

線型回帰問題としてのアンサンブル感度解析

Ensemble Sensitivity Analysis as a Linear Regression

中下 早織・榎本 剛

Saori NAKASHITA and Takeshi ENOMOTO

Synopsis

Ensemble sensitivity analysis, which aims to detect the source of a forecast error, can be framed as a multivariate linear regression problem between initial perturbations and a forecast metric. While previous studies have examined the differences between univariate and multivariate formulations, there has been limited research on the impact of multicollinearity. This study compares various regression algorithms for ensemble sensitivity analysis to determine the most accurate one for estimating a nonlinear response. Using a spatially one-dimensional toy model, our idealized experiments reveal that the choice of linear regression algorithm impacts the sensitivity gradients, especially with a larger ensemble size or a longer optimization time. For strongly nonlinear cases, the responses predicted by partial least squares regression with a large ensemble size were the most consistent with the measured changes in nonlinear perturbed forecasts, outperforming other algorithms, including traditional adjoint sensitivity analysis. These findings suggest that partial least squares regression is well-suited for sensitivity estimation when nonlinearity is significant. However, they also highlight the importance of mitigating sampling errors in sensitivity estimation.

キーワード：アンサンブル感度解析, 多変量線型回帰, 多重共線性

Keywords：ensemble sensitivity analysis, multivariate linear regression, multicollinearity

1. はじめに

アンサンブル感度解析は、アンサンブル予測のばらつきから予測誤差の要因となる予測初期の変数・領域を特定する解析手法である。線型化した数値モデルが必要となる従来の感度解析と比べて、アンサンブル感度解析はすでに計算されたアンサンブル予測データを用いて解析を行うことができるため、顕著現象の予測可能性研究に広く用いられている。

随伴法 (Hall et al. 1982) に基づいて導出されたアンサンブル感度解析 (以下、アンサンブル随伴感度解析) は、アンサンブル予測における予測指標と初期摂動の間の線型回帰問題に帰着し、得られる回帰係数が初期の基本場に対する予測指標の勾配 (感度) を表す (Gombos and Hansen 2008; Gombos et al. 2012)。

この線型回帰問題を解く際に最小二乗法を用いる場合、アンサンブル初期摂動から計算される誤差共分散の逆行列を求める必要がある。しかし、大抵の場合アンサンブル摂動から計算される共分散はフルランクでなく、逆行列が定義されない。そのため Ancell and Hakim (2007, 以下 AH07) は、共分散の対角成分 (分散) のみを用いる近似を提案した。この対角近似を用いるアンサンブル随伴感度解析は、総観規模の低気圧 (Torn and Hakim 2008) から対流システム (Ancell and Coleman 2022) まで幅広い時空間スケールを持つ現象に適用されている。また、Ito and Wu (2013) では熱帯低気圧の中心位置を予測指標とした同様の感度解析手法を導入し、熱帯低気圧の進路予測に影響を与える環境場の要因を特定できることを示した。

アンサンブル随伴感度解析における対角近似は広く用いられているが、線型回帰問題として考えると、得られる感度は単変量回帰の解となる。Hacker and Lei (2015, 以下 HL15) はこの点を問題視し、線型回帰問題の解として最小ノルム解を選択することで、多変量回帰としてのアンサンブル随伴感度解析を考案した。彼らは非線型予測において摂動を与えた場合の予測指標の変化（応答）を、線型感度解析でどの程度正しく推定できるのかを評価指標として、単変量回帰と多変量回帰の比較を行うことで、多重スケールの変動が存在する場合やモデルに誤差がある場合、観測が少ない場合に多変量回帰を用いた方が単変量回帰よりも非線型応答をよく表現できることを主張した。また、榎本ら (2014) および Enomoto et al. (2015, 以下 EYO15) では、予測指標の変化を最大にする初期摂動を、感度を介さずに直接求めるアンサンブル随伴感度解析を提案した。彼らの定式化は、初期摂動に課す制約をアンサンブル誤差共分散によって定義することで、HL15 の多変量回帰から得られる解と一致するため、多変量回帰とみなせる（第3節参照）。

線型回帰問題としてのアンサンブル随伴感度解析は、初期摂動の変数の数よりもアンサンブル数の方が少ないことが多いため、劣決定問題である。このような劣決定問題の解法として、最小ノルム解だけでなく、リッジ回帰を選択することもできる。また、劣決定の要因の一つとなる共線性の問題に注目すると、主成分回帰や部分的最小二乗回帰を用いることも望ましいと考えられる。しかし、これらの線型回帰問題の解法をアンサンブル随伴感度解析の枠組みで比較した研究はほとんどない。また、導出の元となった随伴感度解析とアンサンブル随伴感度解析を同じ条件下で比較した研究も限られている。そこで本研究では、予測誤差を指標とした感度解析における非線型応答の推定精度に着目して、随伴感度解析とアンサンブル随伴感度解析の比較を行う。線型回帰問題の解法がアンサンブル感度に与える影響を調べ、最も精度よく非線型応答を推定できる手法を明らかにすることを目的とする。

本論文の構成は以下の通りである。まず第2節で、随伴感度解析について簡潔に説明する。次に第3節で、本研究で比較するアンサンブル随伴感度解析と、手法間の関係について述べる。第4節で実験設定を示し、第5節で実験結果を示す。最後に第6節で全

体の議論とまとめを示す。

2. 随伴感度解析

随伴感度解析は、予測誤差の要因を調べたい現象を含む領域（以下、検証領域）において、その現象が発達する時刻（以下、検証時刻）における予測指標 J の変化量を最大にするような予報変数に対する摂動を求めることで、対象とする現象の予測に最も影響を与える要因を特定する。本研究では予測指標として、解析に対する予測の誤差のエネルギー (Langland et al. 2002)

$$J(\mathbf{x}_t) = \frac{1}{2}(\mathbf{e}_t)^T \mathbf{C} \mathbf{e}_t, \quad \mathbf{e}_t = \mathbf{x}_t - \mathbf{x}_t^a \quad (1)$$

を用いる。ここで、 n をモデルの状態変数の次元として、 $\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_t^a \in \mathbb{R}^n$ はそれぞれ時刻 t における予測と解析、 $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ は予報変数からエネルギーを計算する際の係数行列を表す。 $\mathbf{C}$ は検証領域を定める役割も持つ。時刻 T における予報変数の微小変化 $\delta \mathbf{x}_T$ に対する $J(\mathbf{x}_T)$ の変化を考える。 $\mathbf{x}_T$ の周りでのテイラー展開を用いて、摂動の二次以上の高次の項を無視することで、

$$\Delta J = J(\mathbf{x}_T + \delta \mathbf{x}_T) - J(\mathbf{x}_T) \simeq \left[\frac{\partial J}{\partial \mathbf{x}_T} \right]^T \delta \mathbf{x}_T \quad (2)$$

と表すことができる。時刻 0 から T までの摂動の時間発展が線型であると仮定する。

$$\delta \mathbf{x}_T = \mathbf{M} \delta \mathbf{x}_0 \quad (3)$$

ここで $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ は接線型モデルを表す。式 (2, 3) より、随伴モデル $\mathbf{M}^T$ を用いて予測指標の変化量を表すことができる。

$$\Delta J = \left[\frac{\partial J}{\partial \mathbf{x}_T} \right]^T \mathbf{M} \delta \mathbf{x}_0 \equiv \left[\frac{\partial J}{\partial \mathbf{x}_0} \right]^T \delta \mathbf{x}_0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{x}_0} = \mathbf{M}^T \frac{\partial J}{\partial \mathbf{x}_T} \quad (5)$$

式 (5) は初期の予報変数 $\mathbf{x}_0$ の単位変化に対する予測指標の変化を表す。

感度 (5) に対応する初期摂動の与え方はいくつか提案されている (Langland et al. 2002; EYO15; Duc et al. 2023)。本研究では EYO15 に基づき、予測指標の変化を最大にする最適な初期摂動を計算する。初期摂動の振幅が $\|\delta \mathbf{x}_0\|_{\mathbf{G}_0} = 1$ を満たす ($\mathbf{G}_0 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ は初期摂動のノルムを定義する行列) という制約条件のもとで、 $|\Delta J|$ を最大にする初期摂動 $\delta \mathbf{x}_0^*$ を Lagrange

の未定乗数法を用いて求める。未定乗数を λ として、Lagrange 関数を

$$L(\delta \mathbf{x}_0^*, \lambda) = \Delta J + \lambda(1 - (\delta \mathbf{x}_0^*)^T \mathbf{G}_0 \delta \mathbf{x}_0^*) \\ = \left[\frac{\partial J}{\partial \mathbf{x}_0} \right]^T \delta \mathbf{x}_0^* + \lambda(1 - (\delta \mathbf{x}_0^*)^T \mathbf{G}_0 \delta \mathbf{x}_0^*) \quad (6)$$

と定義する。制御変数と未定乗数に対する Lagrange 関数の偏微分を取り、鞍点を求めることで、最適な初期摂動が以下のように決まる。

$$\frac{\partial L}{\partial \delta \mathbf{x}_0^*} = \frac{\partial J}{\partial \mathbf{x}_0} - 2\lambda \mathbf{G}_0 \delta \mathbf{x}_0^* = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial \lambda} = 1 - (\delta \mathbf{x}_0^*)^T \mathbf{G}_0 \delta \mathbf{x}_0^* = 0 \\ \therefore \delta \mathbf{x}_0^* = \pm \left(\left[\frac{\partial J}{\partial \mathbf{x}_0} \right]^T \mathbf{G}_0^{-1} \frac{\partial J}{\partial \mathbf{x}_0} \right)^{-\frac{1}{2}} \mathbf{G}_0^{-1} \frac{\partial J}{\partial \mathbf{x}_0} \quad (7)$$

すなわち、 $\delta \mathbf{x}_0^*$ は $\mathbf{G}_0^{-1} \partial J / \partial \mathbf{x}_0$ と平行になる。

3. アンサンブル随伴感度解析

3.1 AH07 の導出

AH07 では、初期の基本場の誤差分布に基づく統計的な随伴感度を定義した。式 (4) の両辺に対して右から初期摂動の転置を作用させ、期待値を取る。

$$\langle \Delta J \delta \mathbf{x}_0^T \rangle = \left[\frac{\partial J}{\partial \mathbf{x}_0} \right]^T \langle \delta \mathbf{x}_0 \delta \mathbf{x}_0^T \rangle \quad (8)$$

左辺は予測指標の変化量と初期摂動の間の交差共分散 ($\text{cov}(\delta \mathbf{x}_0, \Delta J)$)、右辺は初期摂動の共分散 ($\mathbf{A} = \langle \delta \mathbf{x}_0 \delta \mathbf{x}_0^T \rangle$) と随伴感度との内積を表している。したがって、統計的に定義した随伴感度は以下のように表される。

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{x}_0} = \mathbf{A}^{-1} \text{cov}(\delta \mathbf{x}_0, \Delta J) \quad (9)$$

式 (9) の右辺を N メンバーのアンサンブル予報 ($\mathbf{x}_t^{(1)}, \mathbf{x}_t^{(2)}, \dots, \mathbf{x}_t^{(N)}$) で近似する。アンサンブル平均 $\bar{\mathbf{x}}_t = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_t^{(i)}$ からの摂動行列

$$\mathbf{X}_t = [\mathbf{x}_t^{(1)} - \bar{\mathbf{x}}_t, \dots, \mathbf{x}_t^{(N)} - \bar{\mathbf{x}}_t] \in \mathbb{R}^{n \times N} \quad (10)$$

と各メンバーの予測指標の摂動を並べた行ベクトル

$$\mathbf{J}_e = [J(\mathbf{x}_t^{(1)}) - \bar{J}, \dots, J(\mathbf{x}_t^{(N)}) - \bar{J}] \in \mathbb{R}^{1 \times N} \quad (11)$$

を用いると、

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{x}_0} \approx \frac{\partial J_e}{\partial \mathbf{x}_0} = [\mathbf{X}_0 \mathbf{X}_0^T]^{-1} \mathbf{X}_0 \mathbf{J}_e^T \quad (12)$$

と表される。これは初期摂動を説明変数、予測指標の摂動を目的変数とした線型回帰問題

$$\mathbf{J}_e = \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}_0 + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad \hat{\boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial J_e}{\partial \mathbf{x}_0} \quad (13)$$

($\boldsymbol{\varepsilon} \in \mathbb{R}^{1 \times N}$ は残差) の最小二乗解である (HL15)。大抵の場合、アンサンブル数は状態変数の次元よりもはるかに小さいため、共分散 $\mathbf{X}_0 \mathbf{X}_0^T$ はランク落ちとなり、逆行列を定義することはできない。そこで AH07 は、初期摂動の分散のみを用いることで、アンサンブル随伴感度を定義した。

$$\frac{\partial J_e}{\partial \mathbf{x}_0 \text{ diag}} = \mathbf{D}^{-1} \mathbf{X}_0 \mathbf{J}_e^T, \quad \mathbf{D} = \text{diag}[\mathbf{X}_0 \mathbf{X}_0^T] \quad (14)$$

これは第 1 節で述べたように、単変量回帰の解とみなせる。

3.2 HL15 の導出

HL15 では、線型回帰問題 (13) の回帰係数 $\boldsymbol{\beta}$ に対する最小ノルム解を Lagrange の未定乗数法を用いて求めた。

$$L(\boldsymbol{\beta}, \lambda) = \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta} - (\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}_0 - \mathbf{J}_e) \lambda \quad (15)$$

ここで未定乗数 $\lambda \in \mathbb{R}^N$ はアンサンブル次元のベクトルである。式 (7) と同様に鞍点を求めることで、最小ノルム解に基づくアンサンブル随伴感度が以下のように定義される。

$$\frac{\partial J_e}{\partial \mathbf{x}_0 \text{ minnorm}} = \mathbf{X}_0 (\mathbf{X}_0^T \mathbf{X}_0)^{-1} \mathbf{J}_e^T \quad (16)$$

なお、アンサンブル摂動を平均からのずれとして定義する (10) 場合、 $\mathbf{X}_0^T \mathbf{X}_0$ のランクは高々 $N - 1$ となり、やはり逆行列が存在しない。本研究ではこの定義に則るため、 $(\mathbf{X}_0^T \mathbf{X}_0)^{-1}$ を Moore-Penrose の擬逆行列に置き換えて計算する。

3.3 EYO15 の導出

J の変化を最大にする初期摂動 $\delta \mathbf{x}_0$ を、アンサンブル初期摂動 (10) の線型結合で表すことを考える。すなわち、線型結合の係数ベクトルを $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^N$ として、

$$\delta \mathbf{x}_0 = \mathbf{X}_0 \mathbf{p} \quad (17)$$

と表す。式 (4) の関係が各アンサンブルメンバーに対しても成り立つと仮定すると、

$$\Delta J = \left[\frac{\partial J}{\partial \mathbf{x}_0} \right]^T \mathbf{X}_0 \mathbf{p} = \mathbf{J}_e \mathbf{p} \quad (18)$$

が成り立つ。式 (6) に代入することで、Lagrange 関数は制御変数を $\mathbf{p}$ として、

$$L(\mathbf{p}, \lambda) = \mathbf{J}_e \mathbf{p} + \lambda(1 - \mathbf{p}^T \mathbf{X}_0^T \mathbf{G}_0 \mathbf{X}_0 \mathbf{p}) \quad (19)$$

と書き換えられる。したがって、求めるべき最適初期摂動は、

$$\delta \mathbf{x}_0^* = \pm [\mathbf{J}_e (\mathbf{X}_0^T \mathbf{G}_0 \mathbf{X}_0)^{-1} \mathbf{J}_e^T]^{-\frac{1}{2}} \mathbf{X}_0 (\mathbf{X}_0^T \mathbf{G}_0 \mathbf{X}_0)^{-1} \mathbf{J}_e^T \quad (20)$$

と表される。

3.4 HL15 と EYO15 の関係

本研究では初期摂動の計算 (7) において、初期ノルムとしてアンサンブル解析誤差共分散に基づくノルム（ヘシアンノルム）を用いる。すなわち、

$$\mathbf{G}_0^{-1} = \mathbf{A}_{\text{ens}} = \frac{1}{N-1} \mathbf{X}_0 \mathbf{X}_0^T \quad (21)$$

とする。このとき、EYO15 で定式化された初期摂動は、HL15 の最小ノルム解から求められる初期摂動と等価であることを示す。

$\mathbf{X}_0^T (\mathbf{A}_{\text{ens}})^{-1} \mathbf{X}_0 \simeq (N-1) \mathbf{I}_N$ ($\mathbf{I}_N$ は $N \times N$ 次の単位行列) より、式 (20) は

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{x}_0^* &\simeq \pm \sqrt{\frac{N-1}{\mathbf{J}_e \mathbf{J}_e^T}} \frac{1}{N-1} \mathbf{X}_0 \mathbf{J}_e^T \\ &= \pm \frac{1}{\text{std}(\mathbf{J}_e)} \text{cov}(\mathbf{X}_0, \mathbf{J}_e) \end{aligned} \quad (22)$$

と表される。ここで $\text{std}(\mathbf{J}_e)$ は予測指標の標準偏差を、 $\text{cov}(\mathbf{X}_0, \mathbf{J}_e)$ は初期摂動と予測指標の間の共分散を表す。すなわち、予測指標の変化量 ΔJ を最大にする初期摂動は、予測指標のアンサンブル摂動 (11) を重みとするアンサンブル初期摂動の線型結合に比例する。

一方で、HL15 の多変量回帰から導出される予測指標の応答を最大にする初期摂動について考える。式 (7) において、 $\partial J / \partial \mathbf{x}_0$ を式 (16) に置き換えると、

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{x}_0^* &= \alpha \mathbf{G}_0^{-1} \mathbf{X}_0 (\mathbf{X}_0^T \mathbf{X}_0)^{-1} \mathbf{J}_e^T \\ \alpha &= \pm \left([\mathbf{X}_0 (\mathbf{X}_0^T \mathbf{X}_0)^{-1} \mathbf{J}_e^T]^T \mathbf{G}_0^{-1} \mathbf{X}_0 (\mathbf{X}_0^T \mathbf{X}_0)^{-1} \mathbf{J}_e^T \right)^{-\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

と表される。ここに $\mathbf{G}_0^{-1} = \mathbf{A}_{\text{ens}}$ を代入すると、

$$\begin{aligned} \alpha &= \pm \left(\mathbf{J}_e (\mathbf{X}_0^T \mathbf{X}_0)^{-1} \mathbf{X}_0^T \frac{\mathbf{X}_0 \mathbf{X}_0^T}{N-1} \mathbf{X}_0 (\mathbf{X}_0^T \mathbf{X}_0)^{-1} \mathbf{J}_e^T \right)^{-\frac{1}{2}} \\ &= \pm \frac{1}{\text{std}(\mathbf{J}_e)} \\ \delta \mathbf{x}_0^* &= \pm \frac{1}{\text{std}(\mathbf{J}_e)} \frac{\mathbf{X}_0 \mathbf{X}_0^T}{N-1} \mathbf{X}_0 (\mathbf{X}_0^T \mathbf{X}_0)^{-1} \mathbf{J}_e^T \\ &= \pm \frac{1}{\text{std}(\mathbf{J}_e)} \text{cov}(\mathbf{X}_0, \mathbf{J}_e) \end{aligned} \quad (23)$$

となり、式 (22) と一致する。

3.5 最小二乗解の複数の定式化

AH07, HL15 の定式化に加えて、本研究では線型回帰問題 (13) の解に対する 3 つの定式化を提案し、数値実験で比較する。前節で示したように、HL15 の感度 (16) から求められる初期摂動と EYO15 が直接計算する初期摂動 (20) は等価であることに加え、本研究では予測指標の応答の推定精度を調べるため、感度から求める初期摂動を比較対象とする。

(a) リッジ回帰

感度の L2 ノルムに不等号制約条件を課した上で、最小二乗解を求める。

$$\hat{\beta}_{\text{ridge}} = \arg \min_{\beta} \|\mathbf{J}_e - \beta^T \mathbf{X}_0\|_2^2 \text{ s.t. } \|\beta\|_2 \leq t$$

これを解くと、

$$\frac{\partial J_e}{\partial \mathbf{x}_{0 \text{ ridge}}} = (\mathbf{X}_0 \mathbf{X}_0^T + \mu \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}_0 \mathbf{J}_e^T \quad (24)$$

μ はハイパーパラメータである。リッジ回帰を用いたアンサンブル感度解析については Duc et al. (2023) が言及しているが、他の手法との比較までは行われていない。

(b) 主成分回帰 (Principal Component Regression; PCR)

最小二乗解 (12) が定義されない原因は、アンサンブル数が状態変数次元より小さいことだけでなく、アンサンブル摂動間に相関を持つ（多重共線性）ことも含まれる。PCR は説明変数（アンサンブル摂動）間の相関をなくすように前処理をした後で、線型回帰問題を解くことに相当する。アンサンブル摂動行列の特異値分解

$$\mathbf{X}_0 = \mathbf{E} \mathbf{\Gamma} \mathbf{C}^T \quad (25)$$

において、上位 $R \leq N$ モードの主成分方向 $\mathbf{E}_R$ を用いて回帰問題を解く。主成分得点を $\mathbf{T}_R =$

$\mathbf{E}_R^T \mathbf{X}_0$ として,

$$\begin{aligned}\beta_R &= [\mathbf{T}_R \mathbf{T}_R^T]^{-1} \mathbf{T}_R \mathbf{J}_e^T \\ \frac{\partial J_e}{\partial \mathbf{x}_0}_{\text{pcr}} &= \mathbf{E}_R \beta_R\end{aligned}\quad (26)$$

(c) 部分的最小二乗回帰 (Partial Least Square regression; PLS)

PLS は, PCR が考慮する説明変数間の相関に加えて, 説明変数と目的変数の間での相関も考慮して回帰係数を求めるアルゴリズムである (Wold 1973). 予測指標の摂動と初期摂動の分散を最大にする方向 $\mathbf{t}_1 = \mathbf{X}_0^T \mathbf{w}_1$ への回帰を考える.

$$\begin{aligned}\mathbf{w}_1 &= \arg \max_{\mathbf{w}} \mathbf{J}_e \mathbf{X}_0^T \mathbf{w} \text{ s.t. } \|\mathbf{w}\|_2 = 1 \\ &= \frac{\mathbf{X}_0 \mathbf{J}_e^T}{\|\mathbf{X}_0 \mathbf{J}_e^T\|_2}\end{aligned}\quad (27)$$

$$\mathbf{p}_1 = \frac{\mathbf{X}_0 \mathbf{t}_1}{\|\mathbf{t}_1\|^2}\quad (28)$$

$$d_1 = \frac{\mathbf{J}_e \mathbf{t}_1}{\|\mathbf{t}_1\|^2}\quad (29)$$

$$\hat{\mathbf{J}}_e = d_1 \mathbf{t}_1^T = (d_1 \mathbf{w}_1)^T \mathbf{X}_0\quad (30)$$

次に分散が大きい方向への回帰を考えるために, $\mathbf{t}_1$ 方向の成分を取り除く (deflation).

$$\mathbf{J}_{e(2)} = \mathbf{J}_e - d_1 \mathbf{t}_1^T\quad (31)$$

$$\mathbf{X}_{0(2)} = \mathbf{X}_0 - \mathbf{p}_1 \mathbf{t}_1^T\quad (32)$$

これらの計算を R 回繰り返すことで, 分散の大きい上位 R モードを用いた回帰係数が定義される.

$$\frac{\partial J_e}{\partial \mathbf{x}_0}_{\text{pls}} = \mathbf{W}_R (\mathbf{P}_R^T \mathbf{W}_R)^{-1} \mathbf{d}_R\quad (33)$$

$$\mathbf{W}_R = [\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_R] \in \mathbb{R}^{N \times R}$$

$$\mathbf{P}_R = [\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_R] \in \mathbb{R}^{N \times R}$$

$$\mathbf{d}_R = [d_1, \dots, d_R]^T \in \mathbb{R}^R$$

4. 実験設定

前節で示したアンサンブル随伴感度解析の各手法と随伴感度解析を, 空間一次元のトイモデルを用いた理想化実験で比較する.

4.1 予報モデルと解析の設定

予報モデルとして, 40 変数のカオスモデル (Lorenz 1995, 以下 L96 モデル) を用いる.

$$\frac{dX_i}{dt} = (X_{i+1} - X_{i-2})X_{i-1} - X_i + F \quad (i = 1, \dots, 40)\quad (34)$$

境界は周期的 ($X_{41} = X_1$), $F = 8$ とする. 変数は時空間ともに無次元化されており, 0.5 無次元時間が大気の 6 時間に相当する. 予測誤差 (1) を定義するために, モデル (34) による 1 つの実行結果を真値とみなし, 真値にランダムノイズを加えて作成した観測を, 真値と別の初期値から始めた予測に同化する観測システムシミュレーション実験を行う. 観測は全ての格子点に置き, 観測誤差標準偏差の大きさは 1 とする. データ同化手法には局所アンサンブル変換カルマンフィルタ (LETKF, Hunt et al. 2007) を用いる. 局所化半径 (3 格子分) と共分散膨張 (5%) は, 解析誤差が最小になる値を試行錯誤で探して設定した. アンサンブル数は 8, 16, 24, 32 メンバーで実験を行い, サンプル数が EnASA の推定精度に与える影響を調べる. 各アンサンブル数に対して 1000 サイクルの解析を行い, 各解析値から 96 時間のアンサンブル予測を行う. 最初の 50 サイクルをスピンアップとして除き, 後半の 950 サイクルで随伴感度を計算する.

4.2 感度解析の設定

随伴感度解析 (ASA) の結果を参照解として, アンサンブル随伴感度解析 (EnASA) の解を比較する. ASA における随伴モデルの基本場は, 解析値のアンサンブル平均を初期値として計算する.

アンサンブル随伴感度解析は, 第 3 節で説明した手法を, 以下の設定で比較する.

DIAG 対角近似 (14)

MINNORM 最小ノルム解 (16), 擬逆行列の計算では, $\mathbf{X}_0^T \mathbf{X}_0$ の分散の 99% を説明するモードを利用する.

RIDGE リッジ回帰 (24), ハイパーパラメータは $\mu = 0.01$ とする.

PCR 主成分回帰 (26), R は $\mathbf{X}_0 \mathbf{X}_0^T$ の分散の 99% を説明するモード数から決定する.

PLS 部分的最小二乗回帰 (33), $R = 2$ とする.

PLS で用いるモード数は, ASA の感度との空間相関が最も高いモード数として設定した. PCR と PLS の計算には, scikit-learn (Pedregosa et al. 2011) のバージョン 1.6.1 を用いた. また, PLS のアルゴリズムには scikit-learn に実装されている非線型反復最小二乗法 (Wold 1973) を利用した.

予測指標は, 対解析の二乗予測誤差 (1) とする. 検

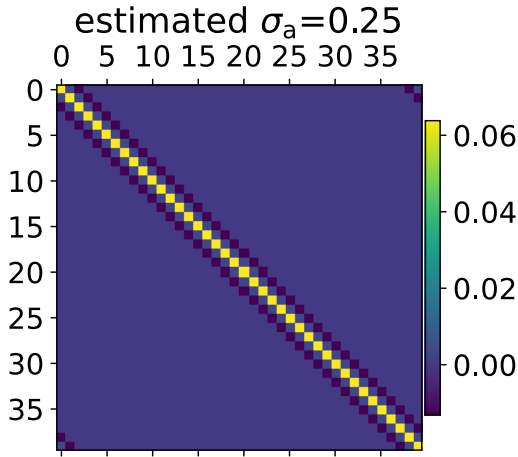


Fig. 1: Estimated analysis error covariance

証領域は、全格子点の中で最も予測誤差の大きい格子点とその左右の格子点を含む3格子分の領域とする。係数行列 $\mathbf{C}$ は、上記の3格子に対応する対角成分のみ1で、残りの要素は全て0の行列となる。検証時刻を24, 48, 72, 96時間後（以下、FTと表記する）に変えて解析を行い、予報時間が長くなるにつれて強まる非線型性が線型の時間発展に基づく感度解析の推定に与える影響を調べる。

4.3 評価

各随伴感度をもとに、最大応答を与える初期摂動 ($\delta \mathbf{x}_0^*$, 式7) を、第3.3節で定義したヘシアンノルムを用いて計算する。ASAに対応する初期摂動は、全てのサイクル・メンバー数で得られたアンサンブル共分散を平均して推定した分散 ($\sigma^a = 0.25$) と相関幅を持つ、空間一様な誤差共分散 (Fig. 1) を用いて計算する。EnASAに対応する初期摂動を求める際は、解析アンサンブルからそのまま推定される誤差共分散と、同化の時と同じ局所化半径（3格子分）で局所化を作用させた誤差共分散を用いて計算を行い、初期摂動に対する局所化の効果を検討する。初期摂動の符号をマイナスに取ると、時間発展が線型の場合は予測誤差が減少する。

上記の方法で得られる初期摂動 $\delta \mathbf{x}_0^*$ を初期の基本場 $\mathbf{x}_0$ を加えて得られる初期値から、非線型モデル M による予測を行い、基本場からの予測指標の変化

$$\Delta J_{nl} = J[M(\mathbf{x}_0 + \delta \mathbf{x}_0^*)] - J[M(\mathbf{x}_0)] \quad (35)$$

を非線型応答と定義する。感度から推定される予測

指標の変化

$$\Delta J_{est} = \left[\frac{\partial J}{\partial \mathbf{x}_0} \right]^T \delta \mathbf{x}_0^* \quad (36)$$

を非線型応答と比較し、各手法がどの程度非線型応答を推定できているのかを調べる。

5. 感度解析手法の比較

5.1 感度勾配と最適初期摂動

まず、感度解析から得られる感度勾配 ($\partial J / \partial \mathbf{x}_0$) と、ヘシアンノルムに基づく最適な初期摂動の分布を手法間で比較する。L96モデルは周期境界を持つため、各サイクルで得られる感度勾配または初期摂動を、検証領域の中央が20番目の格子点に来るように回転させて平均を取ることで、サイクル間で合成した分布を得る。Fig. 2に、8メンバーを用いた実験における感度勾配と初期摂動の分布を示す。ここで初期摂動の符号は、線型の時間発展において予測誤差を減少させる符号（マイナス）にとっている。ASA（青線）から得られる感度勾配は、予報時刻が長くなるにつれて検証領域の左側に伝播している (Fig. 2a, d)。L96モデルが表現する波は左向きの位相速度を持つが、エネルギーは右向きに伝播する。したがってASAの感度勾配が示す左側への伝播は、検証領域の上流側における初期の微小な変化によってもたらされるエネルギーが、検証領域へと伝播することで予測誤差の変化を生じさせることを示している。一方で、FT24では検証領域の右側にも感度勾配が振幅を持ち、FT96においても僅かに右側に変動を示すことから、位相の伝播による変化も特に短い予報時刻では予測誤差の変化に影響を及ぼしていることがわかる。DIAG（緑線）の感度勾配は、他の手法と比べて著しく大きな振幅を示し、激しく変動している。これは、各格子点におけるDIAGの感度勾配の値が、その格子点のみに与えられる単位変化に基づく予測指標の変化を表す (Duc et al. 2023) ためである。DIAGと比べると、その他の多変量回帰に基づく4手法 (MINNORM, RIDGE, PCR, PLS) は似た変動を示している。FT24にはASAが大きな振幅を示す領域で振幅を示しているが、ASAと比べると振幅が小さく、検証領域から離れた場所でも同等の振幅を示している。FT96ではさらに振幅が大きい場所が散らばり、高感度領域の特定が難しい。このことから、ASAが示す高感度領域をEnASAで特定するのは難しいことを示唆している。

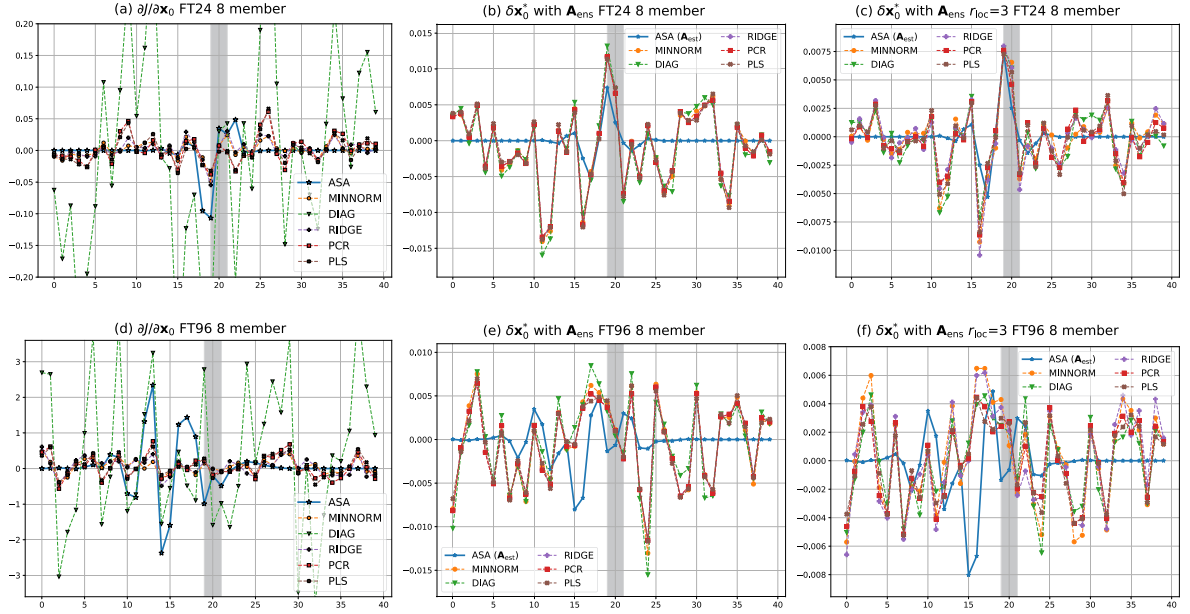


Fig. 2: Distribution of composite (a, d) sensitivity gradients and optimal initial perturbations (b, e) without or (c, f) with covariance localization for eight-member ensembles. The verification time is (a–c) 24 forecast hours and (d–f) 96 forecast hours, respectively. Gray shade in the middle indicates the verification region.

初期摂動の分布は、解析誤差共分散の構造を強く反映している。解析誤差共分散に局所化を作用させない場合 (Fig. 2b, e), 解析誤差共分散に含まれるノイズが各手法の感度勾配の差よりも大きく、EnASA から得られる初期摂動は全て似たような構造を示す。局所化を作用させることで (Fig. 2c, f), 手法間の違いをより反映した初期摂動を得ることができる。また、初期摂動は振幅をヘシアンノルムによって規定している (7) ため、ASA と EnASA の間の振幅の違いは初期摂動には影響を与えず、FT24 における検証領域近傍での初期摂動はよく対応している (Fig. 2c)。

アンサンブル数を 32 に増やすと、EnASA の手法間の違いが顕著に現れる (Fig. 3)。これは、アンサンブル数が増えたことでより多重共線性の影響が現れやすくなり、多変量回帰の手法間の違いが強調される状況となっているためと考えられる。一方で、FT24 における ASA と EnASA の感度勾配を比較すると、8 メンバーの時よりも ASA と EnASA がよく一致しているとはいえない。この要因として、アンサンブル数によらず、予報誤差 J のサンプル分布が 0 付近に偏っていること (Fig. 4) が挙げられる。そのため、標準化したとしても J のサンプル分布は正規分布からかけ離れており、アンサンブル数を増やしても実際のサンプルの自由度は同様に増えず、サンプリン

グ誤差をうまく軽減できない。解析誤差共分散の局所化を考慮しないと、手法間の差が打ち消されてしまう (Fig. 3b, e) ことから、32 メンバーであってもサンプリング誤差を軽減する必要があることが示唆される。予測指標を偏りが生じにくい指標（例えばアンサンブル摂動のエネルギーなど）に変えると、メンバー数を増やすにつれて ASA と EnASA 間の差が小さくなることが確認された (図略)。FT96 には、FT24 よりも予測指標の分布の偏りが緩和され、8 メンバーの時よりも EnASA の振幅が極大を示す位置が ASA が示す高感度領域に対応している (Fig. 3d)。

以上の比較から、線型回帰問題の解法による感度解析への影響を調べるには、局所化されたヘシアンノルムによって定義される最適な初期摂動を比べるのが望ましい。以降の節では、局所化を考慮した初期摂動から推定される応答と、非線型摂動実験における応答の比較を行う。

5.2 非線型応答の推定

前節の比較から、アンサンブル数が多いほど EnASA の手法間での差がはっきりと現れると想定される。そこでまず、32 メンバーの実験において、FT24 を検証時刻とする感度解析から得られる初期摂動に対する非線型応答と線型推定を比較する (Fig. 5)。各パネル中央の散布図は、横軸が感度解析によって推

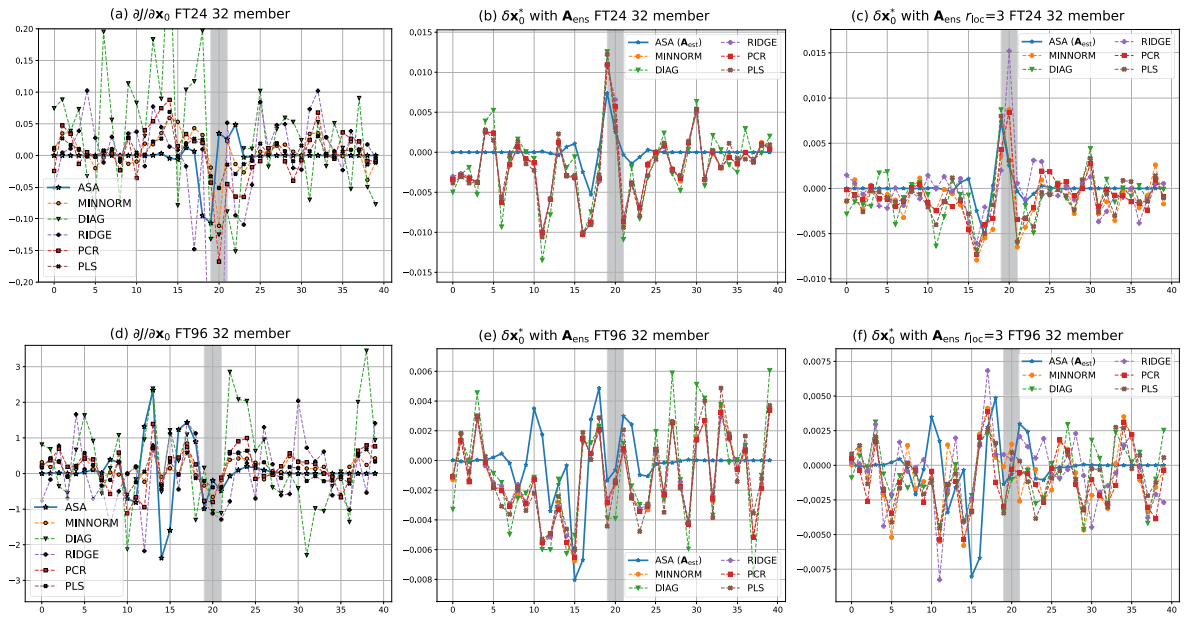


Fig. 3: Same as Fig. 2, but for 32-member ensembles.

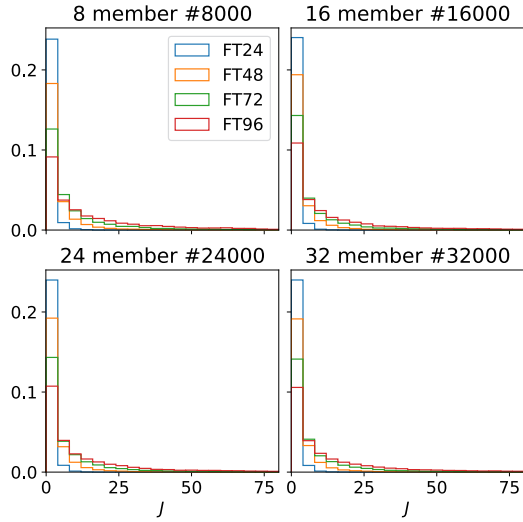


Fig. 4: Normalized histograms of forecast metric J in ensemble representation.

定される予測指標の変化 (36), 縦軸が非線型予測によって実際に得られた予測指標の変化 (35) を表しており, 点が傾き 1 の対角線 (黒線) に近いほど, 推定される応答と実際の応答がよく対応していることを示す. また, 摂動の符号がプラス (マイナス) のとき, 点が対角線の下 (上) に来ている場合は感度解析による推定が過大評価していることを, 対角線の上 (下) に来ている場合は過小評価していることを表す. 散布図の上および左のヒストグラムはそれぞれ推定される応答と実際の応答の正規化した分布を示しており, 推定される応答の分布は線型のため, 常に 0 に

対して対称となる. この検証時刻では非線型性の影響が小さいため, ASA による推定と非線型応答がよく対応している (Fig. 5a). DIAG による推定が大きく過大評価している (Fig. 5b) のは, 前節で述べたように複数の格子点からの応答を重ねて見積もっているためである. その他の多変量回帰手法を比較すると, RIDGE, MINNORM, PCR (Fig. 5c-e) はやや過大評価傾向を示すのに対し, PLS (Fig. 5f) は他の手法よりも比較的良い対応を示している. この傾向は二乗平均平方根差 (RMSD, 凡例に記載) の小ささにも表れている. 多変量回帰手法の中で最も RIDGE の RMSD が大きいのは, 32 メンバーのアンサンブル摂動の全ての情報を利用することで, オーバーフィッティングしてしまうためと考えられる. しかし ASA と比較すると, EnASA はどの手法も対角線上からばらついており, 線型推定と非線型応答の符号が逆になる例も存在している. これは前節で見たように, 感度解析におけるサンプリング誤差の影響で不適切な摂動が加わってしまうためと考えられる.

検証時刻を FT96 とすると, 非線型性の影響が強くなり, 摂動の符号による非線型応答の非対称性が FT24 よりも大きくなる (Fig. 6). このとき, ASA でも非線型応答と線型推定との差が大きくなり, 特に予測誤差を減らす方向の推定 (−) は過大評価傾向にある (Fig. 6a). EnASA では, DIAG と RIDGE の過大評価傾向は FT24 のときと変わらない (Fig. 6b, d)

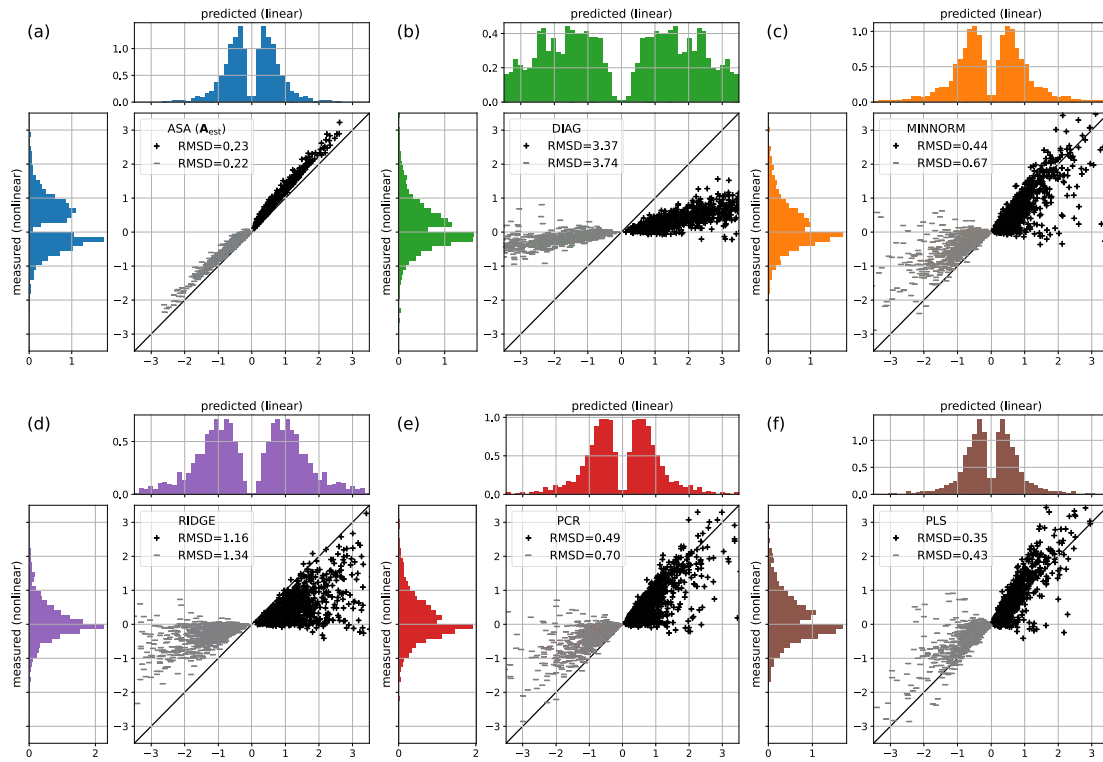


Fig. 5: Comparison of predicted (Eq. 36, horizontal) and measured (Eq. 35, vertical) forecast responses to optimal initial perturbations for (a) ASA and (b–f) EnASA with localized ensemble Hessian norm. The verification time is 24 forecast hours, and the ensemble size is 32. The '+' and '-' markers indicate the sign of initial perturbations, and figures in legends show the root mean square difference (RMSD) between predicted and measured responses. The histograms on each axis show the normalized distribution of responses. Panels show the results of (b) DIAG, (c) MINNORM, (d) RIDGE, (e) PCR, and (f) PLS.

が、MINNORM, PCR, PLS では大きく外す事例もあるものの、ASA よりも RMSD が小さい (Fig. 6c, e, f). 特に PLS では、予測誤差を減らす方向の推定精度が ASA を含む他の手法よりも明らかに高く、非線型性が強い状況での PLS の有用性を示唆している。

非線型応答の大きさと非線型応答と線型推定との差に関して、ASA と多変量回帰に基づく EnASA を比較する (Fig. 7). 非線型応答は検証時刻までの予測時間が長くなるほど大きくなり、 $-J$ という下限の存在するマイナス符号よりも、上限のないプラス符号の方が増加幅が大きい (Fig. 7a). FT24, または 8 メンバーの時は、EnASA の手法間の差はほとんどない。予測時間が伸びるにつれ、ASA と EnASA の差が大きくなり、どの時刻でも ASA による応答が最も大きい。EnASA 間で比較すると、メンバー数 16 以上で予測時間が 72 時間以上になると、僅かな差ではあるが PLS, MINNORM, PCR, RIDGE の順で応答が小さくなっている。非線型応答と線型推定の差 (Fig. 7b) を

見ると、ASA で非線型性が強くなるにつれて急激に差が増大することがわかる。EnASA の予測時間に対する差の増加率は、メンバー数が増えた時の RIDGE を除き、ASA よりも小さい。これは、EnASA が摂動の線型時間発展を仮定しているものの、実際には非線型に時間発展したアンサンブル摂動から感度を推定しているため、非線型性の影響をある程度取り入れていることを示していると考えられる。プラスの符号に関しては、MINNORM, PCR, PLS の間で大きな差は見られない。しかし、マイナス符号に注目すると、PLS の予測時間に対する差の増加率が明らかに小さい。これらの結果は、Fig. 6 と同様に、PLS が強非線型性を示す状況でも正確な推定を行えることを示唆している。

6. 議論とまとめ

本研究では、アンサンブル随伴感度解析が予測指標と初期摂動の間の線型回帰問題とみなせることに

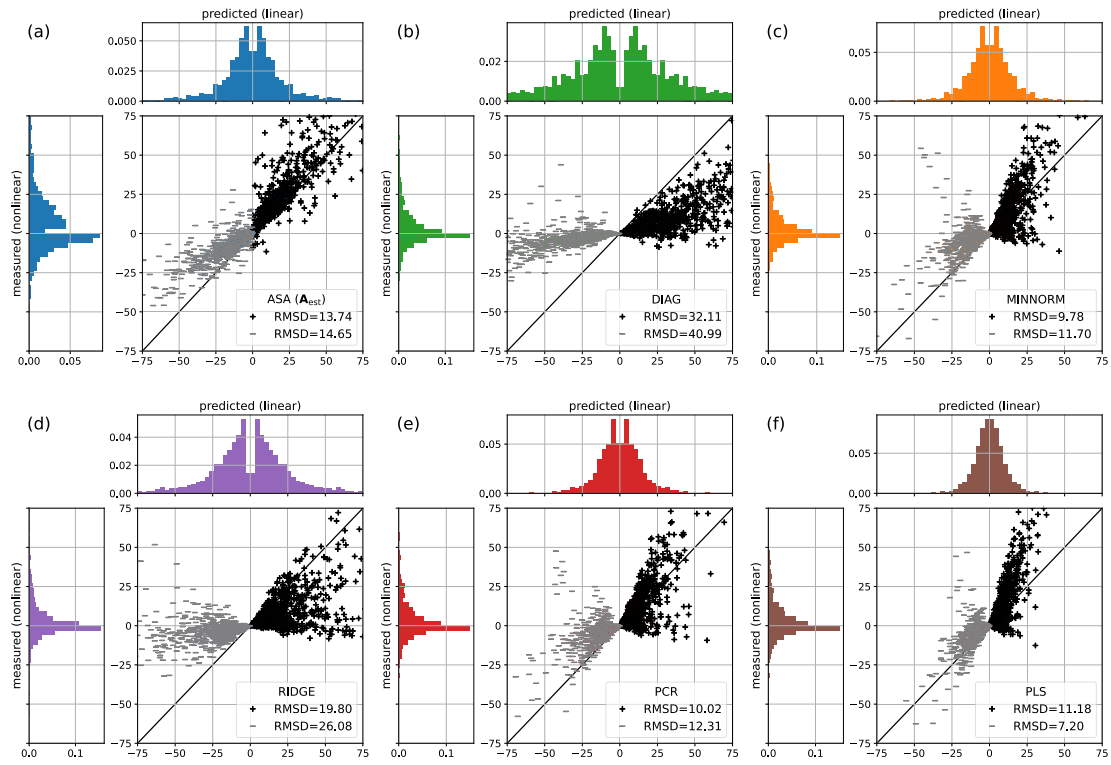


Fig. 6: Same as Fig. 5, but for the verification time as 96 forecast hours.

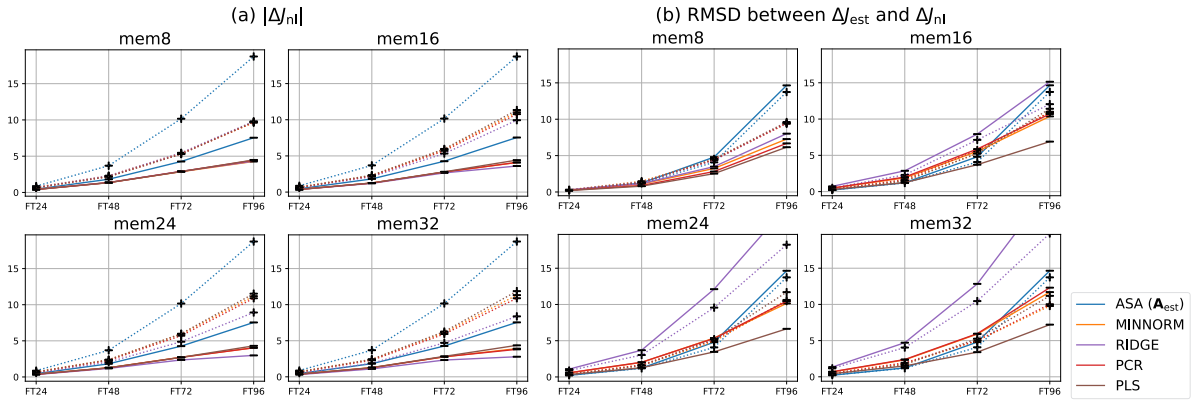


Fig. 7: Dependency on ensemble size and verification time of (a) the magnitude of measured response and (b) RMSD between predicted and measured responses. The solid and dotted curves indicate the minus and plus signs of initial perturbations, respectively. The results of DIAG is omitted since it shows significantly different behavior from the other methods.

着目し、先行研究で提案された2つの手法に加えて、3つの異なる線型回帰問題の解法に基づくアンサンブル随伴感度解析を提案した。線型回帰問題の解法が感度解析の推定精度に与える影響を空間一次元のトイモデルを用いた理想化実験で検証し、サンプルサイズと非線型性に対する推定精度の依存性を調べた。

単変量回帰に相当する対角近似を除き、多変量回帰に基づくアンサンブル随伴感度解析から得られる

感度勾配は、メンバー数が少ない場合には似たような挙動を示していた。メンバー数が増えるにつれて異なる変動を示すようになるが、どの手法も力学的な随伴感度解析が示す高感度領域から離れた領域でも大きな振幅を示しており、アンサンブルデータ同化で期待されるようなアンサンブル数の増加によるサンプリング誤差の軽減は見られなかった。これは予測指標の分布が非正規分布であることが一因と考

えられる。

アンサンブル誤差共分散に基づくヘシアンノルムによって最適化された初期摂動を用いて、非線型応答と線型推定の対応を調べると、リッジ回帰を用いた手法はメンバー数が増えるにつれて過大評価傾向が強くなることがわかった。これは多重線型性の影響であると考えられる。リッジ回帰では状態変数の二乗の大きさを持つ行列の逆行列を求める必要があることから、高次元の問題の解法としては現実的でない。最小ノルム解と主成分回帰、部分的最小二乗法回帰に基づく手法は、非線型性の影響が強い場合に力学的な随伴感度解析よりも高い推定精度を示した。特に部分的最小二乗法回帰は、最も非線型性が強い実験において、全ての手法の中で最も正確に予測誤差を減少させる初期摂動を推定していた。アンサンブル随伴感度解析は非線型に時間発展したアンサンブル摂動から感度を推定することで、非線型性の影響を含んだ感度を推定できると期待されるが、この結果は予測指標と初期摂動の間の共線性を考慮することで、より適切に非線型の応答を取り出すことができると示唆している。

非線型性が強い場合のアンサンブル随伴感度解析の推定精度は、平均的には随伴感度解析よりも高いものの、非線型応答と大きく異なる応答を推定する場合も少なくなかった。また、アンサンブル随伴感度解析から得られる初期摂動を与えた場合の非線型応答は、随伴感度解析による非線型応答よりも小さかった。これはサンプリング誤差の影響で、感度の無い領域にも摂動が与えられてしまったためと考えられる。したがって、本研究で得られた線型回帰問題の解法による感度の違いは、サンプリング誤差によって不明瞭になっている可能性がある。メンバー数を増やしてもアンサンブル随伴感度解析から推定される感度勾配が随伴感度解析による推定に近づかない要因として、予測指標の分布の偏りを挙げたが、その他の要因として、感度解析の過程で局所化を考慮していないことが考えられる。アンサンブル随伴感度解析では、予測指標の変化量と初期摂動の間の、時刻の異なる交差共分散を考える必要がある。しかし、このような異なる時刻の共分散の局所化は、簡単な移流問題以外では計算が困難であることが知られている (Bocquet 2016; Griewank et al. 2023)。局所化を含むアンサンブル随伴感度解析の改善は今後の課題である。

謝辞

本研究は JSPS 科研費 22KJ1966, 24H02226 の助成を受けました。

参考文献

- 榎本剛・山根省三・大淵済 (2014): アンサンブル手法に基づく簡易感度解析. 京都大学防災研究所年報, **57B**, pp.163–168.
- Ancell, B. C., and A. A. Coleman (2022): New perspectives on ensemble sensitivity analysis with applications to a climatology of severe convection. *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, **103**, E511–E530.
- Ancell, B., and G. J. Hakim (2007): Comparing adjoint- and ensemble-sensitivity analysis with applications to observation targeting. *Mon. Wea. Rev.*, **135**, pp.4117–4134.
- Bocquet, M. (2016): Localization and the iterative ensemble Kalman smoother. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **142**, pp.1075–1089.
- Duc, L., T. Kawabata, and D. Hotta (2023): On the foundation and different interpretations of ensemble sensitivity. *Mon. Wea. Rev.*, **151**, pp.1689–1697.
- Enomoto, T., S. Yamane, and W. Ohfuchi (2015): Simple sensitivity analysis using ensemble forecasts. *J. Meteor. Soc. Japan*, **93**, pp.199–213.
- Gombos, D., and J. A. Hansen (2008): Potential vorticity regression and its relationship to dynamical piecewise inversion. *Mon. Wea. Rev.*, **136**, pp.2668–2682.
- Gombos, D., R. N. Hoffman, and J. A. Hansen (2012): Ensemble statistics for diagnosing dynamics: Tropical cyclone track forecast sensitivities revealed by ensemble regression. *Mon. Wea. Rev.*, **140**, pp.2647–2669.
- Griewank, P. J., M. Weissmann, T. Necker, T. Nomokonova, and U. Löhnert (2023): Ensemble-based estimates of the impact of potential observations. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **149**, pp.1546–1571.
- Hacker, J. P., and L. Lei (2015): Multivariate ensemble sensitivity with localization. *Mon. Wea. Rev.*, **143**, pp.2013–2027.

- Hall, M. C. G., D. G. Cacuci, and M. E. Schlesinger (1982): Sensitivity analysis of a radiative-convective model by the adjoint method. *J. Atmos. Sci.*, **39**, pp.2038–2050.
- Ito, K., and C.-C. Wu (2013): Typhoon-position-oriented sensitivity analysis. Part I: Theory and verification. *J. Atmos. Sci.*, **70**, pp.2525–2546.
- Langland, R. H., M. A. Shapiro, and R. Gelaro (2002): Initial condition sensitivity and error growth in forecasts of the 25 January 2000 East Coast snow-storm. *Mon. Wea. Rev.*, **130**, pp.957–974.
- Lorenz, E. N. (1995): Predictability: a problem partly solved. *Seminar on predictability*, pp.1–18.
- Pedregosa, F. and coauthors, 2011: Scikit-learn: machine learning in Python. *J. Machine Learning Res.*, **12**, pp.2825–2830.
- Torn, R. D., and G. J. Hakim (2008): Ensemble-based sensitivity analysis. *Mon. Wea. Rev.*, **136**, pp.663–677.
- Wold, H. (1973): Nonlinear Iterative Partial Least Squares (NIPALS) Modelling: Some Current Developments. *Multivariate Analysis–III*, P.R. Krishnaiah, Ed., Academic Press, pp.383–407.

(論文受理日: 2025 年 8 月 29 日)