0577-6619/2011/69(3)-0423-31 *Acta Meteorologica Sinica* 气象学报

非线性滤波在含“开关”过程的资料同化中的应用研究*

郑 琴 吴文华
ZHENG Qin WU Wenhua

解放军理工大学理学院，南京，211101
Institute of Sciences, PLA University of Science and Technology, Nanjing 211101, *China*
2009-02-18 收稿，2009-07-11 改回.

Zheng Qin, Wu Wenhua. 2011. A study of the nonlinear filter and its application in the data assimilation with physical “on-off” processes. *Acta Meteorologica Sinica*, 69(3):423-431

Abstract Using an idealized model of partial differential equation with discontinuous “on-off” switches in the forcing term, the feasibility and effectivity of the nonlinear filter in data assimilation with discontinuous physical “on-off” processes is investigated. First, the general nonlinear filter algorithm was discussed in the Bayesian theory framework, then two kinds of assimilation approaches based respectively on the particle filter (PF) and the ensemble Kalman filter (EnKF) were analyzed and compared. Since the EnKF utilizes only first two statistic moments in the analysis step, it is able to deal with the noises with probability density function well matching the Gaussian distribution, and will produce larger error when the true probability density functions badly approximated by the Gaussian distribution. Although the PF approximates the error distribution utilizing particles, it uses the whole error statistic moments, so it is able to deal with the problem caused by the non-Gaussian observation error in the data assimilation. Last, numerical experiments are conducted for the four cases of linear and nonlinear observation operators, Gaussian and non-Gaussian observation errors. The assimilation results show that no matter the observation operator is linear or nonlinear, both the PF and EnKF can overcome the difficulty brought by the discontinuous “on-off” switches and obtain satisfying assimilation results in the case of Gaussian observation error. But for the non-Gaussian observation error, the PF is more effective with satisfactory results than the EnKF and the filtering being unstable during the process of assimilation using the EnKF.
Key words Data assimilation, “On-Off”, Particle filter, Ensemble Kalman filter

摘 要 利用一个描述实际数值天气预报模式中比湿在单格线上随时间发展的偏微分方程作为控制方程，研究分析了非线性滤波方法在含“开关”过程的资料同化中的有效性和可行性。首先在贝叶斯理论框架下，讨论了一般情形的非线性滤波方法，然后对基于粒子滤波(PF)和基于集合卡尔曼滤波(EnKF)的两种同化方法进行对比，由于 EnKF 是通过对集合成员的统计分析得到的误差分布的一阶矩和二阶矩来近似真实误差分布的，所以当用高斯分布近似真实误差分布所产生的误差较大时，基于 EnKF 的同化方法得到的结果也会有较大的误差。最后分别从观测算子为线性和非线性、观测误差为高斯型和非高斯型 4 种情形进行数值试验，结果显示当观测误差为高斯型时，无论观测算子为线性还是非线性，基于 PF 和基于 EnKF 的同化方法都能克服由“开关”过程给资料同化带来的困难，给出满意的同化结果；而当观测误差为非高斯型时，EnKF 出现滤波不稳定，产生了非理想的同化结果，但 PF 方法仍然能够有效地发挥作用，给出满意的同化结果。
关键词 资料同化，“开关”，粒子滤波，集合卡尔曼滤波
中图法分类号 O29 P456.7

---

* 资助课题：国家自然科学基金项目(40975063 和 40830955)。
作者简介：郑琴，E-mail:qinzheng@mail.iap.ac.cn

1 引 言

在数值天气预报中,资料同化的目的在于"利用现有的所有信息来定义一个最大可能的大气(海洋)运动状态"(Talagrand,1997)。目前的资料同化方法主要分为两类:非序列资料同化方法和序列资料同化方法,前者主要以四维变分(4D-Var)方法为代表,而集合卡尔曼滤波(EnKF)则是序列同化方法研究的重点。

4D-Var 的主要思想是把预报模式作为约束条件,定义一个目标泛函度量模式解与观测资料之间的偏差,通过计算目标函数关于控制变量的梯度,为同化中的极小化过程提供下降方向,使得模式解和观测资料在某种范数意义上充分接近。对于实际观测资料的 4D-Var,由于融入了物理参数化过程,特别是湿物理过程使得模式方程中的某些项关于时间、空间或模式变量不连续或不可微,从而导致了所谓的"开关"问题。人们通过对简化的含"开关"过程的理想模式进行研究,揭示了"开关"问题对四维变分同化会产生不容忽视的影响:一方面会引起非线性模式的数值解及其相应的代价函数产生锯齿形振荡,另一方面,用传统方法获取的切线线性模式的解不是非线性模式扰动解的有效一阶线性近似(Xu,1996,1997; Mu, et al, 2003, 2005; Zheng, et al, 2006;王铁等,2008)。针对这些问题,人们提出了一些解决方法,例如,在"开关"时间层插值处理、广义切线性伴随方法、置值伴随方法和基于非线性扰动方程的伴随方法(Xu,1997;Mu,et al, 2003,2005; Zhu, et al,2002;郑琴等,2009),但是这些方法在向实际模式推广时均有较大的难度。

基于卡尔曼滤波(KF)理论的序列同化方法与寻求整个同化时间段的最优解的变分同化方法不同,它只着眼于求解观测时刻的最优分析值。由于 KF 仅适用于线性高斯系统,而实际的大气海洋模式都是非线性。因此,经典的 KF 拓展到广义卡尔曼滤波(EKF),从而可以应用到非线性模式中,但是 EKF 需要预报模式的切线性模式和伴随模式,计算量很大,在目前条件下难以承受。因此,序列同化方法在一段时间内没有引起人们的关注。20 世纪 90 年代,Evensen(1994)基于随机动力预测理论提出了 EnKF 同化方法,该方法不需要预报模式的切线性模式和伴随模式,与 4D-Var 相比,它更容易实现,而且可移植性比较强。EnKF 继承了 KF 优点的同时降低了计算量,并成功的应用于非线性系统。虽然 EnKF 完全利用非线性模式方程传播给出预报误差的统计,但是在分析时只保留真实误差统计分析的前一、二阶矩,忽略了更高阶的统计信息(Kivman,2003)。

EnKF 在大气海洋资料同化中有着广泛的应用(Zhang, et al,2005; Laxon, et al,2007; 马旭林等,2008),EnKF 在含有"开关"过程的资料同化中是否仍然能够有效地发挥作用是本文研究工作之一。此外,随着各种非常规观测资料的加入,模式量和观测量之间一般都呈非线性关系,因此相应的观测误差可能为非高斯型误差。在 EnKF 同化方法中,都是使用了真实误差统计分析的一、二阶矩,这对于高斯型误差而言,其一、二阶矩可以确定整个分布;而对于非高斯型误差,则仅仅利用一、二阶矩还不能完全确定分布。因此,在序列资料同化中,如何处理非高斯型观测误差引起了人们的极大关注。近年来,基于蒙特卡罗的递归贝叶斯估计(也称粒子滤波,PF)方法在信号处理、目标跟踪、导航定位以及语音识别等领域有了广泛的应用(韩旭军等,2008;贺静波等,2008;张旭等,2008)。该方法与 KF 原理类似,但相比于 KF 具有以下优点:(1)PF 可以应用于状态方程和测量方程都是非线性的系统;(2)对系统过程误差和观测误差不再局限于高斯分布的情形。本文尝试将 PF 作为一种序列资料同化方法应用于含有"开关"过程的资料同化,并研究其可行性和有效性。

2 控制方程

针对"开关"问题的研究,最初,主要集中在常微分方程模型(描述了实际预报模式中,单格点上比湿随时间的发展,也称为单格点模型)(Xu,1996,1997; Mu, et al, 2003);后来, Mu 等(2005)和 Zheng 等(2006)将研究的模型推广到偏微分方程(描述了实际数值天气预报模式中在单格线上比湿随时间的发展,也称为单格线模型)。在上述文献中的模型,所研究的"开关"在同化窗口内至多被触动一次,考虑到实际模式中的开关可能反复被触动,最近郑琴等(2009)针对单格点模型,研究了"开关"振荡对变分资料同化的影响及其有效处理。本文考虑的控制方程为下列含有"开关"振荡的偏微分方程

$$\begin{cases}\dfrac{\partial q}{\partial t}+a\dfrac{\partial q}{\partial l}=F(t)-GH_+(q-q^*) \\ \qquad\qquad 0\leqslant l\leqslant L,0\leqslant t\leqslant T \\ q(t,l)\Big|_{t=0}=q_0(l) \qquad 0\leqslant l\leqslant L \\ \dfrac{\partial q(t,l)}{\partial l}\Big|_{l=0}=0 \qquad 0\leqslant t\leqslant T\end{cases} \tag{1}$$

其中,$q(t,l)\geqslant 0$ 表示比湿;q^* 是产生降水的比湿临界值(又称为阈值);$q_0(l)$是初始比湿,它在区间[0,L]上连续可微,而且满足$\dfrac{\mathrm{d}q_0(l)}{\mathrm{d}l}<0$。$t$ 是时间变量,l 代表空间变量 x、y 或 z;$a(t,l)\geqslant 0$ 表示平流速度($l=x$ 或 y)或对流速度($l=z$),是一个已知的连续可微函数,且当 $l\neq L$ 时,$a(t,l)>0$,当 $l=L$ 时,$a(t,l)=0$;$a(\partial q/\partial l)$表示平流项或者对流项。$GH_+(q-q^*)$表示由物理参数化过程所引起的量,$G>0$ 为常数;$F(t)$是时间 t 的连续可导函数,表示由其他物理过程所引起的量,$H(x)$为 Heaviside 单位步长函数,定义为

$$H_+(x)=\begin{cases}1 & x\geqslant 0\\ 0 & x<0\end{cases} \tag{2}$$

它模拟了物理参数化过程中的"开关"。

为了研究"开关"的反复触动对序列资料同化方法的影响,对方程组(1)进一步假设:$q_0(l)<q^*$,$F(0)-G>0$,$\dfrac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t}<0$,这些条件仅仅是为了保证在同化窗口,"开关"能被反复触动而产生"开关"振荡。

利用迎风格式对方程组(1)进行离散,其中"开关"过程的数值处理按照传统的方法,得到如下的离散模式

$$\begin{aligned}q_0^i&=q_0(l_i) \qquad\qquad i=0,1,2\cdots,M\\ q_k^i&=q_{k-1}^i-\frac{\Delta t}{\Delta l}a(t_{k-1},l_i)(q_{k-1}^i-q_{k-1}^{i-1})+\\ &\quad F(t_{k-1})\Delta t \qquad\qquad \text{如果 } q_{k-1}^i<q^*\\ q_k^i&=q_{k-1}^i-\frac{\Delta t}{\Delta l}a(t_{k-1},l_i)(q_{k-1}^i-q_{k-1}^{i-1})+\\ &\quad F(t_{k-1})\Delta t-G\Delta t\end{aligned}$$

否则 $i=1,2,\cdots,M$; $k=1,2,\cdots,N$ (3)

其中,当 $i=0$ 时,$a(t_{k-1},l_i)=0$,Δt 为时间步长;$t_k=k\Delta t$;Δl 为空间步长,$l_i=i\Delta l$;k 是时间层;i 是空间格点;$M+1=(L/\Delta l)+1$ 为空间离散格点总数;$N=T/\Delta t$ 为积分过程中总时间层。当模式(3)的网格比满足下列柯朗-弗里德里希斯-列维(CFL)条件

$$0<\frac{\Delta t}{\Delta l}a<1$$

时,格式是收敛和计算稳定的。

方程的相关参数取为:$a(t,l)=(1+t)(1-l)$,$F(t)=A-Bt$,$A=8$,$B=11$,$G=7$,$q^*=0.58$,$\Delta l=0.05$,$\Delta t=0.01$,$M=20$,$N=100$,初始条件 $q_0(l)=0.05+0.35\cos(\pi l/2)$。此时方程组(1)的数值解如图 1a 所示,在第 10 个空间格点上,模式解随时间的发展变化如图 1b 所示。

由图 1 可知,由于"开关"过程的传统数值处理,当开关反复被触动时,非线性模式的数值解不仅出现严重的锯齿形振荡,而且还产生了"开关"振荡,增强了模式解的非线性特征。

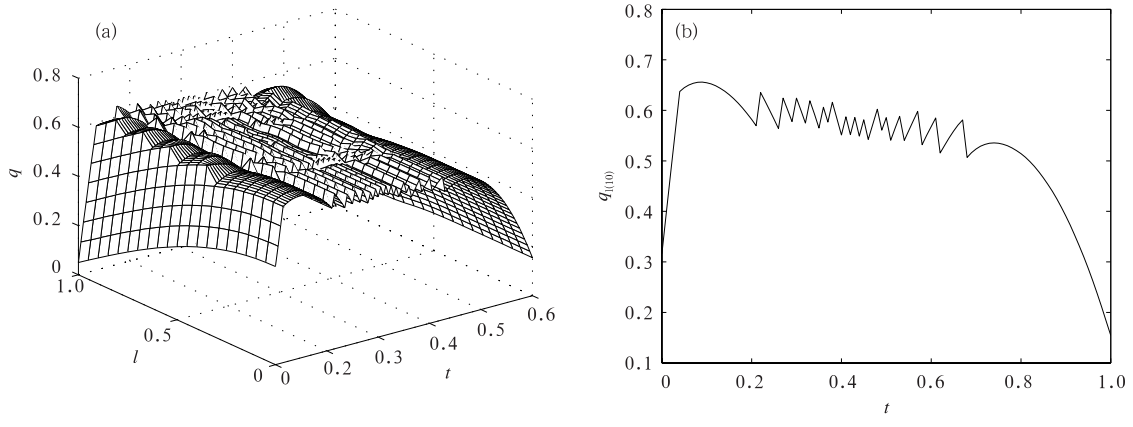


图 1　模式数值解(a)和第 10 个空间格点的模式解(b)

Fig. 1　Numerical solution of the nonlinear model (a) and the model solution at the tenth space grid point (b)

3 贝叶斯滤波(BF)方法

贝叶斯理论为非线性滤波方法提供了统一的数学理论框架,因此首先介绍贝叶斯估计。在实际的数值天气预报模式中,含有误差的非线性模式和观测方程可以描述为

$$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{k-1}) + \boldsymbol{w}_{k-1} \tag{4}$$

$$\boldsymbol{y}_k = \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}_k) + \boldsymbol{v}_k \tag{5}$$

其中,$\boldsymbol{x}_k \in \mathbf{R}^n$ 表示模式变量,$\boldsymbol{y}_k \in \mathbf{R}^m$ 表示观测变量,n 和 m 分别表示状态变量和观测变量的维数。$\boldsymbol{w}_k \in \mathbf{R}^n$ 和 $\boldsymbol{v}_k \in \mathbf{R}^m$ 分别表示 k 时刻的模式误差和观测误差。

从贝叶斯学派观点解释状态方程和观测方程的含义为:

① 式(4)确定了预测当前时刻状态的条件转移概率 $p(\boldsymbol{x}_k \mid \boldsymbol{x}_{k-1}, \boldsymbol{y}_{0:k-1})$,而且,状态值序列 $\{\boldsymbol{x}_k, k = 0,1,2\cdots\}$ 满足马尔可夫链性质,即:$p(\boldsymbol{x}_k \mid \boldsymbol{x}_{0:k-1}, \boldsymbol{y}_{0:k-1}) = p(\boldsymbol{x}_k \mid \boldsymbol{x}_{k-1})$;

② 式(5)确定了预测当前观测值的似然概率 $p(\boldsymbol{y}_k \mid \boldsymbol{x}_{0:k}, \boldsymbol{y}_{0:k-1})$,观测值序列 $\{\boldsymbol{y}_k, k = 0,1,2,\cdots\}$ 具有条件独立性,即 $\boldsymbol{x}_k$ 给定的条件下,观测值 $\boldsymbol{y}_k$ 条件独立于过去的观测值和状态值,即 $p(\boldsymbol{y}_k \mid \boldsymbol{x}_{0:k}, \boldsymbol{y}_{0:k-1}) = P(\boldsymbol{y}_k \mid \boldsymbol{x}_k)$。

设初始状态 $\boldsymbol{x}_0$ 与过程误差 $\{\boldsymbol{w}_k, k = 0,1,2,\cdots\}$ 和观测误差 $\{\boldsymbol{v}_k, k = 0,1,2,\cdots\}$ 相互独立。滤波的目的是根据观测值 $\boldsymbol{y}_{0:k} = (\boldsymbol{y}_0, \boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_k)$ 来求得 k 时刻状态 $\boldsymbol{x}_k$ 的最佳估计值 $\hat{\boldsymbol{x}}_k$,使得 $E|\boldsymbol{x}_k - \hat{\boldsymbol{x}}_k|^2$ 达到最小,即最小方差无偏估计。由随机分析理论(金治明,2003)可得出

$$\hat{\boldsymbol{x}}_k = E(\boldsymbol{x}_k \mid \boldsymbol{y}_{0:k}) = \int \boldsymbol{x}_k p(\boldsymbol{x}_k \mid \boldsymbol{y}_{0:k}) \mathrm{d}\boldsymbol{x}_k \tag{6}$$

式(6)表明,要想得到 k 时刻的最小方差无偏估计 $\hat{\boldsymbol{x}}_k$,只需要估计出 $\boldsymbol{x}_k$ 条件密度函数 $p(\boldsymbol{x}_k \mid \boldsymbol{y}_{0:k})$(也称后验密度函数)即可。利用贝叶斯公式得(Bergman,1999)

$$p(\boldsymbol{x}_k \mid \boldsymbol{y}_{0:k}) = \frac{p(\boldsymbol{y}_k \mid \boldsymbol{x}_k) p(\boldsymbol{x}_k \mid \boldsymbol{y}_{0:k-1})}{p(\boldsymbol{y}_k \mid \boldsymbol{y}_{0:k-1})} \tag{7}$$

其中,$p(\boldsymbol{x}_k \mid \boldsymbol{y}_{0:k-1})$称为先验函数,它可以根据查普曼-科尔莫戈罗夫方程给出

$$p(\boldsymbol{x}_k \mid \boldsymbol{y}_{0:k-1}) = \int p(\boldsymbol{x}_k \mid \boldsymbol{x}_{k-1}) p(\boldsymbol{x}_{k-1} \mid \boldsymbol{y}_{0:k-1}) \mathrm{d}\boldsymbol{x}_{k-1} \tag{8}$$

$p(\boldsymbol{y}_k \mid \boldsymbol{x}_k)$称为似然函数,通过观测方程(5)来确定;$p(\boldsymbol{y}_k \mid \boldsymbol{y}_{0:k-1})$为归一化常数,且 $p(\boldsymbol{y}_k \mid \boldsymbol{y}_{0:k-1}) = \int p(\boldsymbol{y}_k \mid \boldsymbol{x}_k) p(\boldsymbol{x}_k \mid \boldsymbol{y}_{0:k-1}) \mathrm{d}\boldsymbol{x}_k$。

由此可知,只要给定状态的初始分布 $p(\boldsymbol{x}_0) \sim p(\boldsymbol{x}_0 \mid \boldsymbol{y}_0)$,则可以递归求解出条件密度函数 $p(\boldsymbol{x}_k \mid \boldsymbol{y}_{0:k})$,将递归求解条件密度函数的过程称为贝叶斯滤波(BF),其实现基本流程图见图 2。

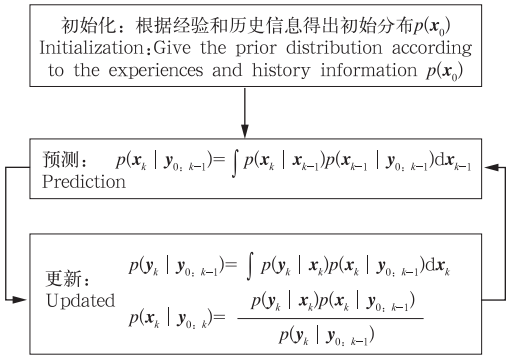


图 2 BF 实现的基本流程

Fig. 2 Basic flow chart of performing the BF

图 2 是 BF 算法的一般流程,通过求解后验密度函数给出了 BF 的完全解。在该算法中,无论是预测部分还是更新部分都涉及到求解高维积分。在实际应用中,我们所碰到的问题大多都是非线性、高维系统,因此很难求解出 BF 的精确解。只有在一些特殊情形下(例如线性高斯系统)才可以得出,此时 BF 退化为经典的 KF。因而,在实际应用中只能通过其他次优的方法来近似,下面主要介绍基于蒙特卡罗思想的 EnKF 和 PF 这两种方法。

3.1 集合卡尔曼滤波

在 EnKF 中,考虑的模型是非线性的,而观测方程是线性的情形

$$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{k-1}) + \boldsymbol{w}_{k-1} \tag{9}$$

$$\boldsymbol{y}_k = \boldsymbol{H}\boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{v}_k \tag{10}$$

其中,$\boldsymbol{f}: \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}^n$ 的非线性函数,$\boldsymbol{H} \in \mathbf{R}^{m \times n}$ 表示观测矩阵;$\boldsymbol{w}_k \in \mathbf{R}^n$ 和 $\boldsymbol{v}_k \in \mathbf{R}^m$ 分别表示 k 时刻的模式误差和观测误差,而且 $\boldsymbol{w}_{k-1} \sim N(0, \mathbf{Q})$,$\boldsymbol{v}_{k-1} \sim N(0, \mathbf{R})$。这里的 $N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$表示高斯分布的密度函数,$\boldsymbol{\mu}$ 表示数学期望,$\boldsymbol{\Sigma}$ 表示方差矩阵。已知状态变量的先验分布为 $p(\boldsymbol{x}_0) = N(\boldsymbol{m}_0, \boldsymbol{P}_0)$。

在上述条件下,状态量与观测量之间的似然函数可以表示为

$$p(\boldsymbol{y}_k \mid \boldsymbol{x}_k) = N(\boldsymbol{H}\boldsymbol{x}_{k-1}, \boldsymbol{R}) \tag{11}$$

由 BF 算法原理可知,还需要知道状态转移密度函数 $p(\boldsymbol{x}_k|\boldsymbol{x}_{k-1})$,但是由于模式是非线性的,因此不能像似然函数那样直接得出状态转移密度函数。在 EnKF 中,就是利用蒙特卡罗方法来近似 $p(\boldsymbol{x}_k|\boldsymbol{x}_{k-1})$,然后再根据 BF 原理给出状态的最佳估计。EnKF 算法流程图见图 3(Evensen,2003)。

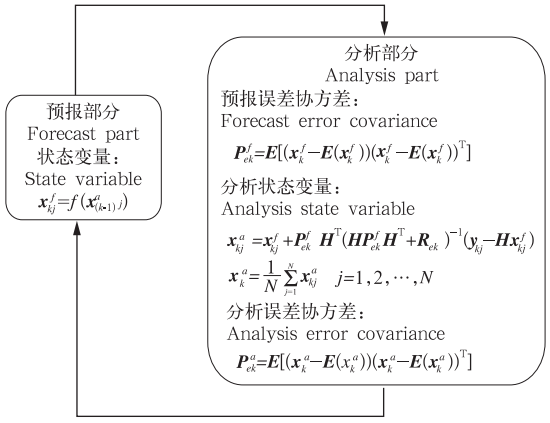


图 3　EnKF 实现的流程

Fig. 3　Flow chart of operating the EnKF

这里的 $\boldsymbol{x}_{kj}^f$ 和 $\boldsymbol{x}_{kj}^a$ 分别表示 k 时刻第 j 集合成员的状态预报值和分析值,而 $\boldsymbol{P}_{ek}^f$ 和 $\boldsymbol{P}_{ek}^a$ 分别表示 k 时刻预报误差协方差矩阵和分析误差协方差矩阵。

对于非线性观测算子情形,EnKF 通过增加状态变量的维数,将非线性观测算子问题转化为线性观测算子进行处理。定义新状态变量和线性观测算子为

$$\hat{\boldsymbol{x}}_k=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_k\\ \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}_k)\end{bmatrix},\qquad \hat{\boldsymbol{H}}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_k\\ \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}_k)\end{pmatrix}=\boldsymbol{y}_k \tag{12}$$

这里的 $\boldsymbol{h}(\cdot)$ 表示的是非线性观测算子,将线性观测算子情形的 $\boldsymbol{x}_k$ 和 $\boldsymbol{H}$ 分别替换为 $\hat{\boldsymbol{x}}_k$ 和 $\hat{\boldsymbol{H}}$,然后按照线性观测算子情形的滤波公式进行计算。

3.2　粒子滤波

如何求解高维积分是 BF 算法的关键,PF 方法就是利用蒙特卡罗数值积分来求解 BF 算法中的积分。蒙特卡罗数值积分需要根据密度函数 $p(\boldsymbol{x}_{0:k}|\boldsymbol{y}_{0:k})$ 进行取样,在实际问题中,直接对 $p(\boldsymbol{x}_{0:k}|\boldsymbol{y}_{0:k})$ 进行取样一般比较困难,因此,人们提出了重要取样方法(Liu,2001)。该方法核心思想是:首先从较容易取样的密度函数 $q(\boldsymbol{x}_{0:k}|\boldsymbol{y}_{0:k})$(称为重要密度函数)进行取样得到相互独立的粒子,然后通过给每个粒子赋予重要权重来进行调整。此时,密度函数 $p(\boldsymbol{x}_{0:k}|\boldsymbol{y}_{0:k})$ 可以近似为:

$$p(\boldsymbol{x}_{0:k}\mid\boldsymbol{y}_{0:k})\approx\sum_{i=1}^{N}\tilde{\boldsymbol{s}}_k^{(i)}\delta(\boldsymbol{x}_{0:k}-\boldsymbol{x}_{0:k}^{(i)}) \tag{13}$$

其中,$\delta(\cdot)$ 为 Radon-Nikodým 密度,$\tilde{\boldsymbol{s}}_k^{(i)}$ 称为粒子的重要权重,则在 BF 算法中的滤波密度函数 $p(\boldsymbol{x}_k|\boldsymbol{y}_{0:k})$ 可以近似为

$$p(\boldsymbol{x}_k\mid\boldsymbol{y}_{0:k})\approx\sum_{i=1}^{N}\tilde{\boldsymbol{s}}_k^{(i)}\delta(\boldsymbol{x}_k-\boldsymbol{x}_k^{(i)}) \tag{14}$$

在实际应用中,总是希望在得到 k 时刻的后验密度函数 $p(\boldsymbol{x}_{0:k}\mid\boldsymbol{y}_{0:k})$ 时,不需要改变 k 时刻以前得到的轨迹 $\{\boldsymbol{x}_{0:k-1}^{(i)},i=1,\cdots,N\}$,从而实现递推估计。有关文献(Doucet,1997;Liu,1994,2003)提出了序列重要性取样方法,其所对应的 PF 算法如下:

步骤 1:根据先验分布 $p(\boldsymbol{x}_0)$ 初始化粒子 $\{\boldsymbol{x}_0^{(i)},i=1,2,\cdots,N\}$ 置 $k=0$,$\boldsymbol{s}_k^{(i)}=1/N$

步骤 2:计算粒子的重要权重

$$\boldsymbol{s}_k^{(i)}=\boldsymbol{s}_{k-1}^{(i)}\frac{p(\boldsymbol{y}_k\mid\boldsymbol{x}_k^{(i)})p(\boldsymbol{x}_k^{(i)}\mid\boldsymbol{x}_{k-1}^{(i)})}{q(\boldsymbol{x}_k^{(i)}\mid\boldsymbol{x}_{0:k-1,y_k}^{(i)})},\ i=1,2,\cdots,N$$

步骤 3:归一化粒子的重要权重

$$\tilde{\boldsymbol{s}}_k^{(i)}=\boldsymbol{s}_k^{(i)}\Big/\sum_{j=1}^{N}\boldsymbol{s}_k^{(i)},\ i=1,2,\cdots,N$$

步骤 4:计算粒子有效大小 N_{eff},如果 $N_{\mathrm{eff}}\geqslant N_{\mathrm{thres}}$ 转到步骤 6

步骤 5:根据粒子的归一化重要权重进行重取样,得到新的 N 个粒子

$$P_r(\boldsymbol{x}_k^{(i)}=\boldsymbol{x}_k^{(j)})=\tilde{\boldsymbol{s}}_k^{(j)},\ i=1,2,\cdots,N$$

步骤 6:根据重要性密度函数预测新的状态粒子 $\{\boldsymbol{x}_{k+1}^{(i)},\ i=1,2,\cdots,N\}$

$$\boldsymbol{x}_{k+1}^{(i)}\sim q(\boldsymbol{x}_{k+1}\mid\boldsymbol{x}_k^{(i)},\boldsymbol{y}_{1:k+1}),\ i=1,2,\cdots,N$$

步骤 7:置 $k=k+1$ 返回步骤 2。

4　数值实验

为了研究 EnKF 是否在含有"开关"过程的资料同化中仍然有效,同时研究 PF 在作为一种序列资料同化方法应用于大气海洋资料同化的可行性,分别从观测算子为线性和非线性以及观测误差为高斯型和非高斯型 4 种情形进行数值实验,同时比较分析 PF 与 EnKF 两种同化方法。本文采用的 EnKF 同化方案(线性观测算子和非线性观测算子)均是采用 Evensen(2003)文章中的方案。数值实验的具体设计如下:

(1) 观测资料的生成:数值实验所用的观测资料是将观测算子作用于参考解,然后再加入随机噪

声而得到的,而参考解 q_{ref} 是以 $q_0(l) = 0.05 + 0.35\cos(\pi l/2)$ 为初值,通过模式(3)积分得到。

(2) 初始粒子的产生:PF 和 EnKF 两种同化方法的初始集合成员(粒子)都是按照 Evensen(2003)给出的方法,即设状态变量的先验分布为 $p(\boldsymbol{x}_0) = N(\boldsymbol{m}_0, \boldsymbol{P}_0)$,$\boldsymbol{m}_0$ 表示初始时刻状态的最佳估计值(最佳初始猜值),$\boldsymbol{P}_0$ 表示生成初始集合成员(粒子)的方差矩阵。在本数值实验中,初始时刻的最佳估计值 $\boldsymbol{m}_0$ 是通过给参考值加上一定的扰动而得到,即

$$\boldsymbol{m}_0(i) = q_0(l_i) + r \qquad i = 0,1,\cdots,M \tag{15}$$

其中,$r \sim N(0, 0.01^2)$,而 $\boldsymbol{P}_0 = 0.01^2\boldsymbol{I}$,$\boldsymbol{I}$ 为单位矩阵。

(3) 模式误差的设定:模式误差服从均值为零,方差为 0.01^2 的高斯分布,即:$\boldsymbol{w}_k \sim N(0, 0.01^2)$。

(4) 观测误差的设定:对于高斯型观测误差而言,观测误差取均值为零,方差为 0.01^2 的高斯分布 $\boldsymbol{v}_k \sim N(0, 0.01^2)$;对于非高斯型观测误差,取观测误差服从 $\lambda = 1, \mu = 0$ 的柯西分布,并且误差的绝对值不大于 0.15。柯西分布的密度函数为

$$f(x) = \frac{\lambda}{\pi[\lambda^2 + (x-\mu)^2]} \tag{16}$$

其中,λ 为正常数,μ 为实常数。设 θ 是服从 $(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ 上均匀分布的随机变量,则随机变量 $X = \tan\theta$ 是服从 $\lambda = 1, \mu = 0$ 的柯西分布。

(5) EnKF 和 PF 的集合成员大小(粒子数量)均取 500。

4.1 线性观测算子情形

取式(5)中的 $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{I}\boldsymbol{x}$,为了分析两种同化方法在含"开关"过程的资料同化中的可行性和有效性,将以 l_{10}(第 10 个空间格点值)为例,分析两种同化方法在跟踪状态变化的特性,同时为了刻画在同化过程中,所有空间格点的同化结果与参考解间的差异程度,定义空间格点的均方根误差

$$E_{\mathrm{RMS_PF}(k)} = \sqrt{\frac{1}{M-1}\sum_{i=1}^{M}(q_{\mathrm{PF}}(i,k) - q_{\mathrm{ref}}(i,k))^2} \qquad k = 0,1,\cdots,N \tag{17}$$

$$E_{\mathrm{RMS_EnKF}(k)} = \sqrt{\frac{1}{M-1}\sum_{i=1}^{M}(q_{\mathrm{EnKF}}(i,k) - q_{\mathrm{ref}}(i,k))^2} \qquad k = 0,1,\cdots,N \tag{18}$$

其中,q_{ref} 表示参考解;q_{PF} 和 q_{EnKF} 分别表示是 PF 和 EnKF 得到的状态值。

从第 10 个空间格点的同化结果与参考解随时间发展变化(图 4)可以看出,对于高斯型观测误差(图 4a),PF 和 EnKF 两种同化方法都能够很好地给出跟踪模式状态的变化过程,即使在产生"开关"振荡区域,两种方法也都给出了非常满意的结果。对于非高斯型观测误差(图 4b),EnKF 和 PF 两种同化方法却表现出较大的差异,从图 4b 可以看出,EnKF 在跟踪状态的性能要远远的差于 PF,这主要

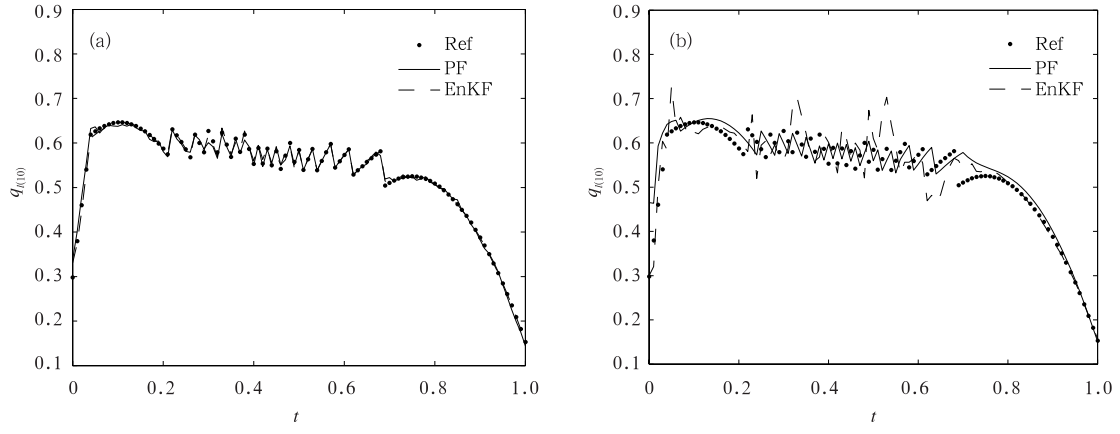


图 4 在高斯型(a)和非高斯型观测误差(b)条件下线性观测算子情形第 10 个空间格点的同化结果与参考解的对比(点线是参考解,虚线是 EnKF 方法,实线是 PF 方法)

Fig. 4 Contrast between reference solutions and assimilation results at the tenth space grid point under the Gaussian (a) and non-Gaussian (b) observation error in the case of linear observational operator (dot line is for the reference, dashed line is for the EnKF method, solid line is for the PF method)

是因为在 EnKF 中,只利用了误差的一、二阶矩。这对于高斯型观测误差是没有问题的,而对于非高斯型误差,在仅利用这两点还不能完全确定整个分布,而在 PF 方法中,它利用了误差的完全信息,从而给出了较好的同化结果。

在高斯和非高斯型观测误差条件下,从空间格点的均方根误差随着时间的发展变化(图 5)也可以看出,对于高斯型观测误差,在同化的初始阶段,两种方法所对应的均方根误差都比较大,这主要是我们给定的初始分布和真实分布的误差较大,随着观测资料的不断加入,均方根误差迅速减小,在同化窗口末端,均方根误差非常接近于 0; 而对于非高斯型观测误差而言,两种方法的均方根误差相对于高斯情形,所对应的值都有所增大,在同化初期,EnKF 要明显优于 PF,但是当 $t>0.2$ 时,PF 要明显优于 EnKF。

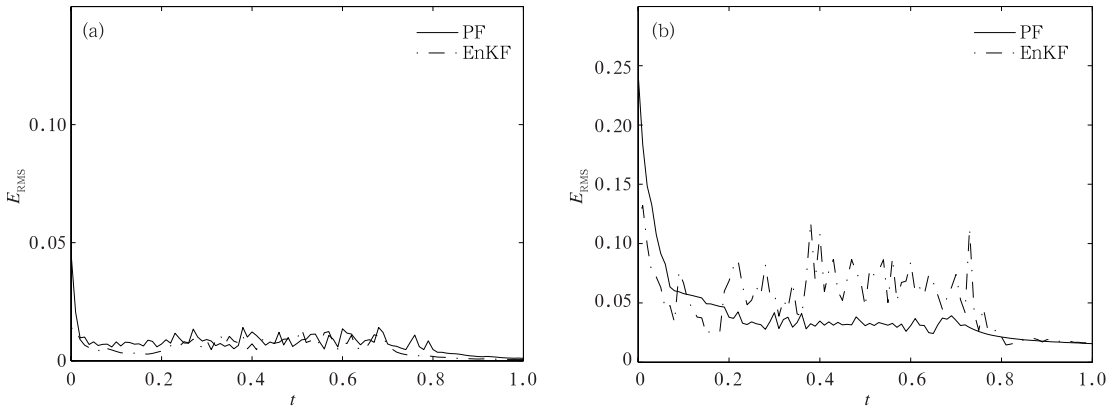


图 5　在线性观测算子情形高斯型(a)和非高斯型观测误差(b)条件下 PF(实线)和 EnKF(虚线)所对应的均方根误差

Fig. 5　RMS errors corresponding to the PF (solid line) and the EnKF(dashed line) under the Gaussian (a) and non-Gaussian (b) observation error in the case of linear observational operator

4.2　非线性观测算子情形

随着现代大气观测手段和探测工具的不断创新,所得到的观测量和模式量的关系一般为非线性关系。因此,当观测算子为非线性算子时,所采用的同化方法是否仍然有效是一个非常重要的问题。为了检验 PF 同化方法在非线性观测算子情形下的有效性,取式(5)为 $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})=(x_0^2,x_1^2,\cdots x_M^2)^{\mathrm{T}}$,其他参数与线性观测算子情形相同。类似地仍然分析第 10 个空间格点的同化结果与参考值对比以及空间格点均方根误差随着时间的发展变化。

在高斯型和非高斯型观测误差情形下,第 10 个空间格点的参考解与 PF 和 EnKF 的同化结果对比如图 6a 和 6b,相应的空间格点的均方根误差随着时间的发展变化如图 7a 和 7b。

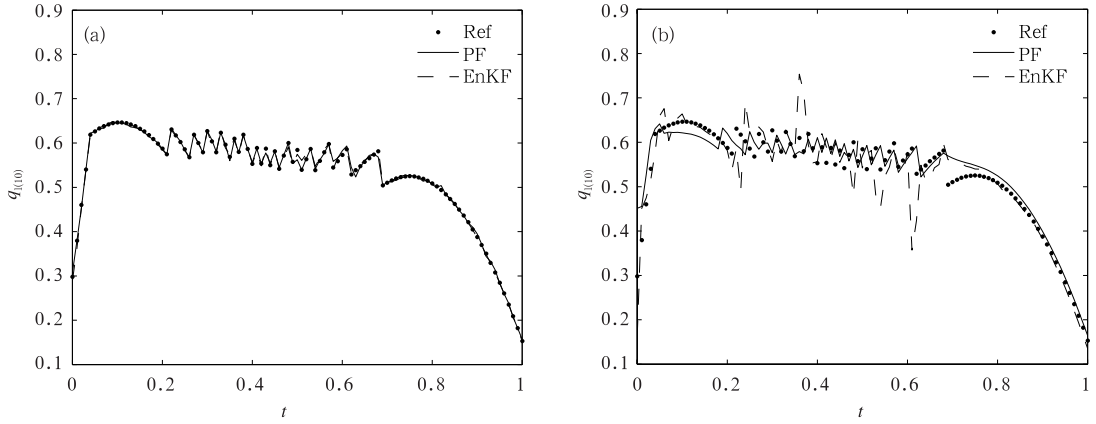


图 6　同图 4,但为非线性观测算子下第 10 个空间格点的同化结果与参考解的对比

Fig. 6　As in Fig. 4 but in the case of nonlinear observational operator

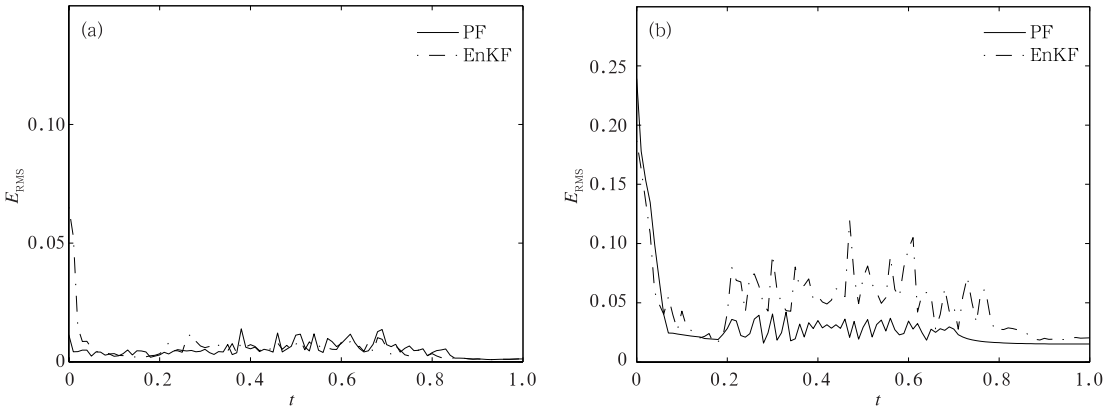


图 7 同图 5,但为非线性观测算子下 PF 和 EnKF 所对应的均方根误差随着时间的发展变化

Fig. 7 As in Fig. 5 but in the case of nonlinear oprator

分析图 6 可知,当观测误差为高斯型时,PF 和 EnKF 同化方法都能够给出满意的同化结果;当观测误差为非高斯型时,EnKF 方法在模式非线性极强的区域("开关"振荡区域)出现了滤波不稳定现象,跟踪状态的性能下降。

从图 7a 中可以看出,在非线性观测算子和高斯误差情形下,虽然 EnKF 方法的结果要优于 PF 方法,但是此时两种同化方法的均方根误差值都非常的小,所以这两种方法都给出满意的同化结果。而对于非线性观测算子、非高斯噪声情形下,EnKF 的均方根误差值要远远的大于 PF 方法所对应的均方根误差值,这一点类似于线性观测算子情形。

5 结 论

在数值天气预报中,资料同化的质量会直接影响到预报的质量,因此,如何提高资料同化质量一直是人们研究的重点。自 20 世纪 90 年代提出 EnKF 同化方法以来,序列同化方法引起了人们的极大关注。本文主要研究了"开关"过程对序列资料同化的影响,以及将 PF 方法作为一种序列同化方法用于含有"开关"过程的资料同化中的可行性和有效性。

本文利用一个含有"开关"的偏微分方程作为控制方程,该方程刻画了在实际数值天气预报模式中比湿在单格线上随着时间的发展变化。为了分析 EnKF 和 PF 方法在含"开关"过程的资料同化的可行性和有效性,本文从观测算子为线性和非线性、观测误差为高斯型和非高斯型 4 种情形进行了相应的数值实验。针对该模型,从实验结果可以得出下列结论。

(1) 在高斯型观测误差情形下,无论是线性还是非线性观测算子,EnKF 在含有"开关"过程的资料同化中仍然能够很好的发挥作用,验证了序列同化方法在含有"开关"过程的资料同化中的有效性。

(2) 在非高斯型观测误差条件下,针对本文的模式,无论是线性还是非线性观测算子,EnKF 不能很好地抓住状态的变化,出现了滤波不稳定。这主要是因为,在 EnKF 中,是通过对集合成员进行统计给出误差分布的一阶矩和二阶矩来表示状态转移密度函数的,这一点对于高斯型误差而言不存在问题,因为对高斯型误差,它的一阶矩和二阶矩就可以确定整个分布;但对非高斯型误差而言,由一阶矩和二阶矩是不能完全确定其分布,因此必然会出现偏差。

(3) 对于 PF 同化方法而言,无论观测算子为线性还是非线性、观测误差为高斯型误差还是非高斯型误差,PF 同化方法都能够给出满意的同化结果。在 PF 同化方法中,虽然也是利用的粒子(在 EnKF 中叫集合成员)来近似真实的误差分布,但是 PF 方法中用的是误差的完全统计信息,能够较好地克服非高斯型误差给资料同化方法带来的困难。

PF 方法也存在一些缺点,其中最主要的缺点是出现粒子退化现象,虽然在 PF 算法中通过重取样操作来减缓粒子退化程度,但是这还不能从根本上解决这一问题,因此如何解决粒子退化现象的问题是提高 PF 性能的重要途径。此外,在 PF 方法中,若初始粒子都与真实值相差比较大时会出现滤波不稳定现象。

本文通过一个简单的理想模式,研究了 EnKF

和 PF 方法在含有“开关”过程的资料同化中的有效性,揭示了 PF 方法能够有效地克服“开关”问题给同化带来的困难。如何将 PF 应用于更加复杂的模型,将是今后工作的重点。

参考文献

韩旭军,李新. 2008. 非线性滤波方法与陆面数据同化. 地球科学进展, 23(8): 813-820

贺静波,彭复员,黄高明. 2008. 基于改进粒子滤波的双站无源定位跟踪算法研究. 系统仿真学报, 20(11): 2825-2827

金治明. 2003. 随机分析基础及其应用. 北京: 国防工业出版社, 345pp

马旭林, 薛纪善, 陆维松. 2008. GRAPES 全球集合预报的集合卡尔曼变换初始扰动方案初步研究. 气象学报,66(4):526-536

王铁, 穆穆. 2008. REM 模式伴随系统的建立及其四维变分资料同化初步试验. 气象学报,66(6): 955-967

张旭,李志国. 2008. 基于粒子滤波和均值平移的目标跟踪. 激光与红外, 38(8): 834-836

Doucet A. 1997. Monte Carlo Methods for Bayesian Estimation of Hidden Markov Models Application to Radiation Signals. Orsay: Paris-Sud

Evensen G. 1994. Sequential data assimilation with a non-linear quasi-geostrophic model using Monte Carlo methods to forecast error statistics. J Geophys Res, 99(C5): 10143-10162

Evensen G. 2003. The ensemble Kalman filter: Theoretical formulation and practical implementation. Ocean Dyn, 53: 343-367

Kivman G A. 2003. Sequential parameter estimation for stochastic systems. Nonlinear Processes Geophys, 10: 253-259

Laxon S, Lister K A, Evensen G. 2007. Assimilating synthetic CryoSat sea ice thickness in a coupled ice-ocean model. J Geophys Res, 112:3176-3201

Liu J S, Kong A, Wong W H. 1994. Sequential imputations and Bayesian missing data problems. J Am Stat Assoc, 89(425): 278-288

Liu J S. 1996. Metropolized independent sampling with comparison to rejection sampling and importance sampling. Stat Comp, 6: 113-119

Liu J S. 2001. Monte Carlo strategies in Scientific Computing. Berlin: Springer, 343pp

Mu M, Wang J F. 2003. An adjoint method for variational data assimilation with physical “on-off” processes. J Atmos Sci, 60(16): 2010-2018

Mu M. Zheng Q. 2005. Zigzag oscillations in variational data assimilation with physical “on-off” processes. Mon Wea Rev, 133: 2711-2720

Niclas Bergman. 1999. Recursive Bayesian Estimation Navigation and Tracking Applications. Linköping: Sweden, 219pp

Talagrand O. 1997. Assimilation of observations: An introduction. J Met Soc Japan (Special Issue), 75(1B): 191-209

Xu Q. 1996. Generalized adjoint for physical processes with parameterized discontinuities. Part I: Basic issues and heuristic examples. J Atmos Sci, 53: 1123-1142

Xu Q. 1997. Generalized adjoint for physical processes with parameterized discontinuities. Part Ⅳ: Problems and treatment in time discretization. J Atmos Sci, 54: 2722-2728

Zhang S, Harrison M J, Wittenberg A T, et al. 2005. Initialization of an ENSO forecast system using a parallelized ensemble filter. Mon Wea Rev, 133: 3176-3201

Zheng Q, Mu M. 2006. The effects of the model errors generated by discretization of “on-off” processes on VDA. Nonlinear Processes Geophys, 13(3): 309-320

Zhu Jiang, Masafumi Kamachl, Zhou Guangqing. 2002. Non-smooth optimization approaches to VDA of models with on/of parameterizations: Theoretical isues. Adv Atmos sci, 19(3): 405-424