

# 変分法データ同化システムにおけるBFGS公式を利用したアンサンブルメンバー生成について

藤井 陽介<sup>1,2,3</sup>・吉田 拓馬<sup>2,1</sup>・久保 勇太郎<sup>2,1</sup>

(受付 2021 年 12 月 29 日；改訂 2022 年 10 月 18 日；採択 10 月 20 日)

## 要 旨

本論文では、解析変数の最適化に準ニュートン法を用いる変分法データ同化システムにおいて、最適化の計算過程で算出される評価関数の勾配などの情報を用いて、アンサンブル予報に必要な解析変数の擾乱を生成する手法について、提案する。提案手法は、それにより解析(事後)誤差分散共分散行列が近似できるように擾乱を生成するが、その擾乱はモデル演算子と観測演算子を合わせた演算子の上位の特異ベクトルを近似したものの線形結合にもなっている。本論文では、提案手法の実用例として、気象庁の大気海洋結合予測システムに含まれる全球海洋データ同化システムによって生成された海洋初期値の擾乱について例示し、さらに、その擾乱を大気海洋結合予測に用いた時の効果について検証した結果についても述べる。

キーワード：アンサンブル予報, BFGS 公式, 準ニュートン法, 変分法, データ同化.

## 1. はじめに

計算機の発達した現代では、ある時刻における事象の状態から、その将来変化を物理法則などの科学的知見に基づく計算で予測する数値モデルが、多くの科学分野で用いられる。例えば、気象予測では、気温や風の東西成分、南北成分などを予報変数とし、そのある時刻における値(初期値)からの時間発展を予測する大気数値モデルが用いられている。初期値が観測データなどにより十分な精度で与えられ、数値モデルの精度も十分に高い場合は、モデルシミュレーションを一回実施するだけで、信頼度の高い予測を行うことができる。このような手法は、気象予測の分野では決定論的予報と呼ばれ、一日から数日先の予報など、モデルの信頼度が高い比較的短期の予報で利用されている。

一方、計算機は有限の量のデータしか計算できないため、数値モデルは一般的に時空間方向に決められた間隔で格子点を配置し、その格子点上の予報変数の変動について計算する。この場合、配置された格子点では表現されない小スケールの事象については無視される。また、対象となる事象の予測を与えられた格子点配置で安定的にあるいは迅速に計算するため、影響の少ない事象についてはあえて除去してしまうことも頻繁に行われる。しかし、モデルで表現されないような小スケールの事象が、予測対象の将来変化に全く影響を与えないわけではない。例えば、Lorenz (1972) が提示した一匹の蝶のはためきが将来の竜巻の進路を変えうるとい

<sup>1</sup> 気象研究所：〒305-0052 茨城県つくば市長峰 1-1

<sup>2</sup> 気象庁 数値予報開発センター：〒305-0052 茨城県つくば市長峰 1-1

<sup>3</sup> 統計数理研究所：〒190-8562 東京都立川市緑町 10-3

いわゆるバタフライ効果はあまりにも有名である。そのようなモデルで無視されている事象の影響により、予測結果は必ず確率的な誤差を伴う。

また、われわれは初期値についても完全に知ることはできない。すべての格子点のある地点で観測を行うのは非常に困難である場合が多く、観測値自体にも必ず誤差が伴う。よって、予測を行う時、数値モデルに与える初期値にも必ず誤差が含まれている。たとえその誤差がわずかであっても、予測に対して決定的な影響を与える可能性があることは、Lorenz (1963)やその後のカオス理論により議論されている通りである。一方で、初期値の精度が高いほど、予測値の精度も高くなると考えられる。そのため、データ同化手法により過去の観測データの情報を数値モデルを用いて統合した解析値が、気象・海洋の予測では初期値として一般に用いられている。

さて、数値モデルを用いてある事象の将来変化を予測するとき、モデルに与える初期値や予測結果に必ず確率的な誤差が含まれることを考慮すると、その事象の未来変化は、ある時刻の状態により未来の起こりうる状態の確率密度分布が決定される、いわゆるマルコフ過程と見做すことができる。そして、マルコフ過程に従う事象の将来変化を予測するためには、特に、予測の確率的なばらつきが大きい場合には、一回モデルシミュレーションで予測値を一つ出すだけでなく、初期値の誤差や予測誤差を確率変数として足し込みつつシミュレーションを無数に行う、いわゆるモンテカルロ法により、予測される状態の確率密度分布を算出するのが理想的であり、気象分野ではこのような予報を、決定論的予報に対して確率論的予報と呼んでいる。しかし、気象や海洋の数値モデルは非常に計算コストが大きく、一事例の予測に対して多くて50~100回、少ない場合一桁の回数のシミュレーションしか行うことができない。これは、モデルの自由度、すなわち予報変数の数が $10^8$ 以上になることもざらであることを考えると、予測の確率密度分布を表すには全く不十分である。そのため、限られた回数のシミュレーションでできるだけ正確に未来の状態の確率密度分布を表現する必要がある、このような手法をアンサンブル予測と呼び、その予測を構成する個々のシミュレーションをアンサンブルメンバーと呼ぶ。

気象や海洋の分野において、アンサンブル予測を行うメリットは主に以下の通りである。まず、代表となる予測値として全てのアンサンブルメンバーの平均値(アンサンブル平均)を用いることにより、個々のメンバーの確率的な誤差が相殺して、単独のシミュレーションよりも高精度の予測値が得られることが挙げられる。次に、各メンバーの差異の大きさ(スプレッドと呼ばれる)から、その予測値の精度を推定することが可能である。また、確率密度分布がある程度予測されることにより、例えば気温が平年より高くなる確率など、確率の予報を行うことが可能となる。さらに近年では、確率は高くないがもし発生すると深刻な影響が生じる極端現象(例えば集中豪雨など)について、たとえ極僅かなメンバーによる予測であっても、実際に予測されることにより対策を講じることができるというメリットも強調されている。

我々は、初期値の誤差やモデルの予測誤差を陽に知ることはできない。このような状況の中、むやみやたらに乱数を誤差として足し込んでも、確率分布を予測することはできない。むしろ、予測の過程で成長(増大)する誤差が取り込まれず、予測精度と比べてスプレッドが小さくなってしまふことが多い。このような場合、極端現象も捉えることができず、予測としての価値も低下してしまう。よって、アンサンブル予報を有効に行うためには、どのようにアンサンブルメンバーを生成するかが重要である。

アンサンブル予測においてアンサンブルメンバーを生成する方法としては、まず、数値モデルは一般的にある時刻から少し先の時刻との間(時間ステップと呼ぶ)の状態変化の計算を繰り返し行うことで未来の予測を行うが、各時間ステップにおいてモデルの誤差を模した確率的なノイズを時間変化に加える方法が用いられる。代表的なのは、確率的物理過程強制法(SPPT);

Buizza and Palmer, 1999; Charron et al., 2010)である。気象・海洋の数値モデルでは、モデルで直接表現できない小スケールの現象に起因する予報変数の時間変化を、各格子点における予報変数の値から推定する手法が多く用いられているが、SPPTではそのようなスキームで計算された時間変化に対して時刻や場所により変動する乱数をかけることにより、確率的ノイズを与える。その他にも、予報変数の時間変化を格子点の値を用いて計算することにより生じる運動エネルギーの損失の大きさを定式化し、相当するノイズを与える Stochastic Kinetic Energy Backscatter (SKEB)法 (Shutts, 2005)などが利用されている。また、科学法則の近似の方法などの細部が異なる複数の数値モデルにより予測を行い、それらを一つのアンサンブル予測の個々のメンバーと見做すマルチモデルアンサンブル予測(例えば Palmer et al., 2004 など)も、確率的なモデル誤差を扱う方法と考えることができる。

一方、初期値にメンバー毎に異なる擾乱を加えることにより初期値の誤差の効果を扱う方法も広く用いられ、その手法は主に以下の三つに分類される。一つ目はブリーディングと呼ばれる手法(例えば, Toth and Kalnay, 1997 など)であり、複数のモデルシミュレーションを実行し、その差をスケーリングするという操作を繰り返すことにより、予測を開始する時点において最も成長している誤差を取り出す方法である。なお, Bishop and Toth (1999)や McLay et al. (2008)などで用いられているアンサンブル変換法は、スケーリングを行う時に擾乱が足される前の初期値として用いられる解析値の誤差分散・共分散の情報を加味するように、ブリーディングを改良した手法である。二つ目は、予測を開始する前後の時刻におけるモデルの予測計算を表したモデル演算子を線形化した行列について特異ベクトルを求めることにより、その時間でもっとも早く成長する物理モードを取り出す手法(例えば, Molteni et al., 1996 など)である。物理モードの成長速度が急激に変わらないと考えれば、そのモードが予報開始後も効率的にスプレッドを成長させると期待される。そして三つ目の方法は、初期値の確率密度分布に従い、アンサンブルメンバーを生成する方法である。例えば、アンサンブルカルマンフィルタでは、ある時刻における予報変数の値をモデルの予測結果と観測データから、それぞれの誤差の確率分布に関する情報を考慮し、ベイズの定理に基づき解析する (Houtekamer et al., 1996; Tsuyuki and Miyoshi, 2007などを参照)。そして、その解析値(事後推定値)の誤差の分散共分散行列を近似する擾乱を算出し解析値に加えたものを各アンサンブルメンバーの初期値として、その後の予測計算を行う。このような手法は、解析誤差の分散共分散行列を近似する擾乱の算出が可能な場合、アンサンブルカルマンフィルタを利用しないシステムでも適用可能である。その他、連続する異なる時刻から開始した予測をそれぞれ個々のメンバーとする Lagged Averaged Forecast (LAF)法 (Hoffman and Kalnay, 1983)も、初期値の誤差を扱う方法として広く用いられている。

マルコフ過程の理論から考えると、LAF法を含む上記の4つの手法の中では、初期値の確率密度分布に従いアンサンブルメンバーを生成する方法が、最も理論に忠実であるように思われる。しかし実際には、気象や海洋の予測では、一般的に限られた数のシミュレーションしか実行できないことを考慮する必要がある。解析誤差の分散・共分散の情報は正確ではない上に、限られたメンバー数では解析誤差の分布に従う擾乱を生成しても予測へのインパクトが大きな物理モードが十分に取込まれない可能性があり、すでに成長している擾乱、もしくは、これから成長する擾乱をメンバーとして取り込んだ方が、より効率的に予測を行える可能性もある。

さて、本論文では変分法、特に四次元変分法(4DVAR)を用いたデータ同化システムにおいて、アンサンブル予測のために解析値に加える擾乱を効率的に生成する方法について提案する。4DVARとは、初期値などモデルへの入力値を解析変数とし、その事前推定値(背景値)とある期間内の観測データおよびそれらの誤差分布に関する情報から正負を逆転させた尤度関数に準ずる評価関数を定義し、それを最小化する最尤値を求め解析値とする手法である (Sasaki,

1970; Lorenc, 1988; Tsuyuki and Miyoshi, 2007; 藤井, 2009などを参照). 解析値を求めるためには, モデルシミュレーションとアジョイントモデルの計算を数10回繰り返す必要があり, 非常に多くの計算機資源を必要とする. 4DVARにおいて, 背景値や観測値の誤差がガウス分布に従い, 線形のモデルが用いられている場合, 解析値もガウス分布に従い, その誤差分散・共分散は評価関数のヘッセ行列の逆行列, すなわち逆ヘッセ行列により表され, その計算手法もいくつか提案されている(例えば, Fisher and Courtier, 1995; Le Dimet et al., 2002; Bousserez et al., 2015; Ito et al., 2016; Niwa and Fujii, 2020; 丹羽・藤井, 2022など). しかし, 4DVARを用いた大規模なデータ同化システムでは, 解析誤差の分散・共分散については, 直接計算しないのが一般的である.

4DVARでは, 解析値を求めるために多くの計算機資源を使うため, アンサンブルメンバー生成のために計算機資源をほとんど割くことができない場合が多い. しかし, Fujii and Kamachi (2003)及びFujii (2005)で提案された背景誤差分散共分散行列による前処理を含む準ニュートン法POpULarを評価関数の最小化に利用した場合, その過程で計算された様々な解析変数の値に対する評価関数の勾配に関する情報を用いて, 解析誤差分散共分散行列を計算することが可能である(Niwa and Fujii, 2020; 丹羽・藤井, 2022). そこで, 本論文では, POpULarによって得られた情報を用いて, 新たなモデルシミュレーションやアジョイントモデルの計算を行うこと無しに, 解析誤差の分散・共分散を近似する擾乱を生成する方法について検討する.

以後, 2節では, まず, 本論文の前提となる変分法の問題設定と準ニュートン法POpULarについて記述した後に, アンサンブルメンバー生成のための擾乱の生成方法を導出し, その特異ベクトルとの関係についても議論する. 3節では, 提案手法の実用例として, 気象庁の大気海洋結合予測システムにおいて, 提案手法を用いて生成した海洋初期値の擾乱の例を示し, さらに大気海洋結合予測において, 海洋初期値の擾乱を用いた効果を検証した結果について述べる. 最後に, 4節において本論文をまとめると共に, 今後の課題などについて議論する.

## 2. 理論的背景と手法の提案

### 2.1 変分法の設定

本論文では, ある解析変数を以下の評価関数 $\mathcal{J}(\boldsymbol{x})$ が最小値をとるように最適化することを考える.

$$(2.1) \quad \mathcal{J}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{B}^{-1} \boldsymbol{x} + \mathcal{J}_{obs}(\boldsymbol{x})$$

ここで, 右上付き文字 $T$ は行列・ベクトルの転置を表し,  $\mathcal{J}(\boldsymbol{x})$ はスカラー関数である.  $\boldsymbol{x}$ は, 解析変数の数 $N$ の次元を持つ列ベクトルであり, その背景値 $\boldsymbol{x}_b$ に対する修正量, すなわち, インクリメントを表す.  $\boldsymbol{B}$ は背景(事前推定)値 $\boldsymbol{x}_b$ の誤差に関する分散共分散行列であり,  $N \times N$ の次元をもつ. また,  $\mathcal{J}_{obs}(\boldsymbol{x})$ は評価関数の観測値と推定値のミスフィット(データミスフィット)に関する部分を示し, 以下の様に表される.

$$(2.2) \quad \mathcal{J}_{obs}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2} \{ \mathcal{M}(\boldsymbol{x}_b + \boldsymbol{x}) - \boldsymbol{y}_{obs} \}^T \boldsymbol{R}^{-1} \{ \mathcal{M}(\boldsymbol{x}_b + \boldsymbol{x}) - \boldsymbol{y}_{obs} \}$$

ここで,  $\boldsymbol{y}_{obs}$ は同化される観測値を要素とする列ベクトルであり, 観測値の数 $N_{obs}$ の次元を持つ.  $\mathcal{M}$ は, 解析変数を観測値 $\boldsymbol{y}_{obs}$ が観測された地点における同等の物理変数に変換する演算子で, 一般に非線形性を持つ.  $\boldsymbol{R}$ は, 観測値 $\boldsymbol{y}_{obs}$ の誤差に関する分散共分散行列であり,  $N_{obs} \times N_{obs}$ の次元をもつ.

式(2.1)は, 四次元変分法で広く用いられる評価関数であり, 以下の様に求められる. まず, インクリメント $\boldsymbol{x}$ の背景的な確率密度分布 $p(\boldsymbol{x})$ と $\boldsymbol{x}$ が与えられた時の観測値確率密度分布

$p(\mathbf{y}_{obs}|\mathbf{x})$  が以下の様な正規分布で与えられると仮定する.

$$(2.3) \quad p(\mathbf{x}) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^N |\mathbf{B}|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{B}^{-1} \mathbf{x}\right)$$

$$(2.4) \quad p(\mathbf{y}_{obs}|\mathbf{x}) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^{N_{obs}} |\mathbf{R}|^{1/2}} \exp\{-\mathcal{J}_{obs}(\mathbf{x})\}$$

ここで,  $|\mathbf{B}|$ ,  $|\mathbf{R}|$  は, それぞれ  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{R}$  の行列式を表す. この時  $\mathbf{y}_{obs}$  が与えられたときの  $\mathbf{x}$  の尤度関数  $p(\mathbf{x}|\mathbf{y}_{obs})$  は, ベイズの定理から,  $p(\mathbf{x}|\mathbf{y}_{obs}) = p(\mathbf{x})p(\mathbf{y}_{obs}|\mathbf{x})/p(\mathbf{y}_{obs})$  と表される. この尤度関数の対数を取り符号を反転させ, 定数項を取り除いたものが式(2.1)の評価関数である. よって, 評価関数の値を最小にする  $\mathbf{x}$  は,  $\mathbf{x}$  の最尤値である. なお四次元変分法は, より一般的には, 上記の正規分布の仮定をおかなくても尤度関数が与えられれば, その対数を取り符号を反転させたものを評価関数とすることによって, 実行が可能である.

本論文では, 評価関数  $\mathcal{J}(\mathbf{x})$  の値ができるだけ小さくなるようなインクリメント  $\mathbf{x}_e$  を求め (すなわち, できるだけ  $\mathbf{x}$  の最尤値に近い値を  $\mathbf{x}_e$  として), それを背景値  $\mathbf{x}_b$  に加えたものを最適な解析変数の推定値, すなわち, 解析値とする. 気象や海洋に関するデータ同化の分野では,  $\mathbf{x}_e$  は解析インクリメントと呼ばれている. 数値予報で用いられる 4DVAR データ同化システムでは, 一般的に最適化期間の初期時刻におけるモデルの予報変数の格子点値を解析変数とする. この時インクリメントは初期時刻におけるモデルの予報変数の解析による修正量となり, それを最適化したものが解析インクリメントである. また, 4DVAR では,  $\mathcal{M}$  の中に, 初期時刻におけるモデルの予報変数からその観測時刻での値を求めるモデルの推進演算子と, モデルの予報変数から観測される物理変数への変換および格子点値から観測地点での値への内挿を行う観測演算子が含まれる.

さて, 本論文では簡単のため  $\mathcal{M}$  の接線形演算子  $\mathbf{M}$  を用いて,  $\mathcal{M}(\mathbf{x}_b + \mathbf{x}) \approx \mathcal{M}(\mathbf{x}_b) + \mathbf{M}\mathbf{x}$  と近似する. この場合, 式(2.2)は以下の様に表される.

$$(2.5) \quad \mathcal{J}_{obs}(\mathbf{x}) \approx \frac{1}{2} (\mathbf{M}\mathbf{x} - \Delta\mathbf{y}_{obs})^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{M}\mathbf{x} - \Delta\mathbf{y}_{obs})$$

ここで  $\Delta\mathbf{y}_{obs} = \mathbf{y}_{obs} - \mathcal{M}(\mathbf{x}_b)$  である. 本論文では簡単のため, (2.5) が等号で成り立つものとする. なお, モデルや観測演算子が非線形を持ち, (2.5) が等号で成り立たない場合でも, 以下の議論は近似的に成り立つ. また, 式(2.1)の右辺に加えて例えば物理バランスなどに基づく追加的な拘束条件が導入されることもあるが, 以下の議論では簡単のために無視する. なお追加的拘束条件を導入した場合でも, それを  $\mathcal{J}_{obs}$  に含めることにより, 2.2 小節で紹介する降下法 POpULar や 2.3 小節で紹介するアンサンブルメンバーの生成方法は導出可能である. ただし, ヘッセ行列の形やその固有ベクトルの意味合いには影響を与えるので注意が必要である.

## 2.2 準ニュートン法 POpULar

Fujii and Kamachi (2003) および Fujii (2005) で開発された前処理を用いた準ニュートン法に基づく降下法 POpULar では, 評価関数をできるだけ小さくするインクリメント, すなわち解析インクリメント  $\mathbf{x}_e$  を, 以下のように逐次的に求める. まず, 以下で説明する逐次操作を  $k$  回繰り返した後, 求まる  $\mathbf{x}$  の  $k$  番目の推定値を  $\mathbf{x}_k$ , その時の評価関数の勾配を  $\mathbf{g}_k$ , 次の推定値  $\mathbf{x}_{k+1}$  を探す方向を示すベクトル(探索方向)を  $\mathbf{d}_k$  とし,  $\mathbf{x} = \mathbf{x}_k$  の時の評価関数の値や勾配  $\mathbf{g}_k$ , 探索方向  $\mathbf{d}_k$  が  $\mathbf{B}^{-1}$  の計算を行うこと無く逐次的に計算できるように,

$$(2.6) \quad \mathbf{h}_k = \mathbf{B}\mathbf{g}_k$$

$$(2.7) \quad \mathbf{K}_k = \frac{1}{2} \mathbf{x}_k^T \mathbf{B}^{-1} \mathbf{x}_k$$

$$(2.8) \quad \mathbf{c}_k = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{x}_k$$

$$(2.9) \quad \mathbf{e}_k = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{d}_k$$

と定義しておく. なお  $K_k$  と  $\mathbf{c}_k$  は,  $\mathbf{x} = \mathbf{x}_k$  の時の評価関数の第一項の値とその勾配である. 次に,  $\mathbf{x}$  の最初の推定値  $\mathbf{x}_0$  と探索方向  $\mathbf{d}_0$  を以下の様におく.

$$(2.10) \quad \mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$$

$$(2.11) \quad \mathbf{d}_0 = -\mathbf{h}_0 = -\mathbf{B}\mathbf{g}_0$$

この時,

$$(2.12) \quad K_0 = 0$$

$$(2.13) \quad \mathbf{c}_0 = \mathbf{0}$$

$$(2.14) \quad \mathbf{g}_0 = \mathbf{g}_{obs}(\mathbf{0})$$

$$(2.15) \quad \mathbf{e}_0 = -\mathbf{g}_0$$

となる. ここで,  $\mathbf{g}_{obs}(\mathbf{x})$  は,  $\mathcal{J}_{obs}(\mathbf{x})$  の  $\mathbf{x}$  についての勾配である. 次に,  $k-1$  番目の推定値  $\mathbf{x}_{k-1}$  から, 次の推定値  $\mathbf{x}_k$  を以下の式で求める.

$$(2.16) \quad \mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{k-1} + \alpha_k \mathbf{d}_{k-1}$$

ここで  $\alpha_k$  には,  $\mathcal{J}(\mathbf{x}_{k-1} + \alpha \mathbf{d}_{k-1})$  をできるだけ小さくする  $\alpha$  を推定して与える. なお,

$$(2.17) \quad \begin{aligned} & \frac{1}{2}(\mathbf{x}_{k-1} + \alpha \mathbf{d}_{k-1})^T \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}_{k-1} + \alpha \mathbf{d}_{k-1}) \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{x}_{k-1}^T \mathbf{B}^{-1} \mathbf{x}_{k-1} + \alpha \mathbf{d}_{k-1}^T \mathbf{B}^{-1} \mathbf{x}_{k-1} + \frac{\alpha^2}{2} \mathbf{d}_{k-1}^T \mathbf{B}^{-1} \mathbf{e}_{k-1} \\ &= K_{k-1} + \alpha \mathbf{d}_{k-1}^T \{ \mathbf{c}_{k-1} + (\alpha/2) \mathbf{e}_{k-1} \} \end{aligned}$$

であるので,

$$(2.18) \quad \mathcal{J}(\mathbf{x}_{k-1} + \alpha \mathbf{d}_{k-1}) = K_{k-1} + \alpha \mathbf{d}_{k-1}^T \{ \mathbf{c}_{k-1} + (\alpha/2) \mathbf{e}_{k-1} \} + \mathcal{J}_{obs}(\mathbf{x}_{k-1} + \alpha \mathbf{d}_{k-1})$$

と書き直すことができ,  $\mathbf{B}^{-1}$  とベクトルの積を計算する必要はなくなる. さて, 評価関数が, 式(2.1)と式(2.5)で定義される場合, 式(2.18)を最小化する  $\alpha$  は  $\alpha = -\mathbf{d}_{k-1}^T \mathbf{g}_{k-1} / \mathbf{d}_{k-1}^T (\mathbf{e}_{k-1} + \mathbf{M}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{d}_{k-1})$  と計算でき,  $\alpha_k$  として用いることが可能である. ただし, 非線形性を含む一般の評価関数に対しては, 適当な  $\alpha_k$  を求めるために直線探索法が用いられる (Fujii, 2005; Fletcher, 2013 などを参照).

また,  $K_k$ ,  $\mathbf{c}_k$ ,  $\mathbf{g}_k$ ,  $\mathbf{h}_k$  を以下の式で更新する.

$$(2.19) \quad K_k = K_{k-1} + \alpha_k \mathbf{d}_{k-1}^T \{ \mathbf{c}_{k-1} + (\alpha_k/2) \mathbf{e}_{k-1} \}$$

$$(2.20) \quad \mathbf{c}_k = \mathbf{c}_{k-1} + \alpha_k \mathbf{e}_{k-1}$$

$$(2.21) \quad \mathbf{g}_k = \mathbf{c}_k + \mathbf{g}_{obs}(\mathbf{x}_k)$$

$$(2.22) \quad \mathbf{h}_k = \mathbf{B}\mathbf{g}_k$$

さらに,  $\mathbf{d}_k$  については

$$(2.23) \quad \mathbf{d}_k = \mathbf{H}_{k,k} \mathbf{g}_k$$

とする. ここで,  $\mathbf{H}_{k,k}$  は逆ヘッセ行列の近似行列であり, 以下の Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno(BFGS)公式 (Liu and Nocedal, 1989; Nocedal, 1980) により逐次的に計算する.

$$(2.24) \quad \mathbf{H}_{k,i} = \mathbf{V}_i^T \mathbf{H}_{k,i-1} \mathbf{V}_i + \rho_i \mathbf{p}_i \mathbf{p}_i^T$$

ここで,  $\mathbf{p}_i = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{i-1} = \alpha_i \mathbf{d}_{i-1}$ ,  $\mathbf{y}_i = \mathbf{g}_i - \mathbf{g}_{i-1}$ ,  $\rho_i = 1/\mathbf{y}_i^T \mathbf{p}_i$ ,  $\mathbf{V}_i = \mathbf{I} - \rho_i \mathbf{y}_i \mathbf{p}_i^T$ ,  $\mathbf{I}$  は恒等行列である. 式(2.24)の計算では, 例えば  $k'$  番目以降の  $\mathbf{p}_i$  および  $\mathbf{y}_i$  が保存されている場合,  $\mathbf{H}_{k,k'-1}$  を適当に与えて,  $i = k'$  から  $i = k$  までの計算を行うが, 本論文では簡単のため, それまでに計算された  $\mathbf{p}_i$  と  $\mathbf{y}_i$  が全て保存されているものとし,  $\mathbf{H}_{k,0}$  を与えて  $i = 1$  から  $i = k$  までの計算を行うものとする. また, 通常の準ニュートン法では  $\mathbf{H}_{k,0} = \gamma_k \mathbf{I}$  と与えるが, POpULar では

$$(2.25) \quad \mathbf{H}_{k,0} = \gamma_k \mathbf{B}$$

で与える. ここで,  $\gamma_k = \mathbf{y}_k^T \mathbf{p}_k / \mathbf{y}_k^T \mathbf{z}_k$  である. また,  $\mathbf{z}_i = \mathbf{h}_i - \mathbf{h}_{i-1}$  であり,  $\mathbf{p}_i, \mathbf{y}_i$  同様, 計算後にすべて保存しておく. 式(2.25)の設定は,  $\mathbf{x}' = \mathbf{B}^{-1/2} \mathbf{x}$  と変数変換(前処理)し,  $\mathbf{x}'$  について通常の準ニュートン法を適用した場合の計算と等価であるが, 逆ハッセ行列をよりよく近似する行列をその初期推定として与えていると見なすこともできる.

さて, 式(2.24)を含む式(2.23)の計算は,  $\mathbf{e}_k = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{d}_k$  の更新と合わせて, 下記のような逐次計算で置き換えることが可能である.

$$(2.26) \quad \mathbf{s}_k = -\mathbf{h}_k$$

$$(2.27) \quad \mathbf{t}_k = -\mathbf{g}_k$$

$$(2.28) \quad \mathbf{s}_{i-1} = \mathbf{s}_i - \rho_i \mathbf{t}_i^T \mathbf{p}_i \mathbf{z}_i \quad (i = k, k-1, \dots, 1)$$

$$(2.29) \quad \mathbf{t}_{i-1} = \mathbf{t}_i - \rho_i \mathbf{t}_i^T \mathbf{p}_i \mathbf{y}_i \quad (i = k, k-1, \dots, 1)$$

$$(2.30) \quad \mathbf{s}'_0 = \gamma_k \mathbf{s}_0$$

$$(2.31) \quad \mathbf{t}'_0 = \gamma_k \mathbf{t}_0$$

$$(2.32) \quad \mathbf{s}'_i = \mathbf{s}'_{i-1} + \rho_i (\mathbf{t}_i^T \mathbf{p}_i - \mathbf{s}'_{i-1}^T \mathbf{y}_i) \mathbf{p}_i \quad (i = 1, 2, \dots, k)$$

$$(2.33) \quad \mathbf{t}'_i = \mathbf{t}'_{i-1} + \rho_i (\mathbf{t}_i^T \mathbf{p}_i - \mathbf{s}'_{i-1}^T \mathbf{y}_i) \mathbf{q}_i \quad (i = 1, 2, \dots, k)$$

$$(2.34) \quad \mathbf{d}_k = \mathbf{s}'_k$$

$$(2.35) \quad \mathbf{e}_k = \mathbf{t}'_k$$

ここで,  $\mathbf{q}_i = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{p}_i = \alpha_i \mathbf{e}_{i-1}$  であり,  $\mathbf{q}_i$  についても,  $\mathbf{p}_i, \mathbf{y}_i, \mathbf{z}_i$  同様, 計算後に保存しておく.

以上をまとめると, POpULar では, 式(2.10)から式(2.15)の初期設定, および, 式(2.16), 式(2.19)から式(2.22), 及び, 式(2.26)から式(2.35)の逐次計算を繰り返すことにより評価関数の値をできるだけ小さくする  $\mathbf{x}$  を求めている. 上記の計算では,  $\mathbf{B}^{-1}$  に関する計算が回避されている.  $\mathbf{B}$  は,  $N \times N$  の次元をもつ ( $N$  は解析変数の数)が, データ同化で用いられる変分法では, 各格子点における数値モデルの予報変数を解析することが一般的であり,  $N$  は大抵  $10^6$  を軽く超える. そのため,  $\mathbf{B}^{-1}$  に関する計算は一般には困難である. そのため,  $\mathbf{B}^{-1}$  に関する計算を回避出来ることは, POpULar の大きな長所となっている. なお, 現在, 気象庁・気象研究所で用いられている POpULar については更なる改良が加えられているが, 本論文ではその詳細の記述は省略する. また, 評価関数の勾配が線形である場合の POpULar の導出は丹羽・藤井 (2022) にも記述されているので, そちらも参考にされたい.

### 2.3 解析誤差の表現に基づくアンサンブルメンバーの作成

変分法の解析値に適当な擾乱  $\Delta \mathbf{x}_i$  を加え, アンサンブル予測を行うための各アンサンブルメンバーの初期値とすることを考える. この場合, 与える擾乱の確率分布が解析値, すなわち, 事後推定値の誤差の確率分布をよく近似することが望ましい. そこで, 擾乱  $\Delta \mathbf{x}_i$  の分散共分散

行列が解析値の誤差分散共分散行列 ( $\mathbf{E}$  とおく) をよく近似する, すなわち,

$$(2.36) \quad \frac{1}{L_f} \sum_{l=1}^L \Delta \mathbf{x}_l \Delta \mathbf{x}_l^T \approx \mathbf{E}$$

が成り立つように擾乱を生成することを目指す. ここで,  $\Delta \mathbf{x}_l$  は  $N$  次元の列ベクトル,  $\mathbf{E}$  は  $N \times N$  次元の行列であり,  $L$  はアンサンブルメンバー数である.  $L_f$  は各アンサンブルメンバーを標本と考えた場合の自由度であり, 例えば  $\Delta \mathbf{x}_l$  の平均が 0 であるというような拘束条件がある場合,  $L_f = L - 1$  となる. 擾乱変分法では, 解析値の誤差分散共分散行列は逆ヘッセ行列で近似され, 特にモデルや観測演算子に非線形性がなく評価関数が 2 次関数で表される場合は逆ヘッセ行列と一致する (例えば, 藤井, 2009). よって,  $\mathbf{E}$  は,  $\mathcal{J}(\mathbf{x})$  のヘッセ行列

$$(2.37) \quad \mathbf{A} = \mathbf{B}^{-1} + \mathbf{M}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{M}$$

を用いて,  $\mathbf{E} \approx \mathbf{A}^{-1}$  と表される.

2.2 小節で述べた通り, POpULar では解析値を推定する過程で,  $\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i, \mathbf{y}_i$  など, その途中の推定値やその時の勾配に関する情報を保存している. そこで本論文では, それらの情報を用いて, アンサンブルメンバー作成のための擾乱  $\Delta \mathbf{x}_l$  を決定する方法を考える.

まず, 評価関数  $\mathcal{J}(\mathbf{x})$  は, ヘッセ行列  $\mathbf{A}$  とあるベクトル定数  $\mathbf{b}$ , あるスカラー定数  $c$  を用いて,

$$(2.38) \quad \mathcal{J}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c$$

と表す. この時, その勾配は  $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}$  と表されるので,  $\mathbf{y}_i = \mathbf{A} \mathbf{p}_i$  が成り立つ. さらに  $\mathbf{P} = (\mathbf{p}_1 \ \mathbf{p}_2 \ \cdots \ \mathbf{p}_I)$ ,  $\mathbf{Y} = (\mathbf{y}_1 \ \mathbf{y}_2 \ \cdots \ \mathbf{y}_I)$  とおくと,  $\mathbf{Y} = \mathbf{A} \mathbf{P}$  が成り立つ. ここで,  $I$  は POpULar の実行過程で保存した  $\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i$  などのベクトルの本数で, その繰り返し計算の回数と等しい. なお,  $c$  と  $\mathbf{b}$  は, それぞれ  $\mathbf{x} = \mathbf{0}$  の時の評価関数の値と勾配であるが, 以後, 必要としない.

つぎに,  $\mathbf{Q} = (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_I)$  と定義し, グラム・シュミットの直交化法により,  $\mathbf{P}$  と  $\mathbf{Q}$  を  $\check{\mathbf{P}}^T \check{\mathbf{Q}} = \mathbf{I}$  を満たす  $\check{\mathbf{P}} = (\check{\mathbf{p}}_1, \check{\mathbf{p}}_2, \dots, \check{\mathbf{p}}_I)$  と  $\check{\mathbf{Q}} = (\check{\mathbf{q}}_1, \check{\mathbf{q}}_2, \dots, \check{\mathbf{q}}_I)$  に変換する. 具体的には以下のような操作を行う.

$$(2.39) \quad \check{\mathbf{p}}_1 = \mathbf{p}_1 / \mathbf{p}_1^T \mathbf{q}_1, \quad \check{\mathbf{q}}_1 = \mathbf{q}_1 / \mathbf{p}_1^T \mathbf{q}_1$$

$$(2.40) \quad \check{\mathbf{p}}_i = \mathbf{p}_i - \sum_{j=1}^{i-1} \mathbf{p}_i^T \check{\mathbf{q}}_j \check{\mathbf{p}}_j, \quad \check{\mathbf{q}}_i = \mathbf{q}_i - \sum_{j=1}^{i-1} \mathbf{q}_i^T \check{\mathbf{p}}_j \check{\mathbf{q}}_j,$$

$$(2.41) \quad \check{\mathbf{p}}_i = \check{\mathbf{p}}_i / \check{\mathbf{p}}_i^T \check{\mathbf{q}}_i, \quad \check{\mathbf{q}}_i = \check{\mathbf{q}}_i / \check{\mathbf{p}}_i^T \check{\mathbf{q}}_i$$

ここで, (2.40) と (2.41) の計算は,  $i = 2, 3, \dots, I$  について繰り返す. さて, 付録 A で示す通り, 上記の  $\mathbf{p}_i$  と  $\mathbf{q}_i$  に対する変換は共通の行列で表すことができ, その行列を  $\mathbf{G}$  とすると,  $\check{\mathbf{P}} = \mathbf{P} \mathbf{G}$ ,  $\check{\mathbf{Q}} = \mathbf{Q} \mathbf{G}$  となる. また,  $\check{\mathbf{Y}} = \mathbf{Y} \mathbf{G}$  とする. この時,  $\check{\mathbf{P}}^T \check{\mathbf{Y}} = \check{\mathbf{P}}^T \mathbf{A} \check{\mathbf{P}}$  なので,  $\check{\mathbf{P}}^T \check{\mathbf{Y}}$  は対称行列である. そこで,  $\check{\mathbf{P}}^T \check{\mathbf{Y}}$  を固有値分解して,  $\check{\mathbf{P}}^T \check{\mathbf{Y}} = \mathbf{U} \mathbf{\Lambda}^2 \mathbf{U}^T$  と表す. ここで  $\mathbf{U}$  は互いに直交する固有ベクトルを並べた  $I \times I$  の行列であり,  $\mathbf{\Lambda}$  は固有値の平方根  $\lambda_i$  を対角成分とする  $I \times I$  の対角行列である. さらに,  $\check{\mathbf{P}} = \check{\mathbf{P}} \mathbf{U} \mathbf{\Lambda}^{-1}$ ,  $\check{\mathbf{Y}} = \check{\mathbf{Y}} \mathbf{U} \mathbf{\Lambda}^{-1}$  と変換する. この時,

$$(2.42) \quad \check{\mathbf{Y}} = \mathbf{A} \mathbf{P} \mathbf{G} \mathbf{U} \mathbf{\Lambda}^{-1} = \mathbf{A} \check{\mathbf{P}}$$

であり, また

$$(2.43) \quad \check{\mathbf{P}}^T \check{\mathbf{Y}} = \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{U}^T \check{\mathbf{P}}^T \check{\mathbf{Y}} \mathbf{U} \mathbf{\Lambda}^{-1} = \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{U}^T \mathbf{U} \mathbf{\Lambda}^2 \mathbf{U}^T \mathbf{U} \mathbf{\Lambda}^{-1} = \mathbf{I}$$

が成り立つ.



さて、ここで  $\tilde{\mathbf{P}}$  を構成する列ベクトル  $\tilde{\mathbf{p}}_i$  と、 $\tilde{\mathbf{Y}}$  を構成する列ベクトル  $\tilde{\mathbf{y}}_i$  を用いて BFGS 公式により、逆ヘッセ行列を近似することを考える。BFGS 公式は一般には以下の様に表される。

$$(2.44) \quad \mathbf{H}_i = \mathbf{V}_i^T \mathbf{H}_{i-1} \mathbf{V}_i + \rho_i \tilde{\mathbf{p}}_i \tilde{\mathbf{p}}_i^T$$

ここで、 $\rho_i = 1/\tilde{\mathbf{y}}_i^T \tilde{\mathbf{p}}_i$ 、 $\mathbf{V}_i = \mathbf{I} - \rho_i \tilde{\mathbf{y}}_i \tilde{\mathbf{p}}_i^T$  である。また、 $\tilde{\mathbf{p}}_i$  と  $\tilde{\mathbf{y}}_i$  については、 $\tilde{\mathbf{y}}_i = \mathbf{A} \tilde{\mathbf{p}}_i$  が成り立てば、どのようなベクトルでも良い。つまり、 $\mathbf{H}_0$  を適当に与え、 $\tilde{\mathbf{y}}_i = \mathbf{A} \tilde{\mathbf{p}}_i$  が成り立つ適当な  $\tilde{\mathbf{p}}_i$  と  $\tilde{\mathbf{y}}_i$  の組を用いて式(2.44)の更新を繰り返すことにより、逆ヘッセ行列の近似行列を計算することが可能である。例えば、(2.24)では、 $\mathbf{y}_i = \mathbf{A} \mathbf{p}_i$  が成り立つので、 $\tilde{\mathbf{p}}_i, \tilde{\mathbf{y}}_i$  として、 $\mathbf{p}, \mathbf{y}$  を用いている。しかし、 $\tilde{\mathbf{p}}_i$  が  $\mathbf{A}$  について共役である方が、逆ヘッセ行列をより効率的に近似することができる (Nocedal and Wright, 2006; Niwa and Fujii, 2020; 丹羽・藤井, 2022)。そこで、 $\tilde{\mathbf{p}}_i, \tilde{\mathbf{y}}_i$  についても式(2.42)から  $\tilde{\mathbf{y}}_i = \mathbf{A} \tilde{\mathbf{p}}_i$  が成り立ち、 $\tilde{\mathbf{p}}_i$  は式(2.43)により共役でもあるので、ここでは式(2.44)において  $\tilde{\mathbf{p}}_i, \tilde{\mathbf{y}}_i$  を  $\tilde{\mathbf{p}}_i, \tilde{\mathbf{y}}_i$  と置き換える。また、 $\mathbf{H}_0 = \mathbf{B}$  と与える。この時、式(2.43)より、 $\rho_i = 1$  となり、また  $i < j$  の時、 $\tilde{\mathbf{y}}_j^T \tilde{\mathbf{p}}_i = \mathbf{0}$  なので  $\mathbf{V}_j^T \tilde{\mathbf{p}}_i = \tilde{\mathbf{p}}_i$  となり、最終的に以下の式が得られる。

$$(2.45) \quad \mathbf{H}_I = \mathbf{V}^T \mathbf{B} \mathbf{V} + \sum_{i=1}^I \tilde{\mathbf{p}}_i \tilde{\mathbf{p}}_i^T$$

ここで、 $\mathbf{V} = \mathbf{V}_1 \mathbf{V}_2 \cdots \mathbf{V}_I$  である。

さて、背景誤差分散共分散行列は、しばしば適当な行列  $\Delta \mathbf{X}^b = (\Delta \mathbf{x}_1^b, \Delta \mathbf{x}_2^b, \dots, \Delta \mathbf{x}_{I_b}^b)$  (ここで  $I_b$  は、 $\Delta \mathbf{X}^b$  の列の数)を用いて、

$$(2.46) \quad \mathbf{B} = \Delta \mathbf{X}^b (\Delta \mathbf{X}^b)^T$$

と定義される。例えば、アンサンブルカルマンフィルタなど  $I_b$  個の背景誤差のサンプル  $\mathbf{x}_i^b$  から背景誤差分散共分散行列を定義する場合、それは以下の式で与えられる。

$$(2.47) \quad \mathbf{B} = \frac{1}{I_b - 1} \sum_{i=1}^{I_b} (\mathbf{x}_i^b - \bar{\mathbf{x}}^b)^T (\mathbf{x}_i^b - \bar{\mathbf{x}}^b)$$

ここで  $\mathbf{x}_i^b$  は各サンプル、 $\bar{\mathbf{x}}^b$  は、サンプル平均を示す。この時、 $\Delta \mathbf{x}_i^b = (\sqrt{I_b - 1})^{-1} (\mathbf{x}_i^b - \bar{\mathbf{x}}^b)$  と定義すると、式(2.46)が成り立つ。

このような場合、 $I + I_b$  の  $N$  次元ベクトル  $\mathbf{p}_i^{ex}$  を、 $i = 1, 2, \dots, I$  に対して  $\mathbf{p}_i^{ex} = \tilde{\mathbf{p}}_i$ 、 $(i = I + 1, I + 2, \dots, I + I_b)$  に対して  $\mathbf{p}_i^{ex} = \mathbf{V}^T \Delta \mathbf{x}_{i-I}^b$  と定義し、平均 0、分散 1 で互いに独立な  $I + I_b$  個の確率変数から  $L$  個ずつ取り出したサンプル  $\theta_{i,l}$  ( $i = 1, 2, \dots, I + I_b, l = 1, 2, \dots, L$ ) を用いて、

$$(2.48) \quad \Delta \mathbf{x}_l = \sum_{i=1}^{I+I_b} \theta_{i,l} \mathbf{p}_i^{ex}$$

とおく。さらに、 $\mathbf{P}^{ex} = (\mathbf{p}_1^{ex}, \mathbf{p}_2^{ex}, \dots, \mathbf{p}_{I+I_b}^{ex})$  とおき、 $\theta_{i,l}$  ( $i = 1, 2, \dots, I + I_b$ ) を成分とする列ベクトルを  $\boldsymbol{\theta}_l$  とすると、 $\Delta \mathbf{x}_l = \mathbf{P}^{ex} \boldsymbol{\theta}_l$  と表すことができる。よって、

$$(2.49) \quad \frac{1}{L_f} \sum_{l=1}^L \Delta \mathbf{x}_l \Delta \mathbf{x}_l^T = \frac{1}{L_f} \sum_{l=1}^L \mathbf{P}^{ex} \boldsymbol{\theta}_l \boldsymbol{\theta}_l^T (\mathbf{P}^{ex})^T \approx \mathbf{P}^{ex} (\mathbf{P}^{ex})^T = \mathbf{H}_I \approx \mathbf{E}$$

となるので、 $\Delta \mathbf{x}_l$  は、式(2.36)を満たす擾乱であると言える。

ところが、一般的な4DVARでは背景誤差分散共分散行列を経験的に設定することがよくあり、式(2.46)のようにある行列とその転置行列の積で表現できない場合も多い。このような場合、式(2.45)において、背景誤差分散共分散行列に関する右辺第一項を無視し、逆ヘッセ行列を

$$(2.50) \quad \mathbf{H}_I \approx \sum_{i=1}^I \tilde{\mathbf{p}}_i \tilde{\mathbf{p}}_i^T$$

と近似することを検討する。この場合、

$$(2.51) \quad \Delta \mathbf{x}_I = \sum_{i=1}^I \theta_{i,l} \tilde{\mathbf{p}}_i$$

とすると、 $(1/L_f) \sum_{l=1}^L \Delta \mathbf{x}_l \Delta \mathbf{x}_l^T \approx \mathbf{H}_I \approx \mathbf{E}$  となり、 $\Delta \mathbf{x}_l$  は、式(2.36)を満たす。なお、式(2.50)は観測データが十分に有り、さらにPOpULarの繰り返し計算の回数 $I$ が十分に大きいときに成り立つ。しかし実際の4DVARでは、ほとんどの場合、 $I$ が解析変数の数に比べて非常に小さく、式(2.50)は良い近似ではない。この場合、3.1小節で説明するように擾乱を適宜スケールリングすることが必要となる。

#### 2.4 特異ベクトルとの関係

本節では、ベクトル $\tilde{\mathbf{p}}_i$ の物理的な意味について考える。まず、式(2.43)の両辺の左側から $\mathbf{B}^{-1/2} \hat{\mathbf{P}} \mathbf{\Lambda}^2$ をかけると、 $\mathbf{B}^{-1/2} \hat{\mathbf{P}} \mathbf{\Lambda}^2 \check{\mathbf{P}}^T \hat{\mathbf{A}} \check{\mathbf{P}} = \mathbf{B}^{-1/2} \hat{\mathbf{P}} \mathbf{\Lambda}^2$ となる。ここで、 $\hat{\mathbf{P}} = \mathbf{B}^{-1/2} \check{\mathbf{P}}$ 、 $\hat{\mathbf{A}} = \mathbf{B}^{1/2} \hat{\mathbf{A}} \mathbf{B}^{1/2}$ と定義すると、

$$(2.52) \quad (\hat{\mathbf{P}} \mathbf{\Lambda})(\hat{\mathbf{P}} \mathbf{\Lambda})^T \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{P}} \mathbf{\Lambda}^2$$

と書くことが出来る。また、 $(\hat{\mathbf{P}} \mathbf{\Lambda})^T (\hat{\mathbf{P}} \mathbf{\Lambda}) = \mathbf{U}^T \check{\mathbf{P}}^T \mathbf{B}^{-1} \check{\mathbf{P}} \mathbf{U} = \mathbf{U}^T \check{\mathbf{P}}^T \check{\mathbf{Q}} \mathbf{U} = \mathbf{I}$ となるので、 $\hat{\mathbf{p}}_i$ を $\hat{\mathbf{P}}$ の $i$ 列目の要素による列ベクトルとすると、 $\hat{\mathbf{P}} \mathbf{\Lambda}$ を構成する列ベクトル $\lambda_i \hat{\mathbf{p}}_i$ は、互いに直交する単位ベクトルであることがわかる。よって、あるベクトルの右から $(\hat{\mathbf{P}} \mathbf{\Lambda})(\hat{\mathbf{P}} \mathbf{\Lambda})^T$ を作用させると、そのベクトルのうち $(\hat{\mathbf{p}}_1, \hat{\mathbf{p}}_2, \dots, \hat{\mathbf{p}}_I)$ で張られる空間に含まれる成分についてはそのまま保存され、その補空間の成分については除去される。そのため、式(2.52)により、 $\hat{\mathbf{p}}_i$  ( $i = 1, 2, \dots, I$ )は、 $\hat{\mathbf{A}}$ の固有ベクトルを $(\hat{\mathbf{p}}_1, \hat{\mathbf{p}}_2, \dots, \hat{\mathbf{p}}_I)$ で張られる空間内で近似したもので、その固有値は $\lambda_i^2$ であると言える。このような $\hat{\mathbf{p}}_i$ と $\lambda_i^2$ の組み合わせは、Ritz Pairと呼ばれている(Golub and Van Loan, 1996)。

さて、 $\mathbf{B}^{1/2}$ で $\mathbf{x}$ を規格化したものを $\hat{\mathbf{x}}$ とおく、すなわち、 $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{B}^{-1/2} \mathbf{x}$ とすると、式(2.38)から

$$(2.53) \quad J(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{x}}^T \mathbf{B}^{1/2} \hat{\mathbf{A}} \mathbf{B}^{1/2} \hat{\mathbf{x}} + \mathbf{b}^T \mathbf{B}^{1/2} \hat{\mathbf{x}} + c$$

となり、 $\hat{\mathbf{A}}$ は評価関数 $J(\mathbf{x})$ を $\hat{\mathbf{x}}$ の関数と見做した場合のヘッセ行列となっている。よって、その固有ベクトル $\hat{\mathbf{p}}$ の各要素は $\hat{\mathbf{x}}$ の各要素に対応しており、 $\check{\mathbf{p}} = \mathbf{B}^{1/2} \hat{\mathbf{p}}$ は、各要素が元の物理変数に対応するようにするため $\mathbf{B}^{1/2}$ でスケールリングしたものとなっている。ここで規格化とは、単位や変動幅が異なる様々な変数を要素とするベクトルについて、対応する分散共分散行列を用いて、各要素の無次元化、及び、変動幅の標準化を行うことを指している。

また、式(2.37)より、

$$(2.54) \quad \hat{\mathbf{A}} = \mathbf{I} + \mathbf{B}^{1/2} \mathbf{M}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{B}^{1/2}$$

となるので、 $\hat{\mathbf{p}}_i$  ( $i = 1, 2, \dots, I$ )は $\mathbf{B}^{1/2} \mathbf{M}^T \mathbf{R}^{-1/2}$ の特異ベクトルでもあり、その特異値は

$\sqrt{\lambda_i^2 - 1}$  である。ここで  $M$  は、モデル演算子と観測演算子を含む  $M$  の接線形演算子であり、解析時刻のインクリメントから将来のインクリメントを計算し、観測に相当する量に変換するものである。よって  $\hat{p}_i$  は、入力変数のインクリメントと出力変数の観測相当量をそれぞれ  $B^{1/2}$  と  $R^{1/2}$  で規格化した場合に抽出される  $M$  の成長モードの近似であり、 $\hat{p}_i$  はそれを  $B^{1/2}$  でスケールしたものである。そして、式(2.51)で与えられる初期擾乱  $\Delta x_i$  は、上記の近似的な成長モードの線形結合により構成されている。4DVAR の場合、この成長モードの時間スケールとしては概ね初期推定値を与えてから平均的な観測時刻までの時間が想定される。また、演算子  $M$  の出力変数は観測データに相当する量であることには注意が必要である。そのため観測されない擾乱については  $M$  により除去されてしまい、初期擾乱  $\Delta x_i$  には含まれない。よって、本論文の手法を観測がまばらな状態で利用すると、有効な擾乱を取り出せない可能性があり、注意が必要である。

### 3. 結合予測における実用例

本論文では、以後、2022年2月に気象庁において現業運用が開始される大気海洋結合予測システム、即ち、第3世代気象庁・気象研季節アンサンブル予報システム(以後、CPS3)における、2節で述べた理論に基づいた海洋初期擾乱生成の例と、その結合予測におけるインパクトを検証した結果について紹介する。

#### 3.1 システムの構成と海洋初期擾乱作成手順

CPS3 は大気海洋結合モデルと 4DVAR による全球海洋データ同化システムにより構成される。大気海洋結合モデルは、大気部分の水平方向の格子点の間隔(水平解像度)が約 55km、海洋部分の水平解像度が 0.25 度であり、与えられた大気と海洋の初期状態から 6 ヶ月先までの未来の変動を予測するために使われている。大気の初期値は、主に日々の天気予報で用いられている気象庁現業全球解析から与えられる。また、海洋初期値は CPS3 内の全球海洋データ同化システム(以後、MOVE-G3)により作成される。ここで大気初期値と海洋初期値が別々のシステムにより作成されることについては注意が必要である。

MOVE-G3 は、比較的低解像度の解析用モデル G3A と、より高解像度のモデル G3F から構成される。G3A の水平解像度は、東西 1°、南北 0.3~0.5° であり、G3F は結合モデルの海洋部分と同等のモデルである。MOVE-G3 におけるデータ同化の手順は、Usui et al. (2015) とほぼ同じであり、4DVAR による解析は G3A で実行される。一回の解析では、ある 5 日間(観測窓)の海洋観測データにモデルの予測結果が合うように、その前 5 日間にわたって徐々に加えられるインクリメントが最適化され、最適化されたものを解析インクリメントとする。結果として、解析インクリメントは 5 日間にわたって徐々にモデルの初期値に加えられる。解析インクリメントをある期間にわたって徐々に加えることによりモデル場を修正する手法は、一般に Incremental Analysis Updates (IAU; Bloom et al., 1996) と呼ばれている。G3A で実行される 4DVAR では、解析インクリメントが初期時刻において一度に加えられるわけではなく、5 日間にわたって IAU により加えられる点について、2.1 小節で説明したような一般的な 4DVAR データ同化システムとは異なる。また、解析インクリメントを求めるために使われる観測データは水温、塩分、海面高度であり、解析インクリメントが与えられるのは水温、塩分のみである。流速や海面高度もモデルの予報変数であるが、本システムでは解析インクリメントを与えていない。

次に、観測窓の 5 日間に関するデータ同化後の G3A の水温・塩分の平均場から、同じ期間におけるデータ同化前の G3F の平均場を差し引き、これを G3F の解析インクリメントと考え、

同じ5日間にわたってG3Fを積分しながらIAUにより加えることにより、G3Aの同化結果からより高解像度のG3Fに格子点値を生成する、すなわち、ダウンスケーリングを行う。そして、ダウンスケーリング後のG3Fのモデル場(G3Fの解析値)を結合モデルによる予測の際の海洋初期値として利用する。

なおG3Aの評価関数には、式(2.1)の右辺に、密度が上下で逆転して重力的に不安定な状態を解析値としないための追加的な拘束条件など(Fujii et al., 2005)が加えられていて、また、式(2.5)は近似的にしか成り立たない。しかしながら、追加的な拘束条件の影響は小さく無視できるものと考えれば、本システムにおいても2節で行った議論が近似的に成り立つ。実際に、追加的な拘束条件を外した場合の影響は全球の中の限られた地点にのみ見られ、その影響は大きくないと考えられる。また、G3Aでは評価関数を最小化する解析インクリメントを求める手法として、2.2小節で紹介したPOpULarを採用している。そこでMOVE-G3では、式(2.51)に基づき、G3Aの解析インクリメントの擾乱を作成し、それをG3Fにダウンスケーリングすることにより、結合モデルでアンサンブル予測を行うための、各アンサンブルメンバーの海洋初期値を作成している。

具体的な作成方法は以下の通りである(図1参照)。まずG3Aで実行した4DVARの結果を用いて、式(2.51)により、G3Aの解析インクリメントに対する擾乱を作成する(図中①)。ここでは符号が逆転した2通りの擾乱を2組、計4通り作成する。固有ベクトルはLanczos法(Golub and Van Loan, 1996)を用いて計算する。また、擾乱は解析インクリメント同様、水温と塩分のみについて作成される。次に、4通りの擾乱それぞれについて、解析インクリメントに足し込み、それを観測窓の前の5日間にわたってIAUにより加え、さらに観測窓の5日間についても引き続きモデルを積分することにより、G3Aにおける擾乱が加わった状態での水温・塩分場を作成する(図中②)。そして、同化窓の5日間の平均場を計算し、それからダウンスケーリングする前のG3Fの平均場を差し引き、解析インクリメントとする(図中③)。これを、同じ5日間にわたってG3Fに対しIAUにより加えることにより(図中④)、観測窓の最後の時刻における各アンサンブルメンバーの海洋初期値を作成する。最終的には、擾乱を加えて

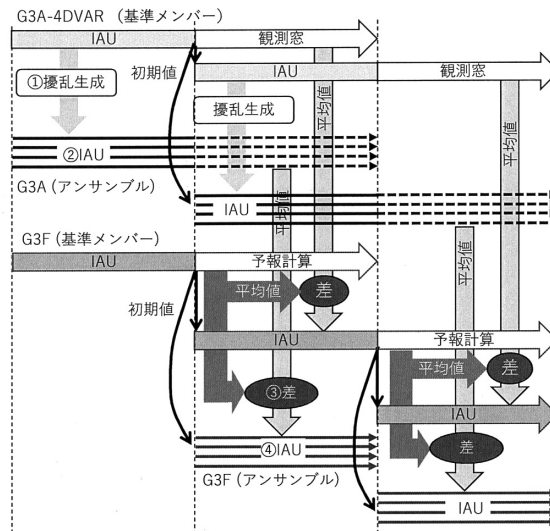


図1. MOVE-G3における海洋初期擾乱の作成手順に関する模式図。横軸は対象時刻であり、破線は5日間隔である。

いないもの(基準メンバー)を含めて、計5メンバーの初期値が作成される(即ち、 $L = 5$ )。

さて、MOVE-G3において、式(2.51)により作成される擾乱はたったの2つであり、一般的な乱数を用いても全ての $\tilde{p}_i$ の情報が十分に反映させる保証が無い。例えば、2つのうちどちらの擾乱についても、ある $\tilde{p}_i$ についてかかる重みが小さくその情報がほとんど使われない可能性がある。そのような状況を回避するため、MOVE-G3では、平均1、分散1の乱数 $\theta_{i,l}$ として、ちょうど0.5の確率で+1または-1をとるものを採用している。なお、ある擾乱についてその符号を逆転させたものを採用するのは、擾乱の平均が必ず0となるようにするためである。また、この場合 $L_f = 4$ とすることで2.3小節の導出がそのまま成り立つ。

また、本システムでのPOpULarの繰り返し計算の回数は20~30回であり、十分な数の $\tilde{p}_i$ を得ることが出来ないため、実際に求まる擾乱 $\Delta x_l$ の大きさは、背景誤差などの大きさに比べかなり小さくなってしまふ。そこで、本システムでは、 $\Delta x_l$ のノルムが、解析インクリメントのノルムの0.5倍となるようにスケーリングしてから利用している。なお、このファクターは、予備実験でエルニーニョの状態を特徴付けるNINO3.4指数(熱帯太平洋東部の5°S~5°N, 120~170°Wの海域における海面水温偏差の平均値)のスプレッドがその予報値の二乗平均平方根誤差(RMSE)と同程度になるように決定している。また、MOVE-G3の擾乱の生成では式(2.45)の背景誤差に関する部分を無視していることについても、注意が必要である。

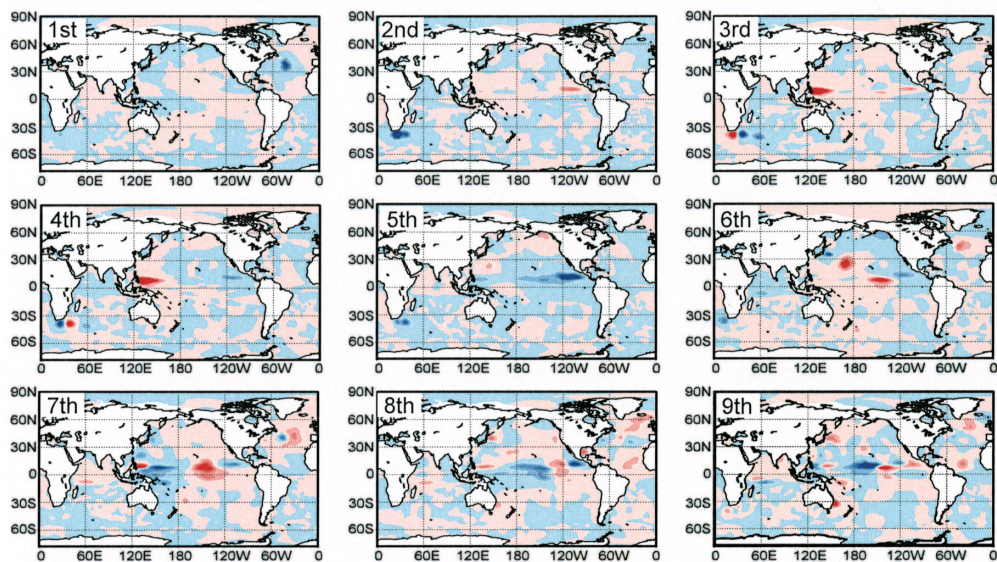
### 3.2 海洋初期擾乱の例

本小節では、MOVE-G3により作成された、2013年4月21~25日、および、10月23~27日の期間を観測窓(すなわち、G3Fの解析値を作成する期間)とした時の4DVAR解析値に対する規格化されたヘッセ行列 $\hat{A}$ の近似固有ベクトルと、それから作成した海洋初期擾乱の例について示す。なお、4月末および10月末に作成した初期値は夏及び冬の3ヶ月予報で用いられる。5月および11月を予報0ヶ月目と考えるため、予報3ヶ月目は8月および翌年2月にあたる。また、2013年はエルニーニョやラニーニャが発生していない平均的な気候の年である。

まず、図2にヘッセ行列の固有ベクトル第1~9モードについて示す。なお、ここで図示するのはそれぞれのモード $\tilde{p}_i$ を $B^{1/2}$ でスケーリングしたもの、すなわち $\tilde{p}_i$ に含まれる100m深水温の偏差である。図を見ると、最上位のモードでは、局所的な偏差が限られた海域に少数見られるだけであるが、下位のモードになるに従い、局所的な偏差の数が増えていき、偏差のある海域も広がっていく。また、上位のモードの偏差は、エルニーニョの発端となる熱帯太平洋東部や、海洋の熱帯不安定波の活動が活発な北太平洋の5~10°N帯、南アフリカ周辺、アメリカ東岸から北大西洋中央部にかけての海域、日本の東海上などの西岸境界流があり渦活動が活発な海域など、力学的不安定の存在が予想される海域に多く見られ、海洋モデルによる成長擾乱をある程度の確に捉えていると考えられる。このことは、ヘッセ行列が式(2.54)で近似でき、式(2.1)には表されていない追加的な拘束条件の影響が小さいことの証左にもなっている。また、4月21日からの解析と10月23日からの解析の比較から、偏差の存在する海域についてある程度共通点があるものの、解析期間によって異なる固有ベクトルが計算されていることがわかる。

次に、乱数を用いた上記の固有ベクトルの線形結合により作成した、G3Aの解析インクリメントに対する擾乱を、図3に示す。まず、4月21日からの解析と10月23日からの解析のどちらの擾乱を見ても、2つの擾乱の間に十分な相違が見られ、適切に独立した擾乱が生成されていることがわかる。また、どの擾乱も主に熱帯域や西岸境界流域など物理的に不安定で誤差の成長が早い海域に大きな偏差が見られ、成長擾乱が適切に取り込まれているものと考えられる。赤道鉛直断面では、特に温度躍層付近に正と負の偏差は交互に並んでいて、赤道ケルビン波と関連した擾乱が捉えられているものと考えられる。

(a) 2013年4月21日～25日の解析に関するヘッセ行列の固有ベクトル(100m深水温)



(b) 2013年10月23日～27日の解析に関するヘッセ行列の固有ベクトル(100m深水温)

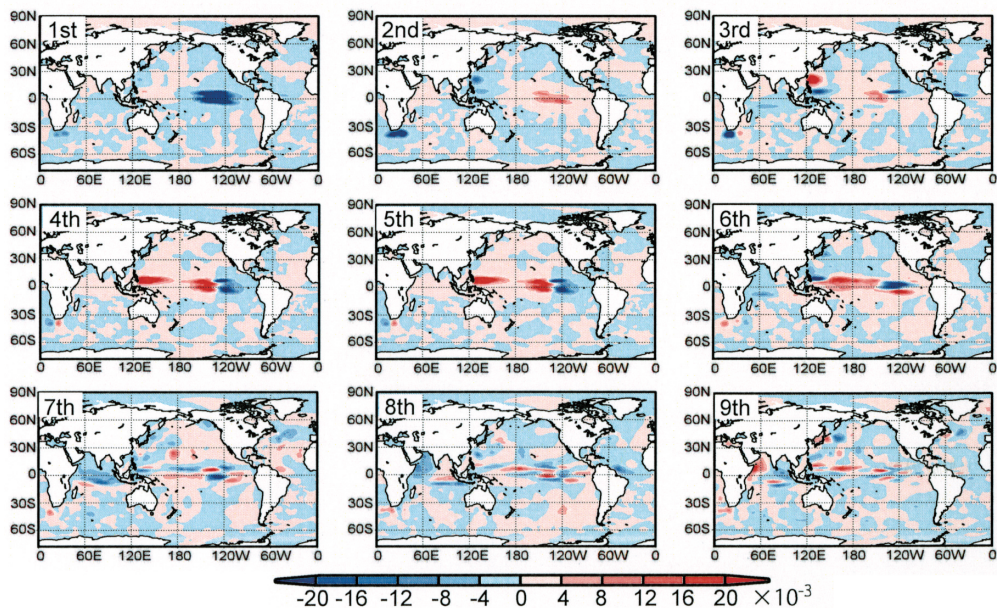


図2. 近似的に計算された4DVARに関するヘッセ行列  $\hat{A}$  の第1～9固有モードに伴う100m深水温のインクリメント(単位  $^{\circ}\text{C}$ )の分布.  $B^{1/2}$  でスケールされている. 4DVARの観測窓の期間は, (a)2013年4月21～25日, (b)2013年10月23～27日である.

次に, 上記の擾乱を元に作成されたG3Fの各アンサンブルメンバーの基準メンバーとの差を図4で示す. なお, ここでは4月25日の差の平均について示すが, 4月26日初期値の結合モデルによる予測では, ここで示す各メンバーの4月25日の最後の状態(4月26日の最初の状

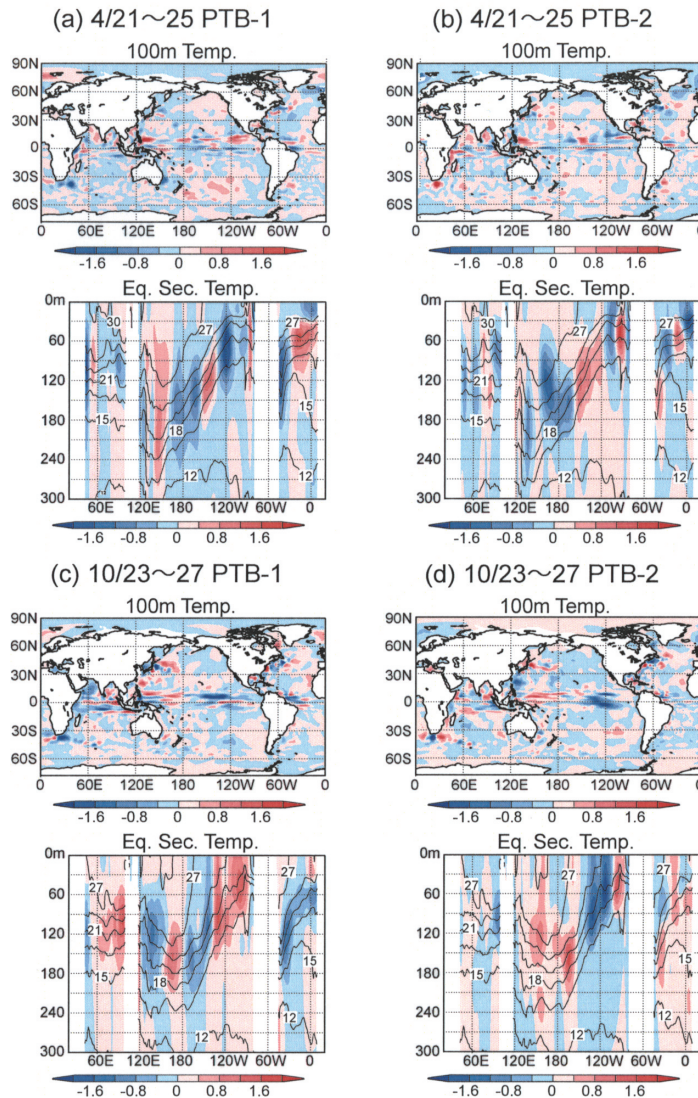


図 3. アンサンブルメンバー作成のために作成された G3A の解析インクリメントの擾乱に伴う全球 100m 深(上段)および赤道鉛直断面(下段, カラー)における水温偏差(単位 °C)の分布. (a), (b)は 2013 年 4 月 21~25 日を観測窓とする解析の解析インクリメントに対する 1 番目, 2 番目の擾乱, (c), (d)は 2013 年 10 月 23~27 日を観測窓とする解析の解析インクリメントに対する 1 番目, 2 番目の擾乱である. 赤道断面図には同日の基準メンバーの解析後の水温分布(等値線, 等値線間隔 3°C)を合わせて描画している.

態)を, 予測における各メンバーの海洋初期値として用いる.

さて, G3F で計算された 4 月 25 日の 2 つの擾乱(図 4(a), (b))を, 元の解析インクリメントの擾乱(図 3)と比較すると, 100m 深水温については概ね類似していることがわかる. 一方, 太平洋の赤道鉛直断面を見ると, やはり両者には類似点があるものの, 特に温度躍層付近で偏差が減少し, 細かな擾乱が消失している様子が見られる. これは, G3A で解析インクリメント

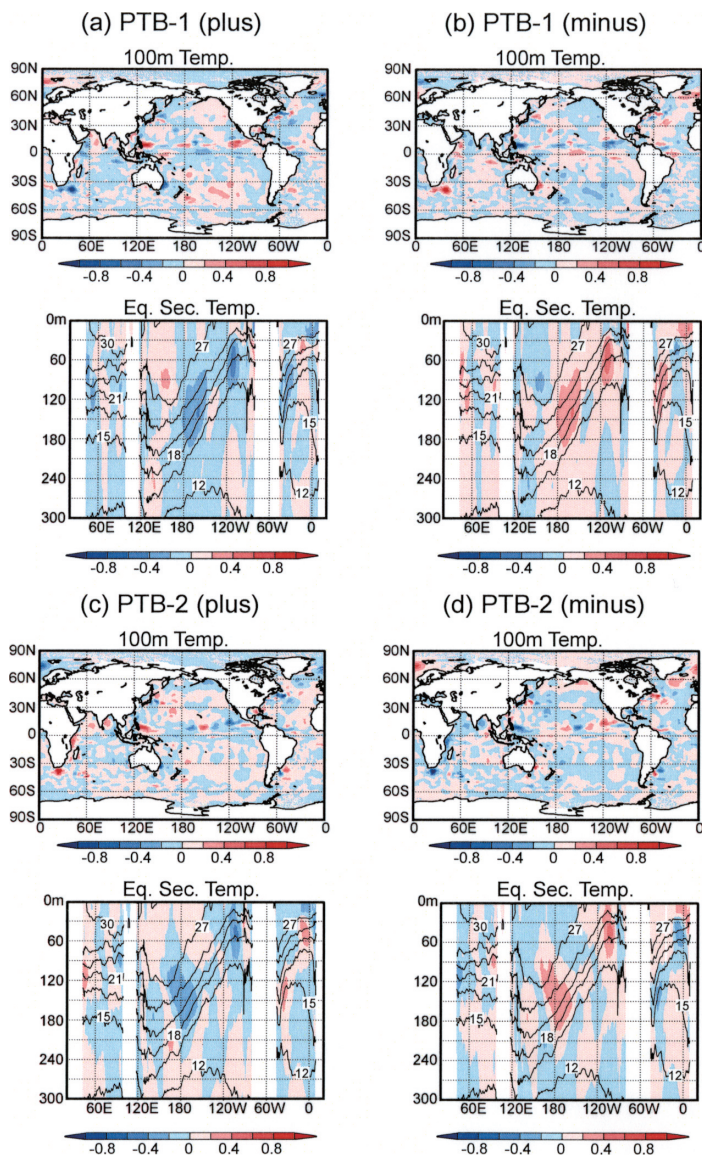


図4. G3Fの全球100m深(上段)および赤道鉛直断面(下段)における各アンサンブルメンバーの2013年4月25日(日平均)の水温の基準メンバーからの偏差(単位 $^{\circ}\text{C}$ )。 (a), (b)はそれぞれ1番目の擾乱を足して、または、引いて生成したアンサンブルメンバーについての偏差。 (c), (d)はそれぞれ2番目の擾乱を足して、または、引いて生成したアンサンブルメンバーについての偏差。 赤道断面図には同日の基準メンバーのG3Fにダウンスケールリングした後の水温場(等値線, 等値線間隔 $3^{\circ}\text{C}$ )を合わせて描画している。

をIAUにより加える時と、同化後のG3Aと同化前のG3Fから計算した解析インクリメントをG3FでIAUにより加える時(それぞれ図1の②と④)の2つの段階で、モデルとなじまない擾乱が除去されているからである。また、同じ擾乱を足し込んだ場合と差し引いた場合のメンバーについて比較すると、ほぼ偏差の正負が逆転した状態になっている。このことから、両者



のスペルッドがほぼ線形的に増加していることが示唆される。このように、本システムにおいては5~10日間程度ならば、解析インクリメントに加えた擾乱に対する応答はほぼ線形的であり、G3Fにダウンスケーリングされても、その線形性はほとんど損なわれない。

### 3.3 予報実験の結果

本小節では、CPS3の結合モデルを用いた90日後までの予報に対する海洋初期擾乱利用の効果について調べた結果を紹介する。ここでは、以下の2つの予報実験の結果を比較している。1つ目の実験では、各予報開始日に対して、MOVE-G3で作成した基準メンバーおよび海洋初期擾乱を含む4つの海洋初期値(図1の④に相当)を用いた計5メンバーのアンサンブル予報を実施し、さらに予報計算の過程で結合モデル大気部分に1節で紹介したSPPTを適用した。この実験をTESTと呼ぶ。一方、2つ目の実験では、海洋初期擾乱は利用せず、すべてのアンサンブル予報のメンバーについて、MOVE-G3の基準メンバーの海洋初期値を用い、結合モデル大気部分にSPPTを適用することにより、各予報開始日について5メンバーのアンサンブル予報を実施した。この実験をCNTLと呼ぶ。つまり、TESTではCNTLでは利用していない海洋初期擾乱を利用しており、両者を比較することにより海洋初期擾乱の効果を調べることができる。なお、大気初期値としては、気象庁の大気長期再解析データJRA-3Q暫定バージョン(Kobayashi et al., 2021)を用いた。アンサンブル予報の開始日は1990~2013年の各年の4月26日および10月28日であり、各実験について計48回のアンサンブル予報を実施している。

また、本論文では、RMSEとスペルッドを以下の定義に従って計算する。

$$(3.1) \quad \text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N_t} \sum_{t=1}^{N_t} (\bar{d}_t^f - d_{t,t}^r)^2}$$

$$(3.2) \quad \text{スペルッド} = \sqrt{\frac{1}{N_t L_f} \sum_{t=1}^{N_t} \sum_{l=1}^{L_f} (d_{t,l}^f - \bar{d}_t^f)^2}$$

ここで、 $d_{t,l}^f$ は任意の変数のアンサンブル $l$ の予報値、 $\bar{d}_t^f$ はそのアンサンブル平均、 $d_{t,t}^r$ は真値と見做すリファレンスの値、 $N_t$ と $t$ は予報を開始した年の数(1990~2013年なので $N_t = 24$ )とそのインデックスであり、 $l, L, L_f$ の定義は2.3小節と同じである。RMSEとスペルッドは、二つの予報開始日(4月26日と10月28日)について、および予報開始からの時間毎に、それぞれ別々に計算する。また、海洋内部の水温の他、NINO3.4指数の予報値についても計算する。リファレンスとしては、NINO3.4指数については気象庁が気象予測などのために衛星観測データなどから作成している客観解析値MGDSST(栗原 他, 2006)から算出した値を、海洋内部の水温については海洋再解析データSODA3.12.2(Carton et al., 2018)を利用する。なお、メンバー数が十分に多く、モデルにメンバー間で共通するようないわゆる系統誤差が無ければ、RMSEとスペルッドは一致する。しかし、実際は系統誤差の影響の他、メンバー数が少なく予報の過程で成長する誤差が十分に含まれないため、スペルッドがRMSEと比べて小さくなってしまふことが多く、少ないメンバー数でいかにスペルッドを大きくするかが、アンサンブル予報の重要な課題となっている。

図5に予測日数に対するNINO3.4指数のアンサンブルメンバー間のスペルッドとRMSEをプロットしたものを示す。まず、10月28日からの予報についてみると、予報開始から最初の10日程度について、CNTLのスペルッドは非常に小さくなっているが、TESTにおいては海洋初期擾乱を足し込むことによってスペルッドが大きくなっており、概ねRMSEを説明できる程度になっている。予報開始後、TESTではスペルッドに比べてRMSEの方が早く増加し、両

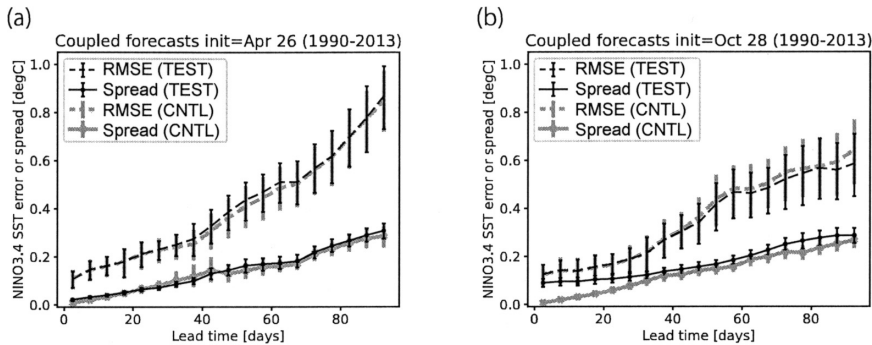


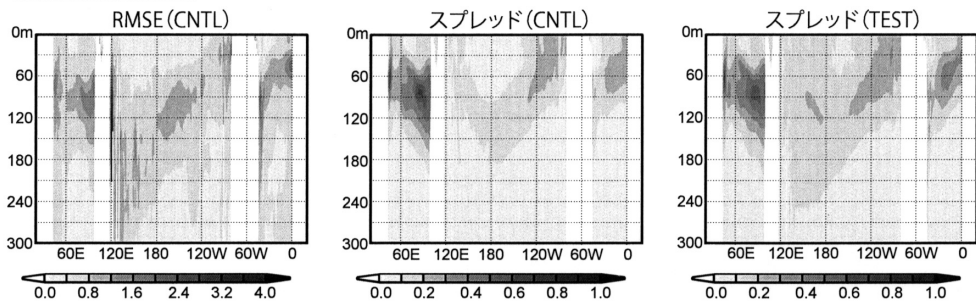
図5. 予測日数に対する NINO3.4 指数のスプレッド(実線)と RMSE(破線)のプロット. 灰色線が CNTL, 黒線が TEST を示す. ブートストラップ法で推定した 90% 信頼区間を合わせて示す. (a)4月26日からの予測. (b)10月28日からの予測.

者の差は大きくなっているが、これはモデルの誤差の影響であると考えられる。一方、TEST と CNTL のスプレッドの差は、予測開始から 30 日程度まで徐々にせばまっているが、その後は一定の大きさを保っており、80~90 日の予測でも両者の差が見られる。また、スプレッドについては TEST の方がずっと大きくなっているにもかかわらず、RMSE については 90% の信頼区間を越えるような差は無いものの、TEST の方が徐々に小さくなっている。このように TEST では、海洋擾乱を加えたことにより、スプレッドの大きさが特に予測の初期において RMSE に近づく一方、予測の後半でも精度が改善しており、期待通りの結果であると言える。

しかしながら、4月26日からの予測について見てみると、TEST では予測開始から数日間のスプレッドが若干 CNTL と比べて大きくなっているものの、RMSE と比べるとまだかなり小さく、その後のスプレッドについても予測開始から 50 日後以降で若干 TEST の方が大きくなっている程度で、大きな違いは無い。また、RMSE についても若干 TEST の方が大きくなっている程度である。この時期は、NINO3.4 指数を計算する太平洋赤道域東部の海面水温の年毎の違いが一年で最も小さい時期にあたり、この海面水温に関する解析インクリメントも小さめになる傾向にある。よって、同海域での力学的不安定などに起因した誤差は小さく、RMSE の多くはモデルの系統誤差に起因しているため、MOVE-G3 で採用したアンサンブルメンバーの作成手法では、捉えられていないのではないかと推測される。

次に、予測を開始した翌月(4月26日からの予測の場合は5月、10月28日からの予測の場合は11月)の赤道鉛直断面における水温のスプレッドと RMSE の分布について図6に示す。なお、RMSE については TEST と CNTL で大きな違いは無いので、CNTL についてのみ示す。スプレッドについて二つの予測実験を比較すると、TEST では、4月26日からの予測と10月28日からの予測どちらについても、太平洋と大西洋で温度躍層(50-300m 深にある鉛直方向の温度変化が特に大きな層)付近のピークが大きくなり、またスプレッドが 0.1 度以上と比較的大きなエリアも太平洋と大西洋において温度躍層から海面付近へと広がっている。インド洋については、4月26日からの予測では同程度であるものの、10月28日からの予測では温度躍層より上層でスプレッドが増加している。また、TEST のスプレッドと RMSE を比較すると、どちらも温度躍層付近で大きな値が見られる。その他、どちらの初期日からの予測もインド洋の東部にピークが見られる点、10月28日からの予測で、大西洋の中央部にピークがある点など、いくつか詳細のパターンが共通することも確認できる。これらのことから、誤差を増加させる擾乱が海洋初期擾乱によってある程度再現できていることがうかがわれる。

4月26日からの予測



10月28日からの予測

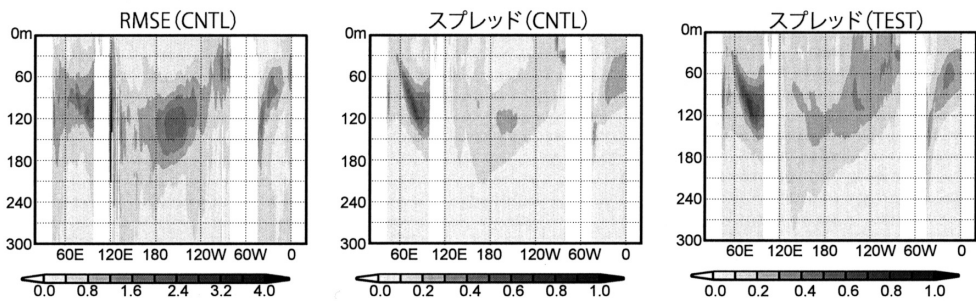


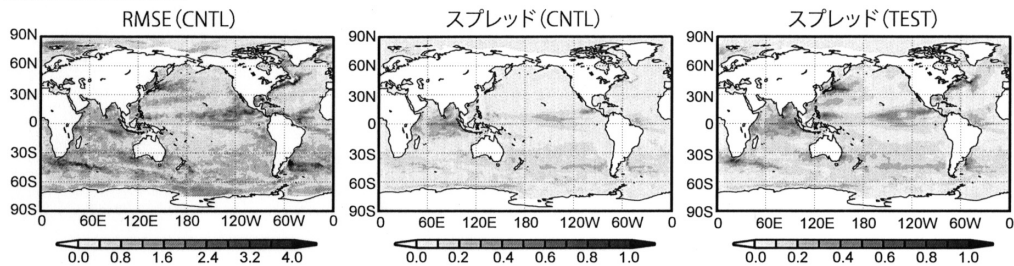
図 6. 赤道鉛直断面における初期月平均の水温の RMSE とスプレッド (共に単位  $^{\circ}\text{C}$ ) の分布. 左)CNTL の RMSE. 中)CNTL のスプレッド. 右)TEST のスプレッド. 上段)4 月 26 日を初期日とした 5 月の予測. 下段)10 月 28 日を初期日とした 11 月の予測. なお, RMSE とスプレッドで, 使っているグレースケールが異なっている. また, TEST の RMSE については, CNTL と比べ大きな違いが無いので省略する.

一方, スプレッドの値は, RMSE に比べて全体的に小さくなっており, その一因としてモデル誤差による RMSE の増加が十分に表現されていないことが考えられる. また, RMSE のピークが太平洋中央部の温度躍層付近にあるのに対し, TEST においてスプレッドを特に増加させているのは, 太平洋東端の海面付近である. 太平洋中央部の温度躍層の変動は, 主にその海域における海上風の変化によってもたらされる. よって, 太平洋中央付近については海洋初期値に含まれる不安定の影響より, モデル誤差, 特に当海域の海上風の不確実性が結合モデルで十分に表現できない効果が影響していると推測される.

図 7 に示す予測を開始した翌月の 100m 深水温の RMSE とスプレッドの全球分布からも, 海洋内部の不安定に起因する RMSE の増加が海洋初期擾乱によりある程度捉えられていることがわかる. 例えば, 太平洋の  $5\sim 10^{\circ}\text{N}$  や日本の東の海域で, CNTL に比べて TEST でスプレッドが大きくなり, より RMSE に近づいていることがわかる.  $5\sim 10^{\circ}\text{N}$  帯は海洋の熱帯不安定波の活動が活発な海域であり, 日本の東岸は, 流路変動の大きな黒潮続流があり海洋の渦活動も盛んな海域である. どちらの海域も海洋変動が大きな海域であり, 変動の原因となる海洋内部の不安定により予測時の RMSE の増加が大きいと考えられるが, TEST では海洋初期擾乱の導入により, その増加が適切に捉えられている.

一方, 海洋変動の大きな一部の海域を除く多くの海域では, TEST でも RMSE に比べスプレッドが非常に小さくなっている. MOVE-G3 では, 4DVAR の繰り返し計算で計算されたわ

## 4月26日からの予測



## 10月28日からの予測

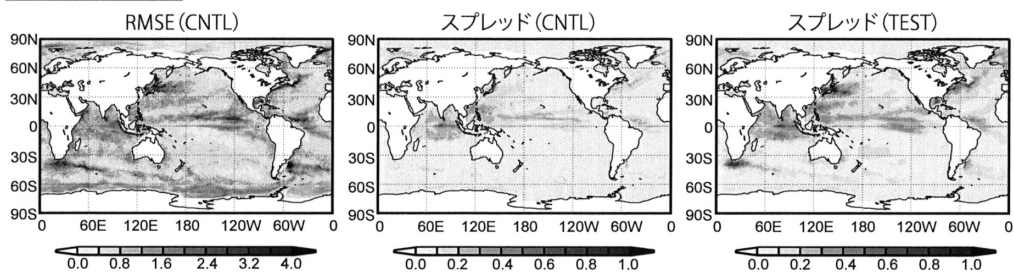


図7. 図6と同じ。ただし、100m 深水温の全球分布について。

ずかな数の擾乱から成長擾乱を抽出しており、式(2.45)の右辺第1項を無視することにより、成長が十分に見られない擾乱については、省略されている。そのため、それほど成長しないが、もともと背景場に含まれている擾乱については十分に拾っておらず、その結果、多くの海域でスプレッドが非常に小さくなっていると考えられる。

#### 4. まとめと今後の課題

本論文では、変分法データ同化システムにおいて、最適化の過程で得られた評価関数の勾配などの情報から、BFGS 公式を用いて、アンサンブル予測に利用するための解析変数の擾乱を生成する手法について提案した。本手法では、最適化の実行により得られる情報を利用して擾乱を生成することから、追加で必要となる計算機資源が小さく、4DVAR などの計算量の大きい同化システムに対しても、容易に採用することが可能である。提案手法は、最適化手法として準ニュートン法 POpULar の使用を前提としていたが、他の最適化手法を利用しても類似の方法により BFGS 公式から擾乱を生成することが可能である。ただし、 $B^{-1/2}$  によって規格化されたヘッセ行列  $\hat{A}$  の固有ベクトルの近似を得るためには、 $P$  を適当に変換し  $\hat{P}^T B^{-1} \hat{P} = I$  となるような  $\hat{P}$  を求める必要があり、それが困難なため固有ベクトル以外のベクトルから擾乱を生成した場合は、成長モードが適切に捉えられない可能性がある。

また本論文では、背景誤差が式(2.46)のようにある行列とその行列の転置との積で表現できない場合の対策として、BFGS 公式の背景誤差に関する部分が無視することを提案し、その実用例として、気象庁の結合予測システムにおける海洋初期値擾乱に関する例を示した。背景誤差に関する部分が無視した場合でも、提案手法による擾乱は、数値モデルと解析変数から観測値への変換を含む演算子の上位の特異ベクトルを近似したベクトルの線形結合となっており、誤差を成長させるモードが取り込まれているという点では、アンサンブルメンバーを生成するための擾乱として適切であると考えられる。実際に、気象庁の結合予測システムで計算された

海洋初期値の擾乱を見ると、エルニーニョと関係する熱帯太平洋東部や熱帯不安定波の活動が活発な北太平洋の 5~10° 帯、流路変動が激しく渦活動が活発な西岸境界流域などで大きな偏差を持ち、成長擾乱が適切に表現されていると考えられる。また、10月28日からの大気海洋結合予測に関しては、NINO3.4 指数予報値について、RMSE がやや小さくなるのに対し、予報初期のスプレッドが増大し、その大きさが RMSE に近づくという改善が見られた。

しかしながら、気象庁の結合予測システムの結果では、大きな偏差が見られるのが一部の海域に限られていて、RMSE は大きいにもかかわらず擾乱の偏差が非常に小さい海域が広く存在していた。BFGS 公式の背景誤差に関する部分を無視していることが、その一因であると考えられる。この問題の解決手段として、前の時刻からのアンサンブル予測の結果を用いて完全な BFGS 公式に基づく擾乱を作成することが有効かもしれない。しかし、予測のメンバー数が十分でないため、実際の 4DVAR による解析では、経験的に決定した背景誤差分散共分散行列が利用されている。そのため、両者の整合性をとるために、アンサンブル変換法の様な手法を導入することが必要かもしれない。

その他、提案手法で生成された擾乱は振幅が小さく、解析インクリメントなどでスケールリングする必要がある点など、理論的な課題も残されている。今後、更に理論的な検討を進めると共に、上記で議論したとおり、背景誤差の情報を取り込むための改良などを検討する必要がある。

## 謝 辞

査読者から有益なコメントを頂きました。感謝申し上げます。本研究は統計数理研究所共同研究プログラム(28-共研-2004, 29-共研-2007, 30-共研-2007, 2019-ISMCRP-2030, 2020-ISMCRP-2049, 2021-ISMCRP-2023)の助成を受けたものです。

## 付 録

### A. 証明補遺

本節では(2.39)から(2.41)の  $p_i, q_i$  に対する変換が、共通の行列で書かれることを証明する。まず、 $1 \times 1$  次元の行列(すなわちスカラー数)  $G_1$  を  $G_1 = 1/p_1^T q_1$  とおく。この時、

$$(A.1) \quad \check{p}_1 = p_1 G_1, \quad \check{q}_1 = q_1 G_1$$

と、書くことができる。次に、ある  $(i-1) \times (i-1)$  次元の行列  $G_{i-1}$  を用いて、

$$(A.2) \quad (\check{p}_1 \check{p}_2 \cdots \check{p}_{i-1}) = (p_1 p_2 \cdots p_{i-1}) G_{i-1}$$

$$(A.3) \quad (\check{q}_1 \check{q}_2 \cdots \check{q}_{i-1}) = (q_1 q_2 \cdots q_{i-1}) G_{i-1}$$

と書くことができると仮定する。この時、 $\tilde{g}_{i,p}$  と  $\tilde{g}_{i,q}$  を

$$(A.4) \quad \tilde{g}_{i,p} = (-p_i^T \check{q}_1 - p_i^T \check{q}_2 \cdots - p_i^T \check{q}_{i-1} 1)^T$$

$$(A.5) \quad \tilde{g}_{i,q} = (-q_i^T \check{p}_1 - q_i^T \check{p}_2 \cdots - q_i^T \check{p}_{i-1} 1)^T$$

と表される  $i$  次元の列ベクトルとすると、

$$(A.6) \quad \hat{p}_i = (\check{p}_1 \check{p}_2 \cdots \check{p}_{i-1} p_i) \tilde{g}_{i,p}$$

$$(A.7) \quad \hat{q}_i = (\check{q}_1 \check{q}_2 \cdots \check{q}_{i-1} q_i) \tilde{g}_{i,q}$$

と書くことができる。ここで(A.2), (A.3)より,

$$(A.8) \quad \begin{aligned} \mathbf{p}_i^T(\check{\mathbf{q}}_1, \check{\mathbf{q}}_2, \dots, \check{\mathbf{q}}_{i-1}) &= \mathbf{p}_i^T(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_{i-1})\mathbf{G}_{i-1} \\ &= \mathbf{p}_i^T \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_{i-1})\mathbf{G}_{i-1} \\ &= \mathbf{q}_i^T(\check{\mathbf{p}}_1, \check{\mathbf{p}}_2, \dots, \check{\mathbf{p}}_{i-1}) \end{aligned}$$

なので,  $\tilde{\mathbf{g}}_{i,p} = \tilde{\mathbf{g}}_{i,q}$  である。そこで,  $\tilde{\mathbf{g}}_i = \tilde{\mathbf{g}}_{i,p}/\check{\mathbf{p}}_i^T \check{\mathbf{q}}_i = \tilde{\mathbf{g}}_{i,q}/\check{\mathbf{p}}_i^T \check{\mathbf{q}}_i$  とおくと

$$(A.9) \quad (\check{\mathbf{p}}_1 \check{\mathbf{p}}_2 \cdots \check{\mathbf{p}}_i) = (\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \cdots \mathbf{p}_i)\mathbf{G}_i$$

$$(A.10) \quad (\check{\mathbf{q}}_1 \check{\mathbf{q}}_2 \cdots \check{\mathbf{q}}_i) = (\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2 \cdots \mathbf{q}_i)\mathbf{G}_i$$

と書くことができる。ここで,

$$(A.11) \quad \mathbf{G}_i = \begin{pmatrix} \mathbf{G}_{i-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_{i-1} & \tilde{\mathbf{g}}_i \\ \mathbf{0} & 1 \end{pmatrix}$$

であり,  $\mathbf{I}_{i-1}$  は  $i-1$  次元の恒等ベクトルである。よって帰納法により,

$$(A.12) \quad (\check{\mathbf{p}}_1 \check{\mathbf{p}}_2 \cdots \check{\mathbf{p}}_I) = (\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \cdots \mathbf{p}_I)\mathbf{G}_I$$

$$(A.13) \quad (\check{\mathbf{q}}_1 \check{\mathbf{q}}_2 \cdots \check{\mathbf{q}}_I) = (\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2 \cdots \mathbf{q}_I)\mathbf{G}_I$$

となり,  $\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i$  に対する変換は, 共通の行列  $\mathbf{G}_I$  で書かれる。

## 参 考 文 献

- Bishop, C. H. and Toth, Z. (1999). Ensemble transformation and adaptive observations, *Journal of Atmospheric Science*, **56**, 1748–1765.
- Bloom, S. C., Takacs, L. L., DaSilva, A. M. and Ledvina, D. (1996). Data assimilation using incremental analysis updates, *Monthly Weather Review*, **124**, 1256–1271.
- Bousserez, N., Henze, D. K., Perkins, A., Bowman, K. W., Lee, M., Liu, J., Deng, F. and Jones, D. B. A. (2015). Improved analysis-error covariance matrix for high-dimensional variational inversions: Application to source estimation using a 3D atmospheric transport model, *Quarterly Journal of Royal Meteorological Society*, **141**, 1906–1921.
- Buizza, R. and Palmer, T. (1999). Stochastic representation of model uncertainties in the ECMWF ensemble prediction system, *Quarterly Journal of Royal Meteorological Society*, **125**, 2887–2908.
- Carton, J. A., Chepurin, G. A. and Chen, L. (2018). SODA3: A new ocean climate reanalysis, *Journal of Climate*, **31**, 6967–6983.
- Charron, M., Pellerin, G., Spacek, L., Houtekamer, P., Gagnon, N., Mitchell, H. and Michelin, L. (2010). Toward random sampling of model error in the Canadian ensemble prediction system, *Monthly Weather Review*, **138**, 1877–1901.
- Fisher, M. and Courtier, P. (1995). Estimating the covariance matrices of analysis and forecast error in variational data assimilation, Technical Memorandum, No.220, European Centre for Medium-Range Weather Forecasts, Reading, UK.
- Fletcher, R. (2013). *Practical Methods for Optimization*, 2nd ed., John Wiley & Sons, New York.
- Fujii, Y. (2005). Preconditioned Optimizing Utility for Large-dimensional analyses (POpULar), *Journal of Oceanography*, **61**, 167–181.
- 藤井陽介 (2009). モデルとの整合性に優れたアジョイント法, 『データ同化—観測・実験とモデルを融合するイノベーション—』(淡路敏之, 蒲地政文, 池田元美, 石川洋一 編), 96–125, 京都大学学術出版会, 京都.

- Fujii, Y. and Kamachi, M. (2003). A nonlinear preconditioned quasi-Newton method without inversion of a first-guess covariance matrix in variational analyses, *Tellus*, **55A**, 450–454.
- Fujii, Y., Ishizaki, S. and Kamachi, M. (2005). Application of nonlinear constraints in a three-dimensional variational ocean analysis, *Journal of Oceanography*, **61**, 655–662.
- Golub, G. H. and Van Loan, C. F. (1996). *Matrix Computations*, 3rd ed., Johns Hopkins University Press, Baltimore.
- Hoffman, R. N. and Kalnay, E. (1983). Lagged average forecasting, an alternative to Monte Carlo forecasting, *Tellus A*, **35**, 100–118.
- Houtekamer, P. L., Lefaiivre, L., Derome, J., Ritchie, H. and Mitchell, H. L. (1996). A system simulation approach to ensemble prediction, *Monthly Weather Review*, **124**, 1225–1242.
- Ito, S., Nagao, H., Yamanaka, A., Tsukada, Y., Koyama, T., Kano, M. and Inoue, J. (2016). Data assimilation for massive autonomous systems based on a second-order adjoint method, *Physical Review E*, **94**(4), 043307.
- Kobayashi, S., Kosaka, Y., Chiba, J., Tokuhiro, T., Harada, Y., Kobayashi, C. and Naoe, H. (2021). JRA-3Q: Japanese reanalysis for three quarters of a century, *WCRP-WWRP Symposium on Data Assimilation and Reanalysis/ECMWF Annual Seminar 2021*.
- 栗原幸雄, 桜井敏之, 倉賀野連 (2006). 衛星マイクロ波放射計, 衛星赤外放射計及び現場観測データを用いた全球日別海面水温解析, *測候時報*, **73**, S1–S18.
- Le Dimet, F.-X., Navon, I. M. and Daescu, D. N. (2002). Second-order information in data assimilation, *Monthly Weather Review*, **130**, 629–648.
- Liu, D. C. and Nocedal, J. (1989). On the limited memory BFGS method for large scale optimization, *Mathematical Programming*, **45**, 503–528.
- Lorenz, A. C. (1988). Optimal nonlinear objective analysis, *Quarterly Journal of Royal Meteorological Society*, **114**, 205–240.
- Lorenz, E. N. (1963). Deterministic nonperiodic flow, *Journal of Atmospheric Science*, **20**, 130–141.
- Lorenz, E. N. (1972). Predictability: Does the flap of a butterfly’s wings in Brazil set off a tornado in Texas?, *Proceedings of 139th Meeting of AAAS Section on Environmental Sciences, New Approaches to Global Weather: GARP*, p.5, American Association for the Advancement of Science, Cambridge, Massachusetts.
- McLay, J., Bishop, C. H. and Reynolds, C. A. (2008). Evaluation of the ensemble transform analysis perturbation scheme at NRL, *Monthly Weather Review*, **136**, 1093–1108.
- Molteni, F., Buizza, R., Palmer, T. and Petroliagis, T. (1996). The ECMWF ensemble prediction system: Methodology and validation, *Quarterly Journal of Royal Meteorological Society*, **122**, 73–119.
- Niwa, Y. and Fujii, Y. (2020). A conjugate BFGS method for accurate estimation of a posterior error covariance matrix in a linear inverse problem, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **146**, 3118–3143.
- 丹羽洋介, 藤井陽介 (2022). 共役ベクトルと BFGS 公式を用いた解析誤差共分散行列の導出, *統計数理*, **70**(2), 195–208.
- Nocedal, J. (1980). Updating quasi-Newton matrices with limited storage, *Mathematical Computing*, **35**, 773–782.
- Nocedal, J. and Wright, S. J. (2006). *Numerical Optimization*, 2nd ed., Springer, New York.
- Palmer, T. N., Alessandri, A., Andersen, U., Cantelaube, P., Davey, M., Delecluse, P., Deque, M., Diez, E., Doblas-Reyes, F. J., Feddersen, H., Graham, R., Gualdi, S., Gueremy, J.-F., Hagedorn, R., Hoshen, M., Keenlyside, N., Latif, M., Lazar, A., Maisonnave, E., Marletto, V., Morse, A. P., Orfila, B., Rogel, P., Terres, J.-M. and Thomson M. C. (2004). Development of European multimodel ensemble system for seasonal-to-interannual prediction (DMETER), *Bulletin of the American Meteorological Society*, **85**, 853–872.
- Sasaki, Y. (1970). Some basic formalisms in numerical variational analysis, *Monthly Weather Review*,

- 98**, 875–883.
- Shutts, G. (2005). A kinetic energy backscatter algorithm for use in ensemble prediction systems, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **131**, 3079–3102.
- Toth, Z. and Kalnay, E. (1997). Ensemble forecasting at NCEP and the breeding method, *Monthly Weather Review*, **125**, 3297–3319.
- Tsuyuki, T. and Miyoshi, T (2007). Recent progress of data assimilation methods in meteorology, *Journal of the Meteorological Society of Japan*, **85B**, 331–361.
- Usui, N., Fujii, Y., Sakamoto, K. and Kamachi, M. (2015). Development of a four-dimensional variational assimilation system for coastal data assimilation around Japan, *Monthly Weather Review*, **143**, 3874–3892.



## Ensemble Member Generation Based on the BFGS Formula in a Variational Data Assimilation System

Yosuke Fujii<sup>1,2,3</sup>, Takuma Yoshida<sup>2,1</sup> and Yutaro Kubo<sup>2,1</sup>

<sup>1</sup>Meteorological Research Institute, Japan Meteorological Agency

<sup>2</sup>Numerical Prediction Development Center, Japan Meteorological Agency

<sup>3</sup>The Institute of Statistical Mathematics

This paper proposes a method to generate a perturbation for ensemble predictions using information on the gradient of the cost function obtained during optimization in a variational data assimilation system in which a quasi-Newton method, the Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno (BFGS) formula, is used for optimizing the analysis variables. The proposed method generates perturbations as a linear combination of the approximated dominant singular vectors of the operator into which model and observation operators are combined, and it can approximate the analysis (posterior) error variance–covariance matrix. As a practical example, we show the perturbations on oceanic initial conditions generated by the global ocean data assimilation system in the coupled atmosphere–ocean prediction system at the Japan Meteorological Agency. We also demonstrate a result of evaluating the effect of using the perturbations in ensemble predictions with the coupled atmosphere–ocean prediction system.