# 内湾河口域における水質シミュレーションの高度化に向けたデータ 同化アプローチ

課題責任者
入江 政安 大阪大学 大学院工学研究科地球総合工学専攻
著者
入江 政安<sup>\*1</sup>, 岡田 輝久<sup>\*1</sup>, 伊藤 由比己<sup>\*1</sup>
\*1 大阪大学 大学院工学研究科

本研究では、沿岸域における水環境解析のために用いる流動水質モデルの再現性向上を図るため、アンサンブルカルマン フィルタを用いたデータ同化を行った。本研究の主な目的のひとつは、沿岸域(閉鎖性内湾)での水質データの同化による 解析結果の精度向上である。データ同化は海洋分野では先行して実施されているが、沿岸域の、かつ、水質についてのデー タ同化についてはほとんど研究されていない。そのため本研究では、最初に同化パラメータについて検討を行った。その上 で、双子実験、ならびに、大阪湾定点自動観測データを用いたデータ同化実験を実施した。本研究では、さらに、データ同 化の過程での、パラメータ最適化についても目的としており、最後にモデルパラメータが最適化できるかについて検討を実 施した。データ同化の対象はクロロフィルおよび DO の鉛直分布である。双子実験および現地データによる同化のいずれに おいても、クロロフィルおよび DO の水平分布、鉛直分布について再現性が向上した。ただし、それぞれの再現性をより向 上させるためには、観測誤差の設定、同化影響半径の調整、ローカリゼーション手法についてより一層の検討が必要である。 また、同化計算を実行中に、パラメータの修正を行うことにより、パラメータ最適化を試みたが、必ずしも全てのパラメー タが最適化できるわけではなく、その方法については再なる検討が必要である。

キーワード:水質モデル,アンサンブルカルマンフィルタ,データ同化,パラメータ最適化,大阪湾

#### 1. はじめに

データ同化が海洋モデルに適用されるようになって久 しい。特に全球モデル、外洋モデルに対しては、再解析 を含め、適用例は非常に多い。翻って沿岸域においては、 長く、ナッジングを中心としたデータ同化が行われてきて おり、近年になってようやく4次元変分法やアンサンブ ルカルマンフィルタによるデータ同化が活発になってい る。ただし、その多くは物理現象を対象としたものであり、 水質、水環境を対象とするものに限れば極端に減る。

一方、水環境解析において、流動水質シミュレーショ ンは一定の役割を果たすが、水質モデルの高度化において は、観測や実験に基づいた新たな知見をモデルに導入する 形でモデルの細緻化が行われる。モデルの細緻化はシミュ レーション精度の向上に貢献するが、いざそのモデルを適 用するとなると、他の海域では必要なデータや必要なパ ラメータが得られず、実効性を持たないことがままある。 パラメータの多くは他の海域で得られた結果を活用する ことになる。

パラメータの最適化にあたっては、トライアンドエラー を繰り返すので、モデル利用者の経験への依存度が大き い。ましてや細緻化されたモデルに対しては、広範な知 識が必要となり、最適化が不十分となることは明らかで ある。従って、最適化を省力化、自動化する手法が重要 であると言える。著者らは、データ同化により、モデル によるシミュレーション精度向上だけではなく、パラメー タ最適化への活用も、その利用目的としている。今回地 球シミュレータを利用する機会を得たので、本報告では、 利用によって得られた結果をとりまとめる。具体的には、 アンサンブルカルマンフィルタを利用する際のパラメー タについての双子実験による感度解析、現地データの同 化結果、パラメータの最適化の例を示す。

## 2. 対象領域の概要とモデル、同化方法

#### 2.1 対象領域

本研究の対象領域は大阪湾とし、播磨灘に西側境界、 紀伊水道に南側境界を取った東西 58.5km×南北 62kmの 範囲とする。対象領域の水平格子及び水深を図1に示す。



水深は湾の東側で浅く、西側に向かうにつれ深くなり、 明石海峡と紀淡海峡の海峡部分では特に水深が深い。水 平格子間隔は一律 500m となっており、東西方向、南北方 向の格子数はそれぞれ 117 個、124 個である。鉛直方向の 層数は 20 層とし、鉛直格子間隔は、表層付近で層厚が薄 くなるように s 座標系を用いて分割している。

#### 2.2 モデルの概要

本研究では海洋モデル ROMS(Regional Ocean Modeling System)<sup>1)</sup>を基盤に、水質モデルには閉鎖性内湾の貧酸素 水塊の再現性を高めるために改良された水質モデルを使 用する。水質モデルの概要を図2に示す。この水質モデ ルでは水中の各水質項目として、植物プランクトン、ク ロロフィル、動物プランクトン、アンモニア態窒素、硝 酸態窒素、リン酸態リン、懸濁態有機物、溶存酸素(DO) を取り扱っている。クロロフィルは図中に直接明記され てはいないが、植物プランクトンに付随する形でモデル 化されている。懸濁態有機物はサイズ別に2種類に分類 されており、微小粒子が大きい粒子に凝集し、沈降する 過程がモデル化されている。



図2 水質モデルの概要

#### 2.3 アンサンブルカルマンフィルタ

本研究では、大阪湾のシミュレーションの再現精度向 上と流動水質モデルの改良および課題の発見のため、ア ンサンブルカルマンフィルタ(EnKF)を用いたクロロフィ ルおよび DO のデータ同化を行う。EnKF は、Kalman<sup>2)</sup>に よって提唱されたアルゴリズムであるカルマンフィルタ を、強い非線形システムでも適応可能にするために、ア ンサンブル近似を利用して統計誤差の推定を行い、モデ ルの状態変数を逐次的に更新する手法である<sup>3)</sup>。EnKF は 主に気象、海洋の分野でデータ同化手法として近年盛ん に用いられるようになっている。国内の沿岸域における 研究例としては、流況、水温、塩分の連続観測データの 同化を行った田中ら<sup>4)</sup>の研究が挙げられる。

数あるデータ同化研究の中でも、本研究の特徴は水質 データの同化である。海洋生態系解明に資するデータ同 化は主に衛星データを用いられることが多いが、本検討 では、沿岸域において観測されているクロロフィルおよ び溶存酸素濃度(DO)の鉛直分布を同化する。データは 国土交通省近畿地方整備局が大阪湾で常時定点観測をしているものである。

#### 3. 双子実験を用いた感度解析

#### 3.1 計算条件

EnKFによるデータ同化では同化パラメータの感度解析 が必要である。ここでは同化影響半径についての感度解 析を紹介する。感度解析は双子実験によった。

影響半径は、ある1つの計算格子に対して考慮する観 測値の個数や、観測値をどの程度影響させるかが変わっ てくるため、同化計算結果に影響を及ぼす重要なパラメー タの1つである。しかし、局所化手法を用いている既往 研究例は、対象領域が本研究の大阪湾より非常に大きい 場合がほとんどであり、その影響半径を本研究に用いる ことはできない。そこで本研究では大阪湾の大きさを考 慮して、影響半径が5km、3km、2kmの3ケースを用意し、 それぞれ同化計算結果の検証を行う。

初期条件に対する摂動の与え方についてはいくつかの方 法があるが、本研究では Hu ら<sup>5)</sup>の研究で用いられた、ば らつきを与える条件がある確率分布を持っていると仮定 し、その分布からランダムに値を取りだし摂動を与える手 法を用いる。摂動を与える条件は、クロロフィルまたは DOの計算結果に与える影響が大きい4つの水質モデルパ ラメータ(光-光合成曲線の初期勾配、植物プランクトン の枯死速度、動物プランクトンの最大成長速度、20°Cに おける海底への酸素消費フラックス)と、河川流量、境界 条件のクロロフィル、DO とした。条件が持つ仮定の分布 は一様分布とし、分布の最小値、最大値に関してはそれぞ れ、精度検証に用いた計算条件値の 0.5 倍、1.5 倍とした。 双子実験でのデータ同化計算期間は2012年8月1日0時 ~8月8日0時の1週間とし、初期アンサンブル生成の ための計算期間は、データ同化計算開始の10日前である 2012年7月22日0時から10日間とした。

#### 3.2 計算結果

図3にCase1(影響範囲5km)、Case5(影響範囲3km)、Case6(影響範囲2km)のDOについてのRMSEの時系列変化を示す。クロロフィルについては影響半径によって大きな変化は現れなかった。しかし、この図のように、疑似観測値のある地点に限ってみた RMSEを





図4 影響半径を変更した場合の底層 DOの RMSE の水平分布(Case 1:5km, Case 6:2km)

指標にすると、DO については影響半径が小さくなると、 RMSE が改善する傾向が見て取れる。

一方で、図4に Case 1 および Case 6 の条件のもと実施 した同化計算の終了時(2012 年 8 月 8 日 0 時)における 底層 DOの RMSE の平面図を示す。クロロフィルについ ては影響半径によって大きな変化は現れなかったが、DO については影響半径が小さくなると RMSE が高くなる傾 向が見て取れる。これは、クロロフィルに比べ DO は濃 度の水平方向の変動が大きくなく、影響半径を小さくす ることによって、単純にデータ同化の影響を受ける計算 格子の数が少なくなってしまったことの影響を強く受け ているためと考えられる。このため、観測地点のみで考 えると影響半径は小さい方が同化効果は大きいが、湾全 体の再現性を考慮した場合、ある程度影響半径は大きい 方が良いと推察される。

# 4. 現地データの同化

### 4.1 計算条件

双子実験により一定の再現性向上が見込めることが明 らかになったことから、次に、実際の観測データである 大阪湾水質定点自動観測システムの観測データから得た クロロフィルおよび DO の鉛直プロファイルデータを用 いて、データ同化を行い、その結果の検証を行った。双 子実験の結果から、アンサンブルメンバー数は 20、局所 化手法は Covariance localization、影響半径は 5km とする。 観測誤差については、2014 年、2015 年の 8 月・9 月に実 施した船舶観測および 2016 年 6 月・7 月にかけて実施し た神戸波浪観測塔での採水調査のデータと同時期におけ る大阪湾水質定点自動観測システムの観測データから算 出した。また、観測誤差の与え方について、双子実験と 同じく観測値の割合で与える方法と固定値で与える方法 の 2 通りでデータ同化を行い、その影響についても考察

| 表 1 | 計算ケ | ース |
|-----|-----|----|
|-----|-----|----|

| Case | 観測誤差の設定 | 観測データの線形補間 |
|------|---------|------------|
| 1    | 固定      | 無し         |
| 2    | %       | 有り         |
| 3    | 固定      | 有り         |
| 4    | 同化なし計算  |            |

を行う。計算ケースを表1に示す。観測データの取得水 深と計算格子上の定義水深が異なるため、同化の際に定 義水深にあわせて、観測データを線形補間してから同化 する場合についても検討している。

#### 4.2 同化計算結果

図 5、図 6 に全 4 ケースにおけるクロロフィルおよび DO の観測地点での RMSE の時系列変化を示す。RMSE は、 Case 1 から Case 3 については観測地点である 6 地点の鉛 直プロファイルデータとアンサンブルの平均値の差から、 Case 4 については 6 地点の鉛直プロファイルデータと計算 値の差から算出している。クロロフィル、DOの両方で、デー 夕同化により RMSE が減少している。1 時間単位に RMSE を平均し、Case 4 の同化なし計算と比較した場合、RMSE の減少率は、Case 1 ではクロロフィルで約 57%、DO で約 53% 減少し、Case 2 ではクロロフィルで約 52%、DO で



約 43% 減少し、Case 3 ではクロロフィルで約 53%、DO で 約 54% 減少した。観測誤差を % で与えた Case 2 で、ク ロロフィル、DOともに RMSE の減少率が一番低くなっ た。特に DO の RMSE については Case 1 および Case 3 と 比べ RMSE が高い時間帯が多いことが分かる。図7、図8 にそれぞれ同化計算終了時(2012年8月8日0時)にお ける神戸港波浪観測塔 (Sta.4) におけるクロロフィルおよ び DO の鉛直プロファイルを示す。青、赤、緑の網掛けが それぞれのケースにおけるアンサンブルの標準偏差、青、 赤、緑の実線がそれぞれのケースにおけるアンサンブルの 平均値、黒の点線が Case 4 での計算値をあらわしている。 クロロフィルの鉛直分布を見ると、この地点では Case 1、 Case 2、Case 3 のいずれについても、同化なし計算に比べ て再現性が向上していることがわかる。一方で、DO の鉛 直分布を見ると、Case 2 のみが再現性を損なう結果となっ ていることがわかる。通常、EnKF によるクロロフィルデー タの同化においては観測誤差は観測値に対する割合で与え ることが多いが、この結果は、観測誤差の与え方において



図7 神戸港波浪観測塔におけるクロロフィルの鉛直分布



も、他の水質項目に拡張する場合には、十分な検討が必要 であることを示している。

#### 5. データ同化を用いたパラメータ最適化

再現性向上だけであれば、EnKFのような高度な同化手 法が必ずしも必要なわけではない。EnKFや4次元変分法 はデータ同化を行う際に、モデルパラメータも同時に制 御変数とすることにより、パラメータの最適化を行うこ とが可能である。双子実験、現地観測データを用いた同 化実験によるパラメータ推定について実施したが、ここ ではパラメータ推定で推定すべき「真値」のある双子実 験の結果の一部を紹介する。

図9、図10にそれぞれ、20℃における海底からの酸 素消費フラックス、沈降性の有機懸濁態窒素の分解速度 のパラメータ値のアンサンブルの時系列変化を示す。青 色の網掛けがアンサンブルの標準偏差、実線がアンサン ブルの平均値、黒の点線が疑似観測値を得るときに使用 したパラメータの「真値」、赤の点線が文献値の最大値、 緑の点線が文献値の最小値を示している。いずれのパラ メータにも時間進行に伴い、パラメータ値の変動が見ら れ、パラメータ推定が行われていることが分かる。そし て、20°Cにおける海底からの酸素消費フラックスについ ては、パラメータ値の変動が時間経過とともに落ち着き、 「真値」付近に収束していることが分かる。しかし、「真値」 付近で平均値が収束しているパラメータは、推定した 29 個の水質モデルパラメータの内7個(P-I曲線の初期勾配、 植物プランクトンの枯死速度、枯死速度に対する温度係 数、動物プランクトンの最大増殖速度、20℃における最 大硝化速度、脱窒反応に対する温度補正係数、20°Cにお





ける海底からの酸素消費フラックス)と限られていた。 それ以外のパラメータは、「真値」に近づきはするものの 「真値」付近ではない値で収束するパラメータもあった。 また、図10の沈降性の有機懸濁態窒素の分解速度のよう に、同化計算開始時のアンサンブルの平均値がパラメー タ推定により「真値」から遠ざかるパラメータも存在した。

# 6. まとめ

これまでほとんど研究が行われてこなかった沿岸域に おける水質の鉛直分布のデータ同化を実施したところ、 再現性については、予想どおり、向上することが分かっ た。しかし、領域がこれまで実施されてきた外洋と比べ て小さいこと、外洋研究と比べて、現象のスケールより 観測データ間の距離が短いことにより同化計算結果にパ ラメータの影響を強く受けることが予想された。沿岸域 における適用に当たっては、同化パラメータおよび同化 に関する諸条件について、より一層の検証が必要である。

本研究ではパラメータの最適化についても検討を行った。EnKFにより水質モデルのパラメータ最適化が実現しうるかどうかについては今後のさらなる検討による評価が必要となる。本研究の中ではパラメータが正しく最適化されたのは一部に限られており、最適化の可能性が示された一方で、今後の課題となる点も多い。

#### 謝辞

本研究の実施に当たり、地球シミュレータの貴重な計 算資源をお借りすることができた。また、本研究は JSPS 科研費 JP25709042 により実施した。記して深甚の謝意を 表する。

## 文献

- D.B. Haidvogel, H. Arango, W.P. Budgell, B.D. Comuelle, E. Curchitser, E. Di Lorenzo, K. Fennel, W.R. Geyer, A.J. Hermann, L. Lanerolle, J. Levin, J.C. McWilliams, A.J. Miller, A.M. Moore, T.M. Powell, A.F. Schepetkin, C.R. Sherwood, R.P. Signell, J.C. Warner and J. Wilkin: Ocean forecasting in terrain-following coordinates: Formulation and skill assessment of the Regional Ocean Modelling System, J. Comp. Phys., 227, pp.3595-3624. 2008
- [2] R.E. Kalman: A new approach to linear filtering and predicted problems, *Journal of Basic Engineering*, 82, pp.35-45. 1960
- [3] G. Evensen: Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using Monte Carlo methods to forecast error statics, *Journal of Geophysical Research*, Vol.99, No.C5, pp.10143-10162. 1994
- [4] 田中昌宏・Ghada EL Serafy・Herman Gerritsen・安達貴浩: アンサンブルカルマンフィルターを用いたリアルタイ ム流況予測モデルの開発,海岸工学論文集,第52巻, pp321-325,2005
- [5] Jiatang Hu, Katja Fennel, Jann Paul Mattern, and John Wilkin: Data assimilation with a local Ensemble Kalman Filter applied to a three-dimensional biological model of the Middle Atlantic Bight, *Journal of Marine Systems*, 94, pp.145-156. 2012

# **Data Assimilation Approach for Improvement of Water Quality Simulation in an Estuary**

Project Representative

Masayasu Irie Graduate School of Engineering, Osaka University

Authors

Masayasu Irie<sup>\*1</sup>, Teruhisa Okada<sup>\*1</sup>, Yoshihiko Ito<sup>\*1</sup>

\*1 Graduate School of Engineering, Osaka University

In this study, data assimilation using Ensemble Kalman Filter is performed to improve the reproducibility of water quality model for the numerical analysis of water environment in coastal areas. One main purpose of this study is assimilation of water quality data in an estuary to get a better representation of Chlorophyll and dissolved oxygen (DO). Although data assimilation has been carried out in the field of ocean science, there are little research on the data assimilation of water quality in coastal areas. In this study, we conducted experiments on twin experiments and assimilation of data collected by Osaka Bay Water Quality Automatic Observation System. The data assimilation is performed with the vertical profiles of chlorophyll and DO. In both twin experiments and real data assimilation, the reproducibility of the horizontal distributions and the vertical distributions of chlorophyll and DO is well improved. In order to obtain more reproducibility of them, it was necessary to further examine the setting of the observation error, the adjustment of the assimilation influence radius, and localization methods. We also examined to optimize model parameters in the water quality model. In the parameter optimization, there are some parameters that reach "true" values during the assimilation period, but more examinations are necessary to estimate reasonable values for all model parameters.

Keywords: Water quality model, Ensemble Kalman Filter, data assimilation, parameter optimization, Osaka Bay

#### 1. Introduction

Data assimilation has been applied in ocean sciences, especially performed with global models or models for open oceans. In coastal areas, data assimilation using nudging have been performed, and the data assimilation by a four-dimensional variational method and Ensemble Kalman Filter (EnKF) has become active in recent years. However, most of them are intended for physical phenomena, and there are rare applications for the analysis of water quality and the environment.

We use data assimilation not only to improve the simulation reproducibility but to utilize them for the purpose of parameter optimization. We got the opportunity to use the Earth Simulator. In this report, we show the sensitivity analysis of assimilation parameters of EnKF by twin experiments, the results of the data assimilation using the vertical profiles of chlorophyll and dissolved oxygen (DO), and an example of optimization of parameters in water quality models.

## 2. Settings

Target area of this study is Osaka Bay. We set the western boundary in Harima Nada, and the southern boundary in Kii Channel. The map and depth of the target area are shown in Fig. 1. The horizontal grid spacing is 500 meters each, and the number of grids in the east and south directions is 117 and 124, respectively. The vertical water column is divided into 20 layers with the s-coordinate system so that the layer thickness is thinner near the surface.

We used Regional Ocean Modeling system (ROMS)<sup>1)</sup> with a water quality model, which was modified to enhance the reproducibility of hypoxia in an enclosed bay. The schematic of the water quality model is shown in Fig. 2. In this water quality model, we handle phytoplankton, chlorophyll, zooplankton, ammonia nitrogen, nitrate nitrogen, phosphate phosphorus, suspended organic matter, and dissolved oxygen (DO) as water quality state variables.





Fig.2 Schematic of water quality model.

## 3. Twin experiments and sensitivity analysis

We performed sensitivity analyses on changing the ensemble number, localization methods and the assimilation influence radius. Figure 3 shows the horizontal distributions of RMSE of bottom DO at the end of the assimilation calculation performed under the conditions of Case 1 with the radius of 5 km and Case 6 with the radius of 2 km (August 8, 2012 at 0:00). Although there was no significant change in RMSE of chlorophyll, RMSE of the bottom DO tends to be higher if the influence radius is small. This would be because the number of computational grids that are affected by the assimilation has been reduced by decreasing the influence radius. It would be summarized that the influence radius is larger when considering the reproducibility of the entire bay.



Fig. 3 The horizontal distributions of RMSE of bottom DO; The influence radius is 5km in Case 1 and 2 km in Case 6).

# 4. Assimilation of data obtained in Osaka Bay

We also performed data assimilation using the vertical profiles of chlorophyll and DO with 1 m resolution obtained from Osaka Bay Water Quality Automatic Observation System. From results of the twin experiments, we assimilated the data with the number of ensemble members of 20, the covariance localization method for localization, and the influence radius of 5km.

Figure 4 shows the temporal change of RMSE of DO at the observation point in four cases. Case 1, 2 and 3 are the results with data assimilation and Case 4 is the result without the assimilation. Difference between Cases 1-3 are caused by the different settings of the observation error and vertical interpolation before the assimilation. The data assimilation reduces RMSE of chlorophyll and DO. Compared with the results of Case 4, the temporal average of RMSE in Case 1 decreased by approximately 57% for chlorophyll and 53% for DO. Figure 5 shows the vertical profile of chlorophyll at the Kobe Port Wave Observation Tower at the end of the assimilation calculation (August 8, 2012 at 0:00). The standard deviations of the ensemble of Case 1-3 are indicated by blue, red, and green shading and means of the ensemble in the cases are indicated by solid lines, and the black dotted line represents the calculation value in Case 4 (without assimilation). Red circles are observations. When the data assimilated, the vertical profiles of chlorophyll is better represented.

RMSE of DO(mg/L)



Fig. 4 The temporal change of RMSE of DO. Red, green and blue solid lines are RMSE in Case 1, 2, 3 with assimilation; Black dotted line is results without assimilation.



Fig.5 The vertical profiles of Chlorophyll at Kobe Port Wave Observation Tower.

#### 5. Parameter estimation in water quality model

It is not necessary to use an advanced assimilation method like EnKF if we just obtain the better reproducibility. If one uses EnKF or a four-dimensional variational method, one can optimize parameters by regarding the model parameters as control variables.

In this study, we also tried to optimize the model parameters

in the water quality model. Figure 6 shows the temporal change of the ensemble of the decomposition rate of sediment oxygen demand (flux) at 20 °C, The standard deviation is indicated by blue shading, while a solid blue line is the average of the ensemble. The black dotted line shows "true value" of the parameter and the red and green dotted lines are the maximum and minimum literature values, respectively. As the assimilation propagates, the parameter value becomes close to the "true value." While there some other parameters which become closer to "true values", some others do not. We need further investigation to know whether EnKF can be used to optimize parameters in water quality models applied for the analysis of coastal water environment.



# 6. Summary

We performed data assimilation using the vertical distributions of water quality substances in coastal areas, and got the reproducibility of the distributions as expected. However, it was under the strong influence of the parameter for the setting of data assimilation. It is because the distance between the observation sites is shorter than the scale of the phenomenon compared with the difference in assimilation in an open ocean. For application in coastal areas, further verification of assimilation parameters and assimilation conditions is necessary.

We also investigated the optimization of model parameters in an water quality model. In this study, we got a limited number of parameters that were correctly optimized. We need further tests to develop the method to optimize the parameters better by EnKF.

# Acknowledgement

We express our profound gratitude for the opportunity that we used computational resources of the Earth Simulator. This work was supported by JSPS KAKENHI Grant Number JP25709042.

## References

 D.B. Haidvogel, H. Arango, W.P. Budgell, B.D. Comuelle, E. Curchitser, E. Di Lorenzo, K. Fennel, W.R. Geyer, A.J. Hermann, L. Lanerolle, J. Levin, J.C. McWilliams, A.J. Miller, A.M. Moore, T.M. Powell, A.F. Schepetkin, C.R. Sherwood, R.P. Signell, J.C. Warner and J. Wilkin: Ocean forecasting in terrain-following coordinates: Formulation and skill assessment of the Regional Ocean Modelling System, J. Comp. Phys., 227, pp.3595-3624. 2008