Datenassimilation
ein Überblick

Timur Olzhabaev
6204094

Seminar „Modellierung und Simulation“

Arbeitsbereich Wissenschaftliches Rechnen
Fachbereich Informatik
Fakultät für Mathematik, Informatik und Naturwissenschaften
Universität Hamburg

30. März 2013

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung

Im dieser Ausarbeitung wird im Rahmen des Seminars „Modellierung und Simulation“ die Idee der Datenassimilation erläutert und ein Überblick über den zugrundeliegenden Formalismus, die bekannten Verfahren und ihren Einsatz gegeben.

1.1 Problemstellung

1.1.1 Rahmen der Vorhersage

Vor der festlegenden Definition des Begriffs *Datenassimilation* wird eine Reihe von Problemen beschrieben, aus denen der Bedarf nach Datenassimilation entsteht. Dies ist hilfreich, um die Idee der Datenassimilation zu verstehen und die abstrakte Definition in einen Kontext einordnen zu können.

Es beginnt mit dem Wunsch, eine hilfreiche Vorhersage in einem komplexen Kontext zu treffen. Wir betrachten ein reales *System*, dessen *Zustände* möglichst genau vorhergesagt werden müssen. Zum Beispiel möchte man wissen, wie das Wetter in einem bestimmten Zeitintervall wird. Es wird also eine Wettervorhersage benötigt. Diese wird mittels einer Simulation berechnet, welche man nach der gebräuchlichen Herangehensweise implementiert. Zunächst wird das System definiert. Im Beispiel der Wettervorhersage betrachten wir die Atmosphäre als das System. Das System wird auf ein *Modell* abgebildet, welches repräsentativ die für uns wichtigen Informationen über das System tägt. Die Informationen bestehen dabei aus dem Zustandsraum des Systems und den Regeln, nach denen ein Zustand in den nächsten übergeht.

Ein Modell der Atmosphäre könnte zum Beispiel ein über den gesamten Planeten gelegtes, gleichmäßiges Gitternetz sein, dessen Gitterpunkte feste Koordinaten haben und für die Wettervorhersage relevante Informationen tragen, wie die Temperatur, Luftfeuchtigkeit, Windgeschwindigkeit und Windrichtung. Das Gitternetz repräsentiert dabei den Zustand des Systems Erde. Als Regeln für die Zustandsübergänge können die bekannten physikalischen Gesetze und empirisches Wissen verwendet werden.

Nach der *Validierung* des Modells wird basierend auf diesem eine *Simulation* implementiert und *verifiziert*. Mit Hilfe der Simulation soll nun eine Vorhersage für einen zukünftigen Zustand des Systems getroffen werden. An dieser Stelle kommt ein erstes Problem zum Vorschein: Die Simulation trägt Systemzustände und verfügt über die Regeln zum Zustandsübergang. Um eine korrekte Vorhersage für einen kommenden Zustand zu treffen, wird jedoch ein Zustand gebraucht, von dem ausgegangen wird, nämlich der aktuelle Zustand des Systems. Wir müssen wissen, wie das Wetter auf der Erde zu diesem Moment aussieht, und in der Lage sein, dieses Wissen in einen Systemzustand überzuführen, den die Simulation verarbeiten kann. **Dieses Wissen kann nur durch Beobachtungen erlangen werden**.

1.1.2 Problematik der Beobachtungen

Im Folgenden wird jede Art von Messung eines Teils des Systemzustands als *Beobachtung* bezeichnet. Eine Beobachtung kann z.B. die Messung der Temperatur an einem bestimmten Ort zu einem bestimmten Zeitpunkt auf der Erde sein. Wetterstationen sind für den Zweck passende Beobachtungsquellen. Hier werden wir uns eines weiteren Problems bewusst:

Der Zustand der Simulation wird viel mehr Informationen tragen, als Beobachtungen hinzugezogen werden können. Bei einem großen und komplexen System, wie der Erdatmosphäre sind nur stichprobenartige Messungen möglich. Es ist nicht möglich, den Beobachtungsraum so granular zu gestalten, wie eine Simulation den Systemzustand trägt. Das Gitternetz, das über der Erde liegt, besteht aus gleichmäßig verteilten Informationspunkten, welche somit auch über den Ozeanen, Gebirgen und sonstigen schwer oder überhaupt nicht zugänglichen Orten liegen. Für eine gute Vorhersage muss die Anzahl der Punkte sehr viel größer sein, als wir Beobachtungsquellen hinzuziehen können.

Weiterhin sind Beobachtungen fehlerbehaftet, da z.B. Messinstrumente gestört werden oder komplett versagen können.

Es bietet sich eine indirekte Lösung an. Dazu muss man das Problem folgerndermaßen betrachten: Es wird eine Aussage über den aktuellen Zustands des Systems benötigt und es ist nur ein geringer Umfang an Beobachtungen vorhanden. Weiterhin ist ein Modell mit Simulation vorhanden, welches Aussagen über zukünftige Systemzustände treffen kann. Macht man eine Vorhersage über den Zustand mit Hilfe der Simulation, so wird zum eingetretenen vorhergesagten Zeitpunkt eine Schätzung vorhanden sein, die als Ausgangszustand verwendet werden kann.

1.1.3 Problematik der Modelle

Im Folgenden wird der Begriff *Modell* als zusammenfassend für *Modell* und *Simulation* verwendet, weil im weiteren Kontext die Trennung nicht benötigt wird. Mit Modell bezeichnen wir neben dem Modell also auch die Simulation, die Vorhersagen über ein System trifft und auf einem Modell basiert, welches das System abbildet.

Das Hauptproblem der Modelle ist ihre Unvollständigkeit, die zu von der Realität abweichenden Vorhersagen führt und folgende Gründe haben kann:

- Es fehlt an Wissen über das System. Beispielsweise könnten die physikalischen Gesetze nicht vollständig verstanden worden sein, so dass Aussagen über mögliches Verhalten der Erdatmosphäre nicht getroffen werden können.

- Das System ist zu komplex. Es z.B. nicht möglich, das vorhandene Wissen über die physikalischen Gesetze auf die gesamte Erdatmosphäre zu skalieren, da sich dann die Physik verändert.

- Das Modell ist diskretisiert. Dies ist eine unvermeidliche Konsequenz von rechnergestützten Simulationen und führt dazu, dass die Realität nicht stetig, wie sie ist, berechnet werden kann. Zwar kann man in der Theorie beliebig fein diskretisieren, jedoch:
- Es fehlt an Rechenleistung (bzw. das System ist zu komplex). Je feiner man diskretisiert, desto mehr Rechen- und Speicheraufwand ist notwendig.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Unerfassbarkeit des Systems zu abweichenden Vorhersagen der Modelle führt.

Betrachtet man die zuvor vorgestellte Idee der Nutzung der Vorhersage als Startpunkt für die darauffolgende Vorhersage, so entsteht hier ein weiteres Problem. Da das Modell nur eine mit Fehlern behaftete Vorhersage liefert, führt das Verwenden dieser als Startpunkt für die nächste Vorhersage zu noch ungenaueren Ergebnissen im nächsten Schritt. Die Abweichungen eskalieren und in jeder Vorhersageiteration entfernt sich die Vorhersage weiter von der Realität. Um dies zu verhindern, muss in jeder Iteration der Ausgangszustand an die Realität angepasst werden. Dies lässt sich durch iteratives Hinzuziehen von Beobachtungen bewerkstelligen.

1.1.4 Idee der Datenassimilation

Es liegen nun zwei Hauptprobleme vor: Die Unvollständigkeit der Beobachtungen und die eskalierende Ungenauigkeit des Modells. Die Idee der Datenassimilation ist es nun, durch das Verwenden der Vorhersagen als Startpunkt für weitere Vorhersagen und durch das Integrieren von Beobachtungen in das Modell in jedem Vorhersageschritt beide Probleme zu lösen. Weiterhin werden bei komplexen Datenassimilationsverfahren mögliche Fehler des Modells und der Beobachtungen betrachtet und es wird versucht diese zu minimieren.

1.2 Definitionen

Im Folgenden werden zwei Definitionen aus Quellen betrachtet, die sich mit dem Thema Datenassimilation beschäftigen. Die vorliegenden Definitionen decken die Kernideen der Datenassimilation ab.

*„**Data assimilation is the process by which observations are incorporated into a computer model of a real system.** Applications of data assimilation arise in many fields of geosciences, perhaps most importantly in weather forecasting and hydrology. **Data assimilation proceeds by analysis cycles. In each analysis cycle, observations of the current (and possibly past) state of a system are combined with the results from a numerical weather prediction mode (the forecast) to produce an analysis, which is considered as 'the best' estimate of the current state of the system.** This is called the analysis step. Essentially, the analysis step tries to balance the uncertainty in the data and in the forecast. The model is then advanced in*

time and its result becomes the forecast in the next analysis circle.“ [7]

Diese Definition deckt die Idee der Datenassimilation, nämlich die Integration von Daten in das Modell ab. Weiterhin deutet sie auf das Konzept von Vorhersageschritten, in denen die bestmögliche Schätzung des aktuellen Zustands des Systems bestimmt wird.

„The data assimilation methodology adds value to the observations by ***filling in the observational gaps and to the model by constraning it with observations****. In this way, the data assimilation allows one to ’make sense’ of the observations“* [1]

Diese Definition verdeutlicht die Funktion der Datenassimilation als Vervollständigung der unvollständigen Daten durch das Modell und als ständige Korrektur des Modells durch die Beobachtungen. Zusammenfassend definieren wir Datenassimilation folgendermaßen:

„Datenassimilationsverfahren kombinieren Modell und Beobachtungen, um ein möglichst genaues Abbild der Realität zu erhalten. Beobachtungslücken werden durch das Modell geschlossen und das Modell wird durch die Daten beschränkt.“

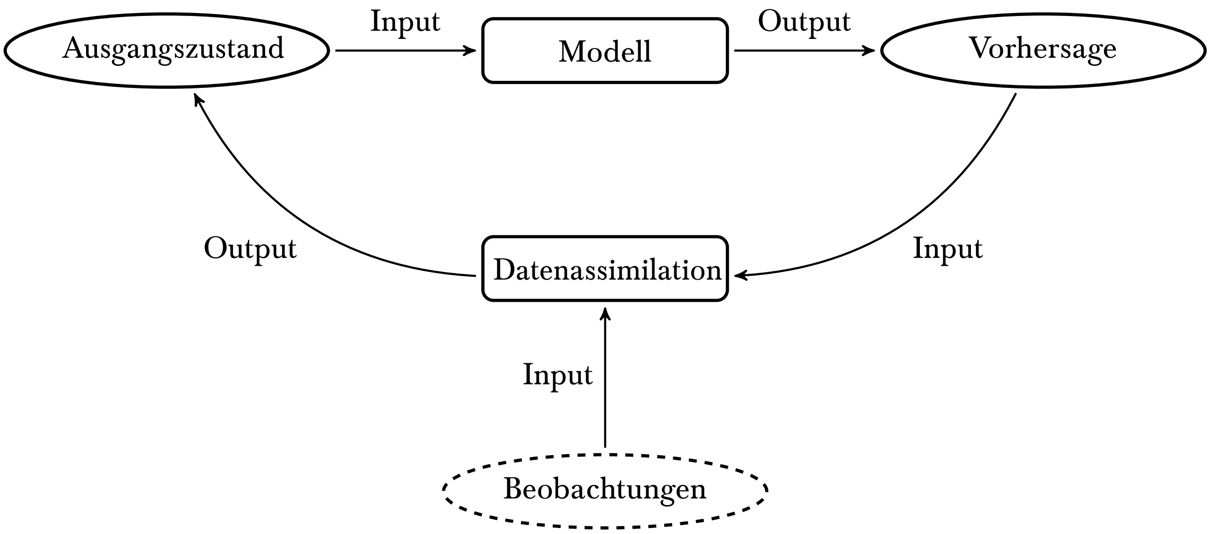

Abbildung 1.1: Zyklus der Datenassimilation

2 Theoretisches Grundgerüst

Im Folgenden bauen wir ein Gerüst aus Hilfsmitteln auf, mit denen wir das Datenassimilationskonzept und die verschiedenen Arten von Datenassimilationsverfahren theoretisch beschreiben können.

2.1 Grundbegriffe

2.1.1 Systemzustand

Die Zustände des Systems, über das wir eine Vorhersage treffen wollen, tragen wir in verschiedenen Varianten der *Zustandsvariable*:

$$\mathbf{x}$$

Diese Variable beschreibt den exakten Systemzustand im stetigen Raum und ist somit für uns maschinell nicht erfassbar. Um eine direktere Verwandtschaft zwischen Modell und Simulation zu herzustellen, diskretisieren wir bereits an dieser Stelle. Das Modell wird also ein numerisches sein. Wir leiten aus der Zustandsvariablen den *Zustandsvektor* (true state) her:

$$\mathbf{x}^t$$

Die Elemente des Zustandsvektors tragen Informationen über den Systemzustand und können bei einem komplexeren Zusammenhang wiederum Tupel sein. Ein Element könnte z.B. ein bestimmter Punkt im Gitternetz über der Erde sein und eine Menge verschiedener Informationen tragen (Temperatur, Luftdruck, etc.).

Das Ergebnis der Datenassimilation, d.h. die bestmögliche Schätzung für den aktuellen Zustand des Systems, den wir nach dem Kombinieren von Beobachtungen und Modell erhalten, nennen wir *Analyse* und tragen den geschätzten Zustand im *Analysevektor*:

$$\mathbf{x}^a$$

Weiterhin führen wir eine Variable ein, die eine wichtige Funktion im Datenassimilationskonzept hat. Dabei handelt es sich um eine erste Schätzung des aktuellen Systemzustandes. Diese kann manuell, d.h. anhand von Empirie von Menschen erstellt werden, eine Vorhersage aus einem älteren, bereits vorhandenen Vorhersagemodell sein, oder aus einem größeren Datensatz mit einfachen Interpolationsverfahren errechnet werden. Sobald jedoch das vorliegende Modell als Simulation für erste Vorhersagen gestartet wurde, ist es naheliegend, die eigens erstellte Vorhersage als die erste Schätzung zu verwenden. Die Schätzung nennen wir *Hintergrund* (background) und tragen sie im *Hintergrundsvektor*:

$$\mathbf{x}^b$$

2.1.2 Beobachtungen

Die Menge aller möglichen Beobachtungen bezeichnen wir als Beobachtungsraum, welcher durch folgende Variable ausgedrückt wird:

$$\mathbf{y}$$

Von diesem leiten wir den Beobachtungsvektor (observation vector) ab, der die tatsächlichen Beobachtungen des Systems zu einem bestimmten Zeitpunkt beinhaltet:

$$\mathbf{y}^o$$

Jedes Element des Beobachtungsvektors ordnet bestimmten Koordinaten im System einen Satz von Informationen zu. In der Wettervorhersage wären es z.B. Temperatur, Luftdruck und Luftfeuchtigkeit, die an einem bestimmten Ort gemessen wurden. Alle Elemente des Beobachtungsvektors werden im Modell jedoch einem bestimmten Zeitpunkt zugeordnet. In der nächsten Vorhersageiteration wird ein neuer Beobachtungsvektor mit neuen Beobachtungen zu einem vorangeschrittenen Zeitpunkt betrachtet.

Beobachtungen betrachten wir grundsätzlich als fehlerbehaftet und unterscheiden zwei Arten von Fehlern: Zum einen kommen immer Messfehler vor, die durch Ungenauigkeit der Messinstrumente oder Störung des Messvorgangs entstehen:

$$\epsilon^\mu$$

Zum anderen müssen immer die Repräsentativitätsfehler betrachtet werden. Diese Art von Fehlern kommt immer dann vor, wenn verwandte Beobachtungen nur als repräsentativ für die von uns gewünschten Beobachtungen verwendet werden, weil letztere uns nicht zur Verfügung stehen. Sammeln wir z.B. einen Satz von meteorologischen Daten zur Bestimmung des aktuellen Atmosphärezustandes durch Datenassimilation, so wird unser Beobachtungsvektor u.a. aus folgenden Gründen den betrachteten Zustand nicht korrekt wiedergeben:

- Die Beobachtungspunkte (z.B. Wetterstationen) liegen mit höchster Wahrscheinlichkeit nicht an den im Modell betrachteten Punkten des Gitternetzes, welches den Systemzustand repräsentiert.

- Die Beobachtungen werden mit höchster Wahrscheinlichkeit nicht alle zum selben Zeitpunkt getroffen. Das Messen, Verarbeiten und Versenden von Daten führt dazu, dass alle Elemente des Beobachtungsvektors aus einem Zeitintervall stammen und nur im Modell einen konkreten Zeitpunkt repräsentieren.

Die Abweichungen, die dadurch entstehen, bezeichnen wir als Repräsentativitätsfehler und tragen sie in folgender Variablen:

$$\epsilon^r$$

Die Kombination aus Messfehlern und Repräsentativitätsfehlern ergeben die Beobachtungsfehler:

$$\epsilon^o$$

2.2 Beobachtungsgleichung

Im Folgenden betrachten wir die Beziehung zwischen Modell und Beobachtungen. Für eine Gegenüberstellung zwischen Modellzustand und Beobachtungen z.B. zu Vergleichszwecken benötigen wir eine Abbildung vom Systemzustand auf die korrespondierenden Beobachtungspunkte. Im Allgemeinen würde es sich dabei um eine Funktion handeln, die den konkreten Zustand auf den Beobachtungsraum abbildet:

$$\mathbf{y} = h(\mathbf{x})$$

Der Beobachtungsraum ist nicht erfassbar. Stattdessen bilden wir auf einen Satz von Beobachtungen, den Beobachtungsvektor, ab. Diese Beobachtungen haben zunächst Messfehler, die bei der Abbildung mit betrachtet werden müssen.

$$\mathbf{y}^o = h(\mathbf{x}) + \epsilon^\mu$$

Eine ideale Funktion, die direkt auf die gemessenen Beobachtungen abbildet, ist nicht verfügbar, da sowohl unsere Modelldaten als auch die Beobachtungen diskretisiert sind. Stattdessen wird ein Satz von Rechenvorschriften verwendet, den wir in dem ***Beobachtungsoperator*** $\mathcal{H}$ tragen. Dieser rechnet nun nicht mehr auf dem stetigen Zustandsraum, sondern auf dem diskreten Zustandsvektor. Eine ideale Abbildung auf die Beobachtungen impliziert, dass die tatsächlich gewünschten und nicht durch Repräsentativitätsfehler abweichenden Beobachtungen gemeint sind. Da diese nicht vorhanden sind, werden zu den Messfehlern die Repräsentativitätsfehler hinzuaddiert, so dass der Term insgesamt die Beobachtungsfehler enthält.

$$\mathbf{y}^o = \mathcal{H}(\mathbf{x}^t) + \epsilon^o$$

Aus der Sicht der Datenassimilation wird diese Abbildung zum Vergleich der Vorhersage des aktuellen Zustands (Background $\mathbf{x}^b$) und der Beobachtungen benötigt. Dabei müssen auch die Fehler der Vorhersage betrachtet werden.

$$\mathbf{y}^o = \mathcal{H}(\mathbf{x}^b) + \epsilon^o + \epsilon^b$$

2.3 Modellgleichung

Im Folgenden wird die Idee des Vorhersagemodells und die Beziehung zur Datenassimilation formal angegangen. Das Modell versetzt durch die Vorhersage das simulierte System von einem Zustand in den nächsten. Abstrakt lässt sich dies durch eine Funktion beschreiben, die einen Zustand auf seinen Folgezustand abbildet. Die Variable k steht dabei für einen Zeitpunkt, wobei $k+1$ den nächsten betrachteten Zeitpunkt im Modell angibt.

$$\mathbf{x}_{k+1} = g(\mathbf{x}_k)$$

Es wird nicht durchgehend Simuliert und das Modell liefert nicht zu jedem beliebigen Zeitpunkt stetig Vorhersagen. Stattdessen wird zu fest definierten, regelmäßigen Abständen (Iterationen), die als praktikabel bestimmt wurden (z.B. Wettervorhersage jede Stunde), eine Vorhersage für den Zustand getroffen, der zur nächsten Iteration eintritt. Die Zeit wird also als diskretes Element betrachtet, d.h. $k \in \mathbb{N}$.

Dies bedeutet, dass wiederum keine Funktion als Abbildung für den Folgezustand vorhanden ist. Stattdessen wird wieder ein Satz von Berechnungsvorschriften (gewöhnliche Simulation) verwendet, welchen wir in dem ***Modelloperator*** $\mathcal{M}$ tragen. Neben dem Modell müssen die durch Diskretisierung und Unvollständigkeit entstehenden ***Modellfehler*** η betrachtet werden.

$$\mathbf{x}_{k+1}^{t} = \mathcal{M}_{k,k+1}(\mathbf{x}_{k}^{a}) + \eta_{k,k+1}$$

Die Eingabe für den Modelloperator ist die Schätzung des aktuellen Zustands des Systems, welcher das Ergebnis der Datenassimilation ist und somit in der Gleichung durch die Analyse $\mathbf{x}^a$ ausgedrückt wird. Die Ausgabe des Modells ist die Vorhersage für den nächsten Zeitschritt. Aus der Sicht der Datenassimilation wird diese als Hintergrund für die Datenassimilation verwendet. Wir betrachten daher die Gleichung folgendermaßen:

$$\mathbf{x}_{k+1}^{b} = \mathcal{M}_{k,k+1}(\mathbf{x}_{k}^{a}) + \eta_{k,k+1}$$

2.4 Prinzip der Datenassimilation

An dieser Stelle fassen wir die eingeführte Theorie zusammen und definieren ein Prinzip der Datenassimilation. Das Vorhersagemodell $\mathcal{M}$ nimmt die Schätzung für den aktuellen Zustand des Systems (Analyse $\mathbf{x}^a$) als Eingabe, um eine Vorhersage für den nächsten Zustand zu treffen. Dieser wird aus der Vorhersage aus dem vorherigen Schritt (Hintergrund $\mathbf{x}^b$) und den aktuellen Beobachtungen (Beobachtungsvektor $\mathbf{y}^o$) durch ein Datenassimilationsverfahren berechnet. Dazu müssen die Modelldaten auf die Beobachtungen abgebildet werden (Beobachtungsoperator $\mathcal{H}$). Ist der vorhergesagte Zeitpunkt erreicht, können die Vorhersage und neue Beobachtungen für die nächste Datenassimlations- und Vorhersageiteration verwendet werden.

Der Kern der Datenassimilation ist also das Berechnen der Analyse $\mathbf{x}^a$. Dazu gibt es verschiedene Methoden, jedoch stützen sich viele auf ein allgemeines Prinzip, welches deutlich die Idee der Korrektur des Modells durch Daten darstellt:

$$\mathbf{x}^a = \mathbf{x}^b + \mathbf{K}(\mathbf{y}^o - \mathcal{H}(\mathbf{x}^b))$$

Die Analyse ist der Hintergrund, welcher um einen gewichteten Satz von Beobachtungen korrigiert wird. $\mathbf{K}$ stellt dabei eine Gewichtsmatrix dar und trägt Aussagen über die Fehler (und somit Aussagekraft) der Beobachtungen und des Hintergrunds. Beobachtungen und Hintergrundsdaten mit größeren möglichen Schwankungen werden so weniger stark in der Korrektur berücksichtigt, womit Abweichungen indirekt rausgefiltert werden.

In vielen Datenassimilationsverfahren wird der Beobachtungsoperator linearisiert, so dass die Rechenvorschriften zur Abbildung des Hintergrunds auf die Beobachtungen sich durch eine Matrix ausdrücken lassen und die Abbildung durch eine Multiplikation stattfindet.

$$\mathbf{x}^a = \mathbf{x}^b + \mathbf{K}(\mathbf{y}^o - \mathbf{H}\mathbf{x}^b)$$

3 Verfahren

In diesem Kapitel werden Datenassimilationsverfahren verschiedener Arten betrachtet, welche konkret im Einsatz sind oder waren. Dabei wird nur die Grundidee und die theoretische Vorschrift der Verfahren vorgestellt, da die Details von der Implementation und dem Einsatzzweck abhängen.

3.1 Cressman's objective analysis

Cressman's objective analysis ist ein Verfahren vom Typ *Sukzessive Korrektur*. Hierbei wird der Hintergrund (erste Schätzung) in bestimmt vielen Durchgängen um die aktuellen Beobachtungen korrigiert, was teilweise dem zuvor aufgestellten Prinzip entspricht. Es handelt sich jedoch um ein sehr altes (1950) und nicht mehr verwendetes Verfahren mit einem z.B. für die moderne Wettervorhersage ungenügenden Korrekturverfahren.

Das Verfahren basiert darauf, dass die integrierten Beobachtungen jeweils einen Wirkungsradius haben, in dem sie Systempunkte noch beeinflussen, wobei der Einfluss mit steigender Distanz sinkt. In Abbildung 3.1 betrachten wir einen aus dem Hintergrund stammenden Informationspunkt im System (**P**) und drei Beobachtungen ($\mathbf{O}_i$) in dessen Nähe. Es ist zu sehen, dass der Systempunkt in den festgelegten Wirkungsradien der Beobachtungen O_1 und O_2 liegt, jedoch nicht mehr im Wirkungsradius von $\mathbf{O}_3$. Entsprechend hat $\mathbf{O}_3$ keinen Einfluss auf **P**. Weiterhin hat $\mathbf{O}_2$ stärkeren Einfluss auf **P**, da die Distanz zum tatsächlichen Punkt kleiner ist. Die Korrektur des Hintergrunds und Berechnung der Analysis wird durch folgende Gleichung beschrieben:

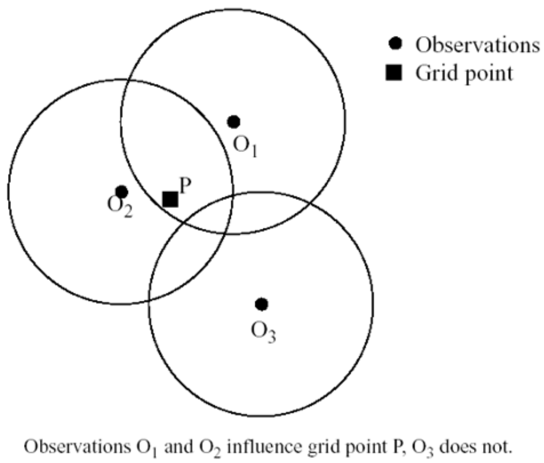

Abbildung 3.1: Quelle: National Centre for Earth Observation (UK) http://www.nceo.ac.uk/

$$\underbrace{\mathbf{x}_j^a}_{\text{Analyse}} = \underbrace{\mathbf{x}_j^b}_{\text{Hintergrund}} + \underbrace{\frac{\sum_{i=1}^{s} w(i,j)(\mathbf{y}_i - \mathbf{x}_j^b)}{\sum_{i=1}^{s} w(i,j)}}_{\text{Korrekturterm}}$$

Die Indizes j und i bezeichnen hierbei nicht die Vektoren zu einem bestimmten Zeitpunkt, sondern jeweils ein Element des Vektors (Informationspunkt im System bzw. Beobachtung). In dem Korrekturterm werden dabei die gewichteten Differenzen zwischen allen Beobachtungen und Hintergrund an einem bestimmten Punkt im System summiert und durch Division durch die Summe der Gewichte normalisiert. Die Gewichtung sieht dabei folgendermaßen aus:

$$w(i,j) = \begin{cases} \frac{R^2 - r(i,j)^2}{R^2 + r(i,j)^2} & \textbf{wenn } r(i,j) \leq R \\ 0 & \textbf{wenn } r(i,j) > R \end{cases}$$

R beschreibt den Wirkungsradius der Beobachtungen und $r(i,j)$ die Entfernung zwischen den Elementen i (Beobachtung) und j (Systempunkt). Mit Zunahme der Entfernung sinkt die Gewichtung. Überschreitet die Entfernung den Wirkungsradius, entfällt die Gewichtung ganz.

Das Verfahren hat schwerwiegende Probleme für große und komplexe Systeme. Zum einen ist die Wahl des Wirkungsradius eine willkürliche und muss aufgrund von empirischem Wissen getroffen werden. Weiterhin fällt die Gewichtung jeder Beobachtung nur nach ihrer Entfernung zu den Systempunkten aus. Es werden also weder die möglichen Fehler der Beobachtungen, noch die Fehler des Hintergrunds mit einbezogen.

3.2 Optimale Interpolation

Dieses Verfahren basiert auf dem konkreten Berechnen der Analyse in der zuvor aufgestellten Annahme, dass der Analysevektor das Ergebnis eines korrigierten Hintergrunds ist, wobei die Korrektur eine gewichtete Differenz zwischen den Beobachtungen und den auf diese abgebildeten Systempunkten ist.

$$\mathbf{x}^a = \mathbf{x}^b + \mathbf{K}(\mathbf{y}^o - \mathbf{H}\mathbf{x}^b)$$

Die Gewichtung wird dabei in einer Gewichtsmatrix getragen, welche Aussagen über mögliche Fehler in den Beobachtungen und dem Hintergrund trägt. Der Kern des Verfahrens ist die numerische Berechnung dieser Matrix durch folgende Gleichung:

$$\mathbf{K} = \mathbf{B}\mathbf{H}^T(\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^T + \mathbf{R})^{-1}$$

$\mathbf{B}$ ist dabei die Kovarianzmatrix des Hintergrunds und $\mathbf{R}$ ist die Kovarianzmatrix der Beobachtungen. Aufgrund der im konkreten Einsatz anfallenden enormen Datenmengen (Kovarianzmatrizen enthalten das Quadrat an Elementen der zugehörigen Vektoren, die z.B. bei der numerischen Wettervorhersage Millionen von Elementen tragen), wird das Verfahren in der Hinsicht vereinfacht, dass die Kovarianzmatrix des Hintergrunds aus dem Modell her einmalig berechnet wird und konstant in jeder Vorhersageiteration verwendet wird.

3.3 Kalman Filter

Beim Kalman Filter handelt es sich um einen Satz mathematischer Gleichungen, mit denen sich Zustände von Systemen unter Berücksichtigung von Beobachtungen schätzen lassen. Damit ist die Idee mit der Datenassimilation verwandt. Der Kalman Filter ist jedoch allgemeiner definiert, so dass abgeleitete Verfahren sich in verschiedenen Kontexten und Größenordnungen, von Regelkreisen in der Mikrotechnologie bis zur Datenassimilation in der numerischen Wettervorhersage, anwenden lassen.

3.3.1 Extended Kalman Filter (EKF)

Diese Formulierung des Kalman Filters ist sehr ähnlich zum zuvor aufgestellten Assimilationsprinzip und der Berechnung in der 'Optimalen Interpolation'. Allgemein ausgedrückt geht man folgendermaßen for:

Wir betrachten eine berechnete Analyse mit Kovarianzmatrix für den aktuellen Zustand des Systems:

$$\mathbf{x}_k^a, \mathbf{P}_k^a$$

Ausgehend von diesen erstellen wir mit Hilfe des Modells eine Vorhersage für den Systemzustand als erste Schätzung (forecast):

$$\mathbf{x}_{k+1}^f = \mathcal{M}_{k,k+1}(\mathbf{x}_k^a)$$

Weiterhin wird die Kovarianzmatrix der Analyse propagiert und somit die Kovarianzmatrix der Schätzung berechnet. Dies ist der Hauptunterschied zur optimalen Interpolation, bei der die Kovarianzmatrix des Hintergrunds nicht in jeder Iteration, sondern nur einmalig berechnet wird. Dazu werden der zu einer Matrix linearisierte Modelloperator und die zu den Modellfehlern gehörende Kovarianzmatrix (Q) in folgender Gleichung verwendet:

$$\mathbf{P}_{k+1}^f = \mathbf{M}\mathbf{P}_k^a\mathbf{M}^T + \mathbf{Q}$$

Ausgehend davon wird die bereits aus der optimalen Interpolation bekannte Gleichung zur Berechnung der Gewichtsmatrix verwendet:

$$\mathbf{K}_{k+1} = \mathbf{P}_{k+1}^f\mathbf{H}^T(\mathbf{H}\mathbf{P}_{k+1}^f\mathbf{H}^T + \mathbf{R})^{-1}$$

Die Analyse der nächsten Iteration wird dann ebenfalls nach dem zuvor aufgestellten Prinzip berechnet:

$$\mathbf{x}_{k+1}^a = \mathbf{x}_{k+1}^f + \mathbf{K}_{k+1}(\mathbf{y}_{k+1}^o - \mathbf{H}\mathbf{x}_{k+1}^f)$$

Schließlich wird die Kovarianzmatrix der Analyse mit folgender Gleichung berechnet:

$$\mathbf{P}_{k+1}^a = (\mathbf{I} - \mathbf{K}_{k+1}\mathbf{H})\mathbf{P}_{k+1}^f$$

Dies ist das Ende einer Iteration und der Voerhersage-/Assimilationszyklus beginnt von vorn.

3.3.2 Ensemble Kalman Filter

Hierbei handelt es sich um eine Erweiterung des Extended Kalman Filters, bei der N verschiedene Läufe des Assimilationszyklus in so genannten *Ensembles* durchgelaufen werden, wobei neben einem Lauf mit den normalen Werten, alle anderen Läufe mit einer durch eine normalverteilte Abweichung versetzter Schätzung berechnet werden. Der Zweck ist eine alternative Berechnung der Kovarianzmatrix der Schätzung mit Hilfe des Ensembles.

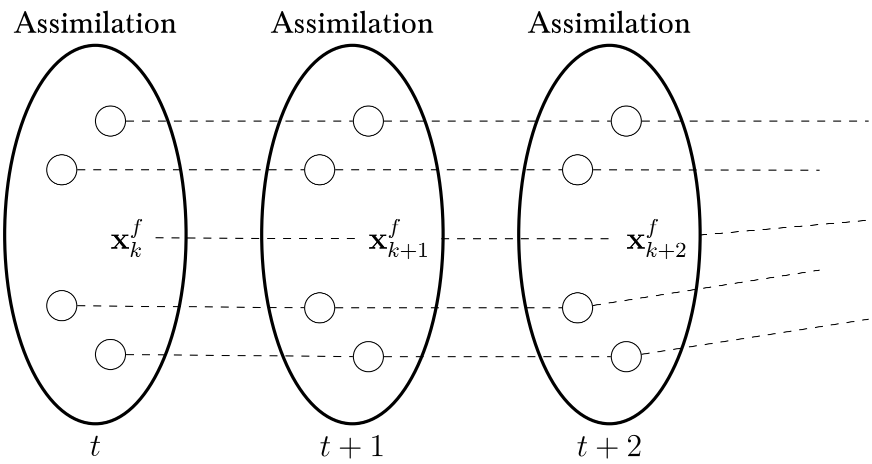

Abbildung 3.2: Vorhersage-/Assimilationsiterationen der Ensemblen

Die komplizierte Berechnung der Kovarianzmatrix der Vorhersage wird nicht mit der im EKF aufgestellten Gleichung durchgeführt, sondern anhand der N Vorhersagen des Ensembles anhand folgender Gleichung geschätzt:

$$\mathbf{P}^f \approx \tfrac{1}{N} \textstyle\sum_{j \in N} (\mathbf{x}_j^f - \overline{\mathbf{x}}^f)(\mathbf{x}_j^f - \overline{\mathbf{x}}^f)^T$$

$\overline{\mathbf{x}}^f$ beschreibt dabei den Durchschnitt der Schätzung im Ensemble. Der Rest des Verfahrens entspricht dem EKF.

3.4 Variationsverfahren

Wie der Begriff bereits andeutet, handelt es sich bei Variationsverfahren um Verfahren, bei denen die Analyse mittels der Minimierung einer Kostenfunktion bestimmt wird. Dies ist eine Abweichung von dem zuvor aufgestellten Prinzip der Datenassimilation, enthält jedoch die gleichen Grundelemente der Berechnung und ist mindestens genauso effektiv.

3.4.1 3D-Var

Beim dreidimensionalen Variationsverfahren wird die Analyse $\mathbf{x}^a$ durch das Minimum der Kostenfunktion $\mathcal{J}$ ausgedrückt, wobei die zuvor definierten Variablen verwendet werden:

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \mathbf{x}^b)^T \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_b) + (\mathbf{y}^o - \mathbf{H}\mathbf{x})^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{y}^o - \mathbf{H}\mathbf{x})$$

Das Minimum wird mit Hilfe des Gradientenverfahrens durch einen Algorithmus numerisch berechnet.

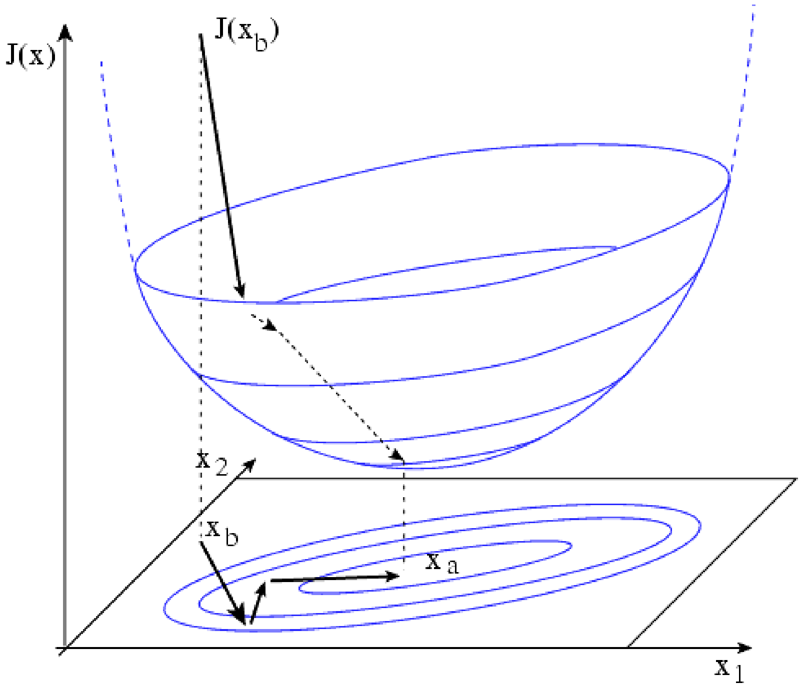

Abbildung 3.3: Annäherung an die Analyse durch Minimierung der Kostenfunktion. Quelle: European Centre for Medium-Range Weather Forecasts `http://www.ecmwf.int/`

3.4.2 4D-Var

Das vierdimensionale Variationsverfahren schließt ein extra Element der Zeit in die Assimilation ein, indem Beobachtungen nicht nur von dem aktuellen Zeitpunkt, sondern aus einem festgelegten Zeitfenster bis zu dem aktuellen Zeitpunkt in die Kostenfunktion einbezogen werden, was zu genaueren Ergebnissen nach der Minimierung führt:

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_b)^T \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_b) + \sum_{i=0}^{n} (\mathbf{y}_i^o - \mathbf{H}_i(\mathbf{x}_i))^T \mathbf{R}_i^{-1} (\mathbf{y}_i^o - \mathbf{H}_i(\mathbf{x}_i))$$

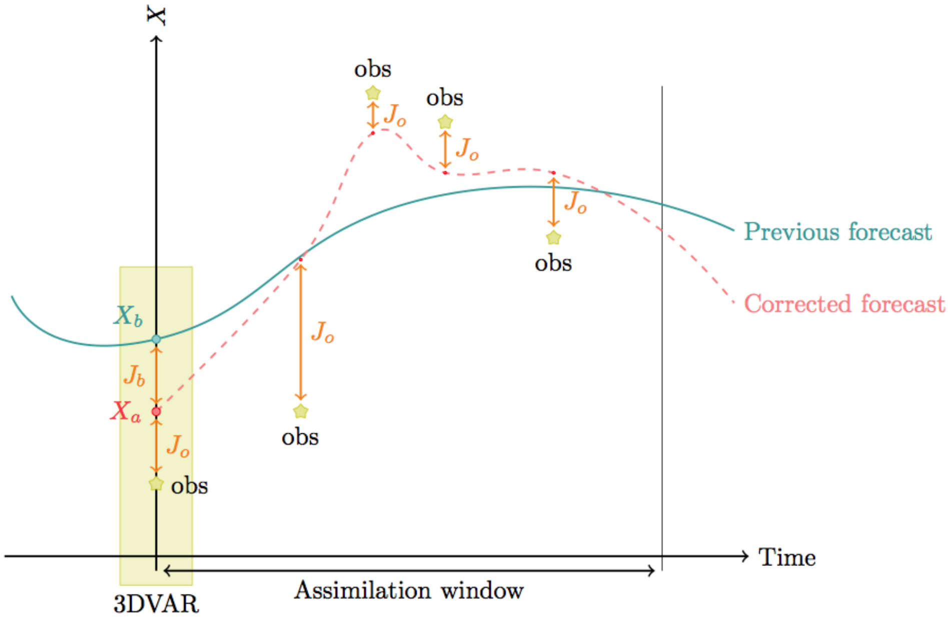

Abbildung 3.4: Korrektur des Hintergrunds durch Beobachtungen aus einem Zeitfenster. Quelle: Introduction to Data Assimilation (2011), E. Blayo, E. Cosme, M. Nodet, A. Vidard

3.5 Nudging

Datenassimilation durch Nudging Verfahren stellt eine Ausnahme dar, da keine Analyse berechnet wird. Stattdessen wird das Modell selbst in Richtung der Beobachtungen korrigiert, indem die Abweichungen des Systemzustands von den Beobachtungen in eine prognostizierende Gleichung des Modells integriert werden:

$$\frac{\delta \mathbf{x}}{\delta t} = \mathcal{M}(\mathbf{x}) + \alpha(\mathbf{y} - \mathbf{x})$$

4 Anwendung

In diesem Kapitel werden konkrete Anwendungsfälle von Datenassimlationsverfahren betrachtet. Dabei handelt es sich um Implementationen nach den zuvor vorgestellten Vorschriften. Im Detail können sie sich von Aspekten der Theorie unterscheiden.

4.1 Anwendungsgebiete

Wie aus dem zuvor laufend verwendeten Beispiel hervorgeht, ist Datenassimilation ein wichtiger Bestandteil der Meteorologie, insbesondere der numerischen Wettervorhersage. Im Allgemeinen lässt sich sagen, dass Datenassimilation immer dann zum Einsatz kommt, wenn eine Vorhersage über den Zustand eines komplexen Systems basierend auf dem jetzigen Zustand getroffen werden muss. Dies trifft auf die meisten Disziplinen der Geowissenschaften, mit der Erde oder einem Bestandteil von ihr als System, zu, vor allem auf die Meteorologie, Klimatologie, Meereskunde und mathematische Geophysik.

Ausserhalb von Geowissenschaften findet Datenassimilation in der Wirtschaft zur Preisvohersage- und entwicklung Verwendung. Weiterhin wurden Datenassimilationsverfahren in der Bioinformatik beim Beschreiben von biologischen Pfadwegen (biological pathways) verwendet.

4.2 Numerische Wettervorhersage

Im Folgenden wird der Einsatz der Datenssimilation in der numerischen Wettervorhersage betrachtet, welche eines der häufigsten Einsatzgebiete von Datenassimilationsverfahren ist und einen vergleichsweise zugänglichen Einblick bietet.

4.2.1 Allgemeines

Bei numerischen Wettervorhersagen handelt es sich um rechnergestützte Wettervorhersagen, welche auf mathematischen Modellen der Erde basieren, in die aktuelle Beobachtungen integriert werden.

Die Modelle tragen den Zustand der Erde oder eines Ausschnitts in einem Gitter von Informationspunkten in einem Datenvektor. Die Gitterpunkte, die jeweils einer bestimmten Position auf der Erde zugeordnet sind, tragen für die Wettervorhersage relevante Informationen, wie Temperatur, Luftfeuchtigkeit, Luftdruck und Windstärke. Die Art der Information stimmt mit der Art der aus den Beobachtungen gewonnenen Informationen überein, so dass diese in das Modell integriert werden können. Weiterhin trägt das Modell ein Zeitelement, bei dem jedem Gitterpunkt auch ein Zeitpunkt zugeordnet ist. Den Gitterpunkten einer

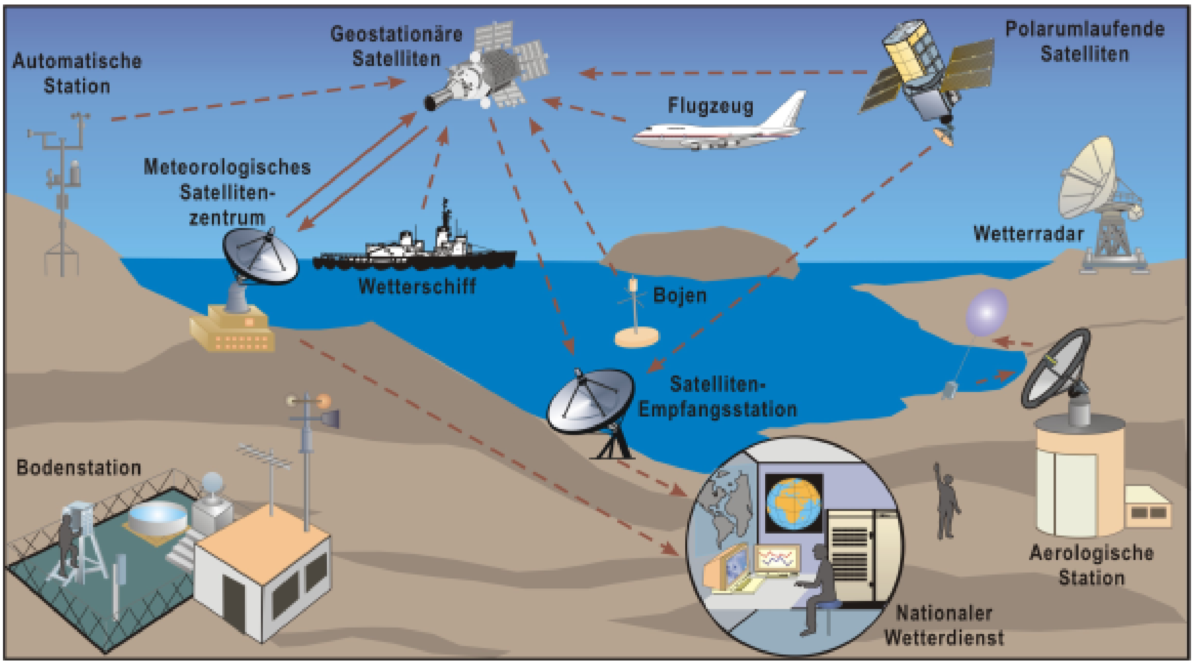

Abbildung 4.1: Netzwerk von Beobachtungen. Quelle: Deutscher Wetterdienst `www.dwd.de`

Vorhersage ist z.B. entsprechend jeweils der Zeitpunkt in der Zukunft zugeordnet, für den der Zustand des Systems Erde vorhergesagt wird. Typischerweise werden Vorhersagen für verschiedene Zeitpunkte in der Zukunft berechnet, wobei relativ verlässliche Vorhersagen sich noch für einen Abstand von 14 Tagen berechnen lassen.

Die Zustandsübergänge des Systems werden im Modell durch ein System partieller Differentialgleichungen beschrieben, welche numerisch (also auch approximativ) gelöst werden müssen, da die Problemgröße (Anzahl der Variablen und Gleichungen) eine analytische Berechnung nicht erlaubt. Da selbst die numerische Berechnung sehr viel Rechenkraft erfordert, werden die Modelle gewöhnlicherweise auf Hochleistungsrechnern (z.B. Clustern) eingesetzt.

Zu integrierende Beobachtungen kommen wegen verschiedener Zugänglichkeiten zu Orten auf der Erde aus verschiedenen Quellen, welche u.a. folgende sein können:

- Satelliten
- Wetterschiffe
- Wetterbojen
- Wetterstationen
- Wetterradare

4.2.2 Konkrete Modelle

Weiterhin betrachten wir zwei konkrete Modelle des deutschen Wetterdienstes. Dabei ist sowohl ein Modell vertreten, das die gesamte Erde als System betrachtet, als auch ein Lokalmodell (LAM bzw. limited area model), welches nur Vorhersagen für einen Ausschnitt der Erde trifft.

Globallmodel Europa (GME)

Das Globallmodel Europa ist ein globales Wettervorhersagemodell des deutschen Wetterdienstes, welcher einer von vierzehn Wetterdiensten weltweit ist, die ein globales Wettervorhersagemodell betreiben. Das GME ist seit 1999 im Einsatz und führt vier Modellrechnungen am Tag durch. Weiterhin werden dreistündige Schätzvorhersagen für die Datenassimilation als Hintergrund berechnet. Als Datenassimilationsverfahren wird dabei 'Optimale Interpolation' verwendet.

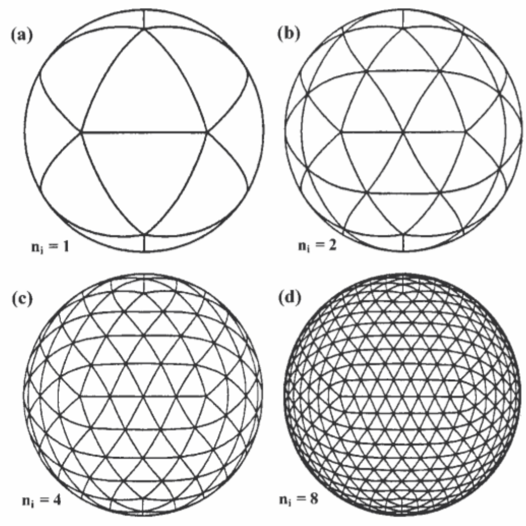

Abbildung 4.2: Dreiecksgitternetz des GME. Quelle: Das Global-Modell GME, D. Majewski, B. Ritter

Eine besondere Eigenschaft des GME ist seine Gitterstruktur. Im Gegensatz zu einem gewöhnlichen quadratischen Gitter, bei dem jeder Gitterpunkt vier Nachbarn hat, handelt es sich um ein Dreiecksgitter, bei dem jeder Gitterpunkt bzw. jede Dreiecksecke über 6 bzw. in wenigen Ausnahmen 5 Nachbarpunkte verfügt. Insgesamt besteht das Gitter aus 1474562 Gitterpunkten mit einer Kantenlänge von 20 Kilometern zwischen den Punkten.

COSMO-EU

Das COSMO-EU Modell des deutschen Wetterdienstes ist ein regionales Modell für den Raum in und um Europa. Neben anderen Variablen betrachtet das Modell

- Temperatur
- Luftdruck
- Wasserdampf
- Wind
- Wolken

- Niederschlag

und assimiliert entsprechende Daten mittels eines 'Nudging' Verfahrens. Der betrachtete Ausschnitt enthält 40 Atmosphäreschichten bis in eine Höhe von 24 Kilometern und wird auf ein kubisches Gitter mit $665 \cdot 657 \cdot 40 = 17476200$ Gitterpunkten abgebildet. Das Modell liefert alle 3 Stunden eine Vorhersage und braucht 20 Minuten Rechenzeit pro Vorhersagetag.

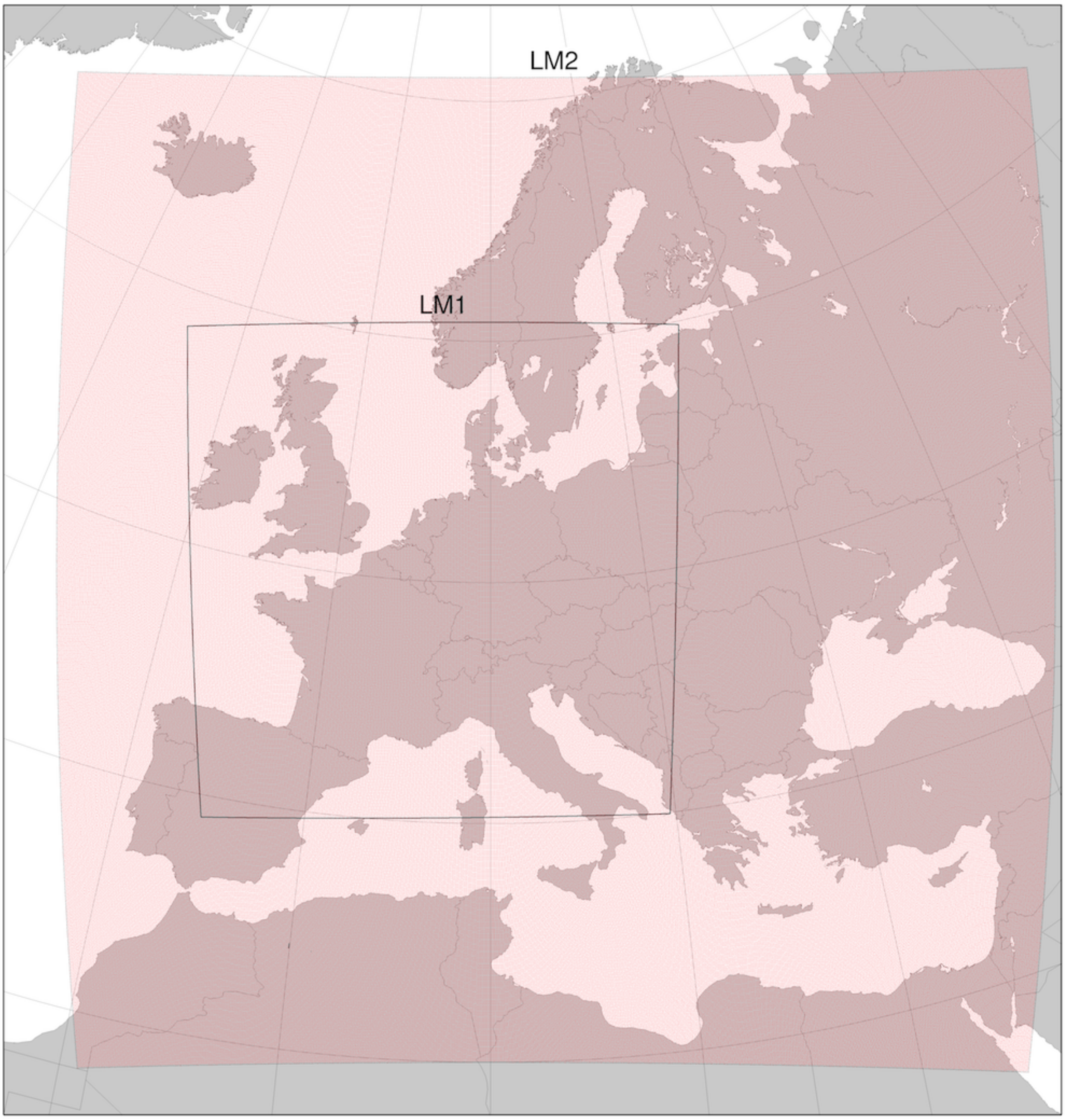

Abbildung 4.3: Gebiet von COSMO-EU. Quelle: Atmacs - Atmospheric attraction computation service `http://atmacs.bkg.bund.de/`

5 Aussicht

5.1 Überblick

Die Verfahren 'Optimale Interpolation', '3D-Var' und 'Nudging' sind in den Geowissenschaften noch relativ weit verbreitet im Einsatz. Es findet jedoch eine Ablösung von der optimalen Interpolation durch den Kalman Filter und des 3D-Var Verfahrens durch vierdimensionale Variation. In beiden Fällen handelt es sich um erweiterte Verfahren des Vorgängers, wobei die Erweiterung eine höhere Rechenkraft erfordert. Steigende Rechenkraft und Verfügbarkeit von Hochleistungsrechnern ermöglicht den Einsatz der erweiterten Verfahren. Weiterhin können sich neue und bisher nicht verbreitet verwendete Verfahren basierend auf hier nicht behandelten Prinzipien als breit anwendbar herausstellen (z.B. Datenassimilation basierend auf Monte Carlo). Der größte Faktor für die qualität aller Datenasswimilationsverfahren ist jedoch die Menge, Genauigkeit und Vielfältigkeit der Beobachtungen. Eine Vervielfältigung von Wetterstationen, Wetterbojen, Satelliten und eine Verbesserung der jeweiligen Messgeräte bringt daher z.B. bessere Ergebnisse in der numerischen Wettervorhersage, als eine Verbesserung des verwendeten Assimilationsverfahrens.

5.2 Datenassimilation auf dem Mars

Die Zukunft der Datenassimilation hängt auch von neuen Anwendungsgebieten ab. Im Folgenden betrachten wir eine vergleichsweise ungewöhnliche Anwendung für Verfahren. Dabei handelt es sich um Datenassimilation für die von der NASA betriebenen numerischen Wettervorhersagen auf dem Mars. Der Mars verfügt über eine Atmosphäre, die größtenteils aus Kohlenstoffdioxid und Stickstoff besteht, was Wetterphänomene ermöglicht. Die Betrachtung des Wetters und somit dessen Vorhersage ist Bestandteil der allgemeinen Erforschung des Planeten. Mehrjährige Beobachtungen der Oberfläche des Mars durch Satelliten zeigten, dass Wetterphänomene des Mars sich eindeutiger wiederholen, als

Abbildung 5.1: Atmosphäre des Mars. Quelle: `http://en.wikipedia.org/wiki/Atmosphere_of_Mars`

die der Erde, was sie stark vorhersagbar
macht.

Kontinuierliche Datensammlung durch zwei Beobachtungssatelliten (Mars Global Surveryor (1999-2006) und Mars Reconnaissance Orbiter (2006 - jetzt)) über Lufttemperatur, Luftdruck und Staubdichte werden gesammelt und in Verschiedene Modelle u.A. mittels eines Ensemble Kalman Filter assimiliert.

Weiterhin exisiteren Pläne zur Erforschung des Wetters auf weiteren erdähnlichen Himmelskörpern des Sonnensystems, welche über eine Atmosphäre verfügen (Venus, Mond des Saturns - Titan). Erkenntnisse über Wetterphänomene auf anderen Himmelskörpern lassen i.a. Rückschlüsse über die Entwicklung des Wetters auf der Erde ziehen.

6 Zusammenfassung

Schließlich fassen wir das wichtigste zur Datenassimilation zusammen:

- Datenassimilation wird immer dann angewendet, wenn der aktuelle Zustand eines komplexen Systems geschätzt werden muss.
- Die Schätzung erfolgt mittels Integration von Beobachtungen des Systems in ein vorhersagendes Modell basierend auf dem System.
- Datenassimilation schreibt einen Satz von Variablen und Gleichungen, die Beziehungen zwischen Modell, Beobachtungen und Zeit ausdrücken.
- Basierend auf diesen sind die Rechenvorschriften zu den verschiedenen Datenassimilationsverfahren.
- Das allgemeine Prinzip der Datenassimilation, welches die Grundlage vieler Verfahren ist, lässt sich folgendermaßen beschreiben: Die bestmögliche Schätzung des Zustands des Systems (Analyse $\mathbf{x}^a$) ist eine erste Schätzung/Vorhersage (Hintergrund $\mathbf{x}^b$) korrigiert um die Beobachtungen ($\mathbf{y}^o$), wobei die Korrektur so gewichtet ist, dass die möglichen Fehler der Beobachtungen und der ersten Schätzung minimiert werden (Gewichtsmatrix $\mathbf{K}$).
- Das Prinzip lässt sich für einen Zeitpunkt k durch folgende Gleichung beschreiben: $\mathbf{x}_k^a = \mathbf{x}_k^b + \mathbf{K}_k(\mathbf{y}_k^o - \mathcal{H}_k(\mathbf{x}_k^b))$
- Das Hauptanwendungsgebiet für komplexe Datenassimilationsverfahren sind die Geowissenschaften, insbesondere die numerische Wettervorhersage.
- Momentan sind folgende Verfahren im Einsatz: Nudging, Optimale Interpolation, Dreidimensionales Variationsverfahren, Vierdimensionales Variationsverfahren, Varianten des Kalman Filters.
- Steigende Leistung und Verfügbarkeit von Hochleistungsrechnern ermöglichen vermehrt den Einsatz der komplexen und rechenlastigen vierdimensionalen Variationsverfahren und Kalman Filter Verfahren.

Literaturverzeichnis

[1] W. Lahoz, B. Khattatov, R. Menard (Eds.). *Data Assimilation - Making Sense of Observations.* (2010).

[2] Eric Blayo, Emmanuel Cosme, Maëlle Nodet, Arthur Vidard. *Introduction to Data Assimilation.* (2011).

[3] D. Majewski, B. Ritter. *Das Global-Modell GME.* (2002).

[4] A. Fowler, University of Reading. *Data Assimilation tutorial on the Kalman filter.*

[5] F. Bouttier, P. Courtier. *Data Assimilation Concept and Methods.*

[6] K. Ide, P. Courtier, M. Ghil, A. C. Lorenc. *Unified Notation for Data Assimilation: Operational, Sequential and Variational.*

[7] `http://en.wikipedia.org/wiki/Data_assimilation`

[8] `http://de.wikipedia.org/wiki/Numerische_Wettervorhersage`

[9] `http://www.dwd.de`

[10] `http://atmacs.bkg.bund.de/`

[11] `http://en.wikipedia.org/wiki/Atmosphere_of_Mars`

[12] `http://en.wikipedia.org/wiki/Climate_of_Mars`

[13] `http://www.atmos.millersville.edu/~lead/Obs_Data_Assimilation.html`

[14] `http://www.asp.ucar.edu/colloquium/1992/notes/part1/course.html`