

MEMO                    08/M08.009  
Datum                    29-01-2008  
Auteur(s)                Bas van 't Hof  
Onderwerp                Instabiliteiten in de berekening van een Kalman filter

## Documentinformatie

Versie	Auteur	Datum	Opmerkingen	Review
0.0	BvtH	29-01-2008	Concept	JD
0.9	BvtH	05-02-2008	Review JD en suggestie van nieuwe weging verwerkt	
Bestandslocatie:		/home/vortech/Memos		

## 1 Inleiding

Melding `m336035` betreft een instabiliteit die optreedt in de berekening van een Kalman filter met het RRSQRT-algoritme. Deze berekening wordt uitgevoerd door Ron van Dijk voor het Havenbedrijf.

Hoewel de berekening stabiel blijft met de versies `simona0609` en `simona0702`, treedt met de nieuwere versie `simona0709` een instabiliteit op, waardoor het programma wordt afgebroken.

In dit memo doe ik verslag van mijn bevindingen van het onderzoek dat ik heb uitgevoerd naar de oorzaak van de instabiliteit.

## 2 Reproducieren van de fout

Gelukkig is het gelukt om de fout op te doen treden op onze computer `vortech25`, nadat ons de invoer was toegestuurd.

Doordat tijdens de berekening enige debug-uitvoer is gegenereerd, konden na deze eerste berekening al enkele waarnemingen worden gedaan met betrekking tot de berekening:

- De nauwkeurigheid van de berekening lijdt sterk aan de gebruikte **SMOOTHING**. Dit probleem wordt uitgelegd in Sectie 3. Ook worden in Sectie 3 suggesties gegeven waarmee een nauwkeuriger berekening kan worden verkregen.
- De voorspelde onzekerheid in de berekende zoutconcentraties loopt sterk op rond tijdstap 175. Dit is de eerste waarde die sterk oploopt in de uitvoer.

De voorspelde onzekerheden in de concentraties worden extreem groot in tijdstap 240. De andere variabelen volgen kort daarna, waarna de som wordt afgebroken.

Het lijkt er dus sterk op dat de transport-berekening de oorzaak is van de optredende instabiliteit. De gevolgen van het gebruik van SMOOTHING moet echter ook worden onderzocht.

Een eenvoudig uit te voeren test is de zogenaamde Okalman-test, die wordt uitgelegd in Sectie 4. Met deze test kunnen op eenvoudige wijze fouten in de programmatuur worden gedetecteerd. Versie `simona0709` zakte voor de Okalman-test. De test is niet uitgevoerd voor de versie `simona0702`. Een derde mogelijke oorzaak kon dus worden toegevoegd aan het lijstje:

- Er zit een fout in de programmatuur, waardoor de Okalman-test niet lukte. Deze fout kan de oorzaak zijn van de instabiliteit.

De drie gevonden problemen in de berekening zijn bestudeerd en in de volgende Secties worden de bevindingen gepresenteerd.

### 3 SMOOTHING in het Kalman filter

In de Kalman-berekeningen van WAQUA kan gebruik worden gemaakt van het keyword SMOOTHING. Dit maakt het mogelijk om ook de metingen van een later tijdstip te gebruiken om een betere schatting voor de randvoorwaarden te verkrijgen. De manier waarop dit wordt gerealiseerd is eenvoudig. In Sectie 3.1 wordt deze werking eerst uitgelegd, waarna in Sectie 3.2 een ongewenst effect van het gebruik van smoothing wordt besproken. In Sectie 3.2 worden ook enkele suggesties gegeven voor het verhelpen van dit ongewenste effect.

Ook in een berekening zonder smoothing treedt echter nog steeds de instabiliteit op waarvan in deze melding sprake is bij gebruik van de nieuwe versie `simona0709`, terwijl de berekening nog steeds stabiel is bij gebruik van de oudere versie `simona0702`. Er moet dus verder worden gezocht naar de oorzaak van de instabiliteit.

#### 3.1 Werking van 'smoothing' in het Kalman filter

Om de werking van 'smoothing' uit te leggen, wordt eerst de werking van het Kalman filter kort beschreven:

- *Bij een Kalman-berekening wordt niet zozeer een voorspelling gedaan van de stromings-toestand in een bepaald gebied, als wel een voorspelling van de kansverdeling van de toestand. Wanneer er metingen beschikbaar zijn, kan dan de voorwaardelijke kansverdeling worden berekend. Dat is de kansverdeling van de stromingstoestand in het gebied, gegeven de gevonden metingen.*

*De voorwaardelijke kansverdeling is altijd smaller dan de onvoorwaardelijke, wat wil zeggen dat de onzekerheden kleiner zijn. Daarom is de voorwaardelijke verwachtingswaarde een nauwkeuriger benadering van de stromingstoestand dan de onvoorwaardelijke.*

Men kan zich voorstellen dat de voorwaardelijke verwachtingswaarde een enigszins grillig verloop in de tijd doormaakt. Immers, vlak na een meting is de benadering gebaseerd op een meting meer dan vlak ervoor.

In het Kalman-filter worden alleen de metingen tot op het gesimuleerde tijdstip verwerkt in de voorwaardelijke kansverdeling, omdat het veel meer rekentijd en geheugen kost om de voorwaardelijke kansverdeling te berekenen voor de metingen die nog moeten komen. Door handig gebruik te maken van het begrip 'stromingstoestand', kunnen echter toch de toekomstige metingen worden gebruikt voor het verkrijgen van extra nauwkeurige benaderingen van de randvoorwaarden:

- *De 'stromingstoestand' bestaat normaal gesproken uit de waterstanden, stroomsnelheden, concentraties, temperatuur en turbulente grootheden in het hele domein, alsmede (de fout in) de randvoorwaarde en het voorgeschreven windveld.*

*Het is echter mogelijk om ook de randvoorwaarden van eerdere tijdstappen in de toestand op te nemen. De 'mechanica' van dit onderdeel van de toestand is eenvoudig: de 'huidige' randvoorwaarden van nu zijn de 'vorige' in de volgende tijdstap enzovoort.*

*Wanneer de voorwaardelijke kansverdeling van de 'toestand' nu wordt berekend, worden de metingen tot op 'nu' gebruikt om een zo goed mogelijke benadering te krijgen van de 'huidige' toestand. Hierin zitten echter de randvoorwaarden van 'enkele tijdstappen terug'.*

*Bekijken we het van de andere kant, dan zitten in de 'toestand van straks' dus de voorwaardelijke verwachtingswaarden van de 'randvoorwaarden van nu', waarin de 'metingen van straks' zijn verwerkt.*

Wanneer de metingen enige tijd in de toekomst worden gebruikt, vertonen de benaderde randvoorwaarden een gladder verloop in de tijd, omdat de toekomstige metingen minder invloed hebben op de randvoorwaarden. Het effect van plotseling een meting meer is daardoor kleiner. Dit verklaart de naam 'smoothing'.

Een belangrijke opmerking is, dat het gebruik van smoothing geen enkel effect heeft op de benaderingen van alle andere onderdelen van de toestand. Alleen de randvoorwaarden krijgen een extra behandeling, maar deze extra behandelde randvoorwaarden worden niet gebruikt in de berekening. Wel kunnen ze met het programma `getser` worden opgevraagd, en gebruikt in een volgende berekening, met of zonder Kalman filter. Het gebruik van een Kalman filter in combinatie met reeds gefilterde randvoorwaarden is uiteraard theoretisch 'verboden' maar zou mogelijk in de praktijk nut kunnen hebben.

### 3.2 Gevolgen van smoothing en suggesties voor verbeterd gedrag

In de vorige sectie is uitgelegd wat het nut kan zijn van het gebruik van 'smoothing' in een Kalman filter: de berekende waterstanden en stroomsnelheden worden niet beter of slechter, maar het is mogelijk om een mogelijk betere benadering te krijgen voor de randvoorwaarden, die in een volgende simulatie gebruikt kan worden en die mogelijk gladder verloopt in de tijd.

Het gebruik van 'smoothing' heeft echter ook een nadeel, en dat heeft te maken met de gebruikte methode om de kansverdeling weer te geven. Het gebruikte algoritme om de kansverdeling weer te geven, heet 'RRSQRT-algoritme'. In het kort komt het er op neer dat er elke tijdstap onzekerheden worden verwaarloosd, omdat het onthouden van alle onzekerheden te veel geheugen en rekentijd vergt. De onzekerheid wordt opgeslagen in een tevoren gekozen aantal 'modes', en alles wat niet in de modes past, wordt verwaarloosd.

Uiteraard wordt er zo weinig mogelijk verwaarloosd, om een zo goed mogelijke benadering te houden van de eigenlijke onzekerheid. Voor het beoordelen van de hoeveelheid verwaarloosde onzekerheid is het 'error budget' ingevoerd: een maat van de totale onzekerheid. De verwaarlozingen worden zodanig uitgevoerd, dat het error budget zo weinig mogelijk kleiner wordt ten gevolge van de verwaarlozing.

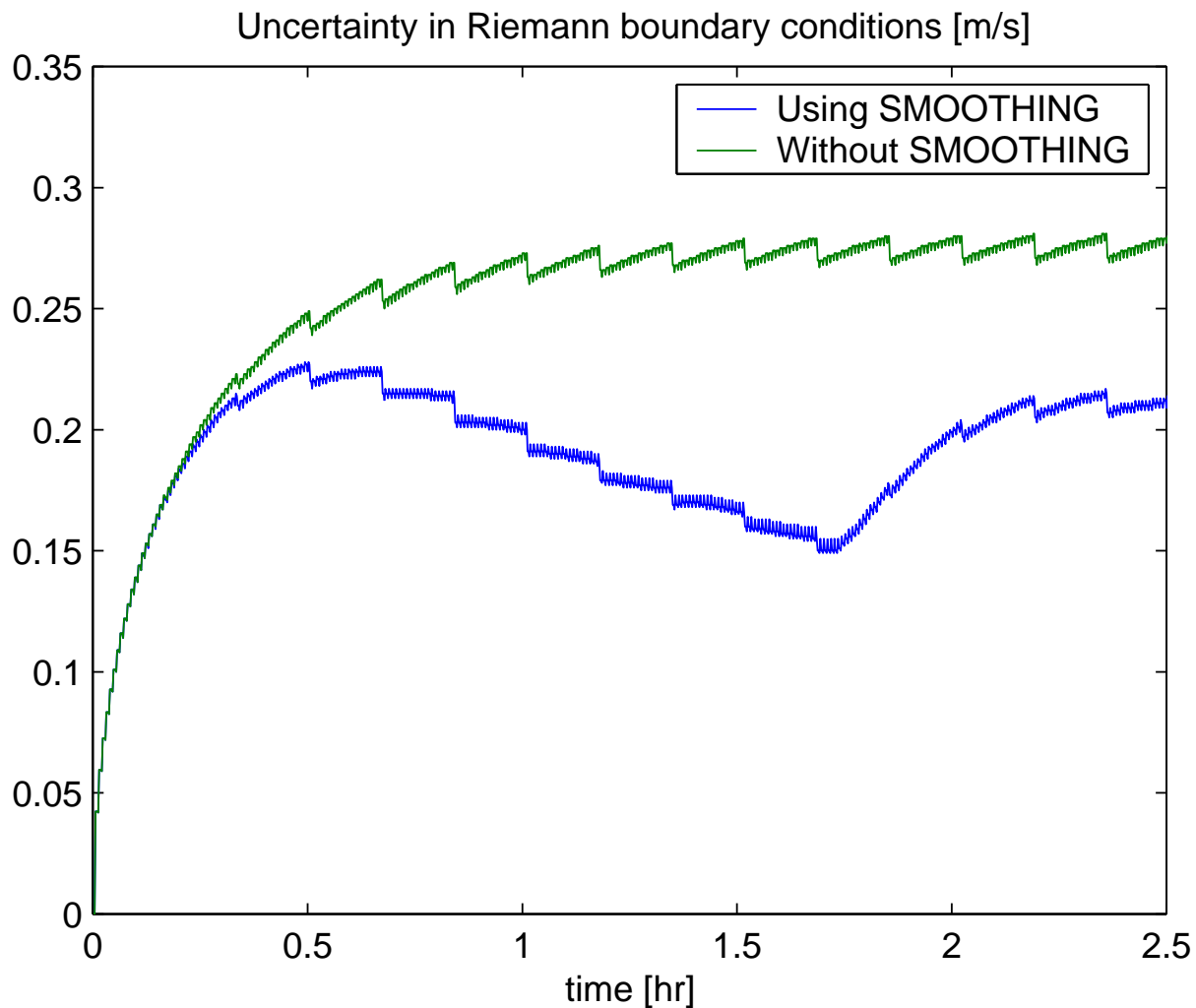
In berekeningen met smoothing bestaat het error budget voornamelijk uit de onzekerheid in de randvoorwaarden uit eerdere tijdstappen, die op de verdere resultaten in de huidige berekening dus geen enkel effect heeft. In de berekening van het Havenmodel, waarin de problemen uit deze melding optreden, bestaat het error budget voor 98.5% uit onzekerheden in de 'oude' randvoorwaarden.

Als gevolg van de dominantie van smoothing in het error budget, wordt veel van de onzekerheid van alle andere onderdelen van de toestand verwaarloosd. Hierdoor wordt een heel vertekend beeld verkregen van de onzekerheden en wordt een slecht filter verkregen.

Het resultaat wordt getoond in Figuur 1. In deze berekening is de opgegeven onzekerheid 0.30m/s. Dat is de onzekerheid die de randvoorwaarden zouden bereiken als er geen metingen waren. In de berekening zonder smoothing blijft deze onzekerheid beperkt tot ongeveer 0.28m/s. Dit is lager dan de opgegeven onzekerheid ten gevolge van het gebruik van metingen en door verwaarlozing. In de berekening met smoothing daalt de berekende onzekerheid tot onder de 0.15m/s. Het verschil komt alleen door verwaarlozing van de onzekerheden.

Het is belangrijk om het geconstateerde effect -relevante informatie wordt verwaarloosd- tegen te gaan. In overleg met Nils van Velzen, Johan Dijkzeul en Martin Verlaan zijn hiervoor vier alternatieven bedacht:

1. De weging van de onzekerheden kan zodanig worden aangepast, dat ze niet langer de berekening domineren.
2. Het aantal modes kan worden verhoogd.



Figuur 1: *Effect van het gebruik van SMOOTHING: een groot deel van de onzekerheid (bijvoorbeeld in de randvoorwaarden) wordt verwaarloosd.*

3. In een eerdere melding is een nieuw smoothing-algoritme ontwikkeld, waarin slechts de randvoorwaarden op relevante tijdsnivo's worden opgenomen in de toestand, en niet de randvoorwaarden op alle tussenliggende tijdsnivo's.

Dit algoritme zou kunnen worden opgenomen in de programmatuur.

4. De smoothing-tijd zou (veel) korter kunnen worden genomen.

In het overleg met genoemde mensen kwam naar voren dat de eerste mogelijkheid (aangepaste weging) de voorkeur geniet. De derde mogelijkheid (nieuw smoothing-algoritme) is niet gewenst, omdat het gaat om een relatief omvangrijke ontwikkeling, terwijl verdere ontwikkeling veel beter binnen COSTA kan worden uitgevoerd. De andere twee opties hebben duidelijk nadelige gevolgen voor de rekentijd of de modelleervrijheid.

Een verbeterde weging kan worden aangeboden met een nieuw keyword `SMOOTHING_WEIGHT` in de `siminp`-file. Hiermee kan worden opgegeven hoe belangrijk de gezamenlijke 'oude' randvoorwaarden zijn ten opzichte van de huidige randvoorwaarden. Wordt het keyword weggelaten, dan krijgt men het oude gedrag, waarin elk tijdsnivo van de 'oude' randvoorwaarden even belangrijk is als de huidige randvoorwaarden.

In de berekening van de huidige melding komt het oude gedrag overeen met de keuze `SMOOTHING_WEIGHT=200`, omdat de smoothing-tijd (100 minuten) overeenkomt met 200 tijdstappen (van een halve minuut).

Ondersteuning van een dergelijke verbeterde weging kan worden gemaakt als er een 'request for change' wordt ingediend.

Het probleem van verwaarlozing van relevante informatie verdient mijns inziens structurele aandacht. Het is verstandig om bij de berekening van een Kalman filter te controleren of voldoende modes zijn gebruikt, bijvoorbeeld door het filter te vergelijken met een filter dat is verkregen met de helft van het aantal modes. Als beide filters merkbaar van elkaar verschillen, zou de som moeten worden herhaald met het dubbele aantal modes.

#### 4 Fouten in de Okalman-test

Een eenvoudig uit te voeren test is de zogenaamde Okalman-test. Hierbij wordt, met slechts een mode, een Kalman berekening uitgevoerd, terwijl de onzekerheden alle gelijk worden gesteld aan nul. In zo'n berekening horen alle berekende onzekerheden te allen tijde gelijk te blijven aan nul.

Hiermee wordt een essentieel onderdeel van de programmatuur getest, namelijk of een tijdstap op correcte wijze kan worden herhaald. De onzekerheden in de oplossing worden door de programmatuur immers geanalyseerd door een tijdstap door te rekenen met een iets verstoorde toestand aan het begin. Het effect aan het einde van de tijdstap van de aangebrachte verstoring wordt niet correct berekend als de tijdstap niet correct kan worden herhaald.

Het bleek, dat de Okalman-test niet succesvol werd doorlopen in de versie `simona0702`. De reden hiervoor bleek te liggen in de verwerking van de barriers. De gevonden fouten zitten al lange tijd in de programmatuur.

Deze verwerking kon eenvoudig worden verbeterd in de nieuwste moederversie, maar niet in de versies `simona0702` en `simona0709`. De reden hiervoor is dat de Kalman-programmatuur onlangs, in het kader van melding `c76276` (ondersteuning van duikers en inlaatsluizen) flink is gemoderniseerd.

Correctie van de oude versies is niet gemakkelijk, en mogelijk niet nodig. Het verhelpen van de fouten in de Okalman-test neemt namelijk de oorzaak van de instabiliteit niet weg: de berekening is ook in de verbeterde moederversie instabiel, op dezelfde wijze als de berekening met versie `simona0709`. Er moet dus nog verder worden gezocht naar de oorzaak van de instabiliteit.

## 5 Flux-limiter tegen overshoots bij transport

In de transport-berekening wordt een flux-limiter gebruikt om over- en undershoots te voorkomen. Dit voorkomt het optreden van onrealistische concentraties op plekken waar maar weinig water staat, maar waar (nog) geen droogval plaatsvindt.

In de versie `simona0702` waren er twee routines die deze limiter berekenden: de routine `wasdfc` voor WAQUA-berekeningen en de routine `trsdif` voor TRIWAQ-berekeningen. Hoewel de structuur van de berekening enigszins verschilde, werd verondersteld dat de limiter in beide routines gelijk was.

In de uniformering van TRIWAQ en WAQUA, melding `c68666`, is de routine `wasdfc` opgeheven en bestond alleen de routine `trsdif` nog. De berekening van de flux-limiter is nadien nog afgesplitst naar de routine `trsf11`. De enig overgebleven implementatie was nu die van TRIWAQ, maar er werd geen effect van verwacht, omdat men veronderstelde dat de beide implementaties equivalent waren.

In deze melding is gebleken dat er een onvolkomenheid zat in de berekening van de flux-limiter, die er eerder, in routine `wasdfc`, niet was. Deze onvolkomenheid bestaat er uit, dat in de routine `trsf11` alleen wordt gekeken of het stoftransport tussen de controlevolumes  $(m, n)$  en  $(m, n+1)$  een onrealistische concentratie kan veroorzaken in het volume  $(m, n)$ . Er wordt echter niet gecontroleerd of er problemen verwacht worden in het volume  $(m, n+1)$ . Deze controle, die vroeger wel in WAQUA voorkwam, is toegevoegd aan de routine `trsf11`, zodat vanaf nu deze controle zowel in WAQUA als in TRIWAQ wordt uitgevoerd.

Deze verbetering heeft het gewenste effect: de berekening is niet langer instabiel, zoals te zien is in Figuur 2. De verbetering is, behalve in de moederversie, ook doorgevoerd in de versie `simona0709`, en ook daar wordt zo de instabiliteit verholpen. In deze versie zijn echter *niet* de fouten verholpen die de `Okalman`-test doen mislukken.

## 6 Conclusies

De belangrijkste bevindingen van dit memo zijn:

- De instabiliteit in de berekening wordt verholpen door een correctie in de transportmodule, die kan worden doorgevoerd in alle bekende versies.

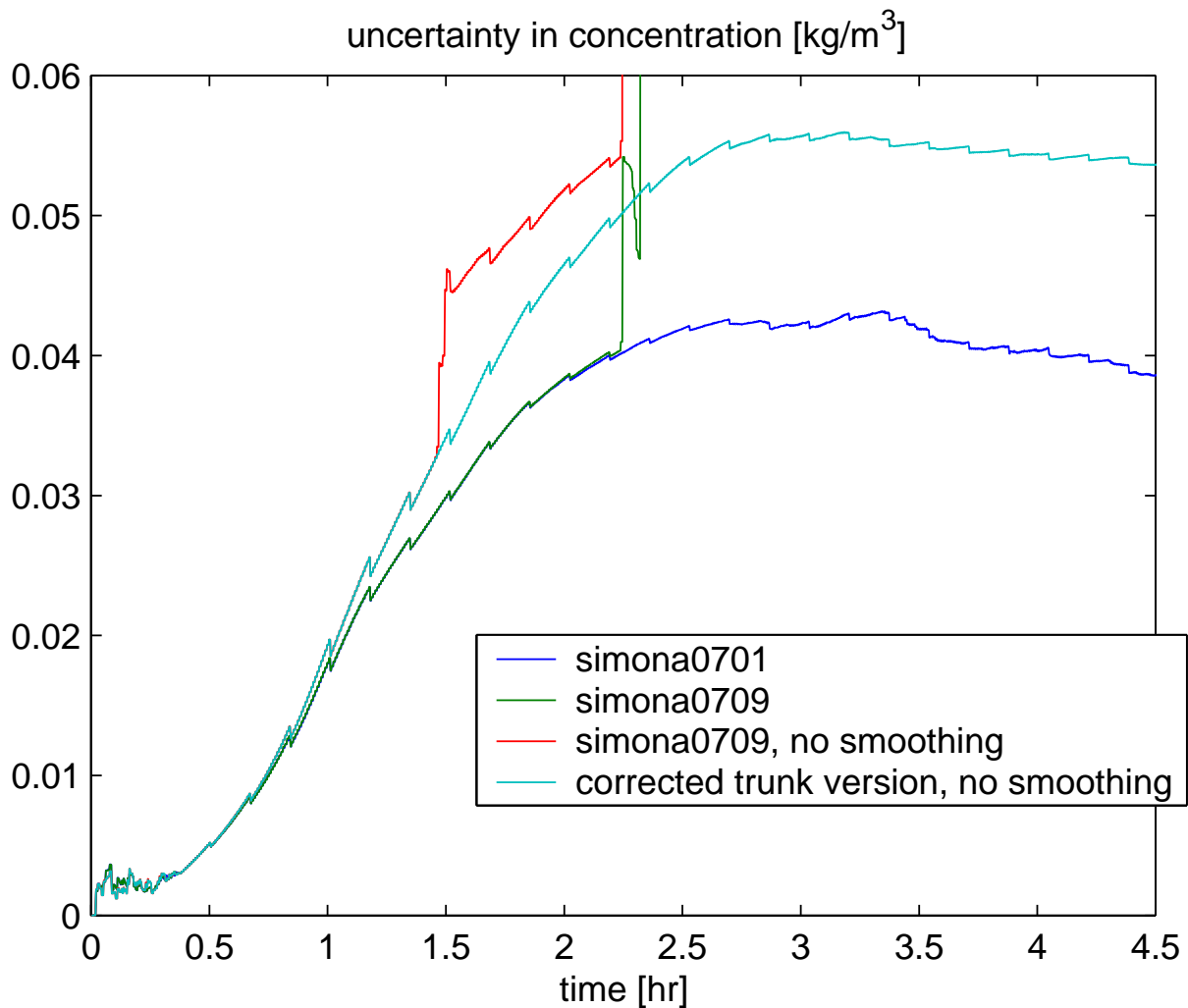
De verbeteringen zijn doorgevoerd in de versie `simona0709` en in de moederversie.

Als gevolg van deze verbetering zouden alle transportberekeningen stabiel moeten verlopen dan voorheen. WAQUA-berekeningen zouden even stabiel moeten verlopen als in de versies `simona0702` en eerder. TRIWAQ-berekeningen zouden vanaf nu net zo stabiel moeten verlopen als WAQUA-berekeningen voorheen.

- Enkele andere fouten in de programmatuur, die niet verantwoordelijk zijn voor de huidige instabiliteit, zijn verholpen in de moederversie;

- Een verbeterde weging is gewenst bij het gebruik van smoothing in Kalman berekeningen.  
Ondersteuning van een dergelijke verbeterde weging kan worden gemaakt als er een 'request for change' wordt ingediend.
- Het is verstandig om bij de berekening van een Kalman filter te controleren of voldoende modes zijn gebruikt, bijvoorbeeld door het filter te vergelijken met een filter dat is verkregen met de helft van het aantal modes. Als beide filters merkbaar van elkaar verschillen, zou de som moeten worden herhaald met het dubbele aantal modes.





Figuur 2: Voorspelde onzekerheden in de concentraties. Bij gebruik van de versie `simona0709` treedt steevast een instabiliteit op na enkele uren. Dit probleem is verholpen door een correctie in de moederversie. Ook hier is te zien dat bij gebruik van smoothing veel onzekerheid wordt verwaarloosd.