

統計数理

第70巻第2号

(通巻136号)

PROCEEDINGS OF THE INSTITUTE OF STATISTICAL MATHEMATICS

目次

特集「データ同化の方法」

「特集 データ同化の方法」について	
上野 玄太	129
雲解像粒子フィルタを用いた積乱雲の非ガウス性に関する研究 [研究詳解]	
川畑 拓矢・上野 玄太	133
データ同化を用いたオーロラ活動指数の推定 [原著論文]	
三好 由純・上野 玄太・山本 凌大・町田 忍・能勢 正仁・塩田 大幸・中村 紗都子 ..	153
アンサンブルカルマンフィルタにおける変数局所化を利用した気象場と大気濃度場の同時データ同化 [原著論文]	
関山 剛・梶野 瑞王	165
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 [総合報告]	
石橋 俊之	181
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 [研究ノート]	
丹羽 洋介・藤井 陽介	195
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 [原著論文]	
藤井 陽介・吉田 拓馬・久保 勇太郎	209
アンサンブルを用いた変分法データ同化と計数データのための拡張 [研究ノート]	
中野 慎也	235
シグネチャ法入門 [研究詳解]	
杉浦 望実	251

2022年12月

大学共同利用機関法人 情報・システム研究機構 統計数理研究所

〒190-8562 東京都立川市緑町 10-3 電話 050-5533-8500(代)

本号の内容はすべて <https://www.ism.ac.jp/editsec/toukei/> からダウンロードできます

ISSN 0912-6112

統計数理

PROCEEDINGS OF THE INSTITUTE OF STATISTICAL MATHEMATICS

第70巻 第2号

2022

統計数理

Vol. 70, No.2

PROCEEDINGS OF THE INSTITUTE OF STATISTICAL MATHEMATICS

(a)	(b)	(c)	(d)
w/o concentration DA (STD)	Independent DA (TEST1)	Variable-localized DA (TEST2)	All-simultaneous DA (TEST3)
濃度 風速 気温 気圧 湿度	濃度 風速 気温 気圧 湿度	濃度 風速 気温 気圧 湿度	濃度 風速 気温 気圧 湿度
濃度 0 0 0 0 0	濃度 0 0 0 0 0	濃度 0 0 0 0	濃度
風速 0	風速 0	風速	風速
気温 0	気温 0	気温 0	気温
気圧 0	気圧 0	気圧 0	気圧
湿度 0	湿度 0	湿度 0	湿度

統計数理研究所

統計数理

(年2回発行)

編集委員長 船渡川 伊久子

編集委員 瀧澤 由美

三分一 史和

持橋 大地

矢野 恵佑

吉本 敦

特集担当編集委員 上野 玄太

中野 慎也

編集室

池田 広樹

長嶋 昭子

脇地 直子

「統計数理」は、統計数理研究所における研究成果を掲載する統計数理研究所「彙報」として1953年に歴史を始め、1985年に誌名を変更し今の形となりました。現在は、統計数理研究所の研究活動に限らず、広く統計科学に関する投稿論文を掲載し、統計科学の深化と発展、そして統計科学を通じた社会への貢献を目指しています。

投稿を受け付けるのは、次の6種です。

- a. 原著論文
- b. 総合報告
- c. 研究ノート
- d. 研究詳解
- e. 統計ソフトウェア
- f. 研究資料

投稿された原稿は、編集委員会が選定・依頼した査読者の審査を経て、掲載の可否を決定します。投稿規程、執筆要項は、本誌最終頁をご参照ください。

また、上記以外にも統計科学に関して編集委員会が重要と認める内容について、編集委員会が原稿作成を依頼することがあります。

その他、「統計数理」に関するお問い合わせは、各編集委員にお願いします。

All communications relating to this publication should be addressed to associate editors of the Proceedings.

大学共同利用機関法人 情報・システム研究機構

統計数理研究所

〒190-8562 東京都立川市緑町10-3 電話050-5533-8500(代)

<https://www.ism.ac.jp/>

© The Institute of Statistical Mathematics 2022

印刷：笹氣出版印刷株式会社

PROCEEDINGS OF THE INSTITUTE OF STATISTICAL MATHEMATICS

Vol. 70, No. 2

Contents

Special Topic: Methodology of Data Assimilation

On the Special Topic "Methodology of Data Assimilation" Genta UENO	129
Non-Gaussianity on Cumulonimbus Prediction Using a Particle Filter at Storm-scale Takuya KAWABATA and Genta UENO	133
Forecasting Auroral Activity Using Data Assimilation Yoshizumi MIYOSHI, Genta UENO, Ryota YAMAMOTO, Shinobu MACHIDA, Masahito NOSE, Daikou SHIOTA and Satoko NAKAMURA	153
Simultaneous Data Assimilation of Meteorological Fields and Atmospheric Concentration Fields Using Variable Localization in the Ensemble Kalman Filter Tsuyoshi Thomas SEKIYAMA and Mizuo KAJINO	165
Background Error Covariance Matrix Factorization in Variational Data Assimilation for Atmospheric State Analysis Toshiyuki ISHIBASHI	181
Estimation of a Posterior Error Covariance Matrix Using Conjugate Vectors and the BFGS Formula Yosuke NIWA and Yosuke FUJII	195
Ensemble Member Generation Based on the BFGS Formula in a Variational Data Assimilation System Yosuke FUJII, Takuma YOSHIDA and Yutaro KUBO	209
Ensemble-based Variational Data Assimilation Approach and Its Extension for Count Data Shin'ya NAKANO	235
Introduction to the Signature Method Nozomi SUGIURA	251

December, 2022

Research Organization of Information and Systems

The Institute of Statistical Mathematics

10-3 Midori-cho, Tachikawa, Tokyo 190-8562, JAPAN

表紙の図は本誌170ページを参照

「特集 データ同化の方法」について

上野 玄太^{1,2,3} (オーガナイザー)

データ同化は、観測データを用いてシミュレーションを改善する方法である。「データ同化」という言葉は、シミュレーションありきの前提で定義され意味を持つ。データ同化をしないのが通常のシミュレーションであり、データ同化の操作を追加することでシミュレーションの精度を改善することが可能になる。

この改善の方法にも歴史があり、古くはシミュレーションによる変数の計算結果を観測データと置き換えた上で、予報の計算を進めるといった素朴なものであった。観測データで置き換えるのだからその時点の変数の値としては完璧で、それゆえその後の予報の精度も高い、とはならないところが悩ましいところである。その理由は、シミュレーションが実際の現象を表現するには力不足であるから、また、観測データには誤差が含まれるからである。そのため、一度に置き換えずに複数の時間ステップに分割し徐々に置き換える方法、そして現在主流であるベイズ的なアプローチへと変遷を遂げてきた。

データ同化の実行に際しては、計算コストやシミュレーションの複雑さなどに応じて、いくつかのアルゴリズムがある。実装が平易なアンサンブルカルマンフィルタ、超大規模なシミュレーションも扱える4次元変分法、非線形性の強い現象にも柔軟に対応する粒子フィルタなどが代表的である。アンサンブルカルマンフィルタ・粒子フィルタは各時点の状態の周辺分布を推定するためのアルゴリズム、4次元変分法は全時点の状態の同時分布のMAP解を得るためのアルゴリズムである。

国内でデータ同化の教科書が続けて出版された(露木・川畑, 2008; 淡路 他, 2009; 樋口, 2011) 時期から10年が経ち、データ同化の利用者や応用分野の拡大が見られる。本号では、現在のデータ同化の方法についての記事を特集した。

川畑論文、三好論文は、粒子フィルタによるデータ同化を扱っている。シミュレーションは一般的に非線形微分方程式に立脚しているため、非線形状態空間モデルの状態推定の問題としてとらえ、粒子フィルタを適用することは自然である。アンサンブルカルマンフィルタのようにみなしガウス分布のような便宜的な操作を施さず、シミュレーションによる状態変数の非線形発展をそのまま生かす粒子フィルタの特徴は魅力である。しかし、粒子フィルタにより適切に状態推定を行うためには粒子数 N を大きくとる必要があることから、大きな計算コストが要求されることが問題である。川畑論文は、観測ノイズの共分散行列を動的に推定した上で粒子フィルタを実施する方法を提案するとともに($N = 1000$)、得られる確率分布の解析の方法についても述べている。三好論文は、計算コストを要しないシミュレーションを採用することで、粒子フィルタの適用に加え、より大きい粒子数を必要とする粒子スムーザを適用し($N = 10000$)、推定されたシミュレーション内のパラメータの時間変化の物理的考察につなげ

¹ 統計数理研究所：〒190-8562 東京都立川市緑町 10-3

² 総合研究大学院大学 複合科学研究科統計科学専攻：〒190-8562 東京都立川市緑町 10-3

³ データサイエンス共同利用基盤施設 データ同化研究支援センター：〒190-0014 東京都立川市緑町 10-3

ている。

アンサンブルカルマンフィルタは変数の分布をガウス分布とみなして推定を行うことで、粒子フィルタより少ない粒子数 N (アンサンブルメンバー数と同義) でも精度が向上しやすい。 $N = 200$ でのアンサンブル計算が可能であれば、アンサンブルカルマンフィルタがそのまま有効に機能すると予想する。 N が十分ではない (100 以下) 場合は、アンサンブル共分散行列にサンプリング誤差が含まれることを考慮して、見せかけの相関を小さくする共分散局所化の操作を追加して対処する。相関関係を認めるのは地理的に近い場所で定義された変数間に限定し、離れた2地点の変数間の相関 (共分散) は積極的に減少させることで、データ同化の効果が適切に得られるようにする操作である。樋口 (2011) による記法を用いれば、一期先予測のアンサンブル共分散行列 $\hat{V}_{t|t-1}$ の代わりに、地理的な距離に応じて減衰する共分散関数 ρ を作用させた $\rho \circ \hat{V}_{t|t-1}$ を用いてフィルタの操作を行うことに対応する (\circ は要素積)。関山論文では、 $N = 20$ でアンサンブルカルマンフィルタを実施するに際して、この共分散局所化の考え方を進めて、変数局所化を検討している。変数局所化とは、物理法則上関連が低い変数間の相関をゼロとする操作である。

4次元変分法では、MAP解を得るために同時分布の最大化と同値な目的関数の最小化問題を解く。これは非線形最適化を行うことに相当し、準ニュートン法や共役勾配法が用いられることが多い。このような勾配法のアルゴリズムを用いて、より少ない反復回数で解への収束を達成するには、変数変換をして目的関数のヘッセ行列の条件数を1に近づける、いわゆる前処理が有効である。勾配の計算にはシミュレーションの時間積分が必要であるため、シミュレーションが超大規模であるという理由で4次元変分法を選択している場合は特に、反復回数の減少は重要である。前処理には、背景誤差共分散行列 (B と書かれることが多い (露木・川畑, 2008; 淡路 他, 2009) が、樋口 (2011) の記法では4次元変分法の場合は $V_{1|0}$ 、3次元変分法の場合は $V_{t|t-1}$ である) の平方根行列 U を用いることが多い。石橋論文は、背景誤差共分散行列を予測アンサンブル共分散行列と局所化を用いて $\rho \circ \hat{V}_{t|t-1}$ と設定する場合に、 $\rho \circ \hat{V}_{t|t-1} = UU'$ を満たす U の一般的な定式化のレビューである。

さて、4次元変分法はMAP解を得ることに注力したおかげで超大規模なシミュレーションに対してもデータ同化を可能にしたが、MAP解 x_t^* 以外の確率分布の情報は得られない。しかし、MAP解以外の情報、具体的には、MAP解周りの分散・共分散の情報は特に望まれる。丹羽論文では、4次元変分法でMAP解を推定する際に用いる準ニュートン法 (BFGS 公式) のアルゴリズムで用いる変数の利用により、副次的にMAP解周りの状態変数の共分散行列を推定する方法を紹介している。この行列は、線形ガウス状態空間モデルの場合はフィルタ共分散行列 $V_{t|t}$ に対応するものである (このとき、MAP解 x_t^* はフィルタ平均ベクトル $x_{t|t}$ と一致する)。藤井論文では、アンサンブルメンバー $x_{t|t}^{(i)}$ を、同じく準ニュートン法 (BFGS 公式) を用いて生成する方法を提案している。アンサンブルメンバーはデータ同化以降時点のアンサンブル予報に利用できるが、予報の時間積分には計算コストがかかるため、予報結果が散らばるメンバーを優先的に生成し、予報幅を得たいという狙いがある。

一方、アンサンブルカルマンフィルタは、観測モデルがガウス分布でない分布で表現されている場合には原理的に適用が難しい。中野論文では、観測モデルがポアソン分布で表現される場合を想定し、アンサンブルを用いた4次元変分法のアルゴリズム (同時分布のMAP解を求めるアルゴリズム) を提案している。通常の4次元変分法は、シミュレーションコードに即した勾配計算プログラム (アジョイントコード) を書く必要があるが、アンサンブルを用いる提案法では、シミュレーションコードはブラックボックスとみなして勾配を求め、目的関数の最小化が可能である。

冒頭で述べたように、データ同化はシミュレーションを立脚点として、推定精度・予報精度

を上げるために、フィルタや最適化の手法を取り入れて発展してきた。杉浦論文は、まだデータ同化では取り入れられていない手法として、シグネチャ法の入門を紹介している。シグネチャ法の利用により、系列データおよび経路の視点での観測モデルの設計、目的関数の設定の可能性が示唆されている。

本特集の編集に当たっては、原稿の執筆を引き受けていただいた著者の方々にまずお礼申し上げます。共同研究、共同研究集会で顔を合わせる研究者に声を掛けさせていただいた。同時に、査読者の方々に何よりお礼申し上げます。データ同化は手法と応用分野が交錯する分野であるが、今回は手法に関する記述に重点を置いた特集号とするために、原稿の著者とはやや異なる専門分野の研究者に査読を引き受けていただいた。本特集号で、上野が共著者となっている原稿については、統計数理研究所の中野慎也准教授に編集を協力いただいた。合わせてお礼申し上げます。

参 考 文 献

- 淡路敏之, 蒲地政文, 池田元美, 石川洋一(編著) (2009). 『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—』, 京都大学学術出版会, 京都.
- 樋口知之(編著) (2011). 『データ同化入門』, 予測と発見の科学, 6, 朝倉書店, 東京.
- 露木義, 川畑拓矢(編著) (2008). 『気象学におけるデータ同化』, 気象研究ノート第 217 号, 日本気象学会, 東京.

雲解像粒子フィルタを用いた 積乱雲の非ガウス性に関する研究

川畑 拓矢¹・上野 玄太^{2,3,4}

(受付 2022 年 2 月 10 日 ; 改訂 7 月 12 日 ; 採択 7 月 14 日)

要 旨

積乱雲を陽に解像し、再現可能な気象シミュレーションモデルに対して sampling importance resampling による粒子フィルタを実装した。目的は積乱雲の発生・発達における非ガウス性を評価し、その起源を突き止めることにある。このために統計分布モデルとして、ガウス分布、ガウス混合分布、ヒストグラムの3種を用意し、情報量規準 BIC を用いて客観的な非ガウス性判定を行った。その結果、まず局地前線上端における上昇流が非ガウスとなり、同領域の水蒸気に非ガウス性が伝搬し、積雲の発生、発達に伴い、温位や雲水、雨水も非ガウスとなっていくことが分かった。最終的に積乱雲の発達に伴い、検証領域全体が非ガウスとなり、積乱雲が非ガウスであることを評価できた。さらにその起源が接地境界層における上昇流であることを発見した。

キーワード：粒子フィルタ、非ガウス性、積乱雲、雲解像。

1. はじめに

近年、豪雨の発生回数が増加傾向にあることが報告されている(気象庁, 2021)。豪雨は積乱雲の集合によってもたらされる地上降水であり、構成する積乱雲の水平スケールは 10km 程度、寿命は 1 時間程度である。その発生は大気下層の水蒸気、風速場、安定度などによって決まり、発生後は水蒸気が凝結して水物質(雨、雪、あられなど)を生成するとともに凝結熱を発生することで上昇流が強化され、発達していく。一連のプロセスは非線形およびカオス性が強く、長時間先に対する予測が難しい。

積乱雲の発生・発達を予測するためには、高性能な数値シミュレーションモデルと精度の高い初期値が必要である。精度の高い初期値は、豪雨の要因となる気象要素に対して、さらにその時空間スケールを捉えられる観測データをシミュレーション結果に対して同化することで得られる。

例えば Kawabata et al. (2007) は 10 分ごとの可降水量データと 1 分ごとの気象レーダー動径ベクトルデータを同化することで、積乱雲の発生予測に世界で初めて成功した。これは発生前の大気下層の水蒸気とその水平収束を、両データの同化によって初期値に再現したことによる。

¹ 気象研究所 気象観測研究部：〒305-0052 茨城県つくば市長峰 1-1

² 統計数理研究所：〒190-8562 東京都立川市緑町 10-3

³ 総合研究大学院大学 複合科学研究科統計科学専攻：〒190-8562 東京都立川市緑町 10-3

⁴ データサイエンス共同利用基盤施設 データ同化研究支援センター：〒190-0014 東京都立川市緑町 10-3

また積乱雲の発生・発達プロセスは非線形性が強く、さらに時間的にも急激な変化を伴うため、これに対する観測、予測の誤差は非ガウスを為すと考えられる。天気予報に対して広く用いられているデータ同化システムは、ガウス分布を前提とした観測モデルを設定し、変分法あるいはカルマンフィルタのアルゴリズムで推定しており、このような非ガウス性を扱うことが難しい。

Bocquet et al. (2010)は事前分布における非ガウス性を2種に分類しており、それぞれ予測誤差と観測誤差を起源としている。後者について、非ガウスを為す観測データの典型として降水量データの取り扱いについていくつかの試みが為されている。Koizumi et al. (2005)はその誤差が指数関数に従っていることに着目し、変分法を用いている気象庁現業システムへ導入した。またLien et al. (2013)は非ガウスを為す観測誤差を統計的にガウス変換する手法を開発して、比較的簡単な数値モデルでその効果を実証した。さらにKotsuki et al. (2017)はこの手法を現実的なモデルに適用して降水予報精度の向上を確かめた。

予測誤差の非ガウス性について、例えば非負のみ取り得る状態変数(降水量など)が挙げられ、この場合は対数正規分布を適用することで対応が可能なが多い(例えばAonashi et al., 2021)。しかし限られた種類の統計分布モデルにしか対応できず、広く対応するためには粒子フィルタを用いる必要がある。

van Leeuwen (2009)は地球物理学における粒子フィルタの適用についてまとめている。またPotthast et al. (2019)はドイツ気象局の全球予報システムに粒子フィルタを導入する開発を行っている。これらの研究では全球規模のような大きなスケールを扱っており、積乱雲のようにスケールが小さくかつ変動の大きく、さらに水物質の相変化といった非線形プロセスを含む現象では非ガウス性が卓越すると考えられ、粒子フィルタの必要性がさらに高い。このため、Poterjoy (2016)とPoterjoy et al. (2017)はWRF(Weather Research and Forecasting Model; Skamarock et al., 2008)に対して局所粒子フィルタを開発し、Poterjoy et al. (2019)は現実事例に適用して予測精度の向上を示した。しかしながらこれら現実大気を対象とした先行研究のアンサンブルサイズは数十のオーダーであり、確率密度や非ガウス性を議論するには不十分であった。

非ガウス性を評価する際に、歪度や尖度、カルバック・ライブラー情報量などを計算してその値の大小を議論することが多い(例えばKondo and Miyoshi, 2019; Bocquet et al., 2010)。これらの手法は、客観的にある閾値を超えると非ガウス、下回るとガウスという評価が出来ず、便宜的に決めた閾値をもちいて非ガウスを判定して議論を行っている。本稿で提案する手法は、いくつかの確率分布モデルを用意して、サンプルがどの分布モデルへ最も当てはまるのかを判定するという全く新しいアプローチを取る。これによってガウスよりも当てはまりの良い分布モデルがある場合に非ガウスと定義するために、客観的な分類が可能である。

気象現象は本質的にカオスであり、特に積乱雲のような激しい対流現象はカオス性が強い。積乱雲のカオス性を明らかにすることは、その予測可能性の限界を明らかにすることでもあり、カオス性は非ガウス性と密接な関係がある。Kawabata and Ueno (2020)は、積乱雲を陽に表現できる対流スケールの気象モデルを、さらにアンサンブルサイズ1000で実行し、積乱雲の発生・発達に関する粒子フィルタの性能と非ガウス性について議論した。本稿はこの研究を元にして非ガウス性の評価に焦点を当て、さらに加筆したものである。

2節では本稿で用いる粒子フィルタのシステムについて、3節で非ガウス性評価方法について述べ、4節で実験設定とその結果について、5節で考察とまとめを述べる。

2. NHM-RPF

本稿で用いる粒子フィルタは気象庁非静力学モデル (Japan Meteorological Agency NonHydrostatic Model: JMANHM; Saito et al., 2006, 2007; Saito, 2012) に基づいている。JMANHM は 2017 年まで気象庁で現業的に用いられ、また研究用としても様々な目的に用いられた。さらに本粒子フィルタには Ueno and Nakamura (2016) が提案した観測誤差共分散行列の動的推定 (Adaptive R Estimator: ARE) が組み込まれ、NHM-RPF と呼んでいる。なお ARE によってフィルタ発散を緩和する効果があることが分かっているが本稿では議論しない。

なお NHM-RPF には様々なリモートセンシング観測データを同化するための観測演算子が実装されており、ドップラー動径ベクトル、Global Navigation Satellite Systems (GNSS) による可降水量データ (Kawabata et al., 2007)、GNSS 天頂遅延量、視線遅延量データ (Kawabata et al., 2013; Kawabata and Shoji, 2018)、気象レーダー反射強度データ (Kawabata et al., 2011)、ドップラーライダーデータ (Kawabata et al., 2014)、二重偏波レーダーデータ (Kawabata et al., 2018a, 2018b) などの観測演算子が実装されている。ただしいずれの観測誤差についてもガウス分布を仮定しており、本研究では予測誤差の非ガウス性に焦点を当てる。

粒子フィルタのアルゴリズムは、時間推進演算子と、フィルタリングの二つのパートに分かれている。時間推進演算子として JMANHM を採用しており、2 モーメント雲物理過程や Deardorff 乱流過程 (Deardorff, 1980) など、高解像度シミュレーション用に高度な物理過程を用いた。なお粒子フィルタのアルゴリズムとしては SIR (sampling importance resampling) 法を採用し、(2.5) 式に定義する重みに従ってリサンプリングを行う。

SIR を採用する優位性として、各メンバーの状態変数が時間に連続しているということが挙げられる。すなわちカルマンフィルタや変分法では、データ同化のタイミングで状態変数を最適化するために連続性が失われ、その前後で力学的なバランスが保たれない。SIR では連続しているために、非線形発展を陽に扱うことが出来、カオス性の高い現象解析に極めて有利である。一方で、高次元の状態空間に対する確率分布を有限個のメンバーで表現するため、初期に莫大な数のメンバーを用意しないと長期間のフィルタリングが出来ないことを意味している。

フィルタリングはベイズの定理より

$$(2.1) \quad p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = \frac{p(\mathbf{x})p(\mathbf{y}|\mathbf{x})}{\int p(\mathbf{y}|\mathbf{x})p(\mathbf{x})d\mathbf{x}}$$

となる。ここで $p(\mathbf{x})$ はモデル大気 \mathbf{x} に関する事前確率密度 (probability density function: PDF)、 $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ は観測値 \mathbf{y} に関する尤度を表す。本研究では観測誤差にガウス分布を仮定し、尤度は次のようになる。

$$(2.2) \quad p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^M \sqrt{|\mathbf{R}|}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} [\mathbf{y} - H(\mathbf{x})]^T \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{y} - H(\mathbf{x})] \right\}$$

ここで \mathbf{R} と $||$ はそれぞれ観測誤差共分散行列と行列式を表し、 M は観測データ数を表している。 $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ を求めるために、 $p(\mathbf{x})$ に対する PDF を N 個のメンバーを用いてデルタ関数で離散化するモンテカルロ近似を導入した。

$$(2.3) \quad p(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$$

ここで N はアンサンブルサイズ、 i は個々のメンバーを表している。さらに PDF の事後分布は重み w_i を用いて次のように離散化される。

$$(2.4) \quad p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^N w_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$$

なお w_i はさらに次のように表される.

$$(2.5) \quad w_i = \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{x}_i)}{\sum_{i=1}^N p(\mathbf{y}|\mathbf{x}_i)}$$

これは各メンバーの持つ尤度の全体に対する割合を意味している. この重みを用いて(2.6)式で表される有効粒子数(effective sample size: ESS; 例えば Reich and Cotter, 2015)が計算され, フィルタの安定度を表す.

$$(2.6) \quad M_e = \frac{1}{\sum_{i=1}^N w_i^2}$$

3. 確率分布の非ガウス性評価手法

ここでは, 粒子フィルタによって得られたアンサンブルに複数の確率分布モデルをあてはめ, 適切なモデルを選択することで, アンサンブルが表現する確率分布の形状を分類する. 特徴的な気象現象の前後には, 静穏時とは異なる特有の形状の分布が現れることを期待したものである.

アンサンブル $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N$ はベクトル N 個の集合であるが, ここではベクトルの成分ごとに確率分布モデルをあてはめる. すなわち, 時刻・格子点・物理量(風速などベクトル量は方向成分も)を指定し, それに対応する成分からなる1次元データ $\{x_i\}_{i=1}^N$ に対して, ガウス分布, 2成分ガウス混合分布, ヒストグラムをあてはめる. ガウス分布は, 静穏時に期待される分布, 2成分ガウス混合分布は, 何らかの理由で複数のガウス分布が共存している状況, ヒストグラムは, 以上の2つの確率分布モデルでは表現しづらい分布の検出のために導入するものである.

$\{x_i\}_{i=1}^N$ が互いに独立に得られたものとする, これらの確率分布モデルの対数尤度は, 次のように表される. ガウス分布モデルは, 平均を μ , 分散を σ^2 としたガウス分布の確率密度関数を $\phi(x; \mu, \sigma^2)$ とすると, 対数尤度は

$$(3.1) \quad \ell(\mu, \sigma^2) = \sum_{i=1}^N \log \phi(x_i; \mu, \sigma^2)$$

となる. 2成分ガウス混合分布モデルは, 各分布の混合比を π_1, π_2 , ($\pi_1 + \pi_2 = 1$), 平均を μ_1, μ_2 , 分散を σ_1^2, σ_2^2 として, 対数尤度は次のようになる.

$$(3.2) \quad \ell(\pi_1, \mu_1, \sigma_1^2, \pi_2, \mu_2, \sigma_2^2) = \sum_{i=1}^N \log[\pi_1 \phi(x_i; \mu_1, \sigma_1^2) + \pi_2 \phi(x_i; \mu_2, \sigma_2^2)]$$

ヒストグラムモデルは, 坂元 他(1983)の5.3節で与えられるモデルを一部改変したものをを用いる. 坂元 他(1983)では, 多項分布を用いてヒストグラムの各階級の確率をモデル化している. 階級の総数を J とし, 第 j 階級 ($j = 1, \dots, J$) の確率と度数をそれぞれ P_j, N_j とすると, 観測値として度数 $\{N_j\}_{j=1}^J$ が得られたときの対数尤度は

$$(3.3) \quad \ell(\{P_j\}_{j=1}^J) = \log \frac{N!}{\prod_{j=1}^J N_j!} + \sum_{j=1}^J N_j \log P_j$$

と与えられる(坂元 他, 1983, (5.48)式).

しかしここで、多項分布に基づくヒストグラムモデル((3.3)式)をそのままガウス分布モデル((3.1)式)、2成分ガウス混合分布モデル((3.2)式)と比較するのは適切ではないことに注意する必要がある。その理由は、(3.3)式で与えられるヒストグラムモデルはガウス分布・2成分ガウス混合分布モデルと概念的に同等でないためである。具体的には、第一に、ガウス分布・2成分ガウス混合分布はいずれも確率密度関数であるが、多項分布は確率関数である。第二に、ガウス分布モデル・2成分ガウス混合分布モデルの対数尤度はデータ $\{x_i\}_{i=1}^N$ に基づいて定義されているが、多項分布モデルはデータの集計値である各階級の度数 $\{N_j\}_{j=1}^J$ に基づいている。データ $\{x_i\}_{i=1}^N$ そのものではなく各階級の度数 $\{N_j\}_{j=1}^J$ に基づくことの影響は、全 N 個のアンサンブルメンバーの中から第 j 階級に割り当てられる N_j 個のメンバーを選ぶ組み合わせの自由度が許されることであり、(3.3)式の右辺第1項がその効果を表している。

そこで、ヒストグラムを階段状の確率密度関数とみなしてモデル化することを考える。第 j 階級の範囲を $[a_{j-1}, a_j)$ とし、確率 P_j を階級の幅で割って得られる確率密度 $p_j = \frac{P_j}{a_j - a_{j-1}}$ をモデルのパラメータとする。(3.3)式で $\sum_{j=1}^J P_j = 1$ を満たす確率 P_j を推定する代わりに、 $\sum_{j=1}^J p_j(a_j - a_{j-1}) = 1$ を満たす確率密度 p_j を推定するわけである。このとき、確率密度関数は

$$(3.4) \quad \phi(x; \{p_j\}_{j=1}^J) = \sum_{j=1}^J p_j I(x \in [a_{j-1}, a_j))$$

となる。ここで I は指示関数である。 $\{x_i\}_{i=1}^N$ の独立性を仮定すると、対数尤度は

$$(3.5) \quad \ell(\{p_j\}_{j=1}^J) = \sum_{j=1}^J N_j \log p_j$$

となる。ここで、

$$(3.6) \quad N_j = \sum_{i=1}^N I(x_i \in [a_{j-1}, a_j))$$

と置き、第 j 階級の度数を表していることに注意する。

ヒストグラムモデルの各階級 $[a_{j-1}, a_j)$ ($j = 1, \dots, J$) の設定は、坂元 他 (1983) に倣う。まず $d = \min_{\substack{1 \leq i, j \leq N, \\ x_i \neq x_j}} |x_i - x_j|$ とする。この値はメンバー同士の値の差の最小値(ただし同一の値となる場合は除く)であり、坂元 他 (1983) では精度と呼ばれている。この d を用いて、 N 個のメンバーすべてが含まれる区間 $[\min_{1 \leq i \leq N} x_i - 0.5d, \max_{1 \leq i \leq N} x_i + 0.5d)$ を $c = [2\sqrt{N}] - 1$ 等分($[\]$ はガウス記号で、 $[a]$ は a を超えない最大の整数)し、分点 $\min_{1 \leq i \leq N} x_i - 0.5d = \xi_0 < \xi_1 < \dots < \xi_c = \max_{1 \leq i \leq N} x_i + 0.5d$ を求める。今回は $N = 1000$ であるため、 $c = 62$ となる。この c 個の階級は、刻み幅を最も小さくした場合であるとみなし、以下ではそれらの階級を合併して得られる、より刻み幅を大きくした場合のヒストグラムを考える。いま、階級の総数を $J \leq c$ とし、各階級 $[a_{j-1}, a_j)$ ($j = 1, \dots, J$) の幅は、両端の階級を不等間隔、中央部を等間隔とするヒストグラムを考える。すなわち $a_1 - a_0 = \Delta a_1$, $a_j - a_{j-1} = \Delta a$ ($j = 2, \dots, J-1$), $a_J - a_{J-1} = \Delta a_J$ とする。

全メンバーが同一の値をとる場合には、上で述べたように d を定義することができない。これは珍しい場合ではなく、全メンバーが降水量をゼロと予報した場合などが当てはまる。このような場合の対処策として、デフォルトの d の値として、数値モデルに期待される計算結果の有効数字の桁数を与えておく(観測値を対象とする場合は、観測装置の精度を d とすればよい

だろう)。

対数尤度(3.1), (3.2), (3.5)式の最大化により, 3つの確率分布モデルを推定する。(3.1)式の最大解は解析的に得られる(例えば坂元 他, 1983の(3.26), (3.27)式)。(3.2)式の最大解は, EM アルゴリズムにより得ることができる(例えば中村 他, 1993の第3節)。(3.5)式の最大解は, 付録の(A.6)式に示すように解析的に得られ,

$$(3.7) \quad \hat{p}_j = \frac{N_j}{N(a_j - a_{j-1})} \quad (j = 1, \dots, J)$$

となる。(3.7)式は, 第 j 階級の確率密度が, その階級に入るアンサンブルメンバー数に応じて与えられることを示しており, 仮にその階級に入るメンバーがなければ確率密度はゼロとなる。階級の合併を含めたヒストグラムモデルの推定のプログラムは, 坂元 他 (1983)の III-1「ヒストグラムの自動描画」のプログラムにおいて, 164行目および232行目を

$$\text{AIC} = -2 * (\text{NX}(\text{I}) * \text{LOG}(\text{NX}(\text{I})/(\text{N2} * \text{XN}))) + \text{AIC}$$

から

$$\text{AIC} = -2 * (\text{NX}(\text{I}) * \text{LOG}(\text{NX}(\text{I})/(\text{N2} * \text{XN})/\underline{\text{XX}})) + \text{AIC}$$

へ変更し(下線部が変更分), 446, 447行目の P を P/XX と変更することで得られる。

推定した3つの確率分布モデルのうち, 情報量規準 BIC (Bayesian Information Criterion; Akaike, 1977; Schwarz, 1978)

$$(3.8) \quad \text{BIC} = -2 \max \ell + m \log N$$

の値が最小となるものを, 最も適当な確率分布モデルとして選ぶ。ここで $\max \ell$ は, 各モデルの最大対数尤度である。自由パラメータ数 m は, 正規分布モデルでは自由パラメータが μ, σ^2 であるから $m = 2$, 2成分正規混合分布モデルでは $\pi_1, \mu_1, \sigma_1^2, \pi_2, \mu_2, \sigma_2^2$ に対して $\pi_1 + \pi_2 = 1$ を考慮して $m = 6 - 1 = 5$, ヒストグラムモデルでは $\{p_j\}_{j=1}^J$ に対して $\sum_{j=1}^J p_j(a_j - a_{j-1}) = 1$ を考慮して $m = J - 1$ となる。

なお, 上掲「ヒストグラムの自動描画」のプログラムにおいて, 165行目および234行目を

$$\text{AIC} = \text{AIC} + 2 * \text{IM}$$

から

$$\text{AIC} = \text{AIC} + \text{IM} * \text{LOG}(\text{XN})$$

と変更することで, AIC の代わりに BIC の値が得られる。

4. 観測システムシミュレーション実験

4.1 実験設定

本研究では, 観測システムシミュレーション実験 (Observation System Simulation Experiment: OSSE) を実施した。まず水平解像度 15km で日本全体をカバーする領域(図 1(a))に対して, アンサンブル平均を含む 51 メンバーの NHM 局所アンサンブルカルマンフィルタ (Local Ensemble Transform Kalman Filter: LETKF; Hunt et al., 2004); NHM-LETKF (Kunii, 2014) を 2016 年 8 月 1 日 00UTC から 8 月 3 日 00UTC まで, 同化間隔を 6 時間として実行した。この結果をダウンスケールして解像度 2km で関東領域(図 1(b))を対象とした 51 メンバーの LETKF を 8 月 2 日 12UTC から 3 時間間隔で実行した (LETKF-2km)。いずれも同化した観測データはゾンデなどの conventional data である。さらに 8 月 2 日 21UTC から関東北西部を切

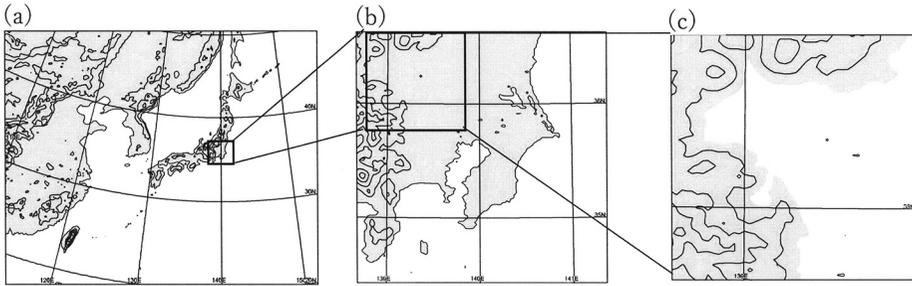


図 1. (a) LETKF 実験領域(15km 解像度), (b) LETKF 実験領域(2km 解像度), (c) OSSE 実験領域(2km 解像度, 48×48 格子), 地形のコンターは 500m 間隔. (Kawabata and Ueno, 2020 より引用.)

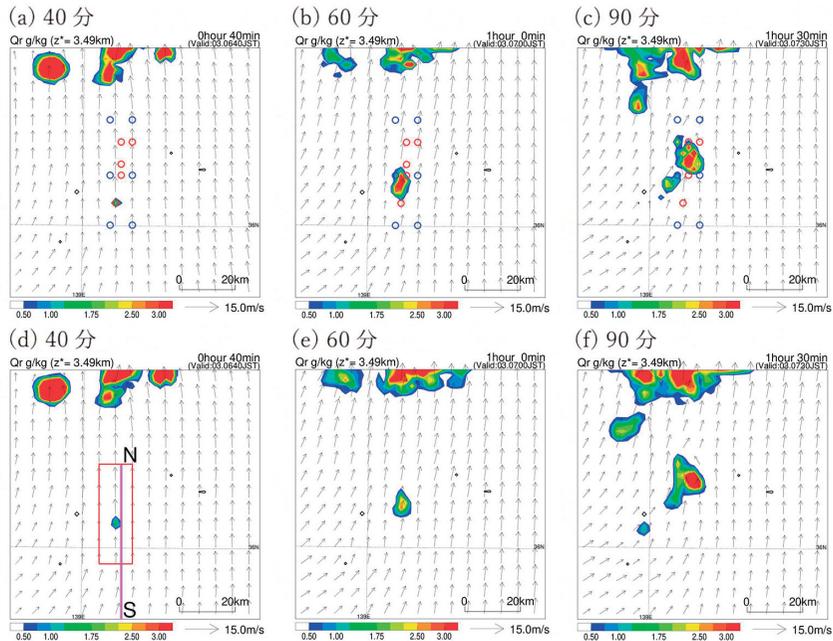


図 2. 上段 (a-c) : Nature run による雨水量混合比 (g kg^{-1}). 高度 3.49km, 時刻は同化開始より 40, 60, 90 分. 下段 (d-f) : NHM-RPF による同化結果(アンサンブル平均). (a) の青丸と赤丸はそれぞれ地上観測データ, レーダー観測データの水平位置. (d) の赤いボックスは図 4, 6, 7 の領域を表し, ピンク線は図 3 と 8 の鉛直断面図線. (Kawabata and Ueno, 2020 より引用.)

り出した領域で解像度 2km のアンサンブル計算を行い, このうちの 1 メンバーを OSSE における nature run として用いた. Nature run では, 実験期間開始 40 分後に雨水が観察され(図 2 (a)), これが発達して 90 分後には成熟した積乱雲となり(図 2(c)), 雲頂も対流圏界面に達した(図略).

同化する観測データは, nature run より生成した. 地上観測データとして, 温位(PT; K), 風(東西成分 U, 南北成分 V; ms^{-1}), 水蒸気混合比(QV; g kg^{-1})を高度 20m に配置し, 気象レー

ダーを模した空中の水物質として雨水量混合比(QR; g kg^{-1})を高度 0.84, 1.94, 3.49, 5.49km に配置した. 図 2(a) に疑似観測データの水平分布を示すが, 積乱雲が発生し, 発達する過程を捉えられる領域とした. また観測誤差として, それぞれの標準偏差を 2.0K , 1.0m s^{-1} , 10.0g kg^{-1} (水蒸気, 雨水とも) に設定し, 正規乱数を誤差として付加した.

NHM-RPF による同化実験は, 1000 メンバーを用い, 8月2日 21UTC から 90 分間である. 1000 メンバーのための初期値・側面境界値は, LETKF-2km の平均を含まない 50 メンバーによる 18, 21UTC における同化結果を一つにまとめて 100 メンバーアンサンブルとして取り扱い, さらにこのアンサンブル集団による平均と共分散を用いて正規分布に従う乱数を生成することで, 900 個の新しいアンサンブルデータを追加作成した. これを第一推定値および側面境界値に用いて, データ同化実験を行った. ここで側面境界値に 900 通りのアンサンブルデータを用いることで, モデル誤差項と同等の効果が期待できる. すなわち同じ初期値から出発しても側面境界値の影響を受けて異なる予測となる. このことは粒子の多様性を確保し, 粒子フィルタの安定性をもたらす.

4.2 結果と考察

4.2.1 発生メカニズム

NHM-RPF によるデータ同化実験では, 対象とする積乱雲の発生(図 2(d))をよく再現し, 発達した後の積乱雲の大きさや強度が nature run と極めて近い結果を得た. 同化しない場合(図略), 発生時刻が遅くなり, 強度が大きく低下する結果であった.

この積乱雲の発生メカニズムを調べるために, 図 2(d) の N-S 線に沿った $d\text{LCL}$ (lifting condensation level: 持ち上げ凝結高度) の鉛直断面図を示す(図 3). $d\text{LCL}$ は, ある気塊が上昇を始める高度と凝結する高度の差として定義される. すなわち小さいほど不安定を表す.

実験開始 10 分後では, 湿った不安定気塊に対して, 南から乾いた安定気塊が吹き寄せており, その上端で上昇流となっている(図 3(a)). 40 分後には局地前線面が 15km ほど北へ移動し, かつ不安定気塊が持ち上げられ, その上端で雨水が発生している. このように本事例における対流の発生は小規模な局地前線の上端から始まっており, これは例えば Iwai et al. (2018) が観測データを用いて示した事例とよく似たメカニズムである.

この局地前線上端に当たる高度 2.82km における各気象要素の水平断面図(10 分ごと)を図 4 に示す. 上昇流については地上との中間点に当たる 1.23km 高度の分布である.

計算開始 10 分後では, 上昇流が存在している地点に対して, 温位が高く, 相対的に乾燥し

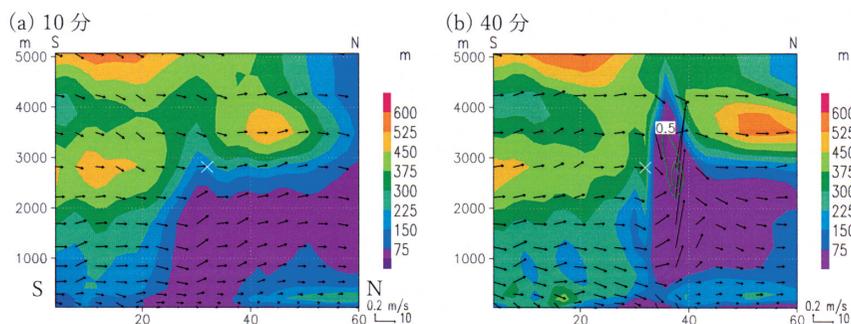


図 3. 図 2(d) ピンク線に沿った鉛直断面図. $d\text{LCL}$ (シェード), 断面図に投影した風 (矢印), 雨水量混合比(緑のコンター). (a) 10 分, (b) 40 分. ×印は図 4 の D グリッドを表す. x 軸は領域南端からの距離 (km). (Kawabata and Ueno, 2020 より引用.)

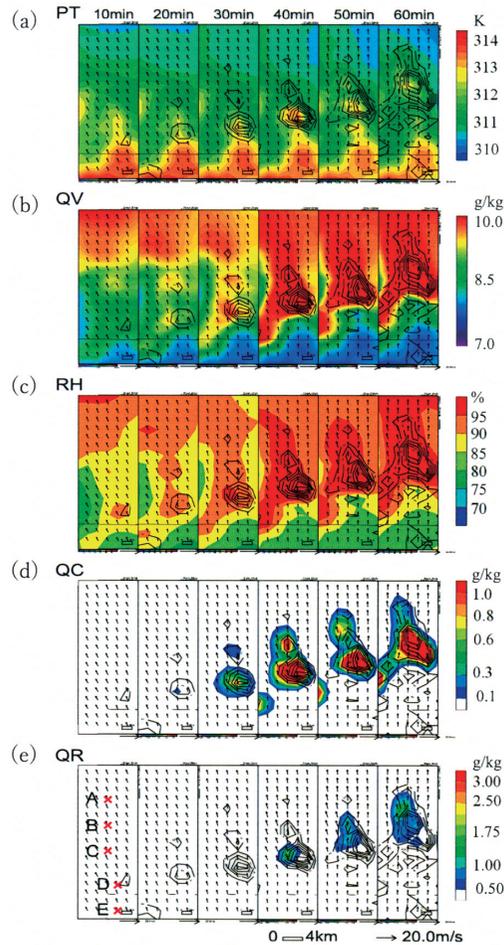


図 4. シェード：高度 2.82km における (a) 温位 (PT), (b) 水蒸気混合比 (QV), (c) 相対湿度 (RH), (d) 雲水量混合比 (QC), (e) 雨水量混合比 (QR) のアンサンブル平均. 図 2 (d) の赤枠内. コンター：高度 1.23km における上昇流 (0.2m s^{-1} 毎). (e) の赤い×は図 5 の A-E に対応. (Kawabata and Ueno, 2020 より引用.)

た気塊が流入している (図 4(a), (b), (c)). そして 20 分後にはこの地点で雲が発生し (図 4(d)), さらに 40 分後に雨水が発生した (図 4(e)). この時刻では, 温位が上がり, 水蒸気が増え, 相対湿度も高くなっている. (図 4(a), (b), (c)). 増加した水蒸気は下層からもたらされ (図 3), 高い温位は水物質の凝結によってもたらされた. この雲は水物質量と面積を拡大しながら北上し, 60 分後には雲頂が高度 8km に達した (図略).

なおこの間, ESS は 200 から 300 で推移し, 80 分後まで 100 を超えており, フィルタが安定して動作したことを表している (図略).

4.2.2 対流発生・発達に関する確率密度

図 4(e) 中の A-E グリッドにおける確率密度 (PDF) を図 5 に示す. これらの各点是对流の発生や発達に関わる地点およびこの領域への流入地点として選択した. なおこれら PDF は事前

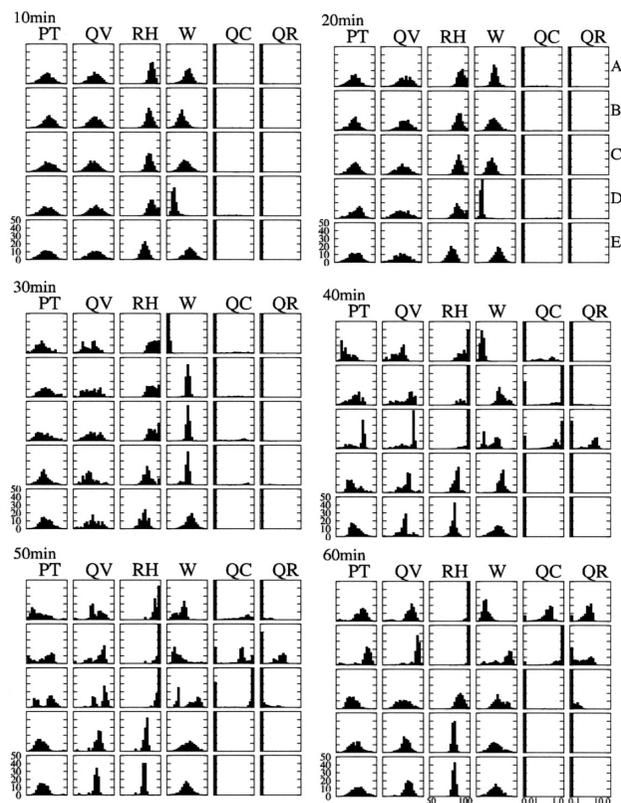


図5. PT, QV, RH, W, QC, QR の A, B, C, D, E (図4(e)参照)グリッドにおける確率密度分布(%). y軸の最大値は50%に設定し, x軸のビンは20個. PT, QV, Wのx軸は最小値から最大値に設定し, RHは50から100%, QCとQRはそれぞれ0.01から 1.0g kg^{-1} , 0.1から 10.0g kg^{-1} の間でかつ対数に設定している. 従ってPT, QV, Wについては対照的な分布であれば平均がx軸の中央に位置することが期待され, RH, QC, QRについてはグリッド, 時刻によって変動することに注意. (Kawabata and Ueno, 2020より引用.)

分布である. これは観測誤差にはガウス分布を仮定しており, これに基づく尤度によってリサンプリングを行った事後分布よりも事前分布の方が非ガウス性が強調されるため, 本研究では事前分布を取り上げている.

実験開始10分後では, PT, QV, 相対湿度(RH), 上昇流(W)についてPDFは概ね正規分布となっているが, QCとQRは凝結のない領域(0g kg^{-1})のみに分布している. このように水物質に関する確率密度は下限値が存在するとともに, 条件が整わないと存在確率が0という性質があり, ガウス近似が有効でない理由となっている. またDグリッドにおけるWのPDFはピークが中央から左に位置しており, 歪んでいる事が分かる. 20分後には, DグリッドにおけるRHが歪み, またQVの分布が広がっている. RHには100%という上限があり, これが一つの原因である.

30分後には, Dグリッドにおけるアンサンブル平均で湿度が95%を超え, 雲水量も 0.5g kg^{-1} を超えた(図4). このような雲の発生と移動に伴い, Cグリッドにおける雲水(QC)のPDFに

においても 0g kg^{-1} より多い QC に対する確率が現れ(高さが 10% 程度の山), RH が 100% のビンに確率が大きくなって, QV, PT とともに二山の確率密度分布を示している. これは湿度 100% を超えた時点で, 水蒸気が雲水に変換されるために QV にもやはり上限が発生し, 凝結熱によって PT が高くなるためである. しかし PT の上限は RH, QV ほど明確には見えない.

40 分になると雲が移動し, C グリッドにおいて 0.5g kg^{-1} 以上の雨水量混合比(図 4)が見られ, PDF においても 1g kg^{-1} 以上の領域(x 軸中央より右側)に分布が見られる. QC に対しては, 1g kg^{-1} の上限に多くの確率密度が達しており, これは B グリッドにおいても同様である. これは JMANHM に採用されている雲物理過程において, 1g kg^{-1} を閾値として雲水を雨水に変換する auto-conversion と呼ばれるスキームが実装されているためである. また B, C グリッドともすべての PDF が非ガウス分布に変化している. すなわち対流の発生過程は極めて非ガウスのであると言える. Wu and Takemi (2021) はここで見られたと同様に雲量の増加と誤差の発達が比例関係にあり, 対流の予測可能性に影響を与えていることを明らかにした. すなわちこのような非ガウス性がカオスを増幅していると言える.

このような過程はまず W から始まり, RH の上限値 100% を起源とする非ガウス性を通じて QV へ伝搬し, 最終的に全変数が非ガウス分布となった. 50-60 分後に掛けて, 発生した積雲は, 積乱雲へ発達しながら北上し, これに伴って非ガウス性も A, B グリッドへ移流した.

これまで述べてきた非ガウス性はモデリングに起因するものと, 自然にそもそも存在するものと 2 種類に分類できる. まず auto-conversion を起因とする非ガウス性は Kondo and Miyoshi (2019) と同様に明らかにモデリング起源である. また解像度 2km は乱流スキームに採用している Deardorff スキームには粗く, 十分に接地境界層を解像できているとは認めがたい. 境界層上端で上昇流が発生し, 積乱雲へと発達するメカニズムは観測的研究 (Iwai et al., 2018) と矛盾がないが, 本研究では非ガウス性が強調されている可能性がある. 次に湿度の上下限や凝結熱の放出は自然に存在し, その誤差分布を議論することは意義深い. ただしそのような評価を行うためには, 本研究のように一つの観測データセットを用いた OSSE では不十分で, 多くの観測データセットを用意する replica 法 (Bishop and Satterfield, 2013) が提案されているが, 計算コストも多大であり, 本研究ではなし得ていない.

ここまで非ガウス性を PDF の形状から主観的に議論してきたが, 3 節で述べた手法を用いて, 客観的に非ガウス性を判定した(図 6). 判定はシミュレーションモデルの各グリッド, 各要素のアンサンブル集合に対して行い, その水平分布を図 6 に示し, アンサンブルスプレッドを図 7 に示す. なお判定結果の一例として, 10 分後の D グリッドにおける W はガウス混合分布, RH はヒストグラム, QV, PT はガウス分布が選ばれた.

W においては, 10 分後の時点ですでに積雲発生地点に周りで非ガウス分布が広がっており, さらにはスプレッドが大きい. 同様に RH でも非ガウス性や大きなスプレッドが見られる. PT や QV については, 10 分後の時点ではほぼ全域でガウス分布が選択されたが, 積雲発生地点付近のスプレッドは周辺より大きい. 従ってスプレッドの大きさと非ガウス性がよく対応するとは限らないことが分かる. また PT の非ガウス性は積雲発生とともにその面積を拡大していくが, 積乱雲が北上した 60 分後には南側からガウス性が回復して行く様子が見られる. PT がガウス性を回復する一方で, QV についてはそうではない. 熱力学的な観点から PT はラグランジュ的に保存する量とされている一方, QV は保存しないとされている. このことが, ガウス性を保存して流入するという今回の観察をもたらししているのか, 今後の調査が必要と考えられる.

PT, QV, W のスプレッドは, そのピークの位置やスプレッドの大きい領域の広がりなど, 非常に良く似通っていて(図 7), さらに QC, RH, W のアンサンブル平均において値の大きな領域, さらには RH の非ガウス性を示した領域とも似通った分布となっている. スプレッドの大

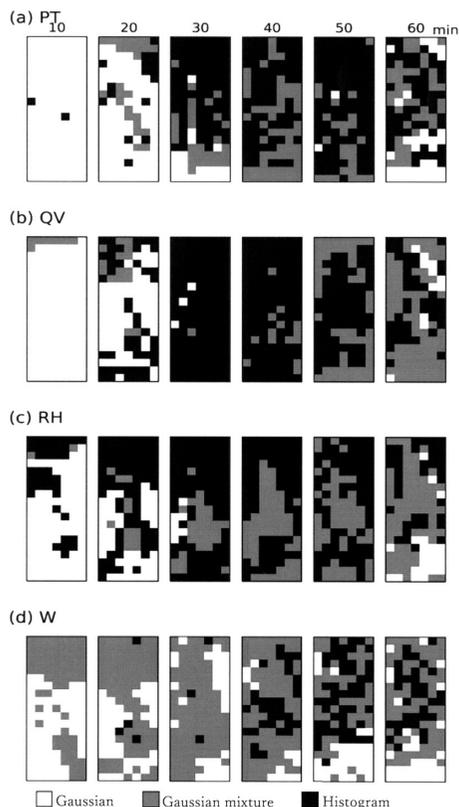


図 6. 高度 2.82km における (a)PT, (b)QV, (c)RH, (d)W に対する選択された統計モデル. 図 4 と同領域. 白, 灰色, 黒はそれぞれガウス, 混合ガウス, ヒストグラムを表す. (Kawabata and Ueno, 2020 を改変.)

きさはメンバーの多様性を表しているが, 各要素間の分布が似通っているということはそれぞれが熱力学的な関係によって強く相関していることを表している. 似通った水平分布ながら, 変数の確率的な側面からガウス分布をなす要素と非ガウスとなる要素があるという現象は興味深い.

非ガウス性がどこから発生しているのか, さらに詳しく調べるために, 図 3 と同じ断面図線に沿った鉛直断面図を示す. この領域には湿った気塊が存在しているが(図 4(b), (c)), そのスプレッドは RH でわずか 2% に満たない. 一方で上昇流は D グリッドにおけるアンサンブル平均で 0.02ms^{-1} に対して, 0.14ms^{-1} のスプレッドであり, 相対的に大きい. また中央値は -0.01ms^{-1} で, 上位 100 メンバーによる平均値は 0.33ms^{-1} である. すなわち少数のメンバーのみが強い上昇流を表している. これは局地前線の位置やタイミングがメンバーによって異なるために生まれた変動であるかもしれない.

D グリッドにおける W と QV の高い相関(図 8(b))が境界層上部に水平に広がっている. また, W は局地前線面を超えて上下に強い自己相関を持っている. これらの事実から, 局地前線面における上昇流が水蒸気を鉛直輸送し, 対流の発生につながったと考えられる. すなわち, W の大きなスプレッドが対流発生 of 大きなスプレッドにつながっており(図 8(a)), 非ガウス性を生じさせたと推測される. このような大きなスプレッドは BIC による統計モデル選択で

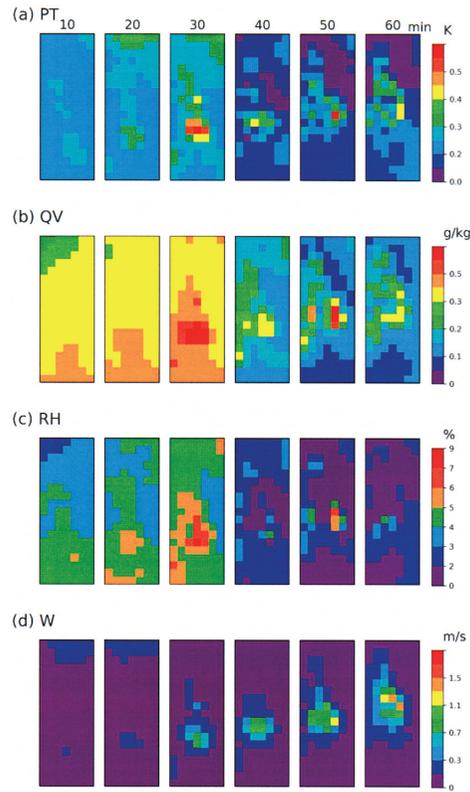


図 7. 図 6 と同じだが各要素のスプレッドを示す。(Kawabata and Ueno, 2020 より引用.)

は非ガウスとなっていることが確認できる(図 8(c)). 特に D グリッドの上下層では非ガウス性が卓越している. すなわち水平分布で確認した非ガウス性の起源であった W は, 鉛直にもその非ガウス性を広げていた.

5. まとめと議論

気象庁非静力学モデルに SIR に基づく粒子フィルタを実装した(NHM-RPF). 本システムの特徴は観測誤差の動的推定によりフィルタ発散を緩和するところにあるが, 本稿の主題が非ガウス性評価にあるので, この効果については触れない.

NHM-RPF を用いて観測システムシミュレーション実験を実施した. 実験は積乱雲の発生前から発達までの 90 分間を対象に, 水平解像度は 2km, アンサンブルサイズは 1000, 同化間隔は 10 分, 地上観測データ, レーダー観測データを模したネットワークを設定した. 第一推定値と比べたところ, 積乱雲の発生・発達予測に対して, 大きく改善した.

非ガウス分布としてガウス混合分布とヒストグラムを用意し, バイズ情報量規準(BIC)を用いてガウス分布より当てはまりのよい分布モデルを判定することで, 客観的にガウス分布ではないグリッドを抽出する手法を開発した. BIC による非ガウス性とスプレッドを併せて議論した.

水平分布から上昇流(W)と相対湿度(RH)に対して, 積雲発生領域で非ガウス性が見られ, そ

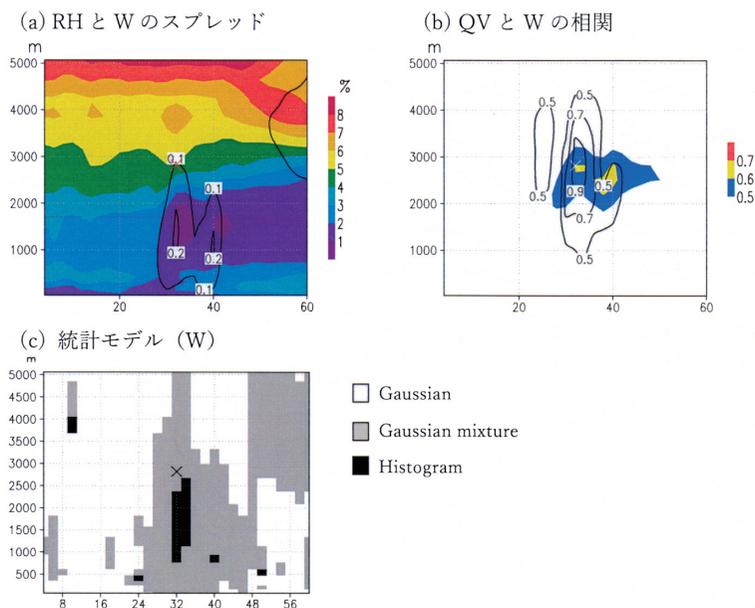


図 8. 図 3 と同じ断面図線に沿った (a)RH のスプレッド(シェード)と W(コンター), (b)QV と W の相関(シェード)と D グリッドからの W の自己相関(コンター), そして(c) W に対する選択された統計モデル. 時刻は実験開始 10 分後. (Kawabata and Ueno, 2020 を改変.)

れぞれスプレッドも大きいことが分かった. 温位 (PT), 水蒸気混合比 (QV) とともにスプレッドが大きい, 非ガウス分布は選択されなかった. この領域は時間とともに拡大し, PT, QV も非ガウスとなった.

積雲発生領域の鉛直断面図から, W の非ガウス性が鉛直方向に分布しており, これによって QV が局地前線上端に輸送され, 積雲発生をもたらしたことが分かった. すなわち局地前線の位置や強度がメンバーによってばらついていることによって生まれたと考えられる W のばらつきが非ガウスとなり, 積乱雲の発達・移動とともに領域全体および全変数が非ガウスとなった. 以上より, 積乱雲の発生・発達の予測プロセスは非ガウスであり, その起源が境界層上部の上昇流にあることが分かった.

本研究では BIC が最小の値を与える統計モデルを最適としているが, それぞれの統計モデルに対する BIC の値が近い値をとり, モデル間の差が小さい格子が存在している. 情報量規準は BIC 以外にも多数提案されており (例えば小西・北川, 2004), 採用する情報量規準によってはこのような格子で選択される統計モデルが入れ替わる可能性がある. 本研究で BIC を採用したのは, 情報量規準値の算出にブートストラップ法のような反復計算が必要なく, 計算コストを抑えられるためである. また気象モデルにおいては 1000 メンバーによるアンサンブルでは実用上サンプリングエラーを無視できることが先行研究によって示されている (Kunii, 2014; Miyoshi et al., 2014; Kondo and Miyoshi, 2016). しかしながらこれはモードが二つしかないガウス分布を仮定した場合であって, 多モードの非ガウス分布に対しては 1000 メンバーでは不足することが予想される. このことも最適な統計モデル判定に対する誤差要因として挙げられる.

さらに本研究における OSSE はガウス分布を仮定した LETKF によるアンサンブルから出発しており、このために図 5, 6 の流入側(南側)でガウスとなっている。しかし、ガウス分布から出発しても非線形性はこれをゆがめ、非ガウスとなる。図 4 と 5 および 6 の比較はこのようなプロセスを表している。さらに非ガウス性が強まってくると、カオス的と言ってよい状況になると考えられる。

従って、非線形性・非ガウス性はカオス性と密接な関係があり、これは予測可能性を決定づけている。本研究において、局地前線面における上昇流が積乱雲の予測可能性を決めていることが示唆された。しかしながら解像度 2km はこのような現象を扱うには大きすぎるかもしれない。今後、数百 m のような高解像度で、かつ積雲発生までに十分に長い実験期間・広い領域を設定して、現実事例で実験を行い、今回と同様の現象が見られるのか、W が非ガウスとなった原因は何なのか調べたい。

謝 辞

本研究は、科学研究費補助金基盤 B「粒子フィルタを用いた積乱雲の発生・発達に関する不確実性の解明」(17H02962)、科学研究費補助金基盤 A「結合データ同化システム開発の方法と応用」(17H00728)、統計数理研究所共同利用プログラム一般研究 2「雲解像非静力学気象モデルを用いた粒子フィルタの開発」(29-共研-1024, 30-共研-2001, 2019-ISMCRP-2028, 2020-ISMCRP-2056, 2021-ISMCRP-2021)、データサイエンス共同利用基盤施設共同利用プログラム一般共同研究「Ensemble Kalman Inversion を用いた洪水確率予測の最適化」ROIS-DS-JOINT(014RP2020)、文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム「防災・減災に資する新時代の大アンサンブル気象・大気環境予測」(JPMXP1020200305) (課題番号: hp200128, hp210166) の助成を受けました。特に科研費参加者の皆様および気象研究所気象観測研究部第 4 研究室の皆様には多くの議論、助言をいただき、深く感謝いたします。また編集委員会および査読者の皆様には多くの有益なコメントをいただき、感謝申し上げます。

付録 A: ヒストグラムモデルの最尤推定量の導出

$\sum_{j=1}^J p_j(a_j - a_{j-1}) = 1$ を考慮して p_J を消去すると、対数尤度(3.5)は

$$(A.1) \quad \ell(\{p_j\}_{j=1}^{J-1}) = \sum_{j=1}^{J-1} N_j \log p_j + N_J \log \frac{1}{a_J - a_{J-1}} \left[1 - \sum_{j=1}^{J-1} p_j(a_j - a_{j-1}) \right]$$

となる。 p_j ($j = 1, \dots, J-1$) が(A.1)式を最大とするための必要条件は

$$(A.2) \quad \frac{\partial \ell}{\partial p_j} = N_j \frac{1}{p_j} - N_J \frac{a_j - a_{j-1}}{1 - \sum_{j=1}^{J-1} p_j(a_j - a_{j-1})} = 0 \quad (j = 1, \dots, J-1)$$

である。(A.2)式の両辺を $(a_j - a_{j-1})$ で割り、 $\sum_{j=1}^J p_j(a_j - a_{j-1}) = 1$ を考慮すると、

$$(A.3) \quad N_j \frac{1}{p_j(a_j - a_{j-1})} = N_J \frac{1}{1 - \sum_{j=1}^{J-1} p_j(a_j - a_{j-1})} = N_J \frac{1}{p_J(a_J - a_{J-1})} \quad (j = 1, \dots, J-1)$$

を得る。(A.3)式の最右辺は j に依存しないから、 K をある定数として、

$$(A.4) \quad N_j \frac{1}{p_j(a_j - a_{j-1})} = K \quad (j = 1, \dots, J)$$

が成り立つことが分かる。ここで、(A.4)式の分母を払い、両辺を $j = 1, \dots, J$ に対して和を取

ると

$$\sum_{j=1}^J N_j = K \sum_{j=1}^J p_j (a_j - a_{j-1})$$

すなわち

$$(A.5) \quad N = K$$

であることから、最尤推定量は(A.4), (A.5)式より

$$(A.6) \quad \hat{p}_j = \frac{N_j}{N(a_j - a_{j-1})} \quad (j = 1, \dots, J)$$

となる。最大対数尤度は(3.5)式に(A.6)式を代入して

$$\begin{aligned} \ell(\{\hat{p}_j\}_{j=1}^J) &= \sum_{j=1}^J N_j \log \frac{N_j}{N(a_j - a_{j-1})} \\ &= \sum_{j=1}^J N_j \log N_j - N \log N - \sum_{j=1}^J N_j \log(a_j - a_{j-1}) \end{aligned}$$

となる。

参 考 文 献

- Akaike, H. (1977). On entropy maximization principle: Applications of statistics, *Proceedings of the Symposium held at Wright State University*, 27–41.
- Aonashi, K., Tashima, T., Kubota, T. and Okamoto, K. (2021). Introduction of a mixed lognormal probability distribution function and a new displacement correction method for precipitation to the ensemble-based variational assimilation of the all-sky microwave imager brightness temperatures, *Journal of the Meteorological Society of Japan*, **99**, 1201–1230, doi:10.2151/jmsj.2021-059.
- Bishop, C. H. and Satterfield, E. A. (2013). Hidden error variance theory. Part I: Exposition and analytic model, *Monthly Weather Review*, **141**, 1454–1468, doi:10.1175/MWR-D-12-00118.1.
- Bocquet, M., Pires, C. A. and Wu, L. (2010). Beyond Gaussian statistical modeling in geophysical data assimilation, *Monthly Weather Review*, **138**, 2997–3023, doi:10.1175/2010MWR3164.1.
- Deardorff, J. W. (1980). Stratocumulus-capped mixed layers derived from a three-dimensional model, *Boundary-Layer Meteorology*, **18**, 495–527, doi:10.1007/BF00119502.
- Hunt, B. R., Kalnay, E., Kostelic, E. J., Ott, E., Patil, D. J., Sauer, T., Szunyogh, I., Yorke, J. A. and Zimin, A. V. (2004). Four-dimensional ensemble Kalman filtering, *Tellus A*, **56**, 273–277, doi:10.3402/tellusa.v56i4.14424.
- Iwai, H., Ishii, S. and Kawamura, S. (2018). Case study on convection initiation associated with an isolated convective storm developed over flat terrain during TOMACS, *Journal of Meteorological Society of Japan*, **96**, 3–23, doi:10.2151/jmsj.2017-014.
- Kawabata, T. and Shoji, Y. (2018). Applications of GNSS slant path delay data on meteorology at storm scales, *Multifunctional Operation and Application of GPS*, 143–168, InTech Open, London, UK, doi:10.5772/intechopen.75101.
- Kawabata, T. and Ueno, G. (2020). Non-Gaussian probability densities of convection initiation and development investigated using a particle filter with a storm-scale numerical weather prediction

- model, *Monthly Weather Review*, **148**, 3–20, doi:10.1175/MWR-D-18-0367.1.
- Kawabata, T., Seko, H., Saito, K., Kuroda, T., Tamiya, K., Tsuyuki, T., Honda, Y. and Wakazuki, Y. (2007). An assimilation and forecasting experiment of the nerima heavy rainfall with a cloud-resolving nonhydrostatic 4-dimensional variational data assimilation system, *Journal of Meteorological Society of Japan*, **85**, 255–276, doi:10.2151/jmsj.85.255.
- Kawabata, T., Kuroda, T., Seko, H. and Saito, K. (2011). A cloud-resolving 4DVAR assimilation experiment for a local heavy rainfall event in the Tokyo metropolitan area, *Monthly Weather Review*, **139**, 1911–1931, doi:10.1175/2011MWR3428.1.
- Kawabata, T., Shoji, Y., Seko, H. and Saito, K. (2013). A numerical study on a mesoscale convective system over a subtropical island with 4D-var assimilation of GPS slant total delays, *Journal of Meteorological Society of Japan*, **91**, 705–721, doi:10.2151/jmsj.2013-510.
- Kawabata, T., Iwai, H., Seko, H., Shoji, Y., Saito, K., Ishii, S. and Mizutani, K. (2014). Cloud-resolving 4D-var assimilation of doppler wind lidar data on a meso-gamma-scale convective system, *Monthly Weather Review*, **142**, 4484–4498, doi:10.1175/MWR-D-13-00362.1.
- Kawabata, T., Bauer, H.-S., Schwitalla, T., Wulfmeyer, V. and Adachi, A. (2018a). Evaluation of forward operators for polarimetric radars aiming for data assimilation, *Journal of Meteorological Society of Japan*, **96A**, 157–174, doi:10.2151/jmsj.2018-017.
- Kawabata, T., Schwitalla, T., Adachi, A., Bauer, H. S., Wulfmeyer, V., Nagumo, N. and Yamauchi, H. (2018b). Observational operators for dual polarimetric radars in variational data assimilation systems (PolRad VAR v1.0), *Geoscientific Model Development*, **11**, 2493–2501, doi:10.5194/gmd-11-2493-2018.
- 気象庁 (2021). 気候変動監視レポート, 気象庁, 東京, <http://www.data.jma.go.jp/cpdinfo/monitor/>.
- Koizumi, K., Ishikawa, Y. and Tsuyuki, T. (2005). Assimilation of precipitation data to the JMA mesoscale model with a four-dimensional variational method and its impact on precipitation forecasts, *Scientific Online Letters on the Atmosphere*, **1**, 45–48, doi:10.2151/sola.2005-013.
- Kondo, K. and Miyoshi, T. (2016). Impact of removing covariance localization in an ensemble Kalman filter: Experiments with 10 240members using an intermediateAGCM, *Monthly Weather Review*, **144**, 4849–4865, <https://doi.org/10.1175/MWR-D-15-0388.1>.
- Kondo, K. and Miyoshi, T. (2019). Non-Gaussian statistics in global atmospheric dynamics: A study with a 10 240-member ensemble Kalman filter using an intermediate atmospheric general circulation model, *Nonlinear Processes in Geophysics*, **26**, 211–225, doi.org/10.5194/npg-26-211-2019.
- 小西貞則, 北川源四郎 (2004). 『情報量規準』, 朝倉書店, 東京.
- Kotsuki, S., Miyoshi, T., Terasaki, K., Lien, G. Y. and Kalnay, E. (2017). Assimilating the global satellite mapping of precipitation data with the nonhydrostatic icosahedral atmospheric model (NICAM), *Journal of Geophysical Research*, **122**, 631–650, doi:10.1002/2016JD025355.
- Kunii, M. (2014). Mesoscale data assimilation for a local severe rainfall event with the NHM-LETKF system, *Weather and Forecasting*, **29**, 1093–1105, <https://doi.org/10.1175/WAF-D-13-00032.1>.
- Lien, G. Y., Kalnay, E. and Miyoshi, T. (2013). Effective assimilation of global precipitation: Simulation experiments, *Tellus A*, **65**, doi:10.3402/tellusa.v65i0.19915.
- Miyoshi, T., Kondo, K. and Imamura, T. (2014). The 10,240-member ensemble Kalman filtering with an intermediate AGCM, *Geophysical Research Letter*, **41**, 5264–5271, <https://doi.org/10.1002/2014GL060863>.
- 中村永友, 小西貞則, 大隅昇 (1993). 混合分布モデルを用いた分類法とデータ構造の色彩表示: LANDSAT 画像データの解析, *統計数理*, **41**, 149–167.
- Poterjoy, J. (2016). A localized particle filter for high-dimensional nonlinear systems, *Monthly Weather Review*, **144**, 59–76, doi:10.1175/MWR-D-15-0163.1.

- Poterjoy, J., Sobash, R. A. and Anderson, J. L. (2017). Convective-scale data assimilation for the weather research and forecasting model using the local particle filter, *Monthly Weather Review*, **145**, 1897–1918, doi:10.1175/MWR-D-16-0298.1.
- Poterjoy, J., Wicker, L. and Buehner, M. (2019). Progress toward the application of a localized particle filter for numerical weather prediction, *Monthly Weather Review*, **147**, 1107–1126, doi:10.1175/MWR-D-17-0344.1.
- Potthast, R., Walter, A. and Rhodin, A. (2019). A localized adaptive particle filter within an operational NWP framework, *Monthly Weather Review*, **147**, 345–362, doi:10.1175/MWR-D-18-0028.1.
- Reich, S. and Cotter, C. (2015). *Probabilistic Forecasting and Bayesian Data Assimilation*. Cambridge University Press, Cambridge, doi:10.1017/CBO9781107706804.
- Saito, K. (2012). The JMA nonhydrostatic model and its applications to operation and research, *Atmospheric Model Applications*, IntechOpen, London, UK, doi:10.5772/35368.
- Saito, K. et al. (2006). The operational JMA nonhydrostatic mesoscale model, *Monthly Weather Review*, **134**, 1266–1298, <https://doi.org/10.1175/MWR3120.1>.
- Saito, K., Ishida, J., Aranami, K., Hara, T., Segawa, T., Narita, M. and Honda, Y. (2007). Nonhydrostatic atmospheric models and operational development at JMA, *Journal of the Meteorological Society of Japan*, **85B**, 271–304, doi:10.2151/jmsj.85B.271.
- 坂元慶行, 石黒真木夫, 北川源四郎 (1983). 『情報量統計学』, 共立出版, 東京.
- Schwarz, G. (1978). Estimating the dimension of a model, *The Annals of Statistics*, **6**, 461–464, doi:10.1214/aos/1176344136.
- Skamarock, W. and Coauthors, et al. (2008). *A Description of the Advanced Research WRF Version 3* [pdf], UCAR/NCAR, doi:10.5065/D68S4MVH.
- Ueno, G. and Nakamura, N. (2016). Bayesian estimation of the observation-error covariance matrix in ensemble-based filters, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **142**, 2055–2080, doi:10.1002/qj.2803.
- van Leeuwen, P. J. (2009). Particle filtering in geophysical systems, *Monthly Weather Review*, **137**, 4089–4114, doi:10.1175/2009MWR2835.1.
- Wu, P. Y. and Takemi, T. (2021). Impact of topography on error growth of moist convection, *Scientific Online Letters on the Atmosphere*, **17**, 134–139, doi:10.2151/sola.2021-024.

Non-Gaussianity on Cumulonimbus Prediction Using a Particle Filter at Storm-scale

Takuya Kawabata¹ and Genta Ueno^{2,3,4}

¹Department of Observation & Data Assimilation, Meteorological Research Institute

²The Institute of Statistical Mathematics

³Department of Statistical Science, School of Multidisciplinary Sciences,
The Graduate University for Advanced Studies, SOKENDAI

⁴Center for Data Assimilation Research and Applications,
Joint Support-Center for Data Science Research (ROIS-DS)

We develop a particle filter with the sampling-importance-resampling algorithm into a storm-scale numerical weather prediction model, which can explicitly resolve cumulonimbus. Our purpose is to investigate the origin of chaos which is caused by non-Gaussianity in initiations and developments of cumulonimbus. For this, we compare the information criterion BIC for three distribution models of Gaussian, Gaussian mixture, and histogram, and select the best model. After that, we objectively determine whether the data follows Gaussian or non-Gaussian distribution. From the result, the updraft in upper area of a local front becomes non-Gaussian first, the non-Gaussianity propagates to water vapor in the same region second. Once cumulus initiates and starts development, other factors like potential temperature, cloud and rain waters become non-Gaussian in sequence. When cumulonimbus becomes mature, whole evaluation area is non-Gaussian, then we see that cumulonimbus is non-Gaussian. From that, we find that the origin of the whole non-Gaussianity is the updraft in the upper region of the local front.

データ同化を用いたオーロラ活動指数の推定

三好 由純¹・上野 玄太²・山本 凌大¹・町田 忍¹・
能勢 正仁¹・塩田 大幸³・中村 紗都子¹

(受付 2022 年 1 月 4 日；改訂 4 月 13 日；採択 4 月 18 日)

要 旨

オーロラは、宇宙空間からの荷電粒子が超高層大気と衝突して起こる発光現象であり、地球周辺の宇宙空間(ジオスペース)の電磁気的な活動を反映して、その動態を様々に変化させる。このオーロラ活動を指標化したものとして、オーロラに伴う電離圏の電流によって変化する地上磁場変化にもとづいたオーロラ活動指数(AU, AL, AE)が広く用いられている。このオーロラ活動指数は、オーロラ活動のみではなくジオスペース全体の電磁気的な変動を反映するものでもあるため、宇宙天気予報の観点から重要な課題である。本研究では、このオーロラ活動指数の高精度予測を目指して、粒子フィルターを用いたデータ同化によるオーロラ活動指数の推定方法を開発した。システムモデルには、先行研究で提案されたオーロラ活動指数の時間発展方程式を用い、AU 指数および同論文で提案されたカップリングパラメータを状態変数ベクトルとしている。また、観測ベクトルとして、オーロラ活動指数の一つである AU 指数を用いている。開発したコードを用いて、1998 年から 2015 年までの期間について、AU 指数のデータ同化計算を行った。データ同化にもとづいてカップリングパラメータを動的に推定することにより、先行研究に比べて AU 指数の再現能力が大きく向上した。また、データ同化によって推定されたカップリングパラメータの解析を行ったところ、カップリングパラメータは季節および年によって値が異なることが明らかとなり、電離圏の電気伝導度の変化の季節、年変化に対応したものである可能性が示唆された。

キーワード：データ同化、粒子フィルター、オーロラ活動予測、宇宙天気予報。

1. はじめに

ジオスペースと呼ばれる地球周辺の宇宙空間では、太陽からのプラズマ流である太陽風と惑星間空間磁場(IMF)が、地球の固有磁場と相互作用することによって、磁気圏と呼ばれる領域を形成している(小野・三好, 2012; Borovsky and Valdivia, 2018)。極域超高層に輝くオーロラは、この磁気圏に存在する電子が超高層大気へ降り込み、高度 100km 付近の大気と衝突することによって起こる発光現象である。特にオーロラが爆発的に輝くときには、高さ 100km 付近の電離圏領域にオーロラジェット電流と呼ばれる水平方向の電流が流れ、その結果、地上の磁場の南北成分も大きく変動する。そのため、極域で地上磁場を観測することによって、オーロラ

¹ 名古屋大学 宇宙地球環境研究所：〒464-8601 愛知県名古屋市中種区不老町

² 統計数理研究所：〒190-8562 東京都立川市緑町 10-3

³ 情報通信研究機構 電磁波研究所：〒184-8795 東京都小金井市貫井北町 4-2-1

の活動度をモニタすることが可能となる。

また、IMFが南を向いた状態がしばらく続くと、磁気再結合を通して、磁気圏や電離圏の活動が活性化し、サブストームと呼ばれる大規模な電磁氣的擾乱現象が発生する。たとえば、サブストームのときには、夜側磁気圏から地球周辺に向かって、高温のプラズマの注入が起こり、その結果として人工衛星の帯電に伴う障害リスクが高まることが指摘されている。また、このサブストームのときには、オーロラが爆発的に輝くとともに、オーロラジェット電流が非常に強くなり、地上の送電線網に影響が及ぶこともある。このようにサブストームは、人類の社会基盤に様々な影響を及ぼす可能性がある。人間活動に密接に関連した宇宙環境の総称を宇宙天気と呼び、その環境変動の予測は宇宙天気予報と呼ばれるが、サブストームの予測、あるいはオーロラ活動度の予測は、このような宇宙天気予報の観点から重要な意義を持つものである。

オーロラの活動の度合いを表す指標として、オーロラジェット電流が起こす地上磁場の変動から算出する、次の3つの指数(AU, AL, AE)がよく使われる(Davis and Sugiura, 1966; WDC, 2005)。AU, AL 指数を表す変数 $AU(t)$, $AL(t)$ は、極域の12箇所の地上磁場観測点で得られた東向き最大のオーロラジェット電流 I_{EMax} , 西向き最大のオーロラジェット電流 I_{WMax} が引き起こす地磁気の時間変動に対応したものであり、磁束密度 nT を単位として持ち、以下のように表される。ここで、 μ_0 は真空の透磁率を表す。

$$AU(t) \propto \mu_0 I_{EMax}$$

$$AL(t) \propto \mu_0 I_{WMax}$$

$$AE(t) = AU(t) - AL(t)$$

このオーロラ活動指数の予測のために、これまで様々なモデルが提案されてきた。そのうち、Goertz et al. (1993)は太陽風とオーロラジェット電流をカップリングした非線形モデルを提案している。このモデルでは、AU 指数は、磁気圏の昼側で IMF と地球磁場との磁気再結合を反映した変数、一方、AL 指数を夜側の磁気圏における電場に対する変化として考えている。さらに、このモデルでは、磁気圏と電離圏の結合は、磁気圏の電場の変化によって起こる電磁流体波(Alfvén 波)によって生じるとしている。Goertz et al. (1993)では、1979年の特定の2日間において、後述の式(2.3)を含む方程式系に基づいた AE 指数の予測を行い、相関係数は約0.9と高精度の予測に成功した。しかし、この Goertz et al. (1993)では、式(2.3)を含む方程式系におけるパラメータを、この2日間に限って最適化しており、そのままでは他の期間にも適用することは難しいことが指摘されている(McPherron and Rostoker, 1993)。

また、AU 指数は driven 過程と呼ばれる太陽風電場によって直接駆動される磁気圏内の物理過程に関わる一方、AL 指数は driven 過程に加えて、磁気圏が太陽風から取り込んで尾部に蓄積し、それを短時間に解放する unloading 過程に関わっていることが知られている(たとえば、Li et al., 2007)。そのため、driven 過程のみを取り入れた Goertz et al. (1993)の研究においては、AL 指数に関する理論的な検討が不十分であることが指摘されている(Baker et al., 1997)。

そこで、本研究では Goertz et al. (1993)によって提案された AU 指数のみを取り上げ、その振る舞いを記述する時間発展方程式に対して、モデルにおけるパラメータをデータ同化によって動的に推定することで、長期間にわたって AU 指数を高精度で予測することを目的とする。さらに、データ同化によって推定されたパラメータの時間変化を分析し、パラメータの意味を議論する。

2. モデルとデータ

2.1 状態空間モデル

本研究においては、次のような非線形・非ガウスのシステムモデル、および非線形・ガウス

の観測モデルとなっている。

$$(2.1) \quad x_t = f_t(x_{t-1} + v_t)$$

$$(2.2) \quad y_t = h_t(x_t) + w_t$$

ここで、 x_t は時刻 t における状態変数ベクトル、 v_t は時刻 t におけるシステムノイズベクトル、 y_t は時刻 t における観測ベクトル、 w_t は時刻 t における観測ノイズベクトルを表す。式 (2.1) は時刻 t のシステムモデルを、また式 (2.2) は時刻 t の観測モデルを示す。これらの状態変数ベクトルおよび観測ベクトルについては後述する。

2.2 システムモデルと観測モデル

本研究では、システムモデルとして、Goertz et al. (1993) が提唱した太陽風の電場 E_y を入力とした AU 指数の変動を計算する微分方程式を用いた。

$$(2.3) \quad \tau_{AD} \frac{dAU_d(t)}{dt} + AU_d(t) = a_1 E_y(t)$$

ここで、 t は時間を表す。また、Goertz et al. (1993) では、direct driven による AU の変化を明示するために、その指数に対応する変数を AU_d としており、本研究もそれに倣った表記を行っている。

本モデルは、太陽風の電場 E_y を入力として、AU 指数の時間変化を出力するものであり、磁気再結合が起こることによって、太陽風の電場が電離圏の電場を発達させるということを、式 (2.3) によって表している。Goertz et al. (1993) によれば、この式において a_1 と τ_{AD} は以下のように与えられる。

$$(2.4) \quad a_1 = \mu_0 g_D \Sigma_{HD} \alpha_{MAX}$$

$$(2.5) \quad \tau_{AD} = T_A \frac{\Sigma_{PD}}{\Sigma_{AD}}$$

ここで、 Σ_{HD} 、 Σ_{PD} 、 Σ_{AD} は、それぞれ昼側のホール電気伝導度、ペダーセン電気伝導度、そして Alfvén 電気伝導度、 T_A は電離圏と磁気圏の間を Alfvén 波が伝搬する時間を示す。また、 α_{MAX} はリコネクション係数の最大値、また g_D は磁気圏境界面の電場が電離圏に投影されるときの比率を表す投影係数を表す。

式 (2.3) の τ_{AD} 、 a_1 はカップリングパラメータであり、それぞれオーロラジェット電流が太陽風電場に応答する時間、および太陽風電場が電離圏に伝搬する割合を表している。本モデルでは、後述するように入力となる E_y の値が負の場合、磁気再結合の効率が極端に低下するため、 E_y の値を強制的に 0 とする。そのため、出力される AU 指数は常に正となるが、実際に観測される AU 指数は極まれに負となる場合もある。そのことを含め、北向き IMF の状態では、本モデルは実際の変化を正しく表現することができない点に注意が必要である。

以上の仮定のもと、Goertz et al. (1993) では、 τ_{AD} 、 a_1 をそれぞれ 70 min、 10^{-13} s/m という値を持つ定数として、1979 年の特定の 2 日間の AU 指数を計算し、相関係数 0.88 と高い精度の推定に成功している。しかし、McPherron and Rostoker (1993) が指摘しているように、ほかの期間については、このパラメータでは常時高い精度が得られるわけではなく、パラメータ自身が時間変化している可能性が考えられる。

本研究では、AU 指数、またカップリングパラメータである a_1 、 τ_{AD} について、式 (2.1) における状態変数ベクトル x_t 、すなわち $x_t = (AU(t), a_1(t), \tau_{AD}(t))$ を考える。システムノイズに関して、 a_1 については 0 から 4.13×10^{-4} s/m、 τ_{AD} については 5 min から 135 min の範囲で設定し、各時刻 t 毎に独立の一様分布として与えている。また、観測された AU 指数を観測ベクトル

ル y_t として用い、観測ノイズの分散としては 100nT^2 を設定している。この AU 指数の時間分解能は 1 分である。

本研究では、式(2.1)、式(2.2)で与えられる状態空間モデルにもとづいて状態ベクトルの予測を行う。そのために、予測分布、フィルター分布、平滑化分布と呼ばれる確率密度分布をデータ同化によって導出する。ここでは、データ同化の計算において、逐次型データ同化の手法の一つである粒子フィルターを用いた(中村 他, 2005)。粒子フィルターは、状態の確率密度分布を多数の粒子でアンサンブル近似する手法であり、他の逐次型データ同化であるアンサンブルカルマンフィルター等とは異なり、非線形・非ガウスの問題にも適用することが可能である。この粒子フィルターを用いて、逐次的に各ステップにおける予測分布、フィルター分布を推定するとともに、粒子 smoother を用いて平滑化分布を導出している。ここでの平滑化区間は 20 分である。実際の計算では、Message Passing Interface (MPI) を用いた並列計算を行ってデータ同化を行い、10000 の粒子を用いて同化を行った。

3. データ同化による AU 指数の予測

本研究では、入力として用いる E_y として太陽風観測衛星である ACE の観測データを用いており、その時間分解能は 1 分である。また、NASA/OMNI-2 データベースを用いることにより、ACE の場所から磁気圏界面までの太陽風伝搬時間は補正されている。なお、Goertz et al. (1993) では、惑星間空間磁場が北向きのときには、磁気再結合の効率が極端に低下して、磁気圏への電場の侵入が起こらないと仮定しているため、本研究でも北向きのときには $E_y = 0$ としている。

本研究では、予測精度の指標として、Mean Absolute Percentage Error (MAPE) を用いた (Kim et al., 2012)。

$$(3.1) \quad MAPE[\%] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{AU_{obs,i} - AU_{pre,i}}{AU_{obs,i}} \right| \times 100$$

ここで、 i は各予測点、 N は予測点数、 $AU_{obs,i}$ は i 番目の AU 指数の観測値、 $AU_{pre,i}$ は、 i 番目の AU 指数の予測値を示す。式(3.1)に示されるように、MAPE の値が小さいほど予測の結果と観測値との差が小さくなり、推定精度が高いことを示している。

図 1 に、2002 年 1 月 14 日の場合について、Goertz et al. (1993) モデルにもとづいて、AU 指数の変動をデータ同化を行った場合、データ同化を行わずに Goertz et al. (1993) のパラメータで計算を行った場合についての結果を示す。図は上から、AU 指数、 a_1 、 τ_{AD} 、 E_y 、 N_{eff} 、MAPE である。まず、AU 指数と E_y を比較すると、太陽風電場が増加するのに伴って、AU 指数も大きくなっているのが分かる。なお、式(2.3)から分かるように、 $E_y < 0$ においては a_1 にはデータ同化の効果は表れていない。このため、図 1 において、 $E_y < 0$ の区間では、 a_1 の表示として事前分布である一様分布の上限と下限が表示されていることに注意されたい。

データ同化を行っていない場合には、観測された AU 指数の細かな変動を推定することはできず、また観測値を再現できていない期間が多い。MAPE による推定精度の評価でも、 $UT = 11 - 17$ で精度が大きく落ちているのが分かる。

一方、データ同化を用いた結果では、AU 指数の細かな変動を推定することができており、MAPE による精度評価においても精度が向上しているのが分かる。また、データ同化によって推定した a_1 、 τ_{AD} は時間とともに変化しており、一定でないことが分かる。Goertz et al. (1993) では、これらの a_1 、 τ_{AD} を一定値として計算を行っていたが、AU 指数の推定精度を高めるためには、 a_1 、 τ_{AD} を動的に変化させる必要があることが分かった。

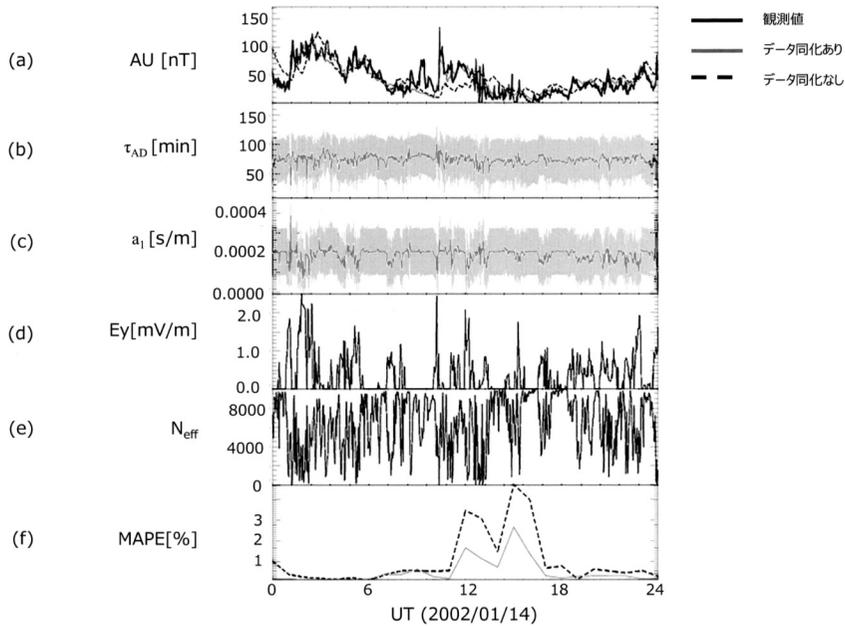


図 1. 2002 年 1 月 14 日の AU 指数についてのデータ同化の例. (a) AU 指数(観測: 黒, データ同化を行った場合: 灰色, データ同化を行わなかった場合: 破線), (b) τ_{AD} の変化. 灰色は平滑化分布の標準偏差を表す. (c) a_1 の変化. 灰色は平滑化分布の標準偏差を表す. (d) 太陽風電場 E_y , (e) Effective sampling size の時間変化, (f) MAPE の時間変化. データ同化を行った場合: 灰色, データ同化を行わなかった場合: 破線.

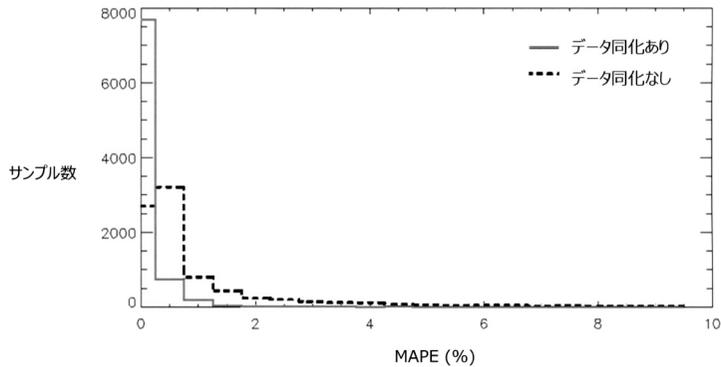


図 2. 2002 年の AU 指数について, データ同化を行った場合(灰色), 行わなかった場合(黒)の推定結果についての MAPE の頻度分布.

次に, 2002 年の 1 年間の AU 指数を推定した結果について, データ同化を行った場合と行わなかった場合についての MAPE の 1 時間平均の分布を, 図 2 として示す. 図 1 で示したのと同様に, 粒子フィルターを用いたことで MAPE が小さく, すなわち推定精度が向上していることが分かる.

また, 粒子フィルターを用いる前のオーロラ活動指数の推定値と観測値に対して, 1 日ごとの両者の相関係数のヒストグラムを図 3 に示す. MAPE 同様, 相関係数による比較でも, デー

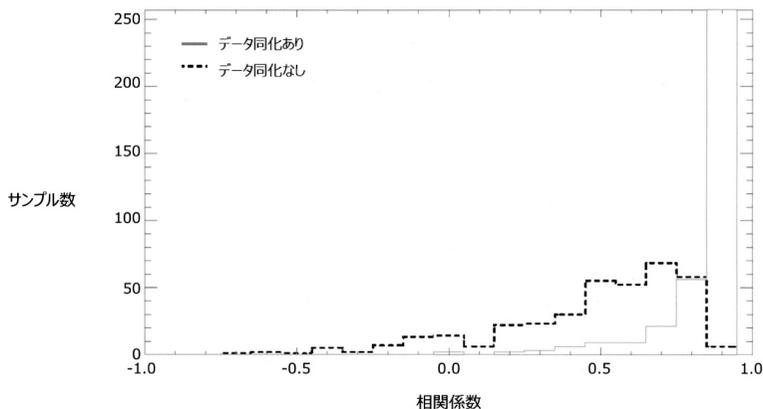


図 3. 2002 年の AU 指数について、データ同化を行った場合(灰色)、行わなかった場合(黒)の推定結果について、1 日の時間変化についての観測値との相関係数の分布。

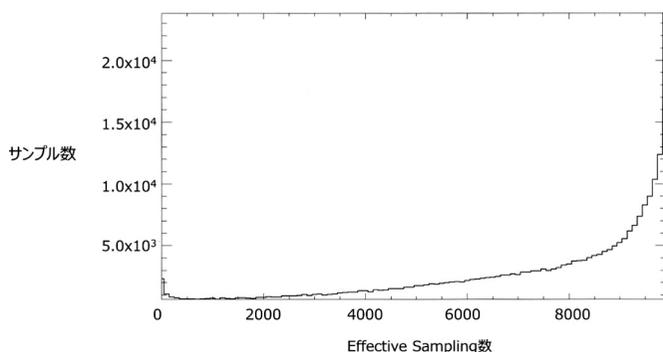


図 4. 2002 年の AU 指数についての Effective sampling size の分布。

タ同化を行ったことで推定精度が向上していることが分かる。このようにデータ同化を行ったことで、高精度の AU 指数変動の推定が可能となるとともに、図 1 に示すように Goertz et al. (1993) モデルに用いられているカップリングパラメータの時間変化の推定が可能となった。

なお、粒子フィルターにおいては、しばしば状態の縮退(退化)が問題となる(樋口 編著, 2009)。ここでは、退化が起きていないかを確認する手法として、Effective sampling size(実効粒子数)(Liu and Chen, 1995)を用いた。Effective sampling size(N_{eff})は、式(3.2)のように与えられる。

$$(3.2) \quad N_{eff} = \frac{1}{\sum_{i=1}^N w_i^2}$$

ここで、 N は全粒子数、 w_t^i は時刻 t における i 番目の粒子の規格化尤度を表す。

N_{eff} が大きいほど、その時刻の粒子分布は広がりを持っていると考えることができ、推定したパラメータの信頼度は高いといえる。一般的に、 $N_{eff} \geq \frac{1}{3}N$ であれば、退化は起こっていないと考えられる(Liu and Chen, 1995)。推定したパラメータの信頼性を評価するために、図 4 に N_{eff} を示す。 N_{eff} の平均値は 7200 程度であり、全粒子数の $\frac{1}{3}$ 以上であるので、退化問題は起こっていないと考えられる。

4. データ同化による AU 指数の長期推定

次に、太陽風を観測している ACE 衛星のデータを利用できる 1998 年から 2015 年について、AU 指数の長期変化について、データ同化を行った結果を示す。

図 5 および図 6 は、それぞれデータ同化から推定された a_1, τ_{AD} の月平均値、およびその月平均値の時系列に対して、STL (Seasonal Decomposition of Time Series by Loess) を用いて、季節成分、長期成分および残差に分解した結果である。STL は、時系列データを季節成分、トレンド (長期) 成分、残差成分の和のモデルとして考えたときに、LOESS 平滑化 (Locally Estimated Scatterplot Smoothing) と呼ばれるノンパラメトリック回帰モデルを用いて分解する手法である。

STL によって分解された季節成分を見ると、 a_1, τ_{AD} とも北半球の夏に高く、冬に低くなるという傾向があることが見出された。また、長期成分においては、 a_1 は 1998 年から 2005 年までは 2 年周期のような変動がみられ、2006 年-2011 年にかけては値が増大しているのが分かる。 τ_{AD} は 2001 年に極大期があり、2010 年に極小期、再び 2015 年に極大期があるのが分かる。

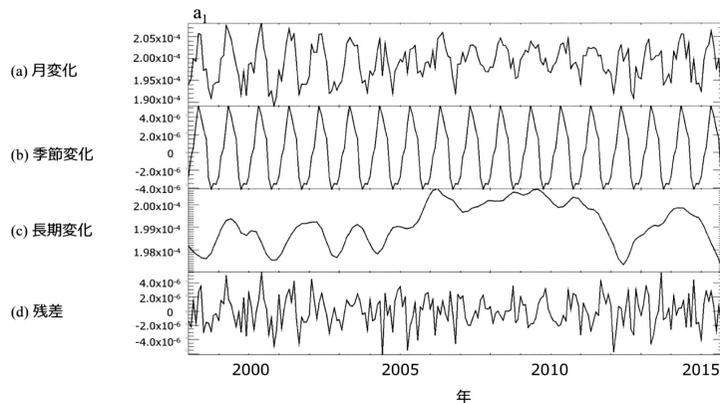


図 5. データ同化で推定した a_1 の 1998 年から 2015 年における長期変化。(a) 月平均、(b) 季節変化、(c) 長期変化、(d) 残差。

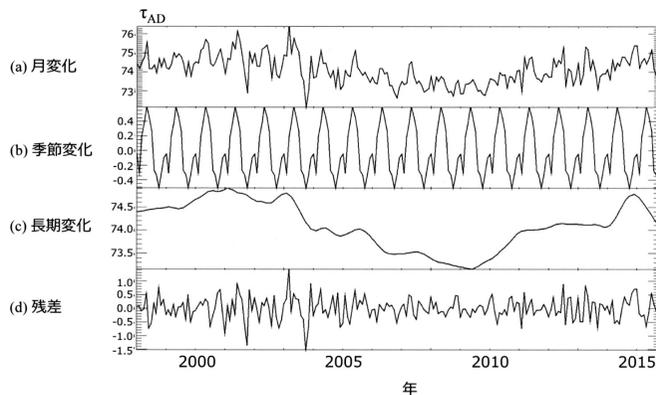


図 6. データ同化で推定した τ_{AD} の 1998 年から 2015 年における長期変化。(a) 月平均、(b) 季節変化、(c) 長期変化、(d) 残差。

a_1, τ_{AD} は、それぞれ式(2.4)、式(2.5)で表され、両パラメータとも電離圏の電気伝導度 (Σ_{HD}, Σ_{PD}) によって変動する。電離圏の電気伝導度は、電離圏の電子密度に依存し、その電子密度の量は太陽紫外線によって変化する。すなわち、式(2.4)、式(2.5)は、太陽紫外線量によって変化することが予想される。そこで、太陽からの紫外線量と相関があるとされる太陽電波 F10.7 指数(波長 10.7cm の太陽電波強度フラックス)と、 a_1, τ_{AD} のトレンドの比較を行ったところ、次節で詳述するように a_1 は F10.7 と逆相関があり、 τ_{AD} は相関があることが分かった。

5. 考察

本研究では、データ同化によって、Goertz et al. (1993)で提案されたモデルにもとづき、AU 指数および同モデルにおけるカップリングパラメータの長期推定を行った。推定されたカップリングパラメータ a_1, τ_{AD} は、ともに夏に高い値、冬に低い値を示す季節変動性があることが明らかになった。

a_1, τ_{AD} は、ともに電離圏電気伝導度に関するパラメータである。太陽紫外線によって電離圏の電子密度は変化するが、太陽天頂角の高い夏に電子密度が大きくなり、逆に太陽天頂角の低い冬に電子密度が低くなることが知られている。電離圏電気伝導度は、電離圏の電子密度に依存するため、電離圏電子密度と同様に電気伝導度も夏に大きく冬に小さくなる。式(2.4)および式(2.5)に示すように、 a_1, τ_{AD} は電離圏電気伝導度の関数であるため、推定された a_1, τ_{AD} の季節変動は、電離圏電子密度の季節変動を反映していると考えられる。

図7では、太陽からの紫外線量と相関があるといわれている F10.7 の長期変化と、 a_1, τ_{AD} それぞれの長期変化との比較を行っている。 a_1 と F10.7 は、逆相関 (-0.62) がみられ、 τ_{AD} と F10.7 は相関 (0.93) がみられる。 τ_{AD} と F10.7 に相関がみられるのは、前述の通り τ_{AD} が電離圏電気伝導度のパラメータであるためと考えられる。同じ電離圏電気伝導度に関するパラメータである a_1 が逆相関となる理由は定かではないが、 E_y が a_1 よりも支配的であるために a_1 の推定が適切に行われていない可能性がある。

今回用いた Goertz et al. (1993)で提案されているモデルは、太陽風の電場のみを入力として AU 指数の時間発展を予測する比較的簡易なモデルである。そのため、モデルの意味の物理的な理解も容易であるという特徴を持つ。一方、たとえば IMF が北向きの時には、磁気圏では

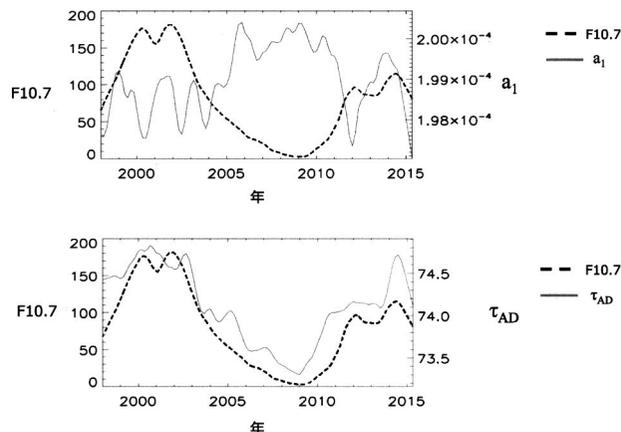


図7. (a)データ同化で推定した a_1 の1998年から2015年における長期変化(灰色)と F10.7 指数(破線)、(b)同 τ_{AD} .

磁気再結合が起きないと仮定しているために、入力となる太陽風電場を 0 とする。そのため、IMF が北向きの際には、入力が 0 になってしまうため推定が上手くいかない場合があり、実際、図 1 においても UT=08-10 においては推定がうまくいっていない。今後、入力パラメータの与え方を検討することによって、様々な IMF の状況に対しての予測が可能になると考えられる。

6. 結論

本研究では、Goertz et al. (1993) のモデルを用いて、オーロラ活動指数である AU 指数変動の高精度予測を行うために、粒子フィルターを用いたデータ同化を行った。本研究で得られた主要な結果は、以下のようである。

- (1) データ同化を用いることで AU 指数変動の推定精度の向上に成功するとともに、オーロラ活動指数予測モデルの太陽風カップリングパラメータ (a_1, τ_{AD}) の推定を行った。
- (2) 推定した太陽風カップリングパラメータに季節依存性を確認した。

本研究の結果から、Goertz et al. (1993) の AU 指数予測モデルにおいて、高精度な予測を行うためには、データ同化によってモデル中のカップリングパラメータを動的に変化させる必要のあることがわかった。また、そのパラメータの性質を推定値の長期変化から調べたところ、太陽紫外線量 (F10.7 指数) との対応 (相関, あるいは逆相関) があることが分かった。今後、Goertz et al. (1993) を用いてオーロラ活動指数の計算、特に観測データが存在しない未来についての予測を高精度で行うために、本研究で明らかになったパラメータの性質を適切に組み込んだモデルの構築が有効であることが示唆される。

参 考 文 献

- Baker, D. N., Klimas, A. J., Vassiliadis, D., Pulkkinen, T. I. and McPherron R. L. (1997). Reexamination of driven and unloading aspects of magnetospheric substorms, *Journal of Geophysical Research*, **102**, 7169–7177, doi:10.1029/96JA02627.
- Borovsky, J. E. and Valdivia, J. A. (2018). The Earth's magnetosphere: A system science overview and assessment, *Surveys in Geophysics*, **39**, 817–859, doi:10.1007/s10712-018-9487-x.
- Davis, T. N. and Sugiura, M. (1966). Auroral electrojet activity index AE and its universal time variations, *Journal of Geophysical Research*, **71**, 785–801, doi:10.1029/JZ071i003p00785.
- Goertz, C. K., Shan, L-H. and Smith, R. A. (1993). Prediction of geomagnetic activity, *Journal of Geophysical Research*, **98**, 7673–7684, doi:10.1029/92JA01193.
- 樋口知之 編著 (2009). 『データ同化入門』, 朝倉書店, 東京.
- Kim, K.-C., Shprits, Y., Subbotin, D. and Ni, B. (2012). Relativistic radiation belt electron responses to GEM magnetic storms: Comparison of CRRES observations with 3-D VERB simulations, *Journal of Geophysical Research*, **117**, A08221, doi:10.1029/2011JA017460.
- Li, X., Oh, K. S. and Temerin, M. (2007). Prediction of the AL index using solar wind parameters, *Journal of Geophysical Research*, **112**, A06224, doi:10.1029/2006JA011918.
- Liu, J. S. and Chen, R. (1995). Blind deconvolution via sequential imputation, *Journal of the American Statistical Association*, **90**, 567–576.
- McPherron, R. L. and Rostoker, G. (1993). Comment on prediction of geomagnetic activity by C. K. Goertz, Lin-Hua Shan, and R. A. Smith, *Journal of Geophysical Research*, **98**, 7685–7686, doi:10.1029/92JA01194.
- 中村和幸, 上野玄太, 樋口知之 (2005). データ同化: その概念と計算アルゴリズム, *統計数理*, **53**, 211–229.
- 小野高幸, 三好由純 (2012). 『太陽地球圏』, 共立出版, 東京.

World Data Center for Geomagnetism, Kyoto, Nose, M., Iyemori, T., Sugiura, M. and Kamei, T. (2005). Geomagnetic AE index, doi:10.17593/15031-54800.

Forecasting Auroral Activity Using Data Assimilation

Yoshizumi Miyoshi¹, Genta Ueno², Ryota Yamamoto¹, Shinobu Machida¹,
Masahito Nose¹, Daikou Shiota³ and Satoko Nakamura¹

¹Institute for Space-Earth Environmental Research, Nagoya University

²The Institute of Statistical Mathematics

³Radio Research Institute, National Institute of Information and Communications Technology

Auroral electrojet indices (AU, AL, AE) are a proxy of substorms and auroral activity. Forecasting these indices is crucial for space weather forecast. This study develops a data assimilation code to estimate the AU index based on the model proposed by Goertz et al. The state vector includes the AU index along with coupling parameters for solar-wind, magnetosphere, and ionosphere. The AU index provided from WDC-C2, Kyoto University is used as the observation vector. Using the data assimilation, the dynamical estimation of the coupling parameters is possible. This approach significantly improves the forecasting performance. The estimated coupling parameters have semi-annual and long-term modulations. According to a previous model, the coupling parameters are a function of the ionospheric conductance. It is expected that the estimated seasonal and yearly variations of the coupling parameters from data assimilation correspond to seasonal and yearly variations of the ionospheric conductance.

アンサンブルカルマンフィルタにおける変数局所化を利用した気象場と大気濃度場の同時データ同化

関山 剛[†]・梶野 瑞王[†]

(受付 2022 年 1 月 4 日 ; 改訂 7 月 11 日 ; 採択 7 月 11 日)

要 旨

アンサンブルカルマンフィルタ (EnKF) は背景誤差共分散を陽に導出し、カルマンゲインの計算に使う。そのためデータ同化の途中で導出された背景誤差共分散に修正を加えることもできる。例えば、共分散を恣意的に大きくしてアンサンブル摂動を拡げること (共分散膨張)、あるいは状態変数間の物理的距離に応じて共分散を減衰させること (共分散局所化) も可能である。気象学における EnKF が系の自由度よりも遙かに小さなサンプル数で実用的に動作する主な理由はこの共分散局所化のおかげである。共分散の局所化は物理的距離とは関係なく、相関の小さな状態変数間でも可能である (変数局所化)。本研究では気象観測データ (風速・気温・気圧等) と濃度観測データを EnKF により同時に同化しつつ、変数局所化によって相関の小さな変数の組み合わせで共分散を強制的に 0 にする実験を試みた。それによりサンプリングエラーの影響が減少し、風速観測の情報から濃度分布の解析精度向上を得ることに成功した。一方で、本研究の条件下では濃度観測の情報から風速分布の解析精度向上を得ることは成功しなかった。

キーワード：データ同化、アンサンブルカルマンフィルタ、変数局所化、気象シミュレーション、大気化学シミュレーション。

1. はじめに

気象学においてデータ同化とは、時間発展する複雑な現実大気の状態を観測データと数値モデルを使って最大限確からしく推定するための数理的技法である。時々刻々推定された大気の状態変数 (格子点上の気温・気圧・風向風速・密度・水蒸気量など) は気象場解析値と呼ばれ、数値予報の初期値として使われる。しかし、地球大気の状態を精緻に表現するのに必要な自由度の巨大さに比して観測データの数あるいは時空間密度は極めて小さいため、圧倒的な劣決定問題を解く必要に迫られる。その上、数値モデルが計算する大気の状態変数は一般に気象変数と呼ばれるが、その直接観測は必ずしも容易ではない。例えば、海洋や僻地の上空あるいは高度数千 m の高層を直接かつ頻繁に観測することは極めて困難である。気象変数の観測データが足りない場合、気象変数からなんらかの物理法則によって導かれる間接的な物理量、例えば大気黒体放射・電波の大気遅延・電波/音波のドップラーシフトなどの観測値をデータ同化に利用する必要に迫られる。

気象学において、より高精度な気象場解析値が得られることは極めて重要である。それは正

[†] 気象庁気象研究所：〒305-0052 茨城県つくば市長峰 1-1

確な天気予報に繋がるのみならず、基礎研究においても大気の状態を広範囲かつ正確に把握する手段となる。そのため様々なデータ同化アルゴリズムの開発が進められてきた。観測データが圧倒的に足りない現状では、空間的に遠く離れた情報を精度良く利用でき、気象変数以外の物理量からの情報も漏れなく利用できるデータ同化アルゴリズムが求められる。それらの要件を満たすものとして現在盛んに利用されている手法が4次元変分法(4D-Var)とアンサンブルカルマンフィルタ(EnKF)である。これらの手法では背景誤差共分散が陰に、あるいは陽に動的に推定され、また観測演算子を用いることで間接的な物理量のデータ同化も可能となっている。背景誤差共分散は限られた地点・限られた物理量の観測データからでも大気全体の状態推定を可能にする鍵である。

気象データ同化において、気象変数とは異なる観測データではあるが気象変数とはなんらかの物理法則によって結びついている物理量を利用したい場合、観測演算子を使う以外にもう一つ方法がある。その物理量を数値モデルの中の状態ベクトルに追加してしまい、気象変数と一緒に推定するのである。この場合、実用上は数値モデルの物理化学過程を拡張する必要があり、追加された物理量も誤差共分散の要素に組み込まれることとなる。もし大気汚染物質濃度などのようにその物理量の予報自体にも社会的ニーズがあるならば、この方法は特に有用である。ところで大気汚染物質のような大気微量成分の空間分布は、化学反応や地表面の影響が小さい場合、風速場(風向風速の3次元分布)の影響のみを受けて時間発展していると近似できる。すなわち大気の流れを追跡する“大気トレーサー”と見なすことができる(図1)。

実際、先行研究において大気微量成分を数値モデルで取り扱えるようにして、大気微量成分濃度の観測データを同化することにより、気象変数(特に風速場)の解析精度向上を試みた例が幾つかある(Semane et al., 2009; Han and McNally, 2010; Allen et al., 2018)。これらの例では成層圏下部および対流圏上部のオゾンに着目し、4D-Varを使ってデータ同化が行われた。大気微量成分であるオゾンは、成層圏下部および対流圏上部において(成層圏上部あるいは地上付近に比べて)化学的な生成消滅が少なく、人工衛星による観測も充実しているため大気トレーサーとして選ばれたと考えられる。しかしこれらの先行研究では、オゾンの観測データを加えたことによる気象変数の解析精度向上はほぼ無いか極めて小さかったことが報告されている。Han and McNally (2010)はその原因を数値モデルのオゾン予測精度の低さに帰しているが、データ同化のアルゴリズム改良によって事態を打開できないだろうか。

EnKFの利点の一つは、4D-Varと異なり背景誤差共分散が陽に導出され、カルマンゲインの計算に使われることにある。また、通常は大気全体の巨大な背景誤差共分散を一度に作るこ

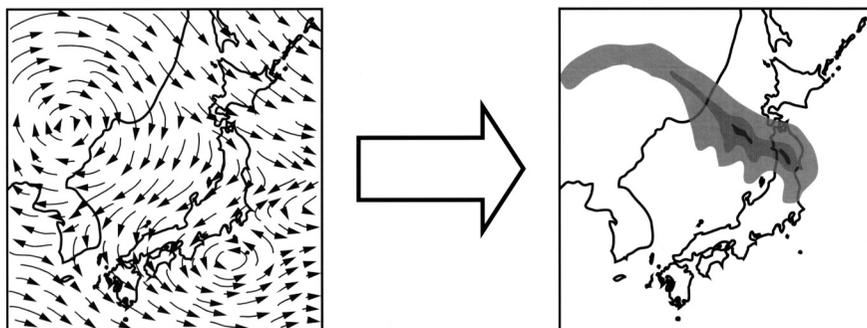


図1. (左)風速場の例、(右)その風速場によって形成された物質濃度分布すなわち濃度場の例。風速場は濃度場に大きな影響を与えるが、濃度場は風速場に直接的な影響を与えない。

とはせず、限定的な範囲の誤差共分散を用いることで小さなアンサンブルサイズでも 4D-Var に匹敵するデータ同化の精度を実現している(時空間的な局所化)。局所化については 2 章にて詳述する。4D-Var と EnKF の性能比較は Kalnay et al. (2007) に詳しい。さらに、データ同化サイクルにおいて数値モデルが過度に信用されることを防ぐため、背景誤差共分散の値を恣意的に膨張させることも行われる(共分散膨張: 2 章にて詳述)。このように EnKF では陽に背景誤差共分散が導出されることを利用して、その値の補正を試みることが一般的である。その共分散補正は制御変数間においても可能であり、変数局所化と呼ばれる(Kang et al., 2011)。変数局所化では、相関が小さいと事前に予想できる制御変数の組ではサンプリングノイズを避けるために共分散を恣意的にゼロにしてしまう操作も可能である。これについても 2 章にて詳述する。

先行研究において大気トレーサーの濃度観測データ同化が気象場の解析精度向上に繋がらなかった原因の一つには、大気トレーサー濃度を計算する数値モデルの不完全性に伴う誤差に比較して大気濃度場と風速以外の気象場の相関が小さかったことが考えられる。それならば、変数局所化によって相関の小さな制御変数間の共分散は事前にゼロにしてしまえば(すなわち濃度観測の情報は気温や気圧の解析には使わない)、濃度データ同化が風速場の解析精度だけを向上させられるのではないだろうか。実際、Kang et al. (2011) は現実大気を用いない理想化実験(観測システムシミュレーション実験 OSSE)において EnKF の変数局所化を使えば、二酸化炭素濃度データの同化が風速場を改善することを示した。しかし残念なことに Kang et al. (2011) が用いた数値モデルは現業気象予報モデルに比べかなり単純化されたものであり、さらに疑似観測値の作成とデータ同化に同一の数値モデルを使った「双子実験」であった。そのため数値モデルにバイアスが一切含まれておらず、観測誤差には既知のランダム誤差のみを含むという極端な理想化実験であった。

そこで本研究では、現実大気 of EnKF データ同化において変数局所化を導入し、大気微量成分濃度データが風速場の精度を大きく向上させることができるかについて検証する。ただし、Kang et al. (2011) が大気トレーサーとして用いた二酸化炭素は対流圏において化学的に不活性であるという利点を持ち数値モデルの性能低下の主要因である化学反応計算が必要ないが、現実大気では広範囲・高頻度で精度良く濃度を観測することが極めて困難である。一方、4D-Var を使った先行研究において使われた高層オゾンは二酸化炭素に比べて高精度観測データは手に入りやすいが、化学反応が複雑であるため数値モデルの不完全性が顕著化しやすい。そこで我々は化学的に不活性で高精度測定が容易に可能な大気トレーサーとして放射性同位体(原子力発電所事故由来のセシウム-137)を利用し、EnKF データ同化における変数局所化の検証を実施することにした。

もし本研究で放射性同位体濃度のデータ同化による風速場の解析精度向上が確認できれば、そのノウハウを非放射性同位体濃度のデータ同化に活かすことができる。すなわち非放射性的同位体を人為的に環境中へ定期的に放出し、その濃度を各地で精密測定することによって、天気予報の精度向上も期待できる。本研究はその一里塚としての重要性を有する。以下、2 章で背景誤差共分散の修正手法について説明した後、3 章で本研究におけるデータ同化実験の設定を記述し、4 章で実験結果の紹介と考察を行う。

2. データ同化手法

2.1 気象データ同化で行われる誤差共分散の修正

気象学や地球物理学での利用における EnKF の解説は Evensen (1994) や三好 (2008) などに譲る。EnKF によるデータ同化サイクルでは解析値 x_t^a を得るだけでなく、次のサイクルにお

いてアンサンブル予報シミュレーションを実行するために初期値(すなわち解析値)のアンサンブル摂動 $\delta x_i^{a(k)}$ ($1 \leq k \leq m$)が必要である。ここで下添字は時刻(i)を表し、上添字は予報(f)あるいは解析(a)を表す。 m はアンサンブルメンバー数である。このアンサンブル摂動を得るための作業をアンサンブル・アップデートと呼ぶ。しかしアンサンブル・アップデートの式を $\delta x_i^{a(k)}$ について解くことは技術的に煩雑で、計算コストも大きい。そのため様々な近似解法や計算コストを減らすアルゴリズムが開発されている。本稿ではその技術的な詳細には立ち入らないが、現業気象機関や研究機関で現在最も採用されているのは平方根フィルタ法であり、本研究では平方根フィルタの一種である局所アンサンブル変換カルマンフィルタ (LETKF; Hunt et al., 2007) と呼ばれる手法を使用した。

また、EnKF では数値モデルの接線形演算子やアジョイント演算子を実装上必要としない。気象学において数値モデルは非線形であることが大前提であるから、接線形化による近似を避けることができ非線形モデルを直接使うことのできる EnKF のメリットは大きい (Hunt et al., 2007)。さらに、EnKF は背景誤差共分散 P_i^f をデータ同化サイクル毎に陽に計算しており、その値の修正も以下に述べるとおり逐次可能である。

気象予報では数値モデルのランダム誤差の評価は極めて難しいため、通常はモデルの完全性を仮定する。しかし現実にはモデルの不完全性に起因する誤差は必ず発生するはずなので、モデルを信用しすぎた状態で推定した背景誤差共分散 P_i^f は実際よりも若干小さく見積もられてしまう。また、たとえモデルが完全だったとしても、アンサンブルメンバー数が十分でなければアンサンブル摂動は期待されるほどに大きくなることができず、やはり背景誤差共分散 P_i^f は実際よりも小さく見積もられる。このように EnKF がデータ同化サイクルにおいて背景誤差共分散を繰り返し小さく見積もると、生成されるアンサンブル摂動は徐々に小さくなり、最終的にはカルマンゲイン K_i が極端に小さくなることによって観測情報は解析値にほとんど取り込まれなくなる。この不具合を避けるためにデータ同化サイクル毎に誤差共分散を恣意的に大きくする操作を実施するのが気象学においては通例である。この操作を共分散膨張 (covariance inflation) と呼ぶ。

共分散膨張のやり方には幾つかあるが、最も単純な方法は解析誤差共分散を計算する際に $\tilde{P}_i^a = P_i^a(1 + \delta)$ と恣意的に修正してしまうことである。ここで δ は任意の正数である。これを multiplicative inflation と呼ぶ。これにより、次のサイクルのアンサンブル摂動は全体的に少し大きくなる。あるいは、アンサンブル摂動を $\delta x_i^{a(k)} = \delta x_i^{a(k)} + \varepsilon$ と修正する方法もある。ここで微小摂動ベクトル ε は、例えば $\langle \varepsilon \varepsilon^T \rangle = \alpha \mathbf{A}$ を満たすようなランダムサンプルで選ぶ。記号 $\langle \rangle$ は期待値を表す。 α はチューニング可能な定数であり、 \mathbf{A} は統計的に計算した解析誤差共分散行列などを利用する。この方法を additive inflation と呼ぶ。いずれにせよ、これらの操作は EnKF の実装において自由に選択可能であり、気象変数や地域ごとに異なるチューニングを施すこともできる。

一方、アンサンブル予報による背景誤差共分散 P_i^f の推定はアンサンブルメンバー数 m が十分に大きければ精度良く成り立つと仮定できるが、その妥当性の確保は容易ではない。状態ベクトルの次元数 N に比べてアンサンブルメンバー数 m が圧倒的に小さくならざるをえない気象学においては、背景誤差共分散 P_i^f の推定にはかなりのサンプリングエラーが入り込むと考えるべきである。ところで地球大気は、天気予報の対象となる数時間から数日の時間スケールで見ると、すぐ近くの場所や風上風下に当たる場所との相関が大きい一方で、遠く離れた場所との相関は極めて小さい。例えば地球の裏側の大気との間で相関は微小存在するのかもしれないが、そんな離れた場所との相関はサンプリングエラーに比べたら遙かに小さいであろうことは容易に想像できる。そこで、物理的距離が離れるにつれて共分散を強制的に減衰させることでサンプリングエラーの影響を可能な限り回避する手法が EnKF では一般に採用されている。

離れた場所の相関は初めから無視するのである．これを共分散局所化 (covariance localization) と呼ぶ．

共分散局所化を適用する範囲すなわち局所化距離は当てはめる減衰関数の形も含めて任意であるが、アンサンブルメンバー数に大きく依存するチューニングパラメータである．気象学的に大きな相関が発生しうる距離や時間にも依存するので、気象予報モデルの種類によって適切な局所化距離が異なる．例えばアンサンブルメンバー数 m が $O(10 \sim 10^2)$ 程度、すなわち現業天気予報システムの標準的アンサンブルサイズを用いる場合、全球モデルならば水平方向に数千 km 離れれば共分散をゼロにするのが一般的であるが、計算領域が数百 km 程度の都市大気汚染モデルならば数十 km 離れれば共分散がゼロになっても構わない．一方で、このような $m \approx O(10 \sim 10^2)$ 程度の気象データ同化システムでは、共分散局所化を行わないと確実にアンサンブルメンバーの発散 (filter divergence) が起こり、データ同化に失敗する．

全球モデルを使った理想化実験の場合、Kondo and Miyoshi (2016) によると、10,240 個のアンサンブルメンバーを使えば EnKF に共分散局所化が必要なかったと報告されている．実際、地球大気の構造はランダムではなく、状態変数間にも物理法則が成立している．したがって地球大気の実質的な自由度は次元数 N に比べて極めて小さいと考えるべきである．さらに EnKF で使われる数値モデル (気象予報モデル) はそれら物理法則に基づいて状態変数を予報し、誤差共分散を推定するためのサンプルを提供しているため、小さなサンプル数 (= アンサンブルメンバー数 m) で実用的な統計推定精度を実現しているのだと考えられる．

状態ベクトルの次元数 N が $O(10^7)$ 程度である現在の気象予報モデルを使った EnKF においては、誤差共分散行列の特異ベクトルの数も本来ならば $O(10^7)$ 程度と考えるべきであろう．ところが共分散局所化を使えば、上記の自由度の制限も相まって、 $m \approx O(10)$ のアンサンブルメンバー数で EnKF は十分に動作する．これは共分散局所化の適用範囲内の空間において、おそらく 10^3 個程度の特異ベクトルを 10 個程度の特異ベクトルで近似していることになる．さらに Kondo and Miyoshi (2016) の報告では、たかだか $m \approx O(10^4)$ で共分散局所化すら不要になる．これは、気象学における EnKF が状態変数のランダムサンプリングによって誤差共分散を推定しているのではないことを示唆している．

以上のような共分散局所化の操作は空間方向 (あるいは時間方向) でのサンプリング制限を想定している．一方で、この局所化操作は空間的距離に応じて実施できるだけでなく、状態変数間でも実施可能である．そのことについて次節で説明する．

2.2 変数局所化

前述の共分散局所化では空間的距離が離れるにつれて共分散を強制的に減衰させることでサンプリングエラーの影響を可能な限り回避した．しかし真のシグナルよりもサンプリングエラーの方が大きくなってしまふ危険性は空間的に離れた場所に限らない．たとえ同じ場所の大気 (空気塊) だろうと、物理法則上関連が低い物理量との間では相関が極めて小さくなるのが当然である．それならば、空間的距離に関係なく大気微量成分濃度と気温・気圧・湿度との間の共分散を最初から無視してしまえばサンプリングエラーの影響を除去できるはずである．このような EnKF 実装上のアイデアを変数局所化と呼ぶ．

詳述すると、化学的に不活性な大気微量成分の濃度を体積混合比で表した場合、理想気体の状態方程式が仮定できれば気温や気圧が変化しても大気との相対的な体積は変化しないため、濃度は気温や気圧との直接的な相関を持たない．濃度を単位大気体積あたりの質量や粒子数で表した場合も、理想気体の状態方程式が近似できている限り、数時間程度の気温変化量や気圧変化量では密度はあまり変化しないため、濃度変化は極めて小さい．一方で大気微量成分の濃度変化は移流によってほぼ決まり、移流は風向風速で完全に決まるため、濃度と風向風速の相

関は大きいはずである．ところが風向風速は気圧差を外力とするニュートン力学第2法則によって決定され，気圧差は気体の状態方程式に基づいて気温差から生まれるため，風向風速は気温や気圧との相関を有する．よって濃度と気温・気圧との間には風向風速を通じて間接的な相関が僅かにだが存在する．湿度については，水蒸気分子を一種の大気微量成分と考えれば移流によって濃度が変化するため他の大気微量成分濃度と大きな相関を持つはずである．しかし実際には水の相変化によって雲が生成し，雨が降り，水面から水蒸気が供給されるため，著しく水蒸気濃度すなわち湿度は大気中で変化する．したがって湿度と他の大気微量成分濃度との間の相関は必ずしも大きくはない．一方で湿度自体は移流によって風向風速と大きな相関を持つ可能性があり，水の相変化や飽和水蒸気量を決定する気温や気圧とも大きな相関を持つ．まとめると，もし小さな相関を無視したいのならば，大気微量成分濃度は風向風速に限定して共分散を有し，しかしながら風向風速は他の気象変数とも共分散を有すると仮定することが妥当である．

変数局所化はアンサンブルメンバー数の少なさに起因する変数間の共分散誤差にかかるサンプリングエラーの除去に役立つだけではない．加えて，特定の状態変数のシミュレーション精度が低いことに起因する不確かな共分散推定を除去することにも役立つ．数値モデルはすべての状態変数についてその典型値(あるいは気候値)と比べた場合にバイアス誤差が常に同程度となるわけではない．幸い天気予報に関連する気象変数は比較的どれも極端なバイアスを含むことなく予測可能である．例えば気温 300 K に対してバイアス誤差はせいぜい 1~2 K であり，地上気圧 1000 hPa に対しては数 hPa 程度である．一方で大気微量成分濃度は気象変数に比べてバイアス誤差が極めて大きい．例えばエアロゾル濃度のバイアス誤差がその濃度観測値の平均値(気候値)よりも大きいことは頻繁に見られる．なぜなら生成・消滅に関わる化学反応計算は流体力学計算に比べて大きく精度が劣り，地表面からの放出過程(あるいは地表面への沈着過程)や乱流拡散過程も大きな不確定要因となるからである．バイアス誤差が大きければ共分散の正確な推定に支障をきたす．

したがって大気微量成分濃度との相関が大きい風向風速に限れば相関のシグナルが共分散の推定誤差を上回るが，他の気象要素との間では逆に共分散の推定誤差がシグナルを上回る可能性も十分に考えられる．このような場合，変数局所化を使えば風向風速以外の気象要素との共分散を無視することが可能である．ただし同化サイクルを繰り返す中で濃度場が風速場に変化を与え，その変化に影響されて他の気象場も若干変化することが考えられる．したがって変数局所化によって変数同士が完全に独立するわけではない．

本研究では図 2(c)で模式的に示されたような背景誤差共分散行列を設定することで変数局

	(a) w/o concentration DA (STD)					(b) Independent DA (TEST1)					(c) Variable-localized DA (TEST2)					(d) All-simultaneous DA (TEST3)						
	濃度	風速	気温	気圧	湿度	濃度	風速	気温	気圧	湿度	濃度	風速	気温	気圧	湿度	濃度	風速	気温	気圧	湿度		
濃度	0	0	0	0	0	濃度	0	0	0	0	濃度			0	0	0	濃度					
風速	0					風速	0				風速						風速					
気温	0					気温	0				気温	0					気温					
気圧	0					気圧	0				気圧	0					気圧					
湿度	0					湿度	0				湿度	0					湿度					

図 2. 各実験における背景誤差共分散行列の模式図．左から(a)濃度同化無し実験(w/o concentration DA; STD), (b)独立同化実験(Independent DA; TEST1), (c)変数局所化実験(Variable-localized DA; TEST2), および(d)完全同時同化実験(All-simultaneous DA; TEST3)．灰色のセル部分には EnKF が推定した値が入る．

所化を実行した。ここで大気微量成分濃度は濃度自身と風速のみに対して共分散を共有し、他の気象変数との共分散は強制的に0としている。一方、風速は濃度以外にも気温や気圧や湿度との間の共分散も共有している。図中に示した他の3種の実験の詳細については後述する。同様の操作によって、Kang et al. (2011)は変数局所化によるEnKFの性能向上を示した。ただしKang et al. (2011)は二酸化炭素を大気トレーサーとして使い、濃度分布と共にその地表面放出量分布もデータ同化によって逆推定した。一方本研究では放出情報がほぼ既知の放射性セシウムを大気トレーサーとして使うため、解析値を作成するのは放射性セシウム濃度および気象変数に限られる。そのためKang et al. (2011)とは変数局所化の設定パターンが若干異なっている。

真に濃度のみが風向風速と強い相関を持ち、他の気象変数との相関は無視できるのならば、図2(c)で示した変数局所化によってサンプリングエラーの影響を縮小できるはずである。それによって他の条件下の実験(図2(a), (b), (d))よりも風向風速の解析精度が向上することを期待して、本研究を実施した。このような変数局所化は共分散膨張や空間的距離の共分散局所化と同じく、EnKFにおいて誤差共分散が陽に計算され自由に変更できるために効率的に実施可能となる。

3. 実験設定

3.1 変数局所化の設定

本研究における背景誤差共分散行列の変数局所化設定についてまず説明する。実験は4種類実施した。まず標準実験(STD)として、放射性セシウム濃度(以下、濃度と記す)が他のいかなる制御変数とも相関を持たないように設定した(図2(a))。これは濃度観測データを一切同化しないことに相当し、気象観測データのみを同化する通常的气象データ同化と同一である。この場合、濃度分布(濃度場)は気象変数の予報値から物理法則に従い受動的に決定される。風向風速分布(風速場)は局所化距離内に存在する全ての気象観測データの情報を利用して解析値が作成される。

次に、濃度は濃度とのみ相関を持つよう設定した実験(TEST1)を用意した(図2(b))。この場合、濃度場は気象変数の予報値に従ってシミュレーションされつつ、局所化距離内の濃度観測データの情報を利用して解析値が作成される。風速場はSTDと同様に濃度観測データとは無関係に解析値が作成される。2つのデータ同化は完全に独立である。実はこの実験設定は通常の大気化学データ同化(大気汚染物質の予報を目的にした大気微量成分データ同化)と同じである。一般的に大気汚染物質の予報モデルは誰かが気象データ同化で作成した気象場解析値を天賦の情報として受け取り、その気象場に合わせて濃度場を計算する。そのため大気化学データ同化は大気汚染物質濃度観測データと大気汚染物質予報モデルの情報だけを使って実施され、気象場解析値とは別に濃度場解析値を計算するのが一般的である。TEST1はこれと実質的に同じことをしている。

TEST2では前述のとおり濃度場は濃度場自身と風速場に限定して相関を有し、その他の気象場(気温、気圧、湿度)との相関は強制的に削除されている(図2(c))。一方、風速場は濃度場とも他の気象場とも同時に相関を有している。風速場以外の気象場は濃度場との相関は有していないが風速場とは相関している。この場合、濃度場と風速場は相互に影響を与えながらデータ同化が行われるが、風速場以外の気象場は濃度場の情報を与えられずにデータ同化される。ただし風速場以外の気象場がTEST2においてSTDやTEST1と同一の解析値になることはない。なぜなら風速場が濃度場の観測データ情報に影響されて変化し、その風速場の変化に影響されて他の気象場も若干変化するためである。この実験(TEST2)が本研究の目標である「気象

場と濃度場の同時データ同化における変数局所化の影響評価」の要となる。さらに比較のため、変数局所化を一切設定しない完全同時データ同化の実験(TEST3)も実施した(図2(d))。

3.2 観測データと予報モデル

先述したとおり Kang et al. (2011)が利用した二酸化炭素は広範囲に精度良く濃度観測を継続することが極めて困難であるため、我々の知る限り、現実大気によって変数局所化を検証した例はない。一方、高層オゾンは化学反応系が複雑なため予報モデル精度の向上が難しい。そこで我々が着目したのは福島原発事故由来の放射性セシウムである。放射性同位体の壊変速度や壊変生成物は厳密に既知であり、気温・気圧・太陽光や化学反応によっても変化しない。したがって予報モデルは化学反応計算を行う必要がない。放射性セシウムの場合、降雨さえなければ地表面沈着量はほぼ無視でき、放出場所は福島第一原子力発電所ただ一ヶ所に限定された緯度・経度・高度が完全既知の点源放出である。その放出量は時間変化も含めてすでに推定されており (Katata et al., 2015), その推定値を使ったモデル計算によって各地の濃度観測値の再現が報告されている (例えば Sato et al., 2018)。そのため放射性セシウムをトレーサーとして用いれば化学反応過程および生成消滅過程のモデル不完全性に起因するバイアスを減らすことが可能であり、共分散推定における大きなメリットとなる。さらに同位体は試料さえ捕集できれば、極めて微量でも精度良く濃度測定することが可能である。福島原発事故の場合、図3(a)に示された約100地点において事故直後から1時間間隔で地上付近の放射性セシウムが捕集され、その濃度が計測された (Tsuruta et al., 2014; Oura et al., 2015)。本研究ではこの観測値を大気微量成分濃度データとして利用した。

気象変数の観測データについては、気象庁現業メソ予報システム(JNoVA)のために収集されたデータセットおよび気象庁地域気象観測システム(AMeDAS)の地上風観測データセットを利用した。地上風は原則的に高度10mでの測風である。高層の風速データと異なり、AMeDAS風速データは図3(b)に示すとおり観測地点が広範囲に分布しており(観測頻度も10秒単位)、風速場の解析精度検証に最適である。詳細は Sekiyama et al. (2017), Sekiyama and Kajino

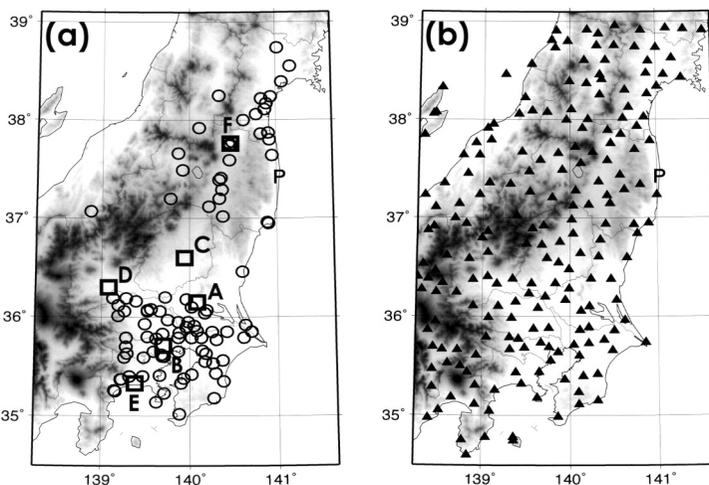


図3. (a) 本研究で用いた放射性セシウム濃度データ(○)および空間線量率データ(□)の地上観測地点(A~Fの記号は表1を参照). (b) 本研究で用いたAMeDAS地上風データの観測地点(▲). Pは福島第一原子力発電所の位置を示す.

(2020), あるいは関山 他 (2022)を参照願いたい。

予報モデルには福島原発事故当時(2011年3月)気象庁が現業メソ予報に使っていた完全圧縮系非静力学メソモデルのJMA-NHMを水平解像度3kmに設定して使った。大気境界層の乱流スキームにはMellor-Yamada Nakanishi-Niino Level-3乱流クロージャーモデル(MYNN3; Nakanishi and Niino, 2006, 2009)を用いた。積雲対流にパラメタリゼーションは用いていない。気象変数はJMA-NHMで予報できるが、オリジナルのJMA-NHMには大気微量成分の移流拡散シミュレーション機能はないので、気象研究所の開発したエアロゾル化学輸送モジュールをJMA-NHMに組み込んだNHM-Chemと呼ばれるバージョン(Kajino et al., 2019)を本研究では利用した。移流スキームにはWalcek and Aleksic (1998)のMPMAアルゴリズム(Mass-conservative, Peak-preserving, Mixing-ratio-bounded Advection Algorithm)を用いた。これにより放射性セシウム濃度の予報が気象予報と同時に可能となった。予報モデルの詳細な環境設定に関してはSekiyama et al. (2017)およびSekiyama and Kajino (2020)を参照願いたい。

JMA-NHM(NHM-Chemバージョン)にEnKF(本研究ではLETKF)を組み合わせたデータ同化システムのプログラムソースコードはKunii (2014)で使われたものをベースにした。Sekiyama et al. (2017)と同じくアンサンブルメンバー数は20個、同化間隔は3時間、共分散局所化には正規分布関数を用いて $1-\sigma$ に相当する距離すなわち $e^{-0.5}$ に減衰する距離を水平50kmに設定した。この50kmという値は試行錯誤によって決定した。実験期間は放射性セシウムが内陸に流れ込んでいた2011年3月14日21時から15日21時に限定した。それ以外の期間の多くは太平洋側へ流れ出していたためである。予報モデルの初期時刻は2011年3月14日9時とし、データ同化サイクルもこの時点から開始した。したがって最初の解析結果は3月14日12時に得られたが、9時から21時までの12時間はスピンアップ期間とした。気象場の初期値と境界値は気象庁全球予報から取り入れた。また、その初期値と境界値には気象庁全球アンサンブル予報の摂動を加えた。濃度場の初期値と境界値はゼロに設定した。濃度値の観測範囲は 0.1 Bq/m^3 程度から 1000 Bq/m^3 程度にまで及ぶため、データ同化の際には常用対数を使って値を変換し、値の変動幅を小さくした。その際、濃度の観測誤差は1(すなわち1桁)に設定した。これは濃度勾配の空間代表性誤差を加味すれば妥当な大きさである。それ以外のデータ同化に関する諸設定についてはSekiyama et al. (2017)およびSekiyama and Kajino (2020)を参照願いたい。

加えて、放射性セシウム濃度場の精度検証のために、つくば市・新宿区・宇都宮市・高崎市・茅ヶ崎市・福島市における空間線量率(γ 線エネルギー量)の観測値をそれぞれ大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構・東京都庁・栃木県庁・群馬県庁・神奈川県庁・福島県庁から頂いた。

4. 結果と考察

濃度観測が3km以内で実施されていたAMeDAS地上風観測地点を選び出し、地上風速(東西風と南北風それぞれ)の観測と解析の比較を行った(図4)。濃度観測には欠測が多いため常に同じAMeDAS地点が選ばれ続けるわけではないことに注意が必要である。濃度観測地点の近傍のみを選んだのは濃度データ同化の影響を明瞭にするためである。残念ながら散布図を肉眼で眺める限りでは実験ごとの明瞭な違いはない。以下、二乗平均平方根誤差(RMSE)で比較する。STDとTEST1は風速場にとって同じ実験条件であるため、当然ながら同じ解析誤差(1.29 m/s)である。本研究では風速の観測誤差は気象庁の現業システムの設定に倣って一律 2 m/s と設定しているが、もしその値がEnKFの推定する背景誤差の大きさから乖離していれば

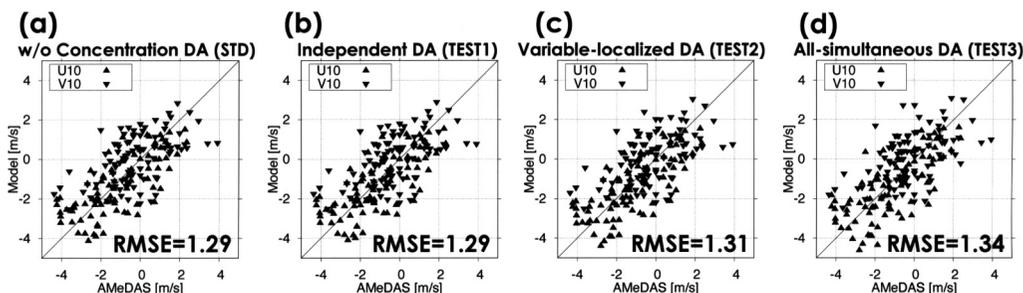


図4. 地上10 m 風速(東西風 U10 および南北風 V10)の AMeDAS 観測値(横軸)と解析値(縦軸)を比較した散布図。サンプルは日本時刻 2011 年 3 月 14 日 21 時から 15 日 21 時までの 3 の倍数時毎の正時。(a)濃度同化無し実験 STD, (b)独立同化実験 TEST1, (c)変数局所化実験 TEST2, (d)完全同時同化実験 TEST3 の結果。二乗平均平方根誤差(RMSE)は東西風と南北風を合わせて計算した。

ば観測の情報あるいはモデルの情報のどちらか一方がデータ同化においてほぼ使われないことになる。どちらが使われないにしてもデータ同化サイクルが最適化されていないことを示すので、観測誤差と背景誤差は大きく乖離していないことが理想的である。そして観測誤差と背景誤差の大きさが同程度の場合、解析誤差は観測誤差よりも若干小さな値になるはずである。したがって上記の RMSE が観測誤差の設定値と乖離しておらず、それでいて 2/3 程度の大きさになっていることは良い傾向である。

期待に反して、変数局所化を行った TEST2 は STD よりも若干誤差が大きくなっている。一方、変数局所化を一切行わない TEST3 は想定どおりサンプリングエラーの影響が大きいと考えられるため最も誤差が大きい。ただしそれらの STD との差は 0.02 m/s あるいは 0.05 m/s と大きくはない。とはいえ、Sekiyama et al. (2017)によると本研究の STD と同一条件でデータ同化を実施した場合、AMeDAS 風観測データを同化に使う実験と使わない実験での地上風解析誤差の変化幅は約 0.1 m/s であるので、 0.05 m/s の悪化は無視できる値ではない。変数局所化実験の TEST2 で STD よりも解析精度が悪化したのは、濃度場と風速場の相関シグナルを共分散推定の不確かさが上回ってしまったためであろう。これは高層オゾンを使った先行研究と同様の結論になってしまった。

では、濃度場の解析誤差は濃度場と風速場の同時データ同化によって改善したのだろうか。図5に濃度場の一例を示す。福島原発事故において関東一円に放射性セシウムが流れ込んだのは2回だけで(3月15日と21日)、うち1回は降雨による激しい沈着が起きたため、明瞭な放射性セシウムのプルームが観測できたのはこの例(3月15日)だけである。3月15日にも北関東山岳域や福島県の一部で弱い降水が見られたが、それらの降水域およびその風下には放射性セシウム観測地点が存在しないため本研究には影響を与えない。これら濃度場に関しては4つの実験間で明瞭な差が見られ、STD だけで北関東の高濃度帯が大きく広がり、神奈川県方面への侵入(penetration)が TEST1, 2, 3 に比べて弱い。濃度観測データ(図中○印)を見ると、現実大気では神奈川県方面へのプルーム侵入は STD の計算結果よりも強く起こっていたようである。

濃度場の再現性を空間線量率との比較で示した結果が表1である。空間線量率は放射性セシウム濃度の推定には直接使えないが、プルームの到達時刻の判別には使える。なぜなら放射性セシウム濃度のピークと空間線量率のピークは一致するためである。関東及び福島における6地点でのプルーム到達時刻の絶対値誤差の合計は STD 実験 > TEST1 実験 > TEST2 実験の順で小さくなる。STD は濃度のデータ同化をしておらず、TEST1 では濃度単独で同化し、

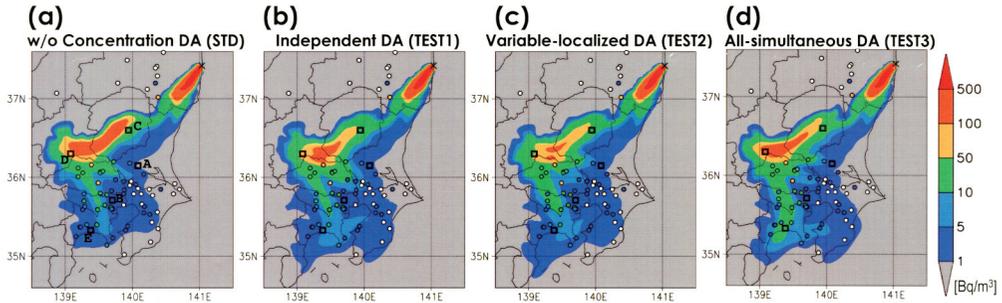


図 5. 放射性セシウム地上濃度の解析値(等値線)と観測値(丸印)の比較例. 日本時刻 2011 年 3 月 15 日 11 時から 12 時までの平均値. 白抜きの丸印は測定下限値以下あるいは欠測であった地点. □印は空間線量率観測地点(表 1 参照). (a) 濃度同化無し実験 STD, (b) 独立同化実験 TEST1, (c) 変数局所化実験 TEST2, (d) 完全同時同化実験 TEST3 の結果.

表 1. 関東・東北 6 地点で比較した放射性セシウム濃度のモデル計算ピーク時刻と空間線量率観測値ピーク時刻の相違(日本時刻 2011 年 3 月 15 日に観測されたブルームによる検証).

観測場所	観測日時	STD 実験	TEST1 実験	TEST2 実験	TEST3 実験
つくば市 (A)	3/15 08-09	-1 時間	-2 時間	-1 時間	-2 時間
新宿区 (B)	3/15 10-11	-1 時間	-2 時間	-1 時間	-2 時間
宇都宮市 (C)	3/15 10-11	-1 時間	±0 時間	±0 時間	-1 時間
高崎市 (D)	3/15 13-14	-2 時間	-1 時間	-1 時間	-2 時間
茅ヶ崎市 (E)	3/15 13-14	-1 時間	-1 時間	-1 時間	-2 時間
福島市 (F)	3/15 17-18	+2 時間	+1 時間	+1 時間	+2 時間
絶対値の合計		8 時間	7 時間	5 時間	11 時間

TEST2 では変数局所化で風速場の情報も取り入れながらデータ同化しているのので, 期待どおりの結果である.

一方, TEST3 では STD よりも絶対値誤差が大きくなってしまっている. これは濃度場の誤差やサンプリングエラーを気温場や気圧場が拾い, それが力学を通じて風速場の解析精度を悪化させ, それにより移流拡散計算の精度が低下して濃度場を悪化させたと考えれば説明がつく. 図 4 で見たとおり TEST3 の地上風解析精度の悪化はわずか 0.05 m/s であるが, 極めて小さな風速場の誤差が大きな濃度場の誤差を作り出す可能性があることは Nachamkin et al. (2007) や Sekiyama et al. (2017) も報告している. 濃度場の誤差は大気微量成分の流路に沿った領域での風速場誤差を蓄積しているからである. また, 相関の対象となる変数が増えるため, 濃度場が余分なサンプリングエラーを拾っている可能性も大いに考えられる. これはアンサンブルメンバー数がわずか 20 個であることの弊害である.

本研究では変数局所化を使っても 4D-Var による先行研究と同じく風速場の解析精度を明瞭に向上させることができなかった. また, 濃度観測データの扱いにおいて, 常用対数を使うだけでなく自然対数を使う/濃度値をそのまま使うなど本稿で紹介した設定以外も試みた. 濃度観測誤差の設定でも, 本稿で使った値(1 桁)以外の値も大小試みた. だが, いずれの場合も本稿で紹介した解析精度を超えるものはなかった. 結局のところ, 誤差共分散推定の不確かさの改善が重要であろう. まず, 本研究の問題点としてアンサンブルメンバー数を十分に大きく取

れなかったことによる誤差共分散の不確実性が上げられる。さらに本研究では特に移流拡散過程にかかわるモデルの不完全性が誤差共分散の推定に悪影響を及ぼした可能性は高い。したがってデータ同化手法の改良とともに移流拡散過程の不完全性を減らす努力が必要である。

例えば、Sekiyama and Kajino (2020)によると福島原発事故大気汚染シミュレーションでは予報モデルの水平解像度が3 km から1 km へ向上すると、複雑地形の再現性が上がり、放射性セシウム濃度の分布再現性が向上することが報告されている。しかし水平解像度が3 km から1 km になると、計算量の増加は流体力学の CFL 条件を考慮する必要があるため、水平解像度増加比の3乗倍すなわち $3^3 = 27$ 倍の計算機資源が必要になる。本研究でも気象研究所のスーパーコンピュータ資源を多く使わせて貰ったが、さらに27倍の計算機資源をすぐに確保することは難しい。しかしながら計算機性能の向上を待って本研究を高解像度化した実験を実施することは大いに期待が持てる。高解像度化だけでなく、アンサンブルメンバー数の拡大もサンプリングエラーの直接的な低減に期待が持てるが、ノイズの大きさはサンプル数の比の平方根でしか減少しないため、やはり計算機性能の大幅な向上を待つ必要がある。

一方、風速場の解析とは異なり、濃度場の解析精度は変数局所化を使った同時データ同化によって大きく改善した。このことを現実大気において実証した本研究の成果は大きい。もし大気汚染物質濃度の予報サービス向上が本研究の目的ならば、この成果はすぐに役立つものである。その場合、EnKFによる解析値推定計算は1回のステップで2度行い(それぞれ本研究でのSTDとTEST2に相当)、気象場の解析値とアンサンブル摂動はSTDで作成し続けて、濃度場の解析値とアンサンブル摂動はTEST2で作成しつつTEST2で作成した気象場は捨てる、という方法が良いだろう。EnKFの解析計算はアンサンブルシミュレーション計算に比べるとかなり計算機負荷が小さいのでそのような方法も可能である。

5. おわりに

現実大気による変数局所化の効果を検証したが、先行研究と同じく風速場の解析精度を明瞭に向上させることはできなかった。しかし濃度観測値を用いた風速場の解析精度向上は気象予報の技術開発に革新をもたらすものであり、今後も様々な試みが続くだろう。そこでは対象にするトレーサーの種類や使用する数値モデルの不完全性、アンサンブルメンバー数の検討が重要であると考えられる。もし本研究の当初目標が成功していれば、放射性同位体の恣意的放出は当然無理であるが、例えば非放射性の同位体のような無害なトレーサーを人為的かつ定期的な環境中へ放出し、その濃度を各地で精密測定することによって、天気予報の精度向上も期待できたはずである。

いかに変数局所化によって重要なシグナルを選択して取りだそうとしても、サンプリングエラーがそのシグナルを上回るような設定では望んだ計算結果を得られないことは心得ておくべきである。ただし実験設定によっては、本研究で濃度場の解析精度だけが向上したように、片利的な結果が得られる可能性はある。そのような成果も目的によっては十分に役立つ可能性がある。変数局所化の実用化においても通常のEnKFと同様にサンプリングエラーを減らすことが重要であり、誤差共分散推定の不確実性の要因特定と改善が求められる。

謝 辞

本研究はJSPS 科研費 17K00533 および(独)環境再生保全機構環境研究総合推進費 1-1802 の助成を受けたものです。局所アンサンブル変換カルマンフィルタのソースコード利用に関しては気象庁の國井勝氏および横田祥氏の協力を得ました。

参 考 文 献

- Allen, D. R., Hoppel, K. W. and Kuhl, D. D. (2018). Extraction of wind and temperature information from hybrid 4D-Var assimilation of stratospheric ozone using NAVGEM, *Atmospheric Chemistry and Physics*, **18**, 2999–3026.
- 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.
- Han, W. and McNally, A. P. (2010). The 4D-Var assimilation of ozone-sensitive infrared radiances measured by IASI, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **136**, 2025–2037.
- Hunt, B. R., Kostelich, E. and Szunyogh, I. (2007). Efficient data assimilation for spatiotemporal chaos: A local ensemble transform Kalman filter, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, **230**, 112–126.
- Kajino, M., Deushi, M., Sekiyama, T. T., Oshima, N., Yumimoto, K., Tanaka, T., Ching, J., Hashimoto, A., Yamamoto, T., Ikegami, M., Kamada, A., Miyashita, M., Inomata, Y., Shima, S., Takami, A., Shimizu, A., Hatakeyama, S., Sadanaga, Y., Irie, H., Adachi, K., Zaizen, Y., Igarashi, Y., Ueda, H., Maki, T. and Mikami, M. (2019). NHM-Chem, the Japan Meteorological Agency’s regional meteorology-chemistry model: Model evaluations toward the consistent predictions of the chemical, physical and optical properties of aerosols, *Journal of the Meteorological Society of Japan*, **97**, 337–374.
- Kalnay, E., Li, H., Miyoshi, T., Yang, S.-C. and Ballabrera-Poy, J. (2007). 4-D-Var or ensemble Kalman filter?, *Tellus A*, **59**, 758–773.
- Kang, J.-S., Kalnay, E., Liu, J., Fung, I., Miyoshi, T. and Ide, K. (2011). “Variable localization” in an ensemble Kalman filter: Application to the carbon cycle data assimilation, *Journal of Geophysical Research*, **116**, D09110.
- Katata, G., Chino, M., Kobayashi, T., Terada, H., Ota, M., Nagai, H., Kajino, M., Draxler, R., Hort, M. C., Malo, A., Torii, T. and Sanada, Y. (2015). Detailed source term estimation of the atmospheric release for the Fukushima Daiichi Nuclear Power Station accident by coupling simulations of an atmospheric dispersion model with an improved deposition scheme and oceanic dispersion model, *Atmospheric Chemistry and Physics*, **15**, 1029–1070.
- Kondo, K. and Miyoshi, T. (2016). Impact of removing covariance localization in an ensemble Kalman filter: Experiments with 10240 members using an intermediate AGCM, *Monthly Weather Review*, **144**, 4849–4865.
- Kunii, M. (2014). Mesoscale data assimilation for a local severe rainfall event with the NHM-LETKF system, *Weather and Forecasting*, **29**, 1093–1105.
- 三好建正 (2008). カルマンフィルタ, 『気象研究ノート第 217 号「気象学におけるデータ同化」』(露木義, 川畑拓矢 編), 69–95, 日本気象学会, 東京.
- Nachamkin, J. E., Cook, J., Frost, M., Martinez, D. and Sprung, G. (2007). Evaluation of dispersion forecasts driven by atmospheric model output at coarse and fine resolution, *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, **46**, 1967–1980.
- Nakanishi, M. and Niino, H. (2006). An improved Mellor-Yamada level-3 model: Its numerical stability and application to a regional prediction of advection fog, *Boundary-Layer Meteorology*, **19**, 397–407.
- Nakanishi, M. and Niino, H. (2009). Development of an improved turbulence closure model for the atmospheric boundary layer, *Journal of the Meteorological Society of Japan*, **87**, 895–912.
- Oura, Y., Ebihara, M., Tsuruta, H., Nakajima, T., Ohara, T., Ishimoto, M., Sawahata, H., Katsumura, Y. and Nitta, W. (2015). A database of hourly atmospheric concentrations of radiocesium (^{134}Cs and ^{137}Cs) in suspended particulate matter collected in March 2011 at 99 air pollution monitoring stations in Eastern Japan, *Journal of Nuclear and Radiochemical Sciences*, **15**, 15–26.

- Sato, Y., Takigawa, M., Sekiyama, T. T., Kajino, M., Terada, H., Nagai, H., Kondo, H., Uchida, J., Goto, D., Quélo, D., Mathieu, A., Quérel, A., Fang, S., Morino, Y., von Schoenberg, P., Grahn, H., Brännström, N., Hirao, S., Tsuruta, H., Yamazawa, H. and Nakajima, T. (2018). Model intercomparison of atmospheric ^{137}Cs from the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant accident: Simulations based on identical input data, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, **123**, 11748–11765.
- Sekiyama, T. T. and Kajino, M. (2020). Reproducibility of surface wind and tracer transport simulations over complex terrain using 5-, 3-, and 1-km-grid models, *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, **59**, 937–952.
- Sekiyama, T. T., Kunii, M. and Kajino, M. (2017). The impact of surface wind data assimilation on the predictability of near-surface plume advection in the case of the Fukushima nuclear accident, *Journal of the Meteorological Society of Japan*, **95**, 447–454.
- 関山剛, 寺田宏明, 鶴田治雄, 大浦泰嗣, 森泉純 (2022). モデル検証のための福島原発事故データ, 『気象研究ノート「点発生源からのメソスケール拡散シミュレーション」』(近藤裕昭, 山澤弘実 編), 日本気象学会, 東京 (in print).
- Semane, N., Peuch, V.-H., Pradier, S., Desroziers, G., El Amraoui, L., Brousseau, P., Massart, S., Chapnik, B. and Peuch, A. (2009). On the extraction of wind information from the assimilation of ozone profiles in Météo-France 4-D-Var operational NWP suite, *Atmospheric Chemistry and Physics*, **9**, 4855–4867.
- Tsuruta, H., Oura, Y., Ebihara, M., Ohara, T. and Nakajima, T. (2014). First retrieval of hourly atmospheric radionuclides just after the Fukushima accident by analyzing filter-tapes of operational air pollution monitoring stations, *Scientific Reports*, **4**, 6717.
- Walcek, C. L. and Aleksic, N. (1998). A simple but accurate mass conservative peak-preserving mixing ratio bounded advection algorithm with Fortran code, *Atmospheric Environment*, **32**, 3863–3880.

Simultaneous Data Assimilation of Meteorological Fields and Atmospheric Concentration Fields Using Variable Localization in the Ensemble Kalman Filter

Tsuyoshi Thomas Sekiyama and Mizuo Kajino

Meteorological Research Institute, Japan Meteorological Agency

The ensemble Kalman filter (EnKF) explicitly derives background error covariance matrixes, which are subsequently used to calculate the Kalman gains. The derived background error covariance can be modified during the data assimilation process. For example, the covariance can be arbitrarily increased to spread the ensemble perturbation (i.e., covariance inflation) or decreased according to the physical distance between state variables (i.e., covariance localization). Covariance localization is a key reason why the EnKF works practically with a much smaller number of samples than the degrees of freedom of the system in meteorology. Covariance localization is applicable not only to physical distances but also between state variables with small correlations (i.e., variable localization). In this study, while simultaneously assimilating meteorological data (wind, temperature, pressure, etc.) and atmospheric concentration data using the EnKF, we attempted to zero the covariances for combinations of variables with small correlations by variable localization. This improved the analysis accuracy of the concentration distribution using wind observation information to minimize the effects of sampling errors. In contrast, under the conditions of this study, the analysis accuracy could not be improved for the wind distribution using the information of the concentration observations.

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、アンサンブル予測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; Ménérier 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.

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

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 \boldsymbol{x} として得られる.

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

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.

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

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 $\boldsymbol{\xi}$ 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.

$$(2.4) \quad B_{\mu,\nu} = C_{\mu,\nu} \sum_m X_{\mu,m} X_{\nu,m}$$

ここで、 $B_{\mu,\nu}$ は B の (μ,ν) 成分、 $C_{\mu,\nu}$ は $N \times N$ 次元の局所化行列 C の (μ,ν) 成分、 $X_{\mu,m}$ は、アンサンブル摂動行列 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。

$$(2.5) \quad C_{\mu,\nu} = \sum_a S_{\mu,a} S_{\nu,a}$$

ここで、 $S_{\mu,a}$ は、 C の根である $N \times A$ 実行列 S の (μ,a) 成分であり、 A はモード数である。 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。

$$(2.6) \quad B_{\mu,\nu} = \sum_{m,a} X_{\mu,m} S_{\mu,a} X_{\nu,m} S_{\nu,a} = \sum_{m,a} U_{\mu,m,a} U_{\nu,m,a}$$

$$U_{\mu,m,a} = X_{\mu,m} S_{\mu,a}$$

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 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、 $B = UU^T$ である。解析変数の変数変換は次式である。

$$(2.7) \quad \delta x_\mu = \sum_{m,a} U_{\mu,m,a} \xi_{m,a}$$

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。

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

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。

$$(2.9) \quad C_{\mu,\nu} = C_{\mu,\nu}^T C_{\mu,\nu}^H C_{\mu,\nu}^Z = \left(\sum_t T_{\mu,t} T_{\nu,t} \right) \left(\sum_h H_{\mu,h} H_{\nu,h} \right) \left(\sum_z Z_{\mu,z} Z_{\nu,z} \right)$$

$$= \sum_{t,h,z} (T_{\mu,t} H_{\mu,h} Z_{\mu,z}) (T_{\nu,t} H_{\nu,h} Z_{\nu,z})$$

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

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

ここで、 $C_{\mu,\nu}^T, C_{\mu,\nu}^H, C_{\mu,\nu}^Z$ 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。

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

ここで $\mathbf{X} \circ \boldsymbol{\alpha}$ は行列 \mathbf{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。

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

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、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 \mathbf{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、 $\delta \mathbf{x} = \mathbf{X} \boldsymbol{\beta}$ 、 $2J_b = \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta}$ 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、 \mathbf{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 \mathbf{C} の逆行列は存在しない。このため、 \mathbf{C} の根や \mathbf{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。

$$(3.3) \quad \mathbf{U} = (\tilde{\mathbf{X}}^1 \mathbf{S}, \dots, \tilde{\mathbf{X}}^M \mathbf{S})$$

ここで、 $\tilde{\mathbf{X}}^m$ は $N \times N$ 行列であり、その (μ, ν) 要素は $\tilde{X}_{\mu, \nu}^m \equiv X_{\mu, m} \delta_{\mu, \nu}$ 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)。 \mathbf{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。 \mathbf{U} は、 $N \times MA$ 行列である。制御変数 $\boldsymbol{\xi}$ は、 MA 次元ベクトルで、その成分は、 $(m, a) = (1, 1), (1, 2), \dots, (M, A)$ 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)。

$$(3.4) \quad \mathbf{U} = (\tilde{\mathbf{S}}^1 \mathbf{X}, \dots, \tilde{\mathbf{S}}^A \mathbf{X})$$

ここで、 $\tilde{\mathbf{S}}^a$ は $N \times N$ 行列であり、その (μ, ν) 要素は $\tilde{S}_{\mu, \nu}^a \equiv S_{\mu, a} \delta_{\mu, \nu}$ 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.

$$(3.5) \quad U = (\hat{X}^1 \circ S, \dots, \hat{X}^M \circ S)$$

ここで、 \hat{X}^m は $N \times A$ 行列であり、その (μ, a) 要素は $\hat{X}_{\mu,a}^m \equiv X_{\mu,m}$ で与えられる。 U は、 $N \times MA$ 行列である。Lorenz (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 S と 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)。

$$(3.6) \quad U = (x^1 \circ s^1, x^1 \circ s^2, \dots, x^M \circ s^A)$$

ここで、 x^m と 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。

$$(3.7) \quad U = (x^1 \circ s^1, x^1 \circ s^2, \dots, x^M \circ s^A) \equiv X \Delta S$$

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、 $UU^T = B$ を示すことで 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 Lorenz (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間変数を得る。

$$(4.1) \quad \alpha_{\mu,m} = \sum_a S_{\mu,a} \xi_{m,a}$$

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

$$(4.2) \quad \delta x_\mu = \sum_{m,a} X_{\mu,m} S_{\mu,a} \xi_{m,a} = \sum_m X_{\mu,m} \alpha_{\mu,m}$$

これは行列表現では、

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

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.

$$(4.3) \quad \begin{aligned} 2J_b &= \sum_{m,a} \xi_{m,a} \xi_{m,a} = \sum_{m,a,b} \xi_{m,a} \xi_{m,b} \delta_{a,b} = \sum_{m,a,b,\mu,\nu} \xi_{m,a} \xi_{m,b} S_{\mu,a} C_{\mu,\nu}^{-1} S_{\nu,b} \\ &= \sum_{m,\mu,\nu} \alpha_{\mu,m} \alpha_{\nu,m} C_{\mu,\nu}^{-1} \end{aligned}$$

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.

$$(4.4) \quad U_{\mu,m,a} = X_{\mu,m} S_{\mu,a} = \sum_{\nu} X_{\nu,m} \delta_{\mu,\nu} S_{\nu,a} = \sum_{\nu} \tilde{X}_{\mu,\nu}^m S_{\nu,a}$$

ここで, $\tilde{X}_{\mu,\nu}^m = X_{\nu,m} \delta_{\mu,\nu}$ を定義した. $\tilde{X}_{\mu,\nu}^m$ を $N \times N$ 行列 \tilde{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.

$$(4.5) \quad U_{\mu,m,a} = X_{\mu,m} S_{\mu,a} = \hat{X}_{\mu,a}^m S_{\mu,a}$$

ここで, $\hat{X}_{\mu,a}^m = X_{\mu,m}$ 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.

$$(4.6) \quad U_{\mu,m,a} = X_{\mu,m} S_{\mu,a} = x_{\mu}^m s_{\mu}^a$$

ここで, $x_{\mu}^m = X_{\mu,m}$, $s_{\mu}^a = S_{\mu,a}$ 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、 $U^T B^{-1} U = I$ 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 Auligné (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 Auligné, 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。 η をモデル空間の任意のベクトルとして、解の探索方向が $U^T \eta$ の形である場合は、 $\xi = U^T \eta$ であり、 $U^T B^{-1} U \neq I$ であっても、次式が成り立つ。

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

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

これらは、 $U^T B^{-1} U = I$ 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、 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 $U^T \eta$ の形であるため、以上の結果が成り立つ。

解の探索方向が $U^T \eta$ 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 Auligné (2015)の結果は直接使えないが、これらのアルゴリズムの探索方向も、仮想的に $U^T \eta$ 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)でアンサンプ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。

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

(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。

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

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。

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

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

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。

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

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

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

また、

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

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。

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

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。

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

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：

$$(5.13) \quad \delta \check{x}_g = \begin{cases} \delta x_g & 1 \leq g \leq N \\ \sigma_g & N+1 \leq g \leq G \end{cases}$$

拡張した観測演算子：

$$(5.14) \quad \check{H}_{p,l} = \sum_{\mu} H_{p,\mu} L_{\mu,l}$$

ここで、

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

である．変数変換は次式である．

$$(5.16) \quad \delta \check{x}_g = \sum_l \check{U}_{g,l} \xi_l$$

解析解は、次式である．

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

これは、 \mathbf{B} を $\mathbf{U} \mathbf{U}^T$ 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、 $\mathbf{U}^T \mathbf{B}^{-1} \mathbf{U} = \mathbf{I}$ 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.
- Berghórnsson, 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 Izdatelstvo, Leningrad (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., Lakshmvarahan, 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.

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.

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

丹羽 洋介^{1,2}・藤井 陽介^{2,3}

(受付 2022 年 1 月 4 日 ; 改訂 6 月 30 日 ; 採択 6 月 30 日)

要 旨

データ同化や逆解析の問題において、4次元変分法は有効な手法であるが、最適解の誤差が自動的に得られないという欠点がある。本稿は Niwa and Fujii (2020) で示された、4次元変分法を用いた場合の解析誤差共分散行列の推定手法について解説を行った。本手法では、最適解の探索アルゴリズムとして用いられる BFGS 公式を用いた準ニュートン法を採用しているが、厳密な直線探索やアンサンブル法、直交化を新たに導入することで、BFGS 公式の計算に必要なベクトルの共役性を保ちつつ数を増やして解析誤差共分散行列の推定精度を向上させている。

本稿では、BFGS 公式において前処理を施した場合に観測と同じ数の反復回数(または BFGS 公式に必要なベクトルのペア数)で解析的に解析誤差共分散行列が求められることを解説するとともに、Niwa and Fujii (2020) のアルゴリズムを詳述する。さらに、本手法を CO₂ の逆解析問題に適用した際の結果についても紹介する。

キーワード：解析誤差共分散行列，データ同化，逆解析，4次元変分法，BFGS 公式，準ニュートン法。

1. はじめに

4次元変分法(アジョイント法)は問題規模の大きいデータ同化・逆解析の分野において有用な手法であり、広く用いられている手法である(例えば Sasaki, 1969)。しかしながら、アンサンブル・カルマンフィルターなどの手法とは異なり、最適解の誤差(解析誤差)が自動的に得られないという欠点がある。本論文では4次元変分法を用いた場合に、どのように解析誤差を得ることができるか、一つの手法を紹介する。

観測データを \mathbf{y}^o とし、あるパラメータ \mathbf{x} からこの観測データに対応する値を計算するモデル演算を $M(\mathbf{x})$ と定義する。ここで、 \mathbf{x}, \mathbf{y}^o はそれぞれ、解析対象とする時空間内のあらゆる時間・場所の制御変数、観測データを含むものとし、要素数は n, m とする。また、モデル演算子 $M(\cdot)$ は時間発展演算子と観測演算子が含まれる。4次元変分法では、 \mathbf{x} の初期推定値 \mathbf{x}^{pri} が与えられたとき、条件付確率密度関数 $p(\mathbf{x}|\mathbf{x}^{\text{pri}}, \mathbf{y}^o)$ が最大となる解 \mathbf{x}^{pos} を求める(maximum a posteriori estimate: MAP 推定)。

¹ 国立環境研究所 地球システム領域：〒305-8506 茨城県つくば市小野川 16-2

² 気象庁気象研究所 全球大気海洋研究部：〒305-0052 茨城県つくば市長峰 1-1

³ 統計数理研究所：〒190-8562 東京都立川市緑町 10-3

$$(1.1) \quad \boldsymbol{x}^{\text{pos}} = \arg \max_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} p(\boldsymbol{x} | \boldsymbol{x}^{\text{pri}}, \boldsymbol{y}^{\circ})$$

ここで、ベイズの定理を用いると、

$$(1.2) \quad p(\boldsymbol{x} | \boldsymbol{x}^{\text{pri}}, \boldsymbol{y}^{\circ}) = \frac{p(\boldsymbol{x}^{\text{pri}}, \boldsymbol{y}^{\circ} | \boldsymbol{x}) p(\boldsymbol{x})}{p(\boldsymbol{x}^{\text{pri}}, \boldsymbol{y}^{\circ})}$$

であり、さらに、パラメータ \boldsymbol{x} が与えられたときに $\boldsymbol{x}^{\text{pri}}$ と \boldsymbol{y}° が独立に生起するとすると、

$$(1.3) \quad p(\boldsymbol{x} | \boldsymbol{x}^{\text{pri}}, \boldsymbol{y}^{\circ}) = \frac{p(\boldsymbol{x}^{\text{pri}} | \boldsymbol{x}) p(\boldsymbol{y}^{\circ} | \boldsymbol{x}) p(\boldsymbol{x})}{p(\boldsymbol{x}^{\text{pri}}, \boldsymbol{y}^{\circ})}$$

が得られる。式(1.3)の分母は \boldsymbol{x} に依存しないので式(1.1)は

$$(1.4) \quad \boldsymbol{x}^{\text{pos}} = \arg \max_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} [p(\boldsymbol{x}^{\text{pri}} | \boldsymbol{x}) p(\boldsymbol{y}^{\circ} | \boldsymbol{x}) p(\boldsymbol{x})]$$

と変形することができる。 $p(\boldsymbol{x})$ は初期推定値も観測もないときの \boldsymbol{x} の確率密度関数であり、一般に得ることは容易ではないため、ここでは一様分布と仮定すると、

$$(1.5) \quad \boldsymbol{x}^{\text{pos}} = \arg \max_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} [p(\boldsymbol{x}^{\text{pri}} | \boldsymbol{x}) p(\boldsymbol{y}^{\circ} | \boldsymbol{x})]$$

となり、MAP推定は最尤推定(maximum likelihood estimate)に帰着する(露木・川畑, 2008)。4次元変分法では式(1.5)をもとにして定義した評価関数の勾配をアジョイントモデルとよばれるモデルを用いて計算し、反復しながらその勾配がゼロとなる最適解を探索する。ここでは簡単のため、 $p(\boldsymbol{x}^{\text{pri}} | \boldsymbol{x})$ と $p(\boldsymbol{y}^{\circ} | \boldsymbol{x})$ がガウス分布であると仮定すると、評価関数は一般的に対数で定義され、

$$(1.6) \quad J(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{\text{pri}})^{\text{T}} \boldsymbol{B}^{-1}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{\text{pri}}) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{y}^{\circ})^{\text{T}} \boldsymbol{R}^{-1}(\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{y}^{\circ})$$

と表すことができる。4次元変分法では、この評価関数 J を最小とする解を求める。なお、 \boldsymbol{B} および \boldsymbol{R} はそれぞれ初期推定誤差とモデル-観測間の差の共分散行列を表している。さらに、 $\boldsymbol{M}(\cdot)$ が十分に線形であるとみなせる場合には、式(1.6)は接線形モデルを表す行列 \boldsymbol{M} を用いて以下のように書き直すことができる。

$$(1.7) \quad J(\delta \boldsymbol{x}) = \frac{1}{2} \delta \boldsymbol{x}^{\text{T}} \boldsymbol{B}^{-1} \delta \boldsymbol{x} + \frac{1}{2} (\boldsymbol{M} \delta \boldsymbol{x} - \boldsymbol{d}^{\circ})^{\text{T}} \boldsymbol{R}^{-1} (\boldsymbol{M} \delta \boldsymbol{x} - \boldsymbol{d}^{\circ})$$

なお、 $\delta \boldsymbol{x} := \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{\text{pri}}$ であり $\boldsymbol{d}^{\circ} := \boldsymbol{y}^{\circ} - \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}^{\text{pri}})$ である。式(1.7)の評価関数が最小となる解は

$$(1.8) \quad \delta \boldsymbol{x}^{\text{pos}} = \arg \min_{\delta \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} J(\delta \boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{B}^{-1} + \boldsymbol{M}^{\text{T}} \boldsymbol{R}^{-1} \boldsymbol{M})^{-1} \boldsymbol{M}^{\text{T}} \boldsymbol{R}^{-1} \boldsymbol{d}^{\circ}$$

であり、このとき、評価関数の勾配 $\nabla_{\delta \boldsymbol{x}} J$ は

$$(1.9) \quad \nabla_{\delta \boldsymbol{x}} J = \boldsymbol{B}^{-1} \delta \boldsymbol{x} + \boldsymbol{M}^{\text{T}} \boldsymbol{R}^{-1} (\boldsymbol{M} \delta \boldsymbol{x} - \boldsymbol{d}^{\circ}) = \mathbf{0}$$

を満たす。問題の規模が大きい場合、式(1.8)を解析的に解くことは不可能なため、実際の4次元変分法の計算では $\boldsymbol{M}^{\text{T}}$ で表されるアジョイントモデルを用いて評価関数の勾配を計算し、最適解の探索を行う。この時、最適解の誤差共分散行列(解析誤差共分散行列) \boldsymbol{P}_a は必要なく、同時に求められることはないが、実際には \boldsymbol{P}_a は評価関数のヘッセ行列 ($\boldsymbol{A} = \nabla_{\delta \boldsymbol{x}} \nabla_{\delta \boldsymbol{x}}^{\text{T}} J(\delta \boldsymbol{x}) = \boldsymbol{B}^{-1} + \boldsymbol{M}^{\text{T}} \boldsymbol{R}^{-1} \boldsymbol{M}$) の逆行列と等しく、

$$(1.10) \quad \boldsymbol{P}_a = \boldsymbol{A}^{-1} = (\boldsymbol{B}^{-1} + \boldsymbol{M}^{\text{T}} \boldsymbol{R}^{-1} \boldsymbol{M})^{-1}$$

と表すことができる。問題規模が大きい場合には式(1.8)と同様に式(1.10)も解析的に解くこと

は不可能なため、 \mathbf{P}_a を推定する手法が必要となってくる。なお、式(1.7)–(1.10)では、 $M(\cdot)$ ではなく線形のモデル M が使われていることに注意が必要である。モデルが線形であるために、評価関数(式(1.7))が2次関数であり、極小値が一つしか存在せず、ヘッセ行列が定数行列となっている。したがって、解析誤差共分散行列はモデルが線形である場合にしか定義することができない。本稿では、この解析誤差共分散行列を推定する手法を提案しているが、その適用範囲は、モデルが線形であり、かつ、 $p(\mathbf{x}^{\text{pri}}|\mathbf{x})$ と $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ がガウス分布と仮定した線形問題に限っていることに注意されたい。

これまで4次元変分法をフレームワークとした \mathbf{P}_a の推定には様々な手法が提案されており、ランダム化(randomization)法、モンテ・カルロ法、ランチョス法、Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS)法などがある (Rabier and Courtier, 1992; Fisher and Courtier, 1995; Chevallier et al., 2007)。他にも second-order adjoint 法を用いる手法も存在するが (Ito et al., 2016)、制御変数の最適化計算では用いない second-order adjoint モデルを新たに開発する必要がある、モデルが大規模で複雑である場合には開発コストがかかる。ランダム化法やモンテ・カルロ法はその確率的な性質からサンプル数に精度が大きく依存し、特に共分散 (\mathbf{P}_a の非対角要素) の推定精度に難があることが指摘されている (Fisher and Courtier, 1995)。一方で、ランチョス法および BFGS 法は、それぞれ、4次元変分法の最適解探索のアルゴリズムとして用いられる共役勾配法や準ニュートン法と密接に関係、またはアルゴリズムの一部として用いられているため、最適解探索のアルゴリズムを応用することで \mathbf{P}_a を推定することが可能であるが、その推定精度を上げるためには、さらなる追加の手法が必要となってくる (Bousserez et al., 2015)。

そこで筆者らは、制御変数の最適化に用いる既存の BFGS 法を使用しつつ、実装が簡易なベクトルの共役化やアンサンブルを新たに導入することにより、高精度に \mathbf{P}_a を導出する手法を開発した (Niwa and Fujii, 2020)。本論文では、その手法について解説を行う。なお、これからの記述においては、簡単のために $\delta\mathbf{x}$ の δ は省略するとともに、慣例的な表記に従って、ベクトル \mathbf{d} は制御変数の探索方向、ベクトル \mathbf{y} は評価関数の勾配のインクリメントとして表すこととする。

2. BFGS 公式

4次元変分法で用いられる最適解探索のアルゴリズムの一つとして準ニュートン法がある。この準ニュートン法は、ある k 回目の反復計算における制御変数の更新式

$$(2.1) \quad \mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{k-1} + \alpha_k \mathbf{d}_{k-1}$$

で必要な探索ベクトル \mathbf{d}_{k-1} を求める際に、ヘッセ行列の近似逆行列を用いる手法である (なお、 α_k はその探索幅で $J(\mathbf{x}_{k-1} + \alpha_k \mathbf{d}_{k-1})$ が最小となるように決められる)。具体的には、探索ベクトルはヘッセ行列の近似逆行列 \mathbf{H}_k と評価関数の勾配ベクトル \mathbf{g}_k を使って、

$$(2.2) \quad \mathbf{d}_k = -\mathbf{H}_k \mathbf{g}_k$$

として決定される。この時に必要な \mathbf{H}_k の求め方には様々な手法が存在するが、その一つに BFGS 公式があり、以下のような式で書くことができる。

$$(2.3) \quad \mathbf{H}_k = (\mathbf{I} - \rho_k \mathbf{p}_k \mathbf{y}_k^{\text{T}}) \mathbf{H}_{k-1} (\mathbf{I} - \rho_k \mathbf{y}_k \mathbf{p}_k^{\text{T}}) + \rho_k \mathbf{p}_k \mathbf{p}_k^{\text{T}}$$

なお、ここで、 $\mathbf{p}_k := \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}$ 、 $\mathbf{y}_k := \mathbf{g}_k - \mathbf{g}_{k-1}$ 、 $\rho_k := 1/(\mathbf{y}_k^{\text{T}} \mathbf{p}_k)$ であり、 \mathbf{I} は単位行列を表す。また、最初の反復で必要となる \mathbf{H}_0 は任意の正定値対称行列を用いることができる。実際の(2.2)と(2.3)の計算では、 \mathbf{y} および \mathbf{p} のベクトルのみを使った再帰的な計算 (two-loop recursion

scheme)を用いることで、 \mathbf{H}_k をメモリに保持することなく \mathbf{d}_k を計算することができる(例えば Nocedal and Wright, 2006).

ここで注目すべき点は、 \mathbf{H}_k がヘッセ行列の近似逆行列であるということから、 \mathbf{P}_a の近似行列と見なすこともできるということである。したがって、式(2.2)で \mathbf{g}_k を $(1, 0, \dots, 0)^\top$, $(0, 1, \dots, 0)^\top, \dots, (0, 0, \dots, 1)^\top$ といったベクトルに置き換えてやれば、 \mathbf{P}_a のそれぞれの列を推定することが可能となる。しかし、その推定精度は \mathbf{H}_k の計算に必要なベクトル \mathbf{p} , \mathbf{y} や初期推定行列 \mathbf{H}_0 に依存する。Niwa and Fujii (2020)では、アンサンブル手法を使ってベクトル (\mathbf{p}, \mathbf{y}) のペア数を増やしつづ、 (\mathbf{p}, \mathbf{y}) が本来満たすべき共役性を達成することで \mathbf{P}_a の推定精度が大幅に向上することを実証した。以下の章ではその手法について解説していく。

3. 共役性

問題が線形(評価関数が下に凸な2次関数)であるとき、共役性が満たされているとは、以下の式が成り立っていることを意味する。

$$(3.1) \quad \mathbf{p}_i^\top \mathbf{A} \mathbf{p}_j = 0, \quad \text{for all } i \neq j$$

または、線形の場合には $\mathbf{A} \mathbf{p}_j = \mathbf{y}_j$ であることから

$$(3.2) \quad \mathbf{p}_i^\top \mathbf{y}_j = 0, \quad \text{for all } i \neq j$$

BFGS 公式を用いた反復計算において、この共役性が満たされていれば、制御変数の数(= n)の回数の反復で解が収束して解析解と等しくなり、また、そこでの \mathbf{H}_k もヘッセ行列の逆行列と等しくなる($\mathbf{H}_n = \mathbf{A}^{-1}$)ことが知られている(Nocedal and Wright, 2006)。逆にいえば、共役性が満たされていなければ、 n 以上の回数が解の収束に必要となる。

実際には前処理を行うことで、この収束速度は速めることができる。最適化計算において前処理は一般的に使われるものであるが、最もよく使われるものに Lorenc (1988)の手法がある。この Lorenc (1988)の前処理では、制御変数が

$$(3.3) \quad \tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{B}^{-1/2} \mathbf{x}$$

と変換される。この時、変換されたヘッセ行列は

$$(3.4) \quad \begin{aligned} \tilde{\mathbf{A}} &= \mathbf{I} + \mathbf{B}^{1/2} \mathbf{M}^\top \mathbf{R}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{B}^{1/2} = \mathbf{I} + \mathbf{X} \mathbf{X}^\top \\ \mathbf{X} &:= \mathbf{B}^{1/2} \mathbf{M}^\top \mathbf{R}^{-1/2} \end{aligned}$$

と書くことができる。通常のデータ同化または逆解析の問題では、 $n > m$ であるため、このヘッセ行列は1以外の固有値はたかだか m 個しか存在せず、収束性を速めることができる。なおこの前処理をした後のBFGS公式において、そのヘッセ近似逆行列の初期値 $\tilde{\mathbf{H}}_0$ を最もシンプルな正定値対称行列である \mathbf{I} とした場合($\tilde{\mathbf{H}}_0 = \mathbf{I}$)、前処理前のBFGS公式において $\mathbf{H}_0 = \mathbf{B}$ とした場合と同等となる。したがって、通常のBFGS公式において $\mathbf{H}_0 = \mathbf{B}$ とすれば、陰に式(3.3)の前処理をしたこととなり、収束を速めることができる。このような前処理をしたBFGS公式においては、観測数 m の数だけの共役性を満たす (\mathbf{y}, \mathbf{p}) のベクトルのペアさえあれば、それらによって得られるヘッセ近似逆行列 \mathbf{H}_m が解析的に得られる行列、すなわち \mathbf{P}_a と等しくなる。

このことは以下のように証明することができる。まず、共役性が満たされていれば、変換後も

$$(3.5) \quad \tilde{\mathbf{p}}_i^\top \tilde{\mathbf{y}}_j = \tilde{\mathbf{p}}_i^\top \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{p}}_j = 0, \quad \text{for all } i \neq j$$

であるため,

$$(3.6) \quad \begin{aligned} \tilde{\mathbf{H}}_k \tilde{\mathbf{y}}_j &= [(\mathbf{I} - \tilde{\rho}_k \tilde{\mathbf{p}}_k \tilde{\mathbf{y}}_k^{\text{T}}) \tilde{\mathbf{H}}_{k-1} (\mathbf{I} - \tilde{\rho}_k \tilde{\mathbf{y}}_k \tilde{\mathbf{p}}_k^{\text{T}}) + \tilde{\rho}_k \tilde{\mathbf{p}}_k \tilde{\mathbf{p}}_k^{\text{T}}] \tilde{\mathbf{y}}_j \\ &= (\mathbf{I} - \tilde{\rho}_k \tilde{\mathbf{p}}_k \tilde{\mathbf{y}}_k^{\text{T}}) \tilde{\mathbf{H}}_{k-1} \tilde{\mathbf{y}}_j \\ &= (\mathbf{I} - \tilde{\rho}_k \tilde{\mathbf{p}}_k \tilde{\mathbf{y}}_k^{\text{T}}) (\mathbf{I} - \tilde{\rho}_{k-1} \tilde{\mathbf{p}}_{k-1} \tilde{\mathbf{y}}_{k-1}^{\text{T}}) \cdots (\mathbf{I} - \tilde{\rho}_{j+1} \tilde{\mathbf{p}}_{j+1} \tilde{\mathbf{y}}_{j+1}^{\text{T}}) \tilde{\mathbf{H}}_j \tilde{\mathbf{y}}_j, \quad \text{for } j \leq k \end{aligned}$$

が導かれる. ここで, $\tilde{\mathbf{y}}_k := \mathbf{B}^{1/2} \mathbf{y}_k$, $\tilde{\mathbf{p}}_k := \mathbf{B}^{-1/2} \mathbf{p}_k$, $\tilde{\rho}_k := 1/(\tilde{\mathbf{y}}_k^{\text{T}} \tilde{\mathbf{p}}_k)$ である. また,

$$(3.7) \quad \tilde{\mathbf{H}}_j \tilde{\mathbf{y}}_j = [(\mathbf{I} - \tilde{\rho}_j \tilde{\mathbf{p}}_j \tilde{\mathbf{y}}_j^{\text{T}}) \tilde{\mathbf{H}}_{j-1} (\mathbf{I} - \tilde{\rho}_j \tilde{\mathbf{y}}_j \tilde{\mathbf{p}}_j^{\text{T}}) + \tilde{\rho}_j \tilde{\mathbf{p}}_j \tilde{\mathbf{p}}_j^{\text{T}}] \tilde{\mathbf{y}}_j = \tilde{\mathbf{p}}_j, \quad \text{for } j \leq k$$

により, 式(3.6)は

$$(3.8) \quad \tilde{\mathbf{H}}_k \tilde{\mathbf{y}}_j = \tilde{\mathbf{p}}_j, \quad \text{for } j \leq k$$

となり, シンプルな関係性が得られる (Dennis, Jr. and Moré, 1977; Fisher and Courtier, 1995). さらに \mathbf{X} の固有ベクトル $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_m\}$ のいずれとも直交する任意のベクトルを $\tilde{\mathbf{u}}$ とすると,

$$(3.9) \quad \begin{aligned} \tilde{\mathbf{H}}_k \tilde{\mathbf{u}} &= [(\mathbf{I} - \tilde{\rho}_k \tilde{\mathbf{p}}_k \tilde{\mathbf{y}}_k^{\text{T}}) \tilde{\mathbf{H}}_{k-1} (\mathbf{I} - \tilde{\rho}_k \tilde{\mathbf{y}}_k \tilde{\mathbf{p}}_k^{\text{T}}) + \tilde{\rho}_k \tilde{\mathbf{p}}_k \tilde{\mathbf{p}}_k^{\text{T}}] \tilde{\mathbf{u}} \\ &= (\mathbf{I} - \tilde{\rho}_k \tilde{\mathbf{p}}_k \tilde{\mathbf{y}}_k^{\text{T}}) \tilde{\mathbf{H}}_{k-1} \tilde{\mathbf{u}} \\ &= (\mathbf{I} - \tilde{\rho}_k \tilde{\mathbf{p}}_k \tilde{\mathbf{y}}_k^{\text{T}}) (\mathbf{I} - \tilde{\rho}_{k-1} \tilde{\mathbf{p}}_{k-1} \tilde{\mathbf{y}}_{k-1}^{\text{T}}) \cdots (\mathbf{I} - \tilde{\rho}_1 \tilde{\mathbf{p}}_1 \tilde{\mathbf{y}}_1^{\text{T}}) \tilde{\mathbf{H}}_0 \tilde{\mathbf{u}} \\ &= \tilde{\mathbf{u}} \end{aligned}$$

という関係が得られる. なお, ここで

$$(3.10) \quad \tilde{\mathbf{y}}_k \in \text{span}\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_m\}, \quad \tilde{\mathbf{p}}_k \in \text{span}\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_m\}, \quad \text{for any } k \leq m$$

を満たしており,

$$(3.11) \quad \text{span}\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_m\} = \text{span}\{\tilde{\mathbf{p}}_1, \tilde{\mathbf{p}}_2, \dots, \tilde{\mathbf{p}}_m\}$$

であることから(これらの詳しい証明は Niwa and Fujii, 2020 を参照のこと), $1 \leq k \leq m$ について $\tilde{\mathbf{p}}_k^{\text{T}} \tilde{\mathbf{u}} = 0$ かつ $\tilde{\mathbf{y}}_k^{\text{T}} \tilde{\mathbf{u}} = 0$ であること, さらに $\tilde{\mathbf{H}}_0 = \mathbf{I}$ であることを用いた.

ここで, 制御変数の空間の任意のベクトル \mathbf{b} は式(3.11)により

$$(3.12) \quad \begin{aligned} \mathbf{b} &= \sum_{i=1}^m a_i \tilde{\mathbf{p}}_i + \tilde{\mathbf{u}} = \tilde{\mathbf{P}} \mathbf{a} + \tilde{\mathbf{u}} \\ \tilde{\mathbf{P}} &:= (\tilde{\mathbf{p}}_1, \tilde{\mathbf{p}}_2, \dots, \tilde{\mathbf{p}}_m), \mathbf{a} := (a_1, a_2, \dots, a_m)^{\text{T}} \end{aligned}$$

と表すことができ, その \mathbf{b} は以下の式を満たす.

$$(3.13) \quad \tilde{\mathbf{H}}_m \tilde{\mathbf{A}} \mathbf{b} = \tilde{\mathbf{H}}_m (\tilde{\mathbf{Y}} \mathbf{a} + \tilde{\mathbf{u}}) = \tilde{\mathbf{P}} \mathbf{a} + \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{b}$$

ここで $\tilde{\mathbf{Y}} := (\tilde{\mathbf{y}}_1, \tilde{\mathbf{y}}_2, \dots, \tilde{\mathbf{y}}_m)$ であり, 式(3.4), (3.8), (3.9), また, $\tilde{\mathbf{y}} = \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{p}}$, $\mathbf{X}^{\text{T}} \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$ であることを用いた. さらに式(3.13)は

$$(3.14) \quad (\tilde{\mathbf{H}}_m \tilde{\mathbf{A}} - \mathbf{I}) \mathbf{b} = \mathbf{0}$$

と書き換えることができ, この式が任意のベクトル \mathbf{b} に対して成り立つことから, $\tilde{\mathbf{H}}_m = \tilde{\mathbf{A}}^{-1}$ であり, 前処理前の行列においても

$$(3.15) \quad \mathbf{H}_m = \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{P}_a$$

が成り立つ。以上のことから、共役性が保たれていれば、 m 個の (\mathbf{y}, \mathbf{p}) のペアによって \mathbf{P}_a が解析的に導出できることが示されたが、 m 個だけあれば良いとはいえ、観測データの数は通常、可能な反復回数よりも大きい。したがって、 (\mathbf{y}, \mathbf{p}) のベクトルのペアを如何に増やすか、また、それらの (\mathbf{y}, \mathbf{p}) のベクトルについて、どうやって共役性を保たせることができるか、これらの問題に対応した手法を次節で紹介する。

4. 共役性のある (\mathbf{y}, \mathbf{p}) ベクトルの導出

上記では解析誤差共分散行列 \mathbf{P}_a の推定のために BFGS 公式を用いることを提案しているが、そこで必要な (\mathbf{y}, \mathbf{p}) の作成には必ずしも BFGS 公式を用いた準ニュートン法を用いる必然性はない。しかし、Niwa and Fujii (2020) では BFGS 公式を用いた準ニュートン法をベースとしたアルゴリズム POPULar (Preconditioned Optimizing Utility for Large-dimensional analyse) (Fujii and Kamachi, 2003; Fujii, 2005) を用いて (\mathbf{y}, \mathbf{p}) のペアを作成しており、ここで、新たに厳密な直線探索 (exact line search) を導入して (\mathbf{y}, \mathbf{p}) の共役性が保たれるようにしている。さらに、 (\mathbf{y}, \mathbf{p}) のペア数を増やすためにアンサンブルを導入し、アンサンブルメンバー間の (\mathbf{y}, \mathbf{p}) についても共役性が保たれるように直交化を行っている。

4.1 厳密な直線探索

問題が線形であり、評価関数が下に凸な二次関数である場合、式(2.1)において $J(\mathbf{x}_{k-1} + \alpha_k \mathbf{d}_{k-1})$ が最小となる α_k は解析的に

$$(4.1) \quad \alpha_k = -\frac{\mathbf{d}_{k-1}^T \mathbf{g}_{k-1}}{\mathbf{d}_{k-1}^T \mathbf{A} \mathbf{d}_{k-1}}$$

と表すことができ、この α_k を用いた直線探索を厳密な直線探索 (exact line search) と呼ぶ。問題が線形な場合、この厳密な直線探索が BFGS 公式を用いた準ニュートン法で行われれば、得られる (\mathbf{y}, \mathbf{p}) ベクトルが共役性を持つことが知られている (Dennis, Jr. and Moré, 1977)。しかしながら、式(4.1)は \mathbf{A} が基本的に未知であり、また、既知であったとしても、その行列のサイズの大きさ ($n \times n$) から容易に計算することはできない。しかし、新たな変数

$$(4.2) \quad \mathbf{f}_k = \mathbf{e}_{k-1} + \mathbf{M}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{d}_{k-1}$$

を導入することにより、式(4.1)は

$$(4.3) \quad \alpha_k = -\frac{\mathbf{d}_{k-1}^T \mathbf{g}_{k-1}}{\mathbf{d}_{k-1}^T \mathbf{f}_k}$$

となり、ベクトルのみで計算することが可能となる。なお、ここで、 $\mathbf{e} := \mathbf{B}^{-1} \mathbf{d}$ である。式(4.2)式に \mathbf{M} と \mathbf{M}^T があるため、 \mathbf{f} の計算には接線形モデルとアジョイントモデルによる計算が必要となっているが、一方で評価関数の勾配 \mathbf{g} は

$$(4.4) \quad \mathbf{g}_k = \mathbf{g}_{k-1} + \alpha_k \mathbf{f}_k$$

という式で更新することができるため、通常最適化計算において必要であった \mathbf{g} の導出における \mathbf{M} および \mathbf{M}^T の計算は必要ではなくなり、全体的な計算量は厳密な直線探索を導入しても変わらないようになっている。

実はこの \mathbf{f} を用いた厳密な直線探索は Derber and Rosati (1989) で提案されている。ただし、その最適化手法は準ニュートン法ではなく共役勾配法が用いられている。この共役勾配法では、先ほど述べた Lorenc (1988) の前処理を処しているものの、漸化式を用いることによって、

前処理に必要な $B^{1/2}$ や B^{-1} の計算は必要ないというのがもう一つの特徴である。POpULar は、非線形の場合にも対応できるように、この Derber and Rosati (1989) の手法を BFGS 公式を用いた準ニュートン法に拡張したもので、直線探索も厳密なものではないものに置き換えられている。しかし、Niwa and Fujii (2020) はこの POpULar をベースとしつつも、直線探索を上記の厳密なものに戻して共役性のある (\mathbf{y}, \mathbf{p}) ベクトルのペアを作成するようにした (Linear POpULar)。そのアルゴリズムは以下のようになる。

Algorithm 1 Linear POpULar

```

 $\mathbf{x}_0 \leftarrow \mathbf{0};$ 
 $\mathbf{g}_0 \leftarrow -M^T R^{-1} d^0;$ 
 $\mathbf{d}_0 \leftarrow -B\mathbf{g}_0;$ 
 $\mathbf{e}_0 \leftarrow -\mathbf{g}_0;$ 
 $k \leftarrow 1;$ 
repeat
   $\mathbf{f}_k = \mathbf{e}_{k-1} + M^T R^{-1} M \mathbf{d}_{k-1};$ 
   $\mathbf{x}_k \leftarrow \mathbf{x}_{k-1} + \alpha_k \mathbf{d}_{k-1};$ 
  ここで、 $\alpha_k$  は厳密な直線探索(式 4.3)で得られる;
   $\mathbf{g}_k = \mathbf{g}_{k-1} + \alpha_k \mathbf{f}_k;$ 
   $\mathbf{d}_k \leftarrow -H_k \mathbf{g}_k;$ 
   $\mathbf{e}_k \leftarrow B^{-1} \mathbf{d}_k;$ 
  ここで、two-loop recursion scheme を用いた BFGS 公式の計算により  $\mathbf{d}_k$  のみならず  $\mathbf{e}_k$  の計算も行う。
  その際、 $B^{-1}$  の計算を行わずとも  $\mathbf{e}_k$  を計算することができる;
   $k \leftarrow k + 1;$ 
until convergence
  
```

なお、BFGS 公式において、最初のヘッセ行列の逆行列の推定 (H_0) に B を用いることで Lorenc (1988) の前処理を導入しているが、上記のアルゴリズムで見て分かる通り、 $B^{1/2}$ や B^{-1} の計算は必要ない。

問題が線形で厳密な直線探索が使われている場合、共役勾配法と BFGS 公式を用いた準ニュートン法は同一であることが知られているが(例えば Nazareth, 1979)、共役勾配法は丸め誤差の影響を受けやすいため (Golub and van Loan, 1996)、安定して共役性の保たれた (\mathbf{y}, \mathbf{p}) のペアを得るためには、準ニュートン法を用いた方が適している。また、ここで注意しておきたいのが、オリジナルの POpULar の BFGS 公式で使われており、また、一般的にもよく使われているメモリ節約は Niwa and Fujii (2020) では用いていないという点である。メモリ節約とは式(2.3)の H の更新式において、全ての (\mathbf{y}, \mathbf{p}) ベクトルを用いるのではなく、直近のあらかじめ定めた数のペアのみを用いることであるが、ここでの目的は、共役性の保たれた (\mathbf{y}, \mathbf{p}) ベクトルのペアをできるだけ多く作るということであるため、わざわざベクトルの数を減らすメモリ節約は行わない。なお、近年の計算機性能の向上により、全ての (\mathbf{y}, \mathbf{p}) のデータを保持することは容易であり(必ずしもメモリに載せる必要はなく、ディスクに格納できれば良い)、全ての (\mathbf{y}, \mathbf{p}) のデータを保持することに大きな障害は生じない。

最終的な反復回数を K 、モデル計算にかかるコストを C とすると、Algorithm 1 全体の計算量は $O(nK^2) + O(KC)$ と表すことができる。第一項は反復回数の二乗に比例しているが、大気・海洋などの問題でモデル計算のコストが圧倒的に大きい場合には、第二項が卓越し、反復回数に比例して計算量が増加する。また、理論的に必要とされる (\mathbf{y}, \mathbf{p}) の数(= 反復回数)はたかだか m であるが、 $n \gg m$ であったとしても、相当の反復回数が必要となる場合がある。特

にモデル計算が大規模な場合には、アルゴリズムが逐次的であるために、実行可能な反復回数に限界が生じる(計算時間(wall-clock time)がかかりすぎる)。そこで次節では、実行可能な反復回数で Algorithm 1 の計算を打ち切る一方、同様の計算を複数、同時に行うことで、効率よく (\mathbf{y}, \mathbf{p}) の数を増やすことを考える。

4.2 アンサンブルと直交化

BFGS 公式の式(2.3)を見て分かる通り、 \mathbf{H} は (\mathbf{y}, \mathbf{p}) の順序には関係ない。したがって、 $\mathbf{A}\mathbf{p} = \mathbf{y}$ である (\mathbf{y}, \mathbf{p}) のベクトルの数を何らかの方法で増やせばよく、そのため、Niwa and Fujii (2020)では、準ニュートン法による最適化計算を同時に複数行うアンサンブル手法を用いた。先行研究である Bousserez et al. (2015)でも同様に、BFGS 公式とアンサンブルを組み合わせた手法を提案しているが、Niwa and Fujii (2020)では、さらに、得られた (\mathbf{y}, \mathbf{p}) ベクトルに直交化を施すプロセスを入れている。これは、それぞれのアンサンブルメンバーは独立に最適化計算を行うことから、メンバーをまたいで (\mathbf{y}, \mathbf{p}) の共役性が保たれないため、直交化は、これらのベクトルを変換して共役性を満たすようにする。この直交化は以下のようにして行う。

まず得られた全ての (\mathbf{y}, \mathbf{p}) ベクトルをそれぞれ並べて以下のような行列を作る。

$$(4.5) \quad \mathbf{P} = (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \dots, \mathbf{p}_N)$$

$$(4.6) \quad \mathbf{Y} = (\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \mathbf{y}_3, \dots, \mathbf{y}_N)$$

ここで N は全てのアンサンブルメンバーから得られた (\mathbf{y}, \mathbf{p}) ベクトルの数である。次に、 \mathbf{P} と \mathbf{Y} をかけて行列 \mathbf{Q} を作成する。

$$(4.7) \quad \mathbf{Q} = \mathbf{P}^T \mathbf{Y}$$

$\mathbf{p}^T \mathbf{y} = \mathbf{p}^T \mathbf{A}\mathbf{p}$ であり \mathbf{A} がそもそも対称行列であることから、 \mathbf{Q} も対称行列であり、次のように固有値分解することができる。

$$(4.8) \quad \mathbf{Q} = \mathbf{U}\mathbf{L}\mathbf{U}^T$$

ここで \mathbf{U} は固有ベクトルからなる直交行列、 \mathbf{L} は固有値を対角成分にもつ対角行列である。なお、 $N \leq m$ であり、 \mathbf{Q} は $N \times N$ の次元である。 m が十分に小さい場合には(実際に大気・海洋などのデータ同化・逆問題などでは、 $n \gg m$ であることが多い)、式(4.8)の固有値分解は容易に実行可能である。この固有値分解において、理論的には \mathbf{Q} は正定値行列であるために、得られる固有値も全て正となるべきだが、実際の計算では計算誤差により非常に小さい、または負の固有値が計算されてしまう。そこで Niwa and Fujii (2020)では、計算を安定化させるため、最大の固有値と比して 1.0×10^{-6} より小さい固有値を除外している。その除外された後の固有ベクトル、固有値からなる行列をそれぞれ、 \mathbf{U}' 、 \mathbf{L}' とし、それらを使って \mathbf{P} と \mathbf{Y} を以下のように変換する。

$$(4.9) \quad \mathbf{P}' = (\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2, \mathbf{p}'_3, \dots, \mathbf{p}'_{N'}) = \mathbf{P}\mathbf{U}'\mathbf{L}'^{-1/2}$$

$$(4.10) \quad \mathbf{Y}' = (\mathbf{y}'_1, \mathbf{y}'_2, \mathbf{y}'_3, \dots, \mathbf{y}'_{N'}) = \mathbf{Y}\mathbf{U}'\mathbf{L}'^{-1/2}$$

ここで、 N' は除外後の有効な固有値の数であり、 \mathbf{U}' は $N \times N'$ 、 \mathbf{L}' は $N' \times N'$ の次元となっている。なお、変換後でも

$$(4.11) \quad \mathbf{P}'^T \mathbf{Y}' = \mathbf{I}$$

が成り立ち、共役性

$$(4.12) \quad \mathbf{p}_i^T \mathbf{y}'_j = \mathbf{p}'_i{}^T \mathbf{A} \mathbf{p}'_j = 0, \quad \text{for all } i \neq j$$

が満たされていることに注目されたい。この変換後の $(\mathbf{y}', \mathbf{p}')$ を BFGS 公式の計算に用いるが、単一の反復計算で得られる数よりもはるかに多くの数で、かつ、共役性が保たれているため、 \mathbf{P}_a を高精度に推定することが可能となる。

なお、アンサンブルで得られた複数の解析値のばらつきを解析誤差とするのではなく、単純に (\mathbf{y}, \mathbf{p}) のベクトルのペア数を増やせば良いので、アンサンブルメンバーの作成はシンプルにできる。式(1.10)で表せられるように、 \mathbf{P}_a は誤差共分散行列 \mathbf{B} と \mathbf{R} 、またモデルの計算 \mathbf{M} にしかよらないため、これらの行列さえ共通であれば、特段、摂動の与え方に制約はない。そこで、Niwa and Fujii (2020)では、単純にランダムに生成した $\mathbf{d}^\circ (= \mathbf{y}^\circ - \mathbf{M}(\mathbf{x}^{\text{pri}}))$ を入力として用いている。

Niwa and Fujii (2020)の手法では、4.1節の厳密な直線探索を使った準ニュートン法の計算をアンサンブルで行い、そこで得られた (\mathbf{y}, \mathbf{p}) ベクトルを直交化して BFGS 公式を計算している。最終的に直交化するため、理論的には各アンサンブルメンバーの計算で厳密な直線探索を用いる必然性はないが ($\mathbf{A}\mathbf{p} = \mathbf{y}$ さえ満たされていれば良い)、あらかじめ、厳密な直線探索で各メンバー内の (\mathbf{y}, \mathbf{p}) の共役性が保たれていた方が安定的に \mathbf{P}_a を推定できることを実際の実験で経験している。また、直線探索を厳密にすることで発生する追加の計算コストはないため、安全のためにも直線探索を厳密に行っておく方が良い。なお、以上のアルゴリズムでは全て問題が線形であることを前提としているので、モデル計算も線形であることが必須条件である。線形の現象を扱っているモデルであっても、精度向上のために、しばしば非線形の処理がなされる場合があるが、そういった非線形の部分はあらかじめ外しておく必要がある。

5. CO₂ 逆解析問題への適用

上記で紹介したアルゴリズムの有用性を確認するため、Niwa and Fujii (2020)では、大気二酸化炭素(CO₂)濃度の観測データから地表面フラックスを推定するという CO₂ 逆解析問題において、上記アルゴリズムを使って解析誤差共分散行列 \mathbf{P}_a の導出を試みた。用いた数値モデルや実験設定の詳細は Niwa and Fujii (2020)を参照されたい。

図1は BFGS 公式で推定した \mathbf{P}_a が反復回数を重ねるごとに解析解に近づいていく様子を示している。図1(a), (b)では一つの BFGS 公式による計算結果を示し、図1(c), (d)は50メンバーのアンサンブルを使った場合を示す。また、ここで解析解との差をノルムと Ueno and Nakamura (2016)で定義された divergence の2通りで示すことで、メトリックによる違いも確認している。図1でわかることは、反復を重ねるとともにほぼ単調に推定誤差が減少すること、また、アンサンブルを用いることで、誤差の減少速度を大幅に短縮していることがわかる(上段と下段で横軸のスケールが異なることに注意)。このことから、BFGS 公式で用いる (\mathbf{y}, \mathbf{p}) の数を増やすことで、 \mathbf{P}_a の推定精度を高められていることがわかる。さらに、ここでは、共役性のある (\mathbf{y}, \mathbf{p}) を用いた場合に加え(実線)、共役性のない場合(点線)も示している。共役性のない場合では、通常、よく用いられる厳密ではない直線探索を使っており、また、直交化も行っていないが、精度を高めるために BFGS 公式の計算を10回繰り返している(以後同じ。詳細は Niwa and Fujii, 2020を参照のこと)。この両者の違いから、共役性を保つことで推定精度が高められていることがわかる。

図2は \mathbf{P}_a の非対角成分から計算した、東アジアのある場所のフラックスに対する誤差相関の分布を示す。ここでは、50メンバーを用いて15回の反復を行った結果について、共役性が

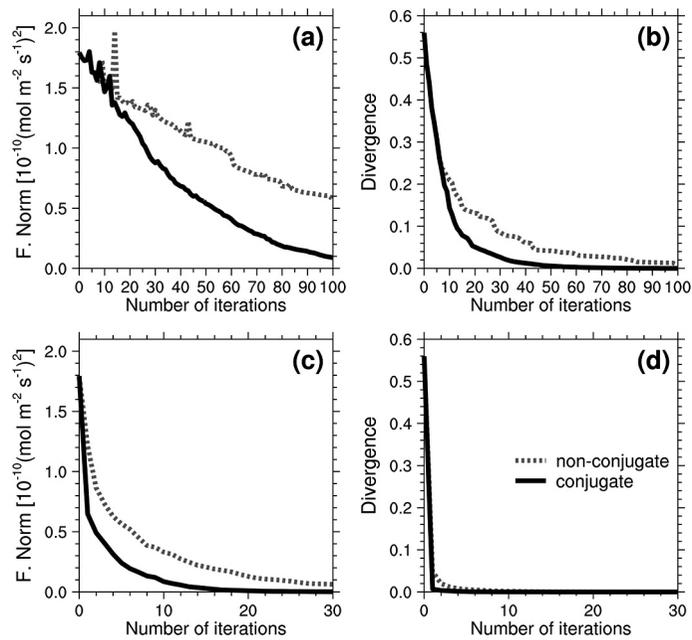


図1. CO₂ 逆解析問題において、BFGS 公式で導出した解析誤差共分散行列 P_a とその解析解との差のノルム (a, c), また、Ueno and Nakamura (2016) で定義された divergence (b, d) の反復回数との関係。上段は一つの BFGS 公式の計算によるもの、下段は 50 メンバーを用いた場合を示す。また、実線は (y, p) ベクトルに共役性がある場合、点線はない場合を示す。Niwa and Fujii (2020) の Fig. 6 および Fig. 9 より改変。

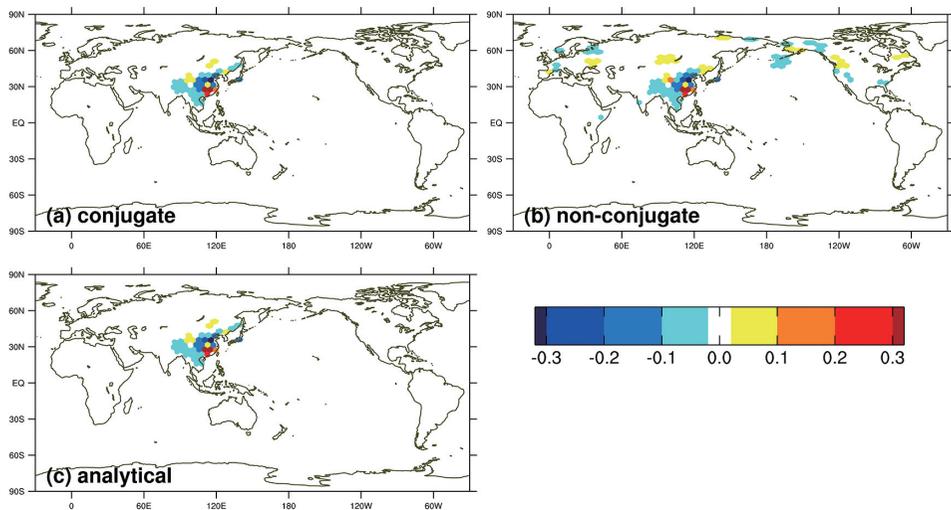


図2. P_a から求めた東アジアのある場所のフラックスに対する誤差相関の分布。共役性のある (y, p) (a) とない (y, p) (b) から推定したものと解析的に求めたもの (c)。Niwa and Fujii (2020) の Fig. 8 より改変。

保たれた場合と保たれていない場合の 2 通りを示している。一般的には対角成分よりも非対角成分の方が導出が困難であるが、共役性が保たれている場合には、解析解の分布をより正確に再現していることが見て取れ、本手法の精度の高さがうかがえる。なお、この時、直交化を経て実際の BFGS 公式に用いた有効な (\mathbf{y}, \mathbf{p}) ベクトルのペア数は 125 個であり、一方で、用いた観測の数は 260 個である。3 節で、前処理をした BFGS 公式では、共役性のある (\mathbf{y}, \mathbf{p}) ベクトルを観測の数だけ用意すれば、解析的に得たものと同等の \mathbf{P}_a が得られることを示したが、この実験においては、およそ半分の数でほぼ十分な精度で推定できていることがわかる。このことは、多くの観測が互いに相関していることに起因していると考えられる。

なお、実際の解析では真の解析誤差共分散行列を知り得ないが、図 1 で示すように、2 つのメトリックは単調に減少しているため、その減少幅が十分に小さくなったところでの推定値が解析解とほぼ同等のものであると期待できる。なお、図 2 のケースでは、解析解と同等の分布を得るには 50 アンサンブルのケースで 15 回の反復回数が必要であったことから、より収束が速く見えるノルムで判断した方が良いことがわかる。

6. まとめと今後の課題

本稿では、Niwa and Fujii (2020) による解析誤差共分散行列 \mathbf{P}_a の新たな推定手法について解説を行った。この手法は、データ同化または逆解析において 4 次元変分法を用いた際に、その最適解の誤差情報を正確に得ることを目的としている。Niwa and Fujii (2020) の手法では、まず、収束速度を速めるために、ヘッセ行列の近似逆行列の初期値に \mathbf{B} を用いる。さらに、BFGS 公式の計算に必要な (\mathbf{y}, \mathbf{p}) ベクトルの共役性を保つために厳密な直線探索を用いる。また、計算時間を短縮するためにアンサンブルで (\mathbf{y}, \mathbf{p}) の数を増やす場合には、得られた全ての (\mathbf{y}, \mathbf{p}) が共役性を保つように直交化を行う。Niwa and Fujii (2020) では、以上の手法を CO_2 逆解析の問題に適用して、実際に高い精度で \mathbf{P}_a を推定できることを実証した。

また、Niwa and Fujii (2020) では、前処理を施した場合には、観測と同じ数の共役性のある (\mathbf{y}, \mathbf{p}) ベクトルを用意すれば解析値と同等の \mathbf{P}_a が得られることを示したが、実際の実験ではその観測数よりもはるかに少ない数の (\mathbf{y}, \mathbf{p}) ベクトルで、解析的に得られるものとほぼ同等の \mathbf{P}_a が得られていた。しかし、それでも必要とされる (\mathbf{y}, \mathbf{p}) ベクトルの数は大きく、問題サイズが大きくなればなるほど、その数も大きくなるため、アルゴリズムのさらなる効率化が望まれる(本稿で示している実験では、比較のための解析解が容易に得られるように、実際の問題よりもサイズを落としている)。特に、直交化後の有効な (\mathbf{y}, \mathbf{p}) ベクトルの数 N' の N に対する割合は、 N の数が大きければ大きいほど小さくなってしまいうことが、一つの問題としてある。図 3 は、反復回数に対する N'/N の推移を示しているが、回数を重ねるごとに有効なベクトルの取得率が低下していることがわかる。また、アンサンブル数が大きい方が、取得率が低いことも図 3 で示されており、この取得率の面にだけ注目すれば、単一の反復計算によるものが効率が良い。したがって、本手法を実際の問題に適用する際には、利用可能なトータルの計算資源と計算時間との兼ね合いでアンサンブル数と個々の反復数を決める必要がある。この N'/N の減少について、一つの原因として考えられるのは、 \mathbf{y} や \mathbf{p} の有効桁が反復計算を重ねるにつれて減少することである(アンサンブル数を増やすと N'/N がより減少するのは、直交化で \mathbf{y} と \mathbf{p} をかけている(式(4.7))ためかもしれない)が、現在のところ確実な原因の解明には至っていない。今後は、その原因を突き止め、 N'/N を大きくする手法を開発することが、さらなる効率化の 1 つのアプローチであると考えられる。

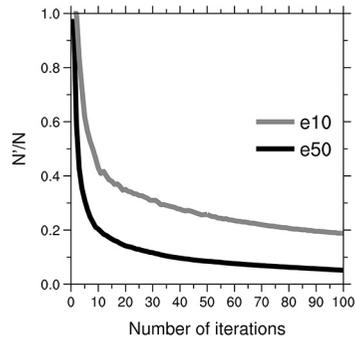


図 3. 反復回数を増やしていった場合の N'/N の推移. N はアンサンプルで得られた (\mathbf{y}, \mathbf{p}) の合計の数. N' は直交化後の有効な (\mathbf{y}, \mathbf{p}) の数. アンサンプルメンバー数が 10 (灰色) と 50 (黒) の場合を示す. Niwa and Fujii (2020) の Fig. 10 より改変.

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。

参 考 文 献

- 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 the Royal Meteorological Society*, **141**(690), 1906–1921, <http://dx.doi.org/10.1002/qj.2495>.
- Chevallier, F., Bréon, F.-M. and Rayner, P. J. (2007). Contribution of the Orbiting Carbon Observatory to the estimation of CO₂ sources and sinks: Theoretical study in a variational data assimilation framework, *Journal of Geophysical Research*, **112**(D09307), <http://dx.doi.org/10.1029/2006JD007375>.
- Dennis, Jr., J. E. and Moré, J. J. (1977). Quasi-Newton methods, motivation and theory, *SIAM Review*, **19**(1), 46–89, <http://dx.doi.org/10.1137/1019005>.
- Derber, J. and Rosati, A. (1989). A global oceanic data assimilation system, *Journal of Physical Oceanography*, **19**, 1333–1347.
- Fisher, M. and Courtier, P. (1995). Estimating the covariance matrices of analysis and forecast error in variational data assimilation, Technical Memorandum, No.220, ECMWF, Reading, UK.
- Fujii, Y. (2005). Preconditioned Optimizing Utility for Large-dimensional analyses (POpULar), *Journal of Oceanography*, **61**(1), 167–181, <http://dx.doi.org/10.1007/s10872-005-0029-z>.
- Fujii, Y. and Kamachi, M. (2003). A nonlinear preconditioned quasi-Newton method without inversion of a first-guess covariance matrix in variational analyses, *Tellus A*, **55**(5), 450–454, <http://dx.doi.org/10.1034/j.1600-0870.2003.00030.x>.
- Golub, G. H. and van Loan, C. F. (1996). *Matrix Computations*, 3rd ed., Johns Hopkins University Press, Baltimore, Maryland.
- 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**, p.043307, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.94.043307>.

- Lorenc, A. C. (1988). Optimal nonlinear objective analysis, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **114**(479), 205–240, <http://dx.doi.org/10.1002/qj.49711447911>.
- Nazareth, L. (1979). A Relationship between the BFGS and Conjugate Gradient Algorithms and Its Implications for New Algorithms, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **16**(5), 794–800, <http://dx.doi.org/10.1137/0716059>.
- 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**(732), 3118–3143, <http://dx.doi.org/10.1002/qj.3838>.
- Nocedal, J. and Wright, S. J. (2006). *Numerical Optimization*, 2nd ed, Springer, New York.
- Rabier, F. and Courtier, P. (1992). Four-dimensional assimilation in the presence of baroclinic instability, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **118**(506), 649–672, <http://dx.doi.org/10.1002/qj.49711850604>.
- Sasaki, Y. (1969). Proposed inclusion of time variation terms, observational and theoretical, in numerical variational objective analysis, *Journal of the Meteorological Society of Japan*, **47**(2), 115–124, http://dx.doi.org/10.2151/jmsj1965.47.2_115.
- 露木 義, 川畑拓矢 編 (2008). 『気象学におけるデータ同化』, 気象研究ノート 217 号, 日本気象学会, 東京.
- Ueno, G. and Nakamura, N. (2016). Bayesian estimation of the observation-error covariance matrix in ensemble-based filters, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **142**(698), 2055–2080, <http://dx.doi.org/10.1002/qj.2803>.

Estimation of a Posterior Error Covariance Matrix Using Conjugate Vectors and the BFGS Formula

Yosuke Niwa^{1,2} and Yosuke Fujii^{2,3}

¹Earth System Division, National Institute for Environmental Studies

²Department of Atmosphere, Ocean, and Earth System Modeling Research,
Meteorological Research Institute, Japan Meteorological Agency

³The Institute of Statistical Mathematics

A four-dimensional variational method is commonly used for data assimilation/inverse problems. However, it cannot automatically provide a posterior error. Niwa and Fujii (2020) developed a technique to estimate a posterior error covariance matrix within the framework of the four-dimensional variational method. Their technique adopts a quasi-Newton method with the BFGS formula, which is a conventional optimizing method. To enhance the estimation accuracy of a posterior error covariance matrix, their technique also employs an exact line search, an ensemble method, and orthogonalization to increase the number of conjugate vectors used in the BFGS formula.

This report explains the fact that with preconditioning in the BFGS formula, an analytical posterior error covariance matrix can be obtained from the same number of iterations (or vector pairs used in the BFGS formula) as observations followed by a detailed description of Niwa and Fujii's technique (2020). Finally, the results obtained by applying this technique to an inverse problem of atmospheric CO₂ are demonstrated.

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^{1,2,3}・吉田 拓馬^{2,1}・久保 勇太郎^{2,1}

(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

¹ 気象研究所：〒305-0052 茨城県つくば市長峰 1-1

² 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

³ 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、その差をスケール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、スケール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, 気象庁の気象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, さらに気象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.

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

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. \boldsymbol{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. なお追加的な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 回繰り返した後に求まる \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 α_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 α 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 α 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, α_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 α_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.

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

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

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

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 λ_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 λ_i^2 であると言える。このような $\hat{\mathbf{p}}_i$ と λ_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 Δx_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 Δx_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

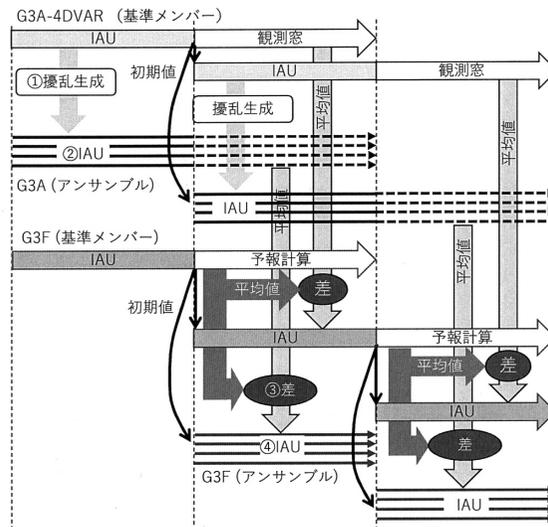


図1. MOVE-G3における海洋初期擾乱の作成手順に関する模式図。横軸は対象時刻であり、破線は5日間隔である。

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 Δx_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、 Δx_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ル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。

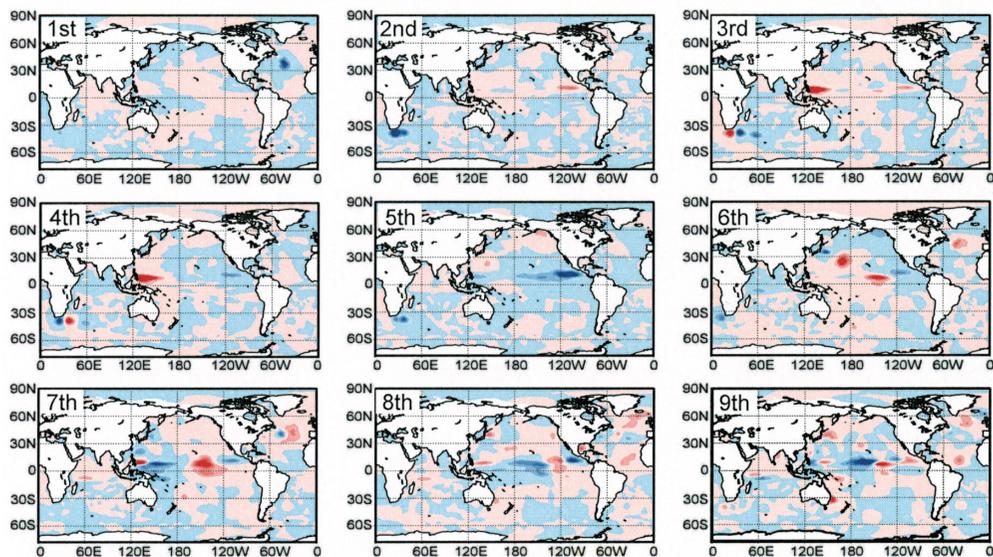
3.2 海洋初期擾乱の例

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 $B^{1/2}$ でスケールリングしたもの、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)

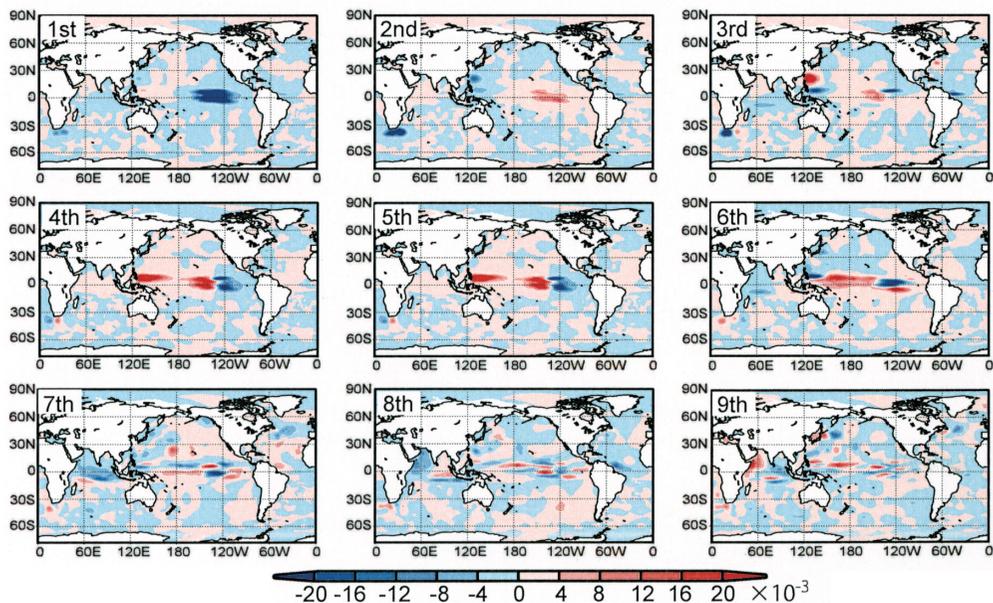


図2. 近似的に計算された4DVARに関するヘッセ行列 \hat{A} の第1～9固有モードに伴う100m深水温のインクリメント(単位 $^{\circ}\text{C}$)の分布. $B^{1/2}$ でスケールされている. 4DVARの観測窓の期間は, (a)2013年4月21～25日, (b)2013年10月23～27日である.

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

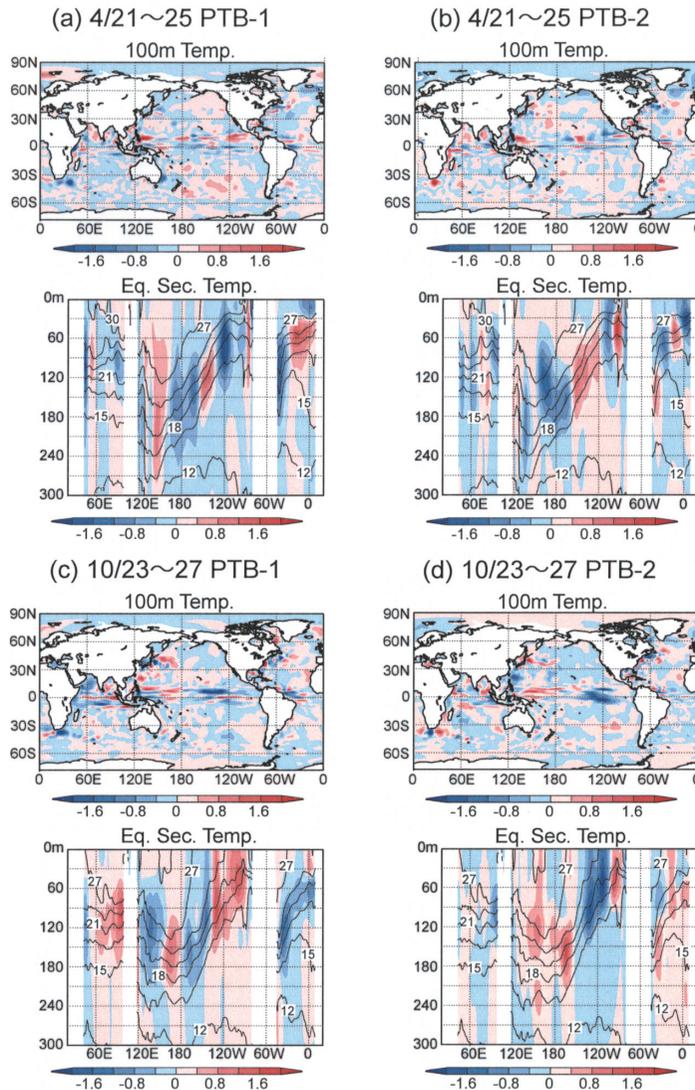


図 3. アンサンブルメンバー作成のために作成された G3A の解析インクリメントの擾乱に伴う全球 100m 深(上段)および赤道鉛直断面(下段, カラー)における水温偏差(単位 °C)の分布. (a), (b)は 2013 年 4 月 21~25 日を観測窓とする解析の解析インクリメントに対する 1 番目, 2 番目の擾乱, (c), (d)は 2013 年 10 月 23~27 日を観測窓とする解析の解析インクリメントに対する 1 番目, 2 番目の擾乱である. 赤道断面図には同日の基準メンバーの解析後の水温分布(等値線, 等値線間隔 3°C)を合わせて描画している.

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

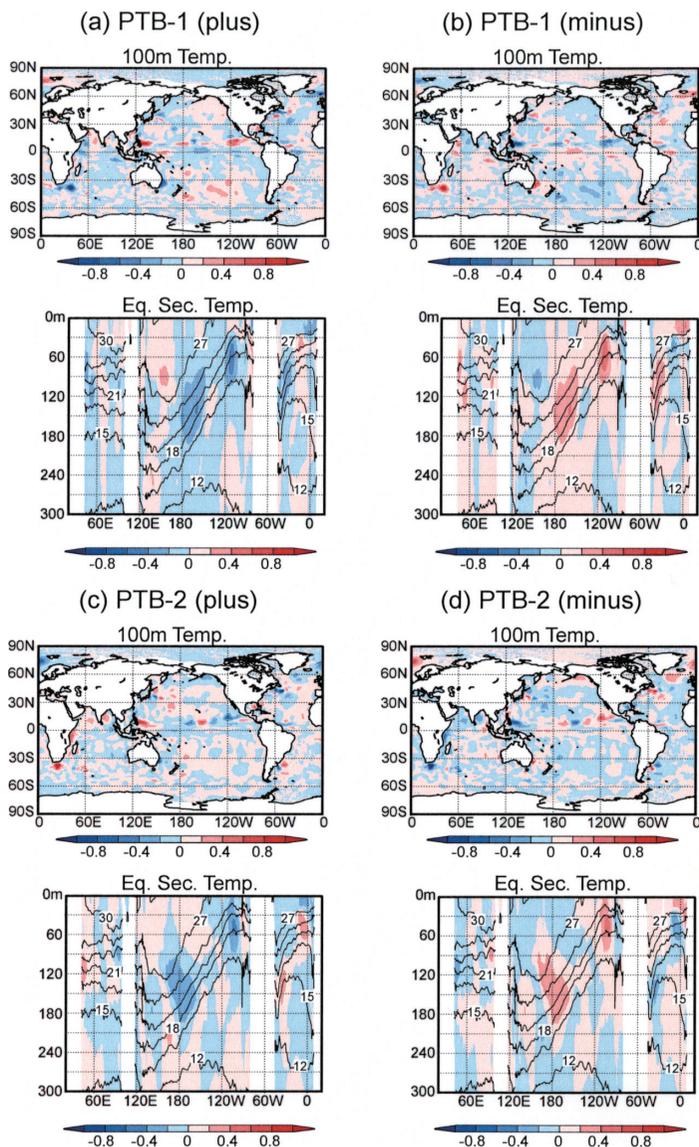


図4. G3Fの全球100m深(上段)および赤道鉛直断面(下段)における各アンサンブルメンバーの2013年4月25日(日平均)の水温の基準メンバーからの偏差(単位 $^{\circ}\text{C}$)。 (a), (b)はそれぞれ1番目の擾乱を足して, または, 引いて生成したアンサンブルメンバーについての偏差。 (c), (d)はそれぞれ2番目の擾乱を足して, または, 引いて生成したアンサンブルメンバーについての偏差。 赤道断面図には同日の基準メンバーのG3Fにダウンスケールした後の水温場(等値線, 等値線間隔 3°C)を合わせて描画している。

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指数の予測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

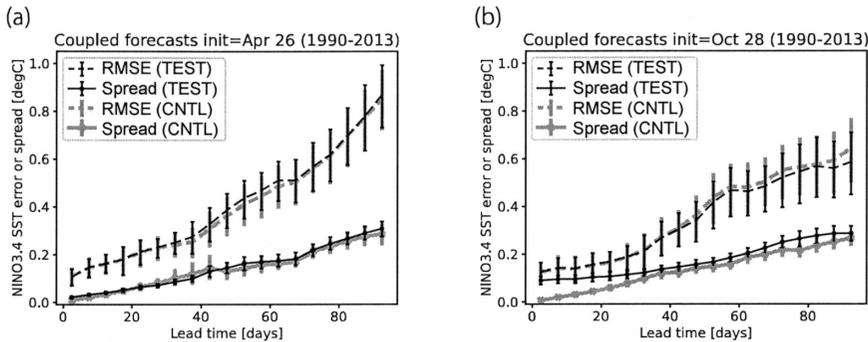


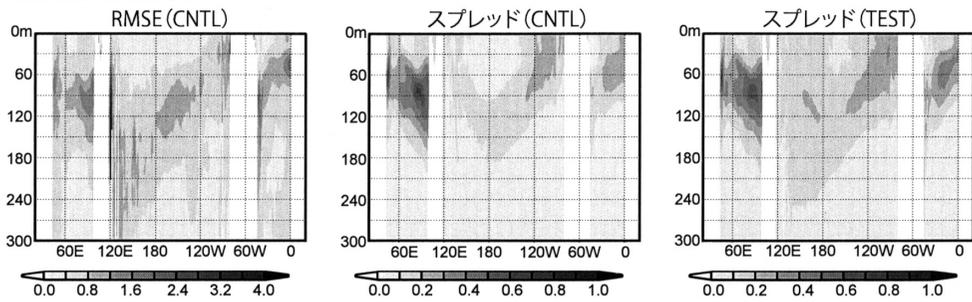
図5. 予測日数に対する NINO3.4 指数のスプレッド(実線)と RMSE(破線)のプロット. 灰色線が CNTL, 黒線が TEST を示す. ブートストラップ法で推定した 90% 信頼区間を合わせて示す. (a) 4 月 26 日からの予測. (b) 10 月 28 日からの予測.

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 と比べるとまだまだ小さく, 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

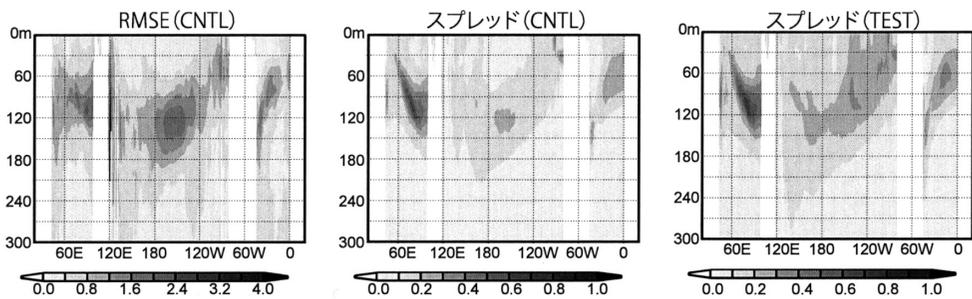


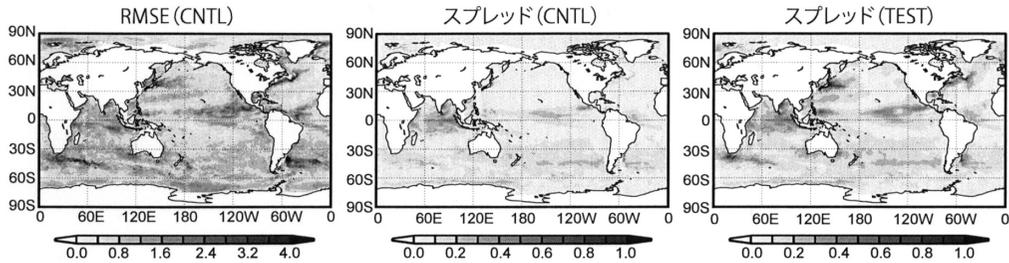
図 6. 赤道鉛直断面における初期月平均の水温の RMSE とスプレッド (共に単位 $^{\circ}\text{C}$) の分布. 左)CNTL の RMSE. 中)CNTL のスプレッド. 右)TEST のスプレッド. 上段)4 月 26 日を初期日とした 5 月の予測. 下段)10 月 28 日を初期日とした 11 月の予測. なお, RMSE とスプレッドで, 使っているグレースケールが異なっている. また, TEST の RMSE については, CNTL と比べ大きな違いが無いので省略する.

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

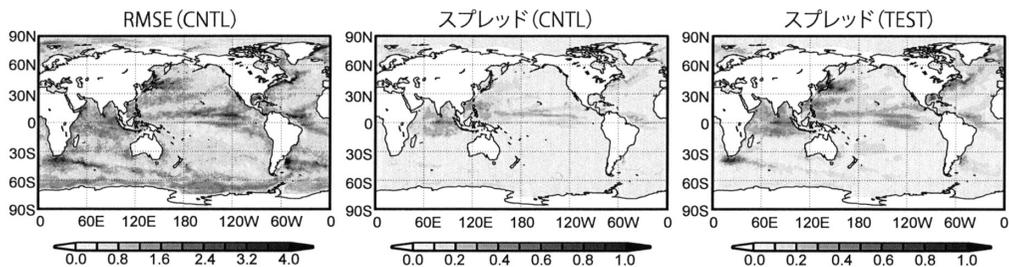


図7. 図6と同じ。ただし、100m 深水温の全球分布について。

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を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を無視した場合でも、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、 1×1 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., Lefavre, 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^{1,2,3}, Takuma Yoshida^{2,1} and Yutaro Kubo^{2,1}

¹Meteorological Research Institute, Japan Meteorological Agency

²Numerical Prediction Development Center, Japan Meteorological Agency

³The 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.

アンサンブルを用いた変分法データ同化と 計数データのための拡張

中野 慎也^{1,2,3}

(受付 2022 年 1 月 3 日 ; 改訂 6 月 10 日 ; 採択 6 月 13 日)

要 旨

4次元変分法の問題を解く方法の一つとして、シミュレーションを様々な設定で実行するアンサンブルシミュレーションの結果を利用した手法が提案されている。こうしたアンサンブルによる変分法アルゴリズムは、シミュレーションモデルを完全にブラックボックスとして扱うことができるため、広く使われるアジョイント法と比較して、非常に実装しやすいのが利点となっている。但し、現状のアンサンブルによる手法は、システムの状態が与えられた下で観測のしたがる条件付き分布が正規分布になることを仮定してアルゴリズムが導出されており、そのままでは正規分布以外の分布にしたがる観測を利用できない。本研究では、システムの状態が与えられた下で観測データがポアソン分布にしたがる場合を考え、シミュレーションモデルをブラックボックス化可能なアンサンブル変分法のアルゴリズムを導出する。

キーワード：データ同化、4次元アンサンブル変分法、ガウス・ニュートン法、ポアソン分布。

1. はじめに

データ同化の代表的なアプローチの一つである4次元変分法は、観測データの時系列が与えられた下で事後確率密度を最大化する解(maximum a posteriori 推定値; MAP 推定値)を求める方法である。4次元変分法の問題を解く代表的なアルゴリズムはアジョイント法(adjoint method; 例えば、淡路 他, 2009)であり、通常、4次元変分法と言えばアジョイント法のことを指す。但し、本稿において「4次元変分法」はMAP推定値を求める方法全般を指す言葉として用い、アジョイント法は4次元変分法の問題を解くアルゴリズムの一つとして区別する。アジョイント法は、シミュレーションモデルによる時間積分を行った後、シミュレーションモデルの随伴作用素に相当するアジョイントモデルで時間を遡る計算を行い、対数事後確率密度関数の勾配を効率的に求める手法である。比較的小さい計算コストで大規模なデータ同化を行うことができるのが利点であるが、一方でアジョイントモデルの開発に手間が掛かるという欠点がある。また、元のシミュレーションモデルに修正を加えた場合は、アジョイントモデルも一緒に更新する必要があるため、維持にも手間が掛かる。

一方、アンサンブルシミュレーションの結果を利用することで、アジョイントモデルを使

¹ 統計数理研究所：〒190-8562 東京都立川市緑町 10-3

² データサイエンス共同利用基盤施設 データ同化研究支援センター：〒190-8562 東京都立川市緑町 10-3

³ 総合研究大学院大学 複合科学研究科統計科学専攻：〒190-8562 東京都立川市緑町 10-3

わずに4次元変分法の問題を解く方法がLiu et al. (2008)によって提案されている。アンサンブルシミュレーションとは、シミュレーションを別々の設定で実行することを意味する。Liu et al. (2008)の4次元アンサンブル変分法は、Lorenz (2003)やZupanski (2005)が提案したアンサンブルシミュレーションによる対数事後確率密度関数の近似を用いており、近似された対数事後確率密度を最大化する値を勾配法で求める。Bocquet and Sakov (2013, 2014)は、同様の近似を用いたガウス・ニュートン法(Gauss-Newton method; 以下GN法)による4次元変分法を提案している。この方法は、手続きの上ではアンサンブルカルマン smoother (ensemble Kalman smoother) (van Leeuwen and Evensen, 1996; Evensen and van Leeuwen, 2000)を繰り返し適用する形になることから、iterative ensemble Kalman smoother (IEnKS)と呼ばれているが、平滑化分布を求める方法ではなく、MAP推定値を近似的に求める方法であり、アンサンブル変分法の一つと見なしてよいと思われる。アンサンブルを用いてGN法の近似アルゴリズムは他にも研究がなされている (Gu and Oliver, 2007; Evensen, 2018)。また、Nakano (2021)でも高次元の問題を念頭に類似したアルゴリズムを議論している。

これらのアンサンブル変分法は、アンサンブルシミュレーションを用いるために計算コストが掛かる上、アンサンブル近似によって精度も落ちる可能性があるが、シミュレーションモデルを完全にブラックボックスとして扱えるため、簡単に実装できるという利点がある。実際、筆者が最近参加した研究 (Minami et al., 2020)においても、アンサンブル変分法を採用することにより、シミュレーションモデルの中身に触れることなくデータ同化を実現している。一方、現状のアンサンブル変分法は、システムの状態が与えられた下で観測のしつがう条件付き分布(尤度)が正規分布になることを仮定してアルゴリズムが導出されており、尤度が正規分布以外の分布で与えられた場合に適用できるか否か自明ではない。現実には、正規分布以外の分布を想定すべき場合もあり、特にポアソン分布を仮定すべき状況は少なからず存在する。例えば、宇宙科学分野では、微弱な紫外線を遠隔から観測したデータを用いることがある。Nakano et al. (2014)では、正規分布による近似を用いて紫外線観測からの推定を行ったが、1回の観測でセンサーによって検知される光子の個数は数個にとどまる場合があり、本来このような場合はポアソン分布で計数データとして扱うのが適切である。他にも、感染症伝播シミュレーションにおいて与えられた状態の下での観測事例数をポアソン分布で表現する場合もあるなど (Saito et al., 2018)、様々な分野でポアソン分布を用いた観測のモデリングが行われる。そこで本研究では、尤度がポアソン分布で記述される場合に、アンサンブル変分法と同様のアルゴリズムが得られるかを検討する。以下では、2節で4次元変分法の問題を定式化した後、3節ではNakano (2021)に基づいたアンサンブルによる変分法のアルゴリズムを導入する。4節ではアルゴリズムのGN法との関係について述べる。5節では4節の考え方を応用し、ポアソン分布にしたがう観測を利用可能なアンサンブルによる変分法アルゴリズムを導出する。最後に6節では、5節のアルゴリズムの有効性を簡単な数値実験で検証する。

2. 4次元変分法

時刻 t_k におけるシステムの状態を $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^d$ 、 \mathbf{x}_k から得られる観測を $\mathbf{y}_k \in \mathbb{R}^n$ と表す。ここでは、 $k = 1, \dots, K$ に対して、数値モデルによる時刻 t_{k-1} から時刻 t_k の間の状態遷移が関数 f_k で

$$(2.1) \quad \mathbf{x}_k = f_k(\mathbf{x}_{k-1})$$

のように書けるものとする。このような仮定を強拘束と呼ぶ。強拘束のもとでは、初期値 \mathbf{x}_0 が与えられれば、任意の k に対する \mathbf{x}_k が、

$$(2.2) \quad \mathbf{x}_k = \mathbf{f}_k \circ \mathbf{f}_{k-1} \circ \cdots \circ \mathbf{f}_1(\mathbf{x}_0)$$

のように定まる。但し、記号 \circ は合成関数を表す。

シミュレーションモデルから時刻 t_k における状態 \mathbf{x}_k が得られたとき、観測 \mathbf{y}_k の予測値を \mathbf{x}_k の関数 $\mathbf{h}_k(\mathbf{x}_k)$ で表すことにすると、 \mathbf{y}_k に基づく尤度 $p(\mathbf{y}_k|\mathbf{x}_0)$ は、

$$(2.3) \quad p(\mathbf{y}_k|\mathbf{x}_0) = p(\mathbf{y}_k|\mathbf{x}_k) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}[\mathbf{y}_k - \mathbf{h}_k(\mathbf{x}_k)]^\top \mathbf{R}^{-1}[\mathbf{y}_k - \mathbf{h}_k(\mathbf{x}_k)]\right)$$

を満たす。 \mathbf{x}_0 の事前分布を

$$(2.4) \quad p(\mathbf{x}_0) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d |\mathbf{P}_b|}} \exp\left(-\frac{1}{2}[\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}}_{0,b}]^\top \mathbf{P}_b^{-1}[\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}}_{0,b}]\right)$$

とすると、観測の時系列 $\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_K$ が与えられた下での \mathbf{x}_0 の事後分布は

$$(2.5) \quad p(\mathbf{x}_0|\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_K) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}[\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}}_{0,b}]^\top \mathbf{P}_b^{-1}[\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}}_{0,b}]\right) \\ \times \prod_{k=1}^K \exp\left(-\frac{1}{2}[\mathbf{y}_k - \mathbf{h}_k(\mathbf{x}_k)]^\top \mathbf{R}^{-1}[\mathbf{y}_k - \mathbf{h}_k(\mathbf{x}_k)]\right)$$

を満たす。強拘束の4次元変分法によるデータ同化では、 $p(\mathbf{x}_0|\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_K)$ の対数を取った対数事後確率密度の最大化を考える。すなわち、以下の目的関数の最小化を行うことになる：

$$(2.6) \quad J(\mathbf{x}_0) = \frac{1}{2}(\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}}_{0,b})^\top \mathbf{P}_b^{-1}(\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}}_{0,b}) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K [\mathbf{y}_k - \mathbf{h}_k(\mathbf{x}_k)]^\top \mathbf{R}^{-1}[\mathbf{y}_k - \mathbf{h}_k(\mathbf{x}_k)].$$

ここで、今後の議論で便利のように、

$$(2.7) \quad \mathbf{g}_k(\mathbf{x}_0) = \mathbf{h}_k \circ \mathbf{f}_k \circ \mathbf{f}_{k-1} \circ \cdots \circ \mathbf{f}_1(\mathbf{x}_0)$$

のように定義される関数 \mathbf{g}_k を導入しておく。このとき、 \mathbf{x}_k が式(2.2)を満たすことから、

$$(2.8) \quad \mathbf{h}_k(\mathbf{x}_k) = \mathbf{g}_k(\mathbf{x}_0)$$

が成り立つ。したがって、式(2.6)の J は

$$(2.9) \quad J(\mathbf{x}_0) = \frac{1}{2}(\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}}_{0,b})^\top \mathbf{P}_b^{-1}(\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}}_{0,b}) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K [\mathbf{y}_k - \mathbf{g}_k(\mathbf{x}_0)]^\top \mathbf{R}^{-1}[\mathbf{y}_k - \mathbf{g}_k(\mathbf{x}_0)]$$

のように書き直せる。

3. アンサンブルを用いた変分法アルゴリズム

以下では、反復法で J の最小化を行うことを考え、 m 回目のイテレーションでの \mathbf{x}_0 の推定値を $\hat{\mathbf{x}}_{0,m}$ と置くことにする。 N 個の異なる初期値 $\{\mathbf{x}_{0,m}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}_{0,m}^{(N)}\}$ を用意し、それぞれシミュレーションを実行する。このとき、 N 個の初期値は平均が $\hat{\mathbf{x}}_{0,m}$ となるように与える。すなわち

$$(3.1) \quad \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_{0,m}^{(i)} = \hat{\mathbf{x}}_{0,m}.$$

これにより N 種類のシミュレーション結果 $\{\mathbf{x}_{0:K,m}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}_{0:K,m}^{(N)}\}$ が得られる。但し、 $\mathbf{x}_{0:K} = (\mathbf{x}_0^\top \cdots \mathbf{x}_K^\top)^\top$ であり、すなわち $\mathbf{x}_{0:K}$ は時刻 t_0 から t_K までの時間ステップごと

の状態を表している．ここで， \mathbf{x}_0 をアンサンブルシミュレーションの初期値 $\{\mathbf{x}_{0,m}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}_{0,m}^{(N)}\}$ の線型和で表すものとする．通常， \mathbf{x}_0 の次元は N よりもはるかに大きく，このような制約を課すことによって， $(m+1)$ 回目のイテレーションで得られる \mathbf{x}_0 の推定値 $\hat{\mathbf{x}}_{0,m+1}$ はアンサンブルメンバーの張る $(N-1)$ 次元の部分空間に制限されることになる．しかし，イテレーションごとに異なる部分空間を張るアンサンブルメンバーを用いれば， $(N-1)$ 次元よりも高次元の空間で解を求めることができる．さて， \mathbf{x}_0 がアンサンブルメンバーの線型結合で表せるという制約の下で J の最小化を考える．このとき， $\hat{\mathbf{x}}_{0,m}$ が式(3.1)を満たすことに注意すれば，適当に $w_{m+1}^{(1)}, \dots, w_{m+1}^{(N)}$ を置くことにより，

$$(3.2) \quad \mathbf{x}_0 = \hat{\mathbf{x}}_{0,m} + \sum_{i=1}^N w_{m+1}^{(i)} (\mathbf{x}_{0,m}^{(i)} - \hat{\mathbf{x}}_{0,m})$$

と書ける．各アンサンブルメンバーの $\hat{\mathbf{x}}_{0,m}$ からの差を横に並べた $d \times N$ 行列

$$(3.3) \quad \mathbf{X}_m = (\mathbf{x}_{0,m}^{(1)} - \hat{\mathbf{x}}_{0,m} \quad \cdots \quad \mathbf{x}_{0,m}^{(N)} - \hat{\mathbf{x}}_{0,m})$$

を定義し， $\mathbf{w}_{m+1} = (w_{m+1}^{(1)} \quad \cdots \quad w_{m+1}^{(N)})^\top$ と置くと， \mathbf{x}_0 は以下のように書ける：

$$(3.4) \quad \mathbf{x}_0 = \hat{\mathbf{x}}_{0,m} + \mathbf{X}_m \mathbf{w}_{m+1}.$$

次に，アンサンブルシミュレーションの結果を利用しやすくするために，関数 $\mathbf{g}_k(\mathbf{x}_0)$ を

$$(3.5) \quad \mathbf{g}_k(\mathbf{x}_0) \approx \mathbf{g}_k(\hat{\mathbf{x}}_{0,m}) + \mathbf{G}_{k,m}(\mathbf{x}_0 - \hat{\mathbf{x}}_{0,m})$$

のように一次近似する．但し， $\mathbf{G}_{k,m}$ は関数 \mathbf{g}_k の $\mathbf{x}_0 = \hat{\mathbf{x}}_{0,m}$ におけるヤコビ行列である．これに式(3.4)を代入すると，

$$(3.6) \quad \mathbf{g}_k(\mathbf{x}_0) \approx \mathbf{g}_k(\hat{\mathbf{x}}_{0,m}) + \mathbf{G}_{k,m} \mathbf{X}_m \mathbf{w}_{m+1}.$$

関数 \mathbf{g}_k は，シミュレーションを k ステップ実行した後，関数 \mathbf{h}_k を適用する操作に相当するため，そのヤコビ行列 $\mathbf{G}_{k,m}$ を求めるのは通常極めて難しい．しかし，式(3.5)の近似を用いると，初期値 $\mathbf{x}_{0,m}^{(i)}$ に対する \mathbf{g}_k の出力が

$$(3.7) \quad \mathbf{g}_k(\mathbf{x}_{0,m}^{(i)}) \approx \mathbf{g}_k(\hat{\mathbf{x}}_{0,m}) + \mathbf{G}_{k,m}(\mathbf{x}_{0,m}^{(i)} - \hat{\mathbf{x}}_{0,m})$$

と書けるので，

$$(3.8) \quad \Gamma_{k,m} = (\mathbf{g}_k(\mathbf{x}_{0,m}^{(1)}) - \mathbf{g}_k(\hat{\mathbf{x}}_{0,m}) \quad \cdots \quad \mathbf{g}_k(\mathbf{x}_{0,m}^{(N)}) - \mathbf{g}_k(\hat{\mathbf{x}}_{0,m}))$$

のように定義される行列 $\Gamma_{k,m}$ を導入すると，

$$(3.9) \quad \mathbf{G}_{k,m} \mathbf{X}_m \approx \Gamma_{k,m}$$

という近似が成り立つ．これを式(3.6)に代入すれば，

$$(3.10) \quad \mathbf{g}_k(\mathbf{x}_0) \approx \mathbf{g}_k(\hat{\mathbf{x}}_{0,m}) + \Gamma_{k,m} \mathbf{w}_{m+1}$$

となる．行列 $\Gamma_{k,m}$ はアンサンブルシミュレーションの結果 $\{\mathbf{g}_{0:k}(\mathbf{x}_0^{(i)})\}_{i=1}^N$ から構成できるので，式(3.10)で \mathbf{g}_k を近似すれば，ヤコビ行列 $\mathbf{G}_{k,m}$ を計算する必要がなく都合が良い．なお，式(3.9)の近似の妥当性を担保するためには，各アンサンブルメンバー $\mathbf{x}_{0,m}^{(i)}$ と $\hat{\mathbf{x}}_{0,m}$ の距離 $\|\mathbf{x}_{0,m}^{(i)} - \hat{\mathbf{x}}_{0,m}\|$ が十分に小さくなるように，すなわち，アンサンブルの $\hat{\mathbf{x}}_{0,m}$ からのばらつきが十分に小さくなるようにするのが望ましい (Nakano, 2021)．式(3.10)と式(3.4)を式(2.9)に代入すると，目的関数 $J(\mathbf{x}_0)$ を近似する関数 $\tilde{J}_{m+1}(\mathbf{w}_{m+1})$ が得られる：

$$(3.11) \quad \check{J}_{m+1} = \frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{x}}_{0,m} - \bar{\boldsymbol{x}}_{0,b} + \mathbf{X}_m \boldsymbol{w}_{m+1})^\top \mathbf{P}_b^{-1}(\hat{\boldsymbol{x}}_{0,m} - \bar{\boldsymbol{x}}_{0,b} + \mathbf{X}_m \boldsymbol{w}_{m+1}) \\ + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K [\boldsymbol{y}_k - \boldsymbol{g}_k(\hat{\boldsymbol{x}}_{0,m}) - \boldsymbol{\Gamma}_{k,m} \boldsymbol{w}_{m+1}]^\top \mathbf{R}^{-1} [\boldsymbol{y}_k - \boldsymbol{g}_k(\hat{\boldsymbol{x}}_{0,m}) - \boldsymbol{\Gamma}_{k,m} \boldsymbol{w}_{m+1}].$$

\check{J}_{m+1} を最小化するために \boldsymbol{w}_{m+1} による勾配を取ると,

$$(3.12) \quad \nabla \check{J}_{m+1} = \mathbf{X}_m^\top \mathbf{P}_b^{-1}(\hat{\boldsymbol{x}}_{0,m} - \bar{\boldsymbol{x}}_{0,b} + \mathbf{X}_m \boldsymbol{w}_{m+1}) - \sum_{k=1}^K \boldsymbol{\Gamma}_{k,m}^\top \mathbf{R}^{-1} [\boldsymbol{y}_k - \boldsymbol{g}_k(\hat{\boldsymbol{x}}_{0,m}) - \boldsymbol{\Gamma}_{k,m} \boldsymbol{w}_{m+1}].$$

\check{J}_{m+1} を最小化する $\check{\boldsymbol{w}}_{m+1}$ は $\nabla \check{J}_{m+1} = 0$ の条件から以下のように求めることができる。

$$(3.13) \quad \check{\boldsymbol{w}}_{m+1} = - \left(\mathbf{X}_m^\top \mathbf{P}_b^{-1} \mathbf{X}_m + \sum_{k=1}^K \boldsymbol{\Gamma}_{k,m}^\top \mathbf{R}^{-1} \boldsymbol{\Gamma}_{k,m} \right)^{-1} \\ \times \left(\mathbf{X}_m^\top \mathbf{P}_b^{-1} [\hat{\boldsymbol{x}}_{0,m} - \bar{\boldsymbol{x}}_{0,b}] - \sum_{k=1}^K \boldsymbol{\Gamma}_{k,m}^\top \mathbf{R}^{-1} [\boldsymbol{y}_k - \boldsymbol{g}_k(\hat{\boldsymbol{x}}_{0,m})] \right).$$

これを式(3.4)に代入すると, $\hat{\boldsymbol{x}}_0$ の推定値

$$(3.14) \quad \check{\boldsymbol{x}}_{0,m+1} = \hat{\boldsymbol{x}}_{0,m} + \mathbf{X}_m \check{\boldsymbol{w}}_{m+1}$$

が得られる。ただ, $\check{\boldsymbol{x}}_{0,m+1}$ を用いた場合, 元の目的関数 J に対して

$$(3.15) \quad J(\check{\boldsymbol{x}}_{0,m+1}) \leq J(\hat{\boldsymbol{x}}_{0,m})$$

が必ずしも成り立たないという問題がある。つまり, 推定値 $\check{\boldsymbol{x}}_{0,m+1}$ は $\hat{\boldsymbol{x}}_{0,m}$ よりもよいという保証がないことになる。そこで, ある実数 α に対し, $\|\boldsymbol{w}_{m+1}\|^2 < \alpha$ の領域で

$$(3.16) \quad \hat{J}_{m+1}(\boldsymbol{w}_{m+1}) = \check{J}_{m+1}(\boldsymbol{w}_{m+1}) + \frac{\sigma_{m+1}^2}{2} \boldsymbol{w}_{m+1}^\top \boldsymbol{w}_{m+1} \geq J(\boldsymbol{x}_0)$$

が成り立つように σ_{m+1} を選び, \check{J}_{m+1} の代わりに \hat{J}_{m+1} を最小化する $\hat{\boldsymbol{w}}_{m+1}$ を求める。このようにすると, $\|\hat{\boldsymbol{w}}_{m+1}\|^2 < \alpha$ を満たしていれば, MM アルゴリズム (majorize-minimization algorithm) (Lange, 2016) の論理により, $\hat{\boldsymbol{x}}_{0,m+1} = \hat{\boldsymbol{x}}_{0,m} + \mathbf{X}_m \hat{\boldsymbol{w}}_{m+1}$ に対して

$$(3.17) \quad J(\hat{\boldsymbol{x}}_{0,m+1}) \leq \hat{J}_{m+1}(\hat{\boldsymbol{w}}_{m+1}) \leq \hat{J}_{m+1}(\mathbf{0}) = J(\hat{\boldsymbol{x}}_{0,m})$$

が成り立つ (Nakano, 2021)。式(3.16)の $\check{J}_{m+1}(\boldsymbol{w}_m)$ を省略せずに書くと

$$(3.18) \quad \hat{J}_{m+1}(\boldsymbol{w}_{m+1}) = \frac{\sigma_{m+1}^2}{2} \boldsymbol{w}_{m+1}^\top \boldsymbol{w}_{m+1} \\ + \frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{x}}_{0,m} - \bar{\boldsymbol{x}}_{0,b} + \mathbf{X}_m \boldsymbol{w}_{m+1})^\top \mathbf{P}_b^{-1}(\hat{\boldsymbol{x}}_{0,m} - \bar{\boldsymbol{x}}_{0,b} + \mathbf{X}_m \boldsymbol{w}_{m+1}) \\ + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K [\boldsymbol{y}_k - \boldsymbol{g}_k(\bar{\boldsymbol{x}}_{0,b}) - \boldsymbol{\Gamma}_{k,m} \boldsymbol{w}_{m+1}]^\top \mathbf{R}^{-1} [\boldsymbol{y}_k - \boldsymbol{g}_k(\bar{\boldsymbol{x}}_{0,b}) - \boldsymbol{\Gamma}_{k,m} \boldsymbol{w}_{m+1}].$$

\hat{J}_{m+1} の勾配は,

$$(3.19) \quad \nabla \hat{J}_{m+1} = \sigma_{m+1}^2 \boldsymbol{w}_{m+1} + \mathbf{X}_m^\top \mathbf{P}_b^{-1}(\hat{\boldsymbol{x}}_{0,m} - \bar{\boldsymbol{x}}_{0,b} + \mathbf{X}_m \boldsymbol{w}_{m+1}) \\ - \sum_{k=1}^K \boldsymbol{\Gamma}_{k,m}^\top \mathbf{R}^{-1} [\boldsymbol{y}_k - \boldsymbol{g}_k(\hat{\boldsymbol{x}}_{0,m}) - \boldsymbol{\Gamma}_{k,m} \boldsymbol{w}_{m+1}]$$

となるので, \hat{J}_{m+1} は I_N を N 次の単位行列として,

$$(3.20) \quad \hat{w}_{m+1} = - \left(\sigma^2 I_N + X_m^T P_b^{-1} X_m + \sum_{k=1}^K \Gamma_{k,m}^T R^{-1} \Gamma_{k,m} \right)^{-1} \\ \times \left(X_m^T P_b^{-1} [\hat{x}_{0,m} - \bar{x}_{0,b}] - \sum_{k=1}^K \Gamma_{k,m}^T R^{-1} [y_k - g_k(\hat{x}_{0,m})] \right)$$

で最小となる. したがって,

$$(3.21) \quad \hat{x}_{0,m+1} = \hat{x}_{0,m} + X_m \hat{w}_{m+1}$$

を $(m+1)$ 回目の推定値とすればよい. アルゴリズムをまとめると, Algorithm 1 のようになる.

Algorithm 1 アンサンブルを用いた変分法アルゴリズム.

$m := 0$ とする.

初期推定値 $\hat{x}_{0,0}$ を設定する.

while unconverged **do**

式(3.1)を満たすようにアンサンブル $\{x_{0,m}^{(1)}, \dots, x_{0,m}^{(N)}\}$ を生成する.

式(3.8)により, 行列 $\Gamma_{k,m}$ を得る.

式(3.21)の \hat{w}_{m+1} を求める.

式(3.21)に従って, $(m+1)$ 回目の推定値 $\hat{x}_{0,m+1}$ を得る.

$m := m+1$ とする.

end while

4. ガウス・ニュートン法との関係

Algorithm 1 は, ガウス・ニュートン法 (Gauss–Newton method; 以下 GN 法) あるいはその修正版であるレーベンバーク・マーカート法 (Levenberg–Marquardt method; 以下 LM 法) (Nocedal and Wright, 2006; 金森 他, 2016) のアンサンブルによる近似と見なすこともできる. GN 法や LM 法がよく用いられるのは, 以下のような非線型の最小二乗問題

$$(4.1) \quad J_l = \frac{1}{2} [y - g(x)]^T R^{-1} [y - g(x)]$$

において, 観測 y が与えられたときに J_l を最小化する x を求める問題である. GN 法では, m ステップ目における最適解の推定値を \hat{x}_m とし, \hat{x}_m の周りで g の 1 次近似

$$(4.2) \quad g(x) \approx g(\hat{x}_m) + G_m(x - \hat{x}_m)$$

を考える. 但し, G_m は g の \hat{x}_m におけるヤコビ行列である. 式(4.2)で式(4.1)を近似すると, 目的関数 J_l の近似

$$(4.3) \quad \check{J}_l = \frac{1}{2} [y - g(\hat{x}_m) - G_m(x - \hat{x}_m)]^T R^{-1} [y - g(\hat{x}_m) - G_m(x - \hat{x}_m)]$$

が得られる. このとき, $x = \hat{x}_m$ における \check{J}_l の勾配, ヘッセ行列はそれぞれ,

$$(4.4) \quad \nabla \check{J}_l = -G_m^T R^{-1} [y - g(\hat{x}_m)],$$

$$(4.5) \quad \nabla^2 \check{J}_l = G_m^T R^{-1} G_m$$

となる。GN 法は、式(4.4)の勾配、式(4.5)のヘッセ行列を使い、ニュートン・ラフソン法 (Newton-Raphson method) の式を用いて最適解の推定値を更新する。すなわち、GN 法の $(m+1)$ ステップ目の推定値 $\hat{\boldsymbol{x}}_{m+1}$ は、

$$(4.6) \quad \check{\boldsymbol{x}}_{m+1} = \hat{\boldsymbol{x}}_m + [\mathbf{G}_m^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{G}_m]^{-1} \mathbf{G}_m^T \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{y} - \mathbf{g}(\hat{\boldsymbol{x}}_m)]$$

となる。LM 法は式(4.3)の \check{J}_l に正則化項を加えた

$$(4.7) \quad \hat{J}_l = \frac{\lambda_m^2}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{x} + \frac{1}{2} [\mathbf{y} - \mathbf{g}(\hat{\boldsymbol{x}}_m) - \mathbf{G}_m(\mathbf{x} - \hat{\boldsymbol{x}}_m)]^T \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{y} - \mathbf{g}(\hat{\boldsymbol{x}}_m) - \mathbf{G}_m(\mathbf{x} - \hat{\boldsymbol{x}}_m)]$$

を考え、これを最小化する。この場合、 $m+1$ ステップ目の推定値 $\hat{\boldsymbol{x}}_{m+1}$ は、

$$(4.8) \quad \hat{\boldsymbol{x}}_{m+1} = \hat{\boldsymbol{x}}_m + [\lambda_m^2 \mathbf{I}_d + \mathbf{G}_m^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{G}_m]^{-1} \mathbf{G}_m^T \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{y} - \mathbf{g}(\hat{\boldsymbol{x}}_m)]$$

のようになる。式(4.1)の非線形最小二乗問題は、式(2.9)において右辺第一項の事前分布に相当する項を落とした場合に相当する。この場合、式(3.21)は

$$(4.9) \quad \hat{\boldsymbol{w}}_m = \left(\sigma^2 \mathbf{I}_N + \sum_{k=1}^K \mathbf{\Gamma}_m^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{\Gamma}_m \right)^{-1} \sum_{k=1}^K \mathbf{\Gamma}_m^T \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{y}_k - \mathbf{g}_k(\hat{\boldsymbol{x}}_{0,m})]$$

となる。つまり、Algorithm 1 は、各イテレーションにおいて関数 \mathbf{g}_k のヤコビ行列を求める代わりに $\mathbf{\Gamma}_m$ を用いた近似を行い、その近似に基づいて LM 法を実行していると解釈することもできる。

Bocquet and Sakov (2013, 2014) では、GN 法に基づいて Algorithm 1 と類似のアルゴリズムを導いており、これを iterative ensemble Kalman smoother (IEnKS) と呼んでいる。但し、IEnKS では、事前分布の分散共分散行列 \mathbf{P}_b を初期アンサンブルの標本分散共分散行列

$$(4.10) \quad \mathbf{P}_b = \frac{1}{N-1} \mathbf{X}_0 \mathbf{X}_0^T$$

で与えており、また、 \mathbf{x}_0 が

$$(4.11) \quad \mathbf{x}_0 = \bar{\mathbf{x}}_{0,b} + \mathbf{X}_0 \mathbf{w}^*$$

の形で書けると仮定している。通常、アンサンブルメンバー数 N は状態ベクトル \mathbf{x}_k の次元よりもはるかに小さい値となる。事前分布の分散共分散行列を式(4.10)で与えた場合、 \mathbf{P}_b は非正則となるので、事前分布はアンサンブルメンバーの張る部分空間に分布し、

$$(4.12) \quad p(\mathbf{x}_0) \propto \exp \left(-\frac{1}{2} [\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}}_{0,b}]^T \mathbf{P}_b^- [\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}}_{0,b}] \right)$$

を満たす。但し、 \mathbf{P}_b^- は \mathbf{P}_b の Moore-Penrose 一般逆行列である。したがって、解くべき目的関数は

$$(4.13) \quad J(\mathbf{x}_0) = \frac{1}{2} (\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}}_{0,b})^T \mathbf{P}_b^- (\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}}_{0,b}) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K [\mathbf{y}_k - \mathbf{g}_k(\mathbf{x}_0)]^T \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{y}_k - \mathbf{g}_k(\mathbf{x}_0)]$$

となる。式(4.10)が成り立つとき、 \mathbf{X}_0 の特異値分解 $\mathbf{X}_0 = \mathbf{U}_0 \mathbf{\Lambda}_0 \mathbf{V}_0^T$ を考えると、

$$(4.14) \quad \mathbf{P}_b = \frac{1}{N-1} \mathbf{U}_0 \mathbf{\Lambda}_0^2 \mathbf{U}_0^T$$

なので、

$$(4.15) \quad \mathbf{X}_0^T \mathbf{P}_b^- \mathbf{X}_0 = (N-1) \mathbf{V}_0 \mathbf{V}_0^T = (N-1) \mathbf{I}_N$$

が成り立つ．これと式(3.10)の近似を組み合わせると，式(4.13)は $\hat{\mathbf{w}}_m^*$ を m 回目のイテレーションにおける \mathbf{w}^* の推定値として，

$$(4.16) \quad \check{J}^*(\mathbf{w}^*) = \frac{N-1}{2} \mathbf{w}^{*\top} \mathbf{w}^* + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K [\mathbf{y}_k - \mathbf{g}_k(\hat{\mathbf{x}}_{0,m}) - \Gamma_{k,m}(\mathbf{w}^* - \hat{\mathbf{w}}_m^*)]^\top \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{y}_k - \mathbf{g}_k(\hat{\mathbf{x}}_{0,m}) - \Gamma_{k,m}(\mathbf{w}^* - \hat{\mathbf{w}}_m^*)]$$

となる．この $\mathbf{w}^* = \hat{\mathbf{w}}_m^*$ における勾配，ヘッセ行列はそれぞれ

$$(4.17) \quad \nabla \check{J}_m^* = (N-1)\hat{\mathbf{w}}_m^* - \sum_{k=1}^K \Gamma_{k,m}^\top \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{y}_k - \mathbf{g}_k(\hat{\mathbf{x}}_{0,m})],$$

$$(4.18) \quad \nabla^2 \check{J}_m^* = (N-1)\mathbf{I}_N + \sum_{k=1}^K \Gamma_{k,m}^\top \mathbf{R}^{-1} \Gamma_{k,m}.$$

したがって，GN法にしたがって J の最小化を行う場合，各イテレーションで

$$(4.19) \quad \mathbf{w}_{m+1}^* = \mathbf{w}_m^* - \left[(N-1)\mathbf{I}_N + \sum_{k=1}^K \Gamma_{k,m}^\top \mathbf{R}^{-1} \Gamma_{k,m} \right]^{-1} \left[(N-1)\mathbf{w}_m^* - \sum_{k=1}^K \Gamma_{k,m}^\top \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{y}_k - \mathbf{g}_k(\hat{\mathbf{x}}_{0,m})] \right]$$

を行えばよく，IEnKSではこの式を用いる．但しこの方法を用いた場合，式(4.11)の仮定から解は初期アンサンブルメンバーの張る部分空間に制限されることになる．

5. 計数観測データのための拡張

次に，時刻 t_k の状態 \mathbf{x}_k が与えられた下で観測 \mathbf{y}_k の各要素 y_{kj} ($j = 1, \dots, n$) がポアソン分布にしたがう場合について，アンサンブルシミュレーションの結果を用いた変分法アルゴリズムの導出を試みる．この場合の尤度は， \mathbf{x}_k に基づく y_{kj} の予測値を $h_{kj}(\mathbf{x}_k)$ として，

$$(5.1) \quad P(\mathbf{y}_k | \mathbf{x}_k) = \prod_{j=1}^n \frac{h_{kj}(\mathbf{x}_k)^{y_{kj}}}{y_{kj}!} \exp[-h_{kj}(\mathbf{x}_k)].$$

このとき， $h_{kj}(\mathbf{x}_k) \geq 0$ が各 j について成り立つ必要がある．ただ，実際の応用においては，ポアソン分布にしたがう観測が非負の状態変数と結びついていることが多い．例えば，1節で触れた宇宙科学分野の紫外線観測の例では，観測される光子の数の期待値が発光源となる流体の密度と比例し，状態変数である流体密度が非負であることから，観測の期待値も非負となる．このような場合，観測と対応付けられる状態変数が非負になっており，状態変数が非負であれば，観測の期待値 $h_{kj}(\mathbf{x}_k)$ は自ずと非負になる状況になっている．以下では，話を簡単にするために状態ベクトル \mathbf{x}_k の全要素が非負であると仮定する．関数 h_k は， \mathbf{x}_k の全要素が非負であれば必ず $h_{kj}(\mathbf{x}_k)$ の全要素が非負になるような関数であると仮定して， $h_{kj}(\mathbf{x}_k)$ が非負になることを保証しておく．初期値 \mathbf{x}_0 については，各要素 $x_{0\ell}$ ($\ell = 1, \dots, d$) が正の値を取るように

$$(5.2) \quad \xi_\ell = \log x_{0\ell}$$

と置き， $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1 \cdots \xi_d)^\top$ を推定することで， \mathbf{x}_0 の推定を行うことにする． $\boldsymbol{\xi}$ の事前分布は，正規分布

$$(5.3) \quad p(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d |\mathbf{P}_\xi|}} \exp\left(-\frac{1}{2}[\boldsymbol{\xi} - \bar{\boldsymbol{\xi}}_b]^\top \mathbf{P}_\xi^{-1} [\boldsymbol{\xi} - \bar{\boldsymbol{\xi}}_b]\right)$$

で与える。このとき、観測の時系列 $\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_K$ が与えられた下での $\boldsymbol{\xi}_0$ の事後分布は

$$(5.4) \quad p(\boldsymbol{\xi} | \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_K) \propto \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d |\mathbf{P}_\xi|}} \exp\left(-\frac{1}{2}[\boldsymbol{\xi} - \bar{\boldsymbol{\xi}}_b]^\top \mathbf{P}_\xi^{-1} [\boldsymbol{\xi} - \bar{\boldsymbol{\xi}}_b]\right) \\ \times \prod_{k=1}^K \prod_{j=1}^n \frac{h_{kj}(\mathbf{x}_k)^{y_{kj}}}{y_{kj}!} \exp[-h_{kj}(\mathbf{x}_k)]$$

を満たし、対数事後確率密度は C を定数として

$$(5.5) \quad \log p(\boldsymbol{\xi} | \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_K) \\ = -\frac{1}{2}[\boldsymbol{\xi} - \bar{\boldsymbol{\xi}}_b]^\top \mathbf{P}_\xi^{-1} [\boldsymbol{\xi} - \bar{\boldsymbol{\xi}}_b] + \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^n [y_{kj} \log h_{kj}(\mathbf{x}_k) - \log y_{kj}! - h_{kj}(\mathbf{x}_k)] + C$$

と書ける。対数事後確率密度 $\log p(\boldsymbol{\xi} | \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_K)$ を最大化するには、以下の目的関数を最小化すればよい：

$$(5.6) \quad J_P(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{2}[\boldsymbol{\xi} - \bar{\boldsymbol{\xi}}_b]^\top \mathbf{P}_\xi^{-1} [\boldsymbol{\xi} - \bar{\boldsymbol{\xi}}_b] + \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^n [\log y_{kj}! + h_{kj}(\mathbf{x}_k) - y_{kj} \log h_{kj}(\mathbf{x}_k)].$$

ここで、式(2.8)と同様に、

$$(5.7) \quad \mathbf{h}_k(\mathbf{x}_k) = \mathbf{z}_k(\mathbf{z}_0)$$

を満たす関数 \mathbf{z}_k を定義する。 \mathbf{z}_k は式(2.7)のような合成関数の形で書くと、

$$(5.8) \quad \mathbf{z}_k(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{h}_k \circ \mathbf{f}_k \circ \mathbf{f}_{k-1} \circ \dots \circ \mathbf{f}_1 \circ \mathbf{e}(\boldsymbol{\xi})$$

となる。但し、関数 \mathbf{e} は

$$(5.9) \quad \mathbf{e}_k(\boldsymbol{\xi}) = \begin{pmatrix} \exp(\xi_1) \\ \vdots \\ \exp(\xi_d) \end{pmatrix}$$

となる d 次元関数である。 $\mathbf{z}_k(\boldsymbol{\xi})$ の j 番目の要素を $z_{kj}(\boldsymbol{\xi})$ と書くことにすると、目的関数 J_P は

$$(5.10) \quad J_P(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{2}[\boldsymbol{\xi} - \bar{\boldsymbol{\xi}}_b]^\top \mathbf{P}_\xi^{-1} [\boldsymbol{\xi} - \bar{\boldsymbol{\xi}}_b] + \sum_{k,j} [\log y_{kj}! + z_{kj}(\boldsymbol{\xi}) - y_{kj} \log z_{kj}(\boldsymbol{\xi})]$$

と書き直せる。

$(m+1)$ 回目のイテレーションでのアンサンブルシミュレーションを実行するために、 $\boldsymbol{\xi}$ について N 個の異なる値 $\{\boldsymbol{\xi}_m^{(1)}, \dots, \boldsymbol{\xi}_m^{(N)}\}$ を用意する。但し、 $\boldsymbol{\xi}$ の推定値を $\hat{\boldsymbol{\xi}}_m$ として、式(3.1)と同様に、

$$(5.11) \quad \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\xi}_m^{(i)} = \hat{\boldsymbol{\xi}}_m$$

が成り立つようにそれぞれの $\boldsymbol{\xi}_m^{(i)}$ を生成するものとする。 $\boldsymbol{\xi}$ については、各アンサンブルメンバーの $\hat{\boldsymbol{\xi}}_m$ からの差を並べた $d \times N$ 行列

$$(5.12) \quad \Xi_m = (\xi_m^{(1)} - \hat{\xi}_m \quad \cdots \quad \xi_m^{(N)} - \hat{\xi}_m)$$

を定義したとき、式(3.4)と同様に

$$(5.13) \quad \xi = \hat{\xi}_m + \Xi_m \mathbf{w}_{m+1}$$

の形で書けるものとする。アンサンブルシミュレーションの結果を用いて N 次元の行ベクトル $\zeta_{k,j,m}^T$ を

$$(5.14) \quad \zeta_{k,j,m}^T = (z_{kj}(\xi_m^{(1)}) - z_{kj}(\hat{\xi}_m) \quad \cdots \quad z_{kj}(\xi_m^{(N)}) - z_{kj}(\hat{\xi}_m))$$

のように定義し、式(3.10)と同様に、関数 z_{kj} を

$$(5.15) \quad z_{kj}(\xi) \approx z_{kj}(\bar{\xi}_b) + \zeta_{k,j,m}^T \mathbf{w}_{m+1}$$

で近似すると、式(5.10)は、

$$(5.16) \quad \begin{aligned} \check{J}_P = & \frac{1}{2} (\hat{\xi}_m - \bar{\xi}_b + \Xi_m \mathbf{w}_{m+1})^T \mathbf{P}_\xi^{-1} (\hat{\xi}_m - \bar{\xi}_b + \Xi_m \mathbf{w}_{m+1}) \\ & + \sum_{k,j} [\log y_{kj}! + z_{kj}(\bar{\xi}_b) + \zeta_{k,j,m}^T \mathbf{w}_{m+1} - y_{kj} \log(z_{kj}(\bar{\xi}_b) + \zeta_{k,j,m}^T \mathbf{w}_{m+1})]. \end{aligned}$$

各イテレーションで解が改善されるようにするために、式(3.19)と同じく 2 次の項を追加すると、

$$(5.17) \quad \begin{aligned} \hat{J}_P = & \frac{\sigma_{m+1}^2}{2} \mathbf{w}_{m+1}^T \mathbf{w}_{m+1} + \frac{1}{2} (\hat{\xi}_m - \bar{\xi}_b + \Xi_m \mathbf{w}_{m+1})^T \mathbf{P}_\xi^{-1} (\hat{\xi}_m - \bar{\xi}_b + \Xi_m \mathbf{w}_{m+1}) \\ & + \sum_{k,j} [\log y_{kj}! + z_{kj}(\bar{\xi}_b) + \zeta_{k,j,m}^T \mathbf{w}_{m+1} - y_{kj} \log(z_{kj}(\bar{\xi}_b) + \zeta_{k,j,m}^T \mathbf{w}_{m+1})]. \end{aligned}$$

\hat{J}_P の勾配は、

$$(5.18) \quad \nabla \hat{J}_P = \Xi_m^T \mathbf{P}_\xi^{-1} [\hat{\xi}_m - \bar{\xi}_b] + \sum_{k,j} \left[\zeta_{k,j,m} - \frac{y_{kj}}{z_{kj}(\bar{\xi}_b)} \zeta_{k,j,m} \right],$$

ヘッセ行列は、

$$(5.19) \quad \nabla^2 \hat{J}_P = \sigma_{m+1}^2 \mathbf{I}_N + \Xi_m^T \mathbf{P}_\xi^{-1} \Xi_m + \sum_{k,j} \left[\frac{y_{kj}}{z_{kj}(\bar{\xi}_b)^2} \zeta_{k,j,m} \zeta_{k,j,m}^T \right].$$

したがって、4 節の考え方にに基づき、ニュートン・ラフソン法で \mathbf{w}_{m+1} の推定値 $\hat{\mathbf{w}}_{m+1}$ を求めると、

$$(5.20) \quad \begin{aligned} \hat{\mathbf{w}}_{m+1} = & - \left(\sigma_{m+1}^2 \mathbf{I}_N + \Xi_m^T \mathbf{P}_\xi^{-1} \Xi_m + \sum_{k,j} \left[\frac{y_{kj}}{z_{kj}(\bar{\xi}_b)^2} \zeta_{k,j,m} \zeta_{k,j,m}^T \right] \right)^{-1} \\ & \times \left(\Xi_m^T \mathbf{P}_\xi^{-1} [\hat{\xi}_m - \bar{\xi}_b] + \sum_{k,j} \left[\zeta_{k,j,m} - \frac{y_{kj}}{z_{kj}(\bar{\xi}_b)} \zeta_{k,j,m} \right] \right). \end{aligned}$$

あとは、式(3.21)と同様に

$$(5.21) \quad \hat{\xi}_{m+1} = \hat{\xi}_m + \Xi_m \hat{\mathbf{w}}_{m+1}$$

で $\hat{\xi}_{m+1}$ を求めれば、 $\hat{\mathbf{x}}_{0,m+1} = e(\hat{\xi}_{m+1})$ が \mathbf{x}_0 の $(m+1)$ 回目の推定値となる。以上のように、

尤度がポアソン分布で与えられた場合であっても、関数 z_k の各要素 z_{kj} を式 (5.15) で近似すれば、勾配、ヘッセ行列を近似的に求めることができるので、アンサンブルを用いた変分法で \mathbf{x}_0 の推定ができると考えられる。

6. 1次元移流拡散モデルによる実験

前節で議論したアルゴリズムの有効性を確認するために、1次元の流体をポアソンノイズ付きで観測するという簡単な設定で数値実験を行った。流体をポアソンノイズ付きで観測するというのは、宇宙プラズマの撮像観測で現れる問題を単純化したものである。1次元流体の移流拡散方程式は、

$$(6.1) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = -u \frac{\partial \rho}{\partial x} + \nu \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}$$

で与えられる。但し、 ρ は流体の密度、 t は時間、 x は位置、 u は速度、 ν は拡散係数である。 x 方向の範囲は $0 \leq x < 200$ とし、 $\rho(x=200) = \rho(x=0)$ の周期境界条件を設定する。また、 $u=2$ 、 $\nu=2$ で固定することとし、 ρ の初期値のみ未知とする。式 (6.1) は、 $\Delta x=2$ 、 $\Delta t=0.2$ の間隔で離散化し、Lax-Wendroff スキーム (例えば、藤井, 1994) で解く。

推定に用いる擬似データは、初期値を

$$(6.2) \quad \rho_0(x) = \begin{cases} -\frac{20}{900}(x-20)(x-80), & (\text{when } 20 < x < 80), \\ 0, & (\text{otherwise}), \end{cases}$$

と与えた上でモデルを実行し、生成した。つまり、これが推定すべき「真の初期値」ということになる。上述のように、 $0 \leq x < 200$ の範囲を $\Delta x=2$ の間隔で離散化しているので、実際に推定すべき未知変数の数は 100 ということになる。観測は $2\Delta x$ おきの空間間隔で、時間間隔 $20\Delta t$ おきに $t=100\Delta t=20$ まで取得されるものとし、各観測にはポアソン分布にしたがうノイズが付加されるものとする。

推定に当たっては、 ρ_0 の各格子点における値 $\rho_{0\ell}$ の対数 $\xi_\ell = \log \rho_{0\ell}$ を 100 個並べた

$$(6.3) \quad \boldsymbol{\xi} = (\xi_1 \quad \cdots \quad \xi_{100})^\top$$

について、事前分布を平均 $\mathbf{0}$ の正規分布

$$(6.4) \quad p(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d |\mathbf{P}_\xi|}} \exp\left(-\frac{1}{2} \boldsymbol{\xi}^\top \mathbf{P}_\xi^{-1} \boldsymbol{\xi}\right)$$

で与える。分散共分散行列 \mathbf{P}_ξ は

$$(6.5) \quad \boldsymbol{\xi}^\top \mathbf{P}_\xi^{-1} \boldsymbol{\xi} = \frac{1}{\alpha^2} \left[\varepsilon^2 \boldsymbol{\xi}^\top \boldsymbol{\xi} + \sum_{\ell=1}^{100} \left(\xi_\ell - \frac{\xi_{\ell-1} + \xi_{\ell+1}}{2} \right)^2 \right]$$

を満たすように設定する。但し、 $\xi_0 = \xi_{100}$ 、 $\xi_{101} = \xi_1$ であり、また本研究では $\varepsilon=0.01$ 、 $\alpha=0.02$ と置いている。また、 $(m+1)$ 回目のイテレーションで用いるアンサンブルは、 m 回目のイテレーションで得られた推定値 $\hat{\boldsymbol{\xi}}_m$ を平均とする正規分布

$$(6.6) \quad \mathcal{N}(\hat{\boldsymbol{\xi}}_m, \delta^2 \mathbf{P}_\xi) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d |\delta^2 \mathbf{P}_\xi|}} \exp\left(-\frac{1}{2\delta^2} [\boldsymbol{\xi} - \hat{\boldsymbol{\xi}}_m]^\top \mathbf{P}_\xi^{-1} [\boldsymbol{\xi} - \hat{\boldsymbol{\xi}}_m]\right)$$

から生成する。

以上のような設定の下、5節で導入したアルゴリズムで初期値 ρ_0 の推定を行った。図1は、

イテレーションごとの推定値の対数尤度 $\sum_k \log p(\mathbf{y}_k | \hat{\xi}_m)$ を示したもので、実線がアンサンブルメンバー数を $N = 100$ としたとき、点線が $N = 50$ としたときの結果を示している。ここで示している対数尤度とは、式(5.10)の目的関数 J_P そのものではなく、式(5.10)右辺第2項の符号を反転させたものに対応する。アンサンブルメンバー数に関わらず、対数尤度はイテレーションごとに増大しており、アルゴリズムが期待どおりに動いていることが確認できる。

図1を詳しく見ると、 $N = 100$ の場合には6回程度のイテレーションでほぼ収束しており、 $N = 50$ の場合は8回程度のイテレーションで収束している。計算コストのほとんどがアンサンブルシミュレーションの実行に因るとすると、 $N = 50$ とした場合、 $N = 100$ とした場合と比べ、1回のイテレーションに必要な計算コストは半分になる。収束に至るまでに要したイテレーションの回数は、 $N = 100$ の場合、 $N = 50$ とした場合の3/4倍程度であったため、今回の実験では、未知変数の数(100)よりも少ないアンサンブルメンバー数($N = 50$)の場合の方が効率的だったということになる。

図2は、6回のイテレーションによる初期値の推定結果であり、黒の実線、黒の点線がそれ

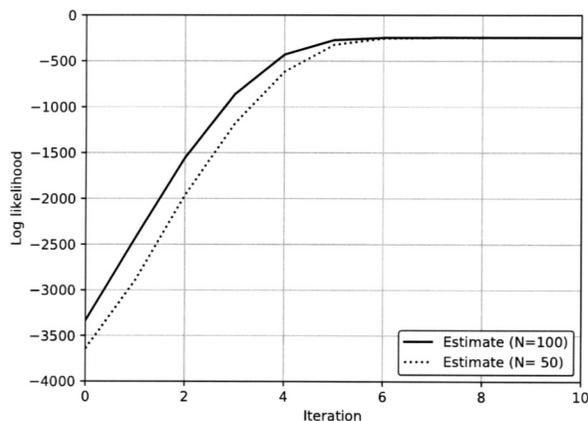


図1. イテレーションごとの対数尤度の変化. $N = 100$ の場合の結果を実線, $N = 50$ の場合の結果を点線で示す.

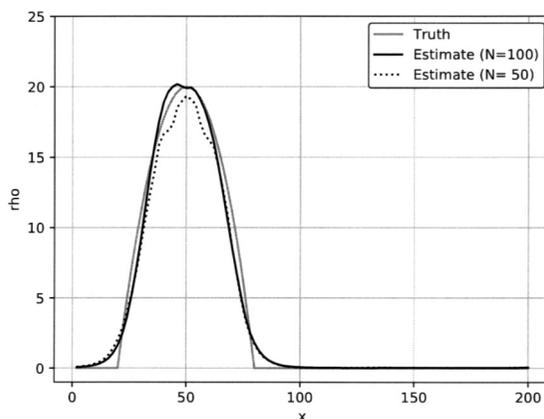


図2. 6回のイテレーションによる初期値の推定結果. $N = 100$ の場合の結果を黒の実線, $N = 50$ の場合の結果を黒の点線, 真の初期値を灰色の実線で示す.

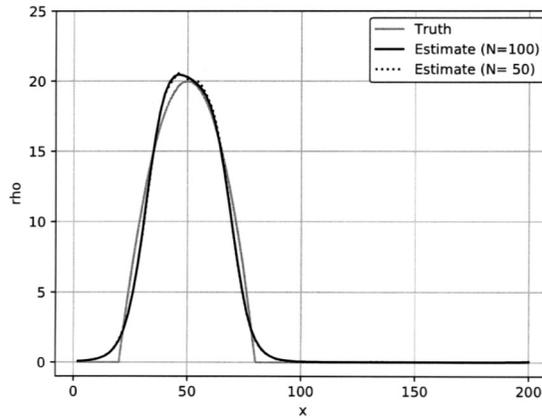


図 3. 10 回のイテレーションによる初期値の推定結果. 各線の意味は図 2 に準じる.

ぞれ $N = 100$, $N = 50$ の場合の結果を示している. また, 灰色の実線は真の初期値である. $N = 100$ の場合, 真の値に近い推定結果が得られている. $N = 50$ の結果を見ると, $N = 100$ の場合と比較して真の値との差異が大きいが, 大まかな構造は捉えられており, 期待どおりアルゴリズムが動いていると言える. 図 3 は, イテレーション 10 回の時点での推定結果で, それぞれの線の意味は図 2 と同じである. $N = 100$ の場合は, イテレーション 6 回の結果とほぼ変わらない. 一方, $N = 50$ の場合, イテレーション 6 回では収束に至っていなかったが, 10 回のイテレーションで $N = 100$ の場合とほぼ同じ値に収束していることが確認できる. $N = 100$ の場合も, $N = 50$ の場合も同じ目的関数の最小化を行っているが, 目的関数が同じであれば N に関わらず同じ結果が得られており, このこともアルゴリズムが正しく動いていることを示している.

比較のために, 観測モデルを正規分布とした場合の実験も行った. 目的関数は

$$(6.7) \quad J_G(\xi) = \frac{1}{2}[\xi - \bar{\xi}_b]^T P_\xi^{-1}[\xi - \bar{\xi}_b] + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K [y_k - z_k(\xi)]^T R^{-1}[y_k - z_k(\xi)]$$

のように設定し, 同じ擬似観測データを与えた上で, 3 節のアルゴリズムを用いて目的関数 J_G を最小化する ξ を求め, 初期値 ρ_0 を推定した. ポアソン分布の場合と異なり, 観測誤差共分散行列 R を設定する必要があるが, R の全要素を推定するのは困難であるため, $R = \text{diag}(s^2, s^2, \dots, s^2)$ のようにすべての対角要素が同じ値を取る対角行列を仮定した. R の対角要素は $s = 0.5, 1.0, 1.5, \dots$ と s を増やして ξ の推定を繰り返し, 収束後の対数尤度 $\sum_k \log p(y_k | \hat{\xi})$ が最大となった値 ($s = 2$ つまり $s^2 = 4$) を選択した. 図 4 が, イテレーションごとの対数尤度 $\sum_k \log p(y_k | \hat{\xi}_m)$ であり, 図 1 と同様に実線がアンサンブルメンバー数を $N = 100$ としたとき, 点線が $N = 50$ としたときの結果である. 観測データがポアソン分布にしたがっているため, 図 4 の正規分布に基づく対数尤度は, 図 1 と結果と比較すると, 計算が収束しても値が小さくなる. また, 収束もやや遅くなっているように見える. 図 5 は, 10 回のイテレーションによる初期値の推定結果である. 大まかな構造は捉えられているが, 図 3 の結果と比較するとピークの付近で ρ の値を過大評価している. これは, 本来ポアソン分布である $p(y_k | x_k)$ を無理に正規分布と仮定して推定したことによるバイアスが現れているものと考えられる. このように, システムの状態が与えられた下でポアソン分布にしたがう計数データを, 正規分布の仮定の下で同化すると必ずしもよい推定結果が得られない. 本稿で導入したアルゴ

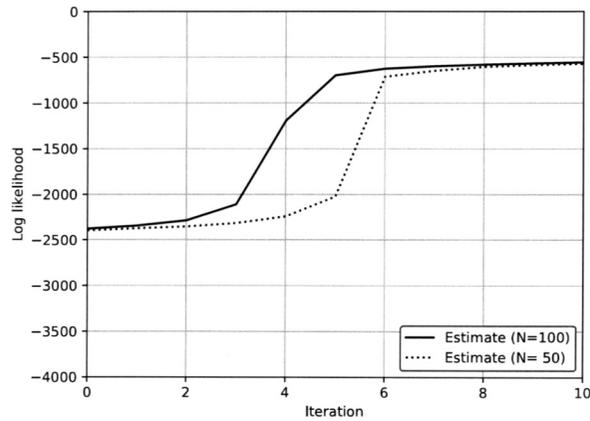


図 4. 観測モデルを正規分布と設定した場合のイテレーションごとの対数尤度の変化。
 $N = 100$ の場合の結果を実線, $N = 50$ の場合の結果を点線で示す。

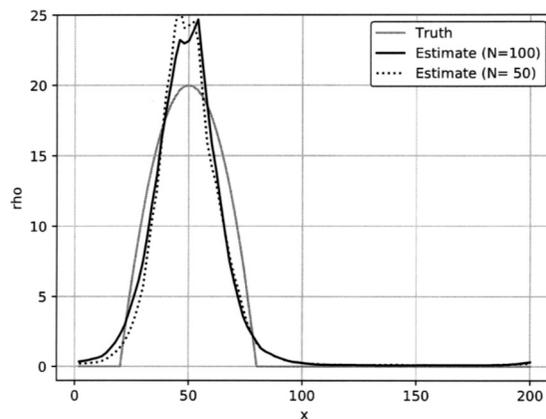


図 5. 観測モデルを正規分布と設定した場合の 10 回のイテレーションによる初期値の推定結果。各線の意味は図 2 に準じる。

リズムは, このような場合に有効であると考えられる。

7. おわりに

本稿では, アンサンブルシミュレーションの結果を利用して 4 次元変分法の問題を解くアプローチが, 尤度が正規分布で与えられる場合だけでなく, ポアソン分布で与えられる場合にも適用可能であることを示した. 正規分布の場合と同じく, ポアソン分布の場合においても, 対数事後確率密度関数から導出される目的関数の勾配, ヘッセ行列をアンサンブルシミュレーションの結果を利用して近似すれば, ニュートン・ラフソン法の式に基づいて入力(初期値)を求めることができる. 本稿ではポアソン分布のみについて議論したが, 同様のアルゴリズムは, 正規分布, ポアソン分布以外にも様々な分布に対して導出できる可能性がある. アンサンブルによる変分法アルゴリズムは, シミュレーションモデルをブラックボックスとして扱うことができ, 実装も容易なので, 他の分布にも適用できれば応用範囲は大きく広がると考えられる.

謝 辞

本研究を進めるにあたっては、科学研究費補助金基盤研究 B (課題番号: 17H01704) および基盤研究 A (課題番号: 17H00728) の助成を受けた。ここに感謝の意を表す。

参 考 文 献

- 淡路敏之, 蒲地政文, 池田元美, 石川洋一 (2009). 『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』, 京都大学学術出版会, 京都.
- Bocquet, M. and Sakov, P. (2013). Joint state and parameter estimation with iterative ensemble Kalman smoother, *Nonlinear Processes in Geophysics*, **20**, 803–818, <http://dx.doi.org/10.5194/npg-20-803-2013>.
- Bocquet, M. and Sakov, P. (2014). An iterative ensemble Kalman smoother, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **140**, 1521–1535, <http://dx.doi.org/10.1002/qj.2236>.
- Evensen, G. (2018). Analysis of iterative ensemble smoothers for solving inverse problems, *Computational Geosciences*, **22**, 885–908, <http://dx.doi.org/10.1007/s10596-018-9731-y>.
- Evensen, G. and van Leeuwen, P. J. (2000). An ensemble Kalman smoother for nonlinear dynamics, *Monthly Weather Review*, **128**, 1852–1867.
- 藤井孝蔵 (1994). 『流体力学の数値計算法』, 東京大学出版会, 東京.
- Gu, Y. and Oliver, D. S. (2007). An iterative ensemble Kalman filter for multiphase fluid flow data assimilation, *SPE Journal*, **12**, 438–446.
- 金森敬文, 鈴木大慈, 竹内一郎, 佐藤一誠 (2016). 『機械学習のための連続最適化』, 講談社, 東京.
- Lange, K. (2016). *MM Optimization Algorithms*, SIAM, Philadelphia.
- Liu, C., Xiao, Q. and Wang, B. (2008). An ensemble-based four-dimensional variational data assimilation scheme. Part I: Technical formulation and preliminary test, *Monthly Weather Review*, **136**, 3363–3373.
- Lorenc, A. C. (2003). The potential of the ensemble Kalman filter for NWP—a comparison with 4D-Var, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **129**, 3183–3203.
- Minami, T., Nakano, S., Lesur, V., Takahashi, F., Matsushima, M., Shimizu, H., Nakashima, R., Taniguchi, H. and Toh, H. (2020). A candidate secular variation model for IGRF-13 based on MHD dynamo simulation and 4D-EnVar data assimilation, *Earth Planets and Space*, **72**, p.136, <http://dx.doi.org/10.1186/s40623-020-01253-8>.
- Nakano, S. (2021). Behavior of the iterative ensemble-based variational method in nonlinear problems, *Nonlinear Processes in Geophysics*, **28**, 93–109, <http://dx.doi.org/10.5194/npg-28-93-2021>.
- Nakano, S., Fok, M.-C., Brandt, P. C. and Higuchi, T. (2014). Estimation of temporal evolution of the helium plasmasphere based on a sequence of IMAGE/EUV images, *Journal of Geophysical Research*, **119**, 3708–3723, <http://dx.doi.org/10.1002/2013JA019734>.
- Nocedal, J. and Wright, S. J. (2006). *Numerical Optimization*, 2nd ed., Springer, New York.
- Saito, M. M., Nishiura, H. and Higuchi, T. (2018). Reconstructing the transmission dynamics of rubella in Japan, 2012–2013, *PLoS ONE*, **13**, p. e0205889, <http://dx.doi.org/10.1371/journal.pone.0205889>.
- van Leeuwen, P. J. and Evensen, G. (1996). Data assimilation and inverse methods in terms of a probabilistic formulation, *Monthly Weather Review*, **124**, 2898–2913.
- Zupanski, M. (2005). Maximum likelihood ensemble filter: Theoretical aspects, *Monthly Weather Review*, **133**, 1710–1726.

Ensemble-based Variational Data Assimilation Approach and Its Extension for Count Data

Shin'ya Nakano^{1,2,3}

¹The Institute of Statistical Mathematics

²Center for Data Assimilation Research and Applications,
Joint Support-Center for Data Science Research

³Department of Statistical Science, School of Multidisciplinary Sciences,
The Graduate University for Advanced Studies, SOKENDAI

Ensemble-based variational approaches are a class of data assimilation methods which solves four-dimensional variational data assimilation problems by using ensemble simulations under various initial conditions and parameter settings. In contrast with the adjoint method, which is usually employed for four-dimensional variational data assimilation, these ensemble-based methods can easily be implemented without editing a simulation code allowing the model to be treated as a black box. A limitation of existing ensemble-based methods is that they are derived assuming that the conditional distributions of observations given the system states are Gaussian. Hence, they are not immediately applicable to observations that obey other distributions. This study derives an ensemble-based algorithm applicable for data assimilation into a black-box simulation model when the conditional distributions of observations are given by Poisson distributions.

シグネチャ法入門

杉浦 望実†

(受付 2021 年 12 月 31 日 ; 改訂 2022 年 7 月 1 日 ; 採択 7 月 1 日)

要 旨

地球科学などで観測される系列データは、多次元空間内の経路とみなすことができる。経路を効果的に読み取るには、経路内の点の順序や非線形性を忠実に記述することができるシグネチャと呼ばれる数列に変換することが有効である。特に、シグネチャの各項の線形結合を使えば、経路の集合上で定義された任意の非線形関数を近似できる。このことにより、系列データにラベルが付されたデータセットを学習するには、経路のシグネチャとラベルの組に対して線型回帰を適用すればよく、ラベルが非線形関数で決められる場合でも高性能な学習ができる。系列データを活用する機械学習やデータ同化にシグネチャ法を取り入れることで、これまで見落とされていた情報が抽出できる可能性がある。

キーワード：シグネチャ、機械学習、系列データ。

1. はじめに

地球科学をはじめとする様々な実証的な科学研究においては、系列データを分析することがしばしば必要になる。ここで、系列データというのは、例えばあるパラメータに沿って値が定義された多次元空間上の経路 $X: [0, 1] \ni t \mapsto X_t \in \mathbb{R}^d$ の上のいくつかの点 X_{t_1}, \dots, X_{t_m} を観測したもののことである。これらをばらばらの点と捉え、モデルと比較したり機械学習したりするのが素朴な扱い方であろう。しかし、これらの点が順番に並んでいることに意味があることもありえる。本稿では、順番の情報を失わないように、系列データを効率的に読み取る方法について述べる。この方法においては、経路上の点群として与えられる観測データを、シグネチャ (e.g., Lyons et al., 2007; Friz and Victoir, 2010) と呼ばれる数列に変換することが核心にあるため、シグネチャ法と呼ぶことにする。シグネチャは、ラフパス理論 (Lyons, 1998) という比較的新しい数学理論における主要概念のひとつである。

系列データをシグネチャに変換することにより、高性能かつ効率的な機械学習が可能になることが過去の研究において示されている。例えば、Fermanian (2021) には、公開データ Motion Sense (Malekzadeh et al., 2018), Urban Sound (Salamon et al., 2014) を対象とした機械学習において、シグネチャ法が他の最先端手法に比して優位かまたは同程度の性能を効率的に達成することが示されている。一方、Quick Draw! (Google, 2017) に関しては、極めて高い計算効率で一定の性能が得られている。Li et al. (2019) には、人間の動作把握への応用例において、シグネチャ法が他手法よりも好成績を効率的に達成することが示されている。その他にも、医療データ (Arribas et al., 2018; Morrill et al., 2019; Moore et al., 2019), 文字認識 (Xie et al., 2018), 金融時系列 (Lyons et al., 2014), 地球科学 (Sugiura and Hosoda, 2020) など多方面への

† 海洋研究開発機構 海洋観測研究センター：〒237-0061 神奈川県横須賀市夏島 2-15

応用例がある。

本稿では、シグネチャを使う理由を述べた後、シグネチャの定義と性質を示し、最後に機械学習への応用について議論する。説明にあたっては、原理的な側面が主になるものの、数学的な厳密性よりも応用とのつながりを重視する。

2. 動機づけ

系列データを扱う際になぜシグネチャが必要になるかを2つの例を挙げて説明する。

2.1 多項式回帰

点とそこでの評価値の集合 $\{(x_i, y_i) \mid x_i, y_i \in \mathbb{R}, i = 1, \dots, N\}$ を考える。このデータを多項式回帰するには、次のコスト関数を最小化することで、多項式の係数 $w = (w_0, \dots, w_M)$ を最適化すればいい(図1)。

$$(2.1) \quad J(w) = \sum_{i=1}^N \left(y_i - \sum_{k=0}^M w_k x_i^k \right)^2.$$

これと同様のことを経路の集合に対して行いたい。経路とそれに対する評価値の集合 $\{(X_i, y_i) \mid y_i \in \mathbb{R}, i = 1, \dots, N\}$ が与えられているとする。各経路 X_i は区間 $[0, 1]$ から \mathbb{R}^d への写像 $X_i : t \mapsto X_{i,t}$ である。各経路をシグネチャに変換することにより、経路の集合に対する回帰が可能になる。具体的には、次のコスト関数を最小化すればいい。

$$(2.2) \quad J(w) = \sum_{i=1}^N \left(y_i - \sum_{k=0}^M w_k S^{(k)}(X_i) \right)^2.$$

ここで $S^{(k)}(X_i)$ は経路 X_i に対して定められたシグネチャと呼ばれる数列の第 k 番目の項である。ただし、以下ではシグネチャの各項 (k) を多重添字で付番することがある。このように各経路をあたかもひとつの点のように扱って「多項式」回帰することを可能にするのが、シグネチャ法の役目のひとつである。

点の集合に対する多項式回帰においては、単項式 $1, x, \dots, x^M$ が回帰曲線(図1)の基底関数であるのに対して、経路の集合に対する回帰においては、シグネチャ $S^{(0)}(X), \dots, S^{(M)}(X)$ が回帰超曲面の基底関数となる。つまり、図1の横軸を、点の集合ではなく、経路の集合に置き

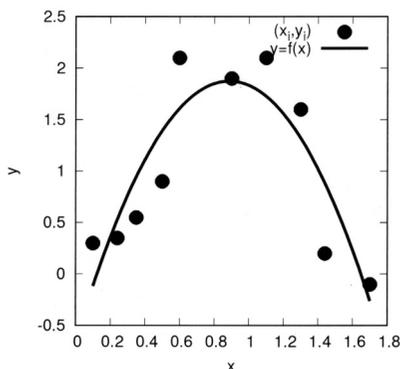


図1. 多項式回帰 ($y = w_0 + w_1x + w_2x^2$).

換えた場合に相当する。

2.2 非可換テイラー展開

区間 $[0, t]$ から d 次元ユークリッド空間 \mathbb{R}^d への写像 $X : u \mapsto X_u$ を経路と呼ぶ。 $Y : [0, t] \rightarrow \mathbb{R}^e$ は、 d 個の滑らかなベクトル場 $V_i : \mathbb{R}^e \rightarrow \mathbb{R}^e$, $i = 1, \dots, d$ を用いた次の常微分方程式で定められるとする。

$$(2.3) \quad \begin{bmatrix} dY_u^{(1)} \\ \vdots \\ dY_u^{(e)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} V_1^{(1)}(Y_u) & \cdots & V_d^{(1)}(Y_u) \\ \vdots & & \vdots \\ V_1^{(e)}(Y_u) & \cdots & V_d^{(e)}(Y_u) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dX_u^{(1)} \\ \vdots \\ dX_u^{(d)} \end{bmatrix}.$$

これは $dY_u = V(Y_u)dX_u$ とも書ける。常微分方程式(2.3)には、再帰型ニューラルネット (Liao et al., 2019) や確率微分方程式など多くの例が含まれる。 Y は X に駆動される制御型方程式になっている。

Y_t の滑らかな関数 $F : \mathbb{R}^e \rightarrow \mathbb{R}$ による評価値 $F(Y_t)$ を X に沿ってテイラー展開する (e.g., Litterer and Oberhauser, 2011; Baudoin and Zhang, 2012)。テイラー展開は、微分積分学の基本定理の適用を繰り返すことによって導出することができる。なお、以下で上付きと下付きの同一の添字の組に対しては、総和を施すものとする。

関数 F の方向微分を $\nabla_{V_i} F(Y_u) := V_i^{(k)}(Y_u) \frac{\partial}{\partial Y^{(k)}} F(Y_u)$ と書くと、

$$(2.4) \quad dF_{u_1} = \frac{\partial F}{\partial Y^{(k_1)}}(Y_{u_1}) dY_{u_1}^{(k_1)} = \nabla_{V_{i_1}} F(Y_{u_1}) dX_{u_1}^{(i_1)}$$

なので、微分積分学の基本定理より、

$$(2.5) \quad F(Y_t) = F(Y_0) + \int_{0 < u_1 < t} \nabla_{V_{i_1}} F(Y_{u_1}) dX_{u_1}^{(i_1)}.$$

式(2.5)内の $\nabla_{V_{i_1}} F(Y_{u_1})$ に微分積分学の基本定理を適用して代入すると、

$$(2.6) \quad F(Y_t) = F(Y_0) + \nabla_{V_{i_1}} F(Y_0) \int_{0 < u_1 < t} dX_{u_1}^{(i_1)} + \int_{0 < u_1 < u_2 < t} \nabla_{V_{i_1}} \nabla_{V_{i_2}} F(Y_{u_1}) dX_{u_1}^{(i_1)} dX_{u_2}^{(i_2)}.$$

この操作を繰り返し適用することにより、以下のように n 次の非可換テイラー展開が得られる (e.g., Boedihardjo et al., 2015)。

$$(2.7) \quad F(Y_t) = \sum_{k=0}^n \nabla_{V_{i_1}} \cdots \nabla_{V_{i_k}} F(Y_0) \int_{0 < u_1 < \cdots < u_k < t} dX_{u_1}^{(i_1)} \cdots dX_{u_k}^{(i_k)} + R_{n+1}(t),$$

$$(2.8) \quad R_{n+1}(t) = \int_{0 < u_1 < \cdots < u_n < t} (\nabla_{V_{i_1}} \cdots \nabla_{V_{i_n}} F(Y_{u_1}) - \nabla_{V_{i_1}} \cdots \nabla_{V_{i_n}} F(Y_0)) dX_{u_1}^{(i_1)} \cdots dX_{u_n}^{(i_n)}.$$

式(2.7)の2次以上の項においては、方向微分が可換でないため、通常のテイラー展開における $X_t^{(i)} - X_0^{(i)}$ の冪のかわりに、反復積分(後述) $\int_{0 < u_1 < \cdots < u_k < t} dX_{u_1}^{(i_1)} \cdots dX_{u_k}^{(i_k)}$ が現れる。

式(2.7)が示唆するのは、システム $\{Y_0, F, V_1, \dots, V_d\}$ が未知な場合、評価値 $F(Y_t)$ と経路の反復積分 $\{\int_{0 < u_1 < \cdots < u_k < t} dX_{u_1}^{(i_1)} \cdots dX_{u_k}^{(i_k)}\}_{i_1, \dots, i_k=1, \dots, d}\}_{k=1, \dots, n}$ との組をデータサンプルとして持っていれば、重回帰によりシステム同定ができるということである。

3. シグネチャの概要

経路に対して定まるシグネチャという数列の定義と性質について述べる。特に、シグネチャ

が経路を独立変数とする関数の空間における基底関数になっていることが重要である。

3.1 シグネチャの定義

$X : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^d$ を経路とする。また、区間 $[0, 1]$ の分割を D として、経路の長さを $\ell = \sup_D \sum_{[t_{i-1}, t_i] \in D} |X_{t_i} - X_{t_{i-1}}|$ で定義する。この長さ ℓ が有限であることを有界変動を持つという。有界変動を持つ経路に対して、1 次の反復積分を次のように定義する。 $i_1 = 1, \dots, d$ に対して、

$$(3.1) \quad \mathcal{S}^{(i_1)}(X) = \int_{0 < t_1 < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} = X_1^{(i_1)} - X_0^{(i_1)}.$$

2 次の反復積分は、 $i_1, i_2 = 1, \dots, d$ に対して、

$$(3.2) \quad \mathcal{S}^{(i_1 i_2)}(X) = \int_{0 < t_1 < t_2 < 1} \mathcal{S}^{(i_1)}(X_{[0, t_2]}) dX_{t_2}^{(i_2)} = \int_{0 < t_1 < t_2 < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)}.$$

ここで、 $X_{[0, t_2]}$ は経路 X の定義域を区間 $[0, t_2]$ に制限したものを表す。これを続けていくと、 n 次の反復積分は、 $i_1, \dots, i_n = 1, \dots, d$ に対して、

$$(3.3) \quad \mathcal{S}^{(i_1 \dots i_n)}(X) = \int_{0 < t_n < 1} \mathcal{S}^{(i_1 \dots i_{n-1})}(X_{[0, t_n]}) dX_{t_n}^{(i_n)} = \int_{0 < t_1 < \dots < t_{n-1} < t_n < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} \dots dX_{t_{n-1}}^{(i_{n-1})} dX_{t_n}^{(i_n)}.$$

n 段シグネチャ $\mathcal{S}_n(X)$ は、これらを並べて書いたものである。

$$(3.4) \quad \mathcal{S}_n(X) = \left(\mathcal{S}^{\emptyset}(X), \mathcal{S}^{(\bullet)}(X), \mathcal{S}^{(\bullet\bullet)}(X), \dots, \mathcal{S}^{(\overbrace{\bullet\bullet\bullet}^n)}(X) \right).$$

ここで、 \bullet には、それぞれ $1, \dots, d$ が入る。0 次の反復積分 $\mathcal{S}^{\emptyset}(X)$ は、常に 1 と定義する。なお、式(3.4)で $n \rightarrow \infty$ とした無限列のことを $\mathcal{S}(X)$ と書き、無限段のシグネチャ、または単にシグネチャと呼ぶ。

具体例として、 $d = 2$ の場合の 2 段シグネチャを書くと、

$$(3.5) \quad \mathcal{S}_2(X) = \left(\mathcal{S}^{\emptyset}(X), \begin{bmatrix} \mathcal{S}^{(1)}(X) \\ \mathcal{S}^{(2)}(X) \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \mathcal{S}^{(11)}(X) & \mathcal{S}^{(12)}(X) \\ \mathcal{S}^{(21)}(X) & \mathcal{S}^{(22)}(X) \end{bmatrix} \right) \\ = \left(1, \begin{bmatrix} X_1^{(1)} - X_0^{(1)} \\ X_1^{(2)} - X_0^{(2)} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(X_1^{(1)} - X_0^{(1)})^2 & \int_0^1 (X_{t_2}^{(1)} - X_0^{(1)}) dX_{t_2}^{(2)} \\ \int_0^1 (X_{t_2}^{(2)} - X_0^{(2)}) dX_{t_2}^{(1)} & \frac{1}{2}(X_1^{(2)} - X_0^{(2)})^2 \end{bmatrix} \right).$$

式(3.5)の 2 次の反復積分のうち、2 つの非対角項の差(の 2 分の 1)は 1 次の反復積分 $X_1^{(i)} - X_0^{(i)}$ の冪では表わせないことに注意(Lévy 面積とも呼ばれる)。 n 段シグネチャの成分は、1 も含めると、 $1 + d + d^2 + \dots + d^n = (d^{n+1} - 1)/(d - 1)$ 個ある。

より正確には、付録 A の式(A.9)に示すように、シグネチャはテンソル代数 $T^n(\mathbb{R}^d)$ の元とみなすことができる。

3.2 経路とシグネチャとの対応

区間 $[0, 1]$ で定義された経路 X を時刻 s を境に 2 分割することを考える。この節では、パラメータの範囲がわかるようにこの経路を $X_{[0, 1]}$ というようにも書く。2 階の反復積分の第 (i_1, i_2) 成分

$$(3.6) \quad \mathcal{S}^{(i_1 i_2)}(X_{[0,1]}) = \int_{0 < t_1 < t_2 < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)}$$

を考える． t_1 と t_2 に関する積分範囲は $0 < t_1 < t_2 < 1$ であるが，任意の $0 < s < 1$ を採ると，この範囲は，

$$(3.7) \quad \{s < t_1 < t_2 < 1\} \cup \{0 < t_1 < s < t_2 < 1\} \cup \{0 < t_1 < t_2 < s\}$$

と 3 つの互いに交わらない部分集合に分けることができる．これにより，

$$(3.8) \quad \begin{aligned} \mathcal{S}^{(i_1 i_2)}(X_{[0,1]}) &= \int_{s < t_1 < t_2 < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)} + \int_{0 < t_1 < s < t_2 < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)} \\ &\quad + \int_{0 < t_1 < t_2 < s} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)} \\ &= \int_{s < t_1 < t_2 < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)} + \int_{0 < t_1 < s} dX_{t_1}^{(i_1)} \int_{s < t_2 < 1} dX_{t_2}^{(i_2)} \\ &\quad + \int_{0 < t_1 < t_2 < s} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)} \\ &= \mathcal{S}^{(i_1 i_2)}(X_{[s,1]}) + \mathcal{S}^{(i_1)}(X_{[0,s]}) \mathcal{S}^{(i_2)}(X_{[s,1]}) + \mathcal{S}^{(i_1 i_2)}(X_{[0,s]}). \end{aligned}$$

この式が示すのは，経路 $X_{[0,s]}$ と $X_{[s,1]}$ とを繋げたときの反復積分の計算規則である．

1 階の反復積分の計算に関しては，上記の第 2 項を考えなくていいので，

$$(3.9) \quad \mathcal{S}^{(i_1)}(X_{[0,1]}) = \mathcal{S}^{(i_1)}(X_{[0,s]}) + \mathcal{S}^{(i_1)}(X_{[s,1]}).$$

このような計算規則は，容易に高階の反復積分に拡張できる：

$$(3.10) \quad \mathcal{S}^{(i_1 \cdots i_n)}(X_{[0,1]}) = \sum_{k=0}^n \mathcal{S}^{(i_1 \cdots i_k)}(X_{[0,s]}) \mathcal{S}^{(i_{k+1} \cdots i_n)}(X_{[s,1]}).$$

ここで，右辺の総和のうち $k=0$ の項においては，添字 $(i_1 \cdots i_k)$ を空集合 $()$ とみなし，0 次の反復積分を用いて $\mathcal{S}^{()}(X_{[0,s]}) \mathcal{S}^{(i_1 \cdots i_n)}(X_{[s,1]}) = \mathcal{S}^{(i_1 \cdots i_n)}(X_{[s,1]})$ と解釈する．同様に， $k=n$ の項においては，添字 $(i_{k+1} \cdots i_n)$ を空集合とみなす．これら反復積分の計算規則は，付録 A の式 (A.7) のテンソル積と整合的であることがわかる．すなわち，経路 $X_{[0,s]}$ と $X_{[s,1]}$ とを繋げた経路を $X_{[0,s]} * X_{[s,1]}$ と書くと，

$$(3.11) \quad \mathcal{S}(X_{[0,1]}) = \mathcal{S}(X_{[0,s]} * X_{[s,1]}) = \mathcal{S}(X_{[0,s]}) \otimes \mathcal{S}(X_{[s,1]})$$

という式が成り立つ．これが Chen の恒等式であり，経路を繋げるという操作 $(*)$ とシグネチャのテンソル積 (\otimes) の間の関係(準同型)を表している．

さらに，シグネチャが経路を忠実に表現していることを示す次の事実がある (Hambly and Lyons, 2010)．2 つの経路 X, Y は，同じ経路を往復で辿るような枝状の部分(樹状経路)の違いを除いて等しいとき，樹状同値であるといい， $X \sim Y$ と書く．有界変動を持つ 2 つの経路は，樹状同値であるとき，またそのときに限り，(無限段の)シグネチャが等しい．すなわち，

$$(3.12) \quad X \sim Y \iff \mathcal{S}(X) = \mathcal{S}(Y).$$

3.3 シグネチャの成分どうしの積

経路 X を固定し，そのシグネチャの成分(反復積分)の間に成り立つ関係式を導出する． d 次元経路 X のシグネチャの第 (i_1, i_2) 成分は，

$$(3.13) \quad \mathcal{S}^{(i_1 i_2)}(X) = \int_{0 < t_1 < t_2 < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)}$$

であるが、これと経路のシグネチャの第 (i_3, i_4) 成分との(実数どうしの)積は、

$$(3.14) \quad \mathcal{S}^{(i_1 i_2)}(X) \mathcal{S}^{(i_3 i_4)}(X) = \left(\int_{0 < t_1 < t_2 < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)} \right) \left(\int_{0 < t_3 < t_4 < 1} dX_{t_3}^{(i_3)} dX_{t_4}^{(i_4)} \right)$$

であるが、重積分の形で書くと、

$$(3.15) \quad \mathcal{S}^{(i_1 i_2)}(X) \mathcal{S}^{(i_3 i_4)}(X) = \int_{0 < t_1 < t_2 < t_3 < t_4 < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)} dX_{t_3}^{(i_3)} dX_{t_4}^{(i_4)} + \\ \cdots + \int_{0 < t_3 < t_4 < t_1 < t_2 < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)} dX_{t_3}^{(i_3)} dX_{t_4}^{(i_4)}.$$

ここで、積分範囲は $t_1 < t_2$ および $t_3 < t_4$ の順序を保ちつつ、 t_1, t_2, t_3, t_4 を並べ替えるすべての順列に亘る。このような順列のとり方をシャッフル積といい、この場合は、

$$(3.16) \quad 12 \omega 34 = \{1234, 1324, 1342, 3124, 3142, 3412\}$$

となる。これを用いて積を書くと、

$$(3.17) \quad \mathcal{S}^{(i_1 i_2)}(X) \mathcal{S}^{(i_3 i_4)}(X) = \sum_{\sigma \in 12\omega 34} \int_{0 < t_{\sigma(1)} < t_{\sigma(2)} < t_{\sigma(3)} < t_{\sigma(4)} < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)} dX_{t_3}^{(i_3)} dX_{t_4}^{(i_4)} \\ = \sum_{\sigma \in 12\omega 34} \int_{0 < t_1 < t_2 < t_3 < t_4 < 1} dX_{t_{\sigma^{-1}(1)}}^{(i_1)} dX_{t_{\sigma^{-1}(2)}}^{(i_2)} dX_{t_{\sigma^{-1}(3)}}^{(i_3)} dX_{t_{\sigma^{-1}(4)}}^{(i_4)} \\ = \sum_{\sigma \in 12\omega 34} \int_{0 < t_1 < t_2 < t_3 < t_4 < 1} dX_{t_1}^{(i_{\sigma(1)})} dX_{t_2}^{(i_{\sigma(2)})} dX_{t_3}^{(i_{\sigma(3)})} dX_{t_4}^{(i_{\sigma(4)})} \\ = \sum_{\sigma \in 12\omega 34} \mathcal{S}^{(i_{\sigma(1)} i_{\sigma(2)} i_{\sigma(3)} i_{\sigma(4)})}(X).$$

最後の式は、 $\mathcal{S}^{(i_1 i_2 \omega i_3 i_4)}(X)$ と略記される。すなわち、

$$(3.18) \quad \mathcal{S}^{(i_1 i_2)}(X) \mathcal{S}^{(i_3 i_4)}(X) = \mathcal{S}^{(i_1 i_2 \omega i_3 i_4)}(X).$$

式(3.18)は、任意の多重添字 I, J に拡張できて、

$$(3.19) \quad \mathcal{S}^{(I)}(X) \mathcal{S}^{(J)}(X) = \mathcal{S}^{(I \omega J)}(X).$$

つまり、2つの反復積分の積は、より高次の反復積分の和で書き表せることがわかる。

さらに、経路 X に対する反復積分の線形結合 $f(X) = \sum_I v_I \mathcal{S}^{(I)}(X)$ と $g(X) = \sum_J w_J \mathcal{S}^{(J)}(X)$ との積は、式(3.19)より、

$$(3.20) \quad f(X)g(X) = \sum_{I, J} v_I w_J \mathcal{S}^{(I \omega J)}(X)$$

となるから、やはり反復積分の線形結合になっている。すなわち、反復積分の線形結合は積に関して閉じており、このことが以下の近似定理につながる。

3.4 経路の関数に対する近似定理

有界変動を持つ経路の集合上で定義された連続関数は、常に反復積分の線形結合で一様に近

似できる。このことを、経路の関数に対する普遍近似定理として以下に述べる。テンソル代数 $T^r(\mathbb{R}^d)^*$ や演算 $\langle \bullet, \bullet \rangle$ の定義は、付録 A の式 (A.5), (A.14) を参照のこと。また、経路は樹状同値類として解釈する (式 (3.12) の上の説明参照)。

定理 1 (Litterer and Oberhauser, 2011; Levin et al., 2013; Kiraly and Oberhauser, 2019). 有界変動を持つ経路の集合 $BV([0, 1], \mathbb{R}^d)$ のコンパクト部分集合 K 上の連続関数 $f \in C(K, \mathbb{R})$ と $\epsilon > 0$ に対して、ある 0 以上の整数 r と $w \in T^r(\mathbb{R}^d)^*$ があって、

$$(3.21) \quad \sup_{X \in K} |f(X) - \langle w, \mathcal{S}(X) \rangle| < \epsilon$$

とすることができる。

証明. K に属する経路にシグネチャの線形結合を割り当てる関数の集合

$$(3.22) \quad A = \{f : K \ni X \mapsto \langle w, \mathcal{S}(X) \rangle \in \mathbb{R} \mid \exists r \geq 0, w \in T^r(\mathbb{R}^d)^*\}$$

は、 K の各点を分離する多元環となっている。すなわち、以下の性質を持つ。

- (1) r 段シグネチャへの変換 $K \ni X \mapsto S_r(X)$ は連続関数なので (Prop. 7.15 of Friz and Victoir, 2010), $A \subset C(K, \mathbb{R})$.
- (2) 関数の和とスカラー倍に関して閉じている: $f, g \in A, \lambda, \mu \in \mathbb{R} \implies \lambda f + \mu g \in A$.
- (3) シャッフ積の性質 (3.20) により、 A は関数の積に関して閉じている: $f, g \in A \implies fg \in A$.
- (4) A は定数関数 1 を含む。
- (5) シグネチャの一意性 (3.12) より、 A は K の点を分離する。実際、 $X \approx Y$ ならばある多重添字 I に対するシグネチャの成分が異なる。このとき、関数 $X \mapsto S^{(I)}(X)$ は A に属し X と Y とを分離する。

従って、ストーン=ワイエルシュトラスの定理 (Stone, 1937) より、 A は $C(K, \mathbb{R})$ 内で稠密である: $\overline{A} = C(K, \mathbb{R})$. \square

定理 1 は、経路の連続関数が $f(X) \approx \sum_I w_I S^{(I)}(X)$ というように多重添字に亘る反復積分の線形結合によって任意の精度で近似できることを示しているので、シグネチャの各項 $\{S^{(I)}(X)\}_{I \in (\text{multiindex})}$ が基底関数の役割を果たしていることがわかる。これは、2.1 項で述べた多項式近似において、単項式 $\{1, x, x^2, \dots\}$ が 1 変数関数に対して果たす役割と同等である。

4. シグネチャを用いた機械学習

シグネチャを機械学習に応用する方法について述べ、実データへの適用例を示す。

4.1 シグネチャの計算

経路 $X : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^d$ の定義域 $[0, 1]$ の分割 $0 = t_0, t_1, \dots, t_m = 1$ を採ると、折れ線 (区分的に線形な経路) は、各区分において

$$(4.1) \quad (X_j)_t = X_{t_{j-1}} + \frac{t - t_{j-1}}{t_j - t_{j-1}} (X_{t_j} - X_{t_{j-1}}), \quad t \in [t_{j-1}, t_j]$$

と定義される。シグネチャを計算するにあたっては、折れ線に対するシグネチャを考えるだけで充分であることが、Chow-Rashevskii の定理 (Theorem 7.28 of Friz and Victoir, 2010) により保証されている。また、実際のな面でも、系列データは観測点での値を線形に結んだ折れ線と

みなすことができることが多い。

折れ線に対する n 段シグネチャは、次のように計算することができる。ベクトル $v = (v^{(1)}, \dots, v^{(d)}) \in \mathbb{R}^d$ に対して、線分 $X : [0, 1] \ni t \mapsto vt \in \mathbb{R}^d$ を考える。 n 次の反復積分を式(3.3)に従って計算すると、

$$(4.2) \quad \mathcal{S}^{(i_1 \dots i_n)}(X) = \frac{1}{n!} v^{(i_1)} v^{(i_2)} \dots v^{(i_n)}.$$

そして、 m 個の線分 X_1, \dots, X_m をつなげた折れ線 $X_1 * \dots * X_m$ に対する反復積分は、Chen の恒等式(3.11)より、 $\mu = 2, \dots, m$ に対して

$$(4.3) \quad \mathcal{S}_n(X_1 * \dots * X_\mu) = \mathcal{S}_n(X_1 * \dots * X_{\mu-1}) \otimes \mathcal{S}_n(X_\mu)$$

と順次計算することができる。なお、 n 次の反復積分の計算にはそれより低次の反復積分の情報を用いるので、各 μ において、 $1, \dots, n$ 次の反復積分に対して(3.10)を順番に計算していく。シグネチャの計算を行うための Python ライブラリとして、 `esig` (Kormilitzin, 2017)、 `iisignature` (Reizenstein and Graham, 2020) などがある。

4.2 打ち切り誤差

シグネチャの段数を打ち切った時の非可換テイラー展開(2.2項)の近似精度を調べる。

まず、 k 次の反復積分のノルム(付録Aの式(A.10))は以下を満たす (Prop. 2.2 of Lyons et al., 2007)。 ℓ を経路 $X : [0, t] \rightarrow \mathbb{R}^d$ の長さとして、

$$(4.4) \quad \left| \int_{0 < u_1 < \dots < u_k < t} dX_{u_1} \otimes \dots \otimes dX_{u_k} \right|_{\otimes k} = \left| \int_{0 < u_1 < \dots < u_k < t} \dot{X}_{u_1} \otimes \dots \otimes \dot{X}_{u_k} du_1 \dots du_k \right|_{\otimes k} \\ \leq \int_{0 < u_1 < \dots < u_k < t} |\dot{X}_{u_1}| \dots |\dot{X}_{u_k}| du_1 \dots du_k \\ = \int_{0 < u_1 < \dots < u_k < t} v^k du_1 \dots du_k \\ = \frac{\ell^k}{k!}.$$

2行目において、付録Aの式(A.11)を用いた。また、3行目において、経路 X はほとんど至るところ微分可能で一定速度 $v = \ell/t$ を持つとした。これは時間パラメータの付け替えにより常に可能である (Prop. 2.2 of Lyons et al., 2007)。

評価値 $y \in \mathbb{R}$ がある滑らかな関数 F を用いて $y = F(Y_t)$ と表され、さらに $Y : [0, t] \rightarrow \mathbb{R}^e$ が X に駆動される微分方程式(2.3)を満たす場合には、2.2項で述べたように、形式的には y をテイラー展開(2.7)で表すことができる。このとき、 n 項までのテイラー展開の剰余は式(2.8)で与えられるが、この大きさを以下に評価する。 \mathbb{R}^d から \mathbb{R}^e への線形変換(行列)の空間を $L(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^e)$ と書くことにし、滑らかな関数 $F : \mathbb{R}^e \rightarrow \mathbb{R}$ と滑らかな変換場

$$V : \mathbb{R}^e \rightarrow L(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^e), \quad y \mapsto \begin{bmatrix} V_1^{(1)}(y) & \dots & V_d^{(1)}(y) \\ \vdots & & \vdots \\ V_1^{(e)}(y) & \dots & V_d^{(e)}(y) \end{bmatrix}$$

に対して、演算子 $\nabla_V^n F : \mathbb{R}^e \rightarrow L((\mathbb{R}^d)^{\otimes n}, \mathbb{R})$ を次のように帰納的に定義する。

$$(4.5) \quad \nabla_V^0 F = F, \quad \nabla_V^{\circ(k+1)} F = \sum_{j=1}^e V^{(j)} \partial_j (\nabla_V^{\circ k} F).$$

また、演算子のノルムを次のように定義する.

$$(4.6) \quad \|\nabla_V^{\circ n} F\|_\infty = \sup_{y \in \mathbb{R}^e} |\nabla_V^{\circ n} F(y)|, \quad |\nabla_V^{\circ n} F(y)| = \sup_{x \in (\mathbb{R}^d)^{\otimes n}} \frac{|\nabla_V^{\circ n} F(y)x|}{|x|_{\otimes n}}.$$

このとき、剰余項(2.8)に対して次の評価が成り立つ (Boedihardjo et al., 2015 の式(1.5)参照).

$$(4.7) \quad \begin{aligned} |R_{n+1}(t)| &= \left| \int_{0 < u_1 < \dots < u_n < t} (\nabla_V^{\circ n} F(Y_{u_1}) - \nabla_V^{\circ n} F(Y_0)) dX_{u_1} \otimes \dots \otimes dX_{u_n} \right| \\ &= \left| \int_{0 < u_0 < \dots < u_n < t} \nabla_V^{\circ(n+1)} F(Y_{u_0}) \dot{X}_{u_0} \otimes \dots \otimes \dot{X}_{u_n} du_0 \dots du_n \right| \\ &\leq \int_{0 < u_0 < \dots < u_n < t} |\nabla_V^{\circ(n+1)} F(Y_{u_0}) \dot{X}_{u_0} \otimes \dots \otimes \dot{X}_{u_n}| du_0 \dots du_n \\ &\leq \int_{0 < u_0 < \dots < u_n < t} |\nabla_V^{\circ(n+1)} F(Y_{u_0})| v^{n+1} du_0 \dots du_n \\ &\leq \|\nabla_V^{\circ(n+1)} F\|_\infty v^{n+1} \int_{0 < u_0 < \dots < u_n < t} du_0 \dots du_n \\ &= \frac{\ell^{n+1}}{(n+1)!} \|\nabla_V^{\circ(n+1)} F\|_\infty. \end{aligned}$$

4行目において、式(4.4)と同様に経路 X はほとんど至るところ微分可能で一定速度 $v = \ell/t$ を持つとした.

まとめると、滑らかなベクトル場の集合 V と滑らかな関数 F が $\|\nabla_V^{\circ n} F\|_\infty = o(n!/\ell^n)$ を満たす時、テイラー展開は収束し、 n 項までの展開の誤差は (4.7) で抑えられる.

4.3 線型回帰

3.4項で述べたように、シグネチャを用いて経路に対する非線形関数を近似することができる. このことを利用して、実際の系列データに対して機械学習を適用することを考える. 普遍近似定理によれば、 d 次元経路 X の集合 K に対して定義される実数値連続関数 f は、十分大きな段数 r のシグネチャを線型変換したものと実際上みなしてよい. 従って、実データ $y \in \mathbb{R}$ は、これに独立同分布に従うノイズを加えた以下のシステムから生成されているとする:

$$(4.8) \quad \begin{aligned} y &= \langle w_{\text{true}}, \mathcal{S}_r(X) \rangle + \zeta, \\ \mathbf{E}[\zeta|X] &= 0, \quad \mathbf{E}[\zeta^2|X] = \sigma^2, \quad w_{\text{true}} \in T^r(\mathbb{R}^d)^*. \end{aligned}$$

ここで、 $\mathbf{E}[\zeta^2|X] = \sigma^2$ は重回帰式の残差が有限の分散を持つことを表している. 一方、このシステムに対するモデルは、段数を $n < r$ に減らし、ノイズレベルを $\Sigma \geq \sigma$ に上げて、

$$(4.9) \quad \begin{aligned} y &= \langle w, \mathcal{S}_n(X) \rangle + \xi, \\ \mathbf{E}[\xi|X] &= 0, \quad \mathbf{E}[\xi^2|X] = \Sigma^2, \quad w \in T^n(\mathbb{R}^d)^* \end{aligned}$$

とする. ここで、重み w を列ベクトル $w \in \mathbb{R}^{M_n \times 1}$, $M_n = (d^{n+1} - 1)/(d - 1)$ とみなす. また、訓練データセットとして、系列データ X_i のシグネチャと評価値 y_i との組が

$$(4.10) \quad \mathcal{D} = \{(\mathcal{S}_n(X_i), y_i) \mid i = 1, \dots, N\},$$

と与えられているとして、計画行列 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times M_n}$ と列ベクトル $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{N \times 1}$ の成分を次のように定義する.

$$(4.11) \quad (\mathbf{X})_{ik} = S_r^{(k)}(X_i), \quad (\mathbf{y})_i = y_i, \quad 1 \leq i \leq N, 1 \leq k \leq M_n.$$

ここでの付番 (k) は、多重添字の通し番号とする．ガウス=マルコフの定理 (e.g., Plackett, 1949) より、このデータ \mathcal{D} のもとで最適な重みは、コスト関数：

$$(4.12) \quad J(\mathbf{w}) = (\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{y})^T (\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{y})$$

を最小化することによって得られる．特に、 $N > M_n$ で、列ベクトル $x^{(1)}, \dots, x^{(M_n)}$ が線型独立のとき、この訓練データセット \mathcal{D} に基づく最適な重み $\mathbf{w}_{\mathcal{D}}$ は、

$$(4.13) \quad \mathbf{w}_{\mathcal{D}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

となるが⁸、この重みを用いた \mathbf{y} の予測値は、

$$(4.14) \quad \mathbf{X}\mathbf{w}_{\mathcal{D}} = \mathbf{P}\mathbf{y}, \quad \mathbf{P} := \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T$$

と書ける．ここで、 $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ は射影行列または影響行列と呼ばれ、

$$(4.15) \quad \mathbf{P}^2 = \mathbf{P}, \quad \mathbf{P}^T = \mathbf{P}, \quad \text{tr}(\mathbf{P}) = M_n$$

などの性質を持つ (e.g., Cardinali et al., 2004)．ここで、 tr は対角成分の和．

システム (4.8) が生成したデータ \mathbf{y} をモデル (4.9) で予測する際の二乗誤差は、ノイズを変化させたときの期待値を \mathbf{E}_{ζ} 、観測データセットを変化させたときの期待値を $\mathbf{E}_{\mathcal{D}}$ 、系列データに亘る期待値を \mathbf{E}_X として、

$$(4.16) \quad \begin{aligned} & \mathbf{E}_{\zeta, \mathcal{D}, X} [(y - \langle \mathbf{w}_{\mathcal{D}}, \mathcal{S}_n(X) \rangle)^2] \\ &= \mathbf{E}_{\zeta} [(y - \langle \mathbf{w}_{\text{true}}, \mathcal{S}_r(X) \rangle)^2] + \mathbf{E}_X [(\langle \mathbf{w}_{\text{true}}, \mathcal{S}_r(X) \rangle - \langle \bar{\mathbf{w}}, \mathcal{S}_n(X) \rangle)^2] \\ & \quad + \mathbf{E}_{\mathcal{D}, X} [\langle \mathbf{w}_{\mathcal{D}} - \bar{\mathbf{w}}, \mathcal{S}_n(X) \rangle^2] \\ & \leq \mathbf{E}_{\zeta} [\zeta^2] + \mathbf{E}_X [\langle \pi_{>n}(\mathbf{w}_{\text{true}}), \mathcal{S}_r(X) \rangle^2] + \mathbf{E}_{\mathcal{D}} \left[\frac{1}{N} \Xi^T \mathbf{P} \Xi \right] \\ & \leq \sigma^2 + \left(\frac{\ell^{n+1}}{(n+1)!} \|\nabla_V^{\circ(n+1)} F\|_{\infty} \right)^2 + \frac{M_n}{N} \Sigma^2 \end{aligned}$$

を満たす．ここで、 $\bar{\mathbf{w}} = \mathbf{E}_{\mathcal{D}}[\mathbf{w}_{\mathcal{D}}]$ 、 Ξ は平均 0 で分散 Σ^2 の独立同分布確率変数 N 個からなる列ベクトル、 ℓ は K 内の経路の長さの上限．なお、右辺各項の評価においては、式 (4.8)、(4.7)、および (4.15) をそれぞれ用いた．右辺の各項は、順に雑音 (ノイズ)、偏り (バイアス)、分散 (バリエーション) と呼ばれる (e.g., Bishop, 2006; Hastie et al., 2009; Mehta et al., 2019)．

サンプル数 N が少ないときにシグネチャの段数 n を増やすと、 Σ はやや減るものの M_n が大きく増え、分散が大きくなる場合がある (過剰適合)．一方、 n を減らすと偏りが大きくなる (過少適合)．このようなバランスを考慮して、2乗誤差を小さくする n を決める必要がある．これが、この問題に対する偏りと分散のトレードオフである．過剰適合を回避するには、シグネチャの段数を減らす他にも、後述のように、コスト関数 (4.12) に L_1 罰則項をつけることによって重要度の低い重み成分を除外する方法がある (Tibshirani, 1996)．

4.4 実データへの適用例

全球海洋観測プロファイル Argo (Gould et al., 2004) の品質管理に適用した例が、Sugiura and Hosoda (2020) に示されている．

Argo フロートは、約 2000 m の海中から海面まで浮上してゆき、その間に圧力 (P)、塩分 (S)、水温 (T) を観測する．得られた観測プロファイルは、 (P, S, T) 座標を持つ \mathbb{R}^3 内の経路とみな

すことができる．ここでは，機械学習の精度を向上させるため，遅れ座標を導入し Lead-lag 変換 (e.g., Chevrete and Kormilitzin, 2016; Fermanian, 2021) という処理を施して， \mathbb{R}^6 内の経路とみなす ($d=6$)．各経路 X には，評価値 $y=0$ または 1 が付与されているものとする． $y=1$ は品質管理を合格したという意味であり， $y=0$ は不合格という意味である．経路は， $n=6$ 段のシグネチャに変換してから用いる．データセットの任意の 4 割を訓練データセットとして，残りの 6 割を検証データセットとする．そして回帰における重みを訓練データセットから計算し，その重みを使って検証データセットに属するプロフィール X に対する y を予測できるかどうかを調べる．

まず，訓練データセット $\{(S_n(X_i), y_i) | i=1, \dots, N\}$ に対して，式(4.12)に L_1 罰則項を加えた次のコスト関数を最小化する重み w_* を求める．

$$(4.17) \quad J(w) = \sum_{i=1}^N ((w, S_n(X_i)) - y_i)^2 + \alpha \|w\|_1.$$

ここで， $\|\bullet\|_1$ は多重添字に亘る絶対値の和を表す．

次に，検証データ X に対する予測値 \tilde{y} は，次式で求められる．

$$(4.18) \quad \tilde{y} = (w_*, S_n(X)).$$

なお，式(4.17)内のハイパーパラメータ $\alpha > 0$ は，検証データを用いた交差検証の結果をもとに調整する．これは，式(4.16)の誤差を小さくするような w の自由度を探していることに相当する．実際に採用されたのは，サンプル数 $N = 3.2 \times 10^4$ に対して自由度 6.7×10^3 である．ここにおける自由度は，全部で $(6^{6+1} - 1)/(6 - 1) = 55987$ 項あるシグネチャの成分に対する重みのうち，零でないものの総数を指す．

Argo プロファイルと対応するシグネチャの例を図 2 に示す．また，図 3 は訓練データ(左)と検証データ(右)に対する予測結果をヒストグラムで表したものである．少なくとも，しきい値 0.5 よりも低い推定値のデータに，合格プロフィールが混入することはほとんどないと言える．一方，同じしきい値で不合格プロフィールの数割は検知することができることもわかる．論文内では，シグネチャ法を用いた方が対照ケースに比して成績が良いことが示されている．

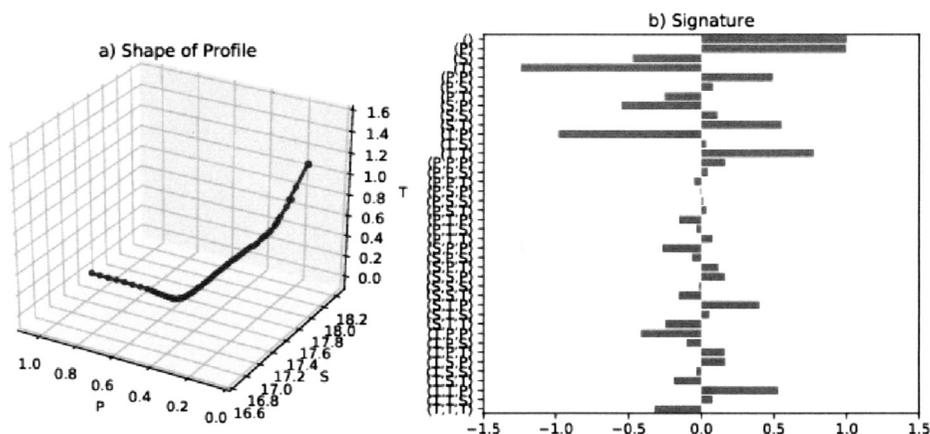


図 2. Argo プロファイル(a)とそのシグネチャ(b)．圧力(P)・塩分(S)・水温(T)を規格化して，3次元空間上にプロフィール X を表示．シグネチャは，例えば多重添字 (PTS) に対して $S^{(PTS)}(X)$ の値を表示．

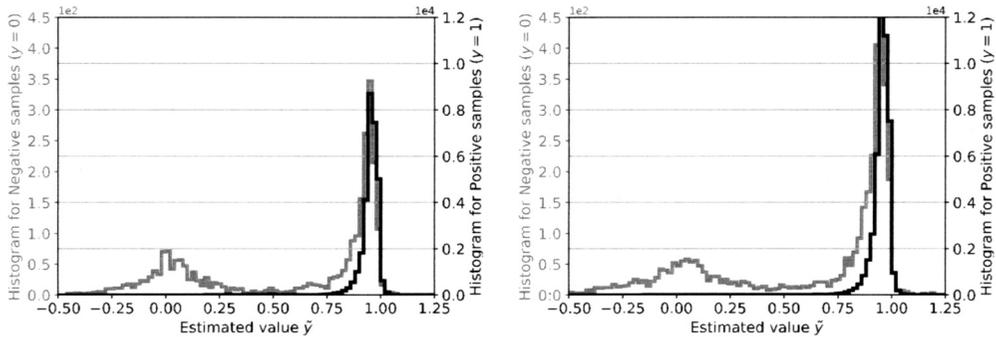


図 3. 訓練データ(左)と検証データ(右)に対する予測値(横軸)のビン毎の度数(縦軸)。黒は $y = 1$ 、灰色は $y = 0$ のデータに対する予測値の度数分布を表し、前者の度数目盛りを右軸に、後者を左軸に示す。

5. まとめ

シグネチャは経路の連続関数の空間の基底関数であり、系列データとその評価値との間の非線形な関係を表すのに極めて有効である。このことを使って、観測された系列データに対する機械学習を行うことができる。典型的な適用例として、従来の多項式回帰をシグネチャを基底関数とする回帰に置き換えて、系列データに対する教師あり学習を行うことができる。この手順を海洋観測プロフィールとその品質管理フラグに適用した例を示した。

シグネチャ法に関しては、この他にもいろいろな応用の可能性が考えられる。

- 一般に時系列解析は、多次元の経路を読み取ることに帰着するので、時系列の断片を経路と見てシグネチャに変換することで、同様の回帰を行うことができる。特に、将来における何らかの値を経路に対する評価値とみなせば、将来予測が可能である (e.g., Sugiura and Kouketsu, 2021)。この手法においては、非線形状態空間モデルを経路自体が持っている非線形性(シグネチャ)と線形状態空間モデル(重み)とに分離するため、回帰が極めて簡単になる。
- また、データ同化においても、観測されたプロフィールとモデル内のプロフィールを比較する必要が生じるが、そのような場合に両者のシグネチャの差を縮めるというようなコスト関数を設定することにより、品質の向上が期待できる。なぜなら、経路上の各点が近いという線形の問題設定から、経路の性質が近いという非線形の問題設定へと自然に転換することができるからである。

謝 辞

貴重な指摘をいただいた査読者に感謝の意を表す。本研究は、JST, AIP 日独仏 AI 研究, JPMJCR20G5 の支援を受けたものである。

付 録

A. テンソル表記

以下のようにテンソルの概念 (e.g., 原, 2019) を導入すると、シグネチャをテンソル代数の元として表すことができる。

A.1 テンソル代数

実ベクトル $u, v \in \mathbb{R}^d$ に対して, テンソル積 $u \otimes v$ は, 双対ベクトル空間の元 f, g に対して,

$$(A.1) \quad (u \otimes v)(f, g) \mapsto \langle u, f \rangle \langle v, g \rangle \in \mathbb{R}$$

なる実数を与える双線形写像である. ここで, $\langle \bullet, \bullet \rangle$ は duality pairing である. 座標表示すると, $u = (u_1, \dots, u_d)$, $v = (v_1, \dots, v_d)$, $f = (f^1, \dots, f^d)$ に対して, $\langle u, f \rangle = \sum_i u_i f^i$ であり, $u \otimes v \in \mathbb{R}^{d \times d}$ はランク 1 行列 $(u_i v_j)_{i,j=1, \dots, d}$ を成分として持つ. また, テンソル積 \otimes の演算自体も双線形である. すなわち,

$$(A.2) \quad (au + bv) \otimes w = a(u \otimes w) + b(v \otimes w),$$

$$(A.3) \quad w \otimes (au + bv) = a(w \otimes u) + b(w \otimes v).$$

ここで, $u, v, w \in \mathbb{R}^d$, $a, b \in \mathbb{R}$. なお, テンソル積 $u \otimes v$ と $v \otimes u$ とは一般に等しくない(可換でない).

ベクトル空間 \mathbb{R}^d の基底を $\{e_1, \dots, e_d\}$ とし, テンソル積で n 個のベクトルのテンソル積の線形結合の全体 (n 階テンソルともいう) を $(\mathbb{R}^d)^{\otimes n}$ と書く. すなわち,

$$(A.4) \quad (\mathbb{R}^d)^{\otimes n} = \left\{ \sum_{i_1, \dots, i_n=1, \dots, d} g^{(i_1 \dots i_n)} e_{i_1} \otimes \dots \otimes e_{i_n} \mid g^{(i_1 \dots i_n)} \in \mathbb{R} \right\}$$

さらに, $k = 0, 1, \dots, n$ 階のテンソルの直和

$$(A.5) \quad T^n(\mathbb{R}^d) := \bigoplus_{k=0}^n (\mathbb{R}^d)^{\otimes k} = \left\{ \sum_{k=0}^n \sum_{i_1, \dots, i_k=1, \dots, d} g^{(i_1 \dots i_k)} e_{i_1} \otimes \dots \otimes e_{i_k} \mid g^{(i_1 \dots i_k)} \in \mathbb{R} \right\}$$

をテンソル代数という.

A.2 テンソル代数における積

テンソル代数の元には和と非可換な乗算が定義されるので, 非可換多項式からなる代数とみることができる. すなわち, ベクトルに対するテンソル積を自然に拡張して, 積を

$$(A.6) \quad \begin{aligned} & (g^{(i_1 \dots i_k)} e_{i_1} \otimes \dots \otimes e_{i_k}) \otimes (h^{(j_1 \dots j_l)} e_{j_1} \otimes \dots \otimes e_{j_l}) \\ &= g^{(i_1 \dots i_k)} h^{(j_1 \dots j_l)} e_{i_1} \otimes \dots \otimes e_{i_k} \otimes e_{j_1} \otimes \dots \otimes e_{j_l} \end{aligned}$$

と定義する. k 階テンソルと l 階テンソルとのテンソル積は $k+l$ 階テンソルになる. このテンソル積はテンソル代数の元に双線型に拡張される. 例えば, $g, h \in T^2(\mathbb{R}^d)$ のテンソル積は, $T^2(\mathbb{R}^d)$ 内では以下のように算定される.

$$(A.7) \quad \begin{aligned} & \left(g^{(0)} + \sum_{i_1=1, \dots, d} g^{(i_1)} e_{i_1} + \sum_{i_1, i_2=1, \dots, d} g^{(i_1 i_2)} e_{i_1} \otimes e_{i_2} \right) \\ & \otimes \left(h^{(0)} + \sum_{i_1=1, \dots, d} h^{(i_1)} e_{i_1} + \sum_{i_1, i_2=1, \dots, d} h^{(i_1 i_2)} e_{i_1} \otimes e_{i_2} \right) \\ &= g^{(0)} h^{(0)} + \sum_{i_1=1, \dots, d} (g^{(0)} h^{(i_1)} + g^{(i_1)} h^{(0)}) e_{i_1} \\ & \quad + \sum_{i_1, i_2=1, \dots, d} (g^{(0)} h^{(i_1 i_2)} + g^{(i_1)} h^{(i_2)} + g^{(i_1 i_2)} h^{(0)}) e_{i_1} \otimes e_{i_2}. \end{aligned}$$

3階以上のテンソルは切り捨てられていることに注意.

A.3 シグネチャのテンソル表記

以上の定義より, 反復積分を次のように簡潔に表記できる.

$$\begin{aligned}
 (A.8) \quad \sum_{i_1 \cdots i_n} \mathcal{S}^{(i_1 \cdots i_n)}(X) e_{i_1 \cdots i_n} &= \sum_{i_1 \cdots i_n} \int_0^1 \int_0^{t_1} \cdots \int_0^{t_{n-1}} dX_{t_1}^{(i_1)} \cdots dX_{t_{n-1}}^{(i_{n-1})} dX_{t_n}^{(i_n)} e_{i_1 \cdots i_{n-1} i_n} \\
 &= \sum_{i_1 \cdots i_n} \int_0^1 \int_0^{t_1} \cdots \int_0^{t_{n-1}} dX_{t_1}^{(i_1)} e_{i_1} \cdots dX_{t_{n-1}}^{(i_{n-1})} e_{i_{n-1}} dX_{t_n}^{(i_n)} e_{i_n} \\
 &= \int_{0 < t_1 < \cdots < t_n < 1} dX_{t_1} \otimes \cdots \otimes dX_{t_n}.
 \end{aligned}$$

ここで, $(\mathbb{R}^d)^{\otimes n}$ の基底を簡単のため $e_{i_1 \cdots i_n} := e_{i_1} \otimes \cdots \otimes e_{i_n}$ と書いた. シグネチャは反復積分の直和なので, 次のように書ける.

$$\begin{aligned}
 (A.9) \quad \mathcal{S}_n(X) &= \sum_{k=0}^n \sum_{i_1 \cdots i_k} \mathcal{S}^{(i_1 \cdots i_k)}(X) e_{i_1 \cdots i_k} \\
 &= \sum_{k=0}^n \int_{0 < t_1 < \cdots < t_k < 1} dX_{t_1} \otimes \cdots \otimes dX_{t_k} \in T^n(\mathbb{R}^d).
 \end{aligned}$$

A.4 テンソル代数のノルム

$g = \sum_{i_1, \dots, i_k=1, \dots, d} g^{(i_1 \cdots i_k)} e_{i_1} \otimes \cdots \otimes e_{i_k} \in (\mathbb{R}^d)^{\otimes k}$ に対して,

$$(A.10) \quad |g|_{\otimes k} = \sqrt{\sum_{i_1, \dots, i_k=1, \dots, d} (g^{(i_1 \cdots i_k)})^2}$$

とノルムを定義すると, $g \in (\mathbb{R}^d)^{\otimes k}$, $h \in (\mathbb{R}^d)^{\otimes l}$ に対して,

$$(A.11) \quad |g \otimes h|_{\otimes k+l} = |g|_{\otimes k} |h|_{\otimes l}$$

が成り立つ (Chapter 7 of Friz and Victoir, 2010). さらに, ノルム (A.10) をもとに, $g = g^0 + \cdots + g^n \in T^n(\mathbb{R}^d)$, $g^k \in (\mathbb{R}^d)^{\otimes k}$ のノルムを

$$(A.12) \quad \|g\| = \max_{k=0, \dots, n} |g^k|_{\otimes k}$$

と定義することができる (Chapter 7 of Friz and Victoir, 2010).

A.5 シグネチャの線形汎関数

$T^n(\mathbb{R}^d)$ の双対空間 $T^n(\mathbb{R}^d)^*$ の基底を $e^{i_1 \cdots i_k}$ と書き, シグネチャの線形汎関数

$$(A.13) \quad w = \sum_{k=0}^n \sum_{i_1 \cdots i_k} w_{i_1 \cdots i_k}(X) e^{i_1 \cdots i_k} \in T^n(\mathbb{R}^d)^*$$

をとる. これを, 演算規則 $\langle e_{i_1 i_2}, e^{j_1 j_2} \rangle = \delta_{i_1}^{j_1} \delta_{i_2}^{j_2}$ などに従って, シグネチャ (A.9) に双線形に作用させると,

$$(A.14) \quad \langle w, \mathcal{S}_n(X) \rangle = \sum_{k=0}^n \sum_{i_1 \cdots i_k} w_{i_1 \cdots i_k} \mathcal{S}^{(i_1 \cdots i_k)}(X) \in \mathbb{R}$$

というスカラーが得られる。これは経路の関数 $X \mapsto \langle w, \mathcal{S}_n(X) \rangle$ を定義している。

参 考 文 献

- Arribas, I. P., Goodwin, G. M., Geddes, J. R., Lyons, T. and Saunders, K. E. A. (2018). A signature-based machine learning model for distinguishing bipolar disorder and borderline personality disorder, *Translational Psychiatry*, **8**, 274, <http://dx.doi.org/10.1038/s41398-018-0334-0>.
- Baudoin, F. and Zhang, X. (2012). Taylor expansion for the solution of a stochastic differential equation driven by fractional Brownian motions, *Electronic Journal of Probability*, **17**, 1–21.
- Bishop, C. M. (2006). *Pattern Recognition and Machine Learning (Information Science and Statistics)*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg.
- Boedihardjo, H., Lyons, T. and Yang, D. (2015). Uniform factorial decay estimates for controlled differential equations, *Electronic Communications in Probability*, **20**(none), 1–11, <https://doi.org/10.1214/ECP.v20-4124>.
- Cardinali, C., Pezzulli, S. and Andersson, E. (2004). Influence-matrix diagnostic of a data assimilation system, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society: A Journal of the Atmospheric Sciences, Applied Meteorology and Physical Oceanography*, **130**(603), 2767–2786.
- Chevryev, I. and Kormilitzin, A. (2016). A primer on the signature method in machine learning, arXiv:1603.03788.
- Fermanian, A. (2021). Embedding and learning with signatures, *Computational Statistics and Data Analysis*, **157**, p. 107148, <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167947320302395>, <https://doi.org/10.1016/j.csda.2020.107148>.
- Friz, P. K. and Victoir, N. B. (2010). *Multidimensional Stochastic Processes as Rough Paths: Theory and Applications*, Cambridge Studies in Advanced Mathematics, Cambridge University Press, Cambridge, <http://dx.doi.org/10.1017/CBO9780511845079>.
- Google (2017). The quick, draw! dataset, <https://github.com/creativelab/quickdraw-dataset>, Data made available by Google, Inc. under the Creative Commons Attribution 4.0 International license.
- Gould, J., Roemmich, D., Wijffels, S., Freeland, H., Ignaszewsky, M., Jianping, X., Pouliquen, S., Desaubies, Y., Send, U., Radhakrishnan, K., Takeuchi, K., Kim, K., Danchenkov, M., Sutton, P., King, B., Owens, B. and Riser, S. (2004). Argo profiling floats bring new era of in situ ocean observations, *Eos, Transactions American Geophysical Union*, **85**(19), 185–191, <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2004EO190002>.
- Hambly, B. and Lyons, T. (2010). Uniqueness for the signature of a path of bounded variation and the reduced path group, *Annals of Mathematics*, **171**, 109–167.
- 原啓介 (2019). 『線形性・固有値・テンソル：線形代数応用への最短コース』, KS 理工学専門書, 講談社, 東京.
- Hastie, T., Tibshirani, R. and Friedman, J. (2009). *The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference and Prediction*, 2nd ed., Springer, Berlin, Heidelberg, <http://www-stat.stanford.edu/~tibs/ElemStatLearn/>.
- Kiraly, F. J. and Oberhauser, H. (2019). Kernels for sequentially ordered data, *Journal of Machine Learning Research*, **20**(31), 1–45, <http://jmlr.org/papers/v20/16-314.html>.
- Kormilitzin, A. (2017). the-signature-method-in-machine-learning, <https://github.com/kormilitzin/>.
- Levin, D., Lyons, T. and Ni, H. (2013). Learning from the past, predicting the statistics for the future, learning an evolving system, arXiv:1309.0260.
- Li, C., Zhang, X., Liao, L., Jin, L. and Yang, W. (2019). Skeleton-based gesture recognition using several fully connected layers with path signature features and temporal transformer module, *Proceedings of the Thirty-third AAAI Conference on Artificial Intelligence and Thirty-*

- first Innovative Applications of Artificial Intelligence Conference and Ninth AAAI Symposium on Educational Advances in Artificial Intelligence*, AAAI Press, Palo Alto, California, USA, <https://doi.org/10.1609/aaai.v33i01.33018585>.
- Liao, S., Lyons, T., Yang, W. and Ni, H. (2019). Learning stochastic differential equations using RNN with log signature features, arXiv:1908.08286.
- Litterer, C. and Oberhauser, H. (2011). On a Chen–Fließ approximation for diffusion functionals, *Monatshefte für Mathematik*, **175**, 577–593.
- Lyons, T., Ni, H. and Oberhauser, H. (2014). A feature set for streams and an application to high-frequency financial tick data, *Proceedings of the 2014 International Conference on Big Data Science and Computing*, Association for Computing Machinery, New York, USA, <https://doi.org/10.1145/2640087.2644157>.
- Lyons, T. J. (1998). Differential equations driven by rough signals, *Revista Matemática Iberoamericana*, **14**(2), 215–310.
- Lyons, T. J., Caruana, M. and Lévy, T. (2007). *Differential Equations Driven by Rough Paths*, Lecture Notes in Mathematics, **1908**, Springer, Berlin, Heidelberg.
- Malekzadeh, M., Clegg, R. G., Cavallaro, A. and Haddadi, H. (2018). Protecting sensory data against sensitive inferences, *Proceedings of the 1st Workshop on Privacy by Design in Distributed Systems*, 1–6.
- Mehta, P., Bukov, M., Wang, C.-H., Day, A. G., Richardson, C., Fisher, C. K. and Schwab, D. J. (2019). A high-bias, low-variance introduction to machine learning for physicists, *Physics Reports*, **810**, 1–124.
- Moore, P. J., Lyons, T. J. and Gallacher, J. (2019). Using path signatures to predict a diagnosis of Alzheimer’s disease, *PLOS ONE*, **14**(9), e0222212, <http://dx.doi.org/10.1371/journal.pone.0222212>.
- Morrill, J., Kormilitzin, A., Nevado-Holgado, A., Swaminathan, S., Howison, S. and Lyons, T. (2019). The Signature-based model for early detection of sepsis from electronic health records in the intensive care unit, *2019 Computing in Cardiology (CinC)*, 1–4, <http://dx.doi.org/10.23919/CinC49843.2019.9005805>.
- Plackett, R. L. (1949). A historical note on the method of least squares, *Biometrika*, **36**(3-4), 458–460, <https://doi.org/10.1093/biomet/36.3-4.458>.
- Reizenstein, J. F. and Graham, B. (2020). Algorithm 1004: The iisignature library: Efficient calculation of iterated-integral signatures and log signatures, *ACM Transactions on Mathematical Software*, **46**(1), <http://dx.doi.org/10.1145/3371237>.
- Salamon, J., Jacoby, C. and Bello, J. P. (2014). A dataset and taxonomy for urban sound research, *Proceedings of the 22nd ACM International Conference on Multimedia*, 1041–1044.
- Stone, M. H. (1937). Applications of the theory of Boolean rings to general topology, *Transactions of the American Mathematical Society*, **41**(3), 375–481.
- Sugiura, N. and Hosoda, S. (2020). Machine learning technique using the signature method for automated quality control of argo profiles, *Earth and Space Science*, **7**(9), p. e2019EA001019, <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2019EA001019>.
- Sugiura, N. and Kouketsu, S. (2021). Simple El Niño prediction scheme using the signature of climate time series, arXiv:2109.02013.
- Tibshirani, R. (1996). Regression shrinkage and selection via the Lasso, *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)*, **58**(1), 267–288, <http://www.jstor.org/stable/2346178>.
- Xie, Z., Sun, Z., Jin, L., Ni, H. and Lyons, T. (2018). Learning spatial-semantic context with fully convolutional recurrent network for online handwritten Chinese text recognition, *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, **40**(8), 1903–1917, <http://dx.doi.org/10.1109/TPAMI.2017.2732978>.

Introduction to the Signature Method

Nozomi Sugiura

Global Ocean Observation Research Center,
Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology

Sequential data observed in Earth Science can be regarded as paths in multidimensional space. Instead of seeing a path as a mere series of vectors, it is useful to convert it into a sequence of numbers called the signature of a path. The signature can faithfully describe the order of points and the nonlinearity between dimensions contained in a path. As a result, any nonlinear function defined on a set of paths can be approximated by a linear combination of terms in the signature of each path in it. Hence, when learning a set of sequential data with labels attached, linear regression can be applied to the signature-label pairs, yielding state-of-the-art results even when the labels are determined by a nonlinear function. Incorporating the signature methods into Machine Learning and Data Assimilation utilizing sequential data should allow us to extract information that has previously been overlooked.

「統計数理」投稿規程

1. 「統計数理」は、統計科学の深化と発展、そして統計科学を通じた社会への貢献を目指すものである。投稿原稿は、統計科学に関連した内容を持つもので、和文の原稿に限る。
2. 投稿原稿は次の6種とする。
 - a. 原著論文 (Paper)
統計科学の発展に貢献すると考えられる研究結果。
 - b. 総合報告 (Review Article)
特定の主題に関する一連の研究およびその周辺領域の発展を著者の見解に従って総括的、かつ体系的に報告したもの。
 - c. 研究ノート (Letter)
研究速報、新しい発想、提言、問題提起、事例報告など研究上、記録にとどめておく価値があると認められるものや、既発表の論文等に対するコメントで、研究上、記録にとどめておく価値があると認められるもの。
 - d. 研究詳解 (Research Review)
特定の研究領域における理論的あるいは応用的成果を、最近の結果や知見を加えてわかりやすく説明したもの。
 - e. 統計ソフトウェア (Statistical Software)
有用な計算法や解析法に関する短いプログラムおよびサブルーチンのリスト、利用手引き、実行例など。
 - f. 研究資料 (Research Archives)
歴史的なデータ、入手困難なデータや統計的手法の比較検討のために有用なデータ、あるいは、歴史的文献の翻訳や解説など。
いずれも原則として、未発表のものに限る。
3. 投稿された原稿は、編集委員会が選定・依頼した査読者の審査を経て、掲載の可否を決定する。
4. 投稿原稿は電子投稿査読システム <https://www.editorialmanager.com/toukei/> より投稿するものとする。原稿は pdf ファイルとし、必要なフォントはすべて埋め込み、原稿全体を一つのファイルにまとめることとする。論文が採択になった場合、著者は最終稿のソースファイルとハードコピーを提出するものとする。
5. 著作権
 - (1) 掲載される論文等の著作権はその採択をもって統計数理研究所に帰属するものとする。統計数理研究所は、紙媒体の「統計数理」のほか電子媒体などを通じて論文等を公表することができる。特別な事情がある場合は、著者と本編集委員会との間で協議の上措置する。
 - (2) 投稿原稿の中で引用する文章や図表の著作権に関する問題は、著者の責任において処理する。
 - (3) 著者が自分の論文等を複製、転載、翻訳、翻案等の形で利用するのは自由である。この場合、著者は掲載先に出典を明記する。
6. 原稿は次の執筆要項に従って作成する。

「統計数理」執筆要項

1. 原稿は A4 用紙に 1 行 36 字から 40 字で 1 行おき、1 頁あたり 22 行程度とする。原稿の長さは原則として表・図を含めて 30 頁相当以内とし、各ページにページ番号を付す。図表は別紙にまとめ、本文中には挿入箇所のみを指定する。L^AT_EX で原稿を作成する場合は、「統計数理」スタイルファイルの使用を推奨する。
<https://www.ism.ac.jp/editsec/toukei/>
2. 原稿は以下の順に書くものとする。

[第 1 頁] 標題, 著者名, 所属名, 和文要旨 (500 字程度, 文献の引用および数式は原則として避ける), 和文キーワード (6 語以内)。

[第 2 頁] 英語による標題, 著者名, 所属名, Abstract (450 ワード程度), Key words (6 words and phrases 以内)。Abstract は、問題の所在と得られた結果等がそれだけで理解できるようなものとする。

[第3頁以降]

- ① 本文：章、節の番号は、第1章にあたるものは、“1.”、第1章第1節にあたるものは、“1.1”というようにつける。また、式の番号は、章ごとに(2.1), (2.2)のようにし、式の左側に配置する。
 - ② 数式：数式は簡明さを心がけ、添字にさらに添字をつけるのはなるべく避ける。
 - ③ 参考文献：書き方は本要項第4項を参照。
 - ④ 表：一枚の用紙に一つの表を書く。表の番号は論文中に現れる順に従って、表1, 表2,... または、Table 1, Table 2,... のようにする。
 - ⑤ 図：一枚の用紙に一つの図を描く。図はそのまま写真製版できる鮮明なものを用意する。大きさは印刷出来上がりの1~2倍とし、トレースが必要な場合は原則として著者が行うものとする。図の番号は論文中に現れる順に従って、図1, 図2,... または、Fig. 1, Fig. 2,... のようにする。図は原則としてモノクロ印刷とするが、カラー印刷を必要とする場合は編集委員会に相談すること。
 - ⑥ 注：本文中の注釈は極力避ける。やむを得ず注釈をつける場合は脚注とせず、論文末尾に後注とする。後注は、順番に“1, 2,...”の番号を付け、本文中では上付きで示す。
3. 本文中での参考文献の引用は、著者名(出版年)とする。たとえば、Efron (1982), 清水・湯浅 (1984), Cox and Snell (1981), 坂元 他 (2004), Nakano et al. (2000).
4. 参考文献の書き方
- ① 雑誌の場合：

著者名(出版年). 標題, 雑誌名, 巻, ページ [始-終]. (雑誌名は省略しないものとする.)

【例】Chernoff, H. (1973). The use of faces to represent points in k -dimensional space graphically, *Journal of the American Statistical Association*, **68**, 361-368.
 - ② 叢書の中の一巻の場合：

著者名(出版年). 書名 (編集者名), 叢書名, 発行所名, 発行地名.

【例】Sakamoto, Y., Ishiguro, M. and Kitagawa, G. (1983). *Akaike Information Criterion Statistics, Mathematics and Its Applications*, Reidel, Dordrecht.
 - ③ 単行本等の場合：

著者名(出版年). 書名, 発行所名, 発行地名.

【例】Cressie, Noel (1993). *Statistics for Spatial Data*, Wiley, New York.
 - ④ 編集書の中の一部の場合：

著者名(出版年). 標題, 編集書名 (編集者名), 巻, ページ, 発行所名, 発行地名.

【例】Akaike, H. (1980). Likelihood and the Bayes procedure, *Bayesian Statistics* (eds. J. M. Bernardo, M. H. DeGroot, D. V. Lindley and A. F. M. Smith), 143-166, University Press, Valencia, Spain.
- なお、同じ著者によるものが同一年に複数個現れる場合には、(1980a), (1980b) などとして区別する。文献は、日本人も含め、著者名のアルファベット順に並べる。
5. 著者校正は原則として一回とする。その際、印刷上の誤り以外の字句や図版の訂正、挿入、削除等は原則として認めない。