基于智能优化粒子滤波算法的热层大气预报研究

任德馨^{1,2,3}, 雷久侯^{1,2,3*}

1. 中国科学技术大学地球和空间科学学院, 中国科学院近地空间环境重点实验室, 合肥 230026;

2. 中国科学技术大学蒙城地球物理国家野外科学观测研究站, 蒙城 233500;

3. 中国科学技术大学, 中国科学院比较行星学卓越创新中心, 合肥 230026

* 通讯作者, E-mail: lejih@ustc.edu.cn

收稿日期: 2021-04-19; 收修改稿日期: 2021-09-06; 接受日期: 2021-09-22; 网络版发表日期: 2021-11-22

中国科学院稳定支持基础研究领域青年团队计划项目(编号: YSBR-018)、中国科学院战略性先导科技专项(B类)项目(编号: XDB41000000)和中国博士后科学基金项目(编号: 2021TQ0318)资助

摘要 随着人类空间活动的快速发展, 地球低轨航天器数量迅速增长, 近地空间变得愈发拥挤. 因此, 亟需采取有效措施预报低轨航天器的运行轨迹, 以避免卫星碰撞等事件的发生. 热层大气对航天器的拖曳作用, 是造成其轨道衰减的重要原因. 然而, 由于热层数值模式存在诸多不确定性参数, 以及太阳和地磁活动等外部驱动难以预测等多种因素, 热层大气预报误差会随时间的增加而快速增大. 对热层大气的可靠预报仍是空间天气领域的难题之一. 本研究开发了一种新型的基于全球观测的热层预报模式(GOFT). 该模式通过智能优化粒子滤波算法, 对理论模式中可能导致热层状态估计出现显著误差的主要不确定性参数进行智能调整, 提高了模式的预报性能. 同时, GOFT对热层大气状态的准确估计将有助于提升对高层大气时空演化特性的深入认识.

关键词 热层, 预报, 智能优化粒子滤波, 不确定性参数

1 引言

随着人类空间活动的快速发展, 地球近地轨道(LEO)航天器数量迅速增长, 近地空间变得愈发拥挤(Radtke等, 2017), 亟需采取有效措施预报LEO航天器的运行轨迹, 以避免卫星碰撞等事件的发生(Bussy-Virat等, 2018). 热层大气可通过曳力作用使LEO航天器发生轨道衰减(He等, 2020). 由于热层受太阳、地磁, 以及低层大气活动等的影响, 呈现复杂的时空变化特性(Emmert, 2015), 大气阻力估计的不确定性是引起航天器轨迹预报误差的主要原因(Berger等,

2020). 因此, 迫切需要实现热层大气准确预报, 以确保LEO航天器的安全运行(Hejduk和Snow, 2018).

在传统的高层大气数值预报应用中, 一般通过特定的数据同化方法, 对实时热层大气状态(如质量密度、温度和中性成分等)进行尽可能准确的估计, 该方面已取得丰硕的研究成果(Picone等, 2005; Matsuo等, 2012, 2013; Mehta和Linares, 2017; Ruan等, 2018; Sutton, 2018; Cantrall等, 2019; Gondelach和Linares, 2020; Ren和Lei, 2020; Weimer等, 2020). 其后使用预报模式对热层大气状态进行预报. 一系列研究表明, 高层大气理论模式基本上可以重现不同时空尺度下复杂的

中文引用格式: 任德馨, 雷久侯. 2022. 基于智能优化粒子滤波算法的热层大气预报研究. 中国科学: 地球科学, 52(1): 186–198, doi: 10.1360/N072021-0113
英文引用格式: Ren D, Lei J. 2022. A long-range forecasting model for the thermosphere based on the intelligent optimized particle filtering. Science China Earth Sciences, 65(1): 75–86, <https://doi.org/10.1007/s11430-021-9847-9>

热层大气变化特征(Fesen等, 2002; Qian和Solomon, 2012; Emmert, 2015), 因此理论模式通常被选用作为高层大气预报模式(Sutton, 2018). 但是, 由于热层理论模式存在不确定性参数或者缺少物理过程等问题, 以及太阳与地磁活动预测困难, 理论模式对热层大气的预报误差会随时间迅速增大(Schunk等, 2012). 目前, 对热层大气的高精度预报仍是空间天气领域的难题之一.

本研究中, 我们主要关注预报模式不确定性参数, 这是实现热层大气高精度预报所面临的重要挑战之一. 我们开发了一种新型的基于全球天基观测的热层预报模式(global observation-based forecast for the thermosphere, GOFT). 该模式使用美国国家大气研究中心开发的全球热层-电离层-电动力学耦合模式(thermosphere-ionosphere-electrodynamics general circulation model, TIEGCM)作为基础, 通过智能优化粒子滤波算法, 对TIEGCM中可能导致热层状态估计出现显著误差的一系列不确定性参数进行智能调整, 以提高热层大气预报精度. 同时, 我们将GOFT预报结果与理论模式TIEGCM以及工程应用广泛使用的热层经验模型(mass spectrometer incoherent scatter radar, MSIS)进行了对比验证, 并讨论了提升高层大气预报精度的可能改进方向.

2 数据与方法

2.1 TIEGCM

GOFT使用TIEGCM作为基本理论模式. TIEGCM

模式通过自洽求解中性和离子的能量、动量与连续性方程, 可获得约97~600km高度范围内的热层-电离层状态(Richmond等, 1992; Qian等, 2014). 作为高层大气物理研究中使用最为广泛的物理模型之一, TIEGCM有能力再现基本的热层-电离层系统变化特征(Qian和Solomon, 2012). 本研究中, 模式水平分辨率为 5° , 垂直分辨率为1/2标高. 低层大气周日与半日潮汐由GSWM模型(Hagan和Forbes, 2002, 2003)定义. 高纬对流由地磁活动指数 K_p 驱动的Heelis模型(Heelis等, 1982)提供. 此外, 太阳XUV、EUV和FUV辐射谱由太阳辐射指数 $F_{10.7}$ 驱动的林VAC模式(Richards等, 1994; Solomon和Qian, 2005)给出.

2.2 GOFT

如前所述, 预报模式的不完善和参数不确定性是限制热层大气预报精度与有效预报时长的重要因素之一. 针对这一问题, 我们构建了一种新型的基于智能优化粒子滤波算法的热层预报模式GOFT, 算法逻辑如图1所示. 粒子滤波是非线性非高斯系统状态估计常用的数据同化算法(Djuric等, 2003; van Leeuwen, 2009). GOFT模式粒子群中“粒子”对应不确定性参数被扰动后的TIEGCM模式. 在当前版本中, 我们调整了潮汐、焦耳加热因子等12个对热层状态存在显著影响的不确定性参数(见2.2.1节).

GOFT在运行之前首先对粒子群进行初始化(2.2.2节). 运行期间, 粒子在每个时间步更新一定时长(本研究中为12h). 其后根据模拟-观测误差获得每个粒子权重(2.2.3和 2.2.4节). 这些带权重的粒子则被用于热层

图1 预报模式GOFT示意图

彩色圆点表示GOFT中粒子, 其大小与粒子权重成正比. 红色曲线表示概率密度函数

预报(2.2.5节). 为了获得更优的粒子群, 在下一步同化新的观测资料前, 通过智能优化算法对粒子群中部分粒子进行变异(2.2.6节), 从而实现对粒子群的适应性优化.

2.2.1 不确定性参数扰动

GOFT中“粒子”对应不确定性参数被扰动的TIEGCM理论模式. 在当前版本中, 我们选择了12个对热层状态存在显著影响的不确定性参数, 包括低层大气潮汐参数化(Li等, 2018)、湍流参数化(Qian等, 2009)、太阳活动与地磁扰动(Emmert, 2015)、高层大气红外辐射(Mlynczak等, 2003, 2008), 以及等离子体与中性大气相互作用(Hsu等, 2016)等. 具体的扰动参数及其变化范围为: 周日迁移潮汐 $[-2, 2]$ 、半日迁移潮汐 $[-2, 2]$ 、焦耳加热系数 $[1.5, 1.8]$ 、太阳辐射加热率 $[0.5, 5]$ 、跨极盖电势 $[0.8, 1.2]$ 、半球能量 $[0.8, 1.2]$ 、NO冷却率 $[0.5, 10]$ 、CO₂冷却率 $[0.5, 10]$ 、离子-氧原子碰撞频率 $[0.5, 10]$ 、湍流扩散系数 $[0.5, 10]$ 、TIEGCM底边界温度 $[-10, 10]$ 、TIEGCM底边界高度 $[-5, 5]$. 底边界温度和高度与默认值直接相加, 其余参数均作为因子与默认值相乘. 不确定性参数的扰动幅度通过不同约束组合下GOFT预报准确度的对比情况确定. 模式不确定性参数在初始化过程中被随机扰动, 其后由模式自动进行选择变异(见2.2.6节). 在后续描述中, 粒子 p 的扰动参数组(由上述12个扰动参数组成)用长度为12的向量 $\mathbf{F}_p$ 表示. 需要指出的是, 针对NO的产生过程 $\text{N}(\text{D}) + \text{O}_2 \rightarrow \text{NO} + \text{O}$, 温度相关的反应率可以更好地描述磁暴期间热层大气变化特性(Chen和Lei, 2018), 我们在GOFT中设置该化学反应率与温度相关 $k = 6.2 \times 10^{-12} (T_n/300) \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$, 其中 T_n 为热层大气温度(Duff等, 2003).

2.2.2 粒子群初始化

在运行GOFT之前, 首先需要对粒子群进行初始化. 本研究中, 设置粒子总数 $P=90$. 首先对参数组 $\mathbf{F}_p$ 进行随机扰动, 生成 $2P=180$ 个扰动粒子. 考虑到高层大气需要一段时间对参数扰动进行充分响应, 随机扰动粒子被提前运行5天, 且最后1天的模拟结果被用于计算粒子适应度(见2.2.3和2.2.4节). 适应度最高的 P 个粒子被选用组成初始粒子群.

2.2.3 误差计算

本研究中, GOFT同化3种观测数据, 包括地球低轨卫星原位密度探测以及临边探测的热层大气密度与温度. 粒子群中 p_{th} 粒子相对 m_{th} 种观测的误差 $\Delta x_{m,p}$ 为

$$\Delta x_{m,p} = \exp \left(\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \ln \left(\frac{y_{m,p,n}}{z_{m,n}} \right) \right), \quad (1)$$

式中, $z_{m,n}$ 表示 m_{th} 种观测的第 n 个观测值, $y_{m,p,n}$ 为 p_{th} 粒子的相应模拟结果, N 表示该种观测资料在当前分析时段的总观测数目.

2.2.4 权重计算

假设共 M 种观测资料在当前运行步被同化入GOFT模式中, p_{th} 粒子关于 m_{th} 种观测的估计误差为 $\Delta x_{m,p}$, 则 p_{th} 粒子的适应度 f_p 表示为

$$f_p = \exp \left(- \sum_{m=1}^M \frac{\Delta x_{m,p}^2}{\sigma_m^2} \right), \quad (2)$$

式中, $\sigma_m = \text{mean}(\Delta x_{m,p}) + \text{std}(\Delta x_{m,p})$ 为粒子群中各粒子相对 m_{th} 种观测误差的均值和标准差之和. 上式可知, 粒子群关于 m_{th} 种观测的适应度与其模拟结果的平均误差及标准差反相关, 因此模式更偏向于改进粒子群使得模拟结果与该类观测更为接近. 粒子 p_{th} 的权重为归一化后的适应度, 表示为

$$\omega_p = f_p / \sum_{p=1}^P f_p, \quad (3)$$

式中, P 为粒子群中粒子总数目.

2.2.5 状态估计与预报

在当前GOFT版本中, 粒子群更新的时间步长为12h, 各粒子的权重由该时段内相应的模拟结果计算获得. 其后, 带权重的粒子可直接向后运行进行热层大气预报. 本研究中, 我们评估了GOFT对热层大气的30天预报性能. 更新周期(12h)内的后验结果和随后的30天预报结果为粒子群中 P 个粒子输出结果的加权平均, 其中权值为相应粒子的权重.

2.2.6 粒子群优化

在下一更新步前, 若最近更新时段内存在超过2种

以上类型的观测可用于GOFT同化, 则通过对粒子的重采样与变异更新粒子群. 否则, 仅根据测量值对粒子群中粒子权重进行更新. 本研究使用残差重采样方法(Douc和Cappé, 2005; Zhang等, 2013)对粒子进行采样, 以确定可以被原样保留到下一更新步的粒子. 假设有 $Q(Q \leq P)$ 个粒子被采样得到, 其中 q_{th} 粒子被采样 S_q ($S_q \geq 1$)次. 则这 Q 个粒子可直接保留用于下一更新步中. 在GOFT中, 总粒子数目 P 不随时间变化, 因此需要进一步生成 $R=P-Q$ 个粒子以保证粒子群数目不变.

GOFT采用差分进化算法(Price, 2013)进化粒子, 以产生其余 R 个粒子. 假设 p_{th} 粒子对应的扰动参数组为 $\mathbf{F}_p$, 该粒子经过变异后扰动参数组为 $\mathbf{F}_p'$, 其定义为 $\mathbf{F}_p' = \mathbf{F}_p + f(\mathbf{F}_j - \mathbf{F}_k)$, 其中差分进化系数 $f=0.5$, $\mathbf{F}_j$ 和 $\mathbf{F}_k$ 为粒子群中随机选择的两个粒子. 最后, 采用交叉算子(交叉率为0.3)对变异前后的扰动参数组 $\mathbf{F}_p$ 与 $\mathbf{F}_p'$ 进行选择, 进化出最终的试验粒子(扰动参数组为 $\mathbf{F}_p''$). 在GOFT中, 我们根据 Q 个粒子的采样概率(S_q-1)/ R , 通过上述差分进化算法, 生成 P 个试验粒子. 值得注意的是, 由于热层需要一段时间来对这些参数的变化进行充分响应, 这些试验粒子被提前2天进行重新初始化, 每个粒子所用的热层大气初始状态, 为初始时刻适应度最高的6个粒子的随机选择. 我们通过这些试验粒子最后12h的输出获取其相应的适应度, 适应度最高的 R 个试验粒子与重采样获得的 Q 个粒子(总数目为 P)共同组成下一更新步的粒子群.

2.3 热层观测与外驱动

本研究中用于GOFT同化的观测资料包括TIMED卫星搭载的全球紫外成像仪(global ultraviolet imager, GUVI)临边探测的150~450km高度的热层大气温度与质量密度(Christensen等, 2003)以及分析时段平均轨道高度为390km的CHAMP卫星(Reigber等, 2002)原位探测的热层大气质量密度. 在这种情况下, 热层大气的高度、纬度, 以及地方时分布信息可以被部分地摄入GOFT模式中. 我们还使用另一颗轨道高度较CHAMP高约90km的GRACE卫星(Tapley等, 2004)测量的热层大气质量密度对预报模式进行评估. 本工作所用的CHAMP及GRACE卫星轨道高度的大气密度, 由Meh-ta等(2017)通过使用测试粒子蒙特卡洛方法估算的阻力系数并通过加速度仪数据反演获取. 他们发现, 相对

于原始数据集, CHAMP的平均偏差为14~18%, 而GRACE的平均偏差为10~24%. 本研究中, 我们未进一步使用缩放因子对CHAMP和GRACE轨道密度进行调整. 需要指出的是, 下文所述“轨道平均密度”表示卫星两次穿过南极期间观测结果的平均值.

我们利用2004年第120~220天期间的热层观测对GOFT预报性能进行评估. 在此期间, GUVI临边观测具有较少的观测空白(如图2a和2b所示). 为了避免极光污染, 临边观测限制在地理纬度60°以内(Emmert等, 2006). 如图2b所示, 临边观测的地方时基本在6~20LT间. CHAMP与GRACE卫星轨道地方时相差4~6h, 且平均轨道高度相差约90km. 因此, GRACE卫星轨道密度可以用于评估GOFT对全球热层大气状态的估计及预报能力. 如图2c所示, 在此期间太阳与地磁活动变化显著, $F_{10.7}$ 指数在2004年第120~220天在80~180sfu之间变化. K_p 指数显示在此期间发生了多次地磁暴. 因此, 对2004年第120~220天模式预报性能的评估, 可以较为全面地验证GOFT在不同太阳与地磁活动条件下对全球热层大气的预报能力.

3 结果

3.1 实时同化结果评估

本研究中, 我们使用热层经验模型MSIS(Emmert等, 2021)的温度和密度输出与GOFT同化结果进行对比. MSIS可以模拟从地面至逃逸层的大气状态, 且已被国际上广泛用于工程应用中(Marcos, 2006; Emmert, 2015). 图3a为MSIS对临边密度轨道平均值的估计误差随时间和高度的变化. 可以看到, MSIS可以较好地估计2004年第120~160天的热层大气密度变化. 然而, 在此之后其模拟精度随时间变化剧烈, 且最大误差可达200%以上. 由于TIEGCM被用于GOFT中作为预测模式, 图3b进一步给出了TIEGCM对GUVI临边密度轨道平均值的估计误差. TIEGCM模拟结果在各高度均显示出明显的随时间变化的误差, 且该误差在第210~220天大于200%. 图3c为GOFT后验结果的相对误差. 由于GOFT需要5天时间进行初始化, GOFT输出结果的开始时间为第125天. 在整个分析时段, 200~500km高度范围内GOFT对GUVI临边密度轨道平均的估计误差均低于20%, 精度明显优于MSIS与TIEGCM.

图2 卫星观测与外驱动信息

(a) TIMED-GUVI临边观测数据的纬度; (b) 临边观测以及CHAMP(红线)和GRACE(蓝线)卫星的上升(实线)与下降(虚线)轨道地方时在2004年第120~220天的变化; (c) 2004年第120~220天的 $F_{10.7}$ 和 Kp 指数的变化

图3d和3e为390km高度临边密度与温度轨道平均值的观测、MSIS和TIEGCM模拟及GOFT后验结果随时间的变化。在分析时段内, GOFT对热层大气质量密度的估计精度显著高于MSIS和TIEGCM。TIEGCM对热层温度的模拟较观测低约4%, 而GOFT与MSIS均对其低估约1%。值得注意的是, 第204~211天内发生了剧烈的地磁暴。在此期间, MSIS模拟温度明显低于观测结果, 而TIEGCM与GOFT模拟的热层温度与观测较为符合。此外, GOFT明显低估了170~180天的热层温度, 而该时段的质量密度却与观测基本一致, 这可能由GOFT对低热层大气质量密度的高估造成的。

图4a为观测与模拟的CHAMP质量密度轨道平均值随时间的变化。可以看到, MSIS对CHAMP密度轨道平均值的估计偏高约22%, 而TIEGCM模拟结果的平

均误差为61%。对于GOFT, 其估计误差低于2%。图4b~4d进一步显示了CHAMP原位探测密度模拟结果相对观测值的误差, 图中将每个轨道展开为上升轨道和下降轨道。MSIS估计的夏季(北半球)质量密度较观测高约20%, 而在冬季(南半球)偏大40%以上。TIEGCM对上升轨道质量密度的估计较观测结果偏高~100%, 而在下降轨道偏高~40%。对于图4d所示的GOFT后验估计, 除南半球中高纬度质量密度的估计误差约为20~40%, 其他纬度质量密度的后验估计误差则基本上低于20%。

我们进一步利用GRACE卫星轨道密度对GOFT同化结果进行评估。如图4e所示, GOFT对GRACE轨道平均密度估计的平均误差低于1%, 远低于TIEGCM和MSIS的73%和51%误差。对于GRACE卫星原位探测质

图3 热层密度的观测与实时同化结果对比

MSIS(a)和TIEGCM(b)模拟及GOFT后验(c)轨道平均临边质量密度的模拟-观测相对误差随时间和高度的变化。390km高度轨道平均临边密度(d)与温度(e)的观测(灰色点线)、MSIS(蓝色点线)和TIEGCM(绿色点线)模拟及GOFT后验结果(红色点线)随时间的变化

量密度(如图4f~4h所示), GOFT同样较TIEGCM和MSIS具有更高的精度。总之, 对比结果表明GOFT可以对全球热层质量密度与温度的实时状态进行较为准确的估计。

3.2 热层预报性能评估

GOFT模式的关键任务是提供较现有模型更为可靠的热层大气多天预报。本研究中, 我们评估了GOFT对未来30天内热层大气的预报性能。需要指出的是, GOFT对热层大气的预报需要首先提供 $F_{10.7}$ 和 K_p 指数的预测信息, 我们在这里使用真实的 K_p 与 $F_{10.7}$ 指数以评估GOFT在预测热层方面的性能。图5和6所示为热层大气预报误差的统计结果, 为预报起始时间自140~190天(均匀间隔5天)的11个预报事例的统计平均。图5比较了GOFT、TIEGCM及MSIS对GUVI临边密度的30天预报误差。如图5a所示, 在前15天预报时段内,

GOFT对390km高度临边密度轨道平均值的统计预报误差低于15%, 相较于TIEGCM和MSIS分别提高了90%和80%。在后续15天预报时段, GOFT对GUVI临边密度的预报误差仍低于20%, 相较于TIEGCM和MSIS分别提高了80~90%和20~70%。对于图5b所示的临边温度, GOFT和MSIS对其预报精度相当且高于TIEGCM。

图5c~5e展示了MSIS、TIEGCM和GOFT对不同高度(150~600km)的GUVI临边密度轨道平均的预报误差随预报时长的变化。可以看到, GOFT对不同高度热层密度的预报精度均显著高于TIEGCM。与TIEGCM相比, GOFT对250~500km高度密度的实时估计准确度提高了80~100%, 且在30天后仍高于70%。此外, GOFT对150~250km高度质量密度存在约20~40%高估, 相对于TIEGCM预报精度提高了60~80%。需要指出的是, MSIS在对250km以下热层大气质量密度的预测精度

图4 热层密度的观测与实时同化结果对比

CHAMP(a)与GRACE(e)卫星轨道平均密度的观测(灰色点线)、MSIS(蓝色点线)和TIEGCM(绿色点线)模拟及GOFT后验结果(红色点线). MSIS(b), (f)、TIEGCM(c), (g)与GOFT(d), (h))估计的CHAMP(左侧)和GRACE(右侧)原位探测密度随时间和纬度的变化

较GOFT高.

我们进一步利用CHAMP和GRACE卫星轨道密度对GOFT的热层大气预报性能进行评估. 图6为MSIS、TIEGCM及GOFT对CHAMP和GRACE卫星轨道密度的30天预报误差随预报时长的变化. 如图6a所示, TIEGCM、MSIS和GOFT对CHAMP轨道平均密度的实时估计误差约为50%、20%和0%. 经过30天预报, GOFT预报精度较TIEGCM和MSIS仍提高约80%和40%. 图6e为不同模型对GRACE卫星轨道平均密度的预报误差. TIEGCM和MSIS对其的实时估计误差约为50%, 而GOFT则约为0%. 对于30天预报, GOFT预报精度较TIEGCM和MSIS分别提高了约70%和50%. 图6b~6d和图6f~6h分别给出了MSIS、TIEGCM与GOFT对CHAMP和GRACE卫星原位探测质量密度预报的相对误差. 可以看到, GOFT同样较TIEGCM与MSIS具有较高的预报精度.

我们还对2004年190天开始的30天预报进行评估, 该时段太阳与地磁活动变化剧烈, 且有多次磁暴发生,

尤其在14~21天预报时段(如图7a和7d黄色阴影区). 不同模式对CHAMP和GRACE轨道平均密度的预报结果如图7b和7e所示. 可以看到, GOFT预报结果与卫星观测非常一致. 图7c和7f为MSIS、TIEGCM和GOFT对CHAMP和GRACE轨道平均质量密度的预报误差. 相较于TIEGCM和MSIS, GOFT展现出稳定的预报性能. 更重要的是, 较于弱扰动期间的预报误差, 磁暴期间GOFT对CHAMP和GRACE轨道平均质量密度的预报误差未见明显增长. 在地磁暴期间, GOFT预报准确度较TIEGCM提高了80%以上.

图8展示了自2004年190天开始的GOFT对390km高度GUVI临边温度轨道平均值的预报(图8b), 以及GUVI临边密度轨道平均(图8c)和CHAMP(图8d)与GRACE(图8e)卫星原位探测密度的预报误差. 对于390km高度处的临边温度(图8b所示), GOFT和MSIS显示出较TIEGCM更高的精度. 如图8c所示, 前22天预报时段里, GOFT对250~500km临边密度的预报偏差低于20%, 明显低于TIEGCM和MSIS. 在随后的8天里,

图 5 热层密度预报误差的统计结果

GOFT(红色点线)、MSIS(蓝色点线)和TIEGCM(绿色点线)对390km高度轨道平均临边密度(a)与温度(b)的平均预报误差随预报时长的变化. MSIS(c)、TIEGCM(d)和GOFT(e)对150~600km轨道平均临边密度的30天预报误差随预报时长和高度的变化

GOFT的预报误差在300~500km处较观测值高30~50%。更重要的是,磁暴期间GOFT预报精度较TIEGCM提高了约80%。如图8d和8e所示为GOFT对CHAMP和GRACE原位探测密度的预报误差随预报时长和纬度的变化。可以看到,在整个预报时段,GOFT同样展现出稳定的预报精度。总之,GOFT与TIEGCM和MSIS的比较结果表明,在提供了准确的太阳和地磁活动预测情况下,GOFT可以提供较为稳定的热层大气长期预测结果,且GOFT对热层大气密度的预报性能基本不依赖于太阳和地磁活动的强弱。

4 讨论

由于测量的局限性以及所涉及物理过程的复杂性,高层大气高精度长期预报一直是空间天气领域的

难题之一。着眼于现有预报模型存在的参数不确定性问题,我们提出了一种通过智能优化模式不确定性参数的新方法预报热层大气。评估结果表明,在给定太阳和地磁活动参数后,预报模式GOFT对热层质量密度的30天预报精度较理论模式TIEGCM提高了70~90%。更重要的是,尽管理论模式预报误差在剧烈的太阳和地磁活动扰动期间显著增加,GOFT仍可以维持较高的预报精度。这是因为基于物理的理论模式可以模拟基本的热层-电离层变化特征(Fesen等, 2002; Qian和Solomon, 2012; Emmert, 2015),因此当模式中不确定性参数被调整后,模式将具备更加稳定的热层大气预报能力。这项工作对传统数据同化方法主要关注模式初始状态提出了挑战,预报模式的不完善性在热层预报中起着更为重要的作用。此外,该方法为实现复杂的高层大气预报提供了一种新策略。

图 6 热层密度预报误差的统计结果

MSIS(蓝色)、TIEGCM(绿色)及GOFT(红色)对CHAMP(a)和GRACE(e)卫星轨道平均密度的预报误差随预报时长变化. MSIS((b), (f))、TIEGCM((c), (g))与GOFT((d), (h))对CHAMP(左侧)和GRACE(右侧)原位探测密度的预报误差随预报时长和纬度的变化

图 7 2004年190天开始的预报事例

(a), (d) $F_{10.7}$ 与 K_p 指数; MSIS(蓝色点线)、TIEGCM(绿色点线)及GOFT(红色点线)对CHAMP((b), (c))和GRACE((e), (f))卫星轨道平均密度的预报值((b), (e))及相对误差((c), (f))随预报时长的变化. CHAMP和GRACE卫星轨道平均密度的观测结果在(b)和(e)中由灰色点线给出. 黄色阴影表示第14~21天的强地磁暴时段

图 8 2004年190天开始的预报事例

(a) $F_{10.7}$ 与 Kp 指数; (b) 观测(灰色点线)、MSIS(蓝色点线)、TIEGCM(绿色点线)及GOFT(红色点线)对390km轨道平均临边温度的预报结果; (c) GOFT对GUVI临边观测轨道平均密度的预报误差; (d), (e) GOFT对CHAMP(d)和GRACE(e)原位探测密度的预报误差随预报时长和纬度的变化。黄色阴影表示第14~21天的强地磁暴时段, 黑色虚线表示磁暴开始和结束时间

尽管目前GOFT展示了出色的热层大气长期预报性能, 但其仍存在一系列可能的改进方向。其一是不确定性参数的选择及扰动方式。在当前版本的GOFT模型中, 我们选取了12个对热层大气状态存在显著影响的不确定性参数, 并使用相应的随机因子与之相乘或相加。如焦耳加热以及太阳辐射加热在GOFT中被分别乘以相应的扰动因子。需要注意的是, 焦耳加热和太阳辐射加热强烈地依赖于地磁和太阳活动强度(He-din和Mayr, 1987; Chun等, 2002), 模式对其的估计偏差可能与太阳和地磁活动强度相关, 因此常数因子可能并不是最优选择。如图6a和6e所示, GOFT对两颗卫星轨道平均密度的预报误差存在明显的周日变化, 这可能由于当前模型尚未考虑非迁移潮汐等物理过程造

成。此外, GOFT预报结果存在一定的系统偏差(如南半球高纬密度的预报结果较观测高50%, 以及对250km以下热层密度的预报偏高而在500km以上偏低), 这是由于GOFT实时数据同化过程的不完善性, 与不确定性参数及扰动方式等的选择相关。因此, 需要对参数选择和扰动方式进行更多测试, 以进一步提高GOFT的预报性能。此外, 由于热层大气状态受多种因素的共同作用, 对这些不确定性参数的调整是否合适也值得进一步研究。

当前模型中我们仅同化了CHAMP轨道密度以及GUVI临边密度和温度探测。尽管这些观测提供了热层的地方时、纬度、高度和时间演化信息, 但是对于12个参数的估计仍具有较大的不确定性。需要指出的是,

热层大气的时空演化紧密地依赖于高层大气不同物理量的状态. GOFT可直接通过计算模拟与观测偏差, 获得每个粒子适应度, 从而优化预报模式. 因此, 在GOFT的未来版本中还将考虑同时同化多颗卫星轨道密度、气辉、热层风、成分, 以及电离层电子密度等观测信息, 以进一步提高GOFT对高层大气的预报性能.

我们采用智能优化粒子滤波算法, 通过计算粒子权重来估计热层大气状态. 因此, 粒子数目的改变可能会影响热层大气预报精度. 本研究中, 我们使用90个粒子估计数值模式中12个不确定性参数. 尽管当前版本的GOFT已显示出良好的热层大气长期预报性能, 但粒子数目以及粒子权重的计算方法对预报模式精度的影响仍值得进一步研究. 此外, 用于粒子变异与进化的算法也有待于进一步研究改进.

需要指出的是, 热层大气状态强烈地受太阳和地磁活动等外部驱动的控制. 因此, 实现热层大气预报的先决条件, 包括对外部驱动的准确预测以及可靠的热层大气预报系统. 然而, 目前国际上仍难以实现对太阳和地磁活动的多天准确预测. 本研究中, 我们主要关注如何构建可靠的热层大气预报模式. 结果表明, 在已知太阳与地磁活动的情况下, GOFT可用于提供较高精度的热层大气预报结果.

5 结论

预报模式的不完善和参数的不确定性是限制热层大气预报时长的重要因素. 本研究中, 我们着眼于现有预报模式参数的不确定性, 提出了一种通过智能优化粒子滤波算法, 优化模式不确定性参数的新方法预报热层大气, 并使用CHAMP和GRACE卫星轨道密度及TIMED-GUVI临边观测对模式预报性能进行评估. 评估结果表明, 在提供了准确的太阳和地磁活动预测条件下, 预报模式GOFT对热层质量密度的30天预报精度显著高于理论模式TIEGCM以及经验模型MSIS, 且其预报精度无显著的太阳和地磁活动强度依赖性. 此外, 鉴于热层大气状态的时空演化紧密地受高层大气不同物理量的控制, GOFT可同时同化多种热层、电离层观测信息用于智能优化理论模式, 这为实现复杂的高层大气高精度预报系统提供了新的方向和思路.

致谢 本论文的数值计算得到了中国科学技术大学超级计算中心的计算支持和帮助. 同时, 感谢陈雪涛博士对本工作提供的建议. Kp 和 $F_{10.7}$ 指数来自OMNIWeb(<https://omniweb.gsfc.nasa.gov/>). GUVI Limb数据来自http://guvi-timed.jhuapl.edu/data_products. GOFT、TIEGCM和MSIS模式结果以及分析程序参见<https://doi.org/10.17605/OSF.IO/79BFP>.

参考文献

- Berger T E, Holzinger M J, Sutton E K, Thayer J P. 2020. Flying through uncertainty. *Space Weather*, 18: e2019SW002373
- Bussy-Virat C D, Ridley A J, Getchius J W. 2018. Effects of uncertainties in the atmospheric density on the probability of collision between space objects. *Space Weather*, 16: 519–537
- Cantrall C E, Matsuo T, Solomon S C. 2019. Upper atmosphere radiance data assimilation: A feasibility study for GOLD far ultraviolet observations. *J Geophys Res-Space Phys*, 124: 8154–8164
- Chen X T, Lei J H. 2018. A numerical study of the thermospheric overcooling during the recovery phases of the October 2003 storms. *J Geophys Res-Space Phys*, 123: 5704–5716
- Christensen A B, Paxton L J, Avery S, Craven J, Crowley G, Humm D C, Kil H, Meier R R, Meng C I, Morrison D, Ogorzalek B S, Straus P, Strickland D J, Swenson R M, Walterscheid R L, Wolven B, Zhang Y. 2003. Initial observations with the global ultraviolet imager (GUVI) in the NASA TIMED satellite mission. *J Geophys Res*, 108: 1451
- Chun F K, Knipp D J, McHarg M G, Lacey J R, Lu G, Emery B A. 2002. Joule heating patterns as a function of polar cap index. *J Geophys Res*, 107: 1119
- Djuric P M, Kotecha J H, Zhang J Q, Huang Y F, Ghirmai T, Bugallo M F, Miguez J. 2003. Particle filtering. *IEEE Signal Process Mag*, 20: 19–38
- Douc R, Cappé O. 2005. Comparison of resampling schemes for particle filtering. In: *Proceedings of the 4th International Symposium on Image and Signal Processing and Analysis*, Zagreb. 64–69
- Duff J W, Dothe H, Sharma R D. 2003. On the rate coefficient of the $N(^2D)+O_2 \rightarrow NO+O$ reaction in the terrestrial thermosphere. *Geophys Res Lett*, 30: 1259
- Emmert J T, Drob D P, Picone J M, Siskind D E, Jones J M, Mlynczak M G, Bernath P F, Chu X, Doornbos E, Funke B, Goncharenko L P, Hervig M E, Schwartz M J, Sheese P E, Vargas F, Williams B P, Yuan T. 2021. NRLMSIS 2.0: A whole-atmosphere empirical model of temperature and neutral species densities. *Earth Space Sci*, 8: e01321

- Emmert J T, Meier R R, Picone J M, Lean J L, Christensen A B. 2006. Thermospheric density 2002–2004: TIMED/GUVI dayside limb observations and satellite drag. *J Geophys Res*, 111: A10S16
- Emmert J T. 2015. Thermospheric mass density: A review. *Adv Space Res*, 56: 773–824
- Fesen C G, Hysell D L, Meriwether J M, Mendillo M, Fejer B G, Roble R G, Reinisch B W, Biondi M A. 2002. Modeling the low-latitude thermosphere and ionosphere. *J Atmos Sol-Terr Phys*, 64: 1337–1349
- Gondelach D J, Linares R. 2020. Real-time thermospheric density estimation via two-line element data assimilation. *Space Weather*, 18: e2019SW002356
- Hagan M E, Forbes J M. 2002. Migrating and nonmigrating diurnal tides in the middle and upper atmosphere excited by tropospheric latent heat release. *J Geophys Res*, 107: 4754
- Hagan M E, Forbes J M. 2003. Migrating and nonmigrating semidiurnal tides in the upper atmosphere excited by tropospheric latent heat release. *J Geophys Res*, 108: 1062
- He C Y, Yang Y, Carter B, Zhang K F, Hu A D, Li W, Deleflie F, Norman R, Wu S Q. 2020. Impact of thermospheric mass density on the orbit prediction of LEO satellites. *Space Weather*, 18: e02336
- Hedin A E, Mayr H G. 1987. Solar EUV induced variations in the thermosphere. *J Geophys Res*, 92: 869–875
- Heelis R A, Lowell J K, Spiro R W. 1982. A model of the high-latitude ionospheric convection pattern. *J Geophys Res*, 87: 6339–6345
- Hejduk M D, Snow D E. 2018. The effect of neutral density estimation errors on satellite conjunction serious event rates. *Space Weather*, 16: 849–869
- Hsu V W, Thayer J P, Wang W, Burns A. 2016. New insights into the complex interplay between drag forces and its thermospheric consequences. *J Geophys Res-Space Phys*, 121: 417–430
- Li Z, Knipp D, Wang W B, Sheng C, Qian L Y, Flynn S. 2018. A comparison study of NO cooling between TIMED/SABER measurements and TIEGCM simulations. *J Geophys Res-Space Phys*, 123: 8714–8729
- Marcos F A. 2006. New satellite drag modeling capabilities. In: Proceedings of the 44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno
- Matsuo T, Fedrizzi M, Fuller-Rowell T J, Codrescu M V. 2012. Data assimilation of thermospheric mass density. *Space Weather*, 10: S05002
- Matsuo T, Lee I T, Anderson J L. 2013. Thermospheric mass density specification using an ensemble Kalman filter. *J Geophys Res-Space Phys*, 118: 1339–1350
- Mehta P M, Linares R. 2017. A methodology for reduced order modeling and calibration of the upper atmosphere. *Space Weather*, 15: 1270–1287
- Mehta P M, Walker A C, Sutton E K, Godinez H C. 2017. New density estimates derived using accelerometers on board the CHAMP and GRACE satellites. *Space Weather*, 15: 558–576
- Mlynczak M, Martin-Torres F J, Russell J, Beaumont K, Jacobson S, Kozyra J, Lopez-Puertas M, Funke B, Mertens C, Gordley L, Picard R, Winick J, Wintersteiner P, Paxton L. 2003. The natural thermostat of nitric oxide emission at 5.3 μm in the thermosphere observed during the solar storms of April 2002. *Geophys Res Lett*, 30: 2100
- Mlynczak M G, Martin-Torres F J, Mertens C J, Marshall B T, Thompson R E, Kozyra J U, Remsberg E E, Gordley L L, Russell III J M, Woods T. 2008. Solar-terrestrial coupling evidenced by periodic behavior in geomagnetic indexes and the infrared energy budget of the thermosphere. *Geophys Res Lett*, 35: L05808
- Picone J M, Emmert J T, Lean J L. 2005. Thermospheric densities derived from spacecraft orbits: Accurate processing of two-line element sets. *J Geophys Res*, 110: A03301
- Price K V. 2013. Differential evolution. In: Zelinka I, Snášel V, Abraham A, eds. Handbook of Optimization. Berlin: Springer. 187–214
- Qian L Y, Solomon S C. 2012. Thermospheric density: An overview of temporal and spatial variations. *Space Sci Rev*, 168: 147–173
- Qian L Y, Solomon S C, Kane T J. 2009. Seasonal variation of thermospheric density and composition. *J Geophys Res*, 114: A01312
- Qian L Y, Burns A G, Emery B A, Foster B, Lu G, Maute A, Richmond A D, Roble R G, Solomon S C, Wang W B. 2014. The NCAR TIE-GCM. In: Huba J, Schunk R, Khazanov G, eds. Modeling The Ionosphere-Thermosphere System. Washington: American Geophysical Union. 73–83
- Radtke J, Kerschull C, Stoll E. 2017. Interactions of the space debris environment with mega constellations—Using the example of the OneWeb constellation. *Acta Astronaut*, 131: 55–68
- Reigber C, Lühr H, Schwintzer P. 2002. CHAMP mission status. *Adv Space Res*, 30: 129–134
- Ren D X, Lei J H. 2020. Evaluation of physics-based data assimilation system driven by neutral density data from a single satellite. *Space Weather*, 18: e2020SW002504
- Richmond A D, Ridley E C, Roble R G. 1992. A thermosphere/ionosphere general circulation model with coupled electrodynamics. *Geophys Res Lett*, 19: 601–604
- Richards P G, Fennelly J A, Torr D G. 1994. EUVAC: A solar EUV flux model for aeronomic calculations. *J Geophys Res*, 99: 8981–8992
- Ruan H B, Lei J H, Dou X K, Liu S Q, Aa E. 2018. An exospheric temperature model based on CHAMP observations and TIEGCM

- simulations. [Space Weather](#), 16: 147–156
- Schunk R W, Gardner L, Scherliess L, Zhu L. 2012. Problems associated with uncertain parameters and missing physics for long-term ionosphere-thermosphere forecasting. [Radio Sci](#), 47: RS0L23
- Solomon S C, Qian L Y. 2005. Solar extreme-ultraviolet irradiance for general circulation models. [J Geophys Res](#), 110: A10306
- Sutton E K. 2018. A new method of physics-based data assimilation for the quiet and disturbed thermosphere. [Space Weather](#), 16: 736–753
- Tapley B D, Bettadpur S, Watkins M, Reigber C. 2004. The gravity recovery and climate experiment: Mission overview and early results. [Geophys Res Lett](#), 31: L09607
- van Leeuwen P J. 2009. Particle filtering in geophysical systems. [Mon Weather Rev](#), 137: 4089–4114
- Weimer D R, Mehta P M, Tobiska W K, Doornbos E, Mlynczak M G, Drob D P, Emmert J T. 2020. Improving neutral density predictions using exospheric temperatures calculated on a geodesic, polyhedral grid. [Space Weather](#), 18: e2019SW002355
- Zhang H J, Qin S X, Ma J W, You H J. 2013. Using residual resampling and sensitivity analysis to improve particle filter data assimilation accuracy. [IEEE Geosci Remote Sens Lett](#), 10: 1404–1408

(责任编辑: 徐寄遥)