

УДК 551.509.328 : 519.216.3

В.Н. Хохлов, канд. геогр. наук

Одесский государственный экологический университет

КРАТКОСРОЧНЫЙ ПРОГНОЗ КОНЦЕНТРАЦИИ ПАРНИКОВЫХ ГАЗОВ МЕТОДАМИ ТЕОРИИ ХАОСА

Прогноз методами теории хаоса применяется к концентрациям метана и хлороформа на станции Мейс Хед. Показано, что даже простая методика построения модели дает удовлетворительные результаты прогноза. Сделан вывод о возможности использования такого подхода для временных рядов загрязняющих веществ в атмосфере.

Ключевые слова: Методы теории хаоса, Парниковые газы

Введение. Динамика изменений концентраций различных газов (в том числе и парниковых) в атмосфере вызывает интерес, по крайней мере, по двум причинам. Во-первых, имеется экологический аспект, связанный со значительной загрязненностью воздуха в промышленных центрах. Во-вторых, в моделях краткосрочного прогноза погоды учитываются процессы фотохимии (в модели *Agège-Aladin* такой модуль учитывает 168 реакций между 56 составляющими атмосферного воздуха и 51 реакцию фотодиссоциации). Внедрение этих процессов в прогностические системы увеличивает машинное время, требуемое для прогнозирования. Поэтому в последнее время существует тенденция к замене физических параметризаций методиками, не требующими знаний о физике или химии, обуславливающих процесс, что существенно уменьшает время расчета. Относительно концентраций отдельных парниковых газов, имеется множество физико-химических механизмов, определяющих динамику их изменений и действующих в широком диапазоне временных и пространственных масштабов, что и определяет сложность эволюции системы.

Хотя при исследовании сложных природных и физических систем часто применяются (линейные) стохастические методы, впечатляющее развитие нелинейных методов и быстро увеличивающееся количество методик для анализа нелинейных временных рядов вызвали своего рода методологическую революцию. Среди множества открытий и теорий, сделавших возможной такую революцию, «наука о хаосе», согласно которой видимый сложный нерегулярный режим может быть результатом простой детерминистической системы с немногими доминирующими нелинейными взаимозависимыми переменными, стала популярной почти во всех областях науки. Доказанность того, что система является хаотической, автоматически предполагает и ее детерминистичность и, как следствие, предсказуемость [1].

Ранее было показано [2], что для временных изменений концентраций некоторых парниковых газов имеет место низкоразмерный хаос, что позволяет применить для них прогноз методами теории хаоса. Целью настоящего исследования является оценка возможности применения такого подхода для краткосрочного прогноза концентраций метана (CH_4) и хлороформа (CHCl_3) на станции Мейс Хед на основе результатов, полученных в предыдущей работе [2].

Материалы и методика исследования. Используем здесь результаты эксперимента AGAGE на станции Мейс Хед, а именно временные ряды метана и хлороформа с шестичасовым осреднением за период с 3 марта 1994 г. по 30 сентября 2004 г. Более подробно эти данные описаны в предыдущей работе [2], а здесь приведем лишь их основные характеристики. Общая длина выборок составляет 15457, концентрации CH_4

измерялись в 10^{-3} млн $^{-1}$, а CHCl_3 – в 10^{-6} млн $^{-1}$. Первый из этих газов имеет как биогенное, так и антропогенное происхождение, а наличие второго определяется только деятельностью человека. Также было определено, что во временных изменениях концентраций этих газов прослеживается хаотический режим, причем времена задержки (τ) составляют 9 временных интервалов как для CH_4 , так и CHCl_3 , а размерности пространств вложения (d) равняются 7 и 5, соответственно. В этой работе проверим результаты восстановления размерности аттрактора с помощью алгоритма ложных ближайших соседних точек, предложенный Кеннелом и др. [3]

Суть этого метода основывается в поиске ответа на вопрос: когда будет исключено ложное пересечение орбиты самой себя вследствие проецирования аттрактора в пространство слишком низкой размерности. Другими словами, нужно определить, являются ли точки в размерности d ближайшими соседями самих себя. Чтобы определить размерность пространства вложения, нужно исследовать эту проблему в размерности $d = 1$, затем – $d = 2$ и т.д. пока не останется ложных ближайших соседних точек.

На рис. 1 представлены результаты расчетов для метана и хлороформа. Для обоих газов количество ложных ближайших соседних точек уменьшается с увеличением размерности вложения (d) и практически достигает нуля на значениях 7 для метана и 5 для хлороформа. Таким образом, полученный результат говорит о том, что восстановление размерности аттрактора в предыдущей работе было выполнено вполне корректно.

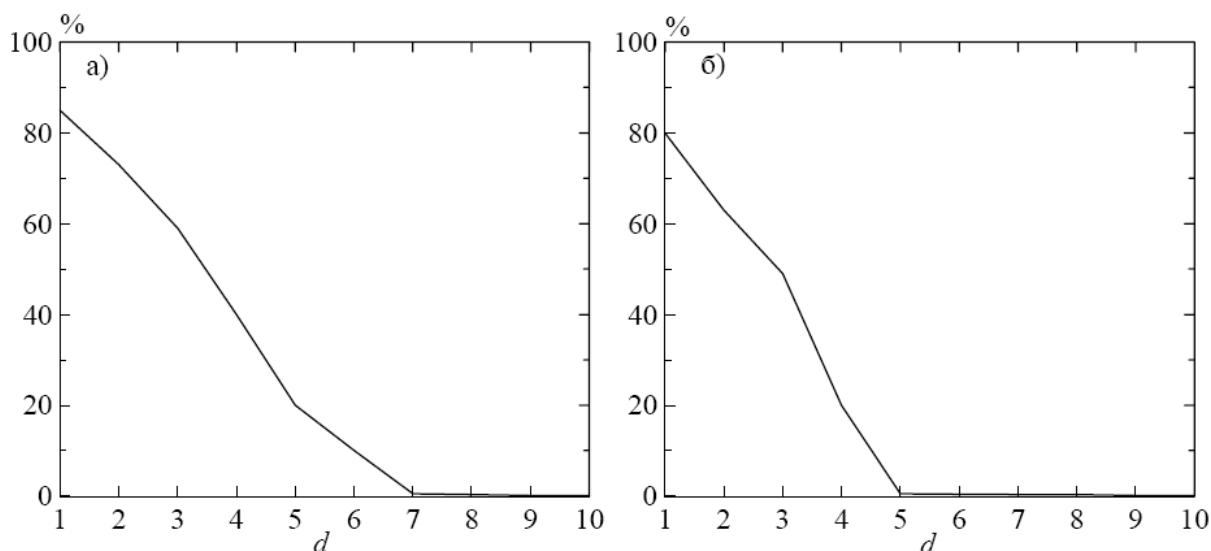


Рис. 1. Процентное содержание ложных ближайших соседних точек в зависимости от размерности аттрактора (d).

Результаты восстановления фазового пространства системы по данным наблюдений и дальнейшая классификация режима системы (как это сделано в [2]) интересны сами по себе. Однако следующая задача, заключающаяся в построении моделей и прогнозе будущих режимов системы, представляет еще больший интерес для исследователей. Основная идея, лежащая в основе решения такой задачи, очень проста: так как имеется информация о временной эволюции орбит $y(k)$ и эти орбиты лежат на компактном аттракторе в фазовом пространстве, то вблизи каждой такой орбиты существует окрестность точек, которые также эволюционируют под влиянием динамики системы в новые точки. Знание этой эволюции в окрестности точек фазового пространства может быть использовано для прогнозирования путем построения локального или глобального отображения с параметрами \mathbf{a} : $y \rightarrow \mathbf{F}(y, \mathbf{a})$, в котором эволюционируют все $y(k) \rightarrow y(k+1)$. Другими словами, зная, как эволюционируют соседние точки, можно использовать эту информацию для построения отображения и, затем, или продолжить

эволюцию последних точек, или интерполировать в любую новую точку фазовую пространства вблизи аттрактора вперед во времени. Схематически такой процесс представлен на рис. 2. Таким образом, задача сводится к определению параметров в отображении, для чего необходимо выбрать некоторый функционал.

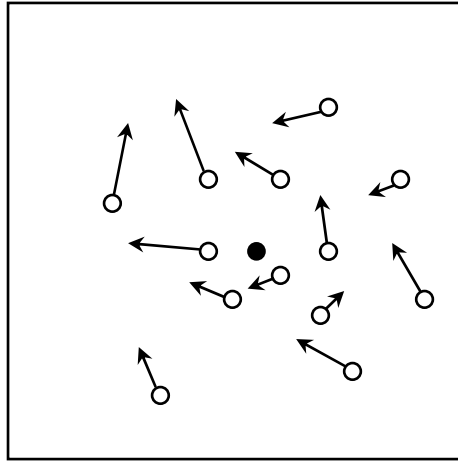


Рис. 2. Локальное отображение фазового пространства. Точка, для которой необходимо сделать прогноз, показана заполненным кружком. В общем случае, вектора имеют направления в d -мерном фазовом пространстве

Единственным способом определения функциональной формы является подгонка кривой, так как алгоритма определения функционала не существует [1]. В настоящей статье приведем лишь основные положения, используемые при подгонке кривой, а более детальная информация может быть найдена в обзорах Абарбанела и др. [1] и Шрейбера [4].

Предположим, что функциональная форма отображения уже выбрана, при этом использовались полиномы или другие базисные функции. Теперь, определим характеристику, которая является мерой качества подгонки кривой к данным и определяет, насколько точно совпадают $\mathbf{y}(k+1)$ с $\mathbf{F}(\mathbf{y}(k), \mathbf{a})$, назвав ее локальной детерминистической ошибкой:

$$\varepsilon_D(k) = \mathbf{y}(k+1) - \mathbf{F}(\mathbf{y}(k), \mathbf{a}). \quad (1)$$

Функцию стоимости для этой ошибки назовем $W(\varepsilon)$. Если отображение $\mathbf{F}(\mathbf{y}, \mathbf{a})$, которое мы строим, является локальным, то для каждой соседней к $\mathbf{y}(k)$ точки, $\mathbf{y}^{(r)}(k)$ ($r = 1, 2, \dots, N_B$),

$$\varepsilon_D^{(r)}(k) = \mathbf{y}(r, k+1) - \mathbf{F}(\mathbf{y}^{(r)}(k), \mathbf{a}), \quad (2)$$

где $\mathbf{y}(r, k+1)$ – точка в фазовом пространстве, к которой эволюционирует $\mathbf{y}(r, k)$. Для меры качества подгонки кривой к данным локальная функция стоимости имеет вид

$$W(\varepsilon, k) = \frac{\sum_{r=1}^{N_B} |\varepsilon_D^{(r)}(k)|^2}{\sum_{r=1}^{N_B} [\mathbf{y}(k) - \langle \mathbf{y}(r, k) \rangle]^2}, \quad (3)$$

а параметры, определенные посредством минимизации $W(\varepsilon, k)$, будут зависеть от \mathbf{a} .

Естественно, что первым шагом при построении модели должно быть определение размерности системы. Для исследуемых в настоящей работе временных рядов концентраций CH_4 и CHCl_3 это уже было сделано [2]. Если данные вложены в соответствующее фазовое пространство и размерность системы определена, то дальнейшая задача состоит в составлении детерминированного правила, лежащего в основе данных.

Наиболее простой и легкий нелинейный метод локального прогноза, называемый

«методом аналогов», заключается в следующем. Для того, чтобы спрогнозировать значение $y(k+1)$ на основе длинного временного ряда $y(j)$ ($j \leq k$), нужно найти ближайшую к $y(k)$ соседнюю точку $y(m)$ и затем предположить, что $y(m+1)$ является прогностическим значением для $y(k+1)$. По классификации Фармера и Сидоровича [5], такой подход называется аппроксимацией первого порядка. Ясно, что качество такого «прогноза» может быть улучшено. Например, можно взять совокупность ближайших к $y(k)$ соседних точек, усреднить значения в них и считать прогнозом такое отображение. Далее, такой подход может быть усовершенствован до подгонки кривой методом наименьших квадратов для локального линейного отображения $y(k)$ в $y(k+1)$, используя достаточное количество соседних точек для меры $\|\bullet\|$,

$$W = \sum_{r=1}^{N_B} \|y(r, k+1) - a^{(r)} y^{(r)}(k) - b^{(r)}\|^2. \quad (4)$$

Выражение (4) представляет собой аппроксимацию второго порядка. Чтобы установить больший вклад самых близких точек, сумма в (4) может быть взята с учетом статистического веса слагаемых. Именно такой подход использовался в дальнейшем в настоящей работе. Отметим, что отображение может быть представлено в форме полинома высокого порядка [5, 6]. Более того, в настоящее время развиваются методы прогноза, основанные на использовании нейросетей и алгоритмов генетического обучения [7].

Результаты исследования и их анализ. Для использования прогноза методами теории хаоса необходимо решить еще одну задачу, которую можно сформулировать так: сколько ближайших соседних точек (NN) нужно взять, чтобы результаты прогноза были удовлетворительными. Для решения этой задачи можно предварительно сделать несколько оценок для различного количества NN, а затем рассчитать коэффициент корреляции между фактическими и прогностическими данными. Как правило, коэффициент корреляции увеличивается, достигает некоего максимума [8]. В данной работе, этот подход был использован для прогноза на четыре временных интервала (24 часа) для 100 последних точек временных рядов метана и хлороформа.

На рис. 3 представлены фактические и прогностические величины для различного числа NN. Хорошо видно, что с увеличением числа ближайших соседних точек прогностическая кривая, как правило, приближается к фактической. Результаты расчета коэффициента корреляции представлены в табл. 1. Как упоминалось ранее, коэффициент корреляции растет с увеличением числа NN и достигает некоторого значения, после чего его изменения не существенны. Так как количество данных во временных рядах в нашем случае велико, то максимума коэффициент корреляции может достигнуть при очень большом количестве ближайших соседних точек, однако брать их все для построения модели прогноза не имеет смысла, так как качество самого прогноза, при этом, существенно не улучшится. Поэтому для последующих расчетов было выбрано NN = 90 для метана и NN = 200 для хлороформа.

Таблица 1 - Коэффициент корреляции (r) между фактическим и прогностическим (на 24 часа) рядами в зависимости от числа ближайших соседних точек (NN) для метана и хлороформа на станции Мейс Хед с 06.09 по 30.09.2004 г.

	метан			хлороформ		
NN	30	90	140	30	200	250
r	0,95	0,98	0,99	0,83	0,91	0,92

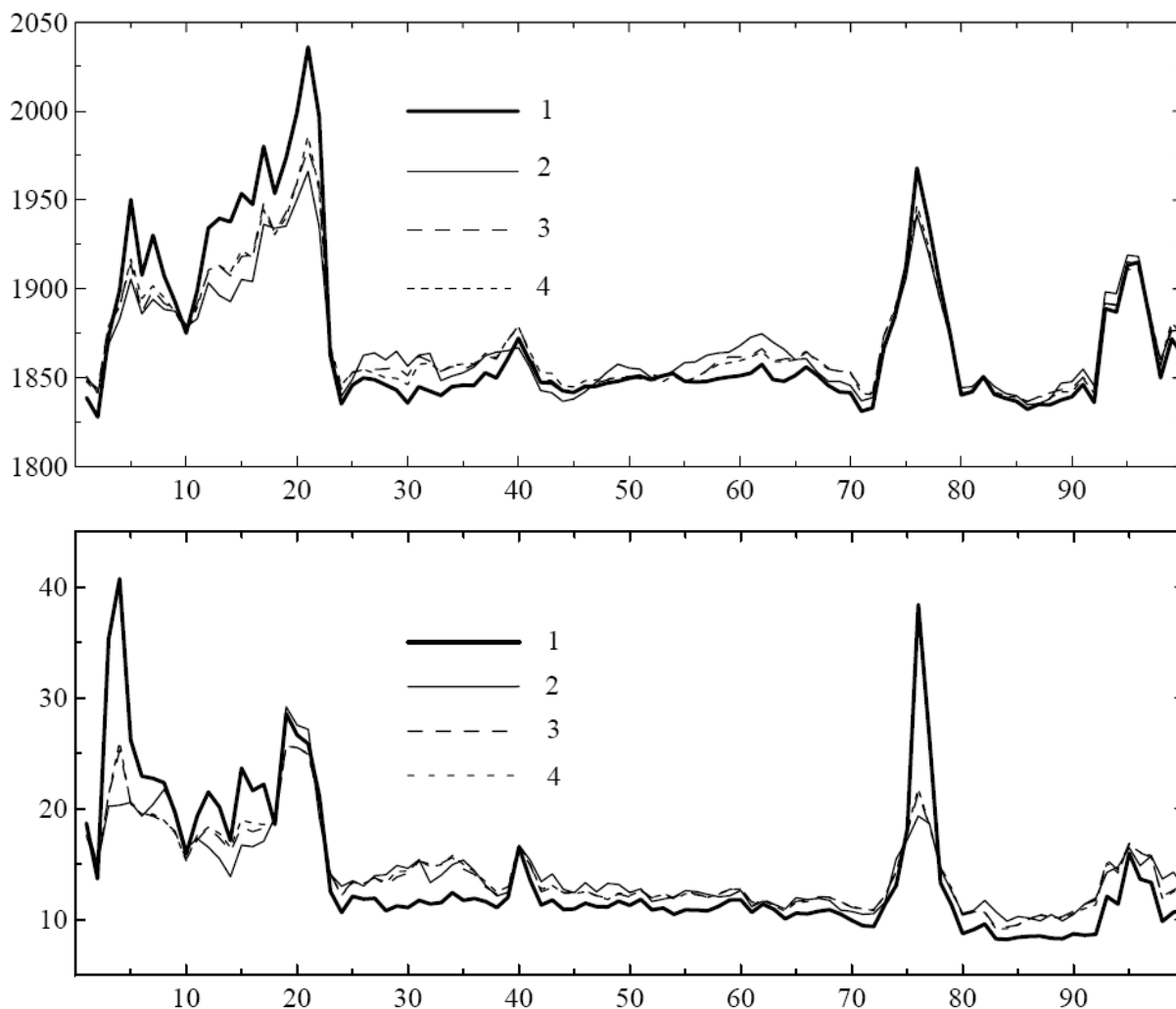


Рис. 3. Фактические и прогностические (на 24 часа) кривые концентраций метана (вверху) и хлороформа (внизу) для станции Мейс Хед с 06.09 по 30.09.2004 г. (1) – факт, (2) – прогноз с учетом 30 ближайших соседних точек, (3) – прогноз с учетом 90 ближайших соседних точек для метана и 200 – для хлороформа, (4) – прогноз с учетом 140 ближайших соседних точек для метана и 250 – для хлороформа. Ось X – порядковый номер 6-часового интервала, начиная с 00 часов 06.09.2004.

На рис. 3 видно, несмотря на то, что практически все пики на фактической кривой повторяются на прогностической, разница между прогнозом и фактическими данными в случае повышенных концентраций газов может быть достаточно большой. Тем не менее, результаты такого прогноза можно считать вполне удовлетворительными.

На рис. 4 представлены отклонения прогностических значений от фактических для различной заблаговременности прогноза – 6, 12, 18 и 24 часа, а в табл. 2 представлены оценки некоторых характеристик успешности прогноза. Можно видеть, что с уменьшением заблаговременности улучшается качество прогноза, т.е. результаты метода очень похожи на те, что могут быть получены другими методами.

Для того, чтобы проверить, насколько построенная модель отображает весь временной ряд, прогноз также был сделан для 500 случайно выбранных сроков. Тот факт, что оценки для этого случая несколько лучше, чем для периода с 06.09 по 30.09.2004 г., можно объяснить достаточно сложным поведением концентраций в последний период (на рис. 3 видно, что наблюдалось пять случаев резкого увеличения концентраций).

Таблица 2 - Коэффициент корреляции (r) между фактическим и прогностическим рядами и среднеквадратическая ошибка прогноза (σ) для прогноза различной заблаговременности для метана и хлороформа на станции Мейс Хед с 06.09 по 30.09.2004 г., а также для 500 случайно выбранных точек ряда

	метан				хлороформ			
	6 часов	12 часов	18 часов	24 часа	6 часов	12 часов	18 часов	24 часа
	100 сроков 06.09 по 30.09.2004 г.							
r	0,99	0,99	0,99	0,98	0,99	0,97	0,94	0,91
σ	4,43	8,07	11,65	14,82	1,33	2,27	2,96	3,45
	500 случайно выбранных точек ряда							
r	0,99	0,99	0,99	0,98	0,99	0,98	0,96	0,94
σ	2,70	5,17	7,41	9,53	0,94	1,65	2,18	2,63

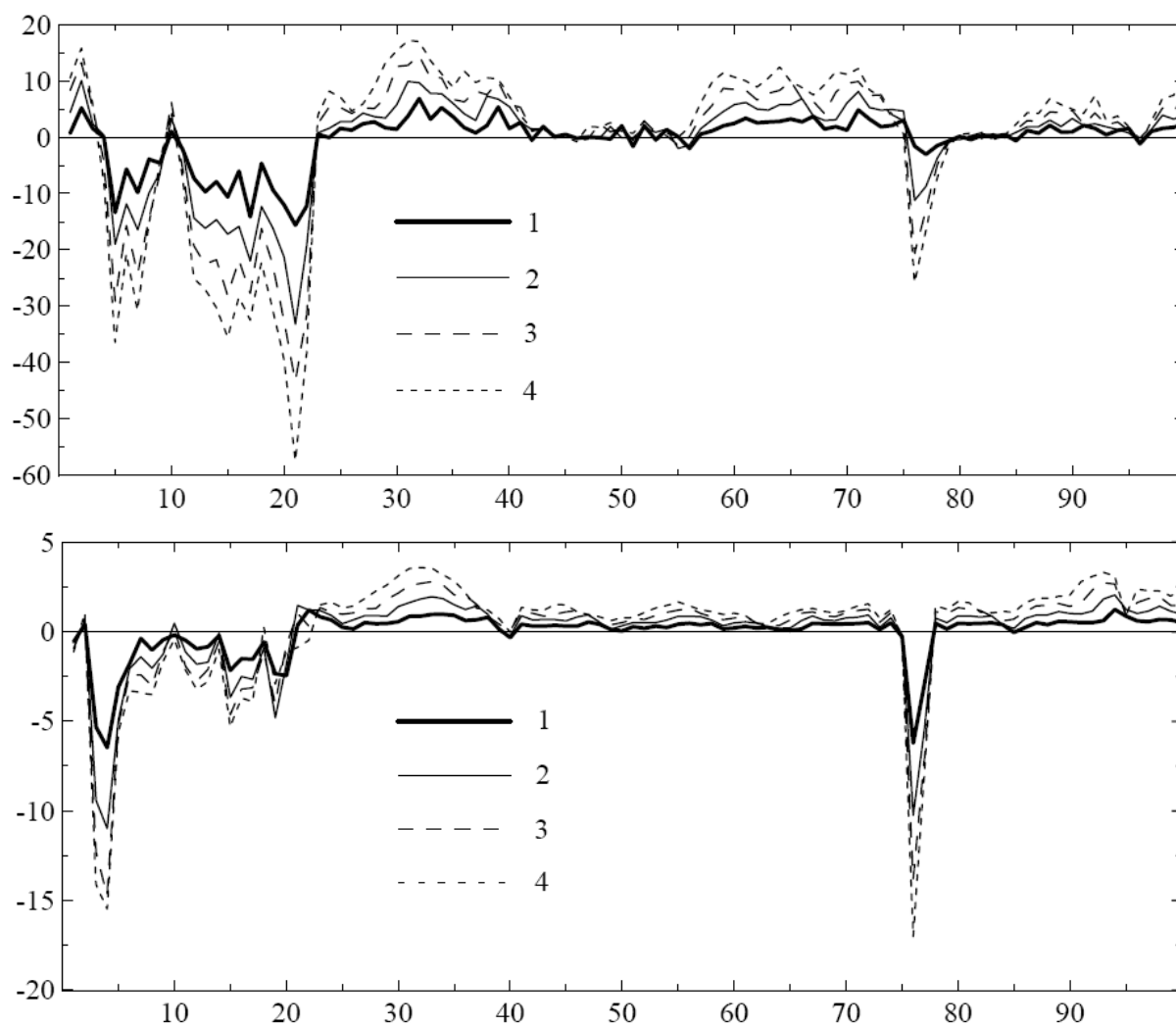


Рис. 4. Отклонения прогностические кривых от фактических для концентраций метана (вверху) и хлороформа (внизу) для станции Мейс Хед с 06.09 по 30.09.2004 г.

(1) – прогноз на 6 часов, (2) – прогноз на 12 часов,
(3) – прогноз на 18 часов, (4) – прогноз на 24 часов.

Ось X – порядковый номер 6-часового интервала, начиная с 00 часов 06.09.2004.

Выводы. Представленные в настоящей работе результаты могут рассматриваться как пример вполне удовлетворительного краткосрочного прогноза концентраций газов в атмосфере. Здесь можно отметить и тот факт, что прогноз методами теории хаоса достаточно хорошо работает в случаях, когда происходит увеличение концентраций, по крайней мере, практически все тенденции к такому увеличению выявлены при прогнозировании. Последнее позволяет использовать его в качестве альтернативы для обычных методов. Кроме того, в настоящем исследовании был применен самый простой подход к аппроксимации функциональной зависимости (см. раздел 2) и можно надеяться, что использование более сложных методик улучшит качество прогноза.

Список литературы

1. *Abarbanel H.D.I., Brown R., Sidorowich J.J. and Tsimring L.Sh.* The analysis of observed chaotic data in physical systems // *Rev. Mod. Phys.* 1993. – Vol. 65. – P. 1331-1392.
2. *Хохлов В.Н.* Хаос и предсказуемость концентраций парниковых газов в атмосфере // *Вісник Одеського державного екологічного університету.* 2005. – Вип. 1. – С. 11-19.
3. *Kennel M.B., Brown R., Abarbanel H.D.I.* Determining embedding dimension for phase-space reconstruction using a geometrical construction // *Phys. Rev. A.* 1992. – Vol. 45. – P. 3403-3411.
4. *Schreiber T.* Interdisciplinary application of nonlinear time series methods // *Phys. Rep.* 1999. – Vol. 308. – P. 1-64.
5. *Farmer J.D., Sidorowich J.J.* Exploiting chaos to predict the future and reduce noise // *Evolution, Learning, and Cognition / Y.C. Lee (Ed.).* – Singapore: World Scientific, 1988. – P. 277-330.
6. *Casdagli M.* Nonlinear prediction of chaotic time series // *Physica D.* 1989. – Vol. 35. – P. 335-356.
7. *Goldberg D.E.* Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning – Reading: Addison-Wesley, 1989. – 412 p.
8. *Islam M.N., Sivakumar B.* Characterization and prediction of runoff dynamics: a nonlinear dynamical view // *Adv. Water Resour.* 2002. – Vol. 25. – P. 179-190.

Короткостроковий прогноз концентрацій парникових газів методами теорії хаосу. Хохлов В.М.

Прогноз методами теорії хаосу застосовується до концентрацій метану та хлороформу на станції Мейс Хед. Показано, що навіть проста методика побудови моделі дає задовільні результати прогнозу. Зроблено висновок про можливість застосування такого підходу для часових рядів забруднюючих речовин в атмосфері.

Ключові слова: Методи теорії хаосу, Парникові гази

Short-term forecast for greenhouse gases concentration by nonlinear prediction method. Khokhlov V.N.

Nonlinear prediction method is used to concentrations of methane and chloroform at Mace Head. It is shown that even though the simple procedure, which used to construct a model, yields satisfactory results. It is concluded that such an approach can be used for time series of air pollutants in the atmosphere.

Key words: Nonlinear prediction method, Greenhouse gases