統計数理（2022）
第 70 巻 第 2 号 181–193

特集「データ同化の方法」
［総合報告］

大気解析のための変分法データ同化における背景誤差共分散行列の根の定式化

石橋 俊之†

（受付 2022 年 1 月 4 日；改訂 3 月 9 日；採択 4 月 11 日）

要　　旨

全球の大気状態を高精度に推定することは，大気のカオス性によって難しい科学的問題となっている．データ同化は，大気に関する膨大な情報を確率密度関数間の関係式（ベイズの定理）を用いて無矛盾に統合することで，これを可能にする枠組みである．特にモデル予測の誤差共分散行列（背景誤差共分散行列; Background Error Covariance Matrix: BECM）は複雑な時空間構造を持つため，これを精度良く推定することは大気解析の主要研究課題となっている．本論文は，変分法による全球大気解析における BECM の定式化のレビューであり，特に変分法で重要な BECM の根に焦点を当てる．近年，アンサンブル予報と局所化による高精度な BECM の根の表現によって大気解析精度の向上が顕著であり，このような BECM の根として 4 つの行列表現がある．これらの表現には，相互関係が完全に示されていない等の課題がある．近年，BECM の根の一般形が示され，これらの行列表現はいずれも一般形から演繹されること等が示された．また，BECM の根の非正則性の問題についても，理論の近似精度の下での不定性の自由度を使って正則性を維持できることや，特定の最小化アルゴリズムについて根の非正則性が解に影響しないことが示されている．

キーワード：データ同化，変分法，大気科学，背景誤差共分散行列，アンサンブル，局所化．

1. はじめに

全球の大気状態を（系の時間発展を予測できる程度に）高精度に推定することは，大気のカオス性 (Lorenz, 1963) によって大自由度系の状態推定問題となるため，大気科学，統計数理，大規模数値計算，地球観測等の複数の科学分野を含む難しい科学的研究課題である．それはまた大気科学や社会基盤情報となる気象や気候予測に不可欠である．データ同化は，確率密度関数 (Probability Density Function: PDF）の間に成り立つ関係式（ベイズの定理）を用いて，大気状態に関する膨大な情報を無矛盾に統合することで，これを可能にする枠組みである．データ同化では，各情報（観測やモデル予測）の PDF を適切に推定して状態推定に用いる必要があり，特にモデル予測の PDF は複雑な時空間構造を持つため，これを精度良く推定することは，大気状態推定研究の主要研究課題となっている．PDF をガウス分布で近似する場合は背景誤差共分散行列（Background Error Covariance Matrix: BECM）の推定に帰着する．

大気解析におけるデータ同化は，数値天気予報（Numerical Weather Prediction: NWP）の初

† 気象庁気象研究所：〒 305–0052 茨城県つくば市長峰 1–1

期値生成手法として，数値計算機や観測システムとともに発展してきた（Lewis et al., 2006; Kalnay, 2003）．関数当てはめ法（Panofsky, 1949; Gilchrist and Cressman, 1954）や繰り返し修正法（Bergthórsson and Döös, 1955; Cressman, 1959; Barnes, 1964）に始まり，不偏最小分散推定を近似した最適内挿法（Eliassen, 1954; Gandin, 1963），その後も，変分法（Sasaki, 1958, 1969, 1970; Thompson, 1969; Parrish and Derber, 1992; Courtier et al., 1994; Rabier et al., 2000; Mahfouf and Rabier, 2000; Klinker et al., 2000）やアンサンブルカルマンフィルタ（Kalman, 1960; Kalman and Bucy, 1961; Evensen, 1994; Houtekamer et al., 2005）と発展してきた．Lorenc (1986) では，変分法とベイズ推定との関係が明瞭に示されている．大気解析の研究は，利用可能な観測や計算資源の下で，ベイズ推定の良い近似系を構成することであるともいえる．これは，NWP モデルがバランス方程式系からはじまり，近似の精緻化と緩和をしながら発展してきたのと同様である．近年の NWP では，PDF のガウス分布近似と接線型近似が主な近似として残っており（Lewis et al., 2006; Kalnay, 2003），これらの近似を精緻化及び緩和するための研究が継続している．

本論文は，大気状態解析のための変分法を用いたデータ同化における BECM の定式化について，特にアンサンブル予報と局所化（Gaspari and Cohn, 1999; Houtekamer and Mitchell, 2001, 2005）を使った流れ依存性（気象場への依存性）の導入をレビューする．全球大気解析においては，解析場の物理的な整合性が特に重要となる．変分法は全球を分割せずに一度で解析できる点で全球大気解析に適している．変分法の BECM は，気候学的なバランスを表現することからはじまったが（Courtier et al., 1994），観測の増強や計算機性能の向上により，アンサンブル予報と局所化を組み合わせることで気象場に依存した時々刻々変化する誤差構造の表現が可能になり，解析や予測精度が大きく改善している（Buehner et al., 2010a, 2010b）．変分法への流れ依存性の導入は，変分法及びそれによる衛星輝度温度観測の直接同化の導入以降，大気解析の精度向上に最も寄与した高度化の一つである．変分法による大気解析では，大自由度系の最小化問題の条件数を 1 に近づけて収束性を改善すると同時に逆行列計算を回避するために，BECM の根が不可欠である．流れ依存した BECM の根の定式化としては，4 つの行列表現が知られており，Lorenc (2003)，Buehner (2005)，Liu et al. (2009)，Bishop and Hodyss (2009) で提示されたものである．これらは BECM の精度向上に寄与するとともに，局所化による解析の自由度の増加を明瞭に示している．一方で，これらは比較的複雑な表現となっており，互いの関係や，導出過程，式の操作性が低いなどの問題があった．Wang et al. (2007) では，Lorenc (2003) と Buehner (2005) の行列表現の同一性が示されている．近年，BECM の根の一般形（統一形）の定式化が与えられ，行列表現は一般形から導かれ，すべての表現が等価であることが示され，一般形はまた簡便な表現となっているため操作性も向上した（Ishibashi, 2015）．

BECM の根には非正則性の問題がある．つまり，BECM の根の逆が存在しないために，解析変数を BECM の根と制御変数の積として変数変換した場合の制御変数の共分散行列が恒等行列であることを別途仮定しなければならない．近年この問題についても，2 つの方向で進展があり，制御変数の共分散行列を恒等行列とすることの妥当性が証明されている．一つは，物理的考察に基づくものであり，理論の近似精度の範囲での不定性の自由度を用いて BECM の根の正則性を維持するものであり，この方法では，BECM の根だけでなく，BECM 自体の非正則性も取り扱える（Ishibashi, 2015）．もう一方の方法は，正則な BECM で根が非正則な場合で，かつ最小化アルゴリズムが BECM の根の転置空間で解を探索する場合に，BECM の根の非正則性が解に影響しないことを示した（Ménétrier and Auligné, 2015）．これらにより非正則な BECM やその根を用いたデータ同化の妥当性は保証されている．

以下では，見通しを良くするために，はじめに第 2 章で，BECM の根の一般形（Ishibashi, 2015）をレビューした後，第 3 章で 4 つの行列表現（Lorenc, 2003; Buehner, 2005; Liu et al., 2009; Bishop and Hodyss, 2009)，第 4 章で一般形から 4 つの行列表現の導出 (Ishibashi, 2015) をレビューする．第 5 章では，非正則な BECM やその根の問題について，2 つの研究 (Ishibashi, 2015; Ménétrier and Auligné, 2015) をレビューする．第 6 章はまとめである．

2. BECM の根の一般形

2.1 大気解析のための変分法データ同化の概要

はじめに大気解析のための変分法データ同化の概要を見ておく (Kalnay, 2003; Lewis et al., 2006)．離散化した大気状態を N 次元実ベクトル $\boldsymbol{x}$ で表す．$\boldsymbol{x}$ の各要素は，例えば，大気を 3 次元の格子と時間で離散化した場合は，各格子点の各時刻の大気状態を表す各物理量(気温，風速，水蒸気量等)である．$\boldsymbol{x}$ の存在するベクトル空間をモデル空間と呼ぶ．大気状態についての観測や数値モデル予測等の情報を Z 次元実ベクトル $\boldsymbol{z}$ で表す．ベイズの定理によって次式が成り立つ．

$$P(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{z}) = P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{x})P(\boldsymbol{x})/P(\boldsymbol{z}) \tag{2.1}$$

ここで，$P(\boldsymbol{a})$ は事象 $\boldsymbol{a}$ が起こる確率を表す PDF，$P(\boldsymbol{a}|\boldsymbol{b})$ は $\boldsymbol{b}$ が起こっているときに $\boldsymbol{a}$ が起こる条件付き PDF を表す．左辺を最大にする $\boldsymbol{x}$ が，$\boldsymbol{z}$ のもとで最も確からしい大気状態である．大気状態を知るためには (2.1) の右辺の PDF を十分な精度で構築する必要がある．PDF は気象場に依存するため，その流れ依存性の表現精度は解析精度を決める重要な要素である．情報 $\boldsymbol{z}$ として観測データ $\boldsymbol{y}$ (P 次元実ベクトル) とモデル予測 (背景場) $\boldsymbol{x}_b$ (N 次元実ベクトル) を考え，これらが各々共分散行列 $\boldsymbol{R}$ と $\boldsymbol{B}$ な独立なガウス分布に従うと仮定すると，最も確からしい大気状態は，以下の評価関数を最小にする x として得られる．

$$J(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_b)^T\boldsymbol{B}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_b) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{y}-H(\boldsymbol{x}))^T\boldsymbol{R}^{-1}(\boldsymbol{y}-H(\boldsymbol{x})) \tag{2.2}$$

ここで，$H(\boldsymbol{x})$ は観測演算子であり，$\boldsymbol{x}$ を観測量に変換する関数である．誤差共分散行列は一般に気象場への依存性を持ち，特に背景誤差共分散行列で顕著である．NWP の全球大気解析では，N は 10^8，P は 10^6 程度であるので，この形のままでは最小化は困難である．そこで，$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^T$ を満たす $\boldsymbol{B}$ の根 $\boldsymbol{U}$ によって，$\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_b = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\xi}$ で変数変換するとともに ($\boldsymbol{\xi}$ は制御変数と呼ばれる)，$\boldsymbol{y}-H(\boldsymbol{x}) \cong \boldsymbol{d}-\boldsymbol{H}\boldsymbol{U}\boldsymbol{\xi}$，$\boldsymbol{H} = (\partial H(\boldsymbol{x})/\partial\boldsymbol{x})_{\boldsymbol{x}_b}$，$\boldsymbol{d} = \boldsymbol{y}-H(\boldsymbol{x}_b)$ のように接線型展開すると，次式を得る．

$$J(\boldsymbol{\xi}) \cong \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}^T\boldsymbol{\xi} + \frac{1}{2}(\boldsymbol{d}-\boldsymbol{H}\boldsymbol{U}\boldsymbol{\xi})^T\boldsymbol{R}^{-1}(\boldsymbol{d}-\boldsymbol{H}\boldsymbol{U}\boldsymbol{\xi}) \tag{2.3}$$

ここで，$\boldsymbol{B}$ の流れ依存性から $\boldsymbol{U}$ も流れ依存性をもつが，大気状態を解析インクリメント ($\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_b$) 程度変化させたときの $\boldsymbol{U}$ の変化は，接線型展開の 2 次の効果であり無視できるため，式 (2.3) は ξ の各要素について 2 次関数になっている．式 (2.3) では，ヘッセ行列の多くの要素は 1 で，$\boldsymbol{B}^{-1}$ の計算も含まれないため，最小化アルゴリズム (準ニュートン法や共役勾配法) での最小化が可能である．(2.1) の右辺の PDF を十分な精度で構築するには，$\boldsymbol{U}$ を流れ依存性も含めて十分な精度で構築することが重要である．式 (2.3) の導出では，$\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{I}$ が成り立っている必要がある．$\boldsymbol{U}$ が正則でない場合の妥当性については第 5 章で見る．

2.2 BECM の根の一般形 (Ishibashi, 2015)

アンサンブル予報と局所化行列によって BECM は次式で表される．

$$B_{\mu,\nu} = C_{\mu,\nu}\sum_m X_{\mu,m}X_{\nu,m} \tag{2.4}$$

ここで，$B_{\mu,\nu}$ は $\boldsymbol{B}$ の (μ,ν) 成分，$C_{\mu,\nu}$ は $N\times N$ 次元の局所化行列 $\boldsymbol{C}$ の (μ,ν) 成分，$X_{\mu,m}$ は，アンサンブル摂動行列 $\boldsymbol{X}$ の (μ,m) 成分であり，M メンバのアンサンブル予報の m 番目のメンバの μ 番目の要素のアンサンブル平均からの偏差を $\sqrt{M-1}$ で規格化した値である．式(2.4)は，アンサンブル予報による流れ依存性を含む BECM の表現 $\sum_m X_{\mu,m}X_{\nu,m}$ に，局所化行列で時空間的に離れた要素同士の相関が小さいなどの情報を加えることで，BECM を構成している．BECM の根を得るには局所化行列を固有値分解等で対称に分割する．

$$C_{\mu,\nu}=\sum_a S_{\mu,a}S_{\nu,a} \tag{2.5}$$

ここで，$S_{\mu,a}$ は，$\boldsymbol{C}$ の根である $N\times A$ 実行列 $\boldsymbol{S}$ の (μ,a) 成分であり，A はモード数である．$\boldsymbol{C}$ をガウス関数で表す場合などでは，固有値の上位 99% までで近似すれば，自由度は大幅に減らすことができる．BECM の根は次式で得られる．

$$\begin{aligned} &B_{\mu,\nu}=\sum_{m,a}X_{\mu,m}S_{\mu,a}X_{\nu,m}S_{\nu,a}=\sum_{m,a}U_{\mu,m,a}U_{\nu,m,a} \\ &U_{\mu,m,a}=X_{\mu,m}S_{\mu,a} \end{aligned} \tag{2.6}$$

BECM は，3 つの添え字を持った量(テンソル)$U_{\mu,m,a}$ の後ろ 2 つの添え字を縮約して得られる．つまり，$U_{\mu,m,a}$ は BECM の根である．このとき $\boldsymbol{B}$ のランクは MA または N 以下である．縮約する添え字を列，しない添え字を行として要素を並べ，$U_{\mu,m,a}$ を $N\times MA$ 行列として扱うと，通常の行列積で，$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^T$ である．解析変数の変数変換は次式である．

$$\delta x_\mu=\sum_{m,a}U_{\mu,m,a}\xi_{m,a} \tag{2.7}$$

アンサンブルメンバ数と局所化行列の根のモード数の積が制御変数の自由度となる．

局所化行列の自由度を下げる場合は次式である．

$$C_{\mu,\nu}=c_{\rho(\mu),\rho(\nu)}=\sum_a s_{\rho(\mu),a}s_{\rho(\nu),a} \tag{2.8}$$

例えば，格子の水平位置だけに依存させる場合は，$\rho(\mu)$ は水平格子位置を返す関数である．局所化を複数の演算子の積で表現する場合の BECM の根も同様に次式で与えられる．

$$\begin{aligned} C_{\mu,\nu}=C^T_{\mu,\nu}C^H_{\mu,\nu}C^Z_{\mu,\nu}&=\left(\sum_t T_{\mu,t}T_{\nu,t}\right)\left(\sum_h H_{\mu,h}H_{\nu,h}\right)\left(\sum_z Z_{\mu,z}Z_{\nu,z}\right) \\ &=\sum_{t,h,z}(T_{\mu,t}H_{\mu,h}Z_{\mu,z})(T_{\nu,t}H_{\nu,h}Z_{\nu,z}) \end{aligned} \tag{2.9}$$

$$B_{\mu,\nu}=\sum_{t,h,z,m}U_{\mu,t,h,z,m}U_{\nu,t,h,z,m} \tag{2.10}$$

$$U_{\mu,t,h,z,m}=T_{\mu,t}H_{\mu,h}Z_{\mu,z}X_{\mu,m} \tag{2.11}$$

ここで，$C^T_{\mu,\nu},C^H_{\mu,\nu},C^Z_{\mu,\nu}$ は各々，時間，水平，鉛直方向の局所化行列の (μ,ν) 成分である．$T_{\mu,t},H_{\mu,h},Z_{\mu,z}$ は，各々，時間，水平，鉛直方向の局所化行列の根の成分である．

以上のように一般形では BECM の根は BECM から直接得られ，実装で不可欠となる自由度の抑制や複数の局所化行列の積表現を導入した場合でも表現は複雑化しない．

3.　BECM の根の 4 つの行列表示

ここでは，4 つの行列表現を見ていく．

3.1　Lorenc (2003) の行列表現

Lorenc (2003) の行列表現での，解析変数の変換は次式である．

$$\delta \boldsymbol{x} = (\boldsymbol{X} \circ \boldsymbol{\alpha})\mathbf{1} \tag{3.1}$$

ここで $\boldsymbol{X} \circ \boldsymbol{\alpha}$ は行列 $\boldsymbol{X}$ と $\boldsymbol{\alpha}$ の要素積である．評価関数の背景項 J_b は次式である．

$$2J_b = Tr(\boldsymbol{\alpha}^T \boldsymbol{C}^{-1} \boldsymbol{\alpha}) \tag{3.2}$$

ここで，$\boldsymbol{\alpha}$ は制御変数であり $N \times M$ 次元行列，$\mathbf{1}$ は全要素が 1 の M 次元ベクトルである．変数変換は要素積を含み，制御変数は行列となっており，元の評価関数(2.3)の背景項と比べるとガウス分布との対応等，意味がわかりにくいが，アンサンブルメンバごとに N 次元制御変数ベクトルがあり，その共分散行列が $\boldsymbol{C}$ である．制御変数は各アンサンブルメンバの要素積による修正量を決めていると解釈できる．Lorenc (2003) ではこれらの導出過程は顕わに示されていないが，局所化しない場合の式，$\delta \boldsymbol{x} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}$，$2J_b = \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta}$ を拡張したものであり，局所化しない場合には解析変数 $\boldsymbol{\beta}$ はアンサンブルメンバの重みを全球一様に決めてしまうのに対し，制御変数に格子点への依存性をもたせ，その依存性は局所化行列を共分散行列とするように決められていると見ることができる．この表示は，アンサンブルを用いた BECM の根を用いて変分法で解析を行う研究の最初のものであり，比較的複雑な表示は発見的な定式化のためと推測する．式(3.2)の背景項をもった評価関数を実際に最小化することは，$\boldsymbol{C}$ の逆行列計算や条件数の問題で難しい．そもそも多くの場合 $\boldsymbol{C}$ の逆行列は存在しない．このため，$\boldsymbol{C}$ の根や $\boldsymbol{C}$ 自体によるさらなる変数変換が必要である．

3.2　行列積表現

(a) Buehner (2005) の表現

Buehner (2005) の BECM の根の行列表現は次式である．

$$\boldsymbol{U} = (\tilde{\boldsymbol{X}}^1 \boldsymbol{S}, \ldots, \tilde{\boldsymbol{X}}^M \boldsymbol{S}) \tag{3.3}$$

ここで，$\tilde{\boldsymbol{X}}^m$ は $N \times N$ 行列であり，その (μ, ν) 要素は $\tilde{X}^m_{\mu,\nu} \equiv X_{\mu,m}\delta_{\mu,\nu}$ で与えられる．$\delta_{\mu,\nu}$ はクロネッカーのデルタである($N \times N$ 単位行列の (μ, ν)成分)．$\boldsymbol{S}$ は $N \times A$ 行列であり，その (μ, a) 要素は $S_{\mu,a}$ で与えられる．$\boldsymbol{U}$ は，$N \times MA$ 行列である．制御変数 ξ は，MA 次元ベクトルで，その成分は，$(m, a) = (1, 1), (1, 2), \ldots, (M, A)$ の順である．Lorenc (2003) の表現と比べると，制御変数の共分散行列は恒等行列になり，通常の行列積で表現されている．

(b) その他の行列積表現

行列を使った表現は他にも構成でき，例えば次式がある (Ishibashi, 2015)．

$$\boldsymbol{U} = (\tilde{\boldsymbol{S}}^1 \boldsymbol{X}, \ldots, \tilde{\boldsymbol{S}}^A \boldsymbol{X}) \tag{3.4}$$

ここで，$\tilde{\boldsymbol{S}}^a$ は $N \times N$ 行列であり，その (μ, ν) 要素は $\tilde{S}^a_{\mu,\nu} \equiv S_{\mu,a}\delta_{\mu,\nu}$ で与えられる．Buehner (2005) の表現とは列の並び順だけ異なる．

3.3　要素積表現

(a) Liu et al. (2009) の要素積表現

Liu et al.（2009）の要素積表現は次式である．

$$\boldsymbol{U} = (\hat{\boldsymbol{X}}^1 \circ \boldsymbol{S}, \ldots, \hat{\boldsymbol{X}}^M \circ \boldsymbol{S}) \tag{3.5}$$

ここで，$\hat{\boldsymbol{X}}^m$ は $N \times A$ 行列であり，その (μ, a) 要素は $\hat{X}^m_{\mu,a} \equiv X_{\mu,m}$ で与えられる．$\boldsymbol{U}$ は，$N \times MA$ 行列である．Lorenc（2003）の表現と比べると，制御変数の共分散行列は恒等行列になり，通常の要素積で表現されている．

（b）要素積表現 2（Ishibashi, 2015）

行列積表現 2 と同様に $\boldsymbol{S}$ と $\boldsymbol{X}$ を入れ替えると，$N \times M$ 行列の要素積での表現も得られる．

（c）要素積表現 3

別の要素積表現として次式もある（Bishop and Hodyss, 2009）．

$$\boldsymbol{U} = (\boldsymbol{x}^1 \circ \boldsymbol{s}^1, \boldsymbol{x}^1 \circ \boldsymbol{s}^2, \ldots, \boldsymbol{x}^M \circ \boldsymbol{s}^A) \tag{3.6}$$

ここで，$\boldsymbol{x}^m$ と $\boldsymbol{s}^a$ は，N 次元ベクトルでその μ 成分は各々，$X_{\mu,m}$，$S_{\mu,a}$ である．

3.4 変調積（Modulation product）表示（Bishop and Hodyss, 2009）

Bishop and Hodyss（2009）では，変調積演算 Δ を定義して以下の太字表現を構成した．

$$\boldsymbol{U} = (\boldsymbol{x}^1 \circ \boldsymbol{s}^1, \boldsymbol{x}^1 \circ \boldsymbol{s}^2, \ldots, \boldsymbol{x}^M \circ \boldsymbol{s}^A) \equiv \boldsymbol{X} \Delta \boldsymbol{S} \tag{3.7}$$

変調積演算は要素積演算をまとめたものである．変調積表示（3.7）は，要素積表現 3（3.6）と数学的に同一であるが，変調積を定義することで表示を簡素化し，操作性を向上させる意図があった．

3.5 問題点

いずれの行列表現も，$\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^T = \boldsymbol{B}$ を示すことで $\boldsymbol{B}$ の根であることは確認されている．しかし，なぜこの形なのか，4 つの行列表現の関係が明らかでない，表現が比較的複雑なため操作性が低いことが課題としてある．局所化行列は複数の行列の要素積で表現されることが多いが，その場合はこれらの行列表現はより複雑になる．

4. 一般形から行列表現の導出（Ishibashi, 2015）

ここでは，一般形から，4 つの行列表現を演繹して，4 つの表現の同一性を示すとともに，行列表現を解釈する．

4.1 Lorenc（2003）の表現

一般形の変数変換（2.7）のモード和だけ先にとると次式の中間変数を得る．

$$\alpha_{\mu.m} = \sum_a S_{\mu,a} \xi_{m,a} \tag{4.1}$$

変数変換（2.7）は，$\alpha_{\mu,m}$ を使って書くと次式を得る．

$$\delta x_\mu = \sum_{m,a} X_{\mu,m} S_{\mu,a} \xi_{m,a} = \sum_m X_{\mu,m} \alpha_{\mu.m} \tag{4.2}$$

これは行列表現では，

$$\delta \boldsymbol{x} = (\boldsymbol{X} \circ \boldsymbol{\alpha}) \boldsymbol{1}$$

であり，Lorenc (2003) の表現の式(3.1)が導出された．

一般形の背景項は次式のように書き直せる．

$$2J_b = \sum_{m,a} \xi_{m,a}\xi_{m,a} = \sum_{m,a,b} \xi_{m,a}\xi_{m,b}\delta_{a,b} = \sum_{m,a,b,\mu,\nu} \xi_{m,a}\xi_{m,b}S_{\mu,a}C^{-1}_{\mu,\nu}S_{\nu,b}$$
$$= \sum_{m,\mu,\nu} \alpha_{\mu.m}\alpha_{\nu.m}C^{-1}_{\mu,\nu} \tag{4.3}$$

これは Lorenc (2003) の行列表現の背景項(3.2)である．第 3 等号は式(2.3)と同種の仮定が必要であるが，これについては第 5 章で論じる．

以上より，Lorenc (2003) の行列表現は，一般形の制御変数と局所化行列の根について局所化行列のモードの自由度を縮約して生成されるモデル次元とアンサンブル次元の自由度をもった中間変数を制御変数として表現したものと解釈できる．

4.2 Buehner (2005) の表現

一般形の BECM の根(2.6)は次式のように変形できる．

$$U_{\mu,m,a} = X_{\mu,m}S_{\mu,a} = \sum_{\nu} X_{\nu,m}\delta_{\mu,\nu}S_{\nu,a} = \sum_{\nu} \tilde{X}^m_{\mu,\nu}S_{\nu,a} \tag{4.4}$$

ここで，$\tilde{X}^m_{\mu,\nu} = X_{\nu,m}\delta_{\mu,\nu}$ を定義した．$\tilde{X}^m_{\mu,\nu}$ を $N\times N$ 行列 $\tilde{\boldsymbol{X}}^m$ の (μ,ν) 成分とみなすと，これは Buehner (2005) の行列表現の式(3.3)である．Buehner (2005) の行列表示は，BECM の根を行列積で表現するための表示方法の一つと解釈できる．

4.3 Liu et al. (2009) の表現

一般形の BECM の根(2.6)は次式のように変形できる．

$$U_{\mu,m,a} = X_{\mu,m}S_{\mu,a} = \hat{X}^m_{\mu,a}S_{\mu,a} \tag{4.5}$$

ここで，$\hat{X}^m_{\mu,a} = X_{\mu,m}$ を導入した．これは Liu et al. (2009) の行列表現(3.5)である．Liu et al. (2009) の行列表現は，BECM の根を要素積で表現するための表示方法の一つと解釈できる．

4.4 Bishop and Hodyss (2009) の表現

一般形の BECM の根(2.6)は次式のように変形できる．

$$U_{\mu,m,a} = X_{\mu,m}S_{\mu,a} = x^m_\mu s^a_\mu \tag{4.6}$$

ここで，$x^m_\mu = X_{\mu,m}$，$s^a_\mu = S_{\mu,a}$ である．これは Bishop and Hodyss (2009) の行列表示(3.7)である．Bishop and Hodyss (2009) の行列表現は，BECM の根を要素積で表現するための表示方法の一つであり，また，変調積という演算としてまとめて表記することで，表示の簡素化を図った表現と解釈できる．

4.5 4 つの行列表現の関係と位置づけ

以上により，4 つの行列表現は一般形から導かれ，同一であることがわかった．また，各表現について一般形との関係を見ることで，各行列表現の意味を解釈した．

5. 正則でない根の妥当性の証明

正則でない BECM や BECM の根については，式(2.3)の導出が数学的に正しくなくなる問題

がある．通常は，制御変数の共分散行列は恒等行列であるという仮定を追加するなどして問題にしないが，これは結局，$\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{I}$ であると近似するということであり，問題は解消しない．Ishibashi (2015)や Ménétrier and Aulígné (2015)ではこれについて，明示的な解析が行われ，妥当性が証明された．

5.1 最小化アルゴリズムの性質に基づいた妥当性の証明（Ménétrier and Aulígné, 2015）

最小化アルゴリズムでは，繰り返し計算によって評価関数を最小化する．$\boldsymbol{\eta}$ をモデル空間の任意のベクトルとして，解の探索方向が $\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{\eta}$ の形である場合は，$\boldsymbol{\xi}=\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{\eta}$ であり，$\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{U}\neq\boldsymbol{I}$ であっても，次式が成り立つ．

(5.1)
$$\begin{aligned}2J(\boldsymbol{\xi})&=\boldsymbol{\xi}^T\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{\eta}+(\boldsymbol{d}-\boldsymbol{HU\xi})^T\boldsymbol{R}^{-1}(\boldsymbol{d}-\boldsymbol{HU\xi})\\&=\boldsymbol{\xi}^T\boldsymbol{\xi}+(\boldsymbol{d}-\boldsymbol{HU\xi})^T\boldsymbol{R}^{-1}(\boldsymbol{d}-\boldsymbol{HU\xi})\end{aligned}$$

(5.2)
$$\begin{aligned}\partial J(\boldsymbol{\xi})/\partial\boldsymbol{\xi}&=\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{\eta}+\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{H}^T\boldsymbol{R}^{-1}(\boldsymbol{d}-\boldsymbol{HU\xi})\\&=\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{H}^T\boldsymbol{R}^{-1}(\boldsymbol{d}-\boldsymbol{HU\xi})\end{aligned}$$

これらは，$\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{I}$ のときの評価関数(2.3)とその勾配に一致する．したがって，このような最小化アルゴリズムでは，$\boldsymbol{U}$ の非正則性は解に影響せず，評価関数(2.3)を用いて数値計算して良いことがわかる．共役勾配法では，解の探索方向が $\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{\eta}$ の形であるため，以上の結果が成り立つ．

解の探索方向が $\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{\eta}$ の形でない最小化アルゴリズム（例えば準ニュートン法）については，Ménétrier and Aulígné (2015)の結果は直接使えないが，これらのアルゴリズムの探査方向も，仮想的に $\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{\eta}$ ベクトルの重ね合わせで十分な精度で表現できると考えられるので，以上の議論はこれらのアルゴリズムについても妥当だろう．

5.2 理論の近似精度の範囲での不定性の自由度を用いた妥当性の証明（Ishibashi, 2015）

はじめに表記の簡素化のために，本項では式(2.6)でアンサンブルメンバと局所化行列のモードの自由度を添え字 g でまとめて書くことにする．$MA=G$ として BECM は次式である．

(5.3)
$$B_{\mu,\nu}=\sum_g U_{\mu,g}U_{\nu,g}$$

(a) 非正則な BECM の場合 $G\leq N$

BECM やその根の逆は存在しないので，式(2.3)は成り立たない．しかし，以下に示すように BECM の近似精度の範囲での不定性の自由度を利用することで，BECM やその根に正則性を持たせて，式(2.3)の妥当性を維持することができる．式(2.6)の $U_{\mu,\nu}$ を次式のように拡張する．

(5.4)
$$\bar{U}_{\mu,\nu}=\begin{cases}U_{\mu,\nu} & \nu\leq G\\ \varepsilon_{\mu,\nu} & G+1\leq\nu\leq N\end{cases}$$

ここで，$\varepsilon_{\mu,\nu}$ は，$U_{\mu,\nu}$ に比べて微小な量であり，各列は一次独立であるとする．$U_{\mu,\nu}$ の各列が一次独立であれば，$\bar{U}_{\mu,\nu}$ は正則である．$U_{\mu,\nu}$ が $\sum_m X_{\mu,m}=0$ などの拘束条件で一次従属な列を含む場合でも，$U_{\mu,\nu}$ に微小量を加えることで一次独立にできる．BECM を式(2.4)で近似する近似精度の範囲で次式が成り立ち，$\bar{U}_{\mu,\nu}$ は $U_{\mu,\nu}$ と等しい BECM を与える BECM の根である．

(5.5)
$$\sum_{\lambda} \bar{U}_{\mu,\lambda}\bar{U}_{\nu,\lambda} = \sum_{\lambda=1}^{G} U_{\mu,\lambda}U_{\nu,\lambda} + \sum_{\lambda=G+1}^{N} \varepsilon_{\mu,\lambda}\varepsilon_{\nu,\lambda} \cong \sum_{\lambda=1}^{G} U_{\mu,\lambda}U_{\nu,\lambda}$$

(5.6)
$$\delta x_{\mu} = \sum_{\lambda=1}^{G} U_{\mu,\lambda}\xi_{\lambda} + \sum_{\lambda=G+1}^{N} \varepsilon_{\mu,\lambda}\xi_{\lambda} \cong \sum_{\lambda=1}^{G} U_{\mu,\lambda}\xi_{\lambda}$$

微小量 $\varepsilon_{\mu,\nu}$ で拡張した自由度(ダミー自由度)によって正則性を保つことができ，拡張した自由度を含む項は微小量となり，近似誤差(解析誤差の一部)に含まれるので，実際の計算の必要はない．または，以下のように変数変換で顕にダミー自由度を落としても良い．この場合もダミー要素が小さいことは近似が妥当なために必要である．

(5.7)
$$\delta x_{\mu} = \sum_{\nu,g} \bar{U}_{\mu,\nu}E_{\nu,g}\xi_{g}$$

(5.8)
$$E_{\nu,g} = \begin{cases} \delta_{\mu,g} & 1 \le \mu \le G \\ 0 & G+1 \le \mu \le N \end{cases}$$

(5.9)
$$\begin{aligned} 2J_b &= \sum_{\mu,\nu} \delta x_{\mu} B^{-1}_{\mu,\nu} \delta x_{\nu} = \sum_{\mu,\nu,\lambda,g,\eta,l} \bar{U}_{\mu,\lambda}E_{\lambda,g}\xi_g (\bar{U}\bar{U}^T)^{-1}_{\mu,\nu} \bar{U}_{\nu,\eta}E_{\eta,l}\xi_l \\ &= \sum_{\lambda,g,\eta,l} \delta_{\lambda,\eta}E_{\lambda,g}\xi_g E_{\eta,l}\xi_l = \sum_{\lambda,g,l} E_{\lambda,g}\xi_g E_{\lambda,l}\xi_l = \sum_{1\le\lambda\le G,g,l} \delta_{\lambda,g}\xi_g\delta_{\lambda,l}\xi_l \\ &= \sum_{g} \xi_g\xi_g \end{aligned}$$

また，

(5.10)
$$\sum_{\nu} \bar{U}_{\mu,\nu}E_{\nu,g} = U_{\mu,g}$$

であるので，観測項も，もとの変数変換の場合と変わらない．

(b) 正則な BECM で根は非正則な場合 $G > N$

BECM は正則であるが，BECM の根は列の次元の方が行より大きく非正則である．しかし，この場合も (a) と同様に，以下に示すように BECM の近似精度の範囲での不定性の自由度を利用することで，BECM やその根に正則性を持たせて，式(2.3)の妥当性を維持することができる．はじめに式(2.6)の $U_{\mu,\nu}$ を次式のように拡張する．

(5.11)
$$\breve{U}_{l,g} = \begin{cases} U_{l,g} & 1 \le l \le N \\ \varepsilon_{l,g} & N+1 \le l \le G \end{cases}$$

微小量 $\varepsilon_{l,g}$ で拡張した自由度(ダミー自由度)によって正則性を保つことができ，拡張した自由度を含む項は微小量となり，近似誤差(解析誤差の一部)に含まれるので，実際の計算の必要はない．または，以下のように変数変換で顕にダミー自由度を落としても良い．

式(5.11)の拡張に対応する評価関数は次式のようになる．

(5.12)
$$2J = \sum_{g,l} \delta\breve{x}_g (\breve{U}\breve{U}^T)^{-1}_{g,l} \delta\breve{x}_l + \sum_{p,q} \left(d_p - \sum_{l} \breve{H}_{p,l}\delta\breve{x}_l \right) R^{-1}_{p,q} \left(d_q - \sum_{g} \breve{H}_{q,g}\delta\breve{x}_g \right)$$

ここで，以下の量を導入した．

拡張した解析インクリメント：

$$\delta\breve{x}_g = \begin{cases} \delta x_g & 1 \leq g \leq N \\ \sigma_g & N+1 \leq g \leq G \end{cases} \tag{5.13}$$

拡張した観測演算子：

$$\breve{H}_{p,l} = \sum_{\mu} H_{p,\mu} L_{\mu,l} \tag{5.14}$$

ここで，

$$L_{\mu,g} = \begin{cases} \delta_{\mu,g} & 1 \leq g \leq N \\ 0 & N+1 \leq g \leq G \end{cases} \tag{5.15}$$

である．変数変換は次式である．

$$\delta\breve{x}_g = \sum_{l} \breve{U}_{g,l}\xi_l \tag{5.16}$$

解析解は，次式である．

$$\begin{aligned} \delta\breve{\boldsymbol{x}} &= \breve{\boldsymbol{U}}\breve{\boldsymbol{U}}^T\breve{\boldsymbol{H}}^T(\breve{\boldsymbol{H}}\breve{\boldsymbol{U}}\breve{\boldsymbol{U}}^T\breve{\boldsymbol{H}}^T + \boldsymbol{R})^{-1}\boldsymbol{d} = \breve{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{H}^T(\boldsymbol{H}\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{H}^T + \boldsymbol{R})^{-1}\boldsymbol{d} \\ \delta\boldsymbol{x} &= \boldsymbol{L}\delta\breve{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{H}^T(\boldsymbol{H}\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{H}^T + \boldsymbol{R})^{-1}\boldsymbol{d} \end{aligned} \tag{5.17}$$

これは，$\boldsymbol{B}$ を $\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^T$ で近似したときの解析解と一致している．

以上から，BECM が正則，非正則いずれの場合も，BECM の近似精度の範囲で，$\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{I}$ とできることがわかる．

6.　まとめ

本論文では，変分法同化における BECM の定式化について，特に BECM の根による流れ依存性の導入に焦点をあててレビューした．まず，BECM の根の一般形（Ishibashi, 2015）についてレビューした（第 2 章）．次に，知られている 4 つの行列表現（Lorenc, 2003, Buehner, 2005, Liu et al., 2009, Bishop and Hodyss, 2009）についてレビューし（第 3 章），第 4 章ではこれらの行列表現を一般形から演繹し，4 つの表現の同一性を見た（第 4 章）．第 5 章では非正則な BECM や BECM の根の問題について，Ménétrier and Auligné（2015）及び Ishibashi（2015）をレビューした．

これらは最近 20 年程度の全球大気解析の一つの流れを示している．BECM の根の精緻化の研究は今後も大気解析精度の向上に必要である．大きなテーマは物理的なバランスを壊さない局所化の定式化であるが，これは難しい問題であり，計算機性能の向上によるアンサンブル数の拡充で問題を易しくしつつ，ガウス近似や接線型近似の緩和と合わせて取り組む必要があるだろう．

参　考　文　献

Barnes, S. (1964). A technique for maximizing details in numerical weather map analysis, *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, **3**, 396–409.

Bergthórsson, P. and Döös, B. (1955). Numerical weather map analysis, *Tellus*, **7**, 329–340.

Bishop, C. H. and Hodyss, D. (2009). Ensemble covariances adaptively localized with ECO-RAP, Part 2: A strategy for the atmosphere, *Tellus*, **61A**, 97–111.

Buehner, M. (2005). Ensemble-derived stationary and flow dependent background-error covariances: Evaluation in a quasi-operational NWP setting, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **131**, 1013–1043.

Buehner, M., Houtekamer, P. L., Charette, C., Mitchell, H. L. and He, B. (2010a). Intercomparison of variational data assimilation and the ensemble Kalman filter for global deterministic NWP. Part I: Description and single-observation experiments, *Monthly Weather Review*, **138**, 1550–1566.

Buehner, M., Houtekamer, P. L., Charette, C., Mitchell, H. L. and He, B. (2010b). Intercomparison of variational data assimilation and the ensemble Kalman filter for global deterministic NWP. Part II: One-month experiments with real observations, *Monthly Weather Review*, **138**, 1567–1586.

Courtier, P., Thépaut, J.-N. and Hollingsworth, A. (1994). A strategy for operational implementation of 4DVAR, using an incremental approach, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **120**, 1367–1387.

Cressman, G. (1959). An operational objective analysis system, *Monthly Weather Review*, **87**, 367–374.

Eliassen, A. (1954). Provisional report on calculation of spatial covariance and autocorrelation of the pressure field: Appendix to Report No. 5, Videnskaps-Akademiets Institutt for Vaer-Og Klimaforskning, Oslo, Norway (Available from Norwegian Meteorological Institute, P.O. Box 43, Blindern, N-0313 Oslo, Norway).

Evensen, G. (1994). Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using Monte Carlo methods to forecast error statistics, *Journal of Geophysical Research*, **99**, 10143–10162.

Gandin, L. S. (1963). *Objective Analysis of Meteorological Fields*, Gidrometeorologicheskoe IzdateIstvo, Lenigrad (English translation by Israeli Program for Scientific Translations Jerusalem, 1965).

Gaspari, G. and Cohn, S. (1999). Construction of correlation functions in two and three dimensions, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **125**, 723–757.

Gilchrist, B. and Cressman, G. (1954). An experiment in objective analysis, *Tellus*, **6**, 309–318.

Houtekamer, P. L. and Mitchell, H. L. (2001). A sequential ensemble Kalman filter for atmospheric data assimilation, *Monthly Weather Review*, **129**, 123–137.

Houtekamer, P. L. and Mitchell, H. L. (2005). Ensemble Kalman filtering, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **131**, 3269–3289.

Houtekamer, P. L., Mitchell, H. L., Pellerin, G., Buehner, M., Charron, M., Spacek, L. and Hansen, B. (2005). Atmospheric data assimilation with an ensemble Kalman filter: Results with real observations, *Monthly Weather Review*, **133**, 604–620.

Ishibashi, T. (2015). Tensor formulation of ensemble-based background error covariance matrix factorization, *Monthly Weather Review*, **143**, 4963–4973.

Kalman, R. E. (1960). A new approach to linear filtering and prediction problems, *Journal of Basic Engineering*, **82**(1), 35–45.

Kalman, R. and Bucy, R. (1961). New results in linear filtering and prediction theory, *Journal of Basic Engineering*, **83**(1), 95–108.

Kalnay, E. (2003). *Atmospheric Modeling, Data Assimilation and Predictability*, Cambridge University Press, Cambridge.

Klinker, E., Rabier, F., Kelly, G. and Mahfouf, J.-F. (2000). The ECMWF operational implementation of four-dimensional variational assimilation. III: Experimental results and diagnostics with operational configuration, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **126**, 1191–1215.

Lewis, J. M., Lakshmivarahan, S. and Dhall, S. (2006). *Dynamic Data Assimilation*, Cambridge University Press, Cambridge.

Liu, C., Xiao, Q. and Wang, B. (2009). An ensemble-based four dimensional variational data assimilation scheme. Part II: Observing system simulation experiments with Advanced Research WRF (ARW), *Monthly Weather Review*, **137**, 1687–1704.

Lorenc, A. C. (1986). Analysis methods for numerical weather prediction, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **112**, 1177–1194.

Lorenc, A. C. (2003). The potential of the ensemble Kalman filter for NWP—A comparison with 4DVAR, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **129**, 3183–3203.

Lorenz, E. N. (1963). Deterministic nonperiodic flow, *Journal of Atmospheric Sciences*, **20**, 130–141.

Mahfouf, J.-F. and Rabier, F. (2000). The ECMWF operational implementation of four-dimensional variational assimilation. II: Experimental results with improved physics, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **126**, 1171–1190.

Ménétrier, B. and Auligné, T. (2015). An overlooked issue of variational data assimilation, *Monthly Weather Review*, **143**, 3925–3930.

Panofsky, H. (1949). Objective weather map analysis, *Journal of Meteorology*, **6**, 386–392.

Parrish, D. F. and Derber, J. C. (1992). The National Meteorological Center's spectral statistical interpolation analysis system, *Monthly Weather Review*, **120**, 1747–1763.

Rabier, F., Järvinen, H., Klinker, E., Mahfouf, J.-F. and Simmons, A. (2000). The ECMWF operational implementation of four-dimensional variational assimilation. I: Experimental results with simplified physics, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **126**, 1143–1170.

Sasaki, Y. (1958). An objective analysis based on the variational method, *Journal of the Meteorological Society of Japan*, **36**, 77–88.

Sasaki, Y. (1969). Proposed inclusion of time evolution terms, observational and theoretical in numerical variational objective analysis, *Journal of the Meteorological Society of Japan*, **47**, 115–124.

Sasaki, Y. (1970). Some basic formalisms in numerical variational analysis, *Monthly Weather Review*, **98**, 875–883.

Thompson, P. (1969). Reduction of analysis error through constraints of dynamical consistency, *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, **8**, 738–742.

Wang, X., Snyder, C. and Hamill, T. M. (2007). On the theoretical equivalence of differently proposed ensemble–3DVAR hybrid analysis schemes, *Monthly Weather Review*, **135**, 222–227.

Proceedings of the Institute of Statistical Mathematics Vol. 70, No. 2, 181–193 (2022) 193

Background Error Covariance Matrix Factorization in Variational Data Assimilation for Atmospheric State Analysis

Toshiyuki Ishibashi

Meteorological Research Institute, Japan Meteorological Agency

Accurate global atmospheric state analysis is a difficult scientific problem due to its chaotic nature. Data assimilation enables highly accurate atmospheric state analysis by consistently integrating vast amounts of information on the atmospheric state using relationships between probability density functions (Bayes' theorem). Since the background error covariance matrix (BECM) of model prediction has complex spatiotemporal structures, accurate estimation of the BECM is a major research theme of atmospheric analysis. This paper is a review of the BECM formulation in the variational global atmospheric analysis, with a particular focus on the factorization of BECM, which are important in the variational data assimilation. In recent years, the improvement of atmospheric analysis accuracy has been remarkable by the highly accurate BECM factorization using ensemble forecasts and localization matrices, and there are four matrix representations as such BECM factorization.

These expressions have problems such as the relationships between them are not completely clarified. In recent years, the general form of the BECM factorization has been shown, and it has been shown that all of these matrix representations are deduced from the general form. It has also been shown that for the problem of non-regularity of factorized BECM, its regularity can be maintained by using the degrees of freedom under the approximation accuracy of the theory, and that the non-regularity of factorized BECM does not affect the solution in a specific minimization algorithm.

Key words: Data assimilation, variational method, atmospheric science, background error covariance matrix, ensemble, localization.