

1.13 Wiskunde en AI voor het simuleren van klimaat- en andere multischaalsystemen

Prof. dr. D.T. (Daan) Crommelin

Centrum Wiskunde & Informatica (CWI), Amsterdam
Korteweg-de Vries Instituut voor Wiskunde,
Universiteit van Amsterdam
cwi.nl/en/people/daan-crommelin

- Lezing gehouden voor de Koninklijke Maatschappij voor Natuurkunde 'Diligentia' te 's-Gravenhage op 17 maart 2025.
- Een video-opname van de lezing is te zien op www.natuurwetenschappen-diligentia.nl.

Samenvatting van de lezing

Voor het begrijpen of zelfs voorspellen van allerlei complexe fysische systemen, waaronder atmosferen en oceaanstromingen, zijn computers al vele jaren onmisbaar. Ook al zijn de onderliggende fysische wetmatigheden van zulke systemen bekend, met alleen pen en papier doorrekenen hoe die wetmatigheden leiden tot het complexe gedrag dat we waarnemen, is zelden mogelijk. Een belangrijke reden daarvoor is het zogeheten 'multischaalkarakter' van veel fysische systemen, gekenmerkt door de gecompliceerde interactie tussen microscopische (kleinschalige) en macroscopische (grootschalige) processen. Naast pen en papier maken onderzoekers daarom intensief gebruik van computersimulaties. Die simulaties zijn traditioneel gebaseerd op fysische wetmatigheden die aan de hand van wiskundige methoden worden omgezet naar berekeningen die een computer kan uitvoeren. Een nieuwe ontwikkeling is het gebruik van AI (artificiële intelligentie) in aanvulling op, of zelfs ter vervanging van, de fysisch-gebaseerde computermodellen. De inzet van AI-technieken in dit domein is veelbelovend maar werpt tegelijkertijd nieuwe wiskundige vragen op.

Inleiding

Achter het voorspellen van het weer en het simuleren van het klimaat gaat een wereld aan wiskunde schuil. De natuurkundige wetten die de stromingen van de atmosfeer en de oceanen bepalen, zijn geformuleerd als wiskundige vergelijkingen, zogeheten partiële differentiaalvergelijkingen [1]. Om die vergelijkingen op te lossen op een computer wordt gebruikgemaakt van een heel scala aan wiskundige methoden en technieken. De geldigheid en betrouwbaarheid van die methoden is weer gefundeerd in wiskundige analyse [2]. Het gebruik van computers is onmisbaar, omdat de vergelijkingen en het gedrag dat ze beschrijven te complex zijn om met alleen pen en papier op te lossen of te doorgronden. Atmosferen en oceaanstromingen zijn daarin geen uitzondering; er zijn allerlei andere fysische systemen die eveneens te complex zijn om zonder computer door te rekenen. Voorbeelden zijn te vinden in de chemie, biologie, natuurkunde en verder.

Multischaalsystemen

Het uiterst complexe gedrag van atmosfeer en oceanen hangt samen met hun zogeheten multischaalkarakter. Als we bijvoorbeeld naar de atmosfeer kijken, dan zien we patronen en fenomenen die zich over duizenden kilometers uit kunnen strekken, zoals grootschalige systemen met hoge- en lage-drukgebieden en de straalstroom, maar ook meer lokale, kleinschalige patronen zoals stormen en regenfronten. Zoomen we nog verder in dan zien we individuele wolken en lokale turbulentie, en op letterlijk microscopische schaal zijn bijvoorbeeld de vorming van regendruppels en ijsdeeltjes van belang. Al deze grootschalige en kleinschalige processen beïnvloeden elkaar en moeten in principe meegenomen worden bij het simuleren van de atmosfeer. Dat brengt een grote uitdaging met zich mee: de fysische principes achter deze processen zijn bekend, maar zelfs de allerkrachtigste hedendaagse computers zijn bij lange na niet in staat om al deze details ook expliciet mee te nemen in berekeningen van de gehele (globale) atmosfeer. Dit

multischaalkarakter zien we ook terug bij andere systemen dan atmosfeer en oceaan: de aanwezigheid van kleinschalige en grootschalige processen en fenomenen die elkaar wederzijds beïnvloeden speelt ook een belangrijke rol in bijvoorbeeld de biologie (van biochemische processen tot hele organismen) en de natuurkunde (zoals macroscopische materiaaleigenschappen die samenhangen met processen op atomaire schaal) [3, 4].

Fysische modellen: niet-lineaire wiskundige vergelijkingen

De fysische modellen van veel multischaalsystemen in de natuur zijn geformuleerd in de vorm van wiskundige vergelijkingen, in veel gevallen niet-lineaire partiële differentiaalvergelijkingen of gewone differentiaalvergelijkingen. Voor atmosfeer- en oceaanstromingen zijn die vergelijkingen hoofdzakelijk afgeleid van de Navier-Stokes-vergelijkingen (de partiële differentiaalvergelijkingen voor algemene gas- en vloeistofstromingen). Er zijn allerlei versies, gebaseerd op verschillende (combinaties van) fysische benaderingen en aannames die geschikt zijn voor atmosfeer of oceaan, zoals de hydrostatische benadering, de Boussinesq-benadering en de aanname van incompressibiliteit [1].

Ook met deze benaderingen en aannames, bedoeld om tot stelsels vergelijkingen te komen die wat makkelijker op te lossen zijn dan de algemene Navier-Stokes-vergelijkingen, blijft het onmogelijk om de

vergelijkingen met alleen pen en papier op te lossen. In plaats daarvan worden ze numeriek opgelost, op een computer. Dit vormt de basis voor het maken van simulaties en voorspellingen van atmosfeer- en oceaanstromingen. De wiskundige methoden om partiële differentiaalvergelijkingen op te lossen op de computer, en de fundamentele wiskundige onderbouwing en analyse van de geldigheid van deze methoden, behoren tot het deelgebied van 'scientific computing' en numerieke analyse binnen de wiskunde [2]. Twee belangrijke ingrediënten waarmee de vergelijkingen voor atmosfeer en oceaan numeriek worden opgelost zijn:

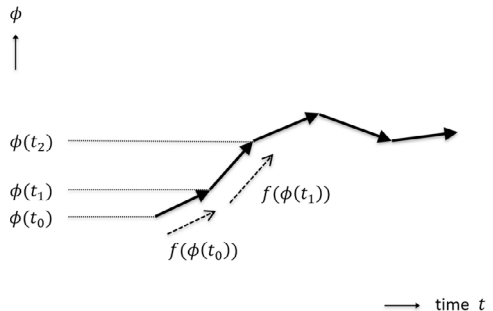
- ruimtelijke discretisatie, bijvoorbeeld door middel van een ruimtelijk grid of raster (figuur 1), waarmee de ruimte- en tijdsafhankelijke partiële differentiaalvergelijkingen worden omgezet in een (hoogdimensionale) set gekoppelde gewone differentiaalvergelijkingen die alleen nog van de tijd afhangen;
- tijdsdiscretisatie, waarmee de toestand van de stroming in stappen van bijvoorbeeld 10 minuten steeds verder vooruit in de tijd berekend wordt (figuur 2), aan de hand van de gewone differentiaalvergelijkingen verkregen uit de eerdergenoemde ruimtelijke discretisatie.

Parametrisatie

Zoals eerder genoemd, is het vanwege het multischaalkarakter niet mogelijk om alle details en kleinschalige processen expliciet mee te nemen in nume-



Figuur 1: Een raster voor ruimtelijke discretisatie in oost-west- en noord-zuid-richtingen.

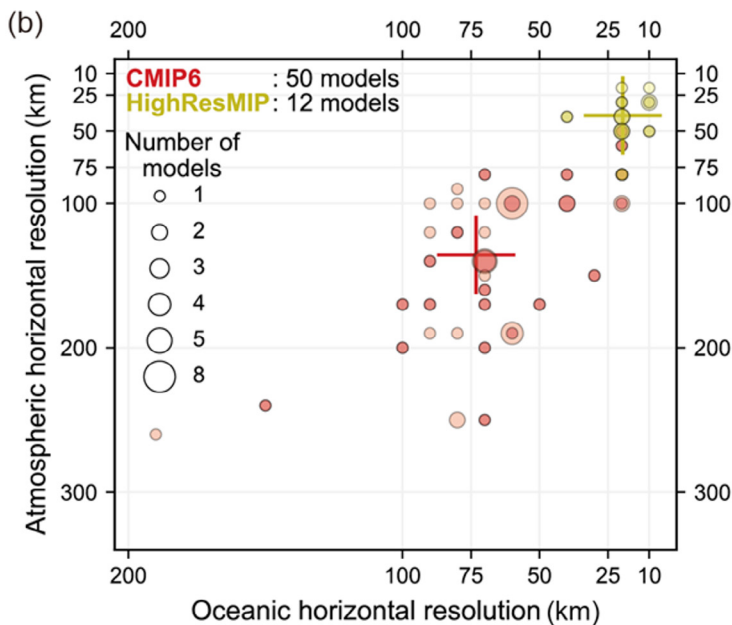


Figuur 2: Een voorbeeld van tijdsdiscretisatie, waarin de toestand van de stroming (ϕ) in stappen vooruit in de tijd berekend wordt, aan de hand van de tijdsafgeleide (f) van ϕ .

rieke simulaties van atmosfeer en oceaan. Het expliciet simuleren van kleinschalige processen vraagt om een verfijnde ruimtelijke discretisatie (oftewel hoge resolutie) en een kleine tijdstap. Hoe hoger de resolutie en hoe kleiner de tijdstap, hoe groter de benodigde rekenkracht. Met een te verfijnde discretisatie is de gevraagde rekenkracht te groot om met de beschikbare computers aan te kunnen. Om toch numerieke simulaties te kunnen doen die een voldoende groot ruimtelijk domein en tijdsinterval beslaan (bijvoorbeeld, in geval van klimaatsimulaties, atmosfeer- en oceaanstromingen over de gehele aarde, gedurende een tijdsinterval van 100 jaar) wordt gebruikgemaakt van zogeheten ‘parametrisaties’ in numerieke modellen. Een parametrisatie (ook wel ‘closure’ of sluiting genoemd) is een vereenvoudigde representatie van het effect van kleinschalige, niet expliciet meegenomen processen op de stroming op grotere schalen (die wel expliciet beschreven worden in het numerieke model).

Een voorbeeld is atmosferische convectie en wolkenvorming, het lokale proces waarbij relatief warme

lucht uit het onderste deel van de atmosfeer opstijgt en een deel van het vocht in de stijgende lucht condenseert en zo wolken vormt. Numerieke modellen die dit expliciet kunnen beschrijven hebben een horizontale ruimtelijke resolutie (afstand tussen rasterpunten) in de orde van 100 meter. Er kunnen simulaties mee worden gedaan op domeinen van bijvoorbeeld 100 km bij 100 km (horizontaal), maar niet over de hele aarde [5]. In klimaatmodellen zoals beschreven in het laatste IPCC-rapport [6] heeft de atmosfeer een horizontale resolutie die vele malen minder fijn is, tussen de 50 km en 300 km (CMIP6-modellen). Een kleinere groep modellen (HighResMIP) heeft hogere resoluties, tussen de 10 km en 50 km. In al deze modellen (figuur 3) moet convectie geparametriseerd worden. Alhoewel convectie en wolkenprocessen kleinschalig zijn is hun effect op het klimaat significant, en een verbetering van hun representatie in klimaatmodellen is van belang voor een beter begrip van klimaatverandering. Het 6e IPCC-rapport meldt hierover: “Clouds remain the largest contribution to overall uncertainty in climate feedbacks” [6].



Figuur 3: Modelresoluties van klimaatmodellen beschreven in het 6e IPCC-rapport.

Bron: [6], figuur 1.19

Data-gedreven modellen

Aangedreven door de grote ontwikkelingen in artificiële intelligentie (AI) in de afgelopen 5-10 jaar is er een nieuwe klasse van modellen aan het ontstaan voor het simuleren van weer en klimaat. Deze modellen worden 'getraind met data', gebruikmakend van moderne technieken voor 'machine learning' (ML) en AI [7, 8]. Een belangrijke bron van data hierbij is zogeheten 're-analysis data' zoals de ERA5-dataset, waarin historische observaties worden gecombineerd met een (fysisch) model om een dataset te creëren die de gehele atmosfeer omvat. De ERA5-dataset bestrijkt de periode sinds 1940, met een tijdstap van 1 uur [9].

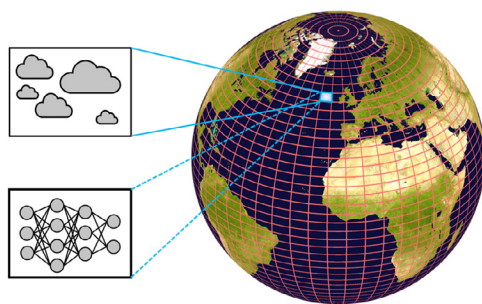
Deze data-gedreven modellen kunnen de fysisch-gebaseerde modellen aanvullen of zelfs als alternatief voor ze dienen. In het laatste geval wordt er met de data een AI-gebaseerd model getraind dat gebruikt kan worden voor voorspellingen of simulaties waar geen fysisch model meer aan te pas komt. De laatste drie jaar zijn er volledig op AI gebaseerde globale weersvoorspellingsmodellen ontwikkeld waarvan de kwaliteit van de voorspellingen (van circa 1 tot 10 dagen vooruit) zich in allerlei opzichten kan meten met die van de beste fysisch-gebaseerde voorspellingsmodellen (zie o.a. [10-12]). Ze maken gebruik van moderne, geavanceerde AI-technieken zoals 'graph neural networks', 'vision transformers' of 'Fourier neural operators'. Voor het trainen (leren uit data) van deze AI-modellen is vrij veel rekenkracht en tijd nodig, maar eenmaal getraind gaat het maken van voorspellingen met AI-modellen erg snel, met slechts beperkte rekenkracht.

Niettemin staande de snelle ontwikkelingen zijn er nog de nodige open vragen rondom AI-gebaseerde weersvoorspellingen. Onder andere het correct voorspellen van extreem weer door AI-modellen is een belangrijk punt van aandacht en onderwerp van intensief onderzoek (zie [13] voor een recent overzicht en meer details). Zoals al genoemd, hebben de AI-weersvoorspellingsmodellen geen fysisch model meer nodig om voorspellingen te maken als ze eenmaal getraind zijn, maar er is wel een fysisch model aan te pas gekomen om de ERA5-dataset te maken waarmee ze getraind worden.

Als het gaat om het inzetten van AI in klimaatmodellering wordt veel onderzoek gedaan naar zogeheten 'hybride' modellen, waarin AI gebruikt wordt in aanvulling op fysisch-gebaseerde modellen [7, 8]. In deze hybride modellen worden dus fysisch-gebaseerde en AI-gebaseerde modelcomponenten gecombineerd, een andere aanpak dan de hierboven beschreven volledig AI-gebaseerde modellen voor weersvoorspelling. AI wordt met name gebruikt om parametrisaties te leren uit data, en zo de representatie van kleinschalige processen in klimaatmodellen te verbeteren [14, 15]. De trainingsdata komt daarbij in veel gevallen van fysische modellen met hoge resolutie (gesimuleerd over een korte tijdsperiode en/of over een beperkt ruimtelijk domein, om de benodigde rekenkracht binnen de perken te houden). Om het effect van kleinschalige processen te representeren met AI-gebaseerde parametrisaties wordt gebruikgemaakt van neurale netwerken (figuur 4).

Conclusie

AI geeft ons een krachtige en snelgroeiende verzameling aan technieken om de uitdagingen aan te gaan die het modelleren en simuleren van multischaalsystemen met zich meebrengen. De combinatie van fysisch-gebaseerd en data-gebaseerd modelleren is veelbelovend en wordt ook buiten het domein van klimaatmodellering intensief onderzocht [17, 18]. De combinatie werpt ook nieuwe vragen op



Figuur 4: Processen zoals atmosferische convectie en wolkenvorming, die te kleinschalig zijn om met het globale raster beschreven te worden, moeten worden geparametriseerd. AI-gebaseerde parametrisaties gebruiken neurale netwerken om het effect van kleinschalige processen te representeren.

Figuur gebaseerd op [16]

die met verdere wiskundige analyse onderzocht moeten worden. Dit betreft onder andere vragen rondom de numerieke stabiliteit en het langetermijngedrag van hybride modellen, de manier van trainen van deze modellen (keuze van de kostfunctie of 'loss function' in ML [19]), uitlegbaarheid ('explainability') en het kwantificeren van onzekerheden van hybride en AI-gebaseerde modellen.

Referenties

1. Cushman-Roisin B., Beckers J.M., **2011**, *Introduction to geophysical fluid dynamics: physical and numerical aspects*, 2nd ed., Cambridge (Massachusetts): Academic Press.
2. Heath M.T., **2018**, *Scientific computing: an introductory survey*, 2nd ed., Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics.
3. Weinan E., Engquist B., **2003**, *Multiscale modeling and computation*, Notices of the AMS 50(9):1062-1070.
4. Praprotnik M., Site L.D., Kremer K., **2008**, *Multiscale simulation of soft matter: From scale bridging to adaptive resolution*, Annual Review of Physical Chemistry 59(1):545-571.
5. Jansson F., van den Oord G., Pelupessy I., Grönqvist J.H., Siebesma A.P., Crommelin D., **2019**, *Regional superparameterization in a global circulation model using large eddy simulations*, Journal of Advances in Modeling Earth Systems 11(9):2958-2979.
6. IPCC, **2021**, *Climate Change 2021: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*, Cambridge: Cambridge University Press.
7. Eyring V., et al., **2024**, *Pushing the frontiers in climate modelling and analysis with machine learning*, Nature Climate Change 14(9):916-928.
8. Bracco A., Brajard J., Dijkstra H.A., Hassanzadeh P., Lessig C., Monteleoni C., **2025**, *Machine learning for the physics of climate*, Nature Reviews Physics 7(1):6-20.
9. Hersbach H., et al., **2020**, *The ERA5 global reanalysis*, Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society 146(730):1999-2049.
10. Pathak J., et al., **2022**, *FourCastNet: a global data-driven high-resolution weather model using adaptive fourier neural operators*, arXiv:2202.11214.
11. Bi K., Xie L., Zhang H., Chen X., Gu X., Tian Q., **2023**, *Accurate medium-range global weather forecasting with 3D neural networks*, Nature 619(7970):533-538.
12. Lam R., et al., **2023**, *Learning skillful medium-range global weather forecasting*, Science 382(6677):1416-1421.
13. Olivetti L., Messori G., **2024**, *Do data-driven models beat numerical models in forecasting weather extremes? A comparison of IFS HRES, Pangu-Weather, and GraphCast*, Geoscientific Model Development 17:7915-7962.
14. Rasp S., Pritchard M.S., Gentile P., **2018**, *Deep learning to represent subgrid processes in climate models*, Proceedings of the National Academy of Sciences 115(39):9684-9689.
15. Bolton T., Zanna L., **2019**, *Applications of deep learning to ocean data inference and subgrid parameterisation*, Journal of Advances in Modeling Earth Systems 11(1):376-399.
16. Crommelin D., Edeling W., **2021**, *Machine learning for multiscale simulations in climate*, In: Schilders W., red., *Mathematics: key enabling technology for scientific machine learning*, Platform Wiskunde Nederland, p. 36-38.
17. Brunton S.L., Noack B.R., Koumoutsakos P., **2020**, *Machine learning for fluid mechanics*, Annual Review of Fluid Mechanics 52(1):477-508.
18. Noé F., Tkatchenko A., Müller K.R., Clementi C., **2020**, *Machine learning for molecular simulation*, Annual Review of Physical Chemistry 71(1):361-390.
19. Melchers H., Crommelin D., Koren B., Menkovski V., Sanderse B., **2023**, *Comparison of neural closure models for discretised PDEs*, Computers & Mathematics with Applications 143:94-107.

Van deze lezing is een video-opname beschikbaar:



De QR-code brengt u direct naar het lezingenarchief op de Diligentia website. Druk op het blauwe woordje "video" om de weergave te starten. Geen QR-scanner? Ga naar de website, menukeuze lezingenarchief en vul "Crommelin" in op de zoekbalk.