

Глубокое обучение для оценки оператора Купмана в идеализированной динамике атмосферы

Кирпичев И.Е., СПбГУ, Санкт-Петербург st088147@student.spbu.ru,

Мокаев Р.Н., СПбГУ, Санкт-Петербург r.mokaev@spbu.ru

Аннотация

Атмосферные процессы описываются нелинейными системами, что существенно затрудняет их прямой анализ с помощью численных методов. Глубокое обучение позволяет разрабатывать модели, которые по точности сопоставимы с традиционными физическими моделями для среднесрочных прогнозов. В данной работе исследуется подход применения глубокого обучения для оценки оператора Купмана, который обеспечивает линейное представление нелинейных динамик и способствует повышению прозрачности модели основанной на данных. Для этого создаётся набор данных, который описывает динамику развития холодных и тёплых пузырей в атмосфере. Далее реализуется частичный автоэнкодер на основе сверточной нейронной сети, который обучается на этих данных. Результаты работы модели сравниваются с исходными данными.

Введение

Анализ и прогнозирование динамических процессов, таких как изменение скорости ветра, плотности и температуры, возникающих в атмосфере, играют важную роль в современном обществе. Традиционные физические и численные модели, хотя и обеспечивают приемлемую точность, требуют значительных вычислительных ресурсов. Кроме того, сложность и нелинейность атмосферной динамики затрудняют её прямой анализ, что делает необходимым поиск подходов, позволяющих одновременно улучшить интерпретируемость моделей и сохранить высокую точность прогнозов.

Одним из таких подходов является применение оператора Купмана [2], [3], который преобразует нелинейную динамическую систему в линейную бесконечномерную систему. Несмотря на теоретическую привлекательность оператора Купмана, его прямое применение для задач атмосферной динамики остаётся затруднительным вследствие бесконечной размерности и необходимости эффективной аппроксимации оператора в конечномерных пространствах. Современные методы глубокого обучения предлагают инстру-

менты для приближённой реализации оператора Купмана. Подходы на основе нейронных сетей (например, автоэнкодеров и сверточных нейронных сетей) позволяют найти оптимальное представление данных в скрытом пространстве, где оператор Купмана будет действовать линейно, сохраняя при этом богатство исходной информации и повышая интерпретируемость полученных моделей. В частности, сверточные автоэнкодеры показали себя перспективными благодаря способности эффективно работать с многомерными пространственными данными и успешно справляться с высокими уровнями нелинейности и шума.

Генерация обучающего набора данных

Физическая модель

Для решения задачи будем использовать двумерные нестационарные уравнения Эйлера, описывающие движение сжимаемой жидкости:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^1}{\partial x^1} + \frac{\partial \rho u^3}{\partial x^3} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u^1}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^1 u^1 + p)}{\partial x^1} + \frac{\partial (\rho u^1 u^3)}{\partial x^3} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho u^3}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^1 u^3)}{\partial x^1} + \frac{\partial (\rho u^3 u^3 + p)}{\partial x^3} + \rho g = 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho \theta}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^1 \theta}{\partial x^1} + \frac{\partial \rho u^3 \theta}{\partial x^3} = 0, \quad (4)$$

$$p_0 \left(\frac{R_d \rho \theta}{p_0} \right)^\gamma = p, \quad (5)$$

где ρ – плотность жидкости, p – давление, u^1 и u^3 – горизонтальная и вертикальная скорости соответственно, θ – потенциальная температура, t – время, x^1 и x^3 – горизонтальная и вертикальная пространственные координаты, $g \approx 9.81 \text{ м/с}^2$ – ускорение свободного падения, R_d – удельная газовая постоянная для сухого воздуха, γ – показатель адиабаты, $p_0 = 100000 \text{ Па}$ – опорное давление.

Для численного решения применяется разрывный метод Галёркина 4-го порядка [5] на сетке 20×20 элементов с 5 узлами на элемент (всего 10,000 точек). Временная дискретизация выполняется полуняевым методом Розенброка 2-го порядка [6] с шагом $\Delta t = 5$.

Линейные системы на каждом шаге решаются итерационным методом FGMRES с предобуславливанием. Матрица Якоби аппроксимируется методом конечных разностей, а для ускорения сходимости используется LU-разложение. Сравнение решений с предобуславливанием и без него показало пренебрежимо малые различия (l_2 -норма разности $\sim 1.1^\circ C$, относительная ошибка $\sim 0.037\%$ на последнем шаге генерации).

Генерация данных

На основе модели WxFactory [4] создан набор данных с тепловыми пузырями [7] в двумерной атмосфере. Параметры генерации:

- Сетка 1000×1000 м
- 1-2 горячих ($\theta = 30.3 - 30.6^\circ C$) и 0-2 холодных ($\theta = 29.8 - 29.95^\circ C$) пузырей
- Гауссово распределение температуры: $\theta(r) = A \cdot \exp[-(r-a)^2/s^2]$ при $r > a$; A при $r \leq a$
- Радиусы $a = 10 - 80$ м, координаты центров $x_0 = 200 - 800$ м, $z_0 = 50 - 750$ м

Результаты генерации

Всего было сгенерировано 960 уникальных сценариев эволюции атмосферы (720 обучающих и 240 валидационных). Каждый сценарий содержит до 215 временных шагов. При генерации некоторые временные шаги сталкивались с неустойчивостью, в таких случаях в набор не добавлялись последние 10 шагов.

Архитектура модели и оператор Купмана

Оператор Купмана

Рассмотрим $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, введем:

$$x_k(x^1, x^3) = (\rho_k(x^1, x^3), u_k^1(x^1, x^3), u_k^3(x^1, x^3), \theta_k(x^1, x^3)) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^4,$$

где $\rho_k, u_k^1, u_k^3, \theta_k$ — плотность, скорости ветра в двух направлениях и температура соответственно. Рассмотрим $M = L^2(\Omega, \mathbb{R}^4)$, M - множество состояний. Динамика системы определяется отображением $f \in C^\infty : M \rightarrow M$, $x_{k+1} = f(x_k)$, образуя дискретную динамическую систему (M, f) .

Оператор Купмана $K : F \rightarrow F$, где $F = \{g : M \rightarrow \mathbb{C}\}$, задаётся как

$$[Kg](x_k) = g(f(x_k))$$

Частичный автоэнкодер на основе сверточной нейронной сети

Работа [8] предоставляет базовую методику оценки оператора Купмана, однако ее подход сталкивается с серьезными трудностями при применении к данным высокой размерности [1]. В данной работе используется модифицированная структура автоэнкодера, предложенная в работе [10]. Энкодер преобразует x_k в скрытое представление $z_k = g(x_k)$, где g — нелинейное отображение. В скрытом пространстве применяется оператор K_m : $z_{k+1} = K_m z_k$. Декодер восстанавливает состояние: $\tilde{x}_{k+1} = g^{-1}(z_{k+1})$.

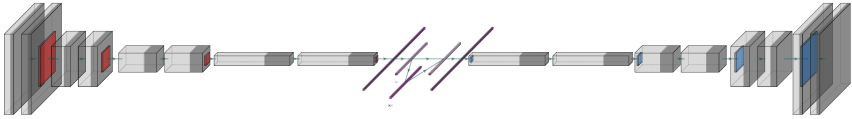


Рис. 1: Архитектура частичного автоэнкодера на основе сверточной нейронной сети. Энкодер (слева): остаточные блоки и Max Pooling. Скрытое пространство (центр): K_m для продвижения состояния. Декодер (справа): остаточные блоки и транспонированная свёртка.

Архитектура модели представлена на рисунке 1. Энкодер состоит из блоков снижения разрешения (DownBlock), которые включают в себя последовательности двух остаточных блоков (Residual Blocks) [9], после которых идет операция Max Pooling. Декодер включает блоки повышения разрешения (UpBlock) с транспонированной свёрткой и остаточными блоками. После энкодера данные преобразуются в вектор, проецируются в скрытое пространство, где применяется K_m , и затем декодируются.

Метрики оценки и функции потерь

Для обучения используется среднеквадратическая ошибка:

$$\text{MSE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2,$$

где y_i — истинное значение, \hat{y}_i — предсказанное.

В работе [8], для эффективного обучения автоэнкодера, оценивающего нелинейные преобразования вместе с оператором Купмана, вводятся три функции потерь (восстановления, предсказания и линейности). Для улучшения обобщающей способности модели и её регуляризации в работе [1] предлагается два дополнительных ограничения (функции потерь шума и замены). Общая функция потерь:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \underbrace{\|x_k - g^{-1}(g(x_k))\|_{\text{MSE}}}_{\text{восстановление}} + \underbrace{\|x_{k+1} - g^{-1}(K_m g(x_k))\|_{\text{MSE}}}_{\text{предсказание}} \\ & + \underbrace{\|g(x_{k+1}) - K_m g(x_k)\|_{\text{MSE}}}_{\text{линейность}} + \underbrace{\|g(\tilde{x}_{k+1}) - K_m g(x_k)\|_{\text{MSE}}}_{\text{шум}} \\ & + \underbrace{\|g(\tilde{x}_{k+1}) - g(x_{k+1})\|_{\text{MSE}}}_{\text{замена}} \end{aligned} \quad (6)$$

Результаты обучения

Модель обучалась на наборе из 151545 векторов состояний, валидационный набор содержал 50344 вектора. Использовалась ранняя остановка (Early Stopping) для контроля обучения, оптимизация проводилась алгоритмом Adam со скоростью обучения 1×10^{-6} .

Псевдосходимость достигнута на 81 эпохе, с минимальными значениями потерь 0.351 (тренировочный набор) и 0.399 (валидационный набор).

На рисунках 2 и 3 показаны реальное развитие пузыря из валидационного набора и одношаговый прогноз его состояния с использованием начальной температуры соответственно. Полученные результаты свидетельствуют о значительной способности модели к обобщению. Несмотря на то, что моделью использовалась только одна переменная, её прогнозы хорошо согласуются с реальной динамикой развития температурного поля. Кроме того, даже с ограниченными знаниями о динамике модель может выполнять одношаговые предсказания, используя только начальное состояние.

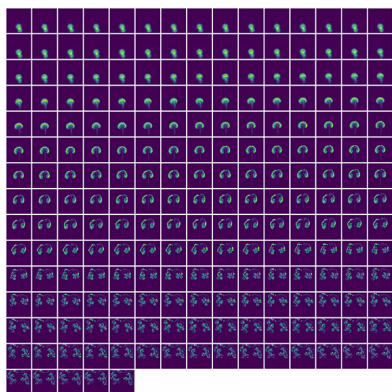


Рис. 2: Оригинальное развитие пузыря из валидационного набора данных.

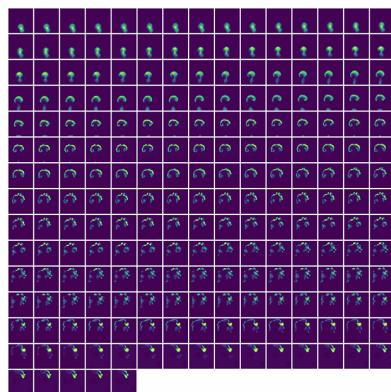


Рис. 3: Однократное предсказание с использованием модели при тех же начальных условиях.

Заключение

В данной работе рассмотрен подход к линейной аппроксимации сложных нелинейных процессов в динамике атмосферы с использованием оператора Купмана. Актуальность выбранной тематики обусловлена сложностью анализа и прогнозирования атмосферных явлений, что имеет важное значение для метеорологии, климатологии и смежных областей.

Для этого был сформирован синтетический набор данных, моделирующий эволюцию температуры в идеализированной атмосфере. Была реализована модель, способная эффективно находить пространство, где оператор Купмана действует линейно. После обучения модели на сгенерированных данных было проведено сравнение прогноза модели с данными из валидационной выборки. Результаты показали, что даже при использовании лишь одного канала (температуры) архитектура успешно улавливает ключевые закономерности динамики. Предсказанные одноступенчатые приращения состояния хорошо согласуются с оригинальными данными, что свидетельствует о способности модели воспроизводить краткосрочную динамику атмосферы с помощью линейного оператора.

Список литературы

- [1] D. Millard, A. Carr, and S. Gaudreault. Deep Learning for Koopman Operator Estimation in Idealized Atmospheric Dynamics. *arXiv preprint*,

2024. arXiv:2409.06522.
- [2] M. Budisic, R. Mohr, and I. Mezic. Applied Koopmanism. *Chaos*, 22(4):047510, 2012. DOI:10.1063/1.4772195.
 - [3] M. J. Colbrook, I. Mezić, and A. Stepanenko. Limits and Powers of Koopman Learning. *arXiv preprint*, 2024. arXiv:2407.06312.
 - [4] S. Gaudreault, M. Charron, V. Dallerit, and M. Tokman. High-Order Numerical Solutions to the Shallow-Water Equations on the Rotated Cubed-Sphere Grid. *arXiv preprint*, 2022. arXiv:2101.05617.
 - [5] J. S. Hesthaven and T. Warburton. *Nodal Discontinuous Galerkin Methods: Algorithms, Analysis, and Applications*. Springer Science & Business Media, 2007. DOI:10.1007/978-0-387-72067-8.
 - [6] V. Dallerit, T. Buvoli, M. Tokman, and S. Gaudreault. Second-Order Rosenbrock-Exponential (Rosexp) Methods for Partitioned Differential Equations. *Numerical Algorithms*, 96(3):1143–1161, 2024. DOI:10.1007/s11075-023-01698-4.
 - [7] A. Robert. Bubble Convection Experiments with a Semi-Implicit Formulation of the Euler Equations. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 50(13):1865–1873, 1993. DOI:10.1175/1520-0469(1993)050<1865:BCEWAS>2.0.CO;2.
 - [8] B. Lusch, J. N. Kutz, and S. L. Brunton. Deep Learning for Universal Linear Embeddings of Nonlinear Dynamics. *Nature Communications*, 9:4950, 2018. DOI:10.1038/s41467-018-07210-0.
 - [9] K. He, X. Zhang, S. Ren, and J. Sun. Deep Residual Learning for Image Recognition. *2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, pages 770–778, 2016. DOI:10.1109/CVPR.2016.90.
 - [10] Y. Xiao, Z. Tang, X. Xu, X. Zhang, and Y. Shi. A Deep Koopman Operator-Based Modelling Approach for Long-Term Prediction of Dynamics with Pixel-Level Measurements. *IET Cyber-Systems and Robotics*, 5(1):e12149, 2023. DOI:10.1049/cit2.12149.