用語説明

06/10/31

アンサンブル･カルマンフィルタ

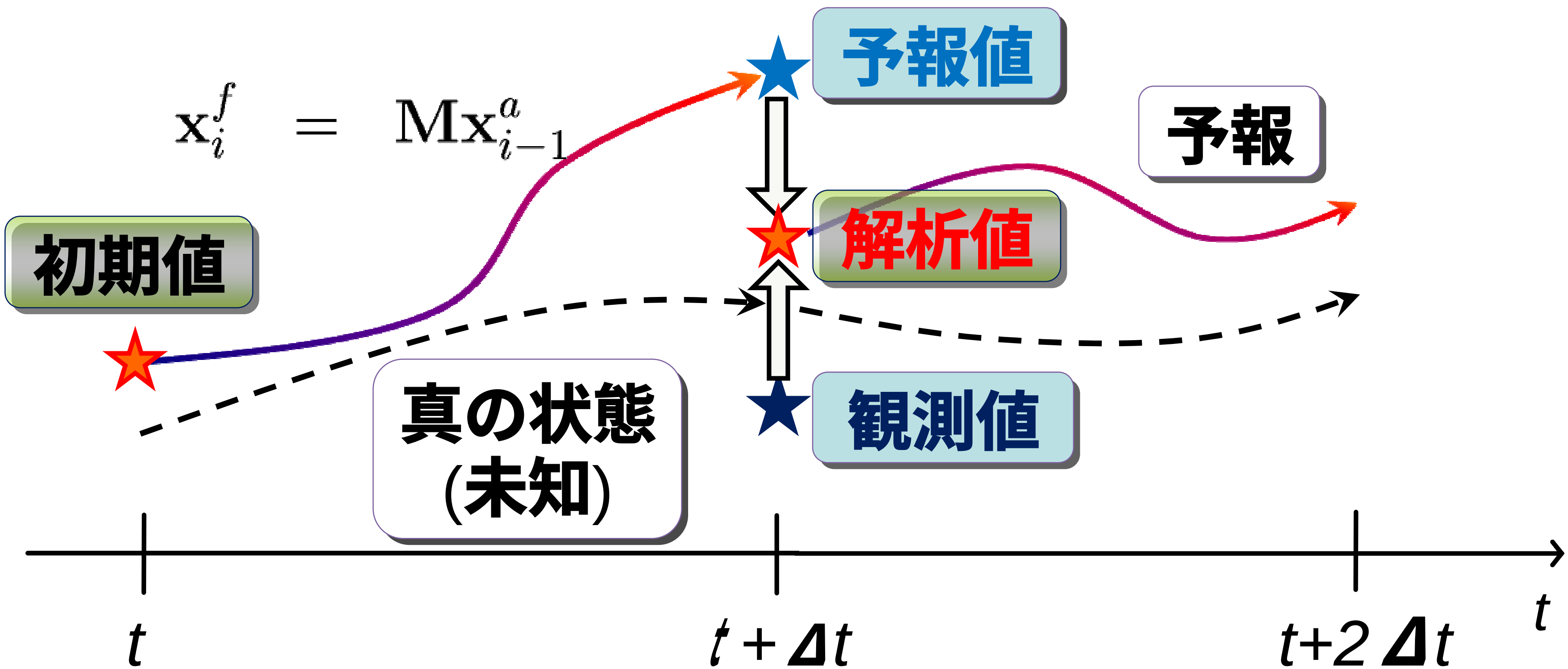
近藤圭一

４次元データ同化とは

- 空間３次元＋時間１次元＝４次元空間に分布した観測データを数値予報モデルに同化する処理。
- 数値モデルが現実から離れていかないようにするために、観測データを使って修正。
- モデルと現実との接点を保つために必要。

データ同化の概要

$$\boxed{\mathbf{x}_i^a = (\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})\mathbf{x}_i^f + \mathbf{K}_i \mathbf{y}_i^0}$$



予報値と**観測値**をカルマンゲイン行列Kでブレンド。

カルマンフィルタとは

- 線型モデル、ガウス分布の誤差統計、という二つの仮定の下、統計的な推定問題の最適解を与える。
- 時間発展と解析の二つのアルゴリズムからなる。

カルマンフィルタ＜時間発展＞

線型モデル$\mathbf{M}$を使って1時刻前の状態$\mathbf{x}_{i-1}^{a}$を現在の状態$\mathbf{x}_i^f$に写す。

$$\boxed{\mathbf{x}_i^f = \mathbf{M}\mathbf{x}_{i-1}^a} \qquad (1)$$

予報と解析に誤差が含まれていると仮定すると、その誤差は誤差共分散行列$\mathbf{P}$として表現される。

$$\boxed{\mathbf{P}_i^f = \mathbf{M}\mathbf{P}_{i-1}^a\mathbf{M}^T + \mathbf{Q}} \qquad (2)$$

$\mathbf{M}$	線型モデル	f：予報、a：解析
$\mathbf{P}$	誤差共分散行列	
$\mathbf{Q}$	モデル誤差共分散行列	

カルマンフィルタ＜解析＞

予報 $\mathbf{x}_i^f$ を観測データ $\mathbf{y}_i^0$ で修正するプロセス。
観測の誤差の大きさに対応した重み付けをすることでもっともらしい大気の状態 $\mathbf{x}_i^a$ を推定する。

$$\boxed{\mathbf{x}_i^a = \mathbf{x}_i^f + \mathbf{K}_i(\mathbf{y}_i^0 - \mathbf{H}\mathbf{x}_i^f)} \tag{3}$$

観測データを用いることで状態の推定誤差が小さくなるプロセス。

$$\boxed{\mathbf{P}_i^a = \left[\mathbf{I} - \mathbf{K}_i\mathbf{H}\right]\mathbf{P}_i^f} \tag{4}$$

$\mathbf{K}$ カルマンゲイン行列 (観測の重み)
$\mathbf{P}$ 誤差共分散行列　　f: 予報、a: 解析
$\mathbf{Q}$ モデル誤差共分散行列　　$\mathbf{H}$ 観測演算子

カルマンフィルタ＜解析＞

観測に対する重みは K はカルマンゲイン行列と呼ばれる。
K は解析の推定誤差を最小とするカルマンフィルタの最適解を与える。

$$\mathbf{K}_i = \mathbf{P}_i^f \mathbf{H}^T \left[\mathbf{H}\mathbf{P}_i^f \mathbf{H}^T + \mathbf{R} \right]^{-1} \tag{5}$$

$\mathbf{K}$	カルマンゲイン行列	$\mathbf{H}$	観測演算子
$\mathbf{P}$	誤差共分散行列		f：予報、a：解析
$\mathbf{R}$	観測誤差共分散行列		

カルマンフィルタ＜まとめ＞

$$\boxed{\mathbf{x}_i^f = \mathbf{M}\mathbf{x}_{i-1}^a \qquad (1)}$$

予報 $\mathbf{x}_i^f$ の計算

$$\boxed{\mathbf{P}_i^f = \mathbf{M}\mathbf{P}_{i-1}^a\mathbf{M}^T + \mathbf{Q} \qquad (2)}$$

予報誤差 $\mathbf{P}_i^f$ の時間発展

$$\boxed{\mathbf{x}_i^a = \mathbf{x}_i^f + \mathbf{K}_i(\mathbf{y}_i^0 - \mathbf{H}\mathbf{x}_i^f) \qquad (3)}$$

予報値 $\mathbf{x}_i^f$ と観測値 $\mathbf{y}_i^0$ を混ぜ合わせて解析値 $\mathbf{x}_i^a$ を作る

$$\boxed{\mathbf{P}_i^a = \left[\mathbf{I} - \mathbf{K}_i\mathbf{H}\right]\mathbf{P}_i^f \qquad (4)}$$

解析誤差 $\mathbf{P}_i^a$ の計算

$$\mathbf{K}_i = \mathbf{P}_i^f\mathbf{H}^T\left[\mathbf{H}\mathbf{P}_i^f\mathbf{H}^T + \mathbf{R}\right]^{-1} \qquad (5)$$

重み $\mathbf{K}_i$ を計算

$\mathbf{M}$	線型モデル	$\mathbf{Q}$	モデル誤差共分散行列
$\mathbf{P}$	誤差共分散行列	$\mathbf{K}$	カルマンゲイン行列
$\mathbf{R}$	観測誤差共分散行列		f：予報、a：解析

アンサンブル・カルマンフィルタ

- カルマンフィルタは、モデル変数の次元が100万を超えるような一般的な数値予報モデルでは実現困難である。

$$\mathbf{K}_i = \mathbf{P}_i^f \mathbf{H}^T \left[\mathbf{H}\mathbf{P}_i^f \mathbf{H}^T + \mathbf{R} \right]^{-1}$$

$\mathbf{K}$	カルマンゲイン行列	$\mathbf{H}$	観測演算子
$\mathbf{P}$	誤差共分散行列		f：予報、a：解析
$\mathbf{R}$	観測誤差共分散行列		

- そこでアンサンブルメンバーを使って $\mathbf{P}$ を表現することを考える。

アンサンブル・カルマンフィルタの導入

- 誤差共分散行列 $\mathbf{P}$ の平方根を考える。
- まず $\mathbf{P}$ は、その定義から

n：サンプル数
i：サンプル番号

$$
\begin{aligned}
\mathbf{P}_i^{f,a} &= \left\langle \delta\mathbf{x}_i^{f,a} \left(\delta\mathbf{x}_i^{f,a}\right)^T \right\rangle \\
&\approx \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} \delta\mathbf{x}^{f,a(i)} \left(\delta\mathbf{x}^{f,a(i)}\right)^T
\end{aligned}
\tag{6}
$$

- $\mathbf{P}$を完全に表現するには、無限の統計サンプルが必要。

アンサンブル・カルマンフィルタの導入

- $\mathbf{P}$は実対称行列だから、$\mathbf{P}$ は実行列の平方根を持つ。

$$\mathbf{P}_i^f = \mathbf{E}_i^f \left(\mathbf{E}_i^f\right)^T \tag{7}$$

- (6),(7)から $\mathbf{E}$ は

$$\mathbf{E} = \frac{1}{\sqrt{n-1}} \left[\delta\mathbf{x}^{(1)} \cdots \delta\mathbf{x}^{(n)} \right] \tag{8}$$

- $\mathbf{P}$の平方根 $\mathbf{E}$ の各列をアンサンブル摂動と見なし、それらの共分散が $\mathbf{P}$ をなすように見ることができる。

アンサンブル・カルマンフィルタの導入

しかし、ここで問題が・・・。

$$\mathbf{P}_i^f = \mathbf{E}_i^f \left(\mathbf{E}_i^f\right)^T \tag{7}$$

$$\mathbf{E} = \frac{1}{\sqrt{n-1}}\left[\delta\mathbf{x}^{(1)} \cdots \delta\mathbf{x}^{(n)}\right] \tag{8}$$

Eは一辺がnの正方行列で、各列をアンサンブル摂動としているので、モデル変数の次元nと同じ数だけのアンサンブルメンバーが必要。

nは100万を優に超えるので、この計算は実際には不可能。

アンサンブル・カルマンフィルタの導入

しかし、誤差共分散行列 P は縮退している。

東京の風

ブエノスアイレスの風

$\boxed{\text{誤差相関はなし}}$

固有値のほとんどが0になり、無視できる。

アンサンブル・カルマンフィルタの導入

$\mathbf{P}$ を固有値分解すると多くの固有値が0になり、それらを無視すると

$$\mathbf{P} = \mathbf{S}\mathbf{D}\mathbf{S}^T$$
$$= \mathbf{E}\mathbf{E}^T \tag{9}$$

$\mathbf{D}$ は各固有値からなる $m \times m$ 対角行列で、$\mathbf{S}$ は各固有値に対応する固有ベクトルからなる直交行列。

この事実を利用すると・・・・

アンサンブル・カルマンフィルタの導入

数少ないアンサンブルメンバー m で誤差共分散行列を十分よく表現できる！

$$\mathbf{E} = \frac{1}{\sqrt{m-1}}\left[\delta\mathbf{x}^{(1)} \cdots \delta\mathbf{x}^{(m)}\right] \tag{10}$$

E は m メンバーのアンサンブル摂動からなる行列と見なすことができる。

つまり、アンサンブルメンバーを使うことで、誤差共分散行列 P を近似してやることができる。

アンサンブル・カルマンフィルタの導入

ここで、(2)式に(9)を代入すると

$$
\begin{aligned}
\mathbf{P}_i^f &= \mathbf{M}\mathbf{P}_{i-1}^a\mathbf{M}^T \\
&= \mathbf{M}\left[\mathbf{E}_{i-1}^a\left(\mathbf{E}_{i-1}^a\right)^T\right]\mathbf{M}^T \\
&= \mathbf{M}\mathbf{E}_{i-1}^a\left(\mathbf{M}\mathbf{E}_{i-1}^a\right)^T
\end{aligned}
\tag{11}
$$

モデル誤差 Q は無視

となり、これは

$$
\mathbf{E}_i^f = \mathbf{M}\mathbf{E}_{i-1}^a \tag{12}
$$

と同値である。

(12)式に(10)式を代入して変形すると・・・

アンサンブル・カルマンフィルタの導入

$$
\begin{aligned}
\mathbf{E}_i^f &= \mathbf{M}\mathbf{E}_{i-1}^a \\
&= \frac{1}{\sqrt{m-1}}\left[\mathbf{M}\delta\mathbf{x}_{i-1}^{a(1)} \cdots \mathbf{M}\delta\mathbf{x}_{i-1}^{a(m)}\right] \\
&\approx \frac{1}{\sqrt{m-1}}\left[M\left(\overline{\mathbf{x}}_{i-1}^a + \delta\mathbf{x}_{i-1}^{a(1)}\right) - M\left(\overline{\mathbf{x}}_{i-1}^a\right)\right. \\
&\qquad \left.\cdots M\left(\overline{\mathbf{x}}_{i-1}^a + \delta\mathbf{x}_{i-1}^{a(m)}\right) - M\left(\overline{\mathbf{x}}_{i-1}^a\right)\right] \\
&\approx \frac{1}{\sqrt{m-1}}\left[M\left(\mathbf{x}_{i-1}^{a(1)}\right) - \overline{\mathbf{x}}_i^f\right. \\
&\qquad \left.\cdots M\left(\mathbf{x}_{i-1}^{a(m)}\right) - \overline{\mathbf{x}}_{i-1}^f\right]
\end{aligned}
\tag{13}
$$

$\mathbf{x}^{a(l)}$：l 番目のアンサンブルメンバー

$\overline{\mathbf{x}}$：アンサンブル平均

M：非線形モデル

行列Eの各列をアンサンブル摂動ベクトルとみなしたアンサンブル予報と考えることができる。

ここまでのまとめ

- m個のアンサンブルメンバーを用意するだけでよい。
- 少ないアンサンブルメンバーで誤差共分散行列 P を表現することができた。

以上のことを使うと

- カルマンゲイン行列も変形できる。

n：大気の状態変数の数
m：アンサンブルメンバー数

$$\mathbf{K} = \mathbf{P}^f\mathbf{H}^T\underbrace{\left[\mathbf{H}\mathbf{P}^f\mathbf{H}^T + \mathbf{R}\right]^{-1}}_{n\times n}$$

$$= \mathbf{E}\underbrace{\left[\mathbf{I} + (\mathbf{H}\mathbf{E})^T\mathbf{R}^{-1}\mathbf{H}\mathbf{E}\right]^{-1}}_{m\times m}(\mathbf{H}\mathbf{E})^T\mathbf{R}^{-1} \qquad (14)$$

- アンサンブルメンバーの数を一辺とした正方行列の逆行列の計算で済む。

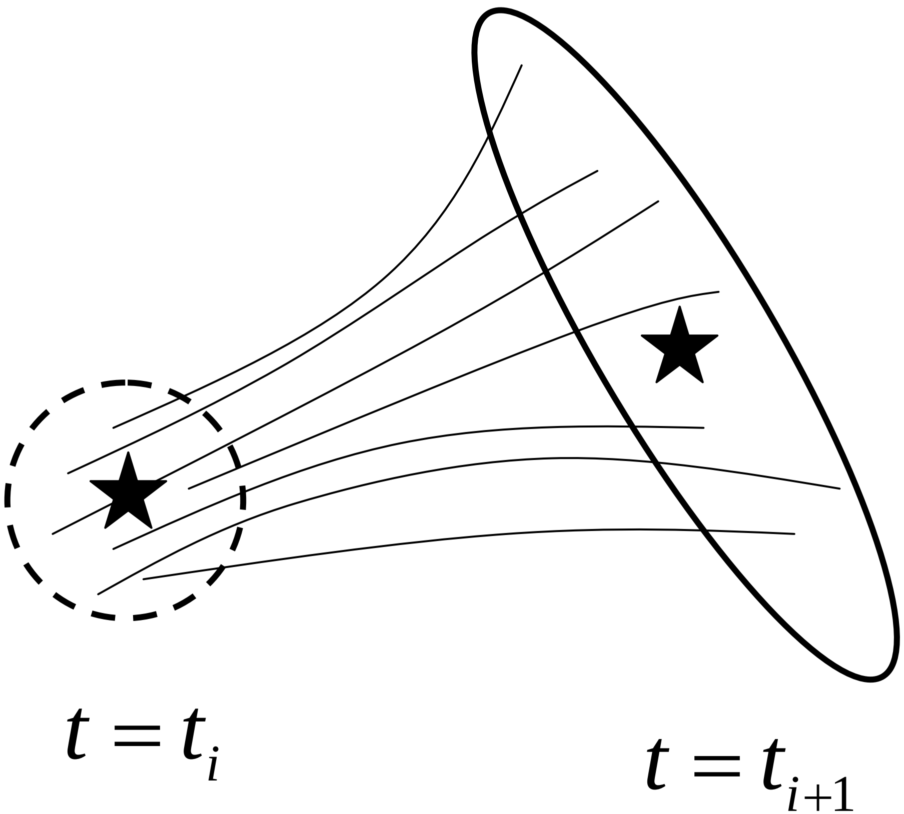
物理的解釈

- アンサンブル予報では、初期値に誤差が含まれていることを想定し、その誤差がどのように時間発展するかを予報する。

- 一方で、カルマンフィルタは誤差の時間発展と解析のプロセスであり、アンサンブル予報がこれを補う。

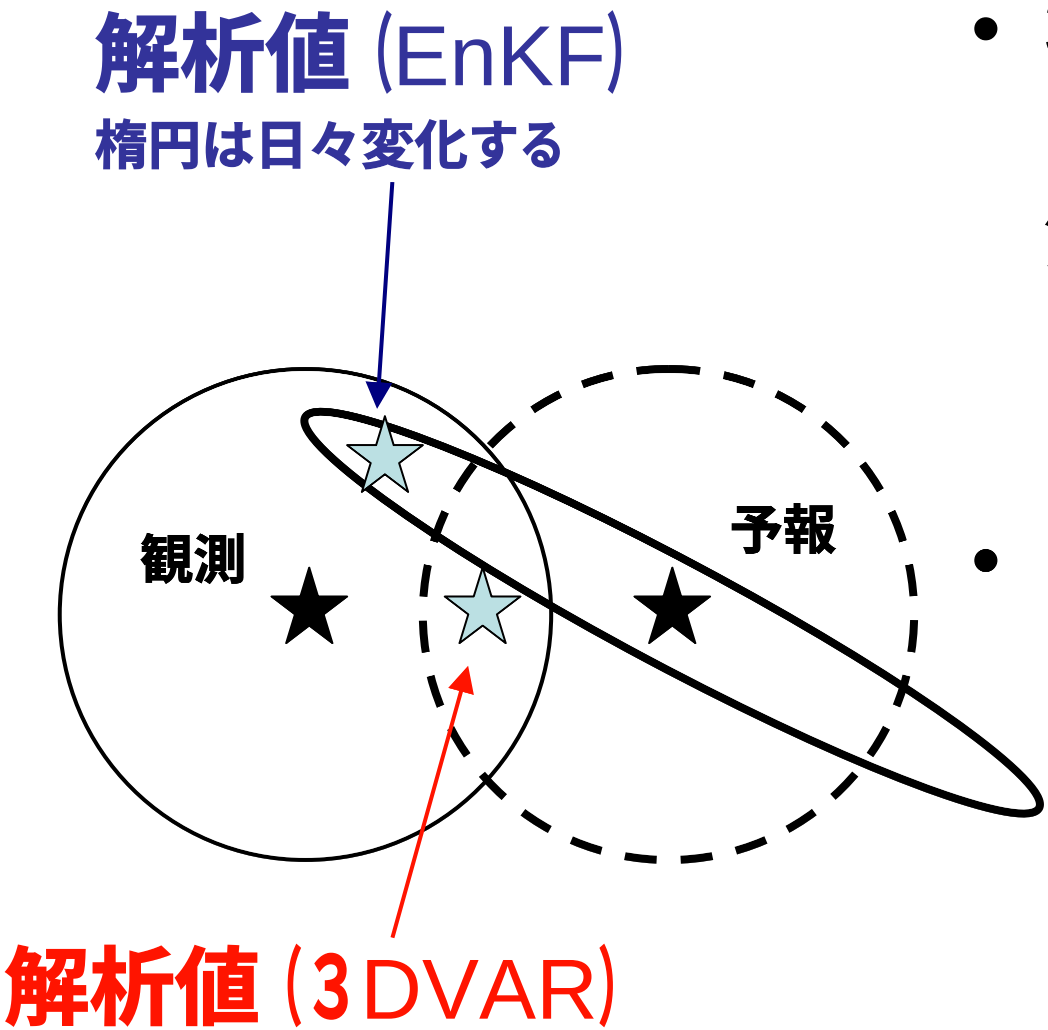
  (アンサンブルメンバーで P を近似)

物理的解釈



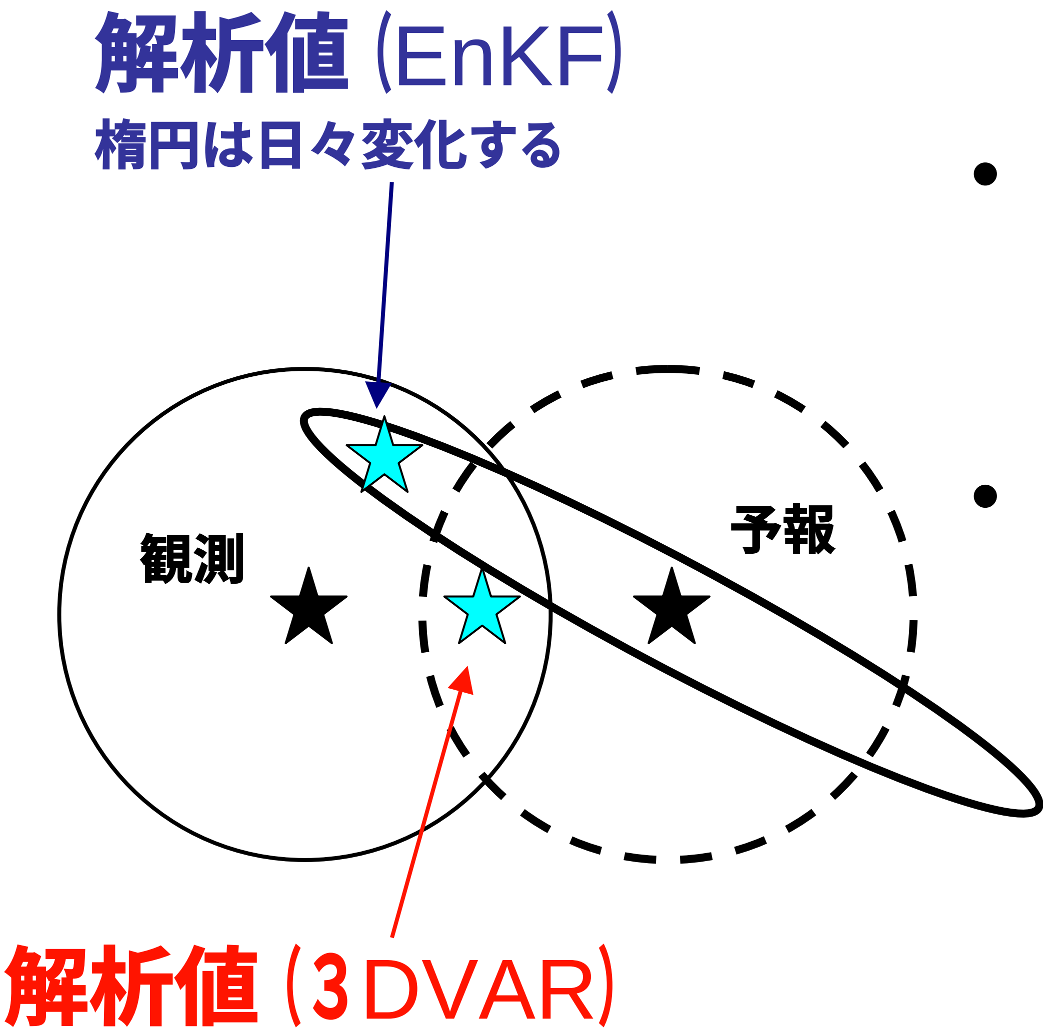
- 初期時刻での誤差の広がり(点線)に対し、終端時刻での誤差の広がり(実線)は大きく扁平になっている。

物理的解釈



- 3DVARなど誤差の時間発展を考慮しない方法では、誤差の広がりは統計的な平均で与えられる(太点線)。
- EnKFでは誤差はその日特有の分布をする(太実線)。

物理的解釈



- データ同化の解は☆である。
- それぞれ観測データからは同じくらい離れている。
- EnKFの解はその日に特有の誤差の広がりを考慮している点で、3DVARなどより優れている。

Kalman Filter　　Ensemble Kalman Filter

Kalman Filter

$$\boxed{\mathbf{x}_i^f = \mathbf{M}\mathbf{x}_{i-1}^a}$$

$$\boxed{\mathbf{P}_i^f = \mathbf{M}\mathbf{P}_{i-1}^a\mathbf{M}^T + \mathbf{Q}}$$

$$\mathbf{K}_i = \mathbf{P}_i^f\mathbf{H}^T\left[\mathbf{H}\mathbf{P}_i^f\mathbf{H}^T + \mathbf{R}\right]^{-1}$$

$$\boxed{\mathbf{P}_i^a = \left[\mathbf{I} - \mathbf{K}_i\mathbf{H}\right]\mathbf{P}_i^f}$$

$$\boxed{\mathbf{x}_i^a = \mathbf{x}_i^f + \mathbf{K}_i(\mathbf{y}_i^0 - \mathbf{H}\mathbf{x}_i^f)}$$

Ensemble Kalman Filter

$$\boxed{\mathbf{x}_i^{f(1,..,m)} = M\mathbf{x}_{i-1}^{a(1,..,m)}}$$

$$\boxed{\mathbf{P}_i^f = \mathbf{E}_i^f\left(\mathbf{E}_i^f\right)^T}$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{E}\left[\mathbf{I} + (\mathbf{H}\mathbf{E})^T\mathbf{R}^{-1}\mathbf{H}\mathbf{E}\right]^{-1}(\mathbf{H}\mathbf{E})^T\mathbf{R}^{-1}$$

$$\boxed{\mathbf{P}_i^a = \left[\mathbf{I} - \mathbf{K}_i\mathbf{H}\right]\mathbf{P}_i^f}$$

$\mathbf{P}_i^a$の平行根 E_i^a (アンサンブル摂動)をアンサンブル平均に加えて $\mathbf{x}_i^{a(1,...,m)}$ をつくる。

$$\boxed{\mathbf{x}_i^a = \overline{\mathbf{x}}_i^f + \mathbf{K}_i(\mathbf{y}_i^0 - \mathbf{H}\overline{\mathbf{x}}_i^f)}$$

いろいろなデータ同化手法

1. **関数当てはめ法**
2. **修正法**
3. **最適内挿法**
4. **ナッジング法**
5. **変分法**

関数当てはめ法

- 観測値のみを使って観測場を表現。
- 三角関数やスプライン関数などの線形結合によって観測場を表現する。
- 各関数の重みは関数による場と観測による場の違いが小さくなるように、最小二乗法で決められる。

- 欠点

  データの空白域（砂漠や海洋など）で実際の場とかなり異なる値を与えてしまうことがある。

最適内挿法

- ＊＊＊＊＊＊
- 観測点と格子点の距離、観測誤差、観測点の不均質な分布などが重みの決定に関係してくる。
- 格子点から遠い･信頼性が低い･観測点がお互いに近い　→　重みは小さい

変分法

ナッジング法