

3. データ同化の基礎理論

Lorenz-96 Two-Scale Model

$$\frac{dX_k}{dt} = -X_{k-1}(X_{k-2} - X_{k+1}) - X_k + F - \frac{hc}{b} \sum_{j=1}^J Y_{jk} \quad (k = 1, \dots, K)$$

parameterize

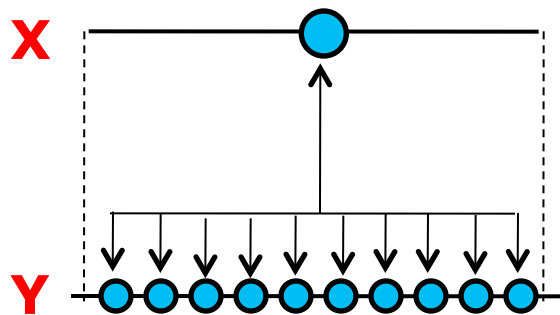
$$\frac{dY_{jk}}{dt} = -cbY_{j+1k}(Y_{j+2k} - Y_{j-1k}) - cY_{jk} + \frac{hc}{b} X_k \quad (j = 1, \dots, J)$$

Parameters in the figure

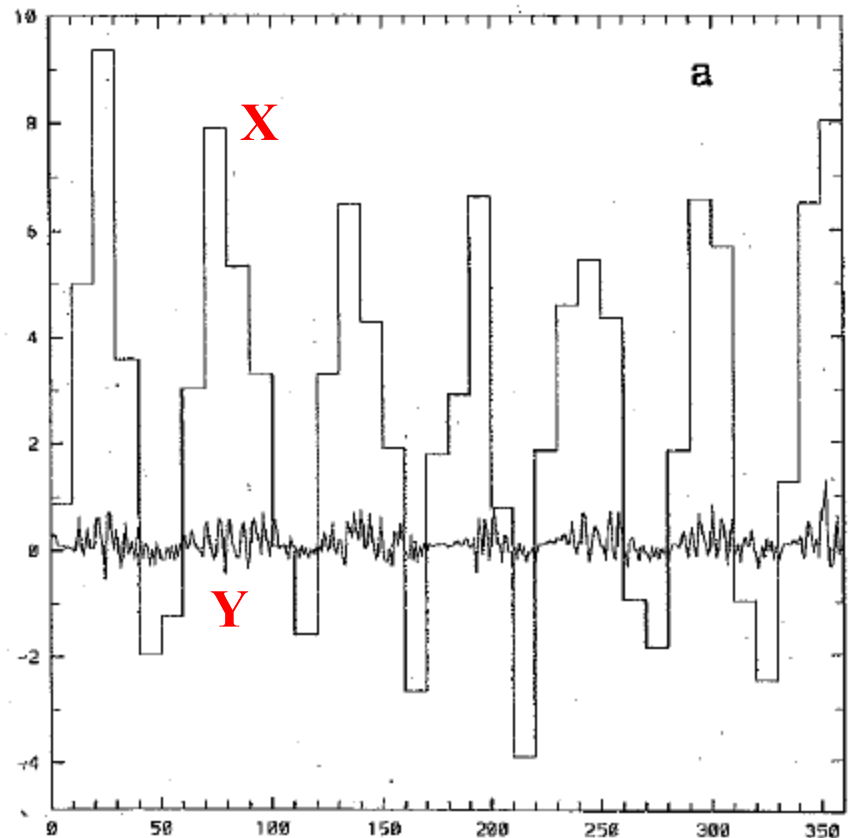
$$K = 36, \quad J = 10 \quad (n = 396)$$

$$F = 10, \quad h = 1, \quad b = c = 10$$

Interactions between X and Y



Lorenz (1996)



Stochastic Parameterization

$K=8, J=32, F=18$

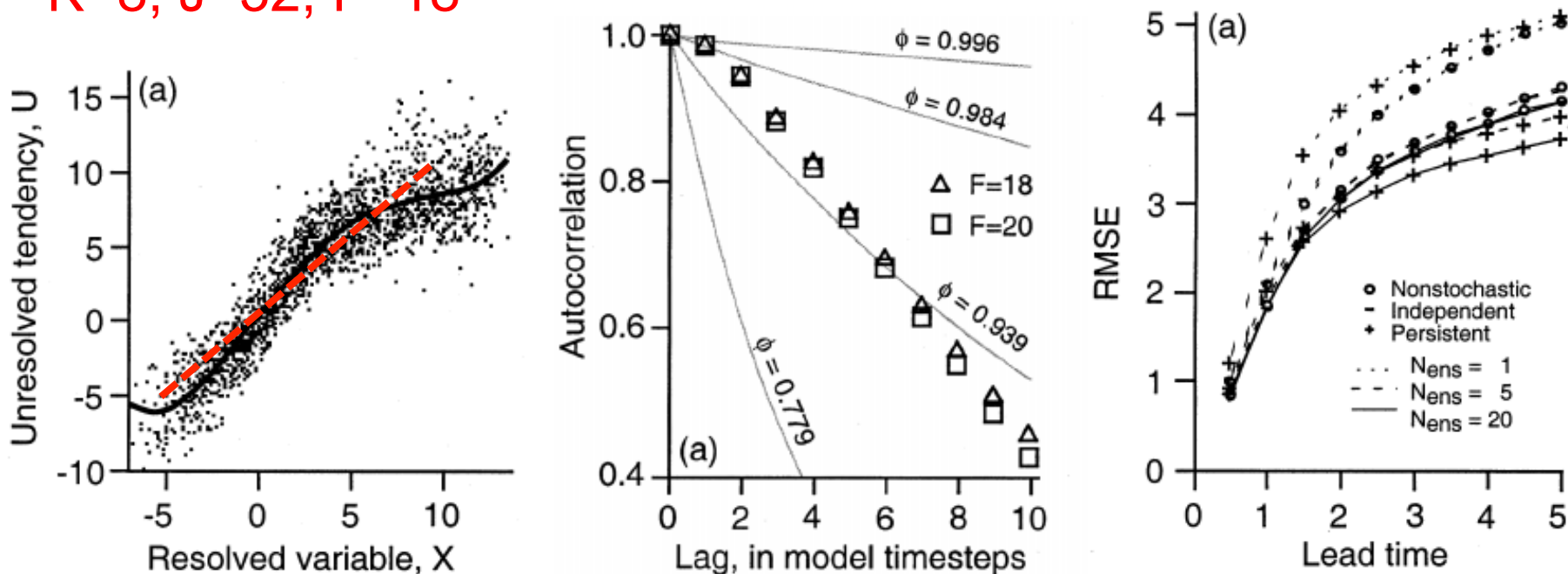


Figure 2. Scatterplots of the unresolved tendency U (Eq. (3)) as a function of the resolved variable X to which it applies, together with the regression functions constituting the deterministic part of the parametrizations $g_U(X)$ (Table 1 and Eq. (4)), for forcings: (a) $F = 18$ and (b) $F = 20$.

Figure 3. (a) Temporal and (b) spatial autocorrelation functions for the stochastic term in the unresolved tendencies (e_k in Eq. (4)), for forcings $F = 18$ (triangles) and $F = 20$ (squares). Also shown in (a) are autocorrelation functions implied by Eq. (5) for selected values of the parameter ϕ (grey lines).

Figure 7. (a) RMSE, and (b) anomaly correlation, given ensemble sizes N_{ens} of 1, 5 and 20, for the three parametrizations defined in Table 2, for forcing $F = 18$.

確率微分方程式

数値モデルを常微分方程式系で表す。

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, t)$$

数値モデルの解像度が有限であることや、境界条件に不確実性があることなどから、数値モデルにランダム誤差は不可避である。

数値モデルの解像度で粗視化した現実のシステムの時間発展は、ランダム誤差 ε_t を考慮した次の方程式でモデル化される。

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, t; \varepsilon_t)$$

ランダム誤差が十分小さく、簡単のため白色ガウス過程であるとする

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, t)dt + \mathbf{G}(\mathbf{x}, t)d\boldsymbol{\beta}_t$$

$\boldsymbol{\beta}_t$: Brown運動

$$\langle d\boldsymbol{\beta}_t \rangle = \mathbf{0}, \quad \langle d\boldsymbol{\beta}_t (d\boldsymbol{\beta}_{t'})^T \rangle = \mathbf{Q}(t)\delta(t - t')$$

Fokker-Planck方程式(1)

$p(\mathbf{x}, t)$: 状態変数 \mathbf{x} の確率密度関数

伊藤の確率積分の場合

$$\int_0^T f_t d\beta_t := \text{l.i.m.}_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^{n-1} f_{t_i} (\beta_{t_{i+1}} - \beta_{t_i})$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} (p F_i) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} [p (\mathbf{GQG}^T)_{ij}]$$

Stratonovich の確率積分の場合

$$\int_0^T f_t d\beta_t := \text{l.i.m.}_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^{n-1} f_{\frac{t_{i+1}+t_i}{2}} (\beta_{t_{i+1}} - \beta_{t_i})$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} (p F_i) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \sum_{k=1}^{n'} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\mathbf{GQ})_{ik} \frac{\partial}{\partial x_j} (p \mathbf{G}_{jk}) \right]$$

平均収束の定義 (X_n, X : 確率変数)

$$\text{l.i.m.}_{n \rightarrow \infty} X_n = X \iff \lim_{n \rightarrow \infty} E \left[|X_n - X|^2 \right] = 0$$

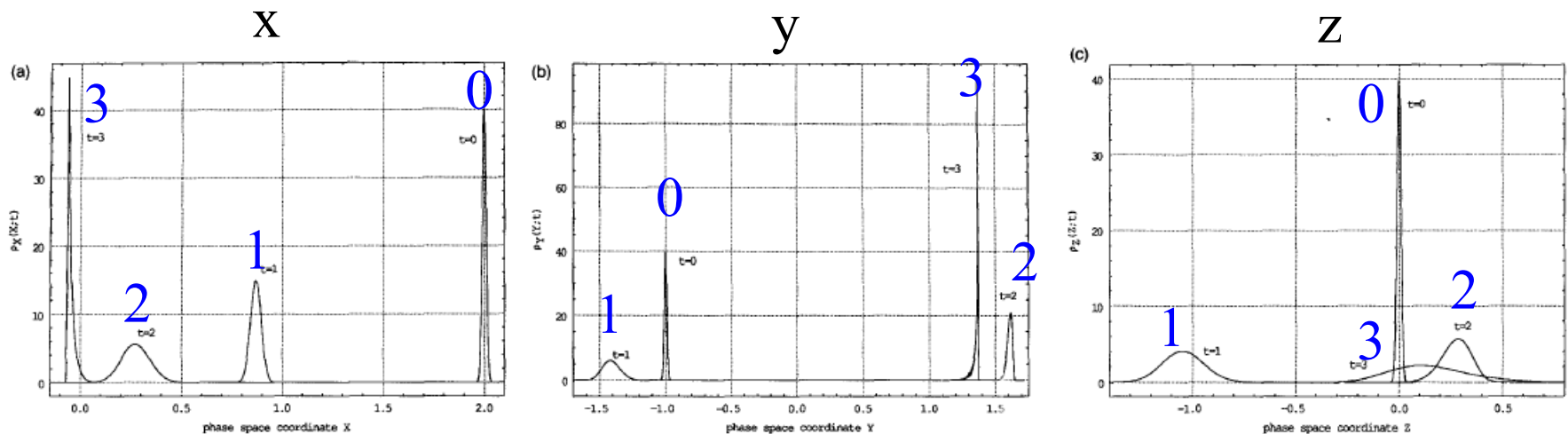
Fokker-Planck方程式(2)

Liouville 方程式

Fokker-Planck 方程式において、数値モデルのランダム誤差を無視。

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} (p F_i) = 0$$

Lorenzモデルの確率密度関数の計算例



(Ehrendorfer, 1994)

Fokker-Planck方程式(3)

システムノイズが時間相関を持つ場合

確率微分方程式 ($\boldsymbol{\varepsilon}$: 1次自己回帰過程, $\boldsymbol{\Gamma}$: 非負定値定数行列)

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, t)dt + \mathbf{G}(\mathbf{x}, t)d\boldsymbol{\varepsilon}$$

$$d\boldsymbol{\varepsilon} = -\boldsymbol{\Gamma}\boldsymbol{\varepsilon}dt + d\boldsymbol{\beta}_t$$

1つの方程式にまとめると

$$d\begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ \boldsymbol{\varepsilon} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{G}(\mathbf{x}, t)\boldsymbol{\Gamma}\boldsymbol{\varepsilon} \\ -\boldsymbol{\Gamma}\boldsymbol{\varepsilon} \end{pmatrix}dt + \begin{pmatrix} \mathbf{G}(\mathbf{x}, t) \\ \mathbf{I} \end{pmatrix}d\boldsymbol{\beta}_t$$

周辺確率密度関数 $p_x(\mathbf{x}, t)$ に対するFokker-Planck方程式

$$\frac{\partial p_x}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} (p_x F_i) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} [\mathbf{G}(\mathbf{x}, t)\boldsymbol{\Gamma}\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}, t)]_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} [p_x (\mathbf{G}\mathbf{Q}\mathbf{G}^T)_{ij}]$$

$$p_x(\mathbf{x}, t) := \int p(\mathbf{x}, \boldsymbol{\varepsilon}, t) d^m \boldsymbol{\varepsilon},$$

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}, t) := \int \boldsymbol{\varepsilon} p(\mathbf{x}, \boldsymbol{\varepsilon}, t) d^m \boldsymbol{\varepsilon}$$

Bayesの定理

観測データが得られると、それによって状態変数の確率密度関数を収縮させ、システムの状態の不確定性を減らすことができる。そのために、Bayesの定理を用いる。

$$P(A_i | B) = \frac{P(B | A_i)P(A_i)}{P(B)}$$
$$= \frac{P(B | A_i)P(A_i)}{\sum_j P(B | A_j)P(A_j)}$$

$P(A_i)$: 事象 A_i の事前確率

$P(A_i | B)$: 事象 B の発現による事象 A_i の事後確率

データ同化では

事象 A_i : システムが i 番目の状態にある。

事象 B : システムのある観測データが得られる。

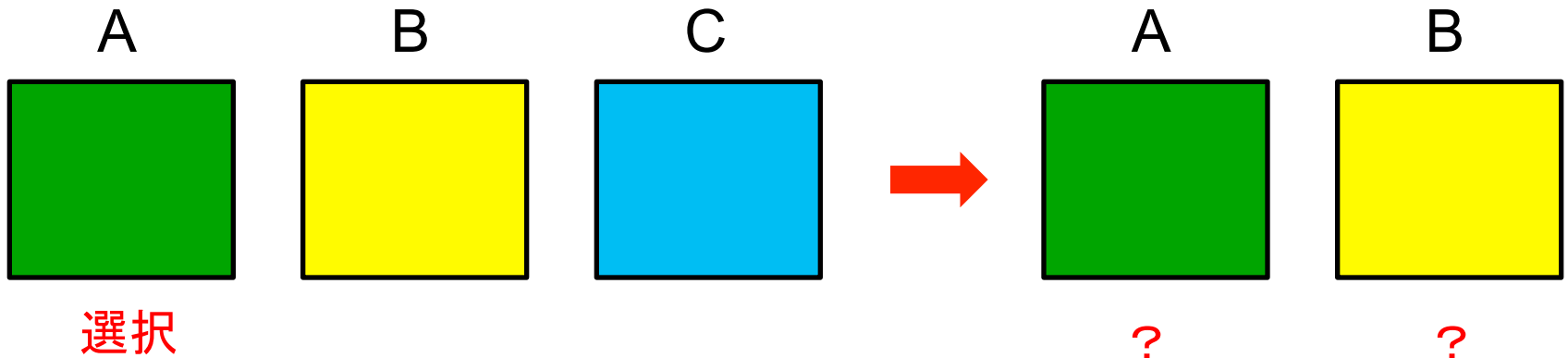
Monty Hall 問題(1)

設定

1. 3つの箱A,B,Cのどれか一つに景品が入っており(等確率とする)、司会者は観客にどれか一つの箱を選択させる。
2. 司会者は残りの2つの箱のうち、景品の入っていないほうの箱を観客に開けて見せる(等確率とする)。
3. 司会者は観客に箱の選択を変える機会を与える。

問題

選択を変えるほうが、景品のある箱を当てる確率が高くなるか。



Monty Hall 問題(2)

Bayesの定理による解答

観客が箱Aを選択し、司会者が箱Cを開けて見せる場合について、観客の立場から考える。

- ・事象A: 箱Aに景品が入っている。
- ・事象B: 箱Bに景品が入っている。
- ・事象C: 司会者が箱Cを開けて見せる。

$$P(A) = \frac{1}{3}, \quad P(C) = \frac{1}{2}, \quad P(C|A) = \frac{1}{2} \quad \therefore P(A|C) = \frac{P(C|A)P(A)}{P(C)} = \frac{1}{3}$$

$$P(B) = \frac{1}{3}, \quad P(C) = \frac{1}{2}, \quad P(C|B) = 1 \quad \therefore P(B|C) = \frac{P(C|B)P(B)}{P(C)} = \frac{2}{3}$$

観客は選択を変えるほうが当たる確率が2倍になる。

古典物理学では、確率は物理の世界に属するのではなく、人間の無知の尺度を表す。

データ同化のエッセンス

\mathbf{x}_k : 時刻 t_k におけるシステムの状態

\mathbf{y}_k : 時刻 t_k に得られる観測データ (異なる時刻の観測データは互いに独立とする)

$p(\mathbf{y}_k | \mathbf{x}_k)$: 時刻 t_k におけるシステムの状態が \mathbf{x}_k であるときの観測データの条件付確率密度関数

$p(\mathbf{x}_k | \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{k-1})$: 時刻 t_k における状態の事前確率密度関数

$p(\mathbf{x}_k | \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_k)$: 時刻 t_k における状態の事後確率密度関数

1. Fokker-Planck方程式

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} (p F_i) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} [p (\mathbf{G} \mathbf{Q} \mathbf{G}^T)_{ij}]$$

を用いて、時刻 t_{k-1} における事後確率密度関数を時刻 t_k まで時間積分し、時刻 t_k における事前確率密度関数を得る。

2. Bayesの定理から、時刻 t_k における事後確率密度関数を得る。

$$p(\mathbf{x}_k | \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_k) = \frac{p(\mathbf{y}_k | \mathbf{x}_k) p(\mathbf{x}_k | \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{k-1})}{\int p(\mathbf{y}_k | \mathbf{x}_k) p(\mathbf{x}_k | \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{k-1}) d^n \mathbf{x}_k}$$

逐次同化

異なる時刻の観測データが互いに独立であれば

$$p(\mathbf{y}_k | \mathbf{x}_k, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{k-1}) = p(\mathbf{y}_k | \mathbf{x}_k)$$

同じ時刻の観測データが互いに独立であれば、次のようにBayesの定理を段階的に適用することによって、観測データを逐次的に同化することができる。

$$p(\mathbf{x}_k | \mathbf{y}_k^{(1)}) = \frac{p(\mathbf{y}_k^{(1)} | \mathbf{x}_k) p(\mathbf{x}_k)}{\int p(\mathbf{y}_k^{(1)} | \mathbf{x}_k) p(\mathbf{x}_k) d^n \mathbf{x}_k}$$

$$p(\mathbf{x}_k | \mathbf{y}_k^{(1)}, \mathbf{y}_k^{(2)}) = \frac{p(\mathbf{y}_k^{(2)} | \mathbf{x}_k) p(\mathbf{x}_k | \mathbf{y}_k^{(1)})}{\int p(\mathbf{y}_k^{(2)} | \mathbf{x}_k) p(\mathbf{x}_k | \mathbf{y}_k^{(1)}) d^n \mathbf{x}_k}$$

すべての観測データが互いに独立であれば、1個ずつ同化することもできる。

観測値の確率密度関数

時刻 t_k における m_k 個の観測データからなるベクトル

$$\mathbf{y}_k = H_k(\mathbf{x}_k) + \Delta\mathbf{y}_k$$

$H_k(\cdot)$: 観測演算子 (数値モデルの格子点から観測点への空間内挿と、数値モデルの状態変数の観測される物理量の変換を行う)

$\Delta\mathbf{y}_k$: 観測誤差 (測定誤差・代表性誤差・変換誤差からなる)

観測誤差が多数の独立な誤差から構成されるならば、**中心極限定理**より、観測誤差はGauss分布に従う。

$$p(\mathbf{y}_k | \mathbf{x}_k) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{m_k} |\mathbf{R}_k|}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{y}_k - H_k(\mathbf{x}_k))^T \mathbf{R}_k^{-1} (\mathbf{y}_k - H_k(\mathbf{x}_k))\right]$$

$\mathbf{R}_k := \langle \Delta\mathbf{y}_k (\Delta\mathbf{y}_k)^T \rangle$: 観測誤差共分散行列

中心極限定理

平均0、分散 $\{\sigma_i^2\}$ の独立な確率変数列 $\{X_i\}$ がLindebergの条件

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{s_n} \sum_{i=1}^n \int_{|x| \geq \varepsilon s_n} x^2 p_i(x) dx = 0, \quad (\forall \varepsilon > 0, \quad s_n := \sqrt{\sigma_1^2 + \dots + \sigma_n^2})$$

を満たすならば、確率変数の基準化された和

$$Y_n := \frac{X_1 + \dots + X_n}{s_n}$$

の分布は、 $n \rightarrow \infty$ のとき、平均0、分散1の正規分布に収束する

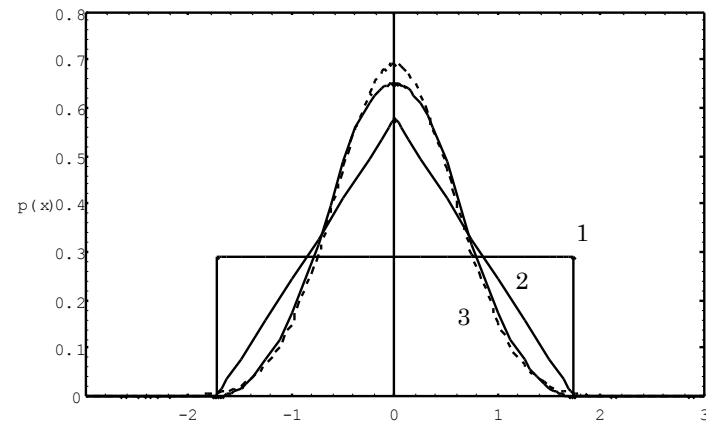
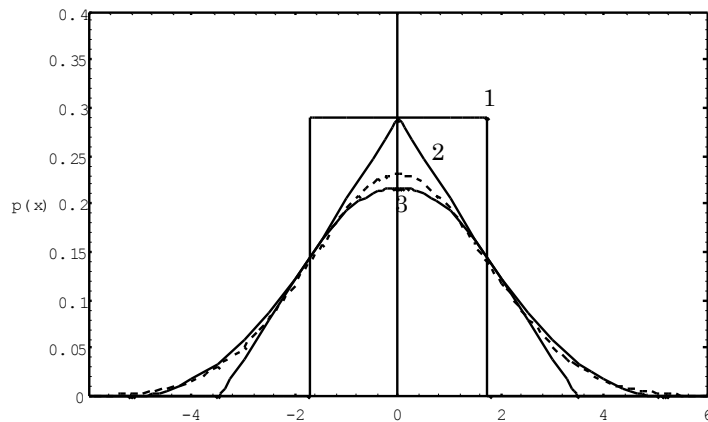


図1.7.3 中心極限定理の例。(a) 観測誤差が、同一の矩形分布に従う独立な根元誤差の和からなる
ときの誤差確率密度関数。根元誤差の個数が1個、2個、3個の場合を示す。(b) 測定誤差が矩形分布
する独立な観測データを平均したときの誤差確率密度関数。平均する観測データが1個、2個、3個の
場合を示す。それぞれの破線は、3個の場合に対応する正規分布の確率密度関数。

観測誤差の推定

\mathbf{x}^f : 状態変数の予測値からなるベクトル

\mathbf{y} : 観測値からなるベクトル

$$\mathbf{d} := \mathbf{y} - H(\mathbf{x}^f) \approx \Delta\mathbf{y} - \mathbf{H}\Delta\mathbf{x}^f$$

$$\Delta\mathbf{y} := \mathbf{y} - H(\mathbf{x}^f), \quad \Delta\mathbf{x}^f := \mathbf{x}^f - \mathbf{x}, \quad \mathbf{H}_{ij} := \left. \frac{\partial(H(\mathbf{x}))_i}{\partial x_j} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^f}$$

期待値をとると

$$\langle \mathbf{d} \rangle \approx \langle \Delta\mathbf{y} \rangle - \mathbf{H} \langle \Delta\mathbf{x}^f \rangle$$

この式から、観測データのバイアスに関する情報が得られる。

一方、予測値と観測値にともにバイアスがなければ

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{d}\mathbf{d}^T \rangle &\approx \langle \Delta\mathbf{y}(\Delta\mathbf{y})^T \rangle + \mathbf{H} \langle \Delta\mathbf{x}^f (\Delta\mathbf{x}^f)^T \rangle \mathbf{H}^T \\ &= \mathbf{R} + \mathbf{H}\mathbf{P}^f\mathbf{H}^T \end{aligned}$$

この式から、観測誤差共分散行列に関する情報が得られる。

線形システムの場合(1)

仮定

- 数値モデルと観測演算子は線形。
- システムノイズにかかる行列 \mathbf{G} は時間のみの関数。
- 初期に与える状態変数の確率密度関数と、観測データの確率密度関数はガウス分布。

確率微分方程式

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F}(t)\mathbf{x}dt + \mathbf{G}(t)d\boldsymbol{\beta}_t$$

Fokker-Planck 方程式

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \sum_{i,j=1}^n F_{ij}(t) \frac{\partial}{\partial x_i} (p x_j) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \left(\mathbf{G}(t) \mathbf{Q}(t) \mathbf{G}(t)^\top \right)_{ij} \frac{\partial^2 p}{\partial x_i \partial x_j}$$

観測データの確率密度関数

$$p(\mathbf{y}_k | \mathbf{x}_k) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{m_k} |\mathbf{R}_k|}} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{y}_k - \mathbf{H}_k \mathbf{x}_k)^\top \mathbf{R}_k^{-1} (\mathbf{y}_k - \mathbf{H}_k \mathbf{x}_k) \right]$$

線形システムの場合(2)

このとき以下に示すように、状態変数の確率密度関数は常にガウス分布になる。ガウス分布は平均値と共分散行列だけで決まるので、データ同化の問題がこれら2つの量を求める問題に還元される。

平均値

$$\bar{\mathbf{x}}(t) := \int \mathbf{x} p(\mathbf{x}, t) d^n \mathbf{x}$$

共分散行列

$$\mathbf{P}(t) := \int (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})^T p(\mathbf{x}, t) d^n \mathbf{x}$$

Fokker-Planck方程式から、それぞれの時間発展方程式が次のように得られる。

$$\frac{d\bar{\mathbf{x}}}{dt} = \mathbf{F}(t)\bar{\mathbf{x}}$$

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \mathbf{F}(t)\mathbf{P} + \mathbf{P}\mathbf{F}(t)^T + \mathbf{G}(t)\mathbf{Q}(t)\mathbf{G}(t)^T$$

線形システムの場合(3)

証明

$$\begin{aligned}
 \frac{d\bar{x}_i}{dt} &= \int x_i \frac{\partial p}{\partial t} d^n \mathbf{x} \\
 &= \int x_i \left[-F_{jk} \frac{\partial}{\partial x_j} (px_k) + \frac{1}{2} (\mathbf{GQG}^\top)_{jk} \frac{\partial^2 p}{\partial x_j \partial x_k} \right] d^n \mathbf{x} \\
 &= \int \left[F_{ik} px_k - \frac{1}{2} (\mathbf{GQG}^\top)_{ik} \frac{\partial p}{\partial x_k} \right] d^n \mathbf{x} = F_{ik} \bar{x}_k = (\mathbf{F}\bar{\mathbf{x}})_i \\
 \frac{dP_{ij}}{dt} &= \int \left[-\frac{d\bar{x}_i}{dt} (x_j - \bar{x}_j) p - (x_i - \bar{x}_i) \frac{d\bar{x}_j}{dt} p + (x_i - \bar{x}_i) (x_j - \bar{x}_j) \frac{\partial p}{\partial t} \right] d^n \mathbf{x} \\
 &= \int \left[-F_{ik} \bar{x}_k (x_j - \bar{x}_j) p - (x_i - \bar{x}_i) F_{jk} \bar{x}_k p \right] d^n \mathbf{x} \\
 &\quad + \int (x_i - \bar{x}_i) (x_j - \bar{x}_j) \left[-F_{kl} \frac{\partial}{\partial x_k} (px_l) + \frac{1}{2} (\mathbf{GQG}^\top)_{kl} \frac{\partial^2 p}{\partial x_k \partial x_l} \right] d^n \mathbf{x} \\
 &= \int \left[F_{il} (x_j - \bar{x}_j) (x_l - \bar{x}_l) p + (x_i - \bar{x}_i) (x_l - \bar{x}_l) F_{jl} p \right] d^n \mathbf{x} + \frac{1}{2} (\mathbf{GQG}^\top)_{ij} + \frac{1}{2} (\mathbf{GQG}^\top)_{ji} \\
 &= F_{il} P_{jl} + P_{il} F_{jl} + (\mathbf{GQG}^\top)_{ij} = (\mathbf{FP})_{ij} + (\mathbf{PF}^\top)_{ij} + (\mathbf{GQG}^\top)_{ij}
 \end{aligned}$$

線形システムの場合(4)

次のガウス分布がFokker-Planck方程式の解であることを示す。

$$p(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n |\mathbf{P}(t)|}} \exp\left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}(t))^T \mathbf{P}(t)^{-1} (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}(t))\right]$$

行列の微分公式

$$\frac{d\mathbf{A}^{-1}}{dt} = -\mathbf{A}^{-1} \frac{d\mathbf{A}}{dt} \mathbf{A}^{-1}$$
$$\frac{d}{dt} \log|\mathbf{A}| = \text{Tr} \left[\mathbf{A}^{-1} \frac{d\mathbf{A}}{dt} \right]$$

ガウス分布の空間微分

$$\frac{1}{p} \frac{\partial p}{\partial x_i} = -P^{-1}_{ij} (x_j - \bar{x}_j)$$

$$\frac{1}{p} \frac{\partial^2 p}{\partial x_i \partial x_j} = -P^{-1}_{ij} + P^{-1}_{ik} P^{-1}_{jl} (x_k - \bar{x}_k)(x_l - \bar{x}_l)$$

線形システムの場合(5)

ガウス分布の時間微分

$$\begin{aligned} \frac{1}{p} \frac{\partial p}{\partial t} = & -\frac{1}{2} \text{Tr} \left[\mathbf{P}^{-1} \frac{d\mathbf{P}}{dt} \right] + \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})^T \mathbf{P}^{-1} \frac{d\mathbf{P}}{dt} \mathbf{P}^{-1} (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \\ & + \frac{1}{2} \left(\frac{d\bar{\mathbf{x}}}{dt} \right)^T \mathbf{P}^{-1} (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) + \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})^T \mathbf{P}^{-1} \frac{d\bar{\mathbf{x}}}{dt} \end{aligned}$$

これに、 $\bar{\mathbf{x}}$ と \mathbf{P} の時間発展方程式を代入すると

$$\begin{aligned} \frac{1}{p} \frac{\partial p}{\partial t} = & -\frac{1}{2} P^{-1}_{ij} \left[F_{jk} P_{ki} + P_{jk} F_{ik} + (\mathbf{GQG}^T)_{ji} \right] \\ & + \frac{1}{2} (x_i - \bar{x}_i) P^{-1}_{ij} \left[F_{jl} P_{lk} + P_{jl} F_{kl} + (\mathbf{GQG}^T)_{jk} \right] P^{-1}_{km} (x_m - \bar{x}_m) \\ & + \frac{1}{2} F_{ij} \bar{x}_j P^{-1}_{ik} (x_k - \bar{x}_k) + \frac{1}{2} (x_i - \bar{x}_i) P^{-1}_{ij} F_{jk} \bar{x}_k \end{aligned}$$

以上から次式が成り立つので、ガウス分布はFokker-Planck方程式の解である。

$$\frac{1}{p} \left[\frac{\partial p}{\partial t} + F_{ij} \frac{\partial}{\partial x_i} (p x_j) - \frac{1}{2} (\mathbf{GQG}^T)_{ij} \frac{\partial^2 p}{\partial x_i \partial x_j} \right] = 0$$

線形システムの場合(6)

Fokker-Planck方程式の時間積分から得られる事前確率密度関数

$$p(\mathbf{x}_k | \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{k-1}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n |\hat{\mathbf{P}}_k|}} \exp\left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{x}}_k)^\top \hat{\mathbf{P}}_k^{-1} (\mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{x}}_k)\right]$$

Bayesの定理から事後確率密度関数を求めると

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}_k | \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_k) &\propto \exp\left[-\frac{1}{2} (\mathbf{y}_k - \mathbf{H}_k \mathbf{x}_k)^\top \mathbf{R}_k^{-1} (\mathbf{y}_k - \mathbf{H}_k \mathbf{x}_k)\right] \exp\left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{x}}_k)^\top \hat{\mathbf{P}}_k^{-1} (\mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{x}}_k)\right] \\ &= \exp\left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x}_k - \bar{\mathbf{x}}_k)^\top \mathbf{P}_k^{-1} (\mathbf{x}_k - \bar{\mathbf{x}}_k)\right] \end{aligned}$$

$$\bar{\mathbf{x}}_k := \hat{\mathbf{x}}_k + \left(\hat{\mathbf{P}}_k^{-1} + \mathbf{H}_k^\top \mathbf{R}_k^{-1} \mathbf{H}_k\right)^{-1} \mathbf{H}_k^\top \mathbf{R}_k^{-1} (\mathbf{y}_k - \mathbf{H}_k \hat{\mathbf{x}}_k)$$

$$\mathbf{P}_k := \left(\hat{\mathbf{P}}_k^{-1} + \mathbf{H}_k^\top \mathbf{R}_k^{-1} \mathbf{H}_k\right)^{-1}$$

Sherman-Morrison-Woodburyの公式

$$(\mathbf{A} + \mathbf{UBV})^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \mathbf{A}^{-1} \mathbf{U} (\mathbf{B}^{-1} + \mathbf{VA}^{-1} \mathbf{U})^{-1} \mathbf{VA}^{-1}$$

線形システムの場合(7)

1. Fokker-Planck方程式による事前確率密度関数の計算
(状態変数の平均値と共分散行列の予測)

$$\begin{aligned}\frac{d\bar{\mathbf{x}}}{dt} &= \mathbf{F}(t)\bar{\mathbf{x}} \\ \frac{d\mathbf{P}}{dt} &= \mathbf{F}(t)\mathbf{P} + \mathbf{P}\mathbf{F}(t)^{\top} + \mathbf{G}(t)\mathbf{Q}(t)\mathbf{G}(t)^{\top}\end{aligned}$$

2. Bayesの定理による事後確率密度関数の計算
(観測データによる確率密度関数の収縮)

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{x}}_k &= \hat{\mathbf{x}}_k + \hat{\mathbf{P}}_k \mathbf{H}_k^{\top} \left(\mathbf{R}_k + \mathbf{H}_k \hat{\mathbf{P}}_k \mathbf{H}_k^{\top} \right)^{-1} \left(\mathbf{y}_k - \mathbf{H}_k \hat{\mathbf{x}}_k \right) \\ \mathbf{P}_k &= \hat{\mathbf{P}}_k - \hat{\mathbf{P}}_k \mathbf{H}_k^{\top} \left(\mathbf{R}_k + \mathbf{H}_k \hat{\mathbf{P}}_k \mathbf{H}_k^{\top} \right)^{-1} \mathbf{H}_k \hat{\mathbf{P}}_k\end{aligned}$$

ただし、Sherman-Morrison-Woodburyの公式を用いて変形した。これらは、連続時間の線形システムと、離散時間の観測データに対する**カルマンフィルタ (Kalman filter)**のアルゴリズムを与える。

計算例

数値モデルの i 番目の状態変数1個が直接観測されるものとする、
観測演算子は次のようになる。

$$\mathbf{H}_k = (0 \ \cdots \ 0 \ \underset{i}{1} \ 0 \ \cdots \ 0)$$

x^f, x^o, x^a : その状態変数の予測値と観測値と解析値
 $\sigma^f, \sigma^o, \sigma^a$: それらの誤差標準偏差

解析値

$$\bar{\mathbf{x}}_k = \hat{\mathbf{x}}_k + \frac{x^o - x^f}{(\sigma^f)^2 + (\sigma^o)^2} (\hat{\mathbf{P}}_k)_i$$
$$\therefore x^a = (\bar{\mathbf{x}}_k)_i = x^f + \frac{(\sigma^f)^2}{(\sigma^f)^2 + (\sigma^o)^2} (x^o - x^f)$$

解析誤差共分散行列

$$\mathbf{P}_k = \hat{\mathbf{P}}_k - \frac{1}{(\sigma^f)^2 + (\sigma^o)^2} (\hat{\mathbf{P}}_k)_i (\hat{\mathbf{P}}_k)_i^T$$
$$\therefore (\sigma^a)^2 = (\mathbf{P}_k)_{ii} = \frac{(\sigma^f \sigma^o)^2}{(\sigma^f)^2 + (\sigma^o)^2}$$

粒子フィルタ(1)

状態変数の確率密度関数を N 個のメンバーからなる状態変数のアンサンブルで近似し、Fokker-Planck方程式を時間積分する代わりに、アンサンブル予報によって確率密度関数の時間発展を計算する。

1. 時刻 t_{k-1} における事後確率密度関数を近似するアンサンブルを $\{\mathbf{x}_{k-1}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}_{k-1}^{(N)}\}$ とする。
2. それらを初期値にして数値モデルを時間積分し、時刻 t_k における事前確率密度関数を近似するアンサンブル $\{\hat{\mathbf{x}}_k^{(1)}, \dots, \hat{\mathbf{x}}_k^{(N)}\}$ を得る。
3. このアンサンブルの各メンバーに次のような重みを付ける。

$$w_k^{(i)} := \frac{p(\mathbf{y}_k | \hat{\mathbf{x}}_k^{(i)})}{\sum_{j=1}^N p(\mathbf{y}_k | \hat{\mathbf{x}}_k^{(j)})} \quad (i = 1, \dots, N)$$

4. このアンサンブルから各メンバーをそれぞれの重みの確率で復元抽出し、 N 個のメンバーからなるアンサンブル $\{\mathbf{x}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{x}_k^{(N)}\}$ を構成する。これが時刻 t_k における事後確率密度関数を近似する。

粒子フィルタ(2)

基本的な粒子フィルタ

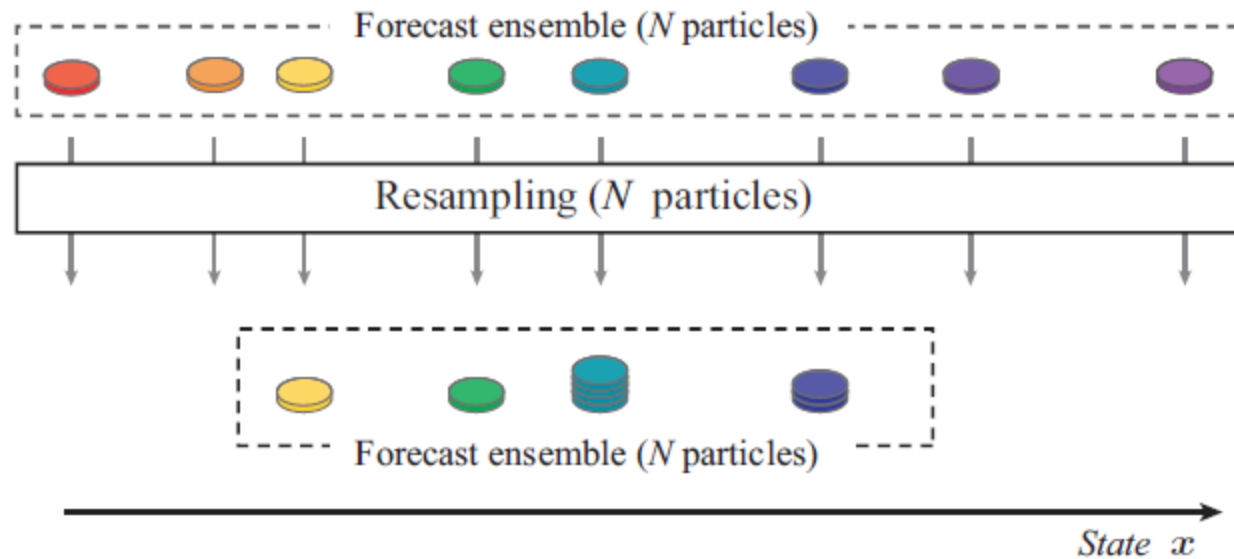


Fig. 1. PF scheme. The value of a state x is on the horizontal axis assuming that the state x is scalar.

粒子フィルタ(3)

融合粒子フィルタ

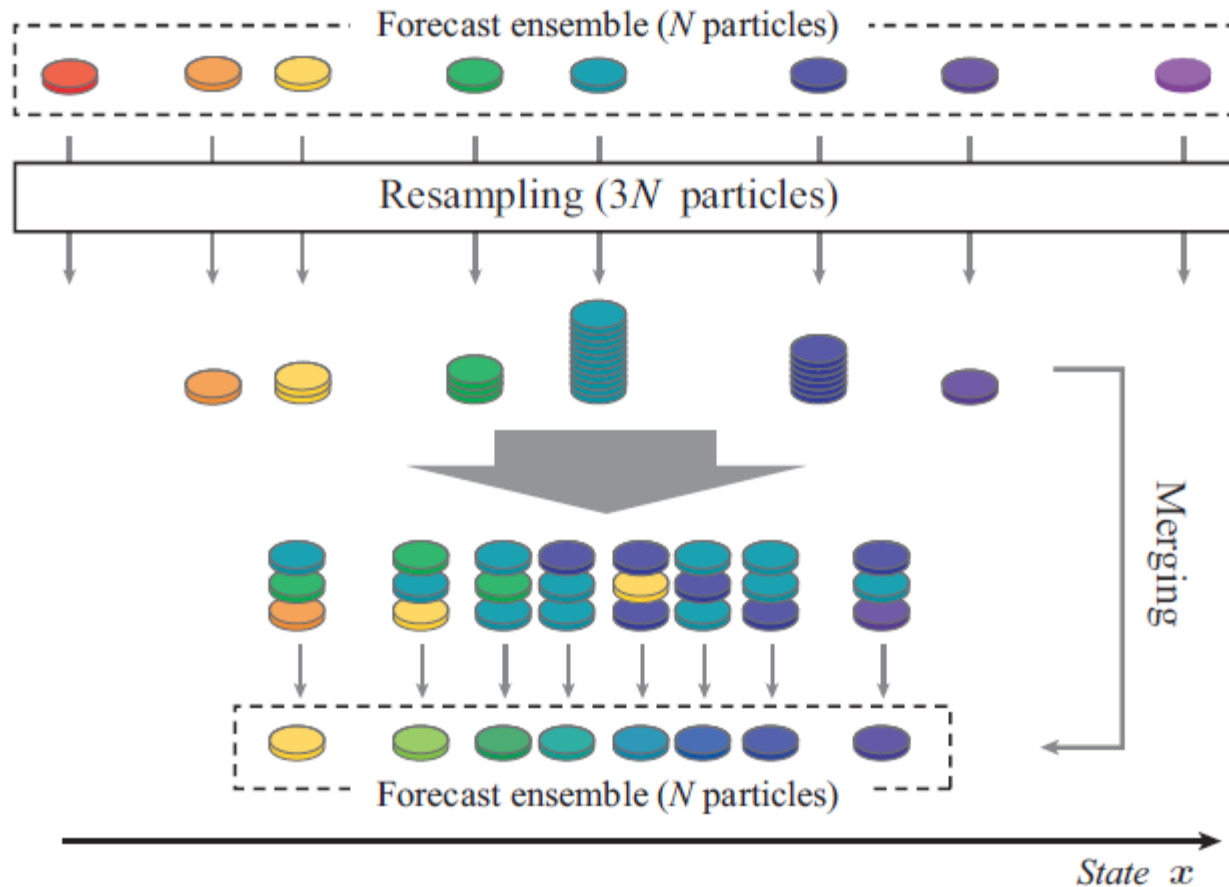


Fig. 2. Scheme of the MPF, in which the number of merging particles is set to be 3. The value of a state x is on the horizontal axis assuming that the state x is scalar.

大規模モデルに適したデータ同化法

- 粒子フィルタは、システムの自由度が大きくなるにつれてメンバー数を非常に大きくしていかなないと性能がでない。そのため、自由度が大きな数値モデルにそのまま適用するのは困難である。
- 大規模な数値モデルでは、予測値の精度が高く、確率密度関数がガウス分布から大きくはずれないという仮定のもとで、近似的なデータ同化法が用いられる。精度の高い観測データが十分あれば、これらの仮定は満足されると考えられる。
- 非線形なシステムに対しては、平均値の推定とモードの推定を区別することが望ましい。現在の代表的なデータ同化法は
 - 平均値の近似推定：**アンサンブルカルマンフィルタ (EnKF)**
Evensen (1994)
 - モードの近似推定：**4次元変分法 (4DVar)**
Le Dimet and Talagrand (1986)