

隐式等权重粒子滤波在高维准地转模式中特性研究*

陈妍^{1,2} 朱孟斌^{1,2} 张卫民¹ 曹小群¹

CHEN Yan ZHU Mengbin ZHANG Weimin CAO Xiaoqun

1. 国防科学技术大学海洋科学与工程研究院, 湖南长沙, 410073

2. 国防科学技术大学计算机学院, 湖南长沙, 410073

1. *Academy of Ocean Science and Engineering, National University of Defense Technology, Changsha, 410073, China*2. *College of Computer, National University of Defense Technology, Changsha, 410073, China*

2016-09-30 收稿, 2017-09-06 改回。

陈妍, 朱孟斌, 张卫民, 曹小群. 2018. 隐式等权重粒子滤波在高维准地转模式中特性研究. 气象学报, 76 (待刊)

Chenyan, Zhu Mengbin, Zhang Weimin, Cao Xiaoqun. 2018. Implicit equal-weights particle filter in a high-dimensional quasi-geostrophic model. *Acta Meteorologica Sinica*, 76(in press) (in Chinese)

Abstract Implicit equal-weights particle filter (IEWPF) has beaten the “curse of dimensionality” in high-dimensional non-linear geophysical models, which has plagued the particle filters community for decades. The IEWPF draws samples from the proposal density with different covariances for each particle and construct equal-weights for all the particles. The IEWPF is implemented in a high-dimensional two-layer quasi-geostrophic model to check its features and properties. The experiment results show that the new particle filter method has a very good consistency and yields excellent data assimilation results. The horizontal kinetic energy spectrum test indicates that the new method can keep the original balance of the model variables. The comparison between IEWPF and equivalent weights particle filter (EWPF) reveals that IEWPF has a better computation cost than EWPF, while both of them are very good when compared with the analyses. Therefore, implicit equal-weights particle filter opens a door for solving the advanced data assimilation problems such as parametrization, etc.

Keywords Implicit equal-weights particle filter, Curse of Dimensionality, Proposal Density, High-Dimensional Quasi-Geostrophic Model

摘要 [目的] 粒子滤波自从被引入到资料同化领域以来, 对于高维系统存在的粒子衰退问题一直困扰着资料同化领域的研究。[资料和方法] 隐式等权重粒子滤波 (Implicit Equal-Weights Particle Filter, IEWPF) 通过在高维的状态空间维数的前提下, 隐式从每个粒子都具有特殊协方差的提议密度 (proposal density) 中进行采样, 构建等权重的粒子集合, [结果] 从而解决了高维系统的粒子衰退问题。[结论] 本文通过在高维准地转模式中应用 IEWPF 方法, 验证了 IEWPF 的系统一致性和资料同化效果。通过对水平动能谱的检验, 验证了 IEWPF 可以保持系

*资助课题: 自然科学基金项目 41375113, 41475094 和 41675097。

作者简介: 陈妍, 主要从事海洋资料同化方法研究。E-mail: chenyanmsc2009@126.com

通讯作者: 陈妍, 主要从事海洋资料同化方法研究。E-mail: chenyanmsc2009@126.com

统的原始平衡特性。通过 IEWPF 与等权重粒子滤波 (Equivalent Weights Particle Filter, EWPF) 的对比试验发现, 两者的资料同化分析场非常接近, 但在运行效率上, IEWPF 远好于 EWPF。同时, IEWPF 也为解决一系列的资料同化问题, 比如参数估计, 提供了新的解决途径。

关键词: 隐式等权重粒子滤波, 维数灾难, 提议密度, 高维准地转模式

中图法分类号 P456.7

1 引言

[前人研究进展] 资料同化方法经过多年的发展, 从基础的松弛逼近方法和逐步订正法为代表的经验资料同化方法, 发展到最优插值、三维变分同化和四维变分同化 (Cao, et al, 2011, 2015; Zhu, et al, 2014) 为代表的统计资料同化方法, 以及现在的以集合卡尔曼滤波和混合资料同化方法为代表的集合资料同化方法。在资料同化方法发展的过程中, 变分资料同化方法和集合卡尔曼滤波方法均包含有线性假设和高斯假设, 粒子滤波不需要线性和高斯分布假设, 是一种相对先进的资料同化方法。

粒子滤波采用蒙特-卡洛方法采样的样本集合来表示和计算后验概率分布, 摒除了线性化模式和线性化观测算子的假设, 同时也不需要先验概率的高斯分布假设, 粒子滤波可以模拟非高斯分布的后验概率函数分布, 这成为了粒子滤波最大的优势。粒子滤波第一次由 Doucet (Doucet, et al, 2001) 引入并成功应用到了低维系统当中。由于地球物理模式或者大气模式的状态量的维数大致在 10^9 维, 现在超级计算机的计算和存储能力限制, 无法使用大规模的粒子集合, 因此粒子集合的成员数量级大约在 10-100。Snyder 的研究 (Snyder, et al, 2008, 2015; Snyder, 2011) 表明, 粒子滤波粒子数目随着模式维数的增加而呈指数级增长。粒子滤波通常分为两步: 预报步, 模式在时间上的演进; 分析步 (权重步), 给出了集合中每个粒子的相对权重。在大多数情况下, 粒子滤波的粒子权重和每个粒子的似然 (likelihood) 是成比例的。因此, 越接近所有观测的粒子, 其所获得的权重越大。在粒子滤波模式不断向前演进的情况下, 大多数的粒子会渐渐远离观测, 以至于其粒子权重变得越来越小直到可以忽略。在整个粒子滤波运行过程的最后阶段, 绝大多数的权重都会集中到一个粒子之上, 使得这个粒子的权重接近于 1, 这就是所谓的“维数灾难 (Curse of Dimensionality)” (Doucet, et al, 2001; Doucet, et al, 2000; van Leeuwen, 2009)。

[研究的意义] 在高维系统中, 粒子滤波采用一个有限大小粒子集合来模拟后验概率分布, 为了解决“维数灾难”问题, 对于粒子权重本身构成的集合的方差取最小值, 此时粒子权重在权重均值周围的波动最小, 权重之间的差异也就最小, 最优提议密度 (Doucet, et al, 2000) 的思想来源于此。Bocquet 等 (2010) 指出最优提议密度在小的集合成员数情况下, 在 Lorenz96 系统中的表现要优于连续重要性重采样方法 (SIR)。提议密度通过从接近所有观测的高概率区域采样, 并且通过引导粒子向观测区域演进, 部分解决了“维数灾难”问题。Chorin 和 Tu 于 2009 年引入了隐式采样 (Chorin, et al, 2009), 这个方法在复杂状态空间和原始状态空间之间建立了隐式映射关系。研究发现 (Ades, et al, 2013), 当每个时间步都存在观测时, 隐式粒子滤波会衰退成为最优提议密

度方法。

[本研究切入点]隐式等权重粒子滤波（IEWPF）(Zhu, et al, 2016)，结合了提议密度和隐式采样的两种方法的优点，通过假设一个从复杂提议密度空间到标准高斯分布的隐式映射关系，将一个非常复杂的等权重问题简化成为一个求解伸缩参数的问题。IEWPF 方法在 1,000 维的线性模型和 Lorenz 96 模型上进行了测试，两个系统的试验结果显示了非常好的性质和一致性 (Zhu, et al, 2016)。每一个粒子都被引导到最差表现的粒子权重的区域，即目标权重被设置成表现最差的粒子的权重值，使得每个粒子的权重都等于目标权重。**[拟解决的关键问题]**通过使得粒子提议密度依赖于前一时刻的所有粒子，IEWPF 解决了困扰粒子滤波领域多年的“维数灾难”问题。

隐式等权重粒子滤波最终目标是进行业务化应用，但是这个过程是一个循序渐进的进程，Zhu 等 (Zhu, et al, 2016) 展示了隐式等权重粒子滤波的理论框架和在 Lorenz96 系统中的应用特性。本文将研究隐式等权重粒子滤波在较为复杂的准地转模式中的基础原理和所表现的特性。准地转理论是 Charney 于 1948 年在动力学分析中首先应用 (Charney, 1948)。随后，Burger (Burger, 1958)，Phillips (Phillips, 1963) 等发展和扩充了准地转理论，给出了多种准地转近似运动的原始方程组。准地转模式显示了静力平衡和地转平衡限制并以逼近真实的方式简化了大气运动，其提供了一个简单的学习框架用以理解和诊断二维或者三维的天气尺度的大气或者海洋运动。准地转运动帮助我们理解质量场（通过横向温度平流）和动量场（通过水平涡度平流）交互产生垂直循环，进而产生真实的天气尺度大气或者海洋模式。准地转运动提供了垂直运动的强迫场以及和中尺度热带气旋相关的云/降水模式的物理视角。

本文将针对隐式等权重粒子滤波的基础理论及其在二层高维准地转模式中的应用特性进行描述，IEWPF 通过构建后验概率分布函数的采样样本，使得所有的粒子在同化观测之后均具有相等的粒子权重。因此，几乎目前所有粒子滤波方法中使用的重采样步骤就变成了不必要的步骤。更重要的是，本文将会详细展示在高维系统中粒子权重计算是如何非常明显地被简化的。IEWPF 的提出为解决困扰粒子滤波领域多年的“顽疾”——“维数灾难”问题提供了一个非常有效的途径，同时也提供了一类崭新的解决高维粒子滤波资料同化问题的思路和方法。

2 隐式等权重粒子滤波基础理论

2.1 分析时间步

粒子滤波是两个理论的结合：贝叶斯理论和蒙特-卡洛方法。贝叶斯理论显示了后验概率密度函数 $p(x|y)$ 可以通过先验概率 $p(x)$ 和似然 $p(y|x)$ 的乘积来表示，观测的概率密度函数 $p(y)$ 可以被认为是一个正则化常数。

$$p(x|y) = \frac{p(x)p(y|x)}{p(y)} \quad (1)$$

蒙特-卡洛方法是指一个概率密度函数可以通过一个随机采样点或者一个粒子集合来模拟，这些随机采样点或者粒子可以通过 Delta 函数来代表指定的粒子状态。

$$p(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x_i - x) \quad (2)$$

方程 (1) 和 (2) 的结合使得后验概率密度函数可以通过特定粒子状态的权重和来进行表示。

$$p(x|y) = \sum_{i=1}^N w_i \delta(x_i - x)$$

$$w_i = \frac{p(y|x_i)}{\sum_{i=1}^N p(y|x_i)} \quad (3)$$

其中, x 是模式状态, y 是观测, $p(y|x)$ 作为似然, 代表着给定的模式状态和观测的相似程度, $p(x)$ 是先验概率, $p(x|y)$ 是给定观测后的后验概率密度分布。粒子权重和似然成正比, 并且决定于粒子本身和观测的远近程度。在有限的集合成员情况下, 可能不会存在足够的粒子和观测非常接近, 因此造成了滤波衰退问题。最后, 只剩下唯一一个粒子, 却贡献了绝大多数的权重值, 使其相对权重接近于 1, 这意味着由一个粒子来代表后验概率密度函数, 从而失去了粒子滤波的统计学意义, 这就是前文提到的“维数灾难”。

将粒子滤波理论扩展到一个完整的时间序列, 其中模式状态序列为 $\{x^0, x^1, \dots, x^n\}$, 观测序列为 $\{y^1, y^2, \dots, y^n\}$ 。这样, 后验概率密度函数可以表示为:

$$p(x^n | y^{1:n}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{p(y^n | x_i^n) p(x_i^n | x_i^{n-1})}{p(y^n)} \quad (4)$$

提议密度是可以同时乘到方程 (4) 上面的一个因子, 在 IEWPF 理论中我们选择提议密度为 $q(x^n | \mathbf{x}^{n-1}, y^n)$ 。在 $q(x^n | \mathbf{x}^{n-1}, y^n)$ 中, \mathbf{x}^{n-1} 表示来自于前一个时间步的所有粒子的一个集合。那么, 模式状态从原始的概率密度函数 $p(x^n | x_i^{n-1})$ 中采样, 便转变成为了从提议密度函数中采样。这样后验概率密度函数可以表示为:

$$p(x^n | y^{1:n}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_i \delta(x^n - x_i^n) \quad (5)$$

其中 w_i 是粒子权重, 可以表示为:

$$w_i = \frac{p(y^n | x_i^n)}{p(y^n)} \frac{p(x_i^n | x_i^{n-1})}{q(x_i^n | \mathbf{x}^{n-1}, y^n)} \quad (6)$$

从提议密度函数 $q(x^n | \mathbf{x}^{n-1}, y^n)$ 中进行采样是 IEWPF 中的隐式部分。在 IEWPF 中, 并没有从原始的提议密度函数 $q(x^n | \mathbf{x}^{n-1}, y^n)$ 中进行采样, 而是从一个简单的标准高斯分布提议密度 $q(\xi)$ 中进行采样 (Chorin, et al, 2009)。通过随机映射, 这两个概率密度分布函数的关系是:

$$q(x^n | \mathbf{x}^{n-1}, y^n) = \frac{q(\xi)}{\left\| \frac{dx}{d\xi} \right\|} \quad (7)$$

其中, $\left\| \frac{dx}{d\xi} \right\|$ 表示变量变换 $x_i = g(\xi_i)$ 的雅可比矩阵的行列式的绝对值。

在 IEWPF 中, 定义函数 $g(\cdot)$ 为:

$$x_i^n = x_i^a + \alpha_i^{1/2} P^{1/2} \xi_i^n \quad (8)$$

其中, x_i^a 是提议密度函数 $q(x_i^n | \mathbf{x}^{n-1}, y^n)$ 的取峰值点, P 是概率密度函数的宽度 (方差), α_i 是一个标量参数。IEWPF 中 α_i 值的选取使得所有的粒子可以得到相等的粒子权重, 称这个相等的粒子权重为目标粒子权重 w_{target} 。因此, 由公式 (9) 求取每个粒子的 α_i 值:

$$w_i = \frac{p(x_i^n | x_i^{n-1}, y^n) p(y^n | x_i^{n-1})}{N p(y^n) q(x_i^n | \mathbf{x}^{n-1}, y^n)} = w_{target} \quad (9)$$

公式 (9) 是 IEWPF 的思想核心, 是 IEWPF 等权重的基本原理部分。该公式保证了 IEWPF 在拥有很大数量独立观测的高维系统中, 集合粒子权重不会产生粒子衰退现象, 从而解决了困扰粒子滤波多年的“维数灾难”问题。

令 J_i 和 J_i^{prev} 分别代表分析时刻和分析时刻前一时刻的粒子权重的两倍对数值, 那么粒子的权重公式可以写为:

$$J_i = J_i^{prev} - 2 \log \left(\frac{p(x_i^n | x_i^{n-1}, y^n) p(y^n | x_i^{n-1})}{q(\xi)} \left\| \frac{dx}{d\xi} \right\| \right) \quad (10)$$

在观测误差和模式误差为高斯分布的前提假设下, 利用 Sylvester's 行列式定理 (Sylvester's determinant lemma) 可以把公式 $\left\| \frac{dx}{d\xi} \right\|$ 简化为:

$$\left\| \frac{dx}{d\xi} \right\| = \alpha_i^{N_x/2} \|P^{1/2}\| \left| 1 + \frac{\partial \alpha_i^{1/2}}{\partial \xi_i^n} \frac{\xi_i^n}{\alpha_i^{1/2}} \right| \quad (11)$$

在高维假设下, 经过化简 (Zhu, et al, 2016), 可以得到公式如下:

$$\varepsilon_i \gamma_i - N_x \log(1 + \varepsilon_i) + \phi_i + J_i^{prev} - C = 0 \quad (12)$$

其中, 存在如下的等式关系:

$$\begin{aligned} \alpha_i &= 1 + \varepsilon_i \\ P &= (Q^{-1} + H^T R^{-1} H)^{-1} \\ \phi_i &= (y^n - Hf(x_i^{n-1}))^T (HQH^T + R)^{-1} (y^n - Hf(x_i^{n-1})) \end{aligned} \quad (13)$$

通过隐式提议密度和目标权重的设置, 可以保证所有的粒子的权重是相等的, 进而解决了“维数灾难”问题。因此, 修改后的粒子 i 的模式状态可以表示为:

$$x_i^n = f(x_i^{n-1}) + K(y^n - Hf(x_i^{n-1})) + \alpha_i^{1/2} P^{1/2} \xi_i^n \quad (14)$$

其中, $K = QH^T(HQH^T + R)^{-1}$, $P = (Q^{-1} + H^T R^{-1} H)^{-1}$, α_i 是一个伸缩参数, 可以将粒子权重伸缩至目标权重。 Q 是模式误差协方差矩阵, H 是观测算子, R 是观测误差协方差矩阵。 $f(\cdot)$ 为 $n-1$ 时刻到 n 时刻的正演模式。在高维系统模式的前提假设下, α_i 的解析解可由 Lambert W 函数求得 (Zhu, et al, 2016):

$$\alpha_i = 1 + \varepsilon_i = -\frac{N_x}{\gamma_i} W\left[-\frac{\gamma_i}{N_x} \cdot e^{-\frac{\gamma_i}{N_x}} \cdot e^{-\frac{c}{N_x}}\right] \quad (15)$$

其中, N_x 为模式状态量的维数, $c = C - \phi_i - J_i^{prev}$, $C = -2 \log w_{target}$ 是一个常数, 取之等于目标权重的两倍对数值, α_i 的解析解存在特定的结构和特性 (Zhu, et al, 2016)。

2.2 松弛逼近项

在两个观测时刻之间会存在若干个模式时间步, 通常情况下我们可以扩展上面描述的 IEWPF 框架到这一系列的时间步中, 因此 x_i^a 就变成了一条模式轨迹。在本试验中的非观测时间步, 我们采用较为简单的松弛逼近方法对粒子集合进行处理。我们指定在观测时间步之前的非观测时间步的收敛到观测位置的松弛提议密度函数为:

$$q(x_i^j | x_i^{j-1}, y^n) \sim N(M(x_i^{j-1}) + B(\tau)[y^n - hM(x_i^{j-1})], \hat{Q}) \quad (16)$$

在方程 (16) 中, $B(\tau)[y^n - hM(x_i^{j-1})]$ 是松弛项, 在时间步 n 迫使模式状态收敛到观测位置。 \hat{Q} 是修改后模式的随机强迫量的协方差矩阵, 简化处理我们选择该协方差矩阵等于 Q 矩阵。从提议密度中进行采样代替从原始模式方程中进行采样, 可以得到:

$$\frac{p(x_i^j | x_i^{j-1})}{q(x_i^j | x_i^{j-1}, y^n)} \propto \exp\left[-\frac{1}{2} v^T Q^{-1} v + \frac{1}{2} (d\beta_i^j)^T Q^{-1} (d\beta_i^j)\right] \quad (17)$$

其中, 引入短符号 v 来表示 $B(\tau)[y^n - hM(x_i^{j-1})] + d\beta_i^j$ 。

松弛强度控制量 $B(\tau)$ 可以表示为:

$$B(\tau) = b\tau QH^T R^{-1} \quad (18)$$

其中, τ 随着时间步的增加而从 0 到 1 呈线性增加, b 是一个可以定义的常数, $B(\tau)$ 控制着松弛收敛的强度。方程 (17) 的表达式在每一个时间步通过简单的 p/q 乘以粒子权重得到 w_i^{prev} 。

3 试验及分析

3.1 两层准地转模式

本节采用一个高维两层准地转模式来做理想试验, 以研究新资料同化方法的基本特性。其中, 资料同化系统代码采用的是 MatLab 代码, 而模式系统代码采用的是 Fortran 代码, 这样整个系统兼具了速度和便捷性, 同时保证了精度和守恒性。两层准地转模式的方程 (Fandry, et al, 1984; Pedlosky, 1979) 采用给定的无量纲变量表示为:

$$\frac{Dq_1}{Dt} = \frac{Dq_2}{Dt} = 0 \quad (19)$$

其中， D/Dt 表示个别微商（全导数，对应个别变化）， q_1 和 q_2 分别表示上下两层的准地转位势涡度，其中下标 1 表示上层：

$$\begin{aligned} q_1 &= \nabla^2 \psi_1 - F_1(\psi_1 - \psi_2) + \beta y \\ q_2 &= \nabla^2 \psi_2 - F_2(\psi_2 - \psi_1) + \beta y + R_s \end{aligned} \quad (20)$$

这里 β 是科里奥利参数的（无量纲）北向微分值， R_s 表示地形强迫或者热强迫（净的热收支）。模式区域纬向采用的是循环方式，并且假设经向速度在距离区域南部和北部边界一个网格点的空间距离处消失。

无量纲化是一种标准的表示形式，为了方程的完整性我们给出无量纲化的过程。定义一个典型的长度量 L ，一个典型的速度量 U ，上下两层的厚度定义为 D_1 和 D_2 ，南部边界的科里奥利参数为 f_0 ，其北向微分值为 β_0 ，重力加速度为 g ，两层之间的位温的差异为 $\Delta\theta$ ，平均位温为 $\bar{\theta}$ 。变量头上的波浪号表示量纲的时间，空间坐标和速度，可以得到：

$$\begin{aligned} t &= \tilde{t} \frac{\bar{U}}{L} \\ x &= \frac{\tilde{x}}{L} \\ y &= \frac{\tilde{y}}{L} \\ u &= \frac{\tilde{u}}{\bar{U}} \\ v &= \frac{\tilde{v}}{\bar{U}} \\ F_1 &= \frac{f_0^2 L^2}{D_1 g \Delta\theta / \bar{\theta}} \\ F_2 &= \frac{f_0^2 L^2}{D_2 g \Delta\theta / \bar{\theta}} \\ \beta &= \beta_0 \frac{L}{\bar{U}} \end{aligned} \quad (21)$$

其中，罗斯贝数为： $\delta = \bar{U} / f_0 L$ 。

模式的预报量是定义在方形网格 $[nx \times ny]$ 上的流函数，格点总数的索引从南到北，从西到东顺序增长。该模式的时间步进算法的设计以运行速度而不是精确度为目的，其仅仅对于时间步长 Δt 的一阶导数是精确的。这样设计出于实用性的考虑，在给定仅仅一个单独的同时时间尺度上的信息的情况下可以运行一个时间步。通常情况下，一个时间步可以从流函数在一个单独时间， t ，的值开始运行，返回流函数在时刻 $t + \Delta t$ 的值。然而，为了可以在分析层中获得风和位势涡度从而可以同化风的观测，我们对时间步的离散方法进行了特殊处理，鉴于本试验的目的是测试新的隐式等权重粒子滤波方法，因此对时间步的离散处理不再赘述。

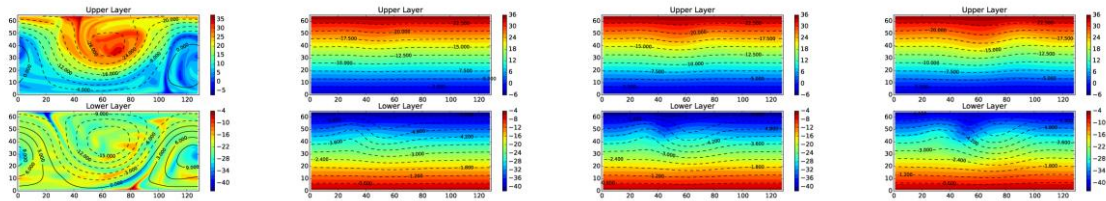
3.2 集合初始化方案和参数设置

在 (Zhu, et al, 2016) 中的高维 Lorenz 96 试验中采用的集合初始化方案为从背景误差协方差矩阵 B 中进行采样。这种集合初始化方案的优点是简单易行，针对简易的理想混沌模式试验是可行的，但是对于模拟真实大尺度大气或者海洋模式的准地转模式或者其他的一般大气 / 海洋环流模式并不适用，因为其背景误差协方差矩阵并不是真实的背景误差协方差矩阵，会随着一些因素（比如季节，日间变化等）发生变化，因此产生的随机格点上的资料同化状态量也非常有可能不满足模式系统平衡条件，极易造成模式系统运行的崩溃。因此，本文选择了另外一种集合成员初始化方案：运行一段较长时间的准地转模式，选取运行过程中的随机时间点的模式状态量，作为 IEWPF 的初始集合成员。

准地转模式采用确定性 (deterministic) 模式。本节设计的试验为资料同化试验，进行资料同化的变量有两个，分别是纬向风 u 和经向风 v 。由于风速和风向是直接观测到的变量，其与纬向风和经向风只需要一个简单转换关系，为了简化观测预处理过程，本文采用直接对纬向风和经向风进行观测。试验中的参数设置分别为：观测误差协方差矩阵为对角矩阵，其主对角元素为 $R=0.8$ ，观测算子矩阵为单位矩阵，其主对角元素为 $H=1$ ，模式误差协方差矩阵也是对角阵，在试验中设定的模式误差协方差矩阵主对角元素的值为 $Q=0.2$ 。本节的所有资料同化试验采用每五个时间步一个同化周期，即每隔四个非观测时间步一个观测时间步（同化分析时间步）。非观测时间步（非同化分析步）采用松弛逼近框架，其参数设置为 $b=0.15$ ， $\tau=0.3$ 。由于计算资源和代码开发周期的限制，本文采用使用 MatLab 和 Fortran 的混合编程方式。由于计算资源有限，本文采用占用计算资源和存储资源较少的对角矩阵作为模式误差协方差矩阵，值得注意的是，实际的模式误差各元素之间应该是存在相关性的。

关于模式的参数设置，模式格点数为：水平格点数 $nx=128$ ，垂直格点数 $ny=64$ ，模式的纬向区域长度为 $12 \times 10^6 m$ ，模式的经向区域长度为 $6.3 \times 10^6 m$ 。模式分为两层，高度分别为 $6000 m$ 和 $4000 m$ ，进行资料同化时，模式高度分别设置为 $5500 m$ 和 $4500 m$ 。模式的时间步长设置为 $\Delta t=0.036 s$ ，南部边界的科里奥利参数为 $f_0=10^{-4}$ ， f 的经向梯度值 $\beta_0=1.5 \times 10^{-11}$ 。边界条件的处理在模式的运行过程中非常重要，其涉及到模式和外界的能量和质量交换，影响到整个模式的运行效果，所以模式运行过程中设计了边界条件更新条件。

粒子滤波集合成员数设置为 20，每个粒子（集合成员）的位势涡度和流函数的初始化状态如图 1 所示：



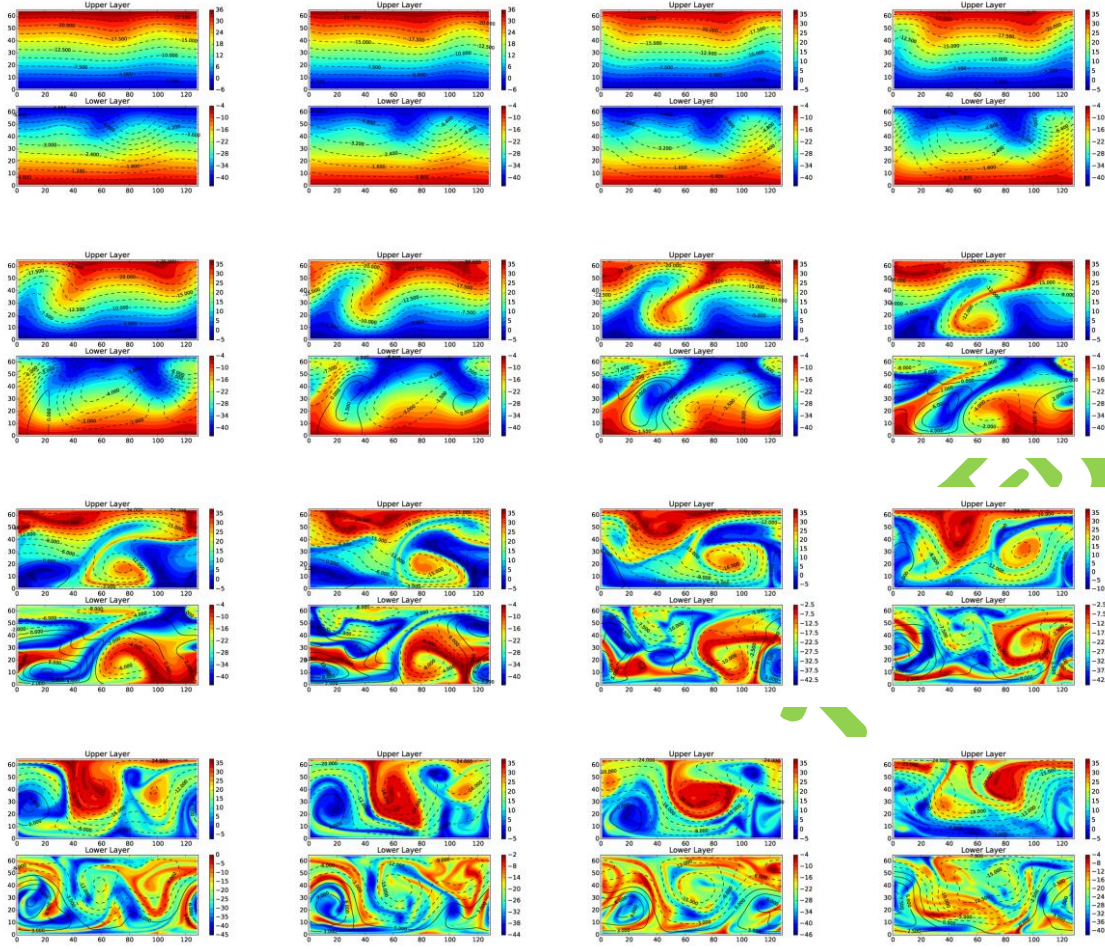


图 1 20 个粒子的模式初始位势涡度和流函数场设置
(曲线代表流函数, 虚线为负值, 实线为正值。阴影图代表位势涡度。)

Fig.1. The ensemble initial first guesses of the potential vorticity (PV) and stream function

3.3 水平动能谱

水平动能谱是在每一层上对风场 (u , v) 进行二维离散余弦变换 (two-dimensional Discrete Cosine Transform, 2D-DCT) 得到。由于离散余弦变换可以有效避免离散傅里叶变换在小尺度范围内的虚假上翘 (Peng, et al, 2014), 得到更宽的谱, 因此该方法适用于有限区域的物理量的谱展开, 并且优于基于二维离散傅里叶变换 (two-dimensional Discrete Fourier Transform, 2D-DFT) 进行的谱分析, 其计算方法如下:

记任意变量 q 的二维离散余弦变换为 $\hat{q}(\mathbf{k})$, 其中 $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ 表示水平波数矢量, $k_x = \frac{\pi}{\Delta} \frac{m}{N_i}$, $k_y = \frac{\pi}{\Delta} \frac{n}{N_j}$, N_i , N_j 分别表示纬向和经向格点总数, Δ 表示格点距离, $m = 1, 2, 3, \dots, N_i - 1$,

$n=1,2,3,\dots,N_j-1$, 总的水平波数为 $k_h = |\mathbf{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ 。这样在给定的时刻 t , 给定的高度 z 上, 单位质量的水平动能谱为:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} (\hat{u}(\mathbf{k})\hat{u}(\mathbf{k}) + \hat{v}(\mathbf{k})\hat{v}(\mathbf{k})) \quad (22)$$

一维水平波数 k_h 谱的构造是通过在 $k_x - k_y$ 平面上等 $|\mathbf{k}|$ 圆环截断求和得到的, 其计算方法如下:

$$E(k_h) = \sum_{k_h - \Delta k/2 \leq |\mathbf{k}| \leq k_h + \Delta k/2} E(\mathbf{k}) / \Delta k \quad (23)$$

其中, $k_h = \frac{\pi l}{\Delta \cdot N}$, $\Delta k = \frac{\pi}{\Delta \cdot N}$, $l=1,2,3,\dots,N-1$, $N = \min(N_i, N_j)$ 。

3.4 资料同化试验

3.4.1 资料同化效果

观测系统试验分别截取第 11 个时间步和第 96 个时间步的位势涡度以及流函数的真值场、同化分析场以及观测场, 如图 2(a), 2(b), 2(d) 和 2(e) 所示。虽然进行同化的变量并不是直接的位势涡度和流函数, 而是纬向风和经向风, 但是, 从两个时刻的对比图可以看出, IEWPF 资料同化框架可以很好的对不同的初始场进行资料同化, 同化分析场和真值场的主要特征完全相同, 只是在位势涡度和流函数的强度上有一定的减弱。这表明, 隐式等权重粒子滤波对于具有复杂关系的多变量模式, 仍然能够在后验概率密度函数的高概率区采样。

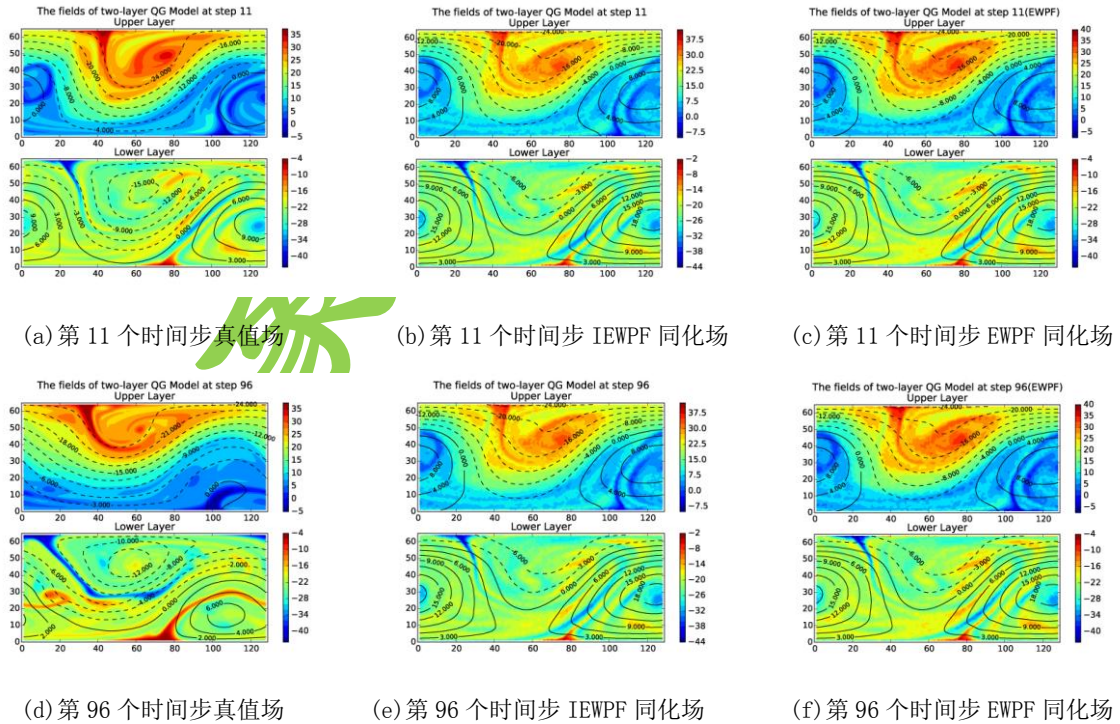


图 2 模式运行第 11 个和第 96 个时间步位势涡度和流函数的真实场及 IEWPF、EWPf 同化分析场比较 (曲线代表流函数, 虚线为负值, 实线为正值。阴影图代表位势涡度。)

Fig.2. The Truth and Comparison of IEWPF and EWPf analyses in PV and stream function at time-Steps 11 and 96

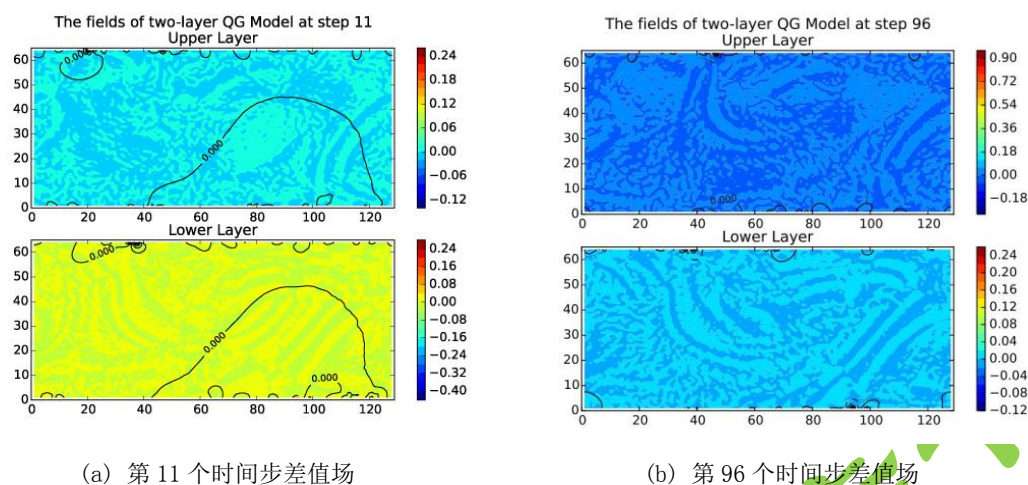


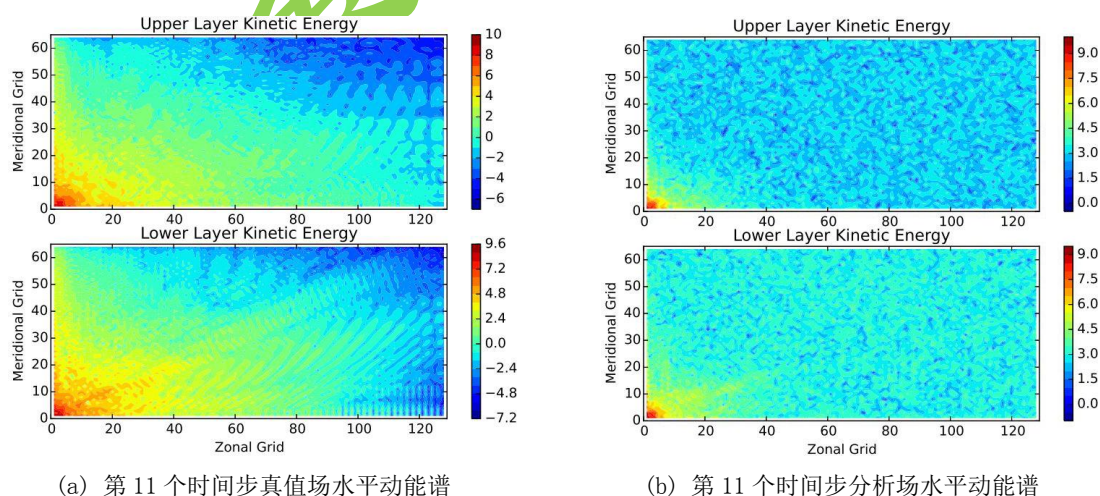
图 3 模式运行第 11 个和第 96 个时间步位势涡度和流函数同化分析场-真实场差值图
(曲线代表流函数。阴影图代表位势涡度)

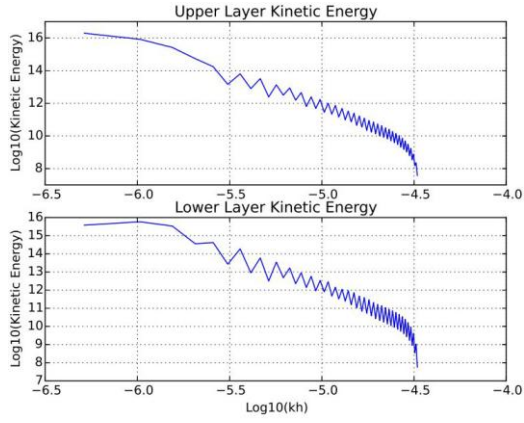
Fig.3. The departures between Analyses and Truth of PV and stream function at time-steps 11 and 96

图 3(a) 和图 3(b) 显示的是第 11 个时间步和第 96 个时间步的位势涡度和流函数的同化分析场与真实场的差值图, 从图中可以看出, 其实其同化分析场和真值场的差异非常小, 而且在区域内分布比较平均, 在边界处相对略大一些, 并且随着资料同化的时间增长, 两者的差值越来越小。

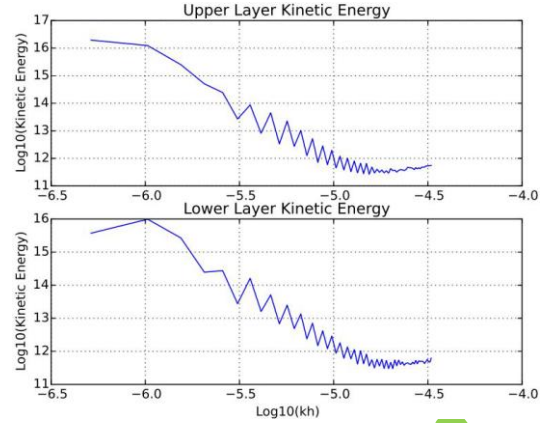
3.4.2 水平动能谱图

水平动能谱和一维水平波数谱是评判模式的一个标准, 同化前后水平动能谱和一维水平波数谱的变化可以反映出同化系统本身对于变量平衡性的一种度量标准。



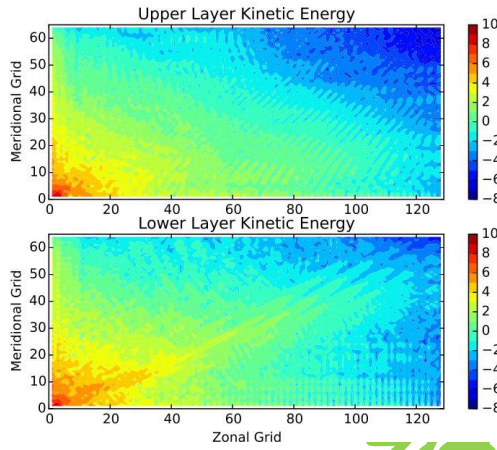


(c) 第 11 个时间步真值场一维水平波数谱

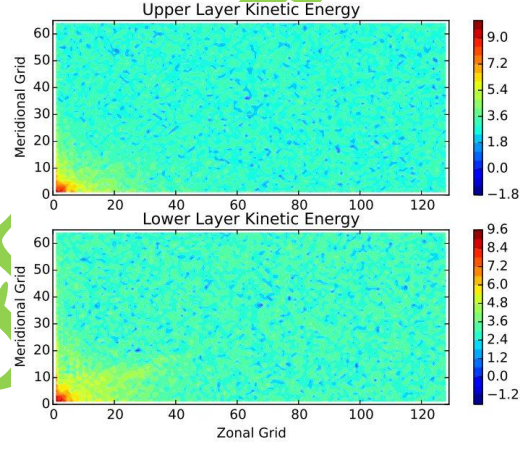


(d) 第 11 个时间步分析场一维水平波数谱

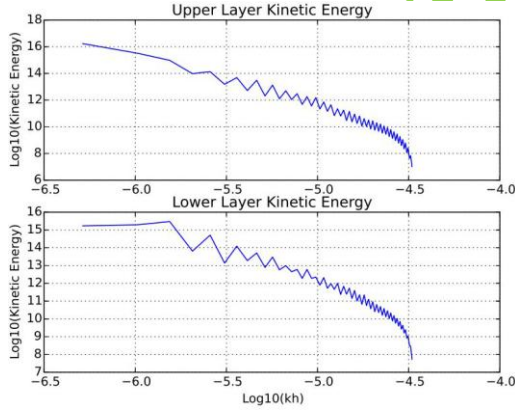
图 4 模式运行第 11 个时间步真实场和同化分析场水平动能谱和一维水平波数谱比较
Fig. 4. The kinetic energy spectrums and 1-D wave number spectrums of the Truth and analyses at Time-Step 11



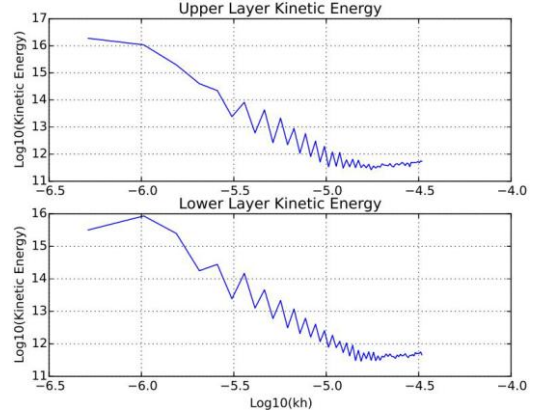
(a) 第 96 个时间步真值场水平动能谱



(b) 第 96 个时间步分析场水平动能谱



(c) 第 96 个时间步真值场一维水平波数谱



(d) 第 96 个时间步分析场一维水平波数谱

图 5 模式运行第 96 个时间步真实场和同化分析场水平动能谱和一维水平波数谱比较
Fig. 5. The kinetic energy spectrums and 1-D wave number spectrums of the Truth and analyses at time-Step 96

观测的生成是在真值场从模式状态空间映射到观测空间之后，添加分布为 $N(0, R)$ 的高斯噪声得到，可以看出在图 4(b) 和图 5(b) 中，噪声的分布影响了整个区域的能量谱的分布。由于高斯噪

声属于全频域范围内的影响,因此在图 4(c)和图 4(d)以及图 5(c)和图 5(d)的对比中,可以明显看出高斯噪声对水平动能谱和一维水平波数谱的影响,主要差异在于加在模拟观测之上的高斯噪声影响了频谱的高频部分的分布。

3.4.3 和等权重粒子滤波方法进行对比

等权重粒子滤波(Ades, et al, 2013; van Leeuwen, 2010, 2011; Ades, et al, 2015a, b) (EWPF) 同样利用提议密度引导粒子成员演进到后验概率密度函数的高概率区域,和隐式等权重粒子滤波的基础思想相似。等权重粒子滤波已经经过了真实的海洋气候模式 HadCM3 试验验证,是一种有效的资料同化方法(Browne, et al, 2015)。因此,等权重粒子滤波和隐式等权重粒子滤波作为两种资料同化方法进行比较。

等权重粒子滤波试验中,采用和隐式等权重粒子滤波完全相同的参数设置和收敛松弛项,不采用重采样步骤,保留 100%的粒子成员。等权重粒子滤波资料同化分析场结果如图 2(c)和图 2(f)所示。经过对比发现,两者的资料同化分析场非常接近,因此两者的资料同化效果对于二层的准地转模式是近乎相同的。但是,从资料同化系统运行的时间上,运行相同时间步的试验,隐式等权重粒子滤波所花的时间为 628.4426s,而等权重粒子滤波运行的时间为 937.0624s,可见在运行效率上,隐式等权重粒子滤波要远远好于等权重粒子滤波。

4 结 论

隐式等权重粒子滤波方法(IEWPF)采用等权重隐式采样方法,使得粒子成员向着观测集中的位置运动,使得所有粒子成员的权重等于目标权重,从而解决了“维数灾难”问题。论文通过在较大规模的两层准地转模式上验证隐式等权重粒子滤波,验证了隐式等权重粒子滤波的一致性和优越性。对于静力平衡的两层准地转模式,IEWPF 通过资料同化得到的分析场很好地得到了真实场的主要特征,并且随着时间的增加推移,真实场和同化分析场之间的差值逐渐减小,其水平能量谱也和真实场的水平能量谱相似,其主要差异在于加在模拟观测之上的高斯噪声影响了频谱的高频部分的分布。

隐式等权重粒子滤波方法为高维非线性资料同化问题提供了有效的解决方案,经过本文的试验以及与等权重粒子滤波的对比试验证明了该资料同化方法的高效及可靠性。同时,隐式等权重粒子滤波也为资料同化领域的其他问题提供了很优秀的解决方案,比如利用资料同化方法进行参数估计等。当然,隐式等权重粒子滤波距离实际应用仍然存在许多问题,如粒子的初始化、参数的选取、并行算法的设计等。而最主要的问题在于,隐式等权重粒子滤波需要模式误差协方差矩阵构成移动粒子的增益矩阵,但目前国际上对于模式误差本身的知识知之甚少,因此针对模式误差的研究已作为作者研究的主要内容。

致谢: 感谢英国雷丁大学 Peter Jan van Leeuwen 教授对作者的悉心指导,感谢国防科大海洋科学与工程研究院吴建平研究员、彭军博士关于动能谱的讨论。

参考文献

- Ades M, van Leeuwen P J. 2013. An exploration of the equivalent weights particle filter. *Quart J Roy Meteor Soc*, 139(672): 820-840
- Ades M, van Leeuwen P J. 2015a. The equivalent-weights particle filter in a high-dimensional system. *Quart J Roy Meteor Soc*, 141(687): 484-503
- Ades M, van Leeuwen P J. 2015b. The effect of the equivalent-weights particle filter on dynamical balance in a primitive equation model. *Mon Wea Rev*, 143(2): 581-596
- Bocquet M, Pires Carlos A, Wu L. 2010. Beyond Gaussian statistical modeling in geophysical data assimilation. *Mon Wea Rev*, 138(8): 2997-3023
- Browne P A, van Leeuwen P J. 2015. Twin experiments with the equivalent weights particle filter and HadCM3. *Quart J Roy Meteor Soc*, 141(693): 3399-3414
- Burger A P. 1958. Scale consideration of planetary motions of the atmosphere. *Tellus*, 10(2): 195-205
- Cao X Q, Song J Q, Zhang W M, et al. 2011. Application of MCMC method for solution of biological inverse problems. *Comput Eng Appl*, 47(26): 219-221 (in Chinese) (本条文献为中文文献, 请核对)
- Cao X Q, Huang Q B, Liu B N, et al. 2015. A new data assimilation method based on dual-number theory. *Acta Phys Sinica*, 64(13): 130502 (in Chinese) (本条文献为中文文献, 请核对)
- Charney J G. 1948. On the Scale of Atmospheric motions. *Cammermeyer in Komm* (请补充出版地信息)
- Chorin A J, Tu X. 2009. Implicit sampling for particle filters. *Proc Natl Acad Sci USA*, 106(41): 17249-17254
- Doucet A, Godsill S, Andrieu C. 2000. On sequential Monte Carlo sampling methods for Bayesian filtering. *Stat Comput*, 10(3): 197-208
- Doucet A, de Freitas N, Gordon N. 2001. *Sequential Monte Carlo Methods in Practice*. Berlin: Springer-Verlag
- Fandry C B, Leslie L M. 1984. A two-layer quasi-geostrophic model of summer trough formation in the Australian subtropical easterlies. *J Atmos Sci*, 41(5): 807-817
- Pedlosky J. 1979. *Geophysical Fluid Dynamics*. New York: Springer-Verlag
- Peng J, Zhang L F, Luo Y, et al. 2014. Mesoscale energy spectra of the Mei-Yu front system. Part I: kinetic energy spectra. *J Atmos Sci*, 71(1): 37-55
- Phillips N A. 1963. Geostrophic motion. *Rev Geophys*, 1(2): 123-176
- Snyder C, Bengtsson T, Bickel P, et al. 2008. Obstacles to high-dimensional particle filtering. *Mon Wea Rev*, 136(12): 4629-4640
- Snyder C. 2011. Particle filters, the “optimal” proposal and high-dimensional systems//*Proceedings of ECMWF Seminar on Data Assimilation for Atmosphere and Ocean*. Reading, UK: ECMWF
- Snyder C, Bengtsson T, Morzfeld M. 2015. Performance bounds for particle filters using the optimal proposal. *Mon Wea Rev*, 143(11): 4750-4761
- van Leeuwen P J. 2009. Particle filtering in geophysical systems. *Mon Wea Rev*, 137(12): 4089-4114
- van Leeuwen P J. 2010. Nonlinear data assimilation in geosciences: an extremely efficient particle filter. *Quart J Roy Meteor Soc*, 136(653): 1991-1999
- van Leeuwen P J. 2011. Efficient nonlinear data-assimilation in geophysical fluid dynamics. *Comput Fluids*, 46(1): 52-58
- Zhu M B, Zhang W M, Cao X Q, et al. 2014. Impact of GNSS radio occultation bending angle data assimilation in YH4DVAR system. *Chin Phys B*, 23(6): 069202
- Zhu M B, van Leeuwen P J, Amezcuca J. 2016. Implicit equal-weights particle filter. *Quart J Roy Meteor Soc*, 142(698): 1904-1919