

第2世代化学再解析データセット (TCR) バージョン2の構築

課題責任者

滝川 雅之 海洋研究開発機構 ビッグデータ活用予測プロジェクトチーム

著者

関谷 高志^{*1}, 宮崎 和幸^{*2}, 大越智 幸司^{*1}, 滝川 雅之^{*1,3}

*1 海洋研究開発機構 ビッグデータ活用予測プロジェクトチーム, *2 海洋研究開発機構 地球環境観測研究開発センター, *3 海洋研究開発機構 北極環境変動総合研究センター

海洋研究開発機構において開発されている LETKF (Local Ensemble Transform Kalman Filter: 局所アンサンブル変換カルマンフィルタ) を用いた大気環境データ同化システムは、これまで多成分同時同化など手法面での高度化を中心に開発を進めてきており、水平解像度としては約 2.8° (300 km) と気候影響評価を対象とした全球化学輸送モデルの典型的な解像度を採用していた。しかしながら、大気汚染物質、特に NO₂ は大都市近傍などにおいて非常に大きな空間分布変動を示すことが知られており、本課題では大都市域を解像可能となる 0.56° まで解像度を上げるための技術要素開発および試験的な同化実験を行い、地上観測等との比較を実施した。その結果、ロンドン、東京では衛星リトリバルの同化による地表濃度の改善が十分ではないものの、ニューヨーク、香港においては同化によって地表濃度が大きく改善することが分かった。

キーワード：データ同化, 化学輸送モデル, 全球, 大気汚染, メガシティ

1. 研究の目的と意義

対流圏において二酸化窒素 (NO₂) は、光化学反応を介して、光化学スモッグの主原因であるオゾン (O₃)、および PM2.5 の主成分のひとつである硝酸塩エアロゾルを生成する。これらの物質は、人体に有害であると同時に、地球の放射収支に影響し気候変動に寄与すると考えられている。これらの大気汚染物質について、化学輸送モデルを用いた予報・予測が数多く行われてきており、その結果は社会においても活用されている。しかしながら、排出量データを含む、化学輸送モデルのシミュレーション結果の不確実性は依然として大きいのが現状である。そこで近年、LETKF や 4 次元変分法などの高度なデータ同化技術を用いて、観測情報を化学輸送モデルに取り込み、大気汚染物質の濃度分布や排出量を推定する取り組みが行われつつある (e.g., Inness et al., 2015 [1]; Miyazaki et al., 2015 [2])。海洋研究開発機構において開発されている LETKF を用いた大気環境データ同化システムは、複数の衛星測器からの多種類の汚染物質の観測を同時に同化しており、全球の対流圏光化学システムを最適化することで、濃度分布、排出量の高精度な推定を可能としている (Miyazaki et al., 2015 [2], 2017 [3])。その一方で、データ同化システムの水平解像度は約 2.8° (300 km) と気候影響評価を対象とした全球化学輸送モデルの典型的な解像度を採用している。しかしながら、大気汚染物質、特に NO₂ は大都市近傍などにおいて非常に大きな空間分布変動を示すことが知られている。そこで、本課題では、昨年度に性能評価を行った高解像度バージョンの全球化学輸送モデル CHASER (Sudo et al., 2002 [4]) を用いて、水平 0.56° 解像度の地球環境データ同化システムを構築し、試験的なデータ同化計算を行った。

2. 研究成果

本課題では、高解像度同化実験を行うにあたり、データ同化システムにおける衛星観測の取り扱いの見直しを行った。通常、衛星観測リトリバルの水平分解能 (約 10 ~ 80 km) は全球化学輸送モデルの水平解像度 (約 300 km) より細かいため、リトリバルされた観測を直接データ同化した場合、それぞれの空間代表性の間に大きなギャップが生じてしまう (図 1 (a))。そこで本システムでは、モデル格子内に存在するリトリバルを平均化することによって、そのモデル格子点を代表する観測データとする、スーパー・オブザベーション手法を採用している。本手法を用いた場合、観測誤差 (σ_{super}) は測定誤差 ($\sigma_{super, meas}$) と空間代表誤差 ($\sigma_{super, rep}$) の二乗和の平方根によって計算される。

$$\sigma_{super} = \sqrt{\sigma_{super, meas}^2 + \sigma_{super, rep}^2}$$

測定誤差は衛星リトリバルプロダクトとして提供されるリトリバル誤差を用いる。一方、空間代表性誤差は観測データがモデル格子点を完全に被覆しないことに起因する誤差であるため、衛星観測データの統計解析により見積もる必要がある。空間代表性誤差は、スーパー・オブザベーションに用いる格子サイズに依存することが先行研究により指摘されている (Boersma et al., 2016 [5])。そのため、0.56° 解像度の格子用に空間代表性誤差を更新し、従来の 2.8° 解像度の空間代表性誤差と比較した。その結果、同じ被覆率の場合、0.56° 解像度の格子を用いた場合の方が、2.8° 解像度の格子を用いた場合よりも空間代表性誤差が大きくなることが示された (図 1 (b))。

さらに、0.56° 解像度用に更新した空間代表性誤差を用いて、試験的なデータ同化計算を約 2 週間行った。デー

タ同化性能の評価のため、試験的計算の後半の期間における、衛星観測の同化によって推定されたNO₂濃度場を独立した地上観測と比較した(図2)。その結果、ロンドン、東京では衛星リトリバルの同化による地表濃度の改善が十分ではないものの、ニューヨーク、香港においては同化によって地表濃度が大きく改善した。改善が十分でない観測地点については、アンサンブルサイズが十分でない、局所化半径が最適な値に設定されていないなどの可能性が考えられる。また、NO_x排出量推定の際の観測データの取り扱いに改善の余地があることも明らかとなった。

3. まとめおよび今後の課題

海洋研究開発機構において開発されているLETKFを用いた大気環境データ同化システムは、これまで多成分同時同化など手法面での高度化を中心に開発を進めてきており、水平解像度としては約2.8°(300 km)と気候影響評価を対象とした全球化学輸送モデルの典型的な解像

度を採用していた。しかしながら、大気汚染物質、特にNO₂は大都市近傍などにおいて非常に大きな空間分布変動を示すことが知られており、本課題では大都市域を解像可能となる0.56°まで解像度を上げるための技術要素開発および試験的な同化実験を行い、地上観測等との比較を実施した。今後は、データ同化システムの0.56°解像度における最適なパラメータ設定について継続的に探索するとともに、改良した排出量推定スキームの導入を行い、0.56°解像度の大気環境データ同化システムの改良を試みる予定である。

謝辞

本研究の一部は文部科学省フラグシップ2020(ポスト「京」)重点課題4「観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化」の支援を受けた。実験は海洋研究開発機構の地球シミュレータ特別推進課題で実施した。実験の実施には上原均氏、池田美紀子氏からご助力をいただいた。

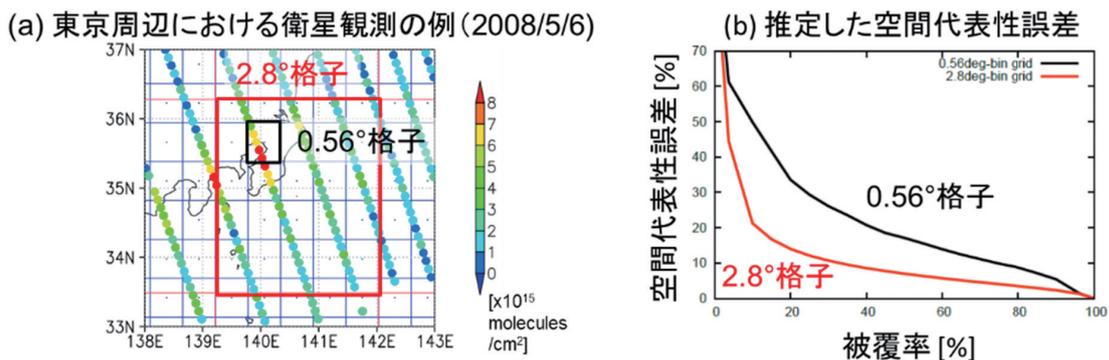


図1 (a) 2008年5月6日の東京周辺におけるOMIによる対流圏NO₂カラム量の観測(×10¹⁵ molecules cm⁻²)。赤色、黒色の長方形は、それぞれ2.8°、0.56°解像度の東京を含むモデル格子点を示している。(b) 衛星観測データの統計解析から推定した各被覆率における空間代表性誤差(%)。赤色、黒色の線は、それぞれ2.8°、0.56°格子において推定を行った誤差を示す。

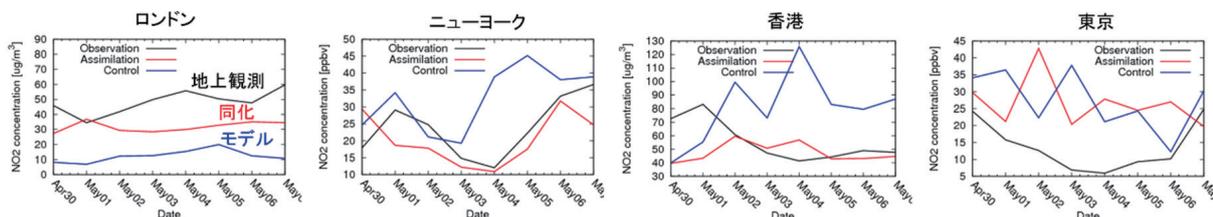


図2 ロンドン、ニューヨーク、香港、東京における地上観測(黒実線)とモデル計算(青実線)、データ同化(赤実線)の日平均NO₂濃度の比較(ロンドン、香港: μg m⁻³、ニューヨーク、東京: ppbv)。

文献

- [1] Inness et al. Inness, A., Blechschmidt, A.-M., Bouarar, I., Chabrillat, S., Crepulja, M., Engelen, R. J., Eskes, H., Flemming, J., Gaudel, A., Hendrick, F., Huijnen, V., Jones, L., Kapsomenakis, J., Katragkou, E., Keppens, A., Langerock, B., de Mazière, M., Melas, D., Parrington, M., Peuch, V. H., Razinger, M., Richter, A., Schultz, M. G., Suttie, M., Thouret, V., Vrekoussis, M., Wagner, A., and Zerefos, C., “Data assimilation of satellite-retrieved ozone, carbon monoxide and nitrogen dioxide with ECMWF’s Composition-IFS”, *Atmos. Chem. Phys.*, 15, 5275–5303, doi:10.5194/acp-15-5275-2015, 2015.
- [2] Miyazaki, K., Eskes, H. J., and Sudo, K., “A tropospheric chemistry reanalysis for the years 2005–2012 based on an assimilation of OMI, MLS, TES, and MOPITT satellite data”, *Atmos. Chem. Phys.*, 15, 8315–8348, doi:10.5194/acp-15-8315-2015, 2015.
- [3] Miyazaki, K., Eskes, H., Sudo, K., Boersma, K. F., Bowman, K., and Kanaya, Y., “Decadal changes in global surface NO_x emissions from multi-constituent satellite data assimilation”, *Atmos. Chem. Phys.*, 17, 807–837, doi:10.5194/acp-17-807-2017, 2017.
- [4] Sudo, K., Takahashi, M., Kurokawa, J., and Akimoto, H., “CHASER: A global chemical model of the troposphere 1. Model description”, *J. Geophys. Res.*, 107, ACH 7–1–ACH 7–20, doi:10.1029/2001JD001113, 2002.
- [5] Boersma, K. F., Vinken, G. C. M., and Eskes, H. J., “Representativeness errors in comparing chemistry transport and chemistry climate models with satellite UV–Vis tropospheric column retrievals”, *Geosci. Model Dev.*, 9, 875–898, <https://doi.org/10.5194/gmd-9-875-2016>, 2016.

Development of a Next-generation Data Assimilation System for the Tropospheric Chemical Reanalysis (TCR)

Project Representative

Masayuki Takigawa Project Team for HPC Advanced Predictions utilizing Big Data, Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology

Authors

Takashi Sekiya^{*1}, Kazuyuki Miyazaki^{*2}, Koji Ogochi^{*1} and Masayuki Takigawa^{*1,3}

*1 Project Team for HPC Advanced Predictions utilizing Big Data, Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology, *2 Research and Development Center for Global Change, Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology, *3 Institute of Arctic Climate and Environment Research, Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology

The atmospheric environment data assimilation system using LETKF (Local Ensemble Transform Kalman Filter) developed in JAMSTEC has been adopted using a horizontal resolution of 2.8° (300 km) as horizontal resolution. However, it is known that atmospheric pollutants, especially NO₂, show very large spatial distribution fluctuations around megacities. In this study, the 0.56°-resolution data assimilation experiments has been carried out and the assimilated dataset was evaluated using ground-based independent monitoring networks for the precursors of pollutants. As a result, it was found that the assimilation greatly improves the surface concentration especially in New York and in Hong Kong.

Keywords: data assimilation, chemical transport model, global scale, air pollution, megacities

1. Objective of this study

Tropospheric ozone and its major precursors (NO_x and CO) are important for human health, ecosystems, and climate. The combined use of satellite measurements of ozone and its precursors using advanced data assimilation technique such as ensemble Kalman filter is capable to provide comprehensive constraints on global tropospheric chemistry system (Inness et al., 2015 [1]; Miyazaki et al., 2015[2]). In this study, a 0.56°-resolution global data assimilation system is developed towards the use of future satellite measurements at high spatial resolution such as TROPOMI and geostationary satellites. We demonstrate the performance of a 0.56°-resolution data assimilation of multiple chemical species (ozone, NO₂, CO, HNO₃, and SO₂) from multiple satellite sensors (OMI, GOME-2, SCIAMACHY, TES, MOPITT, and MLS) for concentration analyses and emission estimations. After a data assimilation in April 2008, the global root mean square error (RMSE) of tropospheric NO₂ column compared to OMI was reduced by 56%. The global RMSE against OMI was smaller by 56% in the data assimilation at 0.56° resolution than at 2.8° resolution. The 0.56°-resolution data assimilation showed better agreements in surface NO₂ concentrations at the selected 43 cities compared to independent monitoring networks (AirBase, AQS, and other networks) than the model simulation. Agreements in tropospheric ozone concentrations compared to ozonesonde, aircraft, and surface measurements were also improved. These improvements were attributed to direct tropospheric and lower

stratospheric ozone adjustments and surface NO_x, CO, and lightning NO_x source corrections. The 0.56°-resolution data assimilation increased the global total surface NO_x emission by 35% compared to a prior emission (HTAP_v2.2, GFED4s, and GEIA inventories). Large emission increments were found at megacities and biomass burning hotspots. Detailed spatial distributions of the estimated surface NO_x emissions differed significantly between 0.56° and 2.8° resolutions. These results suggest that the potentials of using a 0.56°-resolution data assimilation for studying tropospheric chemistry on scales from megacity to global.

2. Results

The treatment of satellite measurements in the global data assimilation has been reevaluated in advance to conducting a 0.56°-resolution global data assimilation. In the most global applications of data assimilation for pollutants, the spatial resolution of the model (~300 km) is coarser than that of the satellite retrievals (10~80 km). Differences between the horizontal resolution of satellite retrievals and model grid cell might cause a large difference of horizontal representativeness (Fig. 1a). Therefore, an ensemble of satellite pixels called “superobservation” for each model grid cell is applied for the high-resolution data assimilation. Here, the observational error for superobservations (σ_{super}) can be calculated by using the measurement error ($\sigma_{super,meas}$) and the horizontal representativeness error ($\sigma_{super,rep}$) as:

$$\sigma_{super} = \sqrt{\sigma_{super,meas}^2 + \sigma_{super,rep}^2}$$

In this study, the individual retrieval errors for satellite data are applied as the measurement error. The horizontal representativeness errors are evaluated from the statistical analysis of satellite data for each model grid cell because it is caused by the coverage of satellite pixels in a grid cell. Boersma et al. (2016 [5]) found that the horizontal representativeness error for superobservations depends on the size of model grid cell. Therefore, the horizontal representativeness error has been estimated for a 0.56°-resolution global data assimilation, and it is compared to that of 2.8°-resolution global data assimilation. It is found that the horizontal representativeness error is larger than that of coarser resolution assimilation if the horizontal coverage of satellite pixel in a grid cell is same (Figure 1b).

A short-term global data assimilation for 0.56°-resolution has been conducted using the horizontal representativeness error updated for high-resolution assimilation. The performance a 0.56°-resolution data assimilation is evaluated using NO₂ concentration observed by independent monitoring networks in Asia, US, and the Europe for the latter part of assimilation period (Fig. 2). Agreements of the surface NO₂ concentration is improved by a 0.56°-resolution data assimilation especially in New York and Hong Kong. The improvements is not remarkable in Tokyo and London, and the possible cause of this discrepancy seems to be an insufficient number of ensemble member, an inadequate localization radius in assimilation, or

an inappropriate treatment of observational data during the estimation of NO_x emission.

3. Summary and future works

A 0.56°-resolution global data assimilation system was developed towards the use of future satellite measurements at high spatial resolution such as TROPOMI and geostationary satellites. We demonstrated the performance of a 0.56°-resolution data assimilation of multiple chemical species (ozone, NO₂, CO, HNO₃, and SO₂) from multiple satellite sensors (OMI, GOME-2, SCIAMACHY, TES, MOPITT, and MLS) for concentration analyses and emission estimations. After a data assimilation in April 2008, the global root mean square error (RMSE) of tropospheric NO₂ column compared to OMI was reduced by 56%. The global RMSE against OMI was smaller by 56% in the data assimilation at 0.56° resolution than at 2.8° resolution. The 0.56°-resolution data assimilation showed better agreements in surface NO₂ concentrations at the selected 43 cities compared to independent monitoring networks (AirBase, AQS, and other networks) than the model simulation. Agreements in tropospheric ozone concentrations compared to ozonesonde, aircraft, and surface measurements were also improved. These improvements were attributed to direct tropospheric and lower stratospheric ozone adjustments and surface NO_x, CO, and lightning NO_x source corrections. The 0.56°-resolution data assimilation increased the global total surface NO_x emission by 35% compared to a prior emission

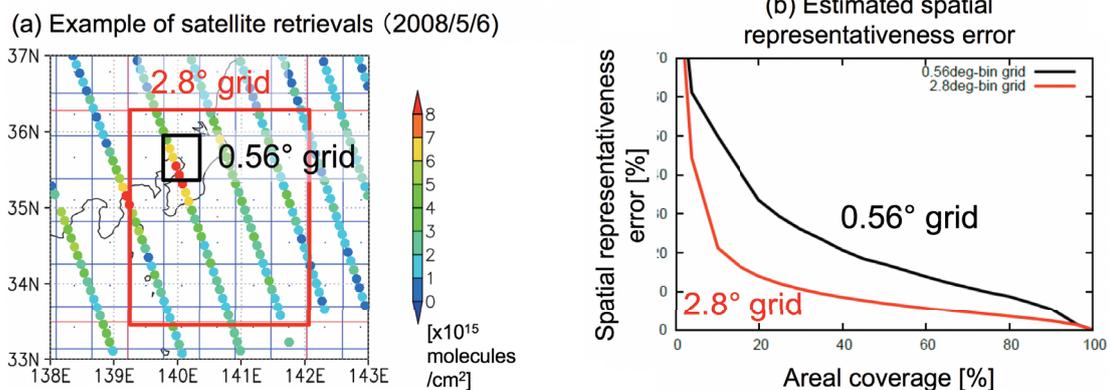


Fig. 1 (a) Tropospheric column number density of NO₂ from the satellite retrieval of OMI on 6 May 2008 around Tokyo ($\times 10^{15}$ molecules cm^{-2}). Red and black square denotes a grid cell of 2.8°- and 0.56°-resolution model covering Tokyo metropolitan area, respectively. (b) Relative horizontal representativeness errors as a function of the covered fraction of one model grid cell for a 2.8°- and a 0.56°- resolution global data assimilation. Red and black line denotes 2.8° and 0.56°, respectively.

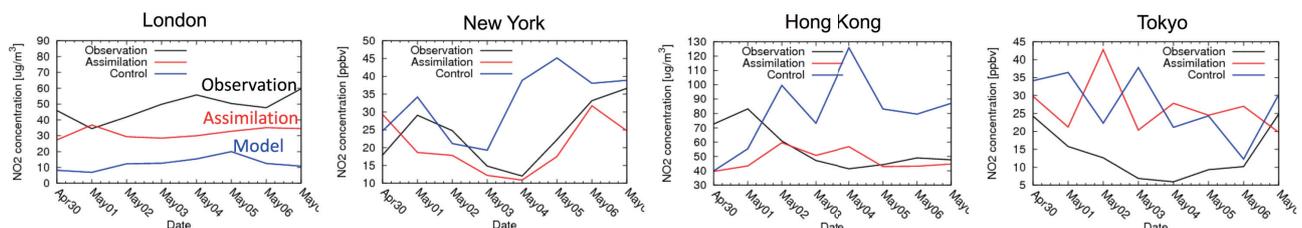


Fig. 2 Daily-mean NO₂ concentration near the surface in London, New York, Hong Kong, and Tokyo from August 30 to May 7, 2008. Black, red, and blue lines denotes observations at the ground-based monitoring networks, 0.56°-resolution data assimilation, and forward model, respectively. Units are $\mu\text{g m}^{-3}$ for London and Hong Kong, and ppbv for New York and Tokyo.

(HTAP_v2.2, GFED4s, and GEIA inventories). Large emission increments were found at megacities and biomass burning hotspots. Detailed spatial distributions of the estimated surface NO_x emissions differed significantly between 0.56° and 2.8° resolutions. These results suggest that the potentials of using a 0.56°-resolution data assimilation for studying tropospheric chemistry on scales from megacity to global.

Acknowledgements

This work was supported by the post-K computer project Priority Issue 4 (the advancement of meteorological and global environmental predictions utilizing observational Big Data). The Earth Simulator was used for simulations as a “Strategic Project with Special Support” of the Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology. The authors would like to thank Ms. Ikeda and Mr. Uehara for their cooperation in performing the simulations.

References

- [1] Inness et al. Inness, A., Blechschmidt, A.-M., Bouarar, I., Chabrillat, S., Crepulja, M., Engelen, R. J., Eskes, H., Flemming, J., Gaudel, A., Hendrick, F., Huijnen, V., Jones, L., Kapsomenakis, J., Katragkou, E., Keppens, A., Langerock, B., de Mazière, M., Melas, D., Parrington, M., Peuch, V. H., Razinger, M., Richter, A., Schultz, M. G., Suttie, M., Thouret, V., Vrekoussis, M., Wagner, A., and Zerefos, C., “Data assimilation of satellite-retrieved ozone, carbon monoxide and nitrogen dioxide with ECMWF’s Composition-IFS”, *Atmos. Chem. Phys.*, 15, 5275–5303, doi:10.5194/acp-15-5275-2015, 2015.
- [2] Miyazaki, K., Eskes, H. J., and Sudo, K., “A tropospheric chemistry reanalysis for the years 2005–2012 based on an assimilation of OMI, MLS, TES, and MOPITT satellite data”, *Atmos. Chem. Phys.*, 15, 8315–8348, doi:10.5194/acp-15-8315-2015, 2015.
- [3] Miyazaki, K., Eskes, H., Sudo, K., Boersma, K. F., Bowman, K., and Kanaya, Y., “Decadal changes in global surface NO_x emissions from multi-constituent satellite data assimilation”, *Atmos. Chem. Phys.*, 17, 807–837, doi:10.5194/acp-17-807-2017, 2017.
- [4] Sudo, K., Takahashi, M., Kurokawa, J., and Akimoto, H., “CHASER: A global chemical model of the troposphere 1. Model description”, *J. Geophys. Res.*, 107, ACH 7–1–ACH 7–20, doi:10.1029/2001JD001113, 2002.
- [5] Boersma, K. F., Vinken, G. C. M., and Eskes, H. J., “Representativeness errors in comparing chemistry transport and chemistry climate models with satellite UV–Vis tropospheric column retrievals”, *Geosci. Model Dev.*, 9, 875–898, <https://doi.org/10.5194/gmd-9-875-2016>, 2016.