等価重み粒子フィルタによる非線形モデルの時変パラメータ推定

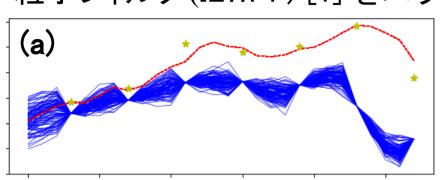
佐藤 峰斗 総合研究大学院大学 統計科学専攻 博士課程(5年一貫制)5年

1. 概要

目的: 気象や海洋等の高次元・非線形システムの予測精度向上に向け、 予測精度を左右するモデルパラメータの推定手法を提案する。

課題: 粒子フィルタは非線形モデルに適用可能だが、退化が課題(図1)。

アプローチ: 全粒子の重みを等しくすることで退化を抑制する、等価重み 粒子フィルタ (IEWPF) [1] をパラメータ推定に拡張する。



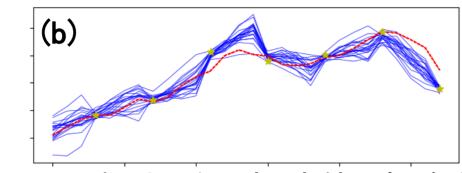


図1. (a) 一般的な粒子フィルタと(b) IEWPF の軌跡の例(赤: 真値、青: 各粒子)

2. 提案手法

2-1. 変数・パラメータに相関のある拡大状態空間モデル

下記のような一般的な拡大状態空間モデルへの拡張では、変数とパラメータの摂動項(システムノイズ)が独立である。(n:時間ステップ)

$${x^n \choose \theta^n} = {f(x^{n-1}, \theta^{n-1}) \choose \theta^{n-1}} + {\beta^n \choose \eta^n}, \quad \beta \sim N(0, Q_\beta), \quad \eta \sim N(0, Q_\eta).$$
 (1)

非線形モデルケへのパラメータの寄与を以下のように一次近似すると

$$f(x^{n-1}, \theta^{n-1}) \cong f(x^{n-1}, \theta^{n-2}) + \frac{\partial f}{\partial \theta}(\theta^{n-1} - \theta^{n-2}),$$
 (2)

以下のように相関のある形で、システムモデルを表すことができる:

$$z^{n} \equiv \begin{pmatrix} \chi^{n} \\ \theta^{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(\chi^{n-1}, \theta^{n-2}) + \frac{\partial f}{\partial \theta} \eta^{n-1} + \beta^{n} \\ \theta^{n-2} + \eta^{n-1} \end{pmatrix} \equiv \tilde{f}(z^{n-1}) + \tilde{\beta}^{\tilde{n}},$$

$$(3)$$

 $\tilde{\beta}^{n} \sim N(0, \tilde{Q}^{n}), \quad \tilde{Q} = \begin{pmatrix} Q_{\beta} + \frac{\partial f}{\partial \theta} Q_{\eta} \frac{\partial f}{\partial \theta}^{T} & \frac{\partial f}{\partial \theta} Q_{\eta} \\ Q_{\eta} \frac{\partial f}{\partial \theta}^{T} & Q_{\eta} \end{pmatrix}. \tag{4}$

2-2. 等価重み粒子フィルタの実現方法

The Implicit Equal-Weights Particle Filter (IEWPF) [1] は、提案分布を

$$z_i^n = \zeta_i^n + \alpha_i^{1/2} P^{1/2} \xi_i^n , \qquad \xi \sim N(0, \mathbf{I})$$
 (5)

で与える。ここで ζ_i^n , P は最適提案分布の平均と分散共分散行列である。 $\zeta_i^n = \tilde{f}\left(z_i^{n-1}\right) + QH^T\left(HQH^T + R\right)^{-1}\left(y^n - Hf\left(z_i^{n-1}\right)\right), P = \left(Q^{-1} + H^TR^{-1}H\right)^{-1}$ 式(5)は提案分布 $q(z^n | z_{1:N}^{n-1}, y^n) = \frac{q(\xi)}{\|\frac{dz}{d\xi}\|}$ 導入による変数変換 $z_i \to \xi_i$ (6)

を表し、各粒子の重みが等しくなるためには α_i が次式を満たせば良い。

$$-2\log w_i^n = -2\log w_i^{n-1} - 2\log \left(\frac{p(y^n|z_i^n)p(z_i^n|z_i^{n-1})}{q(\xi)} \left\| \frac{dz}{d\xi} \right\| \right)$$
(7)

 w_i^n は粒子 i , ステップ n における重みを表す。観測・システムノイズをガウス分布、観測モデル H を線形とし、高次元(変数 x の次元 $N_x \to \infty$)の下で、式(7)を満たす α_i は、解析解を Lamber W function から得ることができる[1]。

2-3. パラメータ予測へのオンライン最適化手法の導入

観測値があるステップ n では、粒子 i の事後分布(フィルタ分布)からのサンプリングは式(5),(6) より得られる。一方、次の観測までの、観測値が無いステップ n+1 の予測は、ステップ n の観測値 y^n の情報を使った提案分布 $q(z_i^{n+1}|z_i^n,y^n)$ を用いて、パラメータの予測分布を次式で得る:

$$p(z^{n}|z_{i}^{n-1},y^{1:n}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N_{p}} \frac{p(z^{n}|z_{i}^{n-1})}{q(z^{n}|z_{i}^{n-1},y^{n})} q(z^{n}|z_{i}^{n-1},y^{n}).$$
(8)

References

- 1. Zhu, Mengbin, Peter Jan Van Leeuwen, and Javier Amezcua. "Implicit equal-weights particle filter." Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society 142.698 (2016): 1904-1919.
- 2. Kingma, D. P., and Ba, J. (2014). Adam: A method for stochastic optimization. arXivpreprint arXiv, 1412.(6980).
- 3. Satoh, Mineto, Peter Jan van Leeuwen, and Shin'ya Nakano. "Online state and time-varying parameter estimation using the implicit equal-weights particle filter." Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society (2024).

この提案分布 q を以下のように生成する:

$$q(z_i^{n+1}|z_i^n, y^n) = N\left(\tilde{f}(z_i^n) + \begin{pmatrix} 0 \\ -\lambda g(\theta_i^{n-2}, y^n) \end{pmatrix}, \tilde{Q}\right). \tag{9}$$

λは Step-size factor, g はステップn, 粒子 i の nudging 項である。ここで、

$$L_i^n(\theta_i^{n-2}) = \left(y^n - Hf(x_i^{n-1}, \theta_i^{n-2})\right)^T R^{-1} \left(y^n - Hf(x_i^{n-1}, \theta_i^{n-2})\right)$$
(10)

の勾配を用いて関数 g を定義: $g \propto V_{\theta}L_i^n$ すると、式(9)は式(10)の評価関数の勾配が小さくなる方向にパラメータ θ を nudging する。関数 g は、最適化アルゴリズムのAdam[2]を用いて次式で定義する:

$$g(\theta_i^{n-2}, y^n) = \widehat{m}_i^n / \sqrt{\widehat{v}_i^n} , \ \widehat{m}_i^n \propto \nabla_{\theta} L_i^n, \ \widehat{v}_i^n \propto (\nabla_{\theta} L_i^n)^2.$$
 (11)

3. 数値実験: Lorenz-96 モデルによる双子実験 3-1. 外力項にパラメータを導入したモデル (1000次元)

Lorenz-96 モデルを用いて、高次元・非線形システムにおける時間変化するパラメータ推定の妥当性を評価した[3]。Lorenz-96 モデル:

$$\frac{d}{dt}x_j = (x_{j+1} - x_{j-2})x_{j-1} - x_j + F_j$$
 (12)

の外力項 F_i に、3つのパラメータ $(\theta_0, \theta_1, \theta_2)$ を導入して以下のように表す:

$$F_j = \theta_{0 \text{true}} \theta_0 + \theta_{1 \text{true}} \theta_1 \sin \left(\frac{2\pi}{\theta_{2 \text{true}} \theta_2} j \right)$$
 (13)

 $(\theta_{0\,\mathrm{true}},\theta_{1\,\mathrm{true}},\theta_{2\,\mathrm{true}})=(8,4,1000)$ で、これらの係数となっている3つパラメータの真値を 1.0 から変化させて疑似観測データを生成した。変数と観測データの分散共分散行列 Q_{β} , R は、それぞれ対角項 0.1, 隣接(上下)対角項 0.025、R=0.02 I とし、疑似観測データ生成時と推定時で同じ値を用いた。パラメータの分散共分散行列 Q_{η} は対角とし、観測データ生成時は 0 とした。

3-2. パラメータの分散共分散と Step-size factor 依存性

変数 x の次元は1000、全変数が 4 ステップ毎に観測され、粒子数 $N_p=20$ とした。図2に (9)式の Step-size factor λ を 0.001 としてパラメータの分散共分散行列 Q_η の対角値を 1.0×10^{-6} , 5.0×10^{-6} , 1.0×10^{-5} , 5.0×10^{-5} と変えた場合 (a) と、 Q_η の対角値を 5.0×10^{-6} として λ を 0.0005, 0.001, 0.002, 0.004 と変えた場合 (b) の軌跡を示す。各パラメータの真値は 200 ステップで +30% 変化したと仮定した。図3にそれぞれの場合の時間平均 RMSE 及び粒子広がり(Spread)を予測とフィルタリングステップに分けて示す。 Q_η の対角値が大きくなると RMSE が小さくなり、RMSE と Spread の比が 1 に近づくが Spread が大きくなる。一方、Step-size factor λ が大きくなると Spread の変化は少なく、RMSE が小さくなる。本結果からパラメータの時間変化を推定できることがわかるが、実用上は Q_η と λ を問題に応じて適切に設定する必要がある。

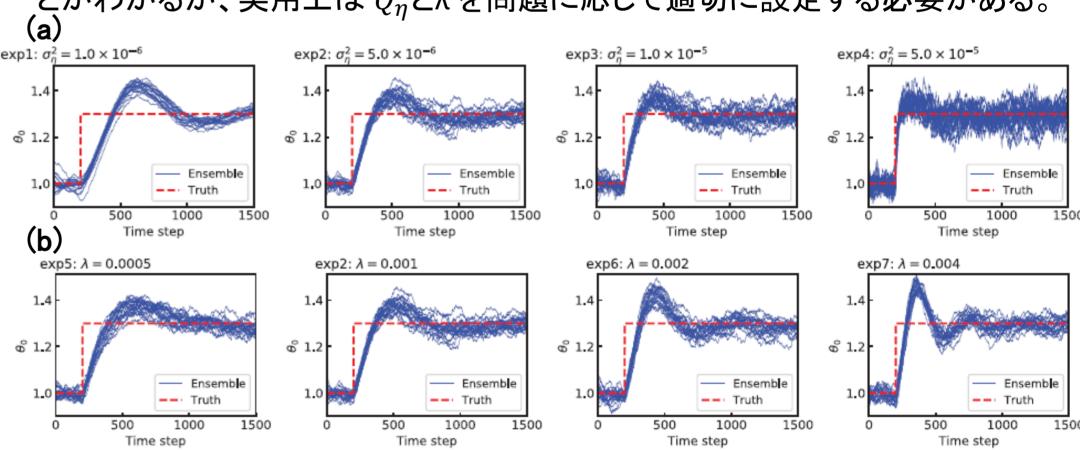


図2. パラメータ θ_0 の真値(赤点線) と粒子(青線)の軌跡。(a)パラメータの分散共分散行列 Q_η 依存性、(b) Step-size factor λ 依存性

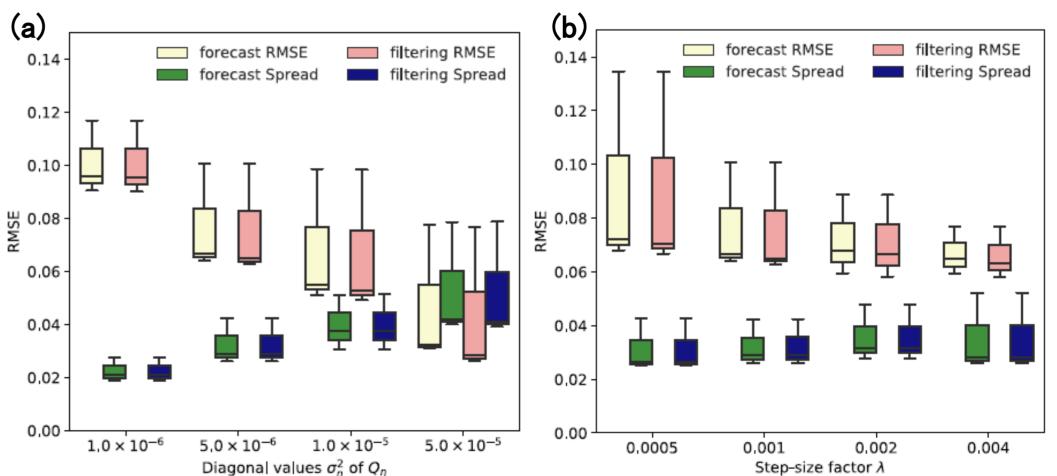


図3. 100 -1500 ステップで時間平均した RMSE 及び粒子広がり (Spread)の (a)パラメータの分散共分散行列 Q_n と、(b) Step-size factor λ 依存性