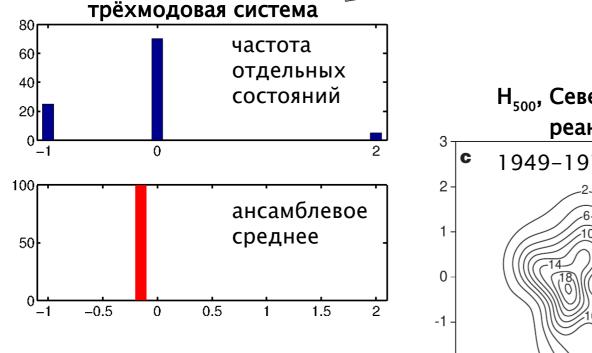
Ансамблевое осреднение дискретных состояний

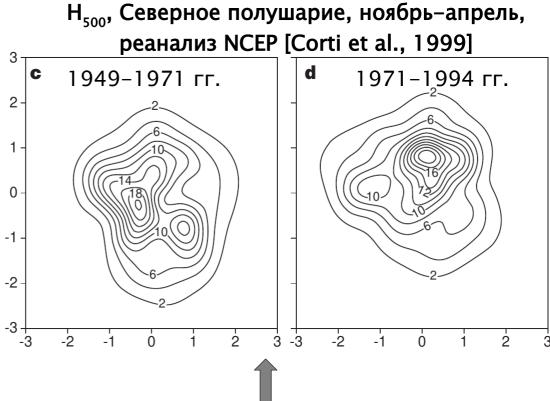
Для систем с дискретными состояниями и быстрыми переходами между ними ансамблевое осреднение может привести к состоянию, которое несовместимо с динамикой системы



Ансамблевое осреднение дискретных состояний

Для систем с дискретными состояниями и быстрыми переходами между ними ансамблевое осреднение может привести к состоянию, которое несовместимо с динамикой системы





Возможно, что атмосфера – пример такой системы

План

Мотивация

Источники неопределённости модельных прогнозов

Методы построения ансамблевых численных экспериментов

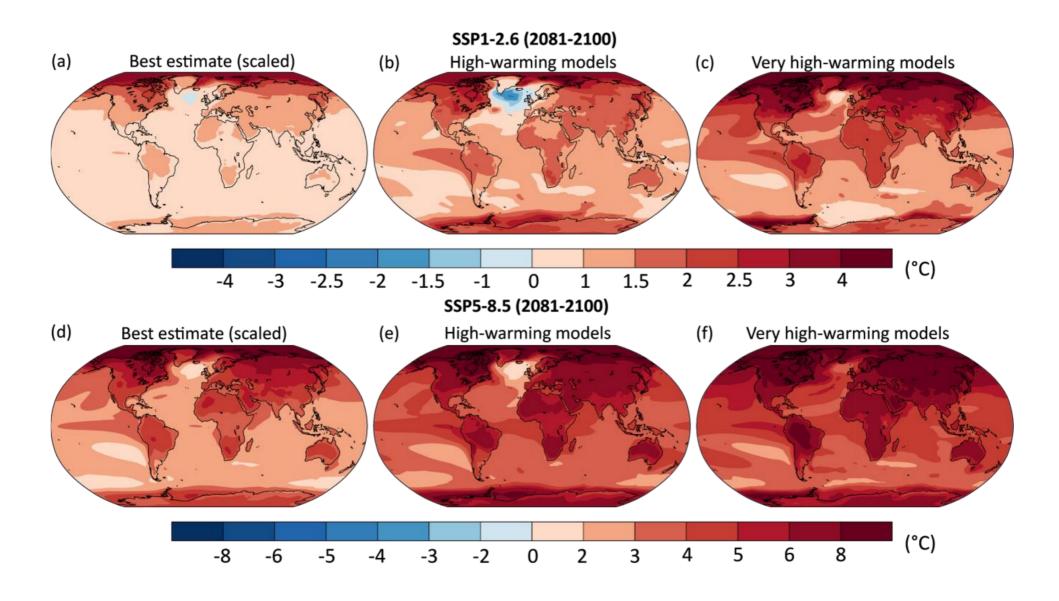
Методы обработки ансамблевых численных экспериментов

«Подводные камни»

Примеры ансамблевых расчётов

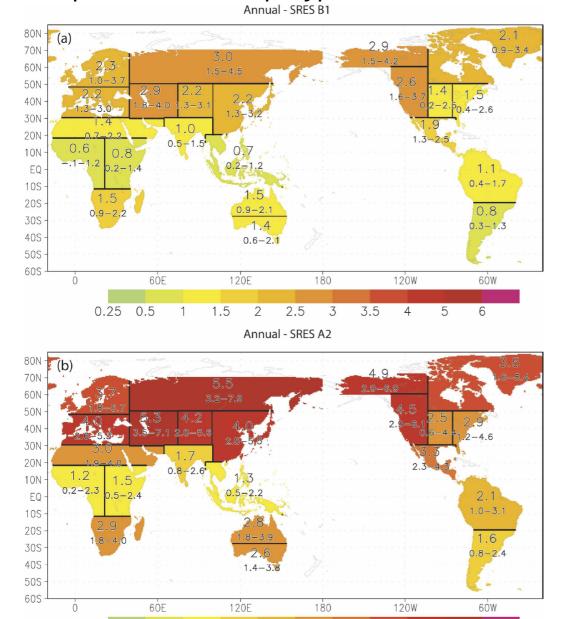
Выводы

СМІР6: "вилка" возможных последствий [ОД6 РГ1 МГЭИК]



Вероятностный прогноз изменений климата [Greene et al., 2006]

Приземная температура в 2079-2098 гг. относительно 1979-1998 гг.



1.5

2.5

3.5

Ансамбль СМІРЗ (14 МОЦ)

Веса: воспроизведение современного состояния (1979–1998 гг.) в зависимости от региона

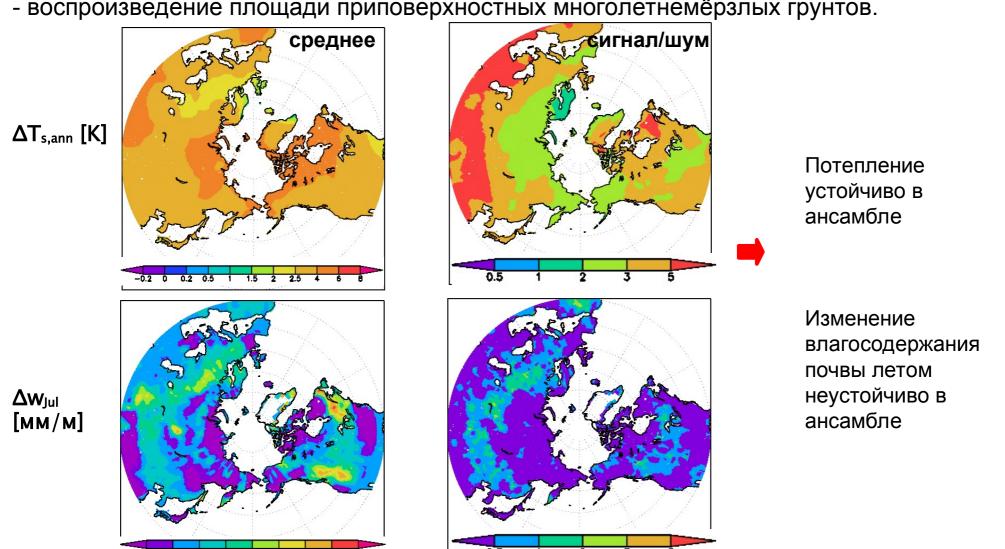
Указаны ансамблевые средние и ансамблевые доверительные интервалы

Изменения климата средних и субполярных широт суши Северного полушария в XXI веке при сценарии SRES A1B [Arzhanov et al., 2011]

Ансамбль СМІРЗ (10 моделей)

Вычисление весов:

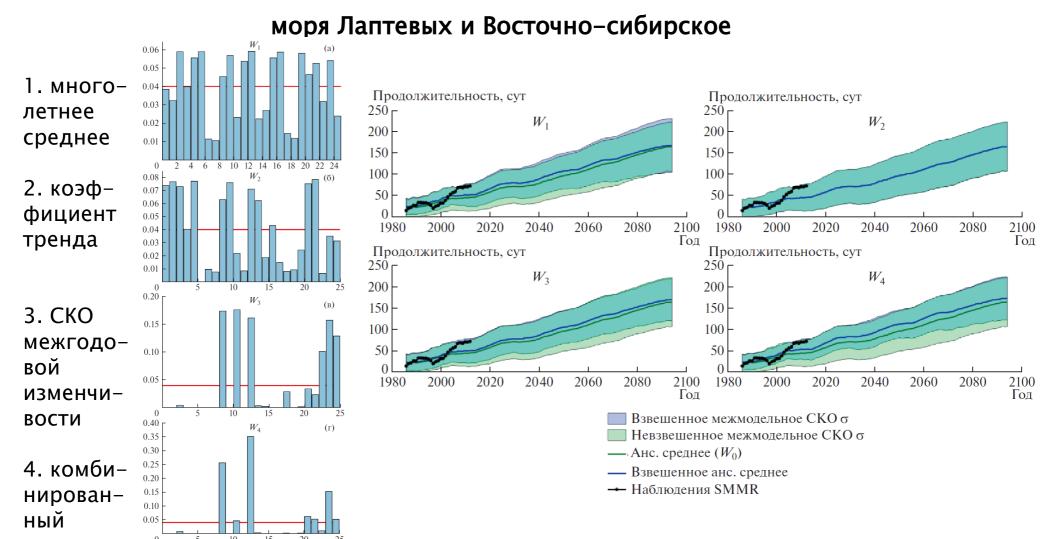
- воспроизведение современной приземной среднегодовой температуры над сушей СП,
- воспроизведение тренда этой температуры в указанных регионах в XX веке,
- воспроизведение площади приповерхностных многолетнемёрзлых грунтов.



Длительность навигации на Северном морском пути [Парфенова и др., 2023]

Ансамбль CMIP5, сценарий RCP8.5 Вычисление весов (по сравнению со спутниковыми данными):

- современная длительность,
- коэффициент тренда длительности для 1980-2018 гг.
- СКО межгодовой изменчивости длительности за тот же период.



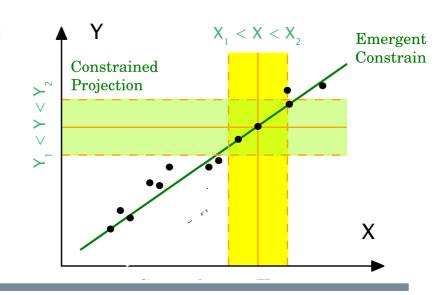
Обобщённые (межмодельные) связи (emergent constraints) (1)

Связь между наблюдаемой X и ненаблюдаемой переменной Y вида

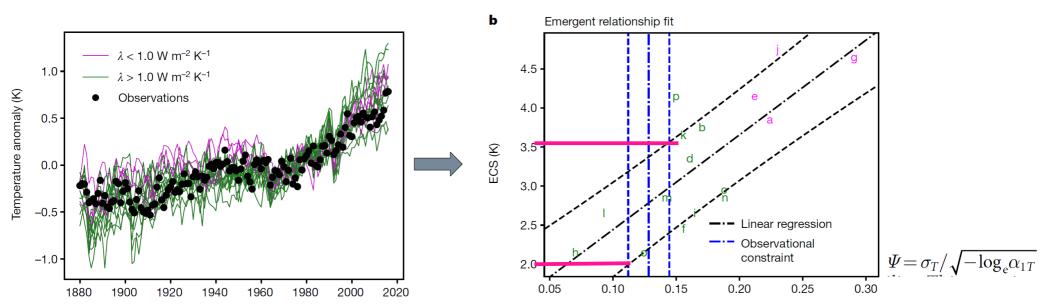
$$Y = f(X) + \epsilon$$

f(X) – межмодельная связь, ∈ – шум

Year



[Cox et al., 2018]



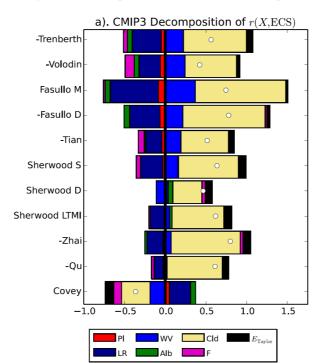
 σ_{T} – СКО температуры после исключения тренда α_{1T} – коэффициент автокорреляции с лагом 1 после исключения тренда

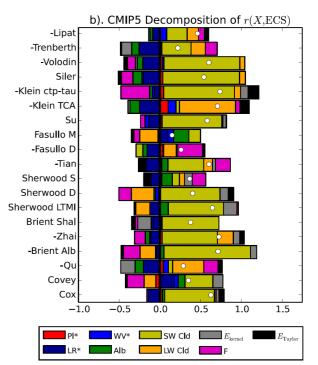
Обобщённые (межмодельные) связи (emergent constraints) (2) [Caldwell et al., 2018]

Covey	Amplitude of seasonal cycle of surface temperature	
Volodin	Difference between tropical and Southern Hemisphere midlatitude total cloud fraction	
Trenberth	Net TOA radiation averaged over the Southern Hemisphere	
Fasullo D	Southern Hemisphere zonal-average midtropospheric RH in the dry zone between 8.5° and 20°S	
Fasullo M	Tropical zonal-average lower-tropospheric RH in moist-convective region	
Qu	BL cloud amount response to SST variations in subtropical stratocumulus regions (after removing EIS contribution)	
Klein ctp-tau	Error in the distribution of cloud-top pressure and optical thickness for regions between 60°N/S	
Klein TCA	Error in total cloud amount for regions between 60°N/S	
Su	Error in vertically resolved tropospheric zonal-average RH between 40°N and 45°S	
Sherwood D	Strength of resolved-scale mixing between BL and lower troposphere in the tropical east Pacific and Atlantic	
Sherwood S	Strength of mixing between BL and lower troposphere in tropical convective regions	
Sherwood LTMI	Sum of Sherwood S and D constraints	
Brient Shal	Fraction of tropical clouds with tops below 850 mb whose tops are also below 950 mb	
Zhai	Seasonal response of BL cloud amount to SST variations in oceanic subsidence regions between	
	20° and 40° latitude	
Tian	Strength of double-ITCZ bias	
Brient Alb	Sensitivity of cloud albedo in tropical oceanic low-cloud regions to present-day SST variations	
Lipat	Latitude of the southern edge of the Hadley cell in austral summer	
Siler	Extent to which cloud albedo is small in warm SST regions and large in cold SST regions	
Cox	Strength of global-average surface temperature variations and temporal autocorrelation	

Из 19 обощённых связей

- для 4 наличие связи подтверждено
- для остальных выявлена либо неустойчивость относительно выбора ансамбля, либо корреляция ECS с физическим процессом или регионом, не согласующаяся с исходным объяснением





Настройка параметров модели. Методы Монте-Карло

Апостериорное распределение вероятности вектора параметров µ модели:

$$p(\mu \mid D) = L(\mu \mid D) p(\mu)$$

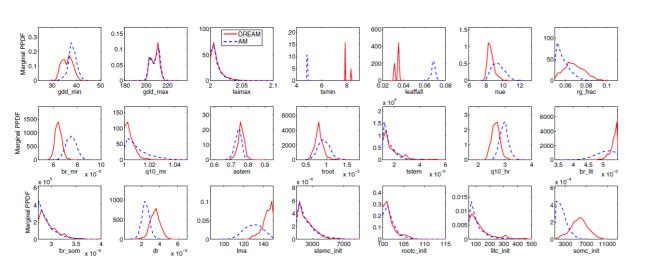
Необходим выбор функций правдоподобия L(µ | D), которые максимизируются

[Lu et al., 2017]: настройка параметров модели биогеохимии суши DALEC:

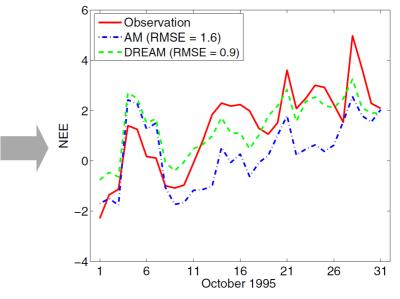
- differential evolution adaptive Metropolis (DREAM)
- adaptive Metropolis (AM) scheme

Настраивается нетто-поток CO₂ между атмосферой и сушей

Обучение: 1992-1994 гг.



Проверка: 1995 г.



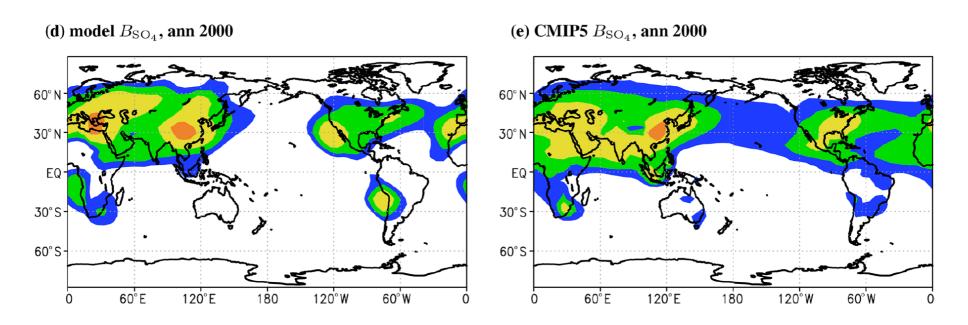
Настройка параметров модели. Байесово осреднение

– Выборка для вектора параметров **µ** модели (например, с использованием латинского гиперкуба

$$- \mu_{opt} = E(\mu \mid D)$$

[Eliseev et al., 2021]: настройка параметров модели серного цикла атмосферы:

- Отбор расчётов с качеством S, достаточно близким к маскимальному
- Ограничения на характеристики химических циклов (для исключения переобучения)
- ⇒ отобраны 40 реализаций из 5000

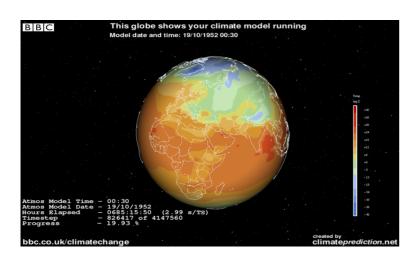


CLIMATEPREDICTION.NET [Stainforth et al., 2005] (1)

- МОЦАО HadSM3 (HadCM3+верхний слой океана).
- Каждая реализация построена случайным выбором значения 6 парамтеров моедли и начальных условий.

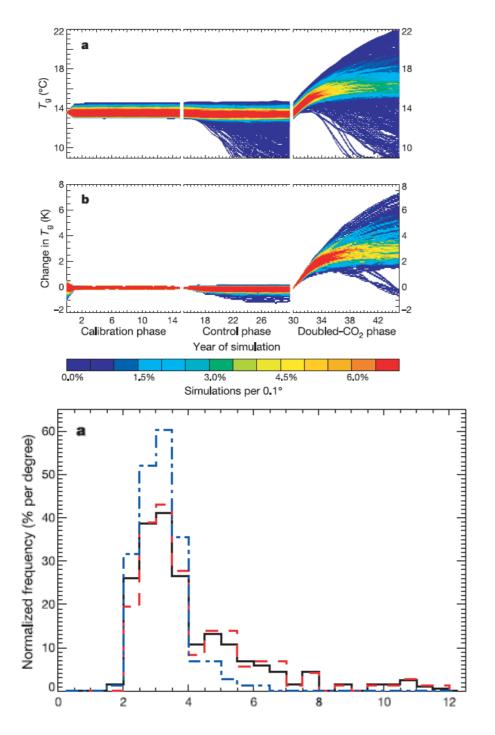
- Расчёты выполнены "облачной" технологией с использованием компьютеров отдельных пользователей-волонтёров. Experiment status

клиент climateprediction.net



Summary		
Model Years	125,112,872	
Active Hosts	37,320	
Complete Model Simulations		
HadSM3	675,066	
HadAM3	17,276	
HadAM3P	517,997	
FAMOUS	215,472	
HadCM3L	23,794	
Sulphur Cycle	14,993	
Spinup	61	
HadSM3MH	67,454	
HadRM3P	250,802	
HadAM3P-EU	121,985	
HadAM3P-SAF	72,964	
HadAM3P-P NW	55,853	
Last Updated	03-Jul-2011 05:30:03	

CLIMATEPREDICTION.NET [Stainforth et al., 2005] (2)



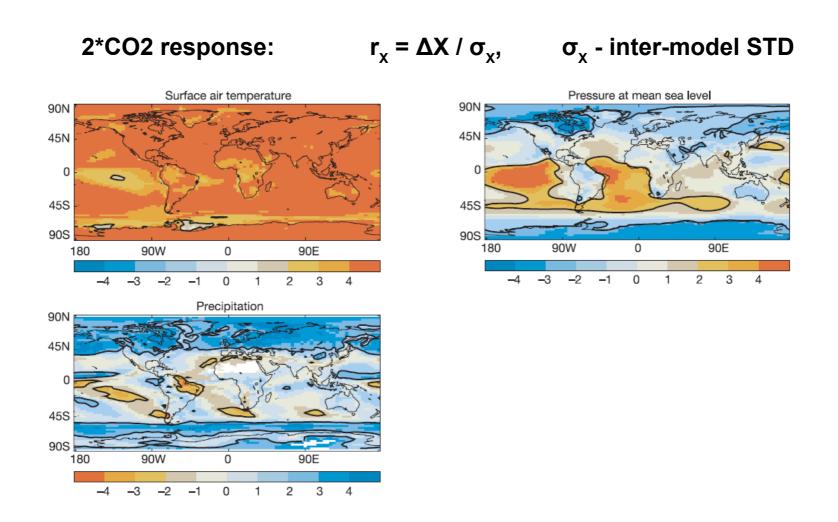
T_a (2017 расчётов)

Подобно предыдущему, но после исключения вычислительно неустойчивых расчётов и после осреднения по начальным условиям.

Апостериорное распределение ΔT_{2*CO2}

QUMP: Quantifying Uncertainty in Model Predictions [Murphy et al., 2004]

- HadSM3 GCM.
- Each member is constructed by randomly selecting values of 29 numerical parameters of the model and initial conditions for simulations.



Выводы

- Модельные ансамбли позволяют оценить неопределённость, связанную с начальными условиями, численными коэффициентами моделей, их структурой и сценариями внешних воздействий.
- Как правило, среднее по ансамблю лучше согласуется с данными наблюдений по сравнению с отдельными моделями, в том числе "лучшими".
- Постановка модельных экспериментов должна учитывать знания о распределении параметров интегрирования и приводить к несмещённой ансамблевой статистике
- Эффективность методов статистической обработки ансамблевых численных экспериментов может быть повышена за счёт выбора веса (правдоподобия) для каждой из реализаций внутри ансамбля. Однако при выборе веса всегда в той или иной мере приходится руководствоваться эвристическими соображениями. В ряде случаев (например, при анализе отклика на различные сценарии внешнего воздействия SSP) построение ансамблевой статистики невозможно
- Ансамблевые эксперименты могут быть использованы при настройке моделей