「データ科学: 理論から実用へ演習」

中野 慎也

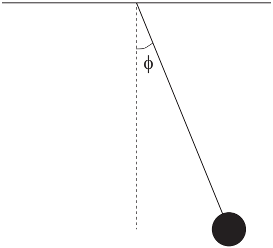
14 September 2023

単振り子

以下のような強制振動付き振り子の運動方程式

$$\frac{d^2\phi}{dt^2} = -\left(\frac{2\pi}{T_p}\right)^2 \sin\phi - \gamma\frac{d\phi}{dt} + f\cos\phi\sin\left(\frac{2\pi t}{T_f}\right) \tag{1}$$

を修正オイラー法で解くモデルに，アンサンブルカルマンフィルタ，4 次元変分法でデータ同化を行うプログラムを実装する．



単振り子

修正オイラー法は微分方程式

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}, t) \tag{2}$$

を

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{g}\left(\boldsymbol{x}_k + \frac{1}{2}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_k, t_k)\Delta t,\ t_k + \frac{\Delta t}{2}\right)\Delta t \tag{3}$$

のような手続きで解く．同化するデータは，同じモデルから

$$y_k = \phi_k + w_k, \quad (w_k \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{R})) \tag{4}$$

で生成されたものを使う．

補足

微分方程式を

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}, t)$$

の形で書くために，元の運動方程式を

$$\begin{aligned}
\frac{d\phi}{dt} &= \dot{\phi} \\
\frac{d\dot{\phi}}{dt} &= -\left(\frac{2\pi}{T_p}\right)^2 \sin\phi - \gamma\dot{\phi} + f\cos\phi \sin\left(\frac{2\pi t}{T_f}\right)
\end{aligned}$$

のように書き直して解いている．したがって，x は 2 次元ベクトル．

アンサンブルカルマンフィルタ (EnKF) のアルゴリズム

- アンサンブルの標本平均，標本分散を求める．

$$\bar{\boldsymbol{x}}_{k|k-1} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{x}_{k|k-1}^{(i)},$$

$$\bar{\mathbf{P}}_{k|k-1} = \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(\boldsymbol{x}_{k|k-1}^{(i)} - \bar{\boldsymbol{x}}_{k|k-1})(\boldsymbol{x}_{k|k-1}^{(i)} - \bar{\boldsymbol{x}}_{k|k-1})^T$$

- カルマンゲイン $\bar{\mathbf{K}}_k = \bar{\mathbf{P}}_{k|k-1}\mathbf{H}_k^T(\mathbf{H}_k\bar{\mathbf{P}}_{k|k-1}\mathbf{H}_k^T + \mathbf{R}_k)^{-1}$ を求めた上で，各アンサンブルメンバーに以下を適用し，アンサンブルを更新する:

$$\boldsymbol{x}_{k|k}^{(i)} = \boldsymbol{x}_{k|k-1}^{(i)} + \bar{\mathbf{K}}_k(\boldsymbol{y}_k - \mathbf{H}_k\boldsymbol{x}_{k|k-1}^{(i)} + \boldsymbol{r}_k^{(i)}).$$

- 推定値には，更新したアンサンブルの標本平均を使う．

$$\bar{\boldsymbol{x}}_{k|k} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{x}_{k|k}^{(i)}.$$

解析値の計算

$$\mathbf{X}_{k|k-1} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}^{(1)}_{k|k-1} - \bar{\boldsymbol{x}}_{k|k-1} & \cdots & \boldsymbol{x}^{(N)}_{k|k-1} - \bar{\boldsymbol{x}}_{k|k-1} \end{pmatrix}$$

という行列を定義すると，アンサンブルの標本分散は

$$\bar{\mathbf{P}}_{k|k-1} = \frac{1}{N-1}\mathbf{X}_{k|k-1}\mathbf{X}^T_{k|k-1}$$

と書ける．さらに $\mathbf{Y}_{k|k-1} = \mathbf{H}_k\mathbf{X}_{k|k-1}$ とおくと，先程のカルマンゲインの式は

$$\begin{aligned}
\bar{\mathbf{K}}_k &= \bar{\mathbf{P}}_{k|k-1}\mathbf{H}_k^T(\mathbf{H}_k\bar{\mathbf{P}}_{k|k-1}\mathbf{H}_k^T + \mathbf{R}_k)^{-1} \\
&= \frac{1}{N-1}\mathbf{X}_{k|k-1}\mathbf{X}^T_{k|k-1}\mathbf{H}_k^T\left(\frac{1}{N-1}\mathbf{H}_k\mathbf{X}_{k|k-1}\mathbf{X}^T_{k|k-1}\mathbf{H}_k^T + \mathbf{R}_k\right)^{-1} \\
&= \frac{1}{N-1}\mathbf{X}_{k|k-1}\mathbf{Y}^T_{k|k-1}\left(\frac{1}{N-1}\mathbf{Y}_{k|k-1}\mathbf{Y}^T_{k|k-1} + \mathbf{R}_k\right)^{-1}
\end{aligned}$$

と書ける．プログラムは，こちらの式にしたがった書き方になっている．

4 次元変分法 (4DVAR) のアルゴリズム

4DVAR では，評価関数

$$J = \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}_b)^T \mathbf{B}^{-1}(\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}_b) + \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{K}(\boldsymbol{y}_k - \mathbf{H}\boldsymbol{x}_k)^T \mathbf{R}^{-1}(\boldsymbol{y}_k - \mathbf{H}\boldsymbol{x}_k)$$

を最小化するために，Forward 計算と Backward 計算を 1 回ずつ行って計算できる $\nabla_{\boldsymbol{x}_0} J$ を使う．

得られた $\nabla_{\boldsymbol{x}_0} J$ を使って降下法で J を小さくしていく．ここでは，最急降下法を用いている．

4 次元変分法 (4DVAR) のアルゴリズム

4DVAR では，以下の手順で $\nabla_{\boldsymbol{x}_0} J$ を求める．

- 初期値 x_0 を与えて，シミュレーションを時間ステップ K まで実行し，$\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_K$ を得る (Forward 計算)．
- $\boldsymbol{\lambda}_K = \mathbf{H}_K^T \mathbf{R}^{-1} [\boldsymbol{y}_K - \mathbf{H}\boldsymbol{x}_K]$ と設定する．
- $k = K-1, \dots, 1$ について，

$$\boldsymbol{\lambda}_k = \mathbf{H}_k^T \mathbf{R}^{-1} [\boldsymbol{y}_k - \mathbf{H}_k \boldsymbol{x}_k] + \mathbf{M}_{k+1}^T \boldsymbol{\lambda}_{k+1}$$

  を順々に計算する (Backward 計算)．
- $\nabla_{\boldsymbol{x}_0} J$ を

$$\nabla_{\boldsymbol{x}_0} J = \mathbf{B}^{-1} [\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}_b] - \mathbf{M}_1^T \boldsymbol{\lambda}_1$$

  のように得る．

但し，$\mathbf{M}_k$ は forward 計算で得た $\boldsymbol{x}_{k-1}$ における $\mathcal{M}$ のヤコビ行列．

アジョイントコード

例題の修正オイラー法では

$$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}_{k-1} + \boldsymbol{g}\left(\boldsymbol{x}_{k-1} + \frac{1}{2}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_{k-1}, t_{k-1})\Delta t,\ t_{k-1} + \frac{\Delta t}{2}\right)\Delta t$$

の形になるので，これを

$$\boldsymbol{x}_k = \mathcal{M}(\boldsymbol{x}_{k-1})$$

とおいたときの，$\boldsymbol{x}_{k-1}$ における，$\mathcal{M}$ のヤコビ行列が M_k となる

$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_k, t_k) = \boldsymbol{g}(\phi_k, \dot{\phi}_k, t_k)$ は

$$\boldsymbol{g}(\phi_k, \dot{\phi}_k, t_k) = \begin{pmatrix} \dot{\phi}_k \\ -\left(\frac{2\pi}{T_p}\right)^2 \sin\phi_k - \gamma\dot{\phi}_k + f\cos\phi_k \sin\left(\frac{2\pi t_k}{T_f}\right) \end{pmatrix}.$$

アジョイントコード

$$\mathcal{M}(\boldsymbol{x}_{k-1}) = \boldsymbol{x}_{k-1} + \boldsymbol{g}\left(\boldsymbol{x}_{k-1} + \frac{1}{2}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_{k-1}, t_{k-1})\Delta t,\ t_{k-1} + \frac{\Delta t}{2}\right)\Delta t$$

を使って $\mathbf{M}_k$ を求めると，$\boldsymbol{x}'_{k-1} = \boldsymbol{x}_{k-1} + \frac{1}{2}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_{k-1}, t_{k-1})\Delta t,\ t'_{k-1} = t_{k-1} + \frac{\Delta t}{2}$ とおいて，

$$\mathbf{M}_k = \left.\frac{\partial \mathcal{M}}{\partial \boldsymbol{x}^T}\right|_{\boldsymbol{x}_{k-1}, t_{k-1}} = \mathbf{I} + \left.\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}^T}\right|_{\boldsymbol{x}'_{k-1}, t'_{k-1}} \left(\mathbf{I} + \frac{\Delta t}{2}\left.\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}^T}\right|_{\boldsymbol{x}_{k-1}, t_{k-1}}\right)$$

但し，$\left.\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}^T}\right|_{\boldsymbol{x}_{k-1}, t_{k-1}}$ は，$\boldsymbol{g}$ の $\boldsymbol{x}_{k-1},\ t_{k-1}$ におけるヤコビ行列．

アジョイントコード

$$\boldsymbol{g}(\phi_{k-1}, \dot{\phi}_{k-1}, t_{k-1}) = \begin{pmatrix} \dot{\phi}_{k-1} \\ -\left(\frac{2\pi}{T_p}\right)^2 \sin\phi_{k-1} - \gamma\dot{\phi}_{k-1} + f\cos\phi_{k-1}\sin\left(\frac{2\pi t_{k-1}}{T_f}\right) \end{pmatrix}$$

なので，

$$\left.\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}^T}\right|_{\boldsymbol{x}_{k-1}, t_{k-1}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\left(\frac{2\pi}{T_p}\right)^2 \cos\phi_{k-1} - f\sin\phi_{k-1}\sin\left(\frac{2\pi t_{k-1}}{T_f}\right) & -\gamma \end{pmatrix}.$$

アジョイントコード

$\mathcal{M}$ のヤコビ行列 M_k の転置がアジョイントコードに相当する．

$$\mathbf{M}_k^T = \mathbf{I} + \left(\mathbf{I} + \frac{\Delta t}{2} \left. \frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}^T} \right|_{\boldsymbol{x}_{k-1}, t_{k-1}} \right)^T \left. \frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}^T} \right|^T_{\boldsymbol{x}'_{k-1}, t'_{k-1}}$$

アジョイントモデルは，

$$\mathbf{M}_k^T \boldsymbol{\lambda}_k = \boldsymbol{\lambda}_k + \left(\mathbf{I} + \frac{\Delta t}{2} \left. \frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}^T} \right|_{\boldsymbol{x}_{k-1}, t_{k-1}} \right)^T \left. \frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}^T} \right|^T_{\boldsymbol{x}'_{k-1}, t'_{k-1}} \boldsymbol{\lambda}_k$$

を返すように書いてある．