

第6章 アンサンブル・カルマンフィルタ ~ データ同化との融合 ~¹

6.1 はじめに

現実の大気状態を完全に知ることは不可能である。これは、離散化による表現の限界、観測の不完全性（観測誤差およびカバレッジの限界）に起因する。現実の大気は連続流体と仮定されるが、実際にこれを表現する際、格子点（より正確には有限個の基底関数²）に離散化される。この際、各格子点で表現される大気の状態は、その近傍領域の代表として取り扱われるため、連続な大気の状態を完全に表現することは不可能である。仮に現実の大気状態が離散化された格子点値によって完全に表現されると仮定しても、測定誤差をはじめとする観測誤差により、観測した場所に限っても完全な大気状態の情報は得られない。その上、観測点の数は、全地球上の各高度をカバーする格子点の数に比べて非常に限られており、観測のない点での大気の状態は、観測から直接知ることはできない。このため、現実の大気状態の完全な情報は得られず、この不完全な情報から推定して得られる解析値には、常に誤差（解析誤差）が含まれる。

一方、数値予報モデルを含むカオス力学系は、初期値に含まれる小さな誤差に敏感であり、初期誤差は指数関数的に成長する。このため、例え小さな誤差でも、解析誤差は予報時間が進むにつれて大きく成長し、予報に大きな影響を与える。アンサンブル予報は、解析値のまわりにばらつかせた複数の初期値（初期アンサンブル）から始めた複数の予報を行うことで、解析誤差の時間発展を追跡し、予報誤差の情報を得ようとするものである。アンサンブル予報が、決定論的 (deterministic) 予報に対して確率論的 (probabilistic) 予報といわれる所以である。

理想的には、解析誤差を正確に反映した初期アンサンブルを用いることで、予報誤差はより正確に見積もられる。解析誤差は、予報の精度の影響を受けるばかりでなく、一般に精度のよい観測のある場所では小さいなど、観測点の分布や観測誤差の大きさといった観測の情報にも大きく依存する。しかし、Breeding 法や特異ベクトル (Singular Vector: SV) 法といった従来のアンサンブル摂動生成法では、通常モデルの動力学的束縛のみが考慮され、観測の情報は考慮されないため、解析誤差を反映したアンサンブル摂動は得られない。Wang and Bishop (2003) は、主に海陸の観測分布密度の違いを反映した時間平均的な解析誤差の重み (mask) をかけることで解析誤差を考慮した masked breeding の手法により、アンサンブル予報が改善することを示した。このことは、アンサンブル摂動生成における解

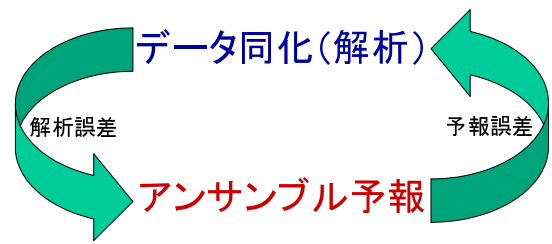


図 6.1.1 データ同化とアンサンブル予報の相補的関係を示した模式図。

析誤差の重要性を示唆するものである。しかし、時間変動する解析誤差の正確な情報は、現在の解析システムでは得ることができないため、解析誤差を正確に反映したアンサンブル摂動を得ることは現在のシステムでは不可能である。

一方、解析（データ同化）の観点から見ると、より精度の高い解析値を得るために、予報誤差の情報が重要な役割を果たす。データ同化とは、Bouttier and Courtier (1999) が彼らの優れたテキストの中で述べているように、時間発展モデルを利用し、時間方向に情報を伝えることで、過去の観測の情報を積み重ねていき、時間が経つにつれてより高精度の解析値を作り出していくプロセスである³。データ同化の実際のプロセスは、一般に予報値と観測値の重み付き平均であり、その重みは予報誤差と観測誤差から最適に決められる。最適な重みを用いることで、時間方向の情報の伝達を最適にし、過去の観測の情報の積み重ねが適切に行われる。観測誤差は、一般には観測固有のものと見なせ、データ同化システムには通常 *a priori* に与えられる。予報誤差については、アンサンブル予報を利用し、日々変動する大気の流れに応じたよりよい情報を得ることで、データ同化でより適切な重みを使うことができ、解析値の精度向上につなげることができる。以上のように、アンサンブル予報の摂動生成には解析の情報が有益であり、解析にはアンサンブル予報の情報が有益だという相補的な関係がある（図 6.1.1 を参照）。

Evensen (1994) により初めて提案されたアンサンブル・カルマンフィルタ (Ensemble Kalman Filter: EnKF) は、アンサンブル予報とデータ同化を融合した手法であり、解析誤差を反映したアンサンブル摂動を生成するとともに、それから得られるよりよい予報誤差を用いたデータ同化を行う。互いの相補的関係を活用したこのサイクルプロセスが、双方に与える好影響を時間方向に積み重ねていく。EnKF は、アンサンブル予報システムと解析システムという現在は独立した二つのシステムを融合することで、理想的な確率論的

¹ 三好建正

² 格子点による離散化は、格子点上だけで 1 となり他は全て 0 をとる基底関数による展開と同値である。

³ カオス力学系は初期値に含まれる誤差が発展し、過去を忘れていくため、時間方向に伝わる情報にも限界がある。

予報解析システムを構成するものである。本章では、未来のアンサンブル解析予報システムとして注目されている EnKF について解説する。まず、第 6.2 節で EnKF の概念的な解説を行い、全体像を俯瞰した上で、第 6.3 節で数式を用いてより厳密な解説を行う。その後、第 6.4 節で詳細な実装技術について述べ、現業利用の際は特に重要となるパラメータの動的推定法 (Miyoshi and Kalnay 2005a) や 4 次元化 (4D-EnKF, Hunt et al. 2004) といった最新の周辺技術も紹介する。第 6.5 節では、実際に EnKF を Lorenz の 40 変数モデル (Lorenz 1996) や低解像度の全球プリミティブ方程式モデルに適用した場合の結果を示す。最後に、第 6.6 節で、利点と問題点についてまとめ、今後の展望を述べる。

6.2 概念的解説

本節では、数式を用いずに概念的な解説を行う。詳細な解説は次節以降で行うが、本節で全体像を概説することが、後の理解の助けになると考える。

EnKF とは、アンサンブル予報の予報誤差の情報を用いたデータ同化と、データ同化による解析誤差の情報を的確に反映したアンサンブル摂動生成の 2 つの部分からなることは前節でも述べたとおりである。しかし実際は、アンサンブル予報の与える予報誤差の情報をデータ同化に活用しようというのがもともとの発想である。Evensen (1994) や Houtekamer and Mitchell (1998) で採用された初期の EnKF は、各アンサンブルメンバーに独立したデータ同化サイクルを適用し、このデータ同化の際にアンサンブル予報の誤差の情報を活用するというものだった。Hamill and Snyder (2000) による 3 次元変分法 (3D-Var) と EnKF のハイブリッド法は、3D-Var の背景誤差の情報にアンサンブル予報の誤差の情報を適度に混ぜ与えるというもので、すでにあるアンサンブル予報を活用しようという発想である。ここには、データ同化の結果を次のアンサンブル摂動生成にフィードバックするという発想はない。データ同化の結果を直接生かしたアンサンブル摂動生成を包含するようになったのは、Anderson (2001) や Bishop et al. (2001)、Whitaker and Hamill (2002) などによって平方根フィルタ (Square Root Filter: SRF) という手法が採用されて以降のことである。本稿では、現在主流となっている SRF に焦点を当てた解説を行う。

アンサンブル予報を活用したデータ同化を行う際の大きな問題は、予報誤差の情報が、計算不可能なほど大きな情報量を持つということである。ガウス分布は、平均値 (一次の統計モーメント) と共分散 (二次の統計モーメント) によって完全に表現される統計分布であるが、誤差がガウス分布であると仮定しても、変数の二乗の次元を持つ共分散行列の情報量が必要である。数値予報モデルの変数の次元が、小さく見積もって $\mathcal{O}(10^5)^4$ と

⁴ 例えば、 $100 \times 50 \times 10$ の格子点に 4 変数あるとすると、

しても、 $\mathcal{O}(10^{10})$ 個の成分を持つ行列となる。3D-Var では、多くの仮定を置きこの膨大な情報量を劇的に減らす、これにより予報誤差の再現性を大きく損なう。EnKF の場合、予報誤差が流れに依存して様々な形状を持つため、このような極端な単純化の手法は適用できない。だからといって、この大きな行列をまともに扱うことは不可能である⁵。このため、アンサンブルメンバーを統計サンプルと見立て、共分散を推定する。この際、もともとの誤差共分散が低次元なものであれば、少ないアンサンブルメンバーでも推定しやすい。実際、離れた地点間の誤差相関はないなど、 $\mathcal{O}(10^{10})$ 個の成分のうち、実質的に意味のあるものは、通常数桁は落ちていると考えてよい。EnKF では、少ないメンバー数によるサンプリングエラーを防ぐため、離れた点の間の誤差相関を強制的に 0 にする「局所化 (localization)」が重要な役割を果たす。それでもまだ、高々 100 程度のアンサンブルメンバー数で誤差共分散が十分表現されうるものとは考えにくい。

ここで、系の位相空間を考えよう。状態は位相空間上では点であり、状態の時間発展は線となる。任意の初期状態から長期積分した後に落ち着く安定な解の集合をアトラクタと呼ぶ⁶。通常、散逸系のアトラクタは、位相空間内の低次元の超平面上に収まる。さらに、カオス力学系は、フラクタルなアトラクタ⁷を持つことが知られている。つまり、アトラクタは疎であり、アトラクタを含むいかなる有限連続空間内でも体積を持たない⁸。実際、Patil et al. (2001) は、NCEP のアンサンブルを解析し、局所的に見てアンサンブルメンバーが非常に似た構造を持つ場所があることを発見した。これは、局所的な位相空間内でみて、アトラクタの分布がその点のまわりに超低次元な方向にのみ広がっていることを意味する。これを彼らは「局所低次元性 (local low dimensionality)」と呼び、大気力学系の持つ特質のひとつとしている。すべてのアンサンブルメンバーはアトラクタ上に分布しているから⁹、アンサンブルメンバーを使って、この超低次元な方向を捉えることができる。これを利用することで、数少ない高々 100 にも満たないアンサンブルメンバー数で、アトラクタ上

2.0×10^5 となる。なお、最近の現業アンサンブル予報システムで使われる全球モデルは、少なくとも $100 \times 50 \times 40$ の格子点 (スペクトル空間を含む) に 4 変数はあり、少なく見積もっても $\mathcal{O}(10^6)$ はある。

⁵ この大きな行列をまともに扱うと、カルマンフィルタ (Kalman Filter: KF, Kalman 1960) そのものになる。

⁶ 力学系には不安定な解も存在することがあるが、これはアトラクタには含まれない。不安定な解も含んだ全ての解の集合は、不変多様体 (invariant manifold) と呼ばれる。

⁷ ストレンジアアトラクタと呼ばれる。

⁸ n 次元の位相空間で、アトラクタは n 次元未満のフラクタル次元を持つという意味。

⁹ 十分長期間の積分 (サイクル計算) を行い計算が落ち着いた後を仮定している。

に広がる誤差の構造を効率よく捉える¹⁰。

このように、局所化と、低次元のアトラクタをもつという大気力学系の性質により、EnKFは、数少ないアンサンブルメンバーで、 $\mathcal{O}(10^{10})$ といった自由度を持つ予報誤差の情報を効率的に表現する。図 6.2.1 は、アトラクタを考慮しない 3D-Var など従来のデータ同化における解析 (図 6.2.1(a)) と、EnKF による解析 (図 6.2.1(b)) の違いを模式的に示したものである。図 6.2.1(a) では予報誤差が大きく広がっており、解析値は予報値から観測値に近づく方向に位置している。これに対し図 6.2.1(b) では、予報誤差は超低次元に広がるアトラクタ上に広がっているため、解析値はこのアトラクタ上に乗る¹¹。この図において、誤差の広がっている方向に距離が短いようなメトリックを考えると、直感的に理解しやすい。解析値は、予報値と観測値からの距離の和を最小にするようなイメージである。

アトラクタの構造を考慮してデータ同化を行う EnKF には、解析場のバランスという観点で大きな利点がある。最適内挿法 (Optimum Interpolation: OI) の頃から、バランスのよい解析場を作り出すことが重視され、地衡風バランスといった力学的バランスが考慮されてきた。それでもなお、モデルにとって数値ノイズの原因となる高周波の波などを解析場から取り除くために、初期値化が必要であった。しかし、EnKF では、アトラクタの広がる方向に解析インクリメントが作られるため、解析場もアトラクタ上に分布する。アトラクタは、モデルの長期積分でとりうる解の集合であるから、自ずとバランスが取れた解析場が得られることになる。これまでの EnKF の研究で、初期値化の議論がみられないのは、このような背景によるものと想像される。つまり、解析場は自動的に超バランス化されており (Kalnay, 私信)、モデルで自然に表現されるものは的確に表現されたものとなる。当然モデルで表現されうる重力波は表現され、無理にダンプしたりする必要はなく、初期値化も通常行われない。この意味でも、理想的な解析を行うものと言えよう。

6.3 数学的解説

本節では、数式を用いてより厳密な解説を行う。三好 (2005) にも EnKF の解説があるが、本稿はこれをさらに強化した。EnKF は、KF (Kalman Filter, Kalman

¹⁰ 初期状態では小さな誤差が、カオス力学系では時間とともに引き伸ばされ成長するが、十分長い時間がたつと、非線形プロセスにより有界な位相空間内で折りたたまれ、誤差の構造が複雑になる。ここでは、非線形性が卓越しない程度の密度で観測が得られ、誤差が単純な構造を維持する場合を考えている。この議論は、十分な観測がない現象はうまく解析できないことを示唆する。

¹¹ 非線形性が卓越し、アトラクタが図 6.2.1(b) 中で曲率の大きな曲線となった場合、解析値はアトラクタ上に必ずしも乗らない。線形性が十分に保たれる範囲でしか EnKF がうまく働かないことを示唆する。

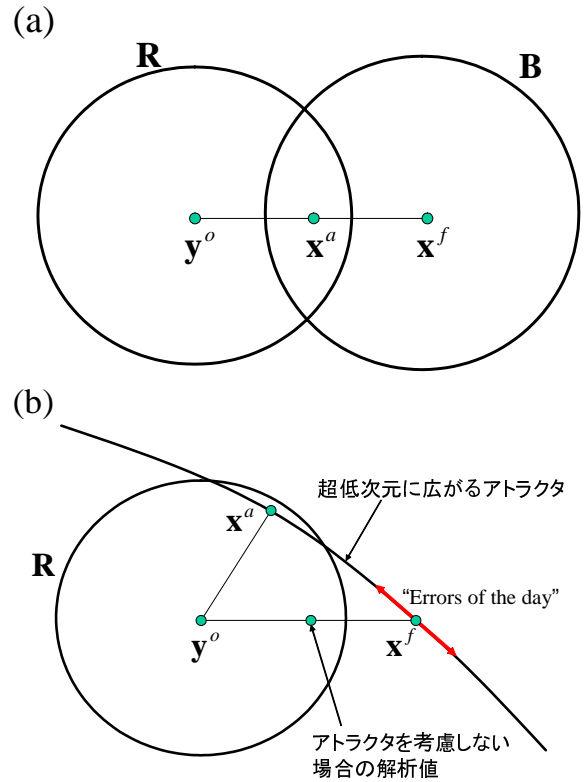


図 6.2.1 誤差の広がりや予報値 x^f 、観測値 y^o および解析値 x^a を位相空間上に示した模式図 (Kalnay 2005 を少し変えて抜粋)。(a) は予報誤差 B が流れに依存した情報を持たず広く広がっている場合を示し、(b) は予報誤差が流れに強く依存し超低次元のアトラクタ上に広がっている場合を示す。R は観測誤差の広がりを表す。

1960) を近似的だが効率的に多次元の大気力学系に適用するものである。KF は線形モデルで誤差がガウス分布と仮定した場合に最適となるデータ同化手法である。はじめに、第 6.3.1 項で KF を導出する。その後第 6.3.2 項でアンサンブルを用いて KF を近似する仕組みについて述べる。EnKF の導出を行った後で、第 6.3.3 項では変分法との関係について簡単に解説する。第 6.3.4 項では、EnKF のアンサンブル摂動生成に注目し、Breeding 法との関係について述べる。本稿で用いる記号は、Ide et al. (1997) に準じる。

6.3.1 カルマンフィルタ

本節の KF の導出は、Gelb et al. (1974) を参考にしている。解析を予報と観測の重み付き平均で定義し、解析誤差の最小分散を課すことで、最適な重みを求めるという、直感的でわかりやすい導出である。誤差がガウス分布する場合、最小分散推定は最尤推定 (最大確率密度推定) と同値となる。このような解説も含め、より数学的に厳密な解説は、Jazwinski (1970) を参照していただきたい。

解析 x^a は、予報 x^f と観測 y^o の重み付き平均 (重

み \mathbf{K}) で与えられる。

$$\mathbf{x}_i^a = \mathbf{x}_i^f + \mathbf{K}_i \left(\mathbf{y}_i^o - H_i(\mathbf{x}_i^f) \right) \quad (6.3.1)$$

ここで、上付き添字 a, f は解析、予報をそれぞれ表し、下付き添字は時刻 (i 番目の解析ステップ) を表す。また、 H は観測演算子で、予報値から観測値に相当する量に変換するプロセスである。解析、予報および観測の、真の状態 \mathbf{x}^t からの誤差を、

$$\delta \mathbf{x}^a = \mathbf{x}^a - \mathbf{x}^t \quad (6.3.2)$$

$$\delta \mathbf{x}^f = \mathbf{x}^f - \mathbf{x}^t \quad (6.3.3)$$

$$\delta \mathbf{y}^o = \mathbf{y}^o - H(\mathbf{x}^t) \quad (6.3.4)$$

と定義すると、(6.3.1) 式は、

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{x}^a &\approx \delta \mathbf{x}^f + \mathbf{K}(\delta \mathbf{y}^o - \mathbf{H}\delta \mathbf{x}^f) \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})\delta \mathbf{x}^f + \mathbf{K}\delta \mathbf{y}^o \end{aligned} \quad (6.3.5)$$

と変形できる。ここで、 \mathbf{H} は、一般には非線形の観測演算子 H を、 \mathbf{x}^t のまわりで線形化した接線形演算子である。 H がもともと線形の場合は、(6.3.5) 式は厳密に成り立つ。解析誤差共分散 \mathbf{P}^a は、統計期待値を記号 $\langle \cdot \rangle$ で表すと、

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^a &= \langle \delta \mathbf{x}^a (\delta \mathbf{x}^a)^\top \rangle \\ &\approx \langle ((\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})\delta \mathbf{x}^f + \mathbf{K}\delta \mathbf{y}^o) \\ &\quad ((\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})\delta \mathbf{x}^f + \mathbf{K}\delta \mathbf{y}^o)^\top \rangle \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H}) \langle \delta \mathbf{x}^f (\delta \mathbf{x}^f)^\top \rangle (\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})^\top \\ &\quad + \mathbf{K} \langle \delta \mathbf{y}^o (\delta \mathbf{y}^o)^\top \rangle \mathbf{K}^\top \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})\mathbf{P}^f (\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})^\top + \mathbf{K}\mathbf{R}\mathbf{K}^\top \end{aligned} \quad (6.3.6)$$

のようになる。ここで、 \mathbf{P}^f 及び \mathbf{R} は、それぞれ予報誤差共分散行列、観測誤差共分散行列である。また、予報誤差と観測誤差には相関がないことを仮定した ($\langle \delta \mathbf{x}^f (\mathbf{K}\delta \mathbf{y}^o)^\top \rangle$ などのクロスタームは 0)。解析誤差が小さくなる、すなわち、解析誤差分散の総和 ($\text{trace}(\mathbf{P}^a)$) が最小をとるとき、

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{K}} (\text{trace}(\mathbf{P}^a)) = 0 \quad (6.3.7)$$

が成り立つ。多変数関数の微分から得られる公式 (Gelb et al. (1974) の式 (2.1-72) および (2.1-73) を参照)

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} (\text{trace}(\mathbf{X}\mathbf{Y}\mathbf{X}^\top)) = \mathbf{X}(\mathbf{Y} + \mathbf{Y}^\top) \quad (6.3.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} (\text{trace}(\mathbf{X}\mathbf{Y})) = \mathbf{Y}^\top \quad (6.3.9)$$

を使って、(6.3.7) 式に (6.3.6) 式を代入して計算すると、

$$-2(\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})\mathbf{P}^f \mathbf{H}^\top + 2\mathbf{K}\mathbf{R} = 0 \quad (6.3.10)$$

となる。ここで、 \mathbf{P}^f と \mathbf{R} が対称行列であることを用いた。(6.3.10) 式を \mathbf{K} について解くと、最適な重み \mathbf{K} が得られる。

$$\mathbf{K} = \mathbf{P}^f \mathbf{H}^\top (\mathbf{H}\mathbf{P}^f \mathbf{H}^\top + \mathbf{R})^{-1} \quad (6.3.11)$$

この \mathbf{K} は、カルマンゲイン行列 (Kalman gain matrix) と呼ばれる。これを (6.3.6) 式に代入して計算すると、

$$\mathbf{P}^a = (\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})\mathbf{P}^f \quad (6.3.12)$$

となり、解析誤差共分散 \mathbf{P}^a は、予報誤差共分散 \mathbf{P}^f を $(\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})$ 倍だけ小さくしたものであることがわかる。

ここまで、KF の解析のプロセスについて述べた。KF の残り半分のプロセスは、時間方向に情報を伝達する予報のプロセスである。予報モデル M は、時刻 i の解析値を時刻 $i+1$ の予報値に時間発展させる。

$$\mathbf{x}_{i+1}^f = M(\mathbf{x}_i^a) \quad (6.3.13)$$

真の時間発展を M^t と書く。

$$\mathbf{x}_{i+1}^t = M^t(\mathbf{x}_i^t) \quad (6.3.14)$$

M が M^t に対してランダム誤差 η を含むと仮定する。

$$\mathbf{x}_{i+1}^t = M(\mathbf{x}_i^t) - \eta \quad (6.3.15)$$

ここで、ランダム誤差 η はバイアスがなく、共分散 \mathbf{Q} を持つとする。

$$\langle \eta \rangle = 0 \quad (6.3.16)$$

$$\langle \eta \eta^\top \rangle = \mathbf{Q} \quad (6.3.17)$$

以上を用いて、予報誤差共分散行列は、以下のように変形される。

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_i^f &= \langle \delta \mathbf{x}_i^f (\delta \mathbf{x}_i^f)^\top \rangle \\ &= \langle (\mathbf{x}_i^f - \mathbf{x}_i^t) (\mathbf{x}_i^f - \mathbf{x}_i^t)^\top \rangle \\ &= \langle (M(\mathbf{x}_{i-1}^a) - M(\mathbf{x}_{i-1}^t) + \eta) \\ &\quad (M(\mathbf{x}_{i-1}^a) - M(\mathbf{x}_{i-1}^t) + \eta)^\top \rangle \\ &\approx \langle (M\delta \mathbf{x}_{i-1}^a + \eta) (M\delta \mathbf{x}_{i-1}^a + \eta)^\top \rangle \\ &= \langle (M\delta \mathbf{x}_{i-1}^a) (M\delta \mathbf{x}_{i-1}^a)^\top + \eta \eta^\top \rangle \\ &= \mathbf{M}\mathbf{P}_{i-1}^a \mathbf{M}^\top + \mathbf{Q} \end{aligned} \quad (6.3.18)$$

ここで、 M は M を \mathbf{x}_{i-1}^t のまわりで線形化したものであり、接線形モデル (Tangent Linear Model: TLM) と呼ばれ、状態の摂動ベクトル $\delta \mathbf{x}$ の時間発展を与える¹²。また、予報誤差とモデルのランダム誤差には相関がないと仮定した ($\langle \delta \mathbf{x}^f \eta^\top \rangle = 0$ など)、(6.3.18) 式は、誤差共分散行列の時間発展 (予報) を与える式である。

以上に得られた 5 つの式 (6.3.1)、(6.3.11)、(6.3.12)、(6.3.13)、(6.3.18) が、KF を構成する基本方程式である¹³。

¹² ここでは数値予報モデルを念頭に、モデル M が非線形であることを前提としたが、 M がもともと線形である場合は、(6.3.18) 式は厳密に成り立つ。

¹³ 厳密には、(6.3.18) 式で非線形モデル M を前提としているので、拡張 KF (Extended KF: EKF) と呼ばれる。単に KF という場合、狭義的に M が線形の場合のみを指すこともあるが、本稿では、KF を EKF を含んで広義的に使う。

6.3.2 アンサンブルを使った定式化

前節で導入した KF は、数値予報モデルのような多次元系では実現困難である。簡単にこれを理解するには、誤差共分散行列 \mathbf{P} の次元を考えるとよい。数値予報モデルの自由度 N は、 $N \sim \mathcal{O}(10^7)$ 程度であり、単純な解像度の粗いモデルでも、 $N \sim \mathcal{O}(10^5)$ を下げることはまずあり得ない。誤差共分散行列は、 N^2 の自由度を持つため、少なくとも $\mathcal{O}(10^{10})$ の自由度を持つことになる。4 バイト実数として保持するとしても、 \mathbf{P} をメモリ上に保持するだけで 40GB の領域が必要となる。この大きさの行列をいくつも保持し、その逆行列を含む計算を行うことは、現実的に不可能であることは容易に想像できる。これだけを述べると、計算機性能が向上すれば解決できる問題に思われるかもしれないが、そうではない。計算機性能が向上すると、予報モデルの解像度もそれに伴って上がるのが通常である。 \mathbf{P} は N^2 の自由度を持つから、モデルの格子点数が 2 倍になれば、 \mathbf{P} は 4 倍の大きさを持つことになる。このように、計算機性能が向上しても、この問題が解決されることはない。

そこで、アンサンブルで \mathbf{P} を表現することを考える。誤差共分散行列 \mathbf{P} は、その定義から、

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \langle \delta \mathbf{x} (\delta \mathbf{x})^\top \rangle \\ &\approx \frac{1}{n-1} \sum_{l=1}^n \delta \mathbf{x}^{(l)} (\delta \mathbf{x}^{(l)})^\top \end{aligned} \quad (6.3.19)$$

と書ける。ここで、 n は統計サンプル数、 l はサンプル番号を表す。これはサンプルから推定する統計量であるから、 \mathbf{P} を完全に推定するには、無限の統計サンプルが必要である ($n \rightarrow \infty$)。一方、 \mathbf{P} が実対称行列であることを考慮すると、実対称行列は実行列の平方根を持つことから、

$$\mathbf{P} = \tilde{\mathbf{E}} \tilde{\mathbf{E}}^\top \quad (6.3.20)$$

と分解できる。ここで、 $\tilde{\mathbf{E}}$ は $N \times N$ 行列である。この際、 $\mathbf{U} \mathbf{U}^\top = \mathbf{I}$ を満たす \mathbf{U} について、 $\tilde{\mathbf{E}} \mathbf{U}$ も式 (6.3.20) を満たすため、 $\tilde{\mathbf{E}}$ の選び方は一意ではない。式 (6.3.20) が意味するところは、高々 N 個のサンプルで完全な \mathbf{P} の推定を行いうるということである。 $\tilde{\mathbf{E}}$ を

$$\tilde{\mathbf{E}} = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \left[\delta \mathbf{x}^{(1)} | \dots | \delta \mathbf{x}^{(N)} \right] \quad (6.3.21)$$

と書くことで、 \mathbf{P} の平方根行列 $\tilde{\mathbf{E}}$ の各列をアンサンブル摂動と見なし、それらをサンプルとした共分散が \mathbf{P} を成すように見ることができる。

大気力学系では、誤差共分散行列 \mathbf{P} は通常縮退しており、実質的な自由度は小さい (Dee 1995; Fukumori and Malanotte-Rizzoli 1995; Cane et al. 1996 などを参照)。これは、たとえば東京の風とブエノスアイレスの気温に誤差相関がないということに相当する。つまり、 \mathbf{P} を固有値分解すると、多くの固有値がほとんど

0 になる。このことを考慮し、0 に非常に近い固有値を無視すると、

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \mathbf{S} \mathbf{D} \mathbf{S}^\top \\ &= \mathbf{E} \mathbf{E}^\top \end{aligned} \quad (6.3.22)$$

のように展開できる。ここで、 \mathbf{D} は $m \times m$ 対角行列で、各成分は \mathbf{P} の固有値である。 m は無視されない固有値の数を表す。 \mathbf{S} は $N \times m$ 行列で、各列は対応する固有ベクトルである。 \mathbf{E} は $N \times m$ 行列であり、以下のように書ける。

$$\mathbf{E} = \frac{1}{\sqrt{m-1}} \left[\delta \mathbf{x}^{(1)} | \dots | \delta \mathbf{x}^{(m)} \right] \quad (6.3.23)$$

この \mathbf{E} も、 $\tilde{\mathbf{E}}$ と同様、 \mathbf{U} だけの自由度を持ち、一意には決まらない。(6.3.23) 式の右辺の各列をアンサンブル摂動とみなすと、 \mathbf{E} を m メンバーのアンサンブル摂動からなる行列とみなすことができる。

\mathbf{P} の平方根 \mathbf{E} (m メンバーのアンサンブル摂動) を使うことで、KF の方程式がどう簡略化されるかを見る。まず、 \mathbf{P} の予報方程式 (6.3.18) は、モデルのランダム誤差を無視すると、

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_i^f &= \mathbf{E}_i^f (\mathbf{E}_i^f)^\top \\ &= \mathbf{M} \mathbf{P}_{i-1}^a \mathbf{M}^\top \\ &= \mathbf{M} \mathbf{E}_{i-1}^a (\mathbf{M} \mathbf{E}_{i-1}^a)^\top \end{aligned} \quad (6.3.24)$$

となり、これは、

$$\mathbf{E}_i^f = \mathbf{M} \mathbf{E}_{i-1}^a \quad (6.3.25)$$

と同値である。(6.3.25) 式の右辺の \mathbf{E} に (6.3.23) 式を代入して変形すると、

$$\begin{aligned} \mathbf{M} \mathbf{E}_{i-1}^a &= \frac{1}{\sqrt{m-1}} \left[\mathbf{M} \delta \mathbf{x}_{i-1}^{a(1)} | \dots | \mathbf{M} \delta \mathbf{x}_{i-1}^{a(m)} \right] \\ &\approx \frac{1}{\sqrt{m-1}} \left[M(\bar{\mathbf{x}}_{i-1}^a + \delta \mathbf{x}_{i-1}^{a(1)}) - M(\bar{\mathbf{x}}_{i-1}^a) | \right. \\ &\quad \left. \dots | M(\bar{\mathbf{x}}_{i-1}^a + \delta \mathbf{x}_{i-1}^{a(m)}) - M(\bar{\mathbf{x}}_{i-1}^a) \right] \\ &\approx \frac{1}{\sqrt{m-1}} \left[M(\mathbf{x}_{i-1}^{a(1)}) - \bar{\mathbf{x}}_i^f | \right. \\ &\quad \left. \dots | M(\mathbf{x}_{i-1}^{a(m)}) - \bar{\mathbf{x}}_i^f \right] \end{aligned} \quad (6.3.26)$$

となる。ここで、 $\mathbf{x}^{(l)}$ は l 番目のアンサンブルメンバー、 $\bar{\mathbf{x}}$ はアンサンブル平均を表す。

$$\mathbf{x}^{a(l)} = \bar{\mathbf{x}}^a + \delta \mathbf{x}^{a(l)} \quad (6.3.27)$$

$$\bar{\mathbf{x}}^a = \frac{1}{m} \sum_{l=1}^m \mathbf{x}^{a(l)} \quad (6.3.28)$$

$$\bar{\mathbf{x}}_i^f = \frac{1}{m} \sum_{l=1}^m M(\mathbf{x}_{i-1}^{a(l)}) \quad (6.3.29)$$

(6.3.26) 式は、 m メンバーのアンサンブル予報と同等である。すなわち、 \mathbf{P} の予報方程式 (6.3.18) は、アンサンブル予報を使って近似される。

次に、解析における最適な重みを与えるカルマンゲイン行列について考える。(6.3.11) 式の \mathbf{P} に (6.3.22) 式を代入すると、

$$\begin{aligned}\mathbf{K} &= \mathbf{P}^f \mathbf{H}^\top (\mathbf{H} \mathbf{P}^f \mathbf{H}^\top + \mathbf{R})^{-1} \\ &= \mathbf{E}^f (\mathbf{H} \mathbf{E}^f)^\top [\mathbf{H} \mathbf{E}^f (\mathbf{H} \mathbf{E}^f)^\top + \mathbf{R}]^{-1} \quad (6.3.30)\end{aligned}$$

となる。こうすることで、 $N \times N$ 行列 \mathbf{P} を直接メモリ上に持つ必要はなく、代わりに $N \times m$ 行列 \mathbf{E} と、 $p \times m$ 行列 $\mathbf{H} \mathbf{E}$ のみをメモリ上に蓄えればよい。なお、 p は観測データ数（観測空間の次元）であり、 $\mathbf{H} \mathbf{E}$ は、各アンサンブルメンバーを観測データに相当するものに変換したものである。(6.3.30) 式の最右辺には \mathbf{H}^\top が現れないため、線形化した \mathbf{H} の計算を、非線形の H で近似できる。

$$\begin{aligned}\mathbf{H} \mathbf{E}^f &= \frac{1}{\sqrt{m-1}} \left[\mathbf{H} \delta \mathbf{x}^{f(1)} | \dots | \mathbf{H} \delta \mathbf{x}^{f(m)} \right] \\ &\approx \frac{1}{\sqrt{m-1}} \left[H(\bar{\mathbf{x}}^f + \delta \mathbf{x}^{f(1)}) - H(\bar{\mathbf{x}}^f) | \right. \\ &\quad \left. \dots | H(\bar{\mathbf{x}}^f + \delta \mathbf{x}^{f(m)}) - H(\bar{\mathbf{x}}^f) \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{m-1}} \left[H(\mathbf{x}^{f(1)}) - H(\bar{\mathbf{x}}^f) | \right. \\ &\quad \left. \dots | H(\mathbf{x}^{f(m)}) - H(\bar{\mathbf{x}}^f) \right] \quad (6.3.31)\end{aligned}$$

この取り扱いは、非線形のモデル M を用いて接線形モデル M を近似した式 (6.3.26) と非常に似ている。

(6.3.30) 式では、 $p \times p$ 行列の逆行列の計算が必要である。もし $m < p$ なら、(6.3.30) 式をさらに変形して、 $m \times m$ 行列の逆行列の計算ですむようにできる。

$$\mathbf{K} = \mathbf{E}^f [\mathbf{I} + (\mathbf{H} \mathbf{E}^f)^\top \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H} \mathbf{E}^f]^{-1} (\mathbf{H} \mathbf{E}^f)^\top \mathbf{R}^{-1} \quad (6.3.32)$$

ここで、異なる観測は独立しており、観測誤差には相関がないという仮定することが多いため、 \mathbf{R} はほぼ対角行列であり、 \mathbf{R}^{-1} の計算は自明であることを考慮している。 \mathbf{R} は $p \times p$ 行列であり、この逆行列の計算が自明でなければ、(6.3.32) 式は (6.3.30) 式から簡略化したことにならない。

最後に、 \mathbf{P} の解析の式 (6.3.12) を考える。いま、 \mathbf{P} はアンサンブルで表現されているから、このプロセスは解析アンサンブルを作り出すプロセス（アンサンブル・アップデート）に相当する。アンサンブル・アップデートの手法として、大きく 2 通りの方法が知られている。

1. 摂動観測法 (Perturbed Observation method: PO 法)
2. 平方根フィルタ (Square Root Filter: SRF)

PO 法は、各アンサンブルメンバーに独立したデータ同化サイクルを適用する方法であり、Evensen (1994) や Houtekamer and Mitchell (1998) など初期の研究で

主に用いられていた。各アンサンブルメンバーを独立にデータ同化すると、

$$\mathbf{E}^a = (\mathbf{I} - \mathbf{K} \mathbf{H}) \mathbf{E}^f \quad (6.3.33)$$

が成り立つ。これは、

$$\mathbf{P}^a = (\mathbf{I} - \mathbf{K} \mathbf{H}) \mathbf{P}^f (\mathbf{I} - \mathbf{K} \mathbf{H})^\top \quad (6.3.34)$$

と同値である。これは、(6.3.12) 式と比べて $(\mathbf{I} - \mathbf{K} \mathbf{H})$ が一つ多くかかっており、実際の解析誤差に比べて小さく見積もられてしまっていることを意味する。この原因は、(6.3.6) 式と比べて $\mathbf{K} \mathbf{R} \mathbf{K}^\top$ の項がないことによる。このため、観測データに摂動を与えて、 $\mathbf{K} \mathbf{R} \mathbf{K}^\top$ の項に相当するものを擬似的に生成しなければならない (Burgers et al. 1998)。この摂動によるサンプリングエラーのため、Whitaker and Hamill (2002) は、PO 法は観測データに摂動を与えない方法に比べて劣る可能性に言及した。

SRF は、観測に摂動を与えずに、(6.3.12) 式を直接解くことでアンサンブル・アップデートを行う方法である。最近の研究では、主に SRF の手法がとられている。SRF では、アンサンブル・アップデートを線形変換で与える。

$$\mathbf{E}^a = \mathbf{E}^f \mathbf{T} \quad (6.3.35)$$

このアンサンブル・アップデートが式 (6.3.12) を満たすことから、

$$\begin{aligned}\mathbf{P}^a &= \mathbf{E}^f \mathbf{T} \mathbf{T}^\top (\mathbf{E}^f)^\top \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{K} \mathbf{H}) \mathbf{E}^f (\mathbf{E}^f)^\top (\mathbf{I} - \mathbf{K} \mathbf{H})^\top \quad (6.3.36)\end{aligned}$$

が成り立つ。これを \mathbf{T} について解けば、アンサンブル・アップデートの公式が得られる。この \mathbf{T} についても、 \mathbf{U} だけの自由度があって、一意には決まらない。SRF の具体的な実装法はいくつか知られており、第 6.4 項で紹介する。Tippett et al. (2003) や Evensen (2003) にも、いくつかの SRF の方法が紹介されている。

本節のまとめとして、SRF による EnKF の手順についてまとめる。

1. アンサンブル予報により、予報アンサンブル摂動 \mathbf{E}^f および予報アンサンブル平均 $\bar{\mathbf{x}}^f$ が得られる。
2. \mathbf{E}^f を使ってカルマンゲイン行列 \mathbf{K} を求める。
3. アンサンブル平均についてデータ同化を行い、解析アンサンブル平均 $\bar{\mathbf{x}}^a$ を得る。
4. SRF によりアンサンブル・アップデートを行い、解析アンサンブル摂動 \mathbf{E}^a を得る。
5. 以上で得られた解析アンサンブル平均に摂動を足し、次の予報のための解析アンサンブル $\mathbf{x}^{a(l)}$ を計算する。
6. 次のアンサンブル予報を行う。1 に戻り、以上の手順を繰り返す。

6.3.3 変分法との関係

変分法について、ここでは簡略的に導入し、以上に述べた KF との関係について簡単に言及するにとどめる。変分法の詳細は、露木 (1997) を参照していただきたい。

予報値 \mathbf{x}^f とその誤差共分散 \mathbf{B} が与えられたとき、状態変数 \mathbf{x} の確率密度関数 (Probability Density Function: PDF) $Prob^f(\mathbf{x})$ は、平均値 \mathbf{x}^f 、共分散 \mathbf{B} のガウス分布

$$Prob^f(\mathbf{x}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^f)^\top \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^f)\right) \quad (6.3.37)$$

で書ける。誤差がガウス分布するというのは、前節までで用いていた仮定と同じである。同様に、観測値 \mathbf{y}^o のまわりにも共分散 \mathbf{R} のガウス分布をするので、

$$Prob^o(\mathbf{x}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{H}\mathbf{x} - \mathbf{y}^o)^\top \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{H}\mathbf{x} - \mathbf{y}^o)\right) \quad (6.3.38)$$

となる。予報値と観測値の両方が与えられたときの合成確率 (joint probability) は、

$$\begin{aligned} Prob^{f\&o}(\mathbf{x}) &= Prob^f(\mathbf{x}) \cdot Prob^o(\mathbf{x}) \\ &\propto \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^f)^\top \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^f) \right. \\ &\quad \left. -\frac{1}{2}(\mathbf{H}\mathbf{x} - \mathbf{y}^o)^\top \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{H}\mathbf{x} - \mathbf{y}^o)\right) \end{aligned} \quad (6.3.39)$$

のようになる。最尤推定を行い、 $Prob^{f\&o}$ が最大値をとることは、評価関数

$$\begin{aligned} J(\mathbf{x}) &= \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^f)^\top \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^f) \\ &\quad + \frac{1}{2}(\mathbf{H}\mathbf{x} - \mathbf{y}^o)^\top \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{H}\mathbf{x} - \mathbf{y}^o) \end{aligned} \quad (6.3.40)$$

が最小値をとることと同値である。 $J(\mathbf{x})$ の最小値を与える \mathbf{x}^* において、

$$\nabla J(\mathbf{x}^*) = 0 \quad (6.3.41)$$

が成り立つ。3D-Var は、準ニュートン法などの最小値探索アルゴリズムを用いて評価関数 $J(\mathbf{x})$ が最小となる解 \mathbf{x}^* を探すアルゴリズムである。準ニュートン法は、局所的な極小を探すアルゴリズムなので、3D-Var は必ずしも大域的最適解を見つけるわけではない。しかし、予報値と観測値は十分に近いという現実的な仮定の下、局所的最適解が大域的にも最適だと考える。

ここで、

$$\delta\mathbf{x} = \mathbf{x} - \mathbf{x}^f \quad (6.3.42)$$

$$\mathbf{d} = \mathbf{y}^o - \mathbf{H}\mathbf{x}^f \quad (6.3.43)$$

を定義すると、評価関数 (6.3.40) はインクリメント形 (incremental form)

$$\begin{aligned} J(\mathbf{x}^f + \delta\mathbf{x}) &\approx \frac{1}{2}\delta\mathbf{x}^\top \mathbf{B}^{-1}\delta\mathbf{x} \\ &\quad + \frac{1}{2}(\mathbf{H}\delta\mathbf{x} - \mathbf{d})^\top \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{H}\delta\mathbf{x} - \mathbf{d}) \end{aligned} \quad (6.3.44)$$

で書ける。ここでの近似は、一般には非線形の観測演算子 \mathbf{H} を線形化していることによるものである。観測演算子がかつとも線形の場合は、(6.3.44) 式は厳密に成り立つ。(6.3.44) 式を $\delta\mathbf{x}$ で微分すると、

$$\nabla J(\delta\mathbf{x}) = \mathbf{B}^{-1}\delta\mathbf{x} + \mathbf{H}^\top \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{H}\delta\mathbf{x} - \mathbf{d}) = 0 \quad (6.3.45)$$

となり、これを解くと、

$$\begin{aligned} \delta\mathbf{x} &= (\mathbf{B}^{-1} + \mathbf{H}^\top \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H})^{-1} \mathbf{H}^\top \mathbf{R}^{-1} \mathbf{d} \\ &= \mathbf{B} \mathbf{H}^\top (\mathbf{R} + \mathbf{H} \mathbf{B} \mathbf{H}^\top)^{-1} \mathbf{d} \end{aligned} \quad (6.3.46)$$

を得る。これが 3D-Var が求めるべき解であり、最適な重み (6.3.11) を用いた KF の解と同じであることがわかる。つまり、変分法も KF も、解を得る方法が違っただけで、求めようとするものは同じなのである。重大な違いは、3D-Var では時間平均的な予報誤差 \mathbf{B} を用いるのに対し、KF では完全に流れに依存した \mathbf{P}^f を用いる点である。OI では、3D-Var と同様、時間一定の予報誤差 \mathbf{B} を用いて、空間局所的に陽に (6.3.46) 式を解く。3D-Var の利点は、このような局所的な扱いを行わない点と、非線形の観測演算子を取り扱える点にある。

最近主流となっている 4 次元変分法 (4D-Var) との関係について述べよう。4D-Var は、3D-Var を時間方向に発展したものであり、異なる時刻の観測をその時刻のものとして扱えるようにしたものである。上で述べたように、3D-Var は KF と同じ解を求めようとするものの、流れに依存する予報誤差を使わないという重大な違いがあったが、露木 (1997) や Bouffier and Courtier (1999) が示しているように、4D-Var で十分長くタイムウィンドウを取れば、理論的には KF と同等の解が得られるようになる。これは、4D-Var が予報誤差の時間発展を暗に行っていることを意味する。しかし、現実には 4D-Var のタイムウィンドウは 24 時間以内であり、3 日程度の時間スケールを持つ現象をターゲットとした解析を行う場合、いかにカオス力学系が過去を忘れるといっても、統計的な背景誤差共分散 \mathbf{B} の影響は残ってしまう。KF では、誤差共分散を陽に時間発展し、常に流れに応じたものを使うので、この点で 4D-Var は不利だといえる。しかし、モデルが不完全である場合、不完全な予報誤差の情報を延々と引き継いでいく KF は、モデルに起因する誤差をどんどん蓄えていってしまう危険性がある。その点 4D-Var では、背景誤差共分散は時間依存しないため、モデルに起

因する誤差をタイムウィンドウを越えて引き継いでいく危険性はない。現業利用する際には、4D-Var と KF のパフォーマンスの差が、このあたりの兼ね合いによることも考慮する必要があるが、モデルの不完全性が小さくなればなるほど、理論的には KF の優位性が現れてくることになる¹⁴。このデメリットを解消するため、4D-Var で使われる背景誤差共分散 B に KF で見積もったものを使うという可能性もあるが、変分法の定式化でなされる B の表現の単純化が大きな問題となることが想像され、KF と同等のものにすることは難しいだろう。4D-Var の重要な効果である異なる時刻の観測の扱いについては、4次元 EnKF (4D-EnKF, Hunt et al. 2004) という技術が提案されており、EnKF でも同様なことができることがわかっている。4D-EnKF については、第 6.4.8 項で解説する。

6.3.4 Breeding 法との関係

ここまで、データ同化法という観点から EnKF について解説した。本節では、アンサンブル摂動生成という観点から、EnKF のアンサンブル・アップデートと Breeding 法のアンサンブル摂動生成の関係について述べる。

Breeding 法では、アンサンブル摂動のリスケージングのサイクルを行う (Breeding サイクルという)。このリスケージングでは、アンサンブル摂動の大きさが一定になるようにする。つまり、 l 番目のアンサンブルメンバーについて、

$$\delta \mathbf{x}^{a(l)} = \alpha^{(l)} \delta \mathbf{x}^f(l) \quad (6.3.47)$$

のようなリスケージングを行う。ここで、Breeding 法による初期アンサンブル摂動の大きさを α とすると、

$$\alpha^{(l)} = \frac{\alpha}{|\delta \mathbf{x}^f(l)|} \quad (6.3.48)$$

となる。 α は一定値であるが、 $\alpha^{(l)}$ は一定値とはならない。このリスケージングのプロセスを、これまで用いた記号を使って書くと、

$$\mathbf{E}^a = \mathbf{E}^f \begin{pmatrix} \alpha^{(1)} & & & 0 \\ & \alpha^{(2)} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \alpha^{(m)} \end{pmatrix} \quad (6.3.49)$$

のような対角行列によるアンサンブル・アップデートになる。EnKF の SRF におけるアンサンブル・アップデート (6.3.35) と見比べると、変換行列 \mathbf{T} が対角行列という特殊な場合に相当することがわかる。このように、Breeding 法は、SRF のアンサンブル・アップデートの一種と見なせる。

¹⁴ 準地衡流チャネルモデルを用いた 4D-Var と EnKF の比較実験で、モデルが完全である場合に、EnKF が 4D-Var に勝るとい結果が得られている (Yang et al. 2005)。

SRF では、一般に変換行列 \mathbf{T} は対角行列ではないので、単に摂動ベクトルの長さを変えるだけでなく、回転や反転を伴う。しかし、アンサンブル予報により得られた予報アンサンブル摂動を引き継ぎ、これらの線形結合として次の初期アンサンブル (解析アンサンブル) の摂動を得るという観点で、Breeding 法と似ている。Patil et al. (2001) が発見した局所低次元性は Breeding 法のアンサンブル摂動から得られたものであり、Breeding 法のアンサンブルはアトラクタをよく捕らえる。SRF が Breeding 法と同じ根を持つことは決して偶然ではなく、Breeding 法を応用したものと解釈することもできる。SRF は、Breeding 法を発展させ、観測の情報も取り込んだ、より性質のよいアンサンブル摂動を得る手法と言える。

また、Breeding 法では、一つのアンサンブル摂動を生成すると、その反対方向の摂動を加えることで、アンサンブル平均が解析値となるようなアンサンブル予報を実現する。つまり、一つの摂動に対し、そのプラス・マイナスペアを用いてアンサンブル予報を行う。これは、Breeding 法に限らず、SV 法も含め、従来のアンサンブル摂動生成法でとられていた手法である。この方法では、 m メンバーのアンサンブル摂動が $m/2$ 程度の次元しか張ることができない。しかし SRF では、アンサンブル摂動はプラス・マイナスペアではなく、 m メンバーあると $m-1$ 次元空間を張る¹⁵。これは SRF がもつ大きな利点である。実際 Wang et al. (2004) は、メンバー数が限られているほど、プラス・マイナスペアの従来の方法によるアンサンブル予報より、EnKF によるアンサンブル予報が優れていることを示した。モデル自由度を考えると、実用可能なアンサンブルメンバー数は常に限られていると考えられ、実用上、従来のプラス・マイナスペアは、それだけで不利であると言える。

Breeding 法で生成される Bred Vector (BV) は、線形モデルにおける Lyapunov Vector (LV, 例えば Kalnay 2003 や Trevisan and Pancotti 1998 を参照) の非線形拡張であり、長い期間のサイクルプロセスで、leading 成分に収束する可能性がある。実際、Miyoshi and Kalnay (2005b) では、Lorenz の 40 変数モデル (Lorenz 1996; Lorenz and Emanuel 1998) を使った長期間の Breeding サイクルを行い、始めはランダム摂動から始めた Breeding サイクルが、単一の BV に収束した結果を示している。これを防ぐため、高次の LV の生成と同様に、サイクルプロセスで直交化を行い、高次の leading 成分を求められる。実際の数値予報モデルでは、BV が単一のものに収束することはない¹⁶が、時と場所によって似

¹⁵ m 個の摂動の総和が 0 ベクトルとなるため、 $m-1$ 個の総和が残り一つの摂動の反対向きのベクトルとなる。この条件により、自由度 1 だけ落ちて、 $m-1$ 次元空間となる。

¹⁶ Toth and Kalnay (1997) や Toth and Wei (2003) は NCEP の現業アンサンブル予報システムで、Corazza et al.

たようなものになることがあり、気象庁では直交化した BV を用いている (第 3.1 節; Kyouda and Kusunoki 2002)。直交化することにより、LV に第一 leading 成分 (first LLV)、第二 leading 成分 (second LLV) と順番が付くように、BV に順番が付く。第一 leading 成分が最も誤差成長率が大きいと期待され、すべてのアンサンブルメンバーを同等の重みで扱うことができなくなる。これに対し、SRF によるアンサンブル摂動はすべてが対等で、また、サイクルプロセスでベクトルの向きを変えることから leading 成分に収束しにくいいため、アンサンブル予報の際に扱いやすく、より自然である。このように、アンサンブル摂動生成法としての EnKF にも期待される。

6.4 アンサンブル・カルマンフィルタの実装技術

前節では、KF を導出し、EnKF の核となるアンサンブルによる KF の近似法について述べた。前節までで、EnKF の基本的考え方はほぼ網羅しており、EnKF に関する論文を読み、大雑把な議論をするには十分と言えるかもしれない。しかし、SRF のアンサンブル・アップデートの詳細を含め、実際に実装するには、より詳細に踏み込んだ具体的な解説が必要である。本節では、前節までで解説した基本的知識を背景に、実際に実装する際の方法や技術について解説する。SRF の実装法は、これまでのところ数種類が提唱されているが、本稿ではそのすべてについて解説は行わない。Tippett et al. (2003) に 4 種類が網羅されており、そのうちのひとつ、Whitaker and Hamill (2002) の逐次的アンサンブル SRF (Serial Ensemble SRF: Serial EnSRF) について、第 6.4.1 項で解説する。このほか、メリーランド大学で開発された、局所 EnKF (Local EnKF: LEKF, Ott et al. 2002; 2004) 及び局所アンサンブル変換 KF (Local Ensemble Transform Kalman Filter: LETKF, Hunt 2005) について、第 6.4.3 項および第 6.4.4 項で解説する。共分散膨張の動的推定法 (Miyoshi and Kalnay 2005a) や 4D-EnKF といった現業利用において特に重要となる最新の技術についても、第 6.4.7 項および第 6.4.8 項で紹介する。

6.4.1 平方根フィルタの逐次的実装法

Serial EnSRF では、

$$\mathbf{E}^a = (\mathbf{I} - \tilde{\mathbf{K}}\mathbf{H})\mathbf{E}^f \quad (6.4.1)$$

という形のアンサンブル・アップデートを仮定する。これが (6.3.12) 式を満たすには、

$$(\mathbf{I} - \tilde{\mathbf{K}}\mathbf{H})\mathbf{P}^f(\mathbf{I} - \tilde{\mathbf{K}}\mathbf{H})^\top = (\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})\mathbf{P}^f \quad (6.4.2)$$

が必要である (Whitaker and Hamill 2002 の (9) 式を参照)。これは Andrews (1968) によって解かれ、その (2003a) は準地衡流チャンネルモデルで、BV が単一のものに収束しないことを示している。

解は、

$$\tilde{\mathbf{K}} = \mathbf{P}^f\mathbf{H}^\top \left[(\mathbf{H}\mathbf{P}^f\mathbf{H}^\top + \mathbf{R})^{-1/2} \right]^\top \left[(\mathbf{H}\mathbf{P}^f\mathbf{H}^\top + \mathbf{R})^{1/2} + \mathbf{R}^{1/2} \right]^{-1} \quad (6.4.3)$$

である (Whitaker and Hamill 2002 の (10) 式を参照)。この式では、 \mathbf{R} の非対角成分も考慮できる。観測が独立で、 \mathbf{R} が対角行列の場合、観測は一つずつ逐次的に取り扱うことができる。こうすると、観測空間の次元は 1 となり、 $\mathbf{H}\mathbf{P}^f\mathbf{H}^\top$ や \mathbf{R} はスカラー、 \mathbf{K} や \mathbf{H} は N 次元ベクトルとなる。この場合、(6.4.3) 式は単純化され、 $\tilde{\mathbf{K}} = \alpha\mathbf{K}$ という形となり、 α は、

$$\alpha = \left(1 + \sqrt{\frac{\mathbf{R}}{\mathbf{H}\mathbf{P}^f\mathbf{H}^\top + \mathbf{R}}} \right)^{-1} \quad (6.4.4)$$

となる (Whitaker and Hamill 2002 の (13) 式を参照)¹⁷。これにより、 $\tilde{\mathbf{K}}$ を陽に構築することなく、すでにデータ同化で計算した \mathbf{K} に (6.4.4) 式の係数をかけるだけで $\tilde{\mathbf{K}}$ が得られる。

逐次的に観測を扱う場合、一つの観測を同化するたびに第一推定値を置き換えることが必要である。たとえば現在のデータを同化し、1 秒後のデータを同化する場合、現在の解析値から 1 秒予報を行い、それを第一推定値とした解析を行う。0 秒後のデータを同化する場合も同様に考え、一つの観測を同化してできた解析値を 0 秒予報し (つまり何もしない) これを第一推定値とした解析を行う。これが、同時刻の多数の観測を一つ一つ逐次的に扱うことでの考え方である。実装する際は、一つの観測を同化したら、それによって作られた解析値を、次の観測を同化する際の第一推定値とすることに注意する。

逐次的実装法は、観測を一つ同化した結果を用いて次の観測を同化するため、並列化には向かない。次節で述べる局所化により、遠く離れた観測はお互いに影響を及ぼすことがなく同時に同化できるため、並列計算を完全に阻むものではない。しかし、並列化が Serial EnSRF のアルゴリズムから自然と生ずるものではないため、その実装は煩雑になるだろう。また、多くの観測がある領域に密集している場合などは並列化できないなど、どんな場合でも効率よく並列化できるものとはならないだろう。このことは、後に述べる LEKF と比べ、実用上の大きな欠点といえる。

6.4.2 局所化

離れた点の間には、誤差相関がないと考えるのは自然である。東京の風とブエノスアイレスの気温の例は、第 6.3.2 項で既に述べた。気候の話などではテレコネクションに注目するので、常にどんな現象でも離れた地点間に誤差相関がないとは言えないかもしれない。しかし、数時間毎の観測を同化し、総観規模の場を再現

¹⁷ Potter (1964) により初めて導かれたとされている。

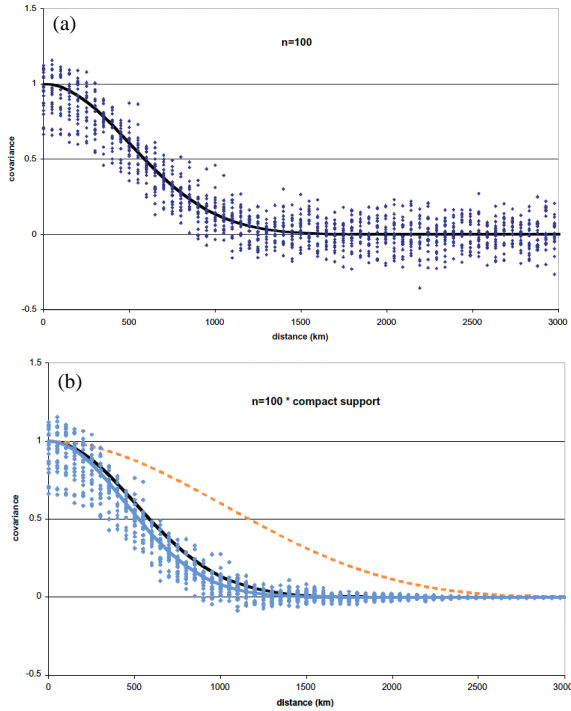


図 6.4.1 ガウス関数を用いた背景誤差共分散のサンプリングエラーのダンブ (Lorenz 2003 より抜粋)。 (a) は局所化をしない場合について、黒実線を完全解とした場合の各サンプル値 (青点) を示す。 (b) は、黒実線を完全解とするサンプル値に対し、橙点線で示されたガウス関数で局所化したサンプル値 (水色点) 及び完全解 (水色線) を示す。

するような気象シミュレーションを考える限り、東京の風とブエノスアイレスの気温に現れる相関は単にサンプリングエラーだと考えるのは、むしろ当然のことである。局所化は水平方向のみならず、鉛直方向にも同様に行う。例えば、地表面の誤差が成層圏の誤差と相関を持たないと考えることに相当する。水平方向と鉛直方向は一般に異なる相関距離スケールを持つ。

EnKF では、非常に限られた数のアンサンプルを用いて予報誤差共分散を表現することは既に述べた。大きなシグナルは捕らえても、特に離れた点ではサンプリングエラーが大きくなる。このため、このサンプリングエラーを小さくするように、局所化を行う。具体的には、離れた点の相関をダンブする。よく行われるのは、ガウス関数のような、距離が大きいかほど 0 に近づくような関数をかける方法である。図 6.4.1 は、ガウス関数を用いた局所化によりサンプリングエラーが除かれる様子を示したものである (Lorenz 2003 より抜粋)。図 6.4.1(b) のように、局所化を行うと、完全解の相関距離が多少小さくなるものの、サンプル値のばらつきが特に遠い点で抑えられ、離れた点のサンプリングエラーが小さくなっていることが見て取れる。

局所化の操作を具体的に定義しよう。格子点値の大きさを持つベクトル x を x_0 のまわりに局所化したものを $S(x_0) \circ x$ と書く。ベクトル x の各要素について、

局所化の中心 x_0 からの距離 r を計算する。局所化の関数 $L(r)$ をベクトルの各要素にかけたものが、 $S(x_0) \circ x$ である。この局所化の操作 (記号 \circ で示したもの) を Schur product と呼ぶ。次に、共分散行列 P の局所化を定義する。ベクトルの場合と同様に、局所化したものを $S \circ P$ と書く。 P の各列 (または行) は、格子点値に対応する。各列 (または行) の局所化の中心となるのは、行列の対角成分に相当する格子点である。中心の点が決まれば、先に定義したベクトルの局所化を各列 (または行) に行うことで、行列 P を局所化できる。

局所化関数 $L(r)$ は、どんな関数でもよいが、図 6.4.1(b) の橙点線で示したようなガウス関数を用いることが多い。アンサンプルの数が少ない EnKF では、サンプル値のばらつきが大きく、特に遠い点で、解析に与える悪影響が強い。ガウス関数は、どれほど遠くても厳密に 0 にはならない関数である。このため、EnKF では、ガウス関数を近似した 5 次関数 (Gaspari and Cohn 1999; Hamill et al. 2001) を用いることが多い。

$$L(r) = \begin{cases} 1 - \frac{1}{4}r^5 + \frac{1}{2}r^4 + \frac{5}{8}r^3 - \frac{5}{3}r^2 & (r \leq 1) \\ \frac{1}{12}r^5 - \frac{1}{2}r^4 + \frac{5}{8}r^3 + \frac{5}{3}r^2 & (1 < r \leq 2) \\ 0 & (2 < r) \end{cases} \quad (6.4.5)$$

この関数のプロットは省略するが、ガウス関数と非常に似た形状をしている。この関数は、すそ ($r > 2$) が完全に 0 になるのが、サンプリングエラーをダンブするという観点で好ましい。

Serial EnSRF の場合は、一度に同化される観測が 1 つ (観測空間の次元が 1) であり、 K は格子点値に対応する N 次元ベクトルである。予報誤差共分散行列 P^f の局所化を行うと、

$$K = (S \circ P^f) H^T ((H(S \circ P^f) H^T + R))^{-1} \quad (6.4.6)$$

$$\approx S \circ (P^f H^T (H P^f H^T + R)^{-1}) \quad (6.4.7)$$

となり、ベクトル K に観測点を中心とした Schur product を行うことが、予報誤差共分散行列 P^f の局所化と同等になる。ここで、観測空間の次元が 1 で、 $H P^f H^T$ がスカラーであることを考慮した。近似記号は、観測点が格子点上にない場合の近似を表す。

6.4.3 局所アンサンプル・カルマンフィルタ (LEKF)

LEKF は、離れた点の相関が 0 であることを前提とした上で、Patil et al. (2001) により示された局所的低次元性 (local low dimensionality) という大気力学系の持つ特徴を利用する。局所的低次元性とは、全体としては複雑に見える大気力学系でも、ある小さな領域に注目すると、誤差の広がる方向が非常に低次元になっていることである。これは、第 6.2 節で概念的に説明し

たアトラクタの低次元性が実現されたものとみなせる。

LEKF では、各格子点のまわりの小さな領域 (local patch) をそれぞれ独立に扱う。Local patch は、各格子点を中心とした 3 次元直方体 (または球) で定義する。LEKF は、local patch 内の格子点値のアンサンブルを使って、local patch 内にある観測のみを EnKF で同化し、local patch の中心の格子点値のみを解析値として保存する。こうすることで、local patch の大きさを越えた誤差相関は完全に 0 であると仮定される。各格子点にそれぞれ local patch が存在しているので、それぞれの local patch を独立に解析する。最後に、各 local patch の解析値を合成し、領域全体の解析値を得る。Local patch には多分に重なりがあるため、この合成法は一意ではないが、local patch の中心の値だけを使う方法がよくとられる。LEKF の重要な特徴は、各 local patch 毎に計算される EnKF は完全に独立しており、自ずから並列化のプロセスを内包する点である。

LEKF では、local patch 内で予報誤差共分散行列を主成分解析し、主成分を用いて効率的に解析を行う。EnKF は、アンサンブル摂動ベクトルの張る空間内で解析を行うが、予報誤差共分散行列はアンサンブル摂動ベクトルから計算される共分散行列であるから、主成分を用いても張る空間は同じである。

各 local patch での解析を考える。各 local patch は完全に独立に、同じ方法で解析される。以下では、一つの local patch での解析アルゴリズムを述べるが、すべての local patch で独立に同じ方程式が適用される。予報誤差共分散行列 \hat{P}^f を主成分解析 (固有値分解) すると、

$$\hat{P}^f = \hat{G}\hat{P}^f\hat{G}^\top \quad (6.4.8)$$

となる。ここで、 \hat{G} は固有ベクトルからなる $N \times r$ 行列、 \hat{P}^f は 0 でない r 個の固有値を対角成分にもつ $r \times r$ 行列である。 r は 0 でない固有値の数である ($r \leq m-1$)。 $r \times N$ 行列 \hat{G}^\top は、 N 次元の物理空間から r 次元の *hat space* への写像を与える。任意の状態ベクトル \mathbf{x} 、共分散行列 \mathbf{X} は、 \hat{G} を使って、 r 次元の *hat space* に写すことができる。

$$\hat{\mathbf{x}} = \hat{G}^\top \mathbf{x} \quad (6.4.9)$$

$$\hat{\mathbf{X}} = \hat{G}^\top \mathbf{X} \hat{G} \quad (6.4.10)$$

LEKF では、EnKF のすべての計算はこの低次元の *hat space* で行われ、最後に物理空間へ戻す変換

$$\mathbf{x} = \hat{G}\hat{\mathbf{x}} \quad (6.4.11)$$

により、物理空間での結果を得る。第 6.3.2 項で示したプロセスでは、誤差共分散行列 \mathbf{P} を陽には計算せずに解析を行ったが、LEKF では *hat space* 内で $\hat{\mathbf{P}}$ を陽に持つ。先に \hat{P}^a を計算し、これを使って解析の計算を

行う (Ott et al. 2004 を参照)。

$$\hat{P}^a = \left[(\hat{P}^f)^{-1} + \hat{\mathbf{H}}^\top \mathbf{R}^{-1} \hat{\mathbf{H}} \right]^{-1} \quad (6.4.12)$$

$$= \hat{P}^f \left[\mathbf{I} + \hat{\mathbf{H}}^\top \mathbf{R}^{-1} \hat{\mathbf{H}} \hat{P}^f \right]^{-1} \quad (6.4.13)$$

$$\hat{\mathbf{x}}^a = \hat{\mathbf{x}}^f + \hat{P}^a \hat{\mathbf{H}}^\top \mathbf{R}^{-1} \mathbf{d} \quad (6.4.14)$$

アンサンブル・アップデートは、

$$\hat{\mathbf{E}}^a = \hat{\mathbf{E}}^f \mathbf{Y} \quad (6.4.15)$$

の形の線形変換とする。定義から、

$$\hat{P}^a = \hat{\mathbf{E}}^f \mathbf{Y} \mathbf{Y}^\top (\hat{\mathbf{E}}^f)^\top \quad (6.4.16)$$

であり、前にも述べたように \mathbf{Y} は一意には決まらないが、予報アンサンブル摂動と解析アンサンブル摂動の差を最小にするように決めると、

$$\mathbf{Y} = \left[\mathbf{I} + (\hat{\mathbf{E}}^f)^\top (\hat{P}^f)^{-1} (\hat{P}^a - \hat{P}^f) (\hat{P}^f)^{-1} (\hat{\mathbf{E}}^f) \right]^{1/2} \quad (6.4.17)$$

となる。この導出は、Ott et al. (2004) を参照いただきたい。

6.4.4 局所アンサンブル変換カルマンフィルタ (LETKF)

Hunt (2005) は、前節で述べた LEKF をさらに効率化した局所アンサンブル変換カルマンフィルタ (Local Ensemble Transform Kalman Filter: LETKF) を考案した。LETKF の根本原理は LEKF と同等であるが、主成分解析を行わず、計算の効率性を高めたものとなっており、現業利用により適している。Harlim and Hunt (2005) や Szunyogh et al. (私信) は、LEKF と LETKF をいくつかのモデルに適用して比較実験を行い、両者のデータ同化性能が同等であることを確かめている。

LETKF では、主成分解析をせず、*hat space* を構成しない。代わりに、アンサンブル摂動 \mathbf{E} を直接使い、 m 個のアンサンブルメンバーが張る m 次元空間内で解析を行う。まず、 m 次元空間内の $m \times m$ 解析誤差共分散行列 \hat{P}^a を以下のように求める。

$$\hat{P}^a = \left[\mathbf{I} + (\mathbf{H}\hat{\mathbf{E}}^f)^\top \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H}\hat{\mathbf{E}}^f \right]^{-1} \quad (6.4.18)$$

これを用いて、物理空間での解析誤差共分散行列 \mathbf{P}^a は、

$$\mathbf{P}^a = \mathbf{E}^f \hat{P}^a (\mathbf{E}^f)^\top \quad (6.4.19)$$

となり、解析アンサンブル摂動 \mathbf{E}^a は、

$$\mathbf{E}^a = \mathbf{E}^f (\hat{P}^a)^{1/2} \quad (6.4.20)$$

となる。 $\mathbf{U}\mathbf{U}^\top = \mathbf{I}$ となる \mathbf{U} の存在により、行列の平方根は一意ではないが、 $(\hat{P}^a)^{1/2}$ が対称行列になるような平方根を選ぶ。

LETKF の効率性は、(6.4.18) 式の逆行列計算と (6.4.20) 式の行列平方根の計算を、1 回の固有値分解で共有して行うところにある。すなわち、

$$\mathbf{I} + (\mathbf{H}\mathbf{E}^f)^\top \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H}\mathbf{E}^f = \mathbf{V}\mathbf{D}\mathbf{V}^\top \quad (6.4.21)$$

のように固有値分解すると、

$$\tilde{\mathbf{P}}^a = \mathbf{V}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{V}^\top \quad (6.4.22)$$

$$(\tilde{\mathbf{P}}^a)^{1/2} = \mathbf{V}\mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{V}^\top \quad (6.4.23)$$

となり、一つの固有値分解が双方に適用される。これらを計算すれば、カルマンゲイン行列 \mathbf{K} は

$$\mathbf{K} = \mathbf{E}^f \tilde{\mathbf{P}}^a (\mathbf{H}\mathbf{E}^f)^\top \mathbf{R}^{-1} \quad (6.4.24)$$

のように求められ (6.3.32) 式も参照) これを用いて解析アンサンブル平均が計算できる。

LETKF では、計算の効率化のため \mathbf{K} を直接計算せず、

$$\tilde{\mathbf{P}}^a (\mathbf{H}\mathbf{E}^f)^\top \mathbf{R}^{-1} \mathbf{d} \quad (6.4.25)$$

という m 次元ベクトルを $m \times m$ 行列 $(\tilde{\mathbf{P}}^a)^{1/2}$ の各列に足して得られる \mathbf{W} を先に計算する。最後に、

$$\mathbf{E}^f \mathbf{W} \quad (6.4.26)$$

により、解析アンサンブルを得る。こうすることで、 $N \times m$ 行列 \mathbf{E}^f を乗じる回数を 1 回ですむようにしており、さらに N 次元のアンサンブル平均に摂動を足すプロセスを不要にしている。 N は local patch 内の状態変数の次元であり、通常 m に比べて大きいため、 \mathbf{E}^f の乗算や N 次元ベクトルの加算にかかる計算量は大きい。これら計算量の大きな計算を省略することで、LEKF に比べ計算が効率化される。LETKF は LEKF と比べ数倍程度の速度向上が報告されており (Kalnay and Harlim, 私信; Miyoshi and Yamane, 私信)、前処理や後処理を含めた解析システム全体の計算時間としても 2 倍程度の速度向上が期待される。LETKF は、LEKF の並列計算効率性に加えさらなる計算効率を求めたものであり、現業利用に適したアルゴリズムだと言える。

6.4.5 観測誤差共分散の局所化

LEKF 及び LETKF (以下、単に LEKF と呼ぶ) では、local patch をとり、local patch 外との誤差相関を 0 とする局所化を内在している。しかし、この局所化は、local patch 内はおしなべて 1 であるのに、外に出たとたん 0 となるような、不自然な階段関数を使ったものと同様である。そこで Miyoshi et al. (2005) は、LEKF でも第 6.4.2 項で述べたような任意の関数を用いた Schur product で局所化を行う方法を導入した。

LEKF を局所化する際は、予報誤差共分散 \mathbf{P}^f を局所化する代わりに、観測誤差共分散 \mathbf{R} を \mathbf{P}^f の重みの

逆数を使って局所化する。例えば、予報誤差を遠い点で小さくする代わりに観測誤差を大きくする、という局所化である。直感的には、予報誤差を小さくし観測の影響を小さくすることは、観測誤差を大きくすることによっても実現されることから理解できる。つまり、

$$\mathbf{K} = (\mathbf{S} \circ \mathbf{P}^f) \mathbf{H}^\top (\mathbf{H}(\mathbf{S} \circ \mathbf{P}^f) \mathbf{H}^\top + \mathbf{R})^{-1} \quad (6.4.27)$$

$$\approx \mathbf{P}^f \mathbf{H}^\top (\mathbf{H}\mathbf{P}^f \mathbf{H}^\top + (\mathbf{S}^{-1} \circ \mathbf{R}))^{-1} \quad (6.4.28)$$

のように、予報誤差に重みをかけることは、観測誤差にその逆数をかけることと同等である。逆数の存在が必要なので、 \mathbf{P} の局所化で重みが 0 となるような、第 6.4.2 項で導入した 5 次方程式 (6.4.5) のような関数は使えない。ガウス関数を使った場合、観測誤差共分散 \mathbf{R} の値を、

$$\mathbf{R} \leftarrow \mathbf{R} \times \exp\left(\frac{d^2}{2\sigma^2}\right) \quad (6.4.29)$$

のように置き換える。ここで、 d は観測点と local patch の中心点の距離、 σ は相関距離パラメータを表す。

後で示すように、この局所化により、LEKF の性能が向上し、Serial EnSRF と同等の性能を示すようになる。LEKF 実装の際は、この局所化の技術を適用するのがよい。この局所化を、observational error covariance localization (または単に observation localization) と呼ぶ。

6.4.6 共分散膨張

KF を非線形系に適用すると、そのままではうまくいかない。KF によって見積もられる誤差共分散が小さくなりすぎ (underestimation)、観測の情報があまり入らなくなり、これをサイクルプロセスで繰り返すことで、だんだんと現実から離れ、誤差が発散してしまう (filter divergence)。この原因ははっきりとは調べられていないが、線形理論である KF を非線形系に適用することによる誤差や、EnKF の場合は少ないサンプルによる共分散の見積もり誤差など、理論における仮定が満たされない部分に起因するものである。原因はさておき、実際問題として KF がうまく働かないことは、KF を試してみれば誰もが経験する。

Filter divergence は共分散が小さく見積もられてしまうことで引き起こされるため、これを解決するには共分散を大きくすればよい。具体的には、誤差共分散の予報方程式 (6.3.18)

$$\mathbf{P}_i^f = \mathbf{M}\mathbf{P}_{i-1}^a \mathbf{M}^\top + \mathbf{Q} \quad (6.4.30)$$

におけるモデルのランダム誤差に起因する項 \mathbf{Q} に相当するものを考慮し、共分散を大きくする。理論的には、KF の導出過程で現れる \mathbf{Q} は、モデルのランダム誤差に起因する共分散である。第 6.3.2 項の解説では、モデルにランダム誤差はないと仮定し、この存在は無視してきた。ここで考慮する \mathbf{Q} は、必ずしもモデルの

ランダム誤差に起因するものではない。実用上 KF が動作するための必要に迫られ、その原因は何であれ、対症療法的に考慮するというものである。このため、 Q として具体的にどのようなものを与えればよいかというのは自明ではない。よく用いられるのは、1 よりほんの少し大きい値をかけて大きくする、共分散膨張 (covariance inflation) と呼ばれる方法である。具体的には、 δ を小さな正の値として、

$$P_i^f = (1 + \delta)MP_{i-1}^a M^T \quad (6.4.31)$$

とする。これにより、見積もられる予報誤差共分散を少し大きくすることになる。この方法は、

$$Q = \delta P_i^f \quad (6.4.32)$$

として Q の項を導入することと同等である。この方法は積をとることから、multiplicative covariance inflation と呼ばれる。この方法は、安定してあらゆる場合に適用可能である。

異なる方法として、各アンサンブルメンバーに小さなランダム誤差ベクトルを足す方法もある。ランダム誤差ベクトルの共分散は、乱数の分布関数により決まる。乱数が独立なガウス分布の場合、非対角成分は 0、対角成分はガウス分布の分散に一致する。ただし、これは無限にサンプルがある場合のことで、限られた数のアンサンブルメンバーで実現される場合は、当然サンプリングエラーを伴う。この方法は、Breeding 法の誤差摂動ベクトル生成過程で、Breeding サイクルのリスケーリングのプロセスで非常に小さなランダム誤差ベクトルを足しこむことが、性質のよい Bred Vector (BV) を得るのに有益であるという事実に基づく。実際、Miyoshi and Kalnay (2005b) は、Lorenz の 40 変数モデル (Lorenz 1996; Lorenz and Emanuel 1998) を使って、ランダム誤差ベクトルを足しこんで作った BV が、何もしない BV では失われた高次の摂動シグナルを捕らえることを示している。これは、何もしない BV がサイクルを重ねるにつれて”古く”なっていくのを、ランダム誤差ベクトルを足しこむことで”若く”保つ効果があることを示している。このように、ランダム誤差ベクトルは、Breeding (育てる) 過程で失われてしまうシグナルを生み出すことから、これから育つ”種”に見立て、*stochastic seeding* (ランダムな種の植え付け) と呼んでいる。第 6.3.4 項で述べた SRF と Breeding の類似性を思い起こすと、SRF もサイクルを長く繰り返すことで”古く”なっていくことが想像され、*stochastic seeding* が有益であると期待される。実際、Corazza et al. (2003b) は、準地衡流チャネルモデルを使った 3 次元変分法のハイブリッド法 (BV の情報を 3 次元変分法の誤差共分散行列に部分的に取り込む手法) によるデータ同化実験で、*stochastic seeding* が 3 次元変分法を安定化させ、性能向上に寄与することを確かめている。Miyoshi (2005) も、低解像度の全球プリミティブ

方程式モデルで、*stochastic seeding* が EnKF の性能向上に寄与することを確かめた。

本項の最後に、LEKF で適用できる *enhanced variance inflation* (Ott et al. 2004) を紹介する。この方法では、主成分方向に展開された *hat space* 上で、解析誤差共分散 \hat{P}^a のトレースに比例する値を \hat{P}^a の対角成分のみに足しこむ。

$$\hat{P}^a \leftarrow \hat{P}^a + \frac{\delta \times \text{trace}(\hat{P}^a)}{r} \mathbf{I} \quad (6.4.33)$$

ここで、 δ は小さな正の値、 r は \hat{P}^a のランクである。膨張の大きさを解析誤差共分散 \hat{P}^a に比例させることで、誤差が大きいときは大きな、小さいときは小さな膨張を与えることになる¹⁸。誤差が大きいときには観測の情報をより多く与える必要があるため、このような取り扱いはフィルタの安定化に寄与する。この方法は、先の積をとる (multiplicative) 方法に対して、足しこむことから、additive covariance inflation¹⁹ と呼ばれることもある。この手法は Lorenz の 40 変数モデルではうまくいくことが確かめられたが (Ott et al. 2004)、実際の大気モデルに適用してうまくいった例はこれまでのところ報告されておらず、実際の場合への適用可能性については疑問もある。

6.4.7 共分散膨張の動的推定法

前項で述べた共分散膨張の導入により、膨張の大きさのパラメータ δ を決める必要がある。これはコントロールパラメータの一つであり、チューニングにより決定する必要がある。Miyoshi and Kalnay (2005a) は、このパラメータを動的に推定する手法を考案した。これにより、このチューニングは不要となり、開発コストの大幅な削減に貢献する。

EnKF がどれほど予報誤差を小さく見積もっているかは、以下の統計でわかる。

$$\langle \mathbf{d} \mathbf{d}^T \rangle = (1 + \delta) \mathbf{H} P^f \mathbf{H}^T + \mathbf{R} \quad (6.4.34)$$

ここで、 $\mathbf{d} (= \mathbf{y}^o - \mathbf{H} \mathbf{x}^f)$ は、観測値と予報値の差 (D 値) からなるベクトルである。 δ を決めるのに、サンプリングエラーの大きい非対角成分を使うのは賢明でない。このため、 δ を見積もるのに、(6.4.34) 式のトレース和を使う。すなわち、観測点での D 値の 2 乗が、アンサンブルの分散と観測誤差の和に等しいという関係になる。このことは、D 値が、観測誤差と予報誤差の双方を含むことを考慮すれば、理解できる。

$$\mathbf{d} = \mathbf{y}^o - \mathbf{H} \mathbf{x}^f \quad (6.4.35)$$

$$= (\mathbf{y}^o - \mathbf{H} \mathbf{x}^t) - (\mathbf{H} \mathbf{x}^f - \mathbf{H} \mathbf{x}^t) \quad (6.4.36)$$

$$\approx \delta \mathbf{y}^o - \mathbf{H} \delta \mathbf{x}^f \quad (6.4.37)$$

¹⁸ multiplicative inflation では、自ずと誤差の大きさに比例した膨張を与えている。

¹⁹ *hat space* では対角成分 (variance) のみ膨張させているが、物理空間では主成分方向全体に膨張させているため、covariance inflation と呼ぶのが適当である。

トレース和は、時間及び空間的に局所化できる。空間的に局所化することで、場所に依存した共分散膨張を得ることが可能である。実際に統計を計算する際は、アプリケーションにおける MOS (Model Output Statistics) のように、長期間の統計を使って、オフラインで δ を計算することもできる。こうすることで、その統計期間（及び空間的な場所）における尤もらしい一定値を得ることができる。

一方、一時刻での統計を使って、その時刻の δ の推定値を得られる。一時刻での統計には、サンプル数（観測点数）が少ないと、サンプリングエラーが大きくなり、非現実的な値を得ることがある。このため、実用上、 δ の上限及び下限値を定め、統計による推定がこれを超えた場合は、上下限値を指定するなどの取り扱いが必要である。一時刻の統計で見積もり、これに上下限を課して得られた δ をその時刻での観測とみなすことにより、アプリケーションにおける KF のように、KF を使って動的に推定することもできる。これにより、時間変動する δ を使うことになる。すなわち、 δ の予報解析サイクルを以下のように構築する。

$$\delta_i^a = \frac{\delta_i^b v_i^o + \delta_i^o v_i^b}{v_i^b + v_i^o} \quad (6.4.38)$$

$$v_i^a = \left(1 - \frac{v_i^b}{v_i^b + v_i^o}\right) v_i^b \quad (6.4.39)$$

$$\delta_{i+1}^b = \delta_i^a \quad (6.4.40)$$

$$v_{i+1}^b = (1 + \Delta) v_i^a \quad (6.4.41)$$

ここで、 v は δ の推定誤差の分散を表す。予測方程式では、 δ については単位行列のモデル (persistence)、誤差分散 v には Δ による誤差の膨張を考慮している。この KF のプロセスで、新たなコントロールパラメータ v_o 及び Δ が生じている。このチューニングが必要となれば、このような動的推定を適用する意味はない。しかし、Miyoshi and Kalnay (2005a) が示したように、この推定プロセスはこれら新たなコントロールパラメータの値にはほとんど依存せず、チューニングは不要である。例えば、 $v^o = 0.21$ 、 $\Delta = 0.03$ といった値を指定すればよい²⁰。Miyoshi (2005) は、この手法を適用することでフィルタが安定化することを示し、アンサンブル・スプレッドの大きさが真の誤差の大きさに近づくことを確認した。アンサンブル・スプレッドは、アンサンブルにより見積もられた誤差の大きさを表すと解釈できるから、適当な大きさの共分散膨張を行うことで、アンサンブルが適当な大きさの誤差を持つように調整されたと言える。

²⁰ Miyoshi and Kalnay (2005a) の Lorenz-96 モデルを用いた調査によると、数桁にわたるレンジで v^o や Δ の値を変えても結果に影響がない。しかし、無用な心配を避けるためにも、 $v^o = 0.21$ や $\Delta = 0.03$ といった無難な値の採用が望ましいだろう。

6.4.8 4次元アンサンブル・カルマンフィルタ

第 6.3.3 項で述べたように、4D-Var は非定時の観測をその時刻のものとして扱うことができる。衛星データやレーダーなど非定時の観測が増加の一途をたどる昨今、このように多くの観測データを適切に扱うことは不可欠である。EnKF は、本来時刻を固定したデータ同化手法で、逐次的に観測データを扱う場合などは、観測があった時刻毎に同化する必要がある。しかし、観測が入るたびに同化するというのは、システム構築上簡単ではない上、計算コストも必要とされる。そこで、*Hunt et al. (2004)* は、EnKF で同化時刻とは異なる時刻の観測データを適切に同化する 4D-EnKF を提唱した。

EnKF は、アンサンブル摂動の張る空間内で解析インクリメントを作る。解析値は予報アンサンブルの線形結合で表されるが、この結合係数が、同じ解析においては、異なる時刻でも一定となる。このことは、以下のように理解できる。各アンサンブルメンバーは、モデルにより時間発展し、各時刻で異なる状態を持つ。アンサンブルの線形結合で実現される解析値は、結合係数を一定とすることで、モデルの時間発展を陽に計算することなく、その異なる時刻での状態を得ることができる。

この考え方に基づき、4D-EnKF では、時刻 i におけるデータ同化の際、異なる時刻 j の観測に対する観測演算子を、

$$HE_j(\mathbf{E}_i^\top \mathbf{E}_i)^{-1} \mathbf{E}_i^\top \quad (6.4.42)$$

に置き換えて扱う。ここでの記号 \mathbf{E} はこれまでとは違い、摂動成分ではなく、アンサンブルメンバーそのものを各列に持つ行列である。このようにして、アンサンブル予報以外にモデルの時間発展を行わずに、その時刻でのアンサンブルがあれば、いかなる時刻の観測も扱えるようになる。これにより、4D-Var 特有の利点と考えられていた非定時観測の扱いについても、EnKF は不利とはならない。*Hunt et al. (2004)* は、Lorenz の 40 変数モデルを使って、4D-EnKF が期待通りの働きをすることを確かめている。

この定式化では、観測時刻 j が解析時刻 i の先か後かは仮定していない。未来の観測があればこれを同化することももちろん可能で、擬似的にスムーザ²¹を実現できる。通常未来の観測は得られないが、オフラインで行う再解析などの場合は未来の観測を使うことができる。スムーザがフィルタよりもよい結果を与えることは当然である。再解析においては、この技術がスムーザとしての役割を果たし、よりよい再解析値を得るのに重要な役割を果たし得る。ただし、カオス力学系の常として、観測時刻 j と解析時刻 i の差は、非線

²¹ スムーザ (smoother) は、過去から現在に加え、未来の観測を使う場合をいう。フィルタ (filter) は、過去から現在までの観測を使う場合をいう。

形の影響が無視できるだけ小さい必要がある。データ同化が時間方向にデータを積み重ねていくことを述べた際、カオス力学系は過去を忘れるため無限に積み重ねることはできないことは既に述べた。

6.5 適用例

前節で、EnKF を実際に実装する際の技術について、詳細に述べた。本節では、Lorenz の 40 変数モデル (Lorenz 1996; Lorenz and Emanuel 1998) と SPEEDY モデル (Molteni 2003) に適用した場合の EnKF のパフォーマンスを簡単に紹介する。本節で述べる内容の詳細は、Miyoshi (2005) にあるので、適宜参照していただきたい。

6.5.1 Lorenz の 40 変数モデルへの適用

これまで何度か出てきた Lorenz の 40 変数モデルは、以下のようなものである。

$$\frac{dx_i}{dt} = x_{i-1}(x_{i+1} - x_{i-2}) - x_i + F \quad (6.5.1)$$

添字 $i = 1, \dots, N$ は格子点を表し、右辺第一項は移流項、 F は forcing に相当する。周期境界条件 ($x_{-1} = x_{N-1}, x_0 = x_N, x_1 = x_{N+1}$) を適用して、 i を経度方向の格子点と見立てることができる。このモデルの振る舞いは chaotic であり、 $N = 40, F = 8$ とした場合、誤差成長速度の観点から、時間 0.2 (次元なし) が 1 日に相当することが知られている。Lorenz (1996) と同様、4 次の Runge-Kutta 法で時間積分し、差分時間 $\Delta t = 0.01$ とした。

構築したデータ同化システムは、第 6.4 項で述べた Serial EnSRF と LEKF である。比較のため、3D-Var も構築した。この低次元のモデルの場合、 40×40 行列をそのまま持ち逆行列を計算することは容易にできるから、3D-Var といっても OI と同じ方程式 (6.3.46) を直接解くものである。観測は格子点上に分布すると仮定したため、観測演算子は線形で、3D-Var と OI は同じものとなる。3D-Var の背景誤差共分散は、長期間のサンプルを用いた NMC 法 (Parrish and Derber 1992) により見積もった。データ同化サイクル実験は、OSSE (Observing Systems Simulation Experiment) に基づき行った。真の状態を同じモデルで作成し、これにガウス分布するランダム誤差を加えて、観測値を生成、同化する。観測誤差の標準偏差は 1.0 とした。

観測点を格子点の半数の 20 点とした場合、3D-Var は、解析値の誤差平方根平均 2 乗誤差 (Root Mean Square Error: RMSE) 1.15 を示した。データ同化を行わない 2 つの自然ランの差は、6.7 程度であるから、3D-Var が良く働いていることがわかる。EnKF の結果を示したのが図 6.5.1 である。3D-Var と比べると 0.3 程度と格段に良く、2 つの EnKF の手法の間には、それほど差はない。しかし、等値線を見比べると、下の

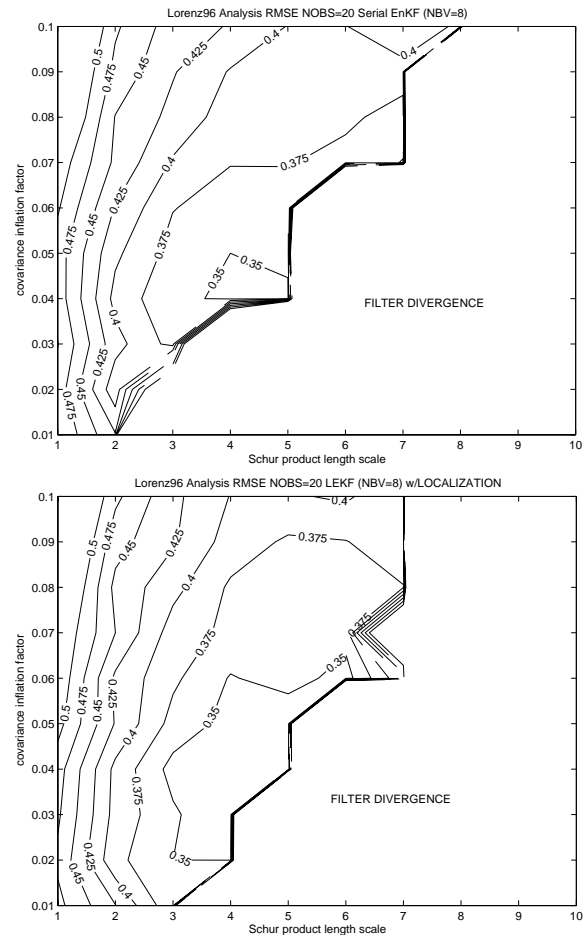


図 6.5.1 40 格子点のうち 20 点を観測し、アンサンブルメンバー数を 8 としたときの Lorenz モデルでの EnKF の解析 RMSE。縦軸は共分散膨張パラメータ、横軸は局所化パラメータを示す。上が Serial EnSRF (最小値は 0.34)、下が LEKF (最小値は 0.33) を表す。“FILTER DIVERGENCE”と書かれている領域は、誤差が発散しフィルタがうまく働かない領域を表す。

LEKF の方が大きな面積を囲っている分、優れていると言える。

6.5.2 全球プリミティブ方程式モデル (SPEEDY) への適用

SPEEDY モデルは、Molteni (2003) により開発された、非常に速い全球プリミティブ方程式モデルである²²。非常に速いのは、物理過程を単純化しているためであるが、単純化しているといっても基本的なプロセスは網羅しており、現実的な全球予報ができる。解像度は T30L7 と非常に粗いが、Molteni (2003) に示されているように、大気大循環をそれなりに再現する。精度は現業モデルのようなより現実的なモデルに劣るが、Molteni (2003) は、誤差の性質が現業モデルと似ている点にも言及している。

²² 6 時間予報に、Celeron 2.53GHz の PC で、2 秒程度の計算時間を要する。

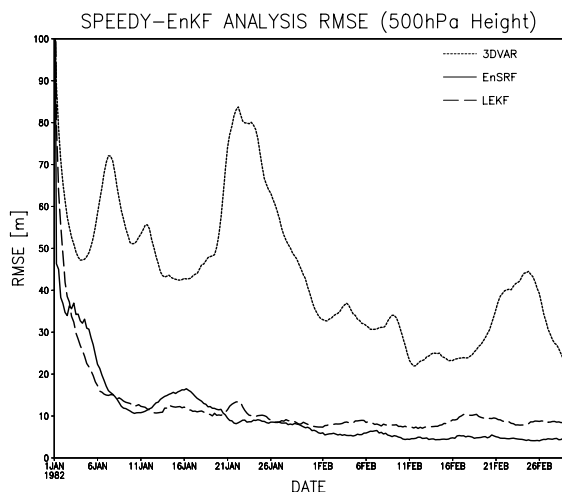


図 6.5.2 3D-Var (点線)、Serial EnSRF (実線)、LEKF (破線) の SPEEDY モデルでの解析 RMSE (500hPa 高度場) の時間変動。横軸は、同化サイクルを始めた 1 月 1 日から 2 月 28 日までの時刻、縦軸は RMSE の大きさをメートルでそれぞれ表す。アンサンブルメンバー数は 30 とした。

表 6.5.1 SPEEDY モデルでの EnKF の成績 (500hPa 高度場の解析 RMSE [m])

メンバー数	Serial EnSRF	LEKF
10	9.2	10.7
20	5.7	4.6
30	4.0	3.9
40	3.5	3.9

実験の詳細は Miyoshi (2005) に譲るとして、早速主な結果を示そう。観測点は格子点空間で一様にとり、16 点ごとに 1 点 (全格子点の約 6%)、時間方向には 6 時間間隔という割合で与えた。観測誤差の標準偏差は、風は東西・南北成分とも 1m/s、気温は 1K、地上気圧は 1hPa、比湿は 0.1g/kg とした。2ヶ月分の予報解析サイクルを計算し後半 1ヶ月の平均を取って、解析 RMSE を計算した。解析 RMSE は、数値予報精度の指標として標準的に用いられる 500hPa 高度場で示す。図 6.5.2 に解析 RMSE の時間変動を示す。Serial EnSRF、LEKF と同様に、3D-Var を大きく上回る。この図は、LEKF に観測誤差共分散の局所化を適用していない場合で、後半一ヶ月は多少 Serial EnSRF に劣るように見えるが、局所化を適用すると同等の結果が得られる。後半一ヶ月の平均値で示すと、3D-Var は 31m であるのに対し、EnKF は、表 6.5.1 に示すようになる。ここで、共分散膨張パラメータは動的推定し、局所化パラメータはチューニングして最良の結果を求めた。Serial EnSRF と LEKF の間には有意な差は見られず、3D-Var を大きく上回っている。

最後に、5 日予報の結果を図 6.5.3 に示す。Serial En-

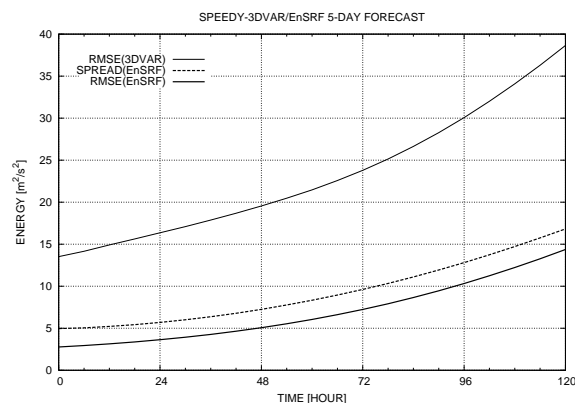


図 6.5.3 3D-Var (細実線) 及び Serial EnSRF (太実線) の SPEEDY モデルでの 5 日予報における解析及び予報 RMSE (エネルギーノルム $[m^2/s^2]$)。横軸は予報時間 (0 ~ 120 時間)、縦軸は RMSE の大きさをメートルでそれぞれ表す。Serial EnSRF については、アンサンブル・スプレッドも示した (太点線)。

SRF の 5 日予報誤差が、3D-Var の解析誤差とほぼ等しくなっており、EnKF が 3D-Var と比べていかに優れているかが一目瞭然である。EnKF のアンサンブル・スプレッドと RMSE を見比べると、両者は平行しており、ほぼ同じ誤差成長率を持っている。これは、真の誤差と、EnKF のアンサンブル摂動が、同じような成長率を持つことを意味する。つまり、EnKF によって捕らえられているアンサンブル摂動は、真の誤差と似た性質を持っており、摂動生成法としても優れていると言える。なお、この図でアンサンブル・スプレッドが RMSE より少し大きいのは、大きめの共分散膨張パラメータを使っているために、共分散が本来より大きく見積もられているためである。共分散膨張パラメータの動的推定を適用すると、スプレッドの大きさが調整され、この二つの線が重なる。

6.6 まとめ

EnKF は、アンサンブル予報システムとデータ同化システムの相補的關係に着目し、この二つのシステムを融合するものである。本章では、EnKF の理論的背景、概念から、実際に実装する際の技術まで網羅的に解説した。さらに、簡単なモデルを用いた適用例を示し、理想的な条件下では EnKF が非常に良く働くことも示した。本節では、これまで培った知見に基づいて、EnKF の利点と問題点について考察し、今後の可能性について探りたい。

6.6.1 利点と問題点

前節まででも、折に触れて EnKF の利点に言及したが、実用上特に重要なものは、以下の通りである。

- 完全に流れに依存した誤差共分散が、データ同化及びアンサンブル摂動生成に反映され、理想的な

アンサンブル予報解析サイクルを構成する。

- 接線形モデルやアジョイントモデルが不要のため、維持開発コストが大幅に削減され、頻繁に改良・更新されるモデルが即座に解析に反映できる。
- 非線形の観測演算子について、接線形コードやアジョイントコードが不要であり、新たな観測導入などの際の開発コストの削減、迅速化が可能となる。
- EnKF のアンサンブル摂動は、プラス・マイナスのペアではなく、 m メンバーあれば $m-1$ 次元の空間を張ることができるものであり、従来のプラス・マイナスペアの手法より約 2 倍程度自由度の大きな空間を張る。

これらの利点は非常に大きく、アジョイントモデルが不要である点だけをとっても、同程度の成績を出すのであれば、4D-Var の代替法となりうるほどのものである。さらに、今後モデルの性能が向上するにつれ、モデル誤差が小さくなり、誤差共分散を陽に予報する KF が有利になると想像される²³。

問題点についても、前節まで折に触れて言及したが、例えば非定時観測の利用は 4D-EnKF により解決された。未だ解決し得ない問題点を挙げると、以下の通りである。

- モデルに誤差があると、これを使って見積もられる誤差共分散の情報に誤差が積み重ねられる。
- SV はノルムをある特定の領域や変数などでターゲットできるが、EnKF はこれができない。台風アンサンブルなど、領域や変数をターゲットしたアンサンブル予報をしたい場合に不利にならないか。
- 降水量の観測や 10 分間平均風速など、時間積分量の観測の同化法が自明でない。

モデル誤差の問題については、まずはバイアスの問題がある。バイアスを完全に除いたとしても、誤差共分散に影響を与えるモデル誤差の二次モーメントの問題が残る。モデルバイアスについては、Dee and da Silva (1998) による推定法、またその低次元のもの (Danforth et al. 2005) により、ある程度は推定されうると調べられている (Miyoshi 2005)。しかし、実際の解像度で実際の観測を用いた場合の適用可能性などについて、更なる研究が必要である。その上、二次モーメントについては、推定する以前の問題として、その大きさ及び影響すら未知である。

領域や変数をターゲットしたアンサンブル予報については、BV が根本的に孕む問題である。しかし、大

きく誤差が成長するアンサンブルが必ずしもよいわけではなく、現実的に可能なばらつき方をしたアンサンブルが意味を持つと考えることで、EnKF には別の利点があるとも考えられる。すべてのアンサンブルメンバーが同じ重みを持ち、データ同化の影響も考慮した現実的なばらつきを持つアンサンブルのほうが、より現実的な台風アンサンブルを実現する可能性もある。例えば精度のよい観測が多数ある場所に大きな振幅を持つような成長モードがあるとしても、データ同化により抑えられている誤差を不用意に大きく見積もったモードをアンサンブルに含める必要はないと考えるのである。これにより、大きな予報円を自信を持って小さくできるなど、利点が生じるものとも想像される。しかしこれらの議論は想像の域を出るものではなく、より明確な議論をするには、実際に EnKF を用いた台風アンサンブルなどの研究、調査が必要である。

時間積分量の観測の同化については、4D-Var は時間方向に積分した観測演算子を使うことが可能である。4D-EnKF は、異なる時刻の瞬間値の同化には有効だが、時間方向に積分する仕組みは持っていない。観測量に相当するものを予報から作り出すことで、見かけの状態変数の次元を増やす方法 (augmentation) が知られている。この方法により、異なる時刻の観測ばかりでなく、時間積分量の観測も状態変数に追加することができるが、時刻が異なると主に移流の効果により局所化の扱い方が自明でなくなる。力学スキームにおけるセミラグランジュ法のように、上流点を求め、このまわりに局所化するなどの工夫が必要になるかもしれない。このように、時間積分量の同化は今後の課題の一つで、時間積分量の観測でインパクトが大きいものがあれば、避けては通れない課題となる。

6.6.2 今後の課題と展望

今後考えられる課題は、以下の通りである。一部前節で述べた問題点とも関連する。

- 高解像度全球モデルへの適用
- 実際の観測データの使用
- モデル誤差推定法の適用可能性調査
- メソ領域モデルへの適用
- アンサンブル予報プロダクトの性質という観点からの性能調査

● ターゲット観測 (targeted observation) への有用性
まず、現業モデル並の高解像度の全球モデルに適用することがあげられる。これまでの研究では、理想的な Lorenz モデルのようなモデルや、T63 程度の低解像度の全球モデルに適用したものが多く、T213 を超える現業モデル並の解像度で適用した場合に、どの程度のアンサンブルメンバーが必要かなどは、自明でない。現象に特有の自由度があれば、モデルの解像度によらず、アンサンブルメンバーの数が決まるかもしれない。一方で、モデルの解像度が高まれば、その分 EnKF に必

²³ 4D-Var はタイムウィンドウの始めの背景誤差共分散を多くの仮定の下、非常に単純な形状に縮退させる。一方 EnKF は局所化以外の仮定はおかないため、EnKF の方が流れに依存した誤差共分散の形状を表現する。実際、Yang et al. (2005) は完全モデルを仮定して準地衡流チャネルモデルを使った 4D-Var と EnKF の比較実験を行い、EnKF の優位性を確かめている。4D-Var のタイムウィンドウが十分長く、タイムウィンドウ始めの背景誤差共分散の影響がなくなった場合は、この点での EnKF の優位性は明らかではなくなる。

要なメンバー数が増加すると考えるのも自然である。この点について調査する必要がある。

次に、実際の観測データを使用することがあげられる。これまでの研究では、モデルの完全性を仮定した研究が多い。実際の観測データを適用した数少ない研究では、カナダのグループが、3D-Var と同程度の性能しか得られないという結果を得ている (Houtekamer et al. 2005)。ただ、彼らの手法では、モデル誤差に起因する項として、統計的なアンサンブル摂動をサイクル毎に足しこむことをしており、彼らのアンサンブル摂動は成長しないことが分かっている。このような点からも、彼らの手法が最善の EnKF とは考えにくい。ごく最近、Whitaker and Hamill (2005) によって、NCEP の全球モデルを用いて、実際の観測データを適用し、3D-Var を上回る結果が得られている。このほか、実際の観測データを用いるとモデルの誤差も問題となり、モデル誤差に敏感な EnKF がうまく働く保証はない。実際の観測を使用してモデル誤差を含む場合には、モデル誤差の推定法が適用可能かどうか、研究が必要である。

実用に向けて、メソ領域モデルへの適用や、アンサンブル予報プロダクトの性質など、ほかにも重要な研究課題がある。このほか、ターゲット観測については、SV 法を応用した予報の感度試験について第 4.2 節の SV 法の解説でも述べられている。EnKF を使うと、解析への感度試験を行うことが可能で、最も解析誤差を小さくするようなターゲット観測を支援することができる。ターゲット観測により効率的に解析誤差を小さくし、この情報を引き継いだサイクルプロセスを重ねていけることが、EnKF におけるターゲット観測の利点である。EnKF をターゲット観測に応用する試みは、例えば Liu et al. (2005) により単純なモデルを用いた研究がなされているなど黎明期であり、今後の研究に期待される。

EnKF は、これまでは理論的に一意ではない SRF の様々な解き方が個別に提案され、いわば群雄割拠の相を成していたが、最近はそのも収束しつつある。基本的な技術への理解は固まりつつあり、Houtekamer et al. (2005) や Whitaker and Hamill (2005) が結果を発表しているように、実際の観測データを適用する段階まで来ている。今後、現実化を視野に入れた開発も近いものと想像される。ただ、ECMWF に代表されるように、世界の多くの数値予報センターでは、4D-Var を運用し、すばらしい成果が得られている。今後しばらくの間は、どちらがよいか結論付けることは難しい。このため、4D-Var を維持し、改良を重ねつつも、EnKF の研究の最先端を見失わず、双方の開発を同時並行して行い、常に最良の技術を適用できるような準備を進めておくことが肝要である。

参考文献

- Anderson, J. L., 2001: An Ensemble Adjustment Kalman Filter for Data Assimilation. *Mon. Wea. Rev.*, **129**, 2884-2903.
- Andrews, A., 1968: A square root formulation of the Kalman covariance equations. *AIAA J.*, **6**, 1165-1168.
- Bishop, C. H., B. J. Etherton, and S. J. Majumdar, 2001: Adaptive Sampling with Ensemble Transform Kalman Filter. Part I: Theoretical Aspects. *Mon. Wea. Rev.*, **129**, 420-436.
- Bouttier, F. and P. Courtier, 1999: *Data assimilation concepts and methods*. Meteorological Training Course Lecture Series, ECMWF, 75pp.
- Burgers, G., P. J. van Leeuwen, and G. Evensen, 1998: Analysis Scheme in the Ensemble Kalman Filter. *Mon. Wea. Rev.*, **126**, 1719-1724.
- Cane, M. A., A. Kaplan, R. N. Miller, B. Tang, E. C. Hackert, and A. J. Busalacchi, 1996: Mapping tropical Pacific sea level: Data assimilation via a reduced state space Kalman filter. *J. Geophys. Res.*, **101**(C10), 22,599-22,617.
- Corazza, M., E. Kalnay, D. J. Patil, S.-C. Yang, R. Morss, M. Cai, I. Szunyogh, B. R. Hunt, and J. A. Yorke, 2003a: Use of the breeding technique to estimate the structure of the analysis "errors of the day". *Nonlinear Proc. Geo.*, **10**, 1-11.
- Corazza, M., E. Kalnay, D. J. Patil, I. Szunyogh, and S.-C. Yang, 2003b: Keeping the bred vectors young: Impact on data assimilation. The presentation file available at <http://www.atmos.umd.edu/~ekalnay/>.
- Danforth, C., E. Kalnay, and T. Miyoshi, 2005: Estimating and Correcting Global Weather Model Error. submitted.
- Dee, D. P., 1995: On-line Estimation of Error Covariance Parameters for Atmospheric Data Assimilation. *Mon. Wea. Rev.*, **123**, 1128-1145.
- Dee, D. P. and A. M. da Silva, 1998: Data assimilation in the presence of forecast bias. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **126**, 269-295.
- Evensen, G., 1994: Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using Monte Carlo methods to forecast error statistics. *J. Geophys. Res.*, **99** (C5), 10143-10162.
- Evensen, G., 2003: The Ensemble Kalman Filter: theoretical formulation and practical implementation. *Ocean Dynamics*, **53**, 343-367.
- Fukumori I. and P. Malanotte-Rizzoli, 1995: An approximate Kalman filter for ocean data assimilation: An example with an idealized Guls Stream model. *J. Geophys. Res.*, **100** (C4), 6777-6793.

- Gaspari, G. and S. E. Cohn, 1999: Construction of correlation functions in two and three dimensions. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **125**, 723-757.
- Gelb, A., J. F. Kasper, R. A. Nash, C. F. Price, and A. A. Sutherland, 1974: *Applied Optimal Estimation*. The M.I.T. Press, 374pp.
- Hamill, T. M. and C. Snyder, 2000: A Hybrid Ensemble Kalman Filter-3D Variational Analysis Scheme. *Mon. Wea. Rev.*, **128**, 2905-2919.
- Hamill, T. M., J. S. Whitaker, and C. Snyder, 2001: Distance-Dependent Filtering of Background Error Covariance Estimates in an Ensemble Kalman Filter. *Mon. Wea. Rev.*, **129**, 2776-2790.
- Harlim, J. and B. R. Hunt, 2005: A local ensemble transform Kalman filter: an efficient scheme for assimilating atmospheric data, preprint.
- Houtekamer, P. L. and H. L. Mitchell, 1998: Data Assimilation Using an Ensemble Kalman Filter Technique. *Mon. Wea. Rev.*, **126**, 796-811.
- Houtekamer, P. L., H. L. Mitchell, G. Pellerin, M. Buehner, M. Charron, L. Spacek, and B. Hansen, 2005: Atmospheric Data Assimilation with an Ensemble Kalman Filter: Results with Real Observations. *Mon. Wea. Rev.*, **133**, 604-620.
- Hunt, B. R., E. Kalnay, E. J. Kostelich, E. Ott, D. J. Patil, T. Sauer, I. Szunyogh, J. A. Yorke, and A. V. Zimin, 2004: Four-dimensional ensemble Kalman filtering. *Tellus*, **56A**, 273-277.
- Hunt, B. R., 2005: Efficient Data Assimilation for Spatiotemporal Chaos: a Local Ensemble Transform Kalman Filter. ArXiv:arc-ive/paper 0511236, <http://arxiv.org/abs/physics/0511236>.
- Ide, K., P. Courtier, M. Ghil, and A. C. Lorenc, 1997: Unified notation for data assimilation: operational, sequential, and variational, *J. Meteor. Soc. Japan*, **75**, 181-189.
- Jazwinski, A. H., 1970: *Stochastic Processes and Filtering Theory*. Academic Press, 376pp.
- Kalman, R. E., 1960: A New Approach to Linear Filtering and Prediction Problems. *J. Basic Eng., Trans. ASME*, 35-45.
- Kalnay, E., 2003: *Atmospheric Modeling, Data Assimilation and Predictability*. Cambridge, 341pp.
- Kyouda, M. and S. Kusunoki, 2002: Ensemble Prediction System. Outline of the Operational Numerical Weather Prediction at the Japan Meteorological Agency, Appendix to WMO Numerical Weather Prediction Progress Report, 59-63.
- Liu, J., E. Kalnay, and T. Miyoshi, 2005: Adaptive observation strategies with the local ensemble transform Kalman filter. Proceeding for the AMS annual meeting 2006, 2.7.
- Lorenc, A. C., 2003: Relative merits of 4D-Var and Ensemble Kalman Filter. Proceedings on ECMWF annual seminar, Recent developments in data assimilation for atmosphere and ocean, 8-12 September 2003.
- Lorenz, E., 1996: Predictability - A problem partly solved. *Proc. Seminar on Predictability*, Reading, United Kingdom, ECMWF, 1-18.
- Lorenz, E. and K. Emanuel, 1998: Optimal sites for supplementary weather observations. *J. Atmos. Sci.*, **55**, 399-414.
- 三好建正, 2005: アンサンブル・カルマンフィルタ - データ同化とアンサンブル予報の接点-. *天気*, **52**, 93-104.
- Miyoshi, T., 2005: Ensemble Kalman filter experiments with a primitive-equation global model. Doctoral dissertation, University of Maryland, College Park, 197pp.
- Miyoshi, T. and E. Kalnay, 2005a: A technique to objectively estimate the covariance inflation parameter within ensemble Kalman filtering. unpublished manuscript.
- Miyoshi, T. and E. Kalnay, 2005b: Ensemble Forecasting using Orthogonalized and Stochastically Seeded Bred Vectors in the Lorenz-96 Model with Orography. in preparation.
- Miyoshi, T., E. Kalnay, and B. Hunt, 2005: Ensemble Kalman filter experiments with the Lorenz-96 model. in preparation.
- Molteni, F., 2003: Atmospheric simulations using a GCM with simplified physical parameterizations. I: model climatology and variability in multi-decadal experiments. *Clim. Dyn.*, **20**, 175-191.
- Ott, E., B. R. Hunt, I. Szunyogh, A. V. Zimin, E. J. Kostelich, M. Corazza, E. Kalnay, D. J. Patil, and J. A. Yorke, 2002: Exploiting local low dimensionality of the atmospheric dynamics for efficient Kalman filtering. ArXiv:arc-ive/paper 020358, <http://arxiv.org/abs/physics/020358>.
- Ott, E., B. R. Hunt, I. Szunyogh, A. V. Zimin, E. J. Kostelich, M. Corazza, E. Kalnay, D. J. Patil, and J. A. Yorke, 2004: A local ensemble Kalman filter for atmospheric data assimilation. *Tellus*, **56A**, 415-428.
- Patil, D. J., B. R. Hunt, E. Kalnay, J. A. Yorke, and E. Ott, 2001: Local Low Dimensionality of Atmospheric Dynamics. *Phys. Rev. Lett.*, 5878-5881.
- Tippett, M. K., J. L. Anderson, C. H. Bishop, T. M. Hamill, and J. S. Whitaker, 2003: Ensemble Square Root Filters. *Mon. Wea. Rev.*, **131**, 1485-1490.

- Toth, Z. and E. Kalnay, 1997: Ensemble forecasting at NCEP and the breeding method. *Mon. Wea. Rev.*, **127**, 3297-3319.
- Toth, Z. and M. Wei, 2003: A New Measure of Ensemble Performance: Perturbation versus Error Correlation Analysis (PECA). *Mon. Wea. Rev.*, **131**, 1549-1565.
- Trevisan, A. and F. Pancotti, 1998: Periodic Orbits, Lyapunov Vectors and Singular Vectors in the Lorenz System. *J. Atmos. Sci.*, **61**, 103-113.
- 露木義, 1997: 変分法によるデータ同化. 数値予報課報告・別冊第 43 号, 気象庁予報部, 102-165.
- Wang, X. and C. H. Bishop, 2003: A Comparison of Breeding and Ensemble Transform Kalman Filter Ensemble Forecast Schemes. *J. Atmos. Sci.*, **60**, 1140-1158.
- Wang, X., C. H. Bishop, S. J. Julier, 2004: Which Is Better, an Ensemble of Positive-Negative Pairs or a Centered Spherical Simplex Ensemble?. *Mon. Wea. Rev.*, **132**, 1590-1605.
- Whitaker, J. S. and T. M. Hamill, 2002: Ensemble Data Assimilation without Perturbed Observations. *Mon. Wea. Rev.*, **130**, 1913-1924.
- Whitaker, J. S. and T. M. Hamill, 2005: Ensemble Data Assimilation in the NCEP GFS. preprint.
- Yang, S-C., M. Corazza, A. Carrassi, E. Kalnay, and T. Miyoshi, 2005: Comparison of ensemble-based and variational-based data assimilation schemes in a quasi-geostrophic model. Proceeding for the AMS annual meeting 2006, 6.11.