PF とその周辺

竹田航太

2023 年 5 月 18 日

目次

1 仮定

$\boldsymbol{x} \in R^N$.

$$X = [\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_M] \in \mathbb{R}^{N \times M}$$

2 全体 [1]

PF のサーベイ [1] によると，PF の課題は一つの particle に重みが集中する “weight degeneracy”であり，それを改善する 4 つの方向性について紹介している．

(1) proposal density: 高次元で課題

(2) ensemble transform: localization or multi-step

(3) local Particle Filter

(4) combination with EnKF

通常の PF

$$
\begin{aligned}
p(\boldsymbol{x}^n) &\approx \sum_{i=1}^{M} w_i^{n-1} p(\boldsymbol{x}^n|\boldsymbol{x}_i^{n-1}) \\
p(\boldsymbol{x}^n|y^n) &\approx \sum_{i=1}^{M} w_i^{n-1} \frac{p(y^n|\boldsymbol{x}^n)}{p(y^n)} p(\boldsymbol{x}^n|\boldsymbol{x}_i^{n-1})
\end{aligned}
$$

と近似し $p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}_i^{n-1})$ に従うサンプル $\boldsymbol{x}_i^{n-1}$ を用いて $p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}_i^{n-1}) \approx \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_i^{n-1})$ と近似する．重みの update を

$$
w_i^n = w_i^{n-1} \frac{p(y^n|\boldsymbol{x}^n)}{p(y^n)}
$$

で行う．

2.1 Proposal density [1]

proposal density のアイデアは proposal density$q(x^n|x^{n-1}, y^n)$ を用いて

$$
p(\boldsymbol{x}^n|y^n) \approx \sum_{i=1}^{M} w_i^{n-1} \frac{p(y^n|\boldsymbol{x}^n)}{p(y^n)} \frac{p(\boldsymbol{x}^n|\boldsymbol{x}_i^{n-1})}{q(x^n|x^{n-1}, y^n)} q(x^n|x^{n-1}, y^n)
$$

と変形し $q(x^n|x^{n-1}, y^n)$ に従うサンプル x_i^n と通常のものを修正した重み

$$
\hat{w}_i^n = w_i^n \frac{p(\boldsymbol{x}^n|\boldsymbol{x}_i^{n-1})}{q(x^n|x^{n-1}, y^n)}
$$

を用いて $p(x^n|y^n)$ を近似する．

nudging(relaxation) を proposal にする方法や EnKF(PO 法) を proposal にする方法がある．いずれの場合も proposal density は Gaussian で書くことができる．

2.2 Transportation [1]

Ensemble DA において prior を posterior に移す変換 D を deterministic に探す方法.

$$
X^a = X^f D.
$$

2.2.1 ETPF

(Cheng-Reich) たとえば，ETPF は OT を用いて変換 D を求める [2].

2.2.2 Tempering

変換を多段階に分けて行う tempering という方法もある．

$$p(y|\boldsymbol{x}) = p(y|\boldsymbol{x})^{\gamma_1} \dots p(y|\boldsymbol{x})^{\gamma_K}, \quad \sum_{k=1}^{K} \gamma_k = 1$$

と分けて

$$\begin{aligned} p_1(\boldsymbol{x}|y) &= \frac{p(y|\boldsymbol{x})^{\gamma_1}}{p(y)} p(\boldsymbol{x}) \\ p_k(\boldsymbol{x}|y) &= \frac{p(y|\boldsymbol{x})^{\gamma_{k-1}}}{p(y)} p_{k-1}(\boldsymbol{x}|y) \end{aligned}$$

と K 回に分けて particle Filter を行う．

2.2.3 Particle Flow Filter

ある dynamics に従って重みの等しい prior particles を重みの等しい posterior particles に移す方法，またそのような dynamics を決める方法.

$$\frac{d}{ds}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, s)$$

density に対する方程式は Lioubille 方程式となる.

$$\partial p(\boldsymbol{x}, s) = -\nabla_x \cdot (p\boldsymbol{f}), \quad p(\boldsymbol{x}, 0) = p(\boldsymbol{x}), \quad p(\boldsymbol{x}, s_{final}) = p(\boldsymbol{x}|y).$$

2 種類の PFF が考えられる．一つ目は tempering のステップを細かくした極限 $\gamma_k = 1/K = \Delta s \to 0$ を考えること.

もう一つは Langevin Dynamics(LD) から始めるものである．posterior $p^*(\boldsymbol{x}) = p(\boldsymbol{x}|y)$ を不変測度にもつ LD を考え，対応する Fokker-Planck 方程式を導く．それは KL-divergence d_{KL} を用いて

$$\frac{dp_s}{ds} = -\nabla_p d_{KL}(p|p^*)|_{p=p_s}$$

と書ける．これを particle の方程式に戻す．ここで $p(\boldsymbol{x}|s)$ の評価が必要となってくる.

具体的な計算について，たとえば RKHS を導入することで $p(\boldsymbol{x}|s)$ の評価を近似できる．RKHS による d_{KL} の particle 近似の微分を用いて，各 particle を動かす．離散勾配法を用いた実装は [3].

3 LPF

[4] は Particle Filter における Localization を提案している．まず，通常の resampling は各 grid$j$ における解析 m-th ensemble の参照元予報 ensemble 番号 $a(j,m)$ を用いて，以下のように各 ensemble を置き換える

$$X^a_{PF}[j,m] = X^b[j,a(j,m)]$$

ただし，通常の PF では $a(j,m)$ は $j \in 1,\ldots,N$ に対して一様.

LPF では通常の PF に対して, 各 grid j の近くの grid$n \in N_j$ から決まる ensemble$X^b[j,a(n,m)]$ の寄与も加える.

$$X^a_{LPF}[j,m] = \frac{1}{2}X^a_{PF}[j,m] + \frac{1}{2\#N_j}\sum_{n\in N_j} X^b[j,a(n,m)]$$

1/2 に必要性はないように見える.

[5] は LPF を Gaussian Mixture に拡張したと言っている．まず，事前 PDF を Gaussian Mixture と考える.

$$p^b(x) \approx \sum_{i=1}^{M} w^{b(i)}\mathcal{N}(\boldsymbol{x}^{b(i)},\gamma P^b)$$

ここで，P^b は ensemble ベースの誤差共分散であり，**各 Gaussian kernel はそれに基づいて一様に取られている**. 解析ステップでは (1) 各 ensemble を KF で mean-update する．この時，誤差共分散は LETKF のように ensemble ベースで計算する．(2) 次に，LPF に従って transform する．計算過程は LETKF と LPF を順番に行うようなものであり，それらを足したコストがかかる.

4 OTPF

[6] は事前分布と観測分布の補完を Wasserstein 距離を用いて定義した．事前分布と観測分布を Dirac 測度で表している．OT 的最適化時にはエントロピー正則化を行なっている．同化後も分布のサポート点数を保つため multinomial sampling scheme を使っているらしい.

Remark 4.1. 観測が分布として得られている必要がある．誤差解析をできていない．補完比率や正則化パラメータに対する解析がない.

5 Linear Ensemble Transform Filter

SIR, EnKF, ETPF

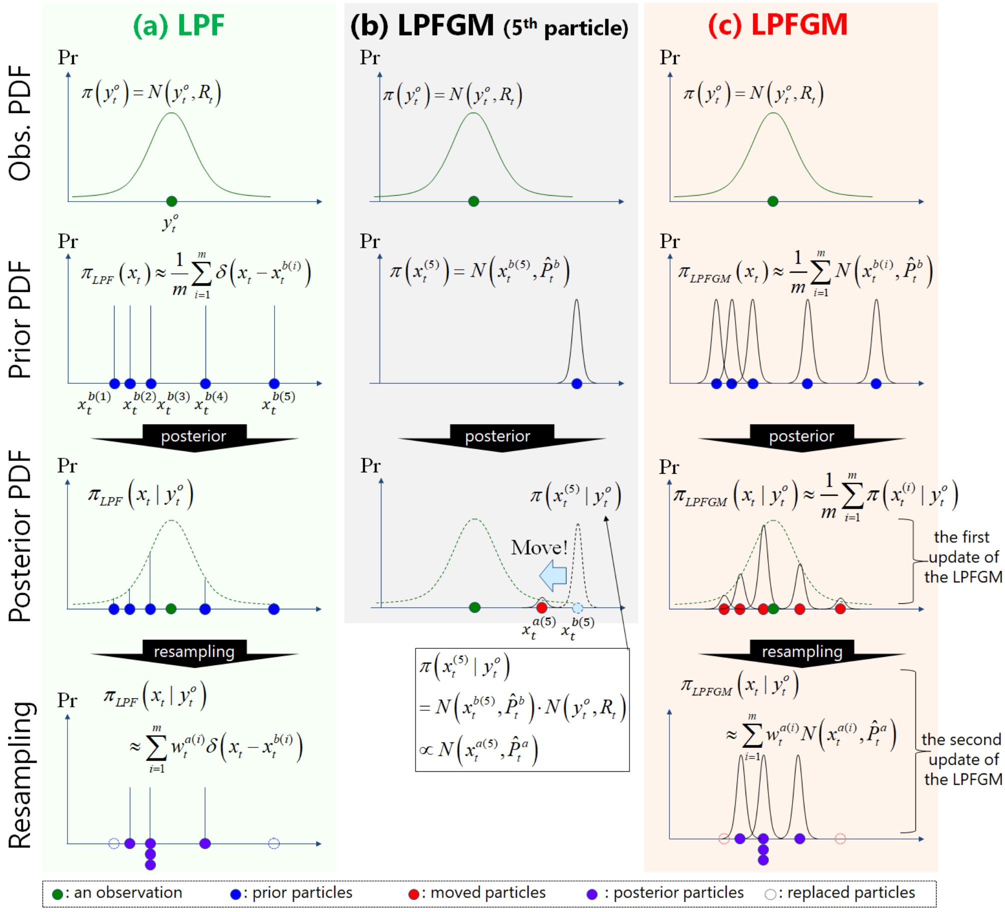

図 1 [5] の Fig.2

参考文献

[1] Peter Jan van Leeuwen, Hans R. Künsch, Lars Nerger, Roland Potthast, and Sebastian Reich. Particle filters for high-dimensional geoscience applications: A review. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 145(723):2335–2365, 2019.

[2] Sebastian Reich. A nonparametric ensemble transform method for bayesian inference. *SIAM JOURNAL ON SCIENTIFIC COMPUTING*, 35(4):A2013–A2024, 2013.

[3] Sahani Pathiraja and Sebastian Reich. Discrete gradients for computational bayesian inference. *Journal of Computational Dynamics*, 6,number = 2,pages = 385-400, 2019.

[4] Stephen G. Penny and Takemasa Miyoshi. A local particle filter for high-dimensional geophysical systems. *NONLINEAR PROCESSES IN GEOPHYSICS*, 23(5):391–405, NOV 4 2016.

[5] S. Kotsuki, T. Miyoshi, K. Kondo, and R. Potthast. A local particle filter and its gaussian mixture extension implemented with minor modifications to the letkf. *Geoscientific Model Development*, 15(22):8325–8348, 2022.

[6] Sagar K. Tamang, Ardeshir Ebtehaj, Peter J. van Leeuwen, Dongmian Zou, and Gilad Lerman. Ensemble riemannian data assimilation over the wasserstein space. *NONLINEAR PROCESSES IN GEOPHYSICS*, 28(3):295–309, JUL 6 2021.

[7] Chih-Chi Hu and Peter Jan van Leeuwen. A particle flow filter for high-dimensional system applications. *QUARTERLY JOURNAL OF THE ROYAL METEOROLOGICAL SOCIETY*, 147(737):2352–2374, APR 2021.

[8] S. Reich and C. Cotter. *Probabilistic Forecasting and Bayesian Data Assimilation.* Cambridge University Press, 2015.