

УДК 551.509.313

Экономичный алгоритм стохастического ансамблевого сглаживания

Е.Г. Климова

Федеральный исследовательский центр информационных и вычислительных технологий, просп. Акад. М.А. Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090

E-mail: klimova@ict.nsc.ru

Английская версия этой статьи печатается в журнале “Numerical Analysis and Applications” № 4, Vol. 13, 2020.

Климова Е.Г. Экономичный алгоритм стохастического ансамблевого сглаживания // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд.-ние. — Новосибирск, 2020. — Т. 23, № 4. — С. 381–394.

Оценка состояния окружающей среды по математической модели и данным наблюдений производится с помощью процедуры усвоения данных. Ансамблевый фильтр Калмана — один из наиболее популярных алгоритмов усвоения данных в настоящее время. Важной составляющей процедуры усвоения данных является оценка не только прогнозируемых величин, но и параметров, не описываемых моделью. Однократная процедура уточнения по данным наблюдений в ансамблевом фильтре Калмана может не дать требуемой точности. В связи с этим все большую популярность получает метод ансамблевого сглаживания, в котором для оценки значений в заданный момент времени применяются данные из некоторого временного интервала. В работе рассматривается обобщение предложенного ранее алгоритма, представляющего собой вариант стохастического ансамблевого фильтра Калмана. Обобщенный алгоритм является алгоритмом ансамблевого сглаживания, при котором сглаживание производится для среднего по выборке значения и затем осуществляется трансформация ансамбля возмущений. Предлагаемая в работе матрица трансформаций используется для оценки как прогнозируемой величины, так и параметра. Важным преимуществом алгоритма является его локальность, что позволяет оценивать параметр в заданном регионе. В статье приводится обоснование применимости этого алгоритма для реализации ансамблевого сглаживания. С предложенным численным алгоритмом проведены тестовые расчеты с 1-мерной моделью переноса и диффузии пассивной примеси. Предложенный алгоритм является эффективным и может быть использован для оценки состояния окружающей среды.

DOI: 10.15372/SJNM20200403

Ключевые слова: усвоение данных, ансамблевый фильтр Калмана, ансамблевое сглаживание.

Klimova E.G. An efficient algorithm for stochastic ensemble smoothing // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2020. — Vol. 23, № 4. — P. 381–394.

The state of the environment using a mathematical model and observational data using a data assimilation procedure is assessed. The Kalman ensemble filter is one of the widespread data assimilation algorithms at present. An important component of the data assimilation procedure is the assessment not only of the predicted values, but also of the parameters that are not described by the model. A single improvement procedure from observational data in the Kalman ensemble filter may not provide a required accuracy. In this regard, the ensemble smoothing algorithm, in which data from a certain time interval are used to estimate values at a given time, is becoming increasingly popular. This paper considers a generalization of the previously proposed algorithm, which is a version of the Kalman stochastic ensemble filter. The generalized algorithm is an ensemble smoothing algorithm, in which smoothing is performed for the average value of a sample and then the ensemble of perturbations is transformed. The transformation matrix proposed in the paper is used to estimate both the predicted value and the parameter. An important advantage of the algorithm is its locality, which makes it possible to estimate a parameter in a given domain. The paper provides a rationale for the applicability of this algorithm to the implementation of ensemble smoothing. Test calculations were performed with the proposed numerical algorithm with a 1-dimensional model of transport and diffusion of passive impurity. The algorithm proposed is effective and can be used to assess the state of the environment.

Keywords: *data assimilation, ensemble Kalman filter, ensemble smoother.*

1. Введение

Задача оптимальной оценки геофизических полей по данным наблюдений и математической модели является одной из наиболее актуальных в настоящее время. Оценка состояния окружающей среды по математической модели и данным наблюдений производится с помощью процедуры усвоения данных [3]. Важной составляющей процедуры усвоения данных является оценка не только прогнозируемых величин, но и параметров, не описываемых моделью. Одним из наиболее популярных алгоритмов усвоения данных является алгоритм ансамблевого фильтра Калмана (EnKF) [8]. Параметр модели может быть оценен при последовательном усвоении при наличии большого временного ряда данных наблюдений с помощью ансамблевого фильтра Калмана. Однако однократная процедура уточнения по данным наблюдений может не дать требуемой точности. В связи с этим все большую популярность получает метод ансамблевого сглаживания (EnKS), в котором для оценки значений в заданный момент времени применяются данные из некоторого временного интервала. В случае когда ошибки наблюдений и прогноза — гауссовские случайные величины, а операторы прогноза и наблюдений линейны, задача сглаживания эквивалентна вариационной задаче усвоения [7].

Алгоритмы ансамблевого фильтра Калмана и ансамблевого сглаживания были предложены в работах [4, 5]. Алгоритм ансамблевого сглаживания представляет собой обобщение ансамблевого фильтра Калмана, и с его помощью осуществляется оценка состояния окружающей среды на заданном временном интервале по данным наблюдений из некоторой временной окрестности. В нелинейном случае в настоящее время рассматриваются итерационные алгоритмы сглаживания, представляющие собой вариационную задачу с применением ансамблей для вычисления ковариаций и линеаризации операторов прогноза и наблюдений [3].

Алгоритм ансамблевого сглаживания широко применяется в задачах оценки состояния окружающей среды, в частности концентрации и эмиссии парниковых газов в атмосфере [6, 13]. В этом случае модели прогноза и наблюдений являются линейными и могут быть использованы алгоритмы ансамблевого фильтра Калмана или ансамблевого сглаживания.

Применение алгоритмов EnKF, EnKS для задач усвоения данных об окружающей среде связано с большим объемом вычислений с матрицами высокой размерности (порядка размерности вектора прогнозируемых переменных и вектора данных наблюдений). Одним из способов оптимизации вычислений является применение различных алгоритмов трансформации матрицы ансамбля возмущений [3, 8].

Ансамблевые алгоритмы фильтрации и сглаживания принято разделять на детерминированные и стохастические. В стохастическом фильтре Калмана рассматриваются данные наблюдений с возмущениями, это позволяет сделать ансамбль отклонений от среднего значения таким же, как ансамбль ошибок оценки. Ансамблевый фильтр Калмана и ансамблевое сглаживание, предложенные в [4, 5], являются стохастическими алгоритмами. Наряду с этими алгоритмами существует большое количество фильтров квадратного корня, в которых анализ производится для среднего по ансамблю значения, а ансамбль ошибок анализа получается из ансамбля ошибок прогноза с помощью матрицы трансформаций. Такие алгоритмы называются детерминированными. В настоящее время проводится большое количество исследований по сравнению стохастических

и детерминированных ансамблевых фильтров [8]. Поскольку в ансамблевом фильтре Калмана оптимальной оценкой является среднее по ансамблю, для задач с линейным оператором модели детерминированный и стохастический фильтр Калмана дают близкие результаты. В то же время следует отметить работу [12], в которой показано, что ансамбли возмущений в стохастическом и детерминированном алгоритмах имеют разные функции распределения. Кроме того, для стохастического ансамблевого фильтра Калмана в линейном случае показано, что имеет место сходимость к оптимальной байесовской оценке при бесконечном увеличении количества ансамблей [3].

В [1, 11] предложен алгоритм стохастического ансамблевого фильтра Калмана с трансформацией ансамбля возмущений (ансамблевый π -алгоритм). В данном алгоритме рассматриваются операции с матрицами порядка размерности ансамбля, как и в популярном детерминированном алгоритме LETKF [9].

В данной статье предлагается обобщение предложенного ранее ансамблевого π -алгоритма [1, 11], представляющего собой вариант стохастического ансамблевого фильтра Калмана. Обобщенный алгоритм является алгоритмом ансамблевого сглаживания, при котором сглаживание производится для среднего по выборке значения и затем осуществляется трансформация ансамбля возмущений. Предлагаемый алгоритм является стохастическим. В статье приводится теоретическое обоснование применимости трансформации возмущений для задачи ансамблевого сглаживания. Алгоритм обобщается на случай совместной оценки прогнозируемой переменной и параметра модели. Особенностью алгоритма является то, что одна и та же матрица трансформаций используется для оценки значений во всех точках временного интервала, на котором проводится процедура сглаживания. Кроме того, для оценки параметра также используется та же матрица трансформаций, что и для прогнозируемой переменной. Алгоритм обладает свойством локальности, т.е. оценка может проводиться для заданного набора узлов сетки. Это свойство важно при оценке параметра в заданном регионе. С рассматриваемым в статье алгоритмом сглаживания проведены модельные численные эксперименты для 1-мерной модели переноса и диффузии пассивной примеси.

В пункте 2 статьи приводится постановка задачи фильтрации и сглаживания. Пункт 3 посвящен описанию процедуры оценки параметров в алгоритме усвоения данных. В п. 4 рассматриваются формулы ансамблевого фильтра Калмана и ансамблевого сглаживания. В п. 5 кратко приводятся формулы ансамблевого π -алгоритма и обоснование его обобщения на случай ансамблевого сглаживания. В п. 6 описаны численные эксперименты с 1-мерной тестовой моделью по сравнению алгоритмов ансамблевой фильтрации и сглаживания. В п. 7 содержатся заключительные выводы.

2. Общая постановка задачи

Будем рассматривать данные наблюдений в дискретные моменты времени. Запишем нелинейную динамическую систему в виде дискретного по времени уравнения процесса

$$x_k^t = f(x_{k-1}^t) + \eta_{k-1}^t,$$

где $x_k^t \in \mathcal{R}^L$ — вектор состояния в момент времени t , f — оператор модели (нелинейная вектор-функция), $\eta_{k-1}^t \in \mathcal{R}^L$ — так называемый вектор “шумов модели”, гауссовская случайная переменная: $E[\eta_{k-1}^t (\eta_{k-1}^t)^\top] = Q_{k-1}^t$, где Q_{k-1}^t — матрица ковариаций “шумов модели”. Здесь и далее E обозначает теоретико-вероятностное осреднение. Будем считать x_k^t “истинным” значением. Индекс “ t ” означает “true value” (истинное значение).

Уравнение наблюдений имеет вид

$$y_k = h(x_k^t) + \varepsilon_k^t,$$

где $y_k \in \mathcal{R}^M$ — вектор наблюдений в момент времени t_k , h — оператор, переводящий значения оцениваемой величины в узлах сетки в наблюдаемые переменные в точках наблюдений (нелинейная вектор-функция), $\varepsilon_k^t \in \mathcal{R}^M$ — вектор ошибок наблюдений, гауссовская случайная переменная $E[\varepsilon_k^t (\varepsilon_k^t)^\top] = R_k^t$, где R_k^t — матрица ковариаций ошибок наблюдений. Случайные переменные ε_k^t и η_{k-1}^t считаются независимыми.

В классическом фильтре Калмана оптимальной оценкой моделируемого состояния по данным наблюдений является теоретико-вероятностное среднее. Задача оптимальной фильтрации состоит в поиске оценки \hat{x}_k , доставляющей минимум следу матрицы ковариаций ошибки J по данным наблюдений в момент времени t_k (конечный момент времени), а задача сглаживания — в поиске минимума в моменты времени t_k , $k = 0, \dots, K$, где

$$J = E(\hat{x}_k - x_k^t)^\top (\hat{x}_k - x_k^t).$$

Таким образом, ищется оптимальная оценка моделируемого состояния по данным наблюдений в смысле минимума следа матрицы ковариаций ошибок оценивания. Решение задачи фильтрации в линейном случае представляет собой алгоритм фильтра Калмана [10]. В [10] также приводятся формулы алгоритма оптимального сглаживания.

3. Оценка параметров в процедуре усвоения данных, основанной на фильтре Калмана

В случае наличия неизвестных параметров рассматривается обобщенное уравнение процесса

$$x_k^t = f(x_{k-1}^t, \alpha_{k-1}^t) + \eta_{k-1}^t$$

и данные наблюдений

$$y_k = h(x_k^t, \alpha_k^t) + \varepsilon_k^t,$$

где $x_k^t \in \mathcal{R}^{L_x}$ — вектор состояния в момент времени t_k , $\alpha_k^t \in \mathcal{R}^{L_\alpha}$ — вектор параметров. При наличии неизвестного параметра рассматривается обобщенная задача оценивания вектора $z = [x, \alpha]^\top$, и формулы фильтра Калмана применяются к этому вектору [2]. Будем считать, что параметр не меняется со временем: $\alpha_{k+1}^t = \alpha_k^t$.

4. Ансамблевый подход к задачам фильтрации и сглаживания

Для реализации алгоритма фильтра Калмана в полной постановке необходимо проведение операций с ковариационными матрицами порядка размерности моделируемой переменной и вектора наблюдений. При использовании современных прогностических моделей процессов в окружающей среде такая задача технически не реализуема. По этой причине в настоящее время очень популярен ансамблевый подход, при котором ковариационные матрицы вычисляются по ансамблю (выборке). В традиционном фильтре Калмана выделяют шаг прогноза, состоящий в вычислении по значениям в заданный момент времени значений в следующий момент времени, и шаг анализа, представляющий собой оценку значений искомой величины по прогнозу и данным наблюдений.

Ансамблевые фильтры принято разделять на стохастические и детерминированные. Стохастический ансамблевый фильтр Калмана [4, 8] состоит из ансамбля прогнозов $\{x_k^{f,n}, n = 1, \dots, N\}$:

$$x_k^{f,n} = f(x_{k-1}^{a,n}) + \eta_{k-1}^n \tag{1}$$

и ансамбля анализов $\{x_k^{a,n}, n = 1, \dots, N\}$:

$$x_k^{a,n} = x_k^{f,n} + K_k \left[y_k + \varepsilon_k^n - h(x_k^{f,n}) \right]. \tag{2}$$

В этих формулах N — количество элементов ансамбля, n — номер элемента ансамбля, k — номер шага по времени. Ансамбли (1) и (2) задают выборку значений “истины”, при этом среднее по выборке значение будет являться оптимальной оценкой, а отклонение от среднего — ансамблем ошибок прогноза и анализа соответственно. Для осуществления ансамблевого варианта алгоритма фильтра Калмана требуется определение ансамбля ошибок наблюдений $\{\varepsilon_k^n, n = 1, \dots, N\}$, а также ансамбля ошибок прогноза $\{dx_k^{f,n} = x_k^{f,n} - \overline{x_k^{f,n}}, n = 1, \dots, N\}$, где $\overline{x_k^{f,n}} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_k^{f,n}$, и ансамбля шумов модели $\{\eta_{k-1}^n, n = 1, \dots, N\}$: $E[\eta_{k-1}^n (\eta_{k-1}^n)^\top] = Q_{k-1}$. Матрица K_k имеет вид:

$$K_k = P_k^f H_k^\top (H_k P_k^f H_k^\top + R_k)^{-1},$$

где P_k^f и R_k — матрицы, оцениваемые по ансамблю:

$$P_k^f = \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^N dx_k^{f,n} (dx_k^{f,n})^\top, \quad R_k = \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^N \varepsilon_k^n (\varepsilon_k^n)^\top,$$

H_k — линеаризованный оператор $h(x_k^{f,n})$ относительно $\overline{x_k^{f,n}}$:

$$h(x_k^{f,n}) \simeq h(\overline{x_k^{f,n}}) + H_k dx_k^{f,n}.$$

Детерминированный ансамблевый фильтр Калмана (шаг анализа) состоит из уравнения для среднего значения

$$\overline{x_k^{a,n}} = \overline{x_k^{f,n}} + K_k \left[y_k - h(\overline{x_k^{f,n}}) \right]$$

и оценки ансамбля ошибок анализа такой, чтобы соответствующая ковариационная матрица удовлетворяла матричному соотношению фильтра Калмана $P_k^a = (I - K_k H_k) P_k^f$ (см. [8, 9]).

Одним из преимуществ стохастического фильтра Калмана является то, что отклонение элемента ансамбля от среднего (ensemble spread) имеет вид, аналогичный ошибке оценки — отклонению среднего значения от “истины” (ensemble skill) [8].

В работе [5] предложен алгоритм ансамблевого сглаживания Калмана (EnKS). Этот алгоритм позволяет оценивать значения в момент времени t_k по данным наблюдений за временной период, следующий за этим моментом времени.

Пусть данные наблюдений $Y = \{y_k, y_{k+1}, \dots, y_{k+l}\}$. Если ошибки наблюдений — гауссовские случайные величины и ошибки наблюдений в разные моменты времени не коррелируют, то алгоритм EnKS может осуществляться последовательно (циклически) по

мере поступления данных, используя данные в момент времени t_{k+j} для оценки значений в момент времени t_k . В конечный момент времени результаты EnKF (ансамблевого фильтра Калмана) и EnKS совпадают [4, 5].

Следуя приведенным в [4] формулам алгоритмов EnKF и EnKS, запишем шаги анализа этих алгоритмов. Будем рассматривать случай линейных операторов модели и наблюдений. Шаг анализа стохастического ансамблевого фильтра Калмана EnKF имеет вид

$$x_k^{a,n} = x_k^{f,n} + \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^N dx_k^{f,n} \left(dx_k^{f,n}\right)^\top H_k^\top (H_k P_k^f H_k^\top + R_k)^{-1} \left[y_k^0 + \varepsilon_k^n - h\left(x_k^{f,n}\right)\right].$$

Алгоритм EnKS — ансамблевое сглаживание Калмана — состоит в уточнении значений в момент времени t_k по данным в последующие моменты времени:

$$x_{k(j)}^{a,n} = x_{k(j-1)}^{a,n} + \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^N dx_{k(j-1)}^{a,n} \left(dx_{k(j-1)}^{a,n}\right)^\top H_{k+j}^\top (H_{k+j} P_{k+j}^f H_{k+j}^\top + R_{k+j})^{-1} \times \left[y_{k+j}^0 + \varepsilon_{k+j}^n - h\left(x_{k+j}^{f,n}\right)\right]. \quad (3)$$

В этой формуле индекс $k(j)$ означает, что производится оценка в момент времени t_k по данным в момент времени t_{k+j} . Известно, что в момент времени t_{k+j} результат сглаживания совпадает с результатом оптимальной фильтрации [4].

В случае когда динамическая система включает в себя также параметр, алгоритмы EnKF и EnKS могут оценивать помимо переменной также и параметр. Если оператор H линеен и не зависит от параметра, оценка параметра производится независимо. В этом случае рассматривается обобщенная задача оценивания вектора $z = [x, \alpha]^\top$ [2]. Зададим ансамбль прогнозов $\{z_k^{f,n}, n = 1, \dots, N\}$. Будем считать, что на шаге прогноза ансамбль параметров не меняется.

Опуская промежуточные выкладки, приведем формулы для оценки параметров в алгоритмах EnKF и EnKS (шаг анализа). В алгоритме EnKF оценка параметра (шаг анализа) имеет вид

$$\alpha_k^{a,n} = \alpha_k^{f,n} + \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^N d\alpha_k^{f,n} \left(dx_k^{f,n}\right)^\top H_k^\top (H_k P_k^f H_k^\top + R_k)^{-1} \left[y_k + \varepsilon_k^n - h\left(x_k^{f,n}\right)\right].$$

В алгоритме EnKS шаг анализа для параметра имеет вид

$$\alpha_{k(j)}^{a,n} = \alpha_{k(j-1)}^{a,n} + \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^N d\alpha_{k(j-1)}^{a,n} \left(dx_{k(j-1)}^{f,n}\right)^\top H_{k+j}^\top (H_{k+j} P_{k+j}^f H_{k+j}^\top + R_{k+j})^{-1} \times \left[y_{k+j}^n + \varepsilon_{k+j}^n - h\left(x_{k+j}^{f,n}\right)\right]. \quad (4)$$

Поскольку параметр оценивается по вновь поступающим данным, его оценка меняется со временем, поэтому индекс “ k ” присутствует в формулах для оценки параметра.

5. Реализация алгоритмов EnKF и EnKS с применением трансформации ансамбля возмущений

5.1. Ансамблевый π -алгоритм

Ансамблевый π -алгоритм был предложен в работах [1, 11]. Запишем уравнение для отклонения от среднего значения $dx_k^n = x_k^{a,n} - \overline{x_k^{a,n}}$, где $\overline{x_k^{a,n}} = 1/N \sum_{n=1}^N x_k^{a,n}$:

$$dx_k^n = \left(x_k^{f,n} - \overline{x_k^{f,n}} \right) - P_k^a H_k^\top R_k^{-1} \left[\varepsilon_k^n + h \left(x_k^{f,n} \right) - \overline{h \left(x_k^{f,n} \right)} \right]. \quad (5)$$

Поскольку в ансамблевом фильтре Калмана ковариационная матрица ошибок оценивания аппроксимируется с помощью выборки (ансамбля):

$$P_k^a = \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^N dx_k^n (dx_k^n)^\top, \quad (6)$$

то, объединив (6) и уравнение (5), получим систему уравнений относительно dx_k^n , которую можно записать в матричном виде как

$$D^\top = F^\top - \Pi^\top D^\top, \quad (7)$$

где D является матрицей размерности $(L \times N)$, столбцами которой являются векторы $\{dx_k^n, n = 1, \dots, N\}$, L — размерность этих векторов, соответствующая числу прогнозируемых переменных, матрица размерности $(N \times N)$ $\Pi^\top = \frac{1}{N-1} D^\top H^\top R^{-1} (HF + E)$, F — матрица со столбцами $\{f_k^n, n = 1, \dots, N\}$: $f_k^n = x_k^{f,n} - \overline{x_k^{f,n}}$. Следует подчеркнуть, что при выводе последней формулы производилась линеаризация оператора $h(x_k^{f,n})$ относительно $\overline{x_k^{f,n}}$. Элементы матрицы Π вычисляются для матриц H_k и R_k по ансамблю значений $\{dx_k^n, n = 1, \dots, N\}$ и не зависят от узла сетки.

Для удобства выкладок индекс “ k ” будем в дальнейшем опускать. Из формулы (7) следует, что

$$D^\top = (I + \Pi^\top)^{-1} F^\top,$$

где I — единичная матрица. В [11] показано, что матрица Π имеет вид:

$$\Pi^\top = (C + 0.25I)^{\frac{1}{2}} - 0.5I,$$

$$C = \frac{1}{N-1} F^\top H^\top R^{-1} (HF + E) = C_1 + C_2.$$

В этих формулах E — матрица, столбцы которой равны вектору ε_k^n . После вычисления матрицы D определяется ковариационная матрица P_k^a и анализ для среднего по ансамблю значения

$$\overline{x_k^{a,n}} = \overline{x_k^{f,n}} + \frac{1}{N-1} DD^\top H^\top R^{-1} \left[y_k - \overline{h \left(x_k^{f,n} \right)} \right].$$

Ансамбль соответствующих анализов в матричном виде можно записать как

$$X_k^a = \overline{x_k^{a,n}} + D,$$

где X_k^a — матрица размерности $(L \times N)$, столбцами которой являются векторы $\{x_k^{a,n}, n = 1, \dots, N\}$.

Как видно из формул ансамблевого π -алгоритма, он является стохастическим фильтром, в котором ансамбль ошибок анализа получается с помощью матрицы трансформаций $(I + \Pi^\top)^{-1}$, не зависящей от узла сетки. Это делает возможным реализацию алгоритма локально, при этом для реализации ансамблевого π -алгоритма требуются операции с матрицами порядка размерности ансамбля. Как видно из формул для оценки параметра в ансамблевом алгоритме, матрица Π одна и та же для оценки моделируемой переменной и параметра модели. Обоснование метода и детали его реализации содержатся в [1, 11].

5.2. Ансамблевое сглаживание с применением π -алгоритма

Будем рассматривать алгоритм ансамблевого сглаживания Калмана, предложенный в [4]. Алгоритм представляет собой линейную оценку “с минимальной дисперсией” (linear variance minimizing). В нелинейном негауссовском случае такая оценка является приближением (аппроксимацией) оптимальной оценки [4]. Рассмотрим обобщенную задачу уточнения по данным в момент времени t_{k+j} значений в моменты времени (t_k, \dots, t_{k+j}) . Обозначим $\tilde{x}_k^{f,n} = \{x_k^{f,n}, \dots, x_{k+j}^{f,n}\}^\top$. Оператор $\tilde{H}_{k+j} = \{0, \dots, H_{k+j}\}^\top$. Тогда задачу ансамблевого сглаживания на заданном временном интервале можно представить в виде

$$\tilde{x}_k^{a,n} = \tilde{x}_k^{f,n} + \tilde{P}^f \tilde{H}_{k+j}^\top (\tilde{H}_{k+j} \tilde{P}^f \tilde{H}_{k+j}^\top + R_{k+j})^{-1} (y_{k+j}^n - \tilde{H}_{k+j} \tilde{x}_k^{f,n}).$$

В этой формуле $\tilde{P}^f = \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^N \tilde{d}x^{f,n} (\tilde{d}x^{f,n})^\top$. Аналогичная запись в обобщенном виде приводится в монографии [4]. Уравнение можно переписать в эквивалентном виде

$$\tilde{x}_k^{a,n} = \tilde{x}_k^{f,n} + \tilde{P}^a \tilde{H}_{k+j}^\top R_{k+j}^{-1} (y_{k+j}^n - \tilde{H}_{k+j} \tilde{x}_k^{f,n}),$$

так как для матриц \tilde{P}^f и \tilde{P}^a будет выполнено соотношение фильтра Калмана $\tilde{P}^a = (I - \tilde{K}_{k+j} \tilde{H}_{k+j}) \tilde{P}^f$, где $\tilde{K}_{k+j} = \tilde{P}^f \tilde{H}_{k+j}^\top (\tilde{H}_{k+j} \tilde{P}^f \tilde{H}_{k+j}^\top + R_{k+j})^{-1}$. Это следует из матричных тождеств, приведенных в [10]. Таким образом, ковариационные матрицы ансамблевого сглаживания обладают свойствами, аналогичными свойствам матриц ансамблевого фильтра Калмана. По этой причине ансамблевый π -алгоритм может быть обобщен на случай ансамблевого сглаживания. Запишем формулу шага анализа в момент времени t_l :

$$x_l^{a,n} = x_l^{f,n} + \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^N dx_l^{a,n} (dx_{k+j}^{a,n})^\top H_{k+j}^\top R_{k+j}^{-1} (y_{k+j}^n - H_{k+j} x_{k+j}^{f,n}).$$

При $l = k + j$ производится шаг анализа ансамблевого фильтра Калмана и вычисляется матрица D_{k+j} ансамблевого π -алгоритма. При $l < k + j$ осуществляется процедура сглаживания.

Уравнение для отклонения от среднего в ансамблевом сглаживании имеет вид

$$dx_l^{a,n} = dx_l^{f,n} + \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^N dx_l^{a,n} (dx_{k+j}^{a,n})^\top H_{k+j}^\top R_{k+j}^{-1} (\varepsilon_{k+j}^n - H_{k+j} dx_{k+j}^{f,n}),$$

или в матричном виде

$$D_l^\top = F_l^\top - \Pi_{k+j}^\top D_l^\top.$$

Из формул следует, что при проведении процедуры ансамблевого сглаживания по данным в момент времени t_{k+j} на временном интервале (t_k, \dots, t_{k+j}) используется матрица Π_{k+j} , полученная в ансамблевом π -алгоритме. Шаг анализа производится по формуле

$$\overline{x_l^{a,n}} = \overline{x_l^{f,n}} + \frac{1}{N-1} D_l D_{k+j}^\top H_{k+j}^\top R_{k+j}^{-1} \left[y_{k+j} - \overline{h(x_{k+j}^{f,n})} \right].$$

Очевидно, что для шага анализа на всем интервале (окне усвоения) можно использовать вычисленное один раз произведение $D_{k+j}^\top H_{k+j}^\top R_{k+j}^{-1} \left[y_{k+j} - \overline{h(x_{k+j}^{f,n})} \right]$. Описанная процедура обобщается на случай оценки параметра. При этом сохраняются преимущества

ансамблевого π -алгоритма. То есть для оценки параметра используется та же матрица трансформаций, что и для оценки прогнозируемой переменной. Таким образом, алгоритм является экономичным в смысле экономии машинных ресурсов, как все алгоритмы, с трансформацией ковариационных матриц. В ансамблевом π -алгоритме производятся операции с матрицами размерности порядка размера ансамбля, как и в популярном в мире алгоритме LETKF [9]. Кроме того, процедура может применяться локально, так как оценка в каждом узле сетки может проводиться независимо. Это свойство локальности вытекает из формул π -алгоритма. Поэтому, в частности, алгоритм может быть применен в случае, если оценка параметра требуется в заданной подобласти.

6. Численные эксперименты с 1-мерной тестовой моделью

С предложенным алгоритмом ансамблевого сглаживания были проведены численные эксперименты с 1-мерной моделью переноса и диффузии пассивной примеси. Целью экспериментов было сравнение алгоритмов ансамблевой фильтрации и ансамблевого сглаживания в одинаковых условиях. Была выбрана задача с неизвестным параметром, поскольку алгоритмы ансамблевого сглаживания в настоящее время широко применяются в задачах оценки потоков парниковых газов [6, 13].

Рассматривалось следующее уравнение:

$$\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial t} + u \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x} = k^2 \frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial x^2} + \tilde{g}(x, t), \quad (8)$$

где $\tilde{\phi}$ — прогнозируемая переменная, $\tilde{g}(x, t)$ — неизвестный источник пассивной примеси. Для решения уравнения применялся полулагранжев метод, при этом бралась неявная схема по времени и схема центральных разностей по пространству. Для решения конечно-разностного аналога уравнения диффузии использовался метод циклической прогонки. Уравнение решалось на отрезке $(0, 1)$, при этом рассматривались периодические граничные условия. Задавалось 240 узлов сетки, $u = 1$, $k^2 = 0.6 \cdot 10^{-3}$.

Рассмотрим конечно-разностный аналог уравнения (8) в виде

$$\phi_{k+1} = A_k \phi_k + g_k,$$

где A_k — линейный оператор, k — номер шага по времени. Заданные начальные значения ϕ_0^t, g_0^t считались “истинными”. Для получения начальных данных для прогноза по модели ϕ_0^d, g_0^d к “истинным” начальным данным добавлялось возмущение $\phi_0^d = \phi_0^t + \delta$, $\delta = N(0, s_0)$, $g_0^d = g_0^t + \delta_g$, $\delta_g = N(0, dg_0)$. Через $N(a, b)$ обозначена случайная величина, распределенная по нормальному закону с математическим ожиданием, равным a , и дисперсией, равной b . Для организации численных экспериментов задавались: ансамбль начальных полей $\phi_0^n = \phi_0^d + \delta^n$, $\delta^n \sim N(0, s_0)$, $n = 1, \dots, N_{\text{ens}}$; $g_0^n = g_0^d + \delta_g^n$, $\delta_g^n \sim N(0, dg_0)$, $n = 1, \dots, N_{\text{ens}}$, наблюдения $y_0 = \phi_t(0) + \delta_0$; $\delta_0 \sim N(0, \varepsilon_0)$; ансамбль наблюдений с возмущениями $y_0^n = y_0 + \delta_0^n$, $\delta_0^n \sim N(0, \varepsilon_0)$, $n = 1, \dots, N_{\text{ens}}$. Через N_{ens} обозначено число элементов ансамбля. Данные наблюдений считались известными во всей области интегрирования. Прогноз осуществлялся в течение $N_t=240$ шагов по времени, усвоение данных проводилось на каждом шаге по времени, при этом производилась оценка значений ϕ и g . Численные эксперименты проводились для значений: $s_0 = \varepsilon_0 = 0.01$, $dg_0 = 0.01$, $N_{\text{ens}}=20$ и 40 . Во всех численных экспериментах рассматривался вариант $R = \varepsilon_0^2 I$. При анализе в узле сетки l брались данные наблюдений из интервала $(l - id, l + id)$. При этом при анализе в узле сетки l вместо матрицы R бралась матрица $\tilde{R} = R \circ e^{-0.5(\rho_{il}/bc)^2}$,

где ρ_{il} — расстояние между узлом сетки и наблюдением, “ \circ ” — знак поэлементного умножения. В проводимых экспериментах брались значения $id = 5$, $bc = 5\Delta x$ (Δx — шаг сетки). Такой алгоритм носит название локализация. Его принято использовать в ансамблевых методах для подавления ложных ковариаций на больших расстояниях, возникающих из-за малого размера выборки (ансамбля).

Для предотвращения расходимости алгоритма со временем использовался так называемый “увеличивающий множитель” $infl$ (inflation factor) [8]. То есть на шаге прогноза ансамбль возмущений домножался на константу: вместо P_f рассматривалась матрица, все элементы которой умножены на $infl$. В алгоритме EnKF значение $infl$ задавалось равным 1.04. В алгоритме EnKS данная константа подбиралась эмпирически и бралась равной 1.3.

В численных экспериментах использовалось окно “усвоения” $nt = 10$ шагов по времени. То есть для оценки значений в момент времени t_k использовались данные наблюдений в моменты времени $\{t_k, \dots, t_{k+nt}\}$.

В постановке задачи оценки параметра предполагается, что параметр на шаге прогноза не меняется. В реальных задачах производится оценка для средних величин для заданного временного интервала [6, 13]. Поэтому в модельных экспериментах были рассмотрены варианты постоянной и кусочно-постоянной по времени функции g . Было проведено две серии экспериментов. В первой серии экспериментов “истинное” значение параметра бралось постоянным по времени, а именно, задавалось в виде дискретного аналога функции $g_0(x)$, где

$$g_0(x) = \begin{cases} 0.1, & 0.375 \leq x \leq 0.625, \\ 0, & 0.375 > x \wedge x > 0.625. \end{cases}$$

В численных экспериментах применялись алгоритмы ансамблевой фильтрации (EnKF) и сглаживания (EnKS), при этом рассматривался стохастический вариант (ансамблевый π -алгоритм). На рисунках 1, 2 приведены значения среднеквадратической ошибки переменных ϕ и g соответственно ($rms \phi$ и $rms g$). В численных экспериментах использовались методы EnKF и EnKS, “окно усвоения” для EnKS $nt=10$ шагов по времени, $infl = 1.04$. Рассматривалось количество элементов ансамбля $N_{ens} = 20$ и 40 (на рисунках количество элементов ансамбля обозначено через NN).

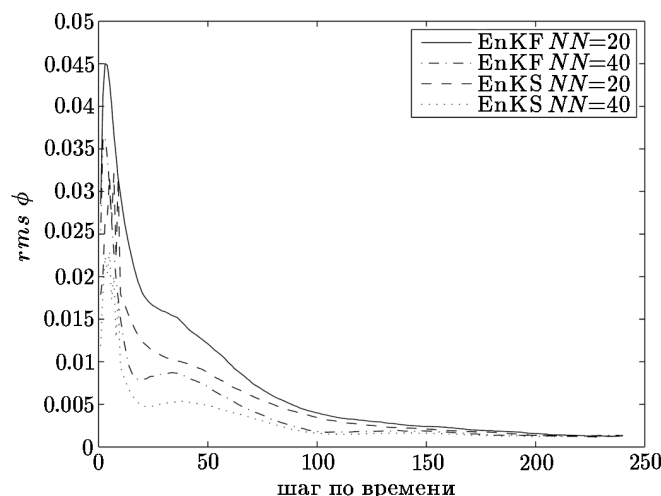


Рис. 1. Среднеквадратическая ошибка оценки прогнозируемой переменной при постоянном по времени значении параметра

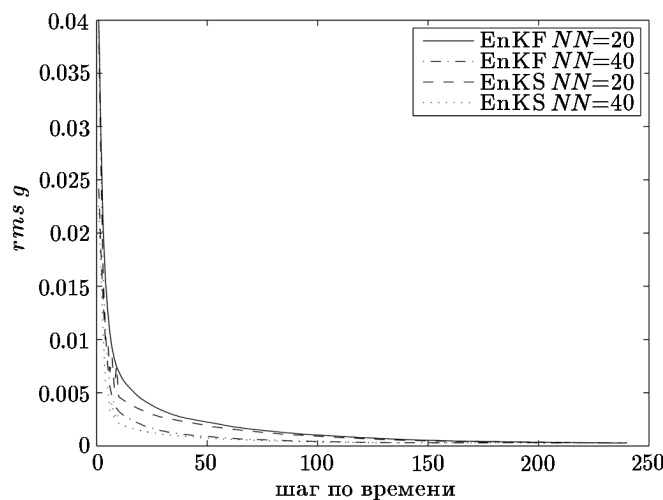


Рис. 2. Среднеквадратическая ошибка оценки параметра при постоянном по времени значении параметра

Во второй серии экспериментов “истинное” значение параметра задавалось кусочно-постоянным в виде дискретного аналога функции $\hat{g}(x, t)$, где

$$\hat{g}(x, t) = \begin{cases} g_0(x), & 0 \leq t < 120, \\ 0.8g_0(x), & t \geq 120. \end{cases}$$

На рис. 3, 4 приведены значения среднеквадратической ошибки переменных ϕ и g соответственно, полученные во второй серии экспериментов. В численных экспериментах использовались методы EnKF и EnKS, окно усвоения для EnKS $nt = 10$ шагов по времени, $infl = 1.3$. Рассматривалось количество элементов ансамбля $N_{ens} = 20$ и 40.

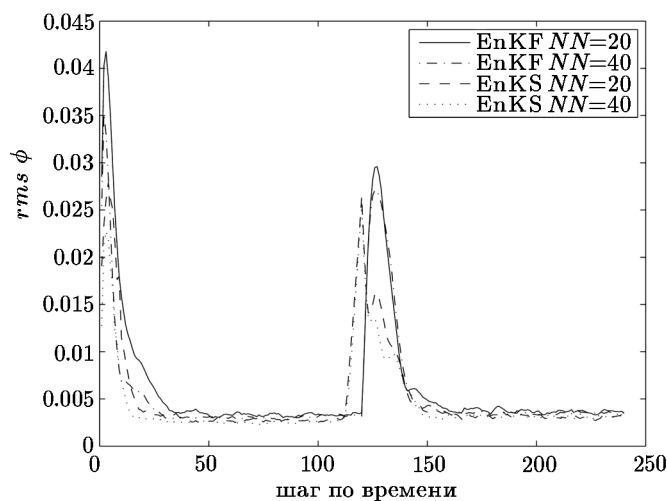


Рис. 3. Среднеквадратическая ошибка оценки прогнозируемой переменной при кусочно-постоянном по времени значении параметра

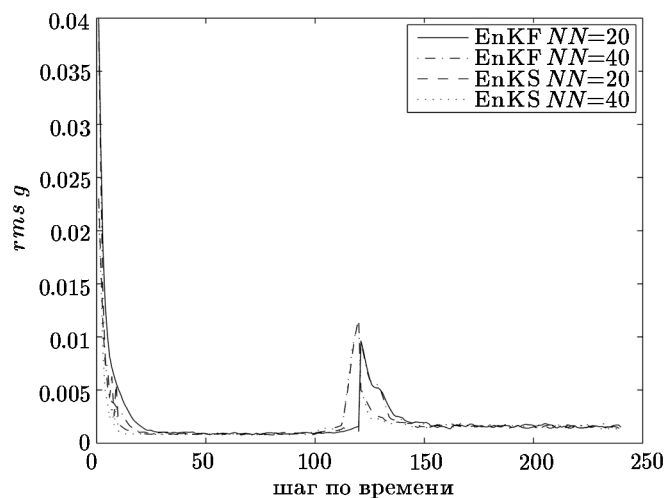


Рис. 4. Среднеквадратическая ошибка оценки параметра при кусочно-постоянном по времени значении параметра

Как видно из рисунков, алгоритм усвоения данных, рассмотренный в данной статье, позволяет оценивать параметр, который напрямую не измеряется. При этом точность оценки на первых шагах по времени увеличивается при применении ансамблевого сглаживания. Увеличение количества элементов ансамбля улучшает качество оценки во всех случаях. Существенное отличие поведения среднеквадратической ошибки на рис. 1, 2 и рис. 3, 4 связано с различиями в задании “истинного” значения параметра. В момент изменения значения параметра во второй серии экспериментов происходит скачок значений среднеквадратической ошибки, затем точность оценки восстанавливается. При этом при использовании алгоритма сглаживания значения ошибки ухудшаются для временного периода $\{120 - nt, \dots, 120\}$. Это связано со свойствами процедуры сглаживания. То есть “искаженная” информация в заданный момент времени (имеющая большое отклонение от “истинного” значения) распространяется на предыдущие шаги по времени.

Таким образом, предлагаемый алгоритм ансамблевого сглаживания Калмана, который является обобщением ансамблевого π -алгоритма, позволяет более точно оценивать на заданном временном интервале как прогнозируемую переменную, так и параметр модели.

7. Заключительные выводы

В статье рассматривается алгоритм стохастического ансамблевого сглаживания Калмана. Алгоритм является обобщением предложенного в [1, 11] ансамблевого π -алгоритма. Приводится обоснование обобщения ансамблевого π -алгоритма на случай ансамблевого сглаживания. Экономичность алгоритма обусловлена использованием одной и той же матрицы трансформаций на всем временном интервале (окне усвоения). Операции выполняются с матрицами, размерность которых равна количеству элементов ансамбля. Важным преимуществом алгоритма является его локальность, что позволяет оценивать параметр в заданной области. Проведены тестовые расчеты с предложенным численным алгоритмом с целью сравнения его с алгоритмом ансамблевого фильтра Калмана. Алгоритм является эффективным в смысле экономии машинных ресурсов и может быть использован при разработке системы усвоения данных для оценки состояния окружающей среды.

Литература

1. **Климова Е.Г.** Стохастический ансамблевый фильтр Калмана с трансформацией ансамбля возмущений // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2019. — Т. 22, № 1. — С. 27–40. Перевод: Klimova E.G. The Kalman stochastic ensemble filter with transformation of perturbation ensemble // Numerical Analysis and Applications. — 2019. — Vol. 12, № 1. — P. 26–36.
2. Справочник по теории автоматического управления под ред. А.А. Красовского. — М.: Наука, 1987.
3. **Carrassi A., Bocquet M., Bertino L., Evensen G.** Data assimilation in the geosciences: An overview of methods, issuers and perspectives // Wiley interdisciplinary reviews: Climate Change. — 2018. — Vol. 9, iss. 5. — P. e535. — DOI: 10.1002/wcc535.
4. **Evensen G.** Data Assimilation. The Ensemble Kalman Filter. — Berlin, Heideberg: Spriger-Verlag, 2009.
5. **Evensen G., van Leeuwen P.J.** An ensemble Kalman smoother for nonlinear dynamics // Monthly Weather Review. — 2000. — Vol. 128. — P. 1852–1867.
6. **Feng L., Palmer P.I. et al.** Consistent regional fluxes of CH₄ and CO₂ inferred from GOSAT proxy XCH₄:XCO₂ retrievals, 2010–2014 // Atmospheric chemistry and physics. — 2017. — Vol. 17, iss. 7. — P. 4781–4797.
7. **Fisher M., Leutbecher M., Kelly G.A.** On the equivalence between Kalman smoothing and weak-constraint four-dimensional variational data assimilation // Quarterly J. of the Royal Meteorological Society. — 2005. — Vol. 131. — P. 3235–3246.
8. **Houtekamer H.L., Zhang F.** Review of the ensemble Kalman filter for atmospheric data assimilation // Monthly Weather Review. — 2016. — Vol. 144, iss. 12. — P. 4489–4532.
9. **Hunt B.R., Kostelich E.J., Szunyogh I.** Efficient data assimilation for spatiotemporal chaos: A local ensemble transform Kalman filter // Physica D. — 2007. — Vol. 230. — P. 112–126.
10. **Jazwinski A.H.** Stochastic Processes and Filtering Theory. — New York: Academic Press, 1970.
11. **Klimova E.** A suboptimal data assimilation algorithm based on the ensemble Kalman filter // Quarterly J. of the Royal Meteorological Society. — 2012. — Vol. 138, iss. 669. — P. 2079–2085.
12. **Lei J., Bickel P., Shyder C.** Comparison of ensemble Kalman filters under non-gaussianity // Monthly Weather Review. — 2010. — Vol. 138. — P. 1293–1306.
13. **Tsuruta A., Aalto T. et al.** Global methane emission estimation for 2010–2012 from Carbon tracker Europe-CH₄ v1.0. // Geoscientific model development. — 2017. — Vol. 10, № 3. — P. 1261–1287.

Поступила в редакцию 8 апреля 2019 г.

После исправления 19 июня 2019 г.

Принята к печати 16 июля 2020 г.

Литература в транслитерации

1. **Klimova E.G.** Stokhasticheskiy ansamblevyy fil'tr Kalmana s transformatsiei ansamblya vozmushchenii // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie. — Novosibirsk, 2019. — Т. 22, № 1. — С. 27–40. Perevod: Klimova E.G. The Kalman stochastic ensemble filter with transformation of perturbation ensemble // Numerical Analysis and Applications. — 2019. — Vol. 12, № 1. — P. 26–36.
2. Spravochnik po teorii avtomaticheskogo upravleniya pod red. A.A. Krasovskogo. — М.: Nauka, 1987.

3. **Carrassi A., Bocquet M., Bertino L., Evensen G.** Data assimilation in the geosciences: An overview of methods, issuers and perspectives // *Wiley interdisciplinary reviews: Climate Change*.—2018.— Vol. 9, iss. 5.— P. e535.— DOI: 10.1002/wcc535.
4. **Evensen G.** *Data Assimilation. The Ensemble Kalman Filter*. — Berlin, Heideberg: Spriger-Verlag, 2009.
5. **Evensen G., van Leeuwen P.J.** An ensemble Kalman smoother for nonlinear dynamics // *Monthly Weather Review*.—2000.— Vol. 128.— P. 1852–1867.
6. **Feng L., Palmer P.I. et al.** Consistent regional fluxes of CH₄ and CO₂ inferred from GOSAT proxy XCH₄:XCO₂ retrievals, 2010–2014 // *Atmospheric chemistry and physics*.—2017.— Vol. 17, iss. 7.— P. 4781–4797.
7. **Fisher M., Leutbecher M., Kelly G.A.** On the equivalence between Kalman smoothing and weak-constraint four-dimensional variational data assimilation// *Quarterly J. of the Royal Meteorological Society*.—2005.— Vol. 131.— P. 3235–3246.
8. **Houtekamer H.L., Zhang F.** Review of the ensemble Kalman filter for atmospheric data assimilation // *Monthly Weather Review*.—2016.— Vol. 144, iss. 12.— P. 4489–4532.
9. **Hunt B.R., Kostelich E.J., Szunyogh I.** Efficient data assimilation for spatiotemporal chaos: A local ensemble transform Kalman filter // *Physica D*.—2007.— Vol. 230.— P. 112–126.
10. **Jazwinski A.H.** *Stochastic Processes and Filtering Theory*.—New York: Academic Press, 1970.
11. **Klimova E.** A suboptimal data assimilation algorithm based on the ensemble Kalman filter // *Quarterly J. of the Royal Meteorological Society*.—2012.— Vol. 138, iss. 669.— P. 2079–2085.
12. **Lei J., Bickel P., Shyder C.** Comparison of ensemble Kalman filters under non-gaussianity // *Monthly Weather Review*.—2010.— Vol. 138.— P. 1293–1306.
13. **Tsuruta A., Aalto T. et al.** Global methane emission estimation for 2010–2012 from Carbon tracker Europe-CH₄ v1.0. // *Geoscientific model development*.—2017.— Vol. 10, № 3.— P. 1261–1287.