

GRAPES 新一代全球/区域变分同化系统研究

薛纪善, 庄世宇, 朱国富, 张华, 刘志权, 刘艳, 庄照荣

中国气象科学研究院灾害天气国家重点实验室, 北京 100081;

国家气象中心, 北京 100081;

国家卫星气象中心, 北京 100081

E-mail: jshxue@cma.gov.cn

2007-12-17 收稿, 2008-02-16 接受

国家科技攻关计划(编号: 2001BA607B02)和国家自然科学基金(批准号: 40518001)资助项目

摘要 概要叙述了新发展的全球与区域同化预报系统的资料同化部分的科学设计与初步试验的结果。本阶段的目标设定为建立可以直接同化卫星辐射率等遥感观测资料的系统框架, 采用三维变分同化方法, 并实现全球与区域一体化。为了与预报模式一致, 分析变量定义在离散格点上。将分析变量分解为动力平衡与不平衡两个部分, 并引入递归滤波或谱变换滤波进行变量变换, 得到与分析变量相异的控制变量, 它们使目标函数的极小化过程的性状得以大大改善。而平衡关系的选择可以根据分析变量的尺度特征来确定, 其在总分析方差中所占的比例则由背景场的误差方差所控制。理想试验的结果与解析求解一致, 表明了系统数值方案的正确性。利用实际观测资料进行连续同化试验, 结果表明即使在使用常规资料条件下, 变分同化方案与过去通行的同化方案相比也有突出的优势。最后讨论了系统进一步发展的问題。

关键词
GRAPES
资料同化
变分
三维
数值天气预报

建立在当代大气科学理论与计算机技术基础上的数值天气预报的发展被认为是 20 世纪科学技术最突出的成就之一, 它不仅已成为目前气象业务预报与气象服务的基础, 也开拓了地球科学的其他领域利用数值模式进行模拟的新研究途径。近十几年, 数值预报的研究与业务应用发展很快, 突出表现在中期预报时效延长与中尺度预报模式具备了实际应用能力。中国的数值预报研究起步较早, 但直至 20 世纪八九十年代才开始建立数值预报的业务系统, 目前采用的大部分是八九十年代的技术, 实际预报效果也不能满足业务的要求。为此, 中国气象局与国家科学技术部从 2001 年开始共同支持了一个大型研究计划发展中国新一代的数值预报系统, 以全面提升中国数值预报系统的技术水平与预报能力^[1]。整个计划包括先进的资料同化系统, 中尺度预报模式与中期预报模式以及数值预报的业务支持系统几个部分。现在一个称之为“全球与区域同化预报系统”(英文名 global/regional assimilation and prediction system, 简称 GRAPES)的新的数值预报系统已经建立起来, 并

在业务环境的试验与天气动力学的数值模拟研究中显示出改进预报与模拟结果的潜力。本文介绍该系统的资料同化部分的设计与初步结果。

20 世纪 90 年代以前数值预报模式的开发, 特别是用于业务预报的模式建立往往是针对具体预报对象, 如针对全球天气形势、局地天气事件、热带气旋等都使用不同的模式与同化方案。其优点是数值方案的选择标准单一, 系统相对简单。但其结果是一个业务预报中心需要同时维持几个完全独立的系统, 增加了维持成本与更新的难度。如果对于不同的对象都采用相同的通用系统, 运行与更新将容易得多。在计算机技术发展不断加速, 数值预报系统更新周期不断缩短的今天, 这将更有利于充分利用计算机的发展来提高数值预报的水平与能力。由于数值预报的原理与基本方法本质上具有普适性, 发展通用的数值预报系统原则上是可能的。而数值预报的技术进步也使这一通用系统的发展在技术上成为可行。中国新一代数值预报系统的发展采用了通用系统思路, 这也是从 20 世纪 90 年代起, 多数国家在模式发

展上的做法^[2,3].

作为一个数学物理中的初值问题,数值预报的成效,取决于预报模式与初值两个方面的精度,后者主要涉及资料同化问题.数值预报发展的历史充分显示了资料同化在数值预报中的重要性.数值预报长期面临大片地区缺乏观测资料的困难,这一困难在近十年中因大量卫星遥感资料在数值预报中的定量应用而基本得以克服.而卫星遥感资料在数值预报中的定量应用,不仅依赖于遥感技术的发展,也与20世纪90年代起资料变分同化技术的应用有密切关系^[4].这一新的同化方法使得与大气模式的基本状态变量呈现非常复杂的非线性关系的遥感观测值,如不同频率的辐射强度的直接同化成为可能.发展GRAPES资料同化系统可以有不同的技术选择,但由于解决遥感资料的同化是发展新的同化与预报系统的最重要的目标之一,因此我们的新同化系统采用变分方案.本文所描述的只是一个三维变分同化系统的基本框架,关于遥感观测算子的引入与向四维变分同化扩展的研究结果,将另文给出.

1 资料同化的理论设计

1.1 基本公式

以 X 表示数值模式的预报变量,它代表了大气状态,因此又可称为系统的状态变量,并以下标 b 表示背景场(一般取从上一同化时刻起始到本次观测的模式预报值),下标 a 表示分析场(即同化的结果). X 随着时间的变化由预报模式决定,即:

$$X(t) = \mathbb{F}(X(t_0)) + e_f, \quad (1.1)$$

这里 t 与 t_0 分别表示模式预报的时刻与起始时刻.以 Y 表示观测值,观测值与状态变量的关系为

$$Y(t) = \mathcal{H}(X(t)) + e_o, \quad (1.2)$$

其中 $\mathcal{H}$ 称为观测算子,它代表了观测值与大气状态的物理联系,对于不同的观测设备,有不同的表达,但应该是已知的.在(1.1)与(1.2)中 e_f 与 e_o 代表了预报模式与观测误差项.假设观测是在 (t_0, t) 的时间区间内进行的,同化的目标是确定 t_0 时刻的模式状态 $X(t_0)$,使由 (t_0, t) 的模式状态所导得的观测值与实际观测的离差在考虑其他必要约束的前提下达到极小^[5,6],也即求 $X_a(t_0)$ 使以下的目标泛函 J 达到极小:

$$J = (X_a - X_b(t_0))^T \mathbf{B}^{-1} (X_a - X_b(t_0)) + \sum_t (Y(t) - \mathcal{H}X_a(t))^T \mathbf{R}^{-1} (Y(t) - \mathcal{H}X_a(t)), \quad (1.3)$$

这里, $\mathbf{B}$ 与 $\mathbf{R}$ 分别是背景场与观测误差的协方差矩阵.

按照(1.1)

$$X_a(t) = \mathbb{F}(X_a(t_0)). \quad (1.4)$$

本文只考虑一个时间的观测,所以略去(1.3)右端第二项的时间求和,也即考虑三维变分同化的问题.关于多时刻的观测将在关于四维变分同化系统的设计中讨论.这时问题简写为

$$J = (X_a - X_b)^T \mathbf{B}^{-1} (X_a - X_b) + (Y - \mathcal{H}(X_a))^T \mathbf{R}^{-1} (Y - \mathcal{H}(X_a)), \quad (1.5)$$

由于 $\mathbf{B}$ 是一个超大规模的矩阵,且接近病态,直接求解(1.5)的极小化是有困难的.我们将通过一系列的变量变换来优化 J 的极小化计算.

1.2 变量变换

本文中我们只考虑数值预报系统的基本预报变量的分析,因此 X 由风的两个水平分量(以 u, v 表示)、大气温度或位势高度(只取其中之一,以 m 表示)与水汽(以 h 表示)所构成.在本系统当前的版本,所有的预报变量都定义在相同的经、纬网格点上,但可很容易地转到与预报模式一致的交错格点上.水汽的分析有特殊性,将留待专门的讨论,在本节中暂时将 h 从状态变量中略去.引入流函数 ψ 与速度势 χ ,再假定 χ 与 m 都由 ψ 平衡的部分及不平衡的部分组成,关于平衡关系将在后面讨论.以下标 u 与 b 分别表示不平衡与平衡部分,并记 $\chi_b = \mathbb{N}(\psi)$, $m = \mathbb{M}(\psi)$, 即:

$$\begin{aligned} \chi &= \mathbb{N}(\psi) + \chi_u, \\ m &= \mathbb{M}(\psi) + m_u. \end{aligned} \quad (1.6)$$

由 ψ, χ_u, m_u 组成新的变量,以 X^c 表示,并将 X^c 与 X 的对应关系记为

$$X = \mathcal{P}(X^c), \quad (1.7)$$

这里

$$\begin{aligned} \mathcal{P} &= \begin{pmatrix} \partial/\partial y & \partial/\partial x & 0 \\ -\partial/\partial x & \partial/\partial y & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ N & 1 & 0 \\ M & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ X &= \begin{pmatrix} U \\ V \\ \Phi \end{pmatrix}, X^c = \begin{pmatrix} \psi \\ \chi_u \\ \phi_u \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1.8)$$

$\mathcal{P}$ 表示一种平衡变换.可以认为 X^c 各个分量具有独立性,当背景场以 X^c 表示时,相应的误差协方差矩阵 $\mathbf{B}^c$ 将分裂为3个独立的矩阵,从而使问题的规模大大缩小.将(1.7)代入(1.5),得到:

$$\begin{aligned} J &= (X_a^c - X_b^c)^T \mathcal{P}^T \mathbf{B}^{-1} \mathcal{P} (X_a^c - X_b^c) \\ &+ (Y - \mathcal{H}(\mathcal{P}X_a^c))^T \mathbf{R}^{-1} (Y - \mathcal{H}(\mathcal{P}X_a^c)), \end{aligned} \quad (1.9)$$

$$\mathbf{B}_c^{-1} = \mathcal{P}^T \mathbf{B}^{-1} \mathcal{P}. \quad (1.10)$$

进一步引入新的变量 W :

$$(X_a^c - X_b^c) = \mathbf{U}W, \quad (1.11)$$

$$\mathbf{B}_c = \mathbf{U}\mathbf{U}^T. \quad (1.12)$$

(1.11), (1.12)代入(1.9)后得到:

$$\mathbf{J} = W^T W + (H(\mathcal{P}\mathbf{U}W) + \mathbf{d})^T \mathbf{R}^{-1} (H(\mathcal{P}\mathbf{U}W) + \mathbf{d}), \quad (1.13)$$

这里 $\mathbf{d} = (\mathcal{H}(X_b) - Y)$ 称之为信息向量, 而 H 是 $\mathcal{H}$ 的切线性算子. 同化问题成为以 W 作为控制变量求(1.13)的极小化. W 的引进使极小化问题的性质进一步优化. 根据极小化的需要, 我们还给出 $\mathbf{J}$ 关于 W 的梯度:

$$\nabla \mathbf{J} = 2(W + \mathbf{U}^T \mathcal{P}^T H^T \mathbf{R}^{-1} (H(\mathcal{P}\mathbf{U}W) + \mathbf{d})). \quad (1.14)$$

(1.13)的极小化问题可以通过适当选取的数值方案求解. 当 W 求得后, 可以通过以下关系计算 X_a :

$$X_a = X_b + \mathcal{P}\mathbf{U}W. \quad (1.15)$$

1.3 动力平衡条件及对非平衡分量的控制

前面提到的状态变量的平衡部分实质上是分析的主体, 因此(1.7)式定义的平衡关系代表了同化系统所隐含的动力学约束. 本文只考虑流函数与位势高度的平衡, 即令 $N=0$. 考虑到模式对低纬度地区与中尺度系统的适应性, 我们给出两种流函数与位势高度的平衡关系的选择, 即线性与非线性平衡方程. 变换算子 $\mathcal{P}$ 中的 $\mathbb{M}$ 实际上是线性或非线性平衡方程的求解器. 对于非线性平衡方程, (1.13)式需要修改为

$$\mathbf{J} = W^T W + (H(\mathcal{P}\mathbf{U}W) + \mathbf{d})^T \mathbf{R}^{-1} (H(\mathcal{P}\mathbf{U}W) + \mathbf{d}), \quad (1.13)'$$

这里 $\mathcal{P}$ 是 $\mathcal{P}$ 的切线性算子(1.14)式, 则应修改为

$$\nabla \mathbf{J} = 2(W + \mathbf{U}^T \mathcal{P}^T H^T \mathbf{R}^{-1} (H(\mathcal{P}\mathbf{U}W) + \mathbf{d})), \quad (1.14)'$$

$\mathcal{P}$ 与 $\mathcal{P}^T$ 所包含的算子 $\mathbb{M}$ 与 $\mathbb{M}^T$ 应理解为原求解器 $\mathbb{M}$ 的切线性及伴随算子. 下面写出 $\mathbb{M}$ 的具体形式:

$$\mathbb{M}_1(\psi) = \nabla^{-2} \left[\nabla \cdot (f \nabla \psi) - 2 \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} \right)^2 + 2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right], \quad (1.16)$$

$$\mathbb{M}_2(\psi) = \nabla^{-2} (\nabla \cdot (f \nabla \psi)), \quad (1.17)$$

(1.16)与(1.17)分别对应于非线性与线性平衡方程, ∇^{-2} 表示 Poisson 方程的求解器. $\mathbb{M}_1$ 为

$$\begin{aligned} \mathbb{M}_1 = \nabla^{-2} & \left[\nabla \cdot (f \nabla) - 4 \left(\frac{\partial^2 \psi_b}{\partial x \partial y} \right) \left(\frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \right) \right. \\ & \left. + 2 \frac{\partial^2 \psi_b}{\partial x^2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + 2 \frac{\partial^2 \psi_b}{\partial y^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right], \end{aligned} \quad (1.18)$$

这里 ψ_b 是背景场的流函数. 过去的研究结果表明在气流曲率大的情况下, 例如涡旋系统的分析, 用(1.16)取代计算相对简单的(1.17)是必要的^[7], 它接近于梯度风或旋衡风平衡. 由于(1.18)中方程的系数与背景场有关, $\mathbb{M}_1$ 已经隐含着与气流相关的背景场误差结构, 这与线性情况显著不同. 一般说背景场处于准平衡状态, 分析场的动力平衡程度主要表现在分析增量场, 即分析场与背景场的差. 由前面的推导可知这主要取决于背景场误差中平衡部分与不平衡部分的方差比. 对位势高度场, 其平衡部分的方差可以由风场导出^[8-11], 为了保证分析结果同样基本处于准平衡状态, 我们将位势高度非平衡部分的方差控制在由风场导出的平衡部分的方差的大约 0.1~0.5 之间. 这个比例随着纬度而变化. 为此要对下面提到的实际统计结果做一定修正.

1.4 湿度分析

关于湿度分析, 重要的问题是分析变量的选择以及与其他分析变量的关系. GRAPES预报模式的湿度变量是 q , 但不少关于湿度同化的研究^[12]认为以相对湿度为基础的变量的统计特征更符合同化系统的理论假定. 为此我们提供了用比湿 q 与相对湿度 RH 作为控制变量的两种选择. 前面已经假定控制变量的背景场误差与其他变量是独立的, 当选取相对湿度 RH 作为控制变量时, 实际隐含着比湿与其他分析变量的相关性. 以 X_s 表示状态变量, X_c 表示控制变量, 为简单起见, 略去风场, 并以 T 表示温度. 则 X_s 与 X_c 分别为

$$X_s = \begin{pmatrix} T \\ q \end{pmatrix}, \quad X_c = \begin{pmatrix} T \\ RH \end{pmatrix},$$

$$J(X_c) = \tilde{J}(X_s(X_c)),$$

$$\nabla_{X_c} J(X_c) = \left(\frac{\partial X_s}{\partial X_c} \right)^T \nabla_{X_s} \tilde{J}(X_s), \quad (1.19)$$

$$\frac{\partial X_s}{\partial X_c} = \begin{pmatrix} \frac{\partial T}{\partial T} & \frac{\partial T}{\partial RH} \\ \frac{\partial q}{\partial T} & \frac{\partial q}{\partial RH} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{\partial q}{\partial T} & \frac{\partial q}{\partial RH} \end{pmatrix}. \quad (1.20)$$

矩阵中底下两个元素由以下关系求得:

$$q = 0.01 q_s(T, p) RH, \quad (1.21)$$

这里 q_s 是饱和比湿, 可以近似取气压 p 在分析中不变, 最后得到:

$$\partial_T J = \partial_T \tilde{J} + 0.01 RH \frac{\partial q_s}{\partial T} \partial_q \tilde{J}, \quad (1.22)$$

$$\partial_{RH} J = 0.01 q_s(T) \partial_q \tilde{J}. \quad (1.23)$$

因此当将分析变量选择为比湿时, 湿度分析是作为单变量分析问题处理的, 但当分析变量选为相对湿度时, 湿度分析与温度(或位势高度)的分析是相关的. 目前还没有足够的证据来帮助确定哪一种湿度变量的选取的降水预报效果更好, 有待做更多的试验.

2 数值求解方案

2.1 背景场误差协方差矩阵的降阶与替代变换

尽管在理论上可以由式(1.13)~(1.15)求得 X_a , 但由于 U 的规模依然很大, 实际求解需要进一步的简化. 为此, 我们假定空间两点的背景场误差协方差可以分解为只与两点的垂直坐标有关的垂直分量和只与两点的水平坐标有关的水平分量的乘积. 这时 B_c 可以表示为

$$B_c = B_h \otimes B_v, \quad (2.1)$$

B_h 与 B_v 分别是水平与垂直方向的协方差矩阵, 而 $\otimes$ 表示克罗内克积. 容易证明 U 可以写成:

$$U = U_h \otimes U_v, \quad (2.2)$$

这里 $B_h = U_h U_h^T$, $B_v = U_v U_v^T$, 代入(1.15)后, 得到

$$X_a = X_b + \mathcal{P}(U_h \otimes U_v) W, \quad (2.3)$$

将 W 表示成一个矩阵的行展开, $W = \text{cs}(\Omega)$, 这里 Ω 的每一列代表了每一个水平格点上的控制变量的值, 由克罗内克积的公式直接可得到:

$$X_a = X_b + \mathcal{P}(\text{cs}(U_v \Omega U_h^T)) = X_b + \mathcal{P}(\text{cs}(\Lambda^{1/2} E \Omega U_h^T)), \quad (2.4)$$

Λ 是 U_v 的特征值构成的对角矩阵, E 是 U_v 的特征向量构成的矩阵. (2.4) 表示了垂直方向的特征向量变换, 一般说, 模式的垂直分层数不超过 10^2 , E 的直接求解没有原则困难. 但 U_h 是高频矩阵, 直接求取依然是很困难的. 从数学上讲 $U_h \Omega^T$ 可以看成是一个以 U_h 为滤波因子的空间滤波过程, 由于对于全球模式与区域模式, 预报变量的几何分布特征不同, 我们分别找出它们的滤波形式.

() 球面上的情形. 由于我们采用的相关模型是均匀、各向同性的, 可以证明转换到球谐函数展开的空间后, 在不同波数的谱系数间的协方差为零, 而且相同的经向波数的各个波的方差相同^[13]. 换言之, 谱系数表达的协方差矩阵是对角的, 且数值分布特别简单. 为此对于全球同化, 我们先将(2.4)的 Ω^T 场做球谐函数展开, 如全球格点数为 n , 而谱展开的截断总波数为 l , Ω 与谱系数 S 可以分别以 n 与 l 维向量表示, 它们间的关系简记为

$$\Omega = G S. \quad (2.5)$$

根据 G 的正交性, $S = G^T \Omega$. 这里 G 是由球谐函数的格点值所构成的 $n \times l$ 阶矩阵. 而对各向同性的协方差矩阵 B_h , 作相同的谱系数到格点值之间的变换, 即

$$B_h = G B_s G^T. \quad (2.6)$$

前面已经说明 B_s 是对角矩阵. 由以上两式,

$$U_h = B_h^{1/2} = G B_s^{1/2} G^T, \quad (2.7)$$

故,

$$U_h \Omega = G B_s G^T \Omega = G B_s^{1/2} S. \quad (2.8)$$

由于相关系数在球面上只是角距离的函数, 因此在作谱变换时只须进行 Legendre 函数的展开, 并将展开得到的各个经向波数的展开系数平均分配到相应的所有纬向分量, 即若以 $B(a)$ 表示仅随角距离 a 变化的相关函数, 对 B 作 Legendre 多项式展开:

$$B(a) = \sum_j b_j P_j(\cos a), \quad (2.9)$$

这里 P_j 是 Legendre 多项式. 而 B_s 中的任意元素 $b_{si,j}$ 为

$$b_{si,j} = \sqrt{\frac{2}{2i+1}} b_i, \quad j = -i, i. \quad (2.10)$$

() 有限区域的情形. 我们采用经纬网格, 对有限区域可以近似当作直角坐标, 但需要对纬圈方向的格距作纬度订正. Lorenc^[14] 已经证明只要恰当定义递归滤波参数, 就可以用一系列递归滤波来逼近类似于前面定义的空间滤波. 在空间滤波因子均匀情况下, 递归滤波参数可以通过对滤波的谱响应特征的比较得到. 我们采用了高斯型与二阶自回归两种相关模型. 一维向前-向后递归滤波的公式为

$$\begin{aligned} q_i &= (1-\alpha)q_{i-1} + \alpha p_i, \\ r_i &= (1-\alpha)r_{i+1} + \alpha q_i, \end{aligned} \quad (2.11)$$

对高斯型的相关模型: $\varepsilon_b^2 \exp(-(x_i - x_j)^2 / (2L^2))$,

$$\alpha = 1 + E - \sqrt{E(E+2)}, \quad E = N\Delta^2/L^2, \quad (2.12)$$

这里 N 是递归滤波的次数, Δ 是格距, L 是相关尺度. 为了使递归滤波保留原有的振幅, 递归滤波的结果应乘以一个因子 $\beta = \varepsilon_b^2 \sqrt{2\pi} L$. 在 GRAPES-3DVar 的情况, 相关模型是二维的, 递归滤波是二维的. 实际操作是先沿一个方向作一遍一维的向前-向后递归滤波, 再沿与其正交的方向作一遍一维向前-向后递归滤波, 如此反复.

对二阶自回归模型: $\varepsilon_b^2 (1 + |x_i - x_j|/s) \exp(-|x_i - x_j|/s)$, α 依然用(2.12), 而

$$E = N\Delta^2/4s^2, \quad N = 2, \quad (2.13)$$

因子 β 为 $\varepsilon_b^2 4S^2$, 其余与高斯的情形相同. 递归滤波应用于 3DVar 是为了逼近前面定义的矩阵 $\mathbf{U}$, 由于 $\mathbf{B} = \mathbf{U}\mathbf{U}^T$, 容易证明 $\mathbf{U}$ 是自伴随的, 矩阵 $\mathbf{U}$ 的作用相当于 $N/2$ 遍递归滤波. 实验表明递归滤波的收敛速度很快.

2.2 背景场误差的统计

尽管我们采用各向同性、均匀的背景场误差相关模型, 但仍必须给定误差的均方差与相关的空间尺度. 我们采用两种不同的方法进行统计. 一种是所谓的 NMC 方法^[10], 其基本假定是背景场(即某一时效的预报)误差的统计结构可以通过对同一时刻的两个不同时效的预报间的偏差的统计得到. 我们选用对同一时刻(00 UTC 或 12 UTC)的 12 与 24 h 的模式预报间的偏差, 统计不同预报要素的空间协方差, 并用选定的相关模型拟合. 另一种方法是“更新矢量”的统计^[8,9]. 前面已定义更新矢量为 $\mathbf{d} = \mathcal{H}(X_b) - Y$, 为简单起见, 假定 Y 与 X 是同一类变量, 这时 $d_i = \varepsilon_{bi} - \varepsilon_{oi}$, 下标 b 表示背景场误差, o 表示观测误差, i 表示第 i 个观测点. 求任意两个观测点上的 d 的乘积的样本平均 $\langle d_i d_j \rangle$, 并进一步假定观测误差与背景场误差不相关, 则有:

$$\langle d_i d_j \rangle = \langle \varepsilon_{bi} \varepsilon_{bj} \rangle + \langle \varepsilon_{oi} \varepsilon_{oj} \rangle. \quad (2.14)$$

若不同观测点的观测误差互相独立, (2.14) 的右端的第二项仅在 $i = j$ 时才存在. 如背景场误差的协方差是均匀、各向同性的, 则它应仅是距离的函数. 由不同观测点对求出的 $\langle d_i d_j \rangle$ 值按照两点间的距离排列可以得到一系列背景场误差协方差随距离变化的样本. 再以光滑的理论模型进行拟合, 可以得到前面提到的实施变分同化所需要的统计参数, 并可分离出观测误差. 两类统计结果已经在其他论文发表^[11], 这里不再重复. 我们只指出, 定性的结果是相似的, 但数量上有区别. 系统中的实际应用是经验性的组合.

2.3 最优化问题的求解

可以有很多数值方法来求解(1.5)的极小值问题, 本文采用有限记忆的变尺度方法(LBFGS)^[15]. LBFGS 是一种拟牛顿算法, 如以 $\mathbf{x}^{(k)}$ 表示第 k 次最优化迭代中得到的分析变量值, 并且令 $\mathbf{s}_k = \mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}$, $\mathbf{g}_k = \mathbf{f}(\mathbf{x}^{(k)})$, $\mathbf{y}_k = \mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k$. 求使目标函数最小的 $\mathbf{x}$ 的迭代公式是

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(k+1)} &= \mathbf{x}^{(k)} - \alpha_k \mathbf{H}_{ek} \mathbf{g}_k, \\ \mathbf{H}_{ek+1} &= \mathbf{V}_k^T \mathbf{H}_{ek} \mathbf{V}_k + \rho_k \mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T, \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$\mathbf{V}_k = \mathbf{I} - \rho_k \mathbf{y}_k \mathbf{s}_k^T, \quad \rho_k = 1 / \mathbf{y}_k^T \mathbf{s}_k.$$

有限记忆的变尺度方法(LBFGS)利用了 $\mathbf{H}_e$ 的更新是根据 $\{\mathbf{s}_k, \mathbf{y}_k\}$ 计算得到的这个特性, 仅存储能隐式计算确定 $\mathbf{H}_{ek}$ 的有限对 $\{\mathbf{s}_k, \mathbf{y}_k\}$, 而不是存储 $\mathbf{H}_{ek}$ 矩阵本身. 因此 LBFGS 算法总是保持有限对最新的矢量对 $\{\mathbf{s}_k, \mathbf{y}_k\}$, 来确定迭代矩阵. 所以 LBFGS 对于变量个数 N 很大的问题很适合. 采用 LBFGS 方法求搜索方向 $\mathbf{d}_k (= -\mathbf{H}_k \mathbf{g}_k)$, 然后沿 $\mathbf{d}_k$ 方向采用 Wolfe-Powell 准则求步长 α_k . 具体步骤如下:

(1) 对于增量分析, 给定初始点 $\mathbf{x}^{(0)} = 0$; 取 $\mathbf{H}_0 = \mathbf{I}$, 为单位矩阵; 迭代收敛判据: $(\mathbf{g}_k, \mathbf{g}_k) \leq (\mathbf{g}_0, \mathbf{g}_0)/100$; 令 $k = 0$.

(2) 检验是否满足精度要求, 是, 则结束; 否, 令 $m = \min\{k, m_0 - 1\}$, 采用 LBFGS 方法得到 $\mathbf{H}_k$, 计算 $\mathbf{d}_k = -\mathbf{H}_k \mathbf{g}_k$.

(3) 按照 Wolfe-Powell 准则迭代求得 α_k : 先计算下降条件, 满足后计算曲率条件, 直至二个条件都满足, 或达到预先规定的最大迭代次数.

(4) $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{d}_k$ 令 $k = k + 1$, 返回(2).

关于 LBFGS 的更详细的讨论可参考有关文献.

3 理想试验

为了检验方案与程序的正确性, 设计了一系列分析格点上观测要素与分析变量相同的单个观测的理想实验. 在这种情形下(2.5)的极小值问题可以准确求解, 因此可用以检验数值求解的结果. 此时 H (以及 $\mathcal{H}$) 成为只有一个对角线元素(以下设为第 i 个格点)为 1, 其余元素全部为 0 的矩阵, 由(1.5)可以解出:

$$X_a - X_b = \mathbf{B} \mathbf{H}^T (\mathbf{H} \mathbf{B} \mathbf{H}^T + \mathbf{R})^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{Y}_b) = \beta_i (d_i / (\sigma_b^2 + \sigma_o^2)), \quad (3.1)$$

σ_b 与 σ_o 分别是背景场与观测误差均方差, β_i 表示背景场误差协方差矩阵 $\mathbf{B}$ 的第 i 列向量, d_i 则是该观测与背景场的差. 由于(3.1)右端括号内是一个常数, 由(1.10),

$$\mathbf{B} = \mathbf{P} \mathbf{B}_c \mathbf{P}^T, \quad (3.2)$$

可以由给定的背景场误差模型 $\mathbf{B}_c$ 计算出 $\mathbf{B}$. 为简单起见, 进一步假定地转平衡, 此时 $\mathbf{M}(\psi) = f\psi$, 这里 f 是地转参数. 将 $\mathbf{P}$ 的表达式(1.8)代入(3.2)我们可得:

$$\langle u_1, u_2 \rangle = - \left(\frac{\partial^2}{\partial y_1 \partial y_2} \langle \psi_1, \psi_2 \rangle + \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} \langle \chi_1, \chi_2 \rangle \right),$$

$$\begin{aligned}\langle v_1, v_2 \rangle &= - \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} \langle \psi_1, \psi_2 \rangle + \frac{\partial^2}{\partial y_1 \partial y_2} \langle \chi_1, \chi_2 \rangle \right), \\ \langle u_1, v_2 \rangle &= \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial y_2} \langle \psi_1, \psi_2 \rangle - \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial y_2} \langle \chi_1, \chi_2 \rangle \right), \quad (3.3) \\ \langle \phi_1, \phi_2 \rangle &= (f_1 f_2 \langle \psi_1, \psi_2 \rangle + \langle \phi_{u1} \phi_{u2} \rangle), \\ \langle \phi_1, u_2 \rangle &= - \frac{\partial}{\partial y_2} (f_1 \langle \psi_1 \psi_2 \rangle), \\ \langle \phi_1 v_2 \rangle &= \frac{\partial}{\partial x_2} (f_1 \langle \psi_1 \psi_2 \rangle).\end{aligned}$$

图1与2给出单个位势高度与风的观测所得到的相同等压面上高度与风的分析增量即分析场与背景场之差,以及在观测格点上分析增量的垂直分布,其中图1是采用区域分析方案由递归滤波计算的结果,而图2是采用球面分析方案由谱变换滤波得到的结果(引自文献[16]).作为对比在图3给出由式(3.1)与(3.3)直接计算的结果.对比图1与图2表明,球面分析与区域分析的结果是相当一致的.区别只出现在

边缘上,那里的分析增量值已经非常小,差别已无实际意义.图1与2的结果不仅相互一致,而且与图3的结果非常接近,因而表明由本文设计的3维变分的数值求解方案有足够的精度,并且分析结果不受分析区域几何特征(全球还是有限区)的影响.图3与图1,2的分析值的差别是由图3的计算中所采用的观测值,即(3.1)的 d_i 是任意给的,由该式可见分析值与 d_i 成正比,所以它的具体取值并没有实际意义.

由于数值方案采用了迭代求解,因此还必须考察其收敛性.关于递归滤波的收敛性,我们已经作过讨论[17],结果都表明适当选取滤波系数,可以保证递归滤波结果很快收敛,关于这一点本文不再给更多结果.下面只给出数值求解的总的收敛性.图4是求解以上理想试验过程中目标函数及其梯度随着迭代步数的变化,横坐标是迭代步数,实线与虚线分别是目标函数值与目标函数的梯度值的变化.由图4可知仅需少数几步迭代即可达到要求的精度.我们曾经

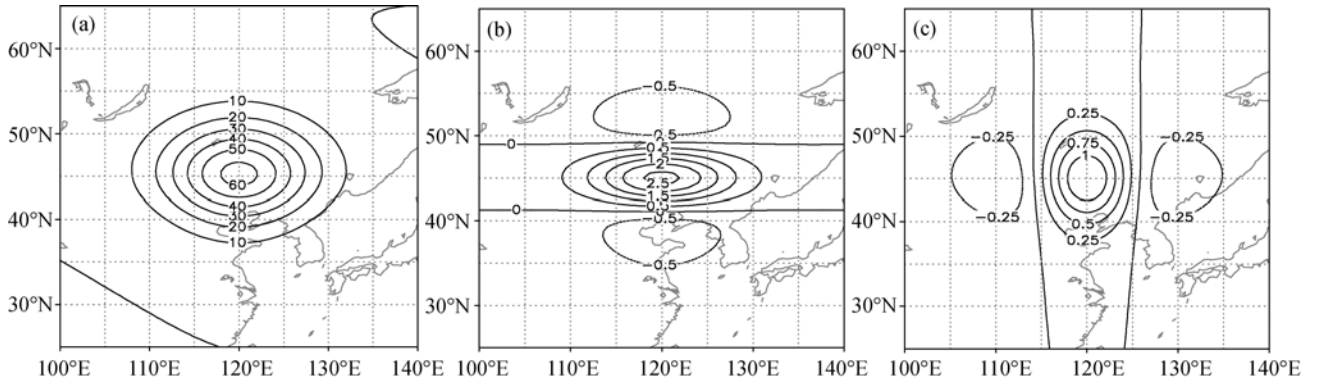


图1 在区域分析方案中由递归滤波计算得到的500 hPa分析增量的理想试验图

(a) z-z; (b) u-u; (c) v-v

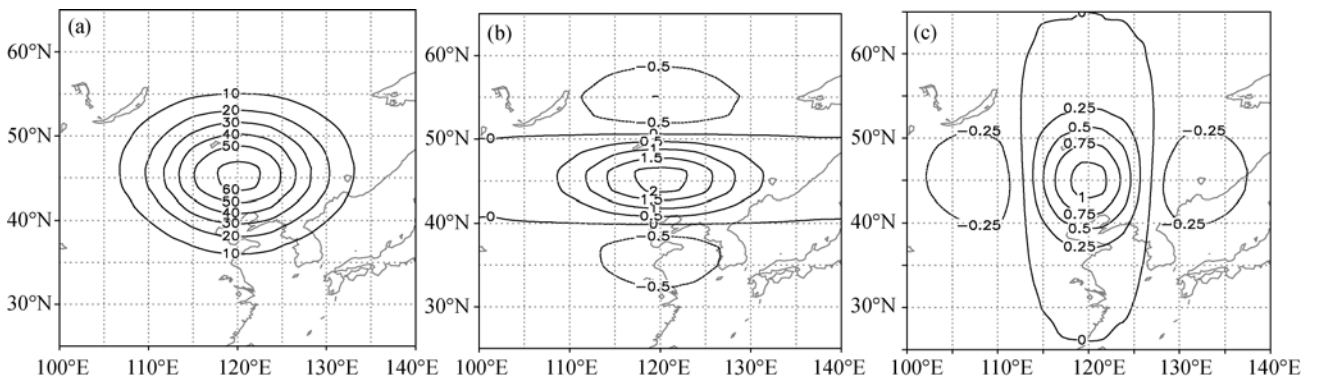


图2 球面分析方案中由谱变换滤波计算得到的500 hPa分析增量的理想试验图

(a) z-z; (b) u-u; (c) v-v

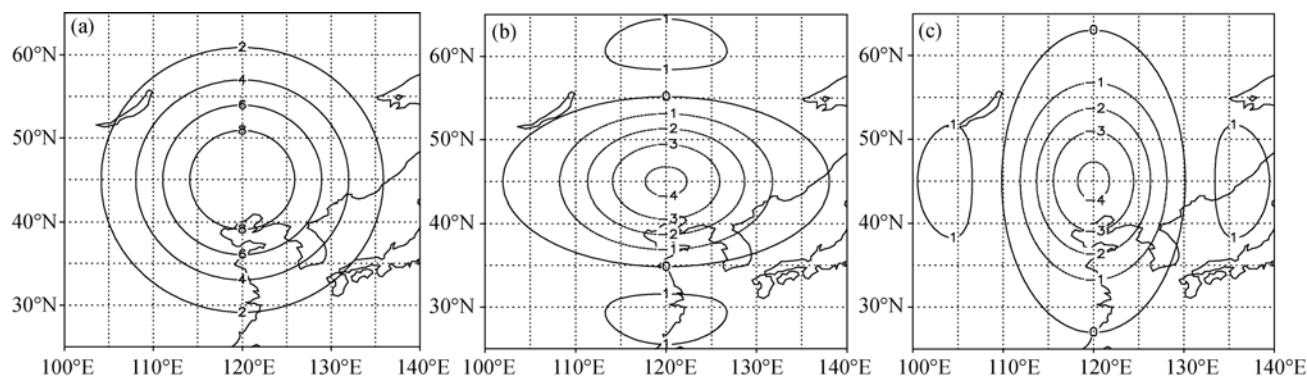


图 3 数值求解方案计算得到的试验图

(a) $z:z$; (b) $u:u$; (c) $v:v$

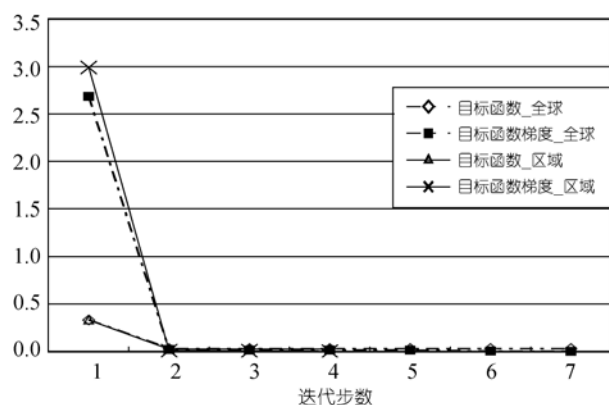


图 4 目标函数及其梯度随迭代步数的变化图

对比过其他的变量变换, 结果表明本文的数值方案的收敛速度是相当快的。

4 实例试验

GRAPES-3DVar 从 2002 年开始逐渐在不同的数值预报业务与研究单位作实际例子的试验。从 2004 年开始又与 GRAPES 中尺度预报模式、GRAPES 全球预报模式连接成同化-预报试验系统, 作批量同化预报试验。这里描述中尺度同化-预报系统设计与实验结果。由于本文的内容局限在同化系统本身的设计, 关于观测资料的使用将均不涉及。我们已经专文讨论有关遥感资料在 GRAPES 同化系统中的使用^[18]。

4.1 同化-预报试验系统

同化预报的流程如图 5。上一时次的预报经过模式后处理后提供给本次分析作为初估值, 系统获取的当前观测资料经过质量控制后作为观测量。变分同化的结果经过模式的预处理程序提供给模式做往前积分的初值。由于我们在同化系统中没有设置对

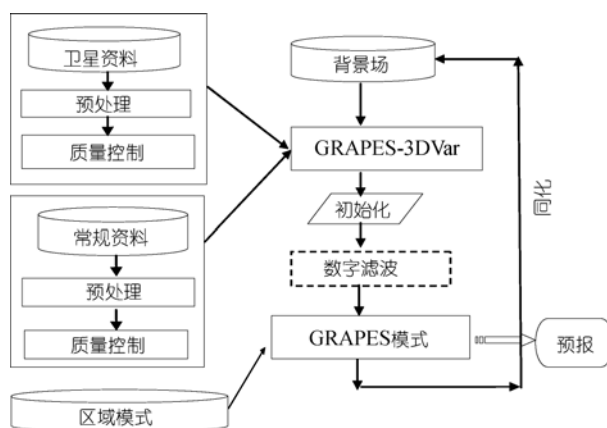


图 5 同化-预报流程图

重力波的控制项, 故在预报模式进行正式积分前, 利用数字滤波初值化方案做一次高频重力波的过滤。但在实际计算中发现对于通常的业务同化时间窗设置如 6 或 12 h, 高频重力波的过滤可以略去。因此数字滤波初始化处理只是在同化时间窗相对较短时才使用。

4.2 实际观测资料的同化试验

在中国气象科学研究院建立的 GRAPES 同化-预报试验平台上, 选取 2004 年 6 月与 2005 年 2 月做批量试验。这里给出一个任选的天气实例, 同化的起始时间是 2004 年 6 月 10 日 00 UTC。由于关于遥感资料在 GRAPES 同化系统中的应用我们将在其他论文中做专门讨论, 所以这里只给出常规观测资料的同化结果。同化-预报区域是中国及临近地区。图 6(a) 是本次同化使用的观测资料的分布, 图 6(b) 是 500 hPa 位势高度与风的分析增量, 即分析值与背景值的差。从图中可以看出分析方案在合理地维持风与位

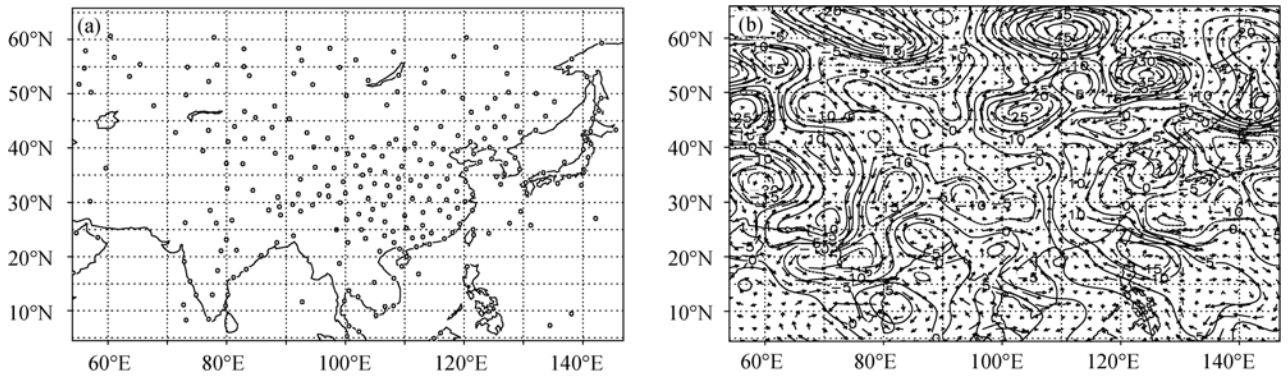


图 6 同化效果检验图(2004 年 6 月 10 日 00 UTC 个例)

(a) 500 hPa 探空资料分布图; (b) 500 hPa 位势高度和矢量风分析增量分布图

势高度平衡的条件下把观测信息扩散到整个分析区域。试验表明即使在完全使用相同的常规观测资料的条件下, 由于放弃了传统的分析方法(如统计插值)的局地挑选观测资料的过程, 3DVar 也可以得到更好的分析结果。

图 7 给出对批量试验的分析的统计检验结果, 检验使用中国地区的探空资料。图 7(a)与(b)是位势高度与矢量风的分析与探空差的全场平均值与均方根

值随气压的变化。作为对比给出背景场的值。该图明显反映出同化系统在拟合观测资料方面的能力。观测与背景场、同化结果之间不存在明显的系统性偏差, 而分析场与观测的均方偏差比背景场与观测的均方偏差大约降低一半左右。这大致与系统给定的观测误差、背景场误差的方差比例相匹配。当然这只是资料稠密地区的情况, 资料稀疏的地区情况会不同, 由图 6(b)可以看出, 在那里, 分析增量相对较小, 因此

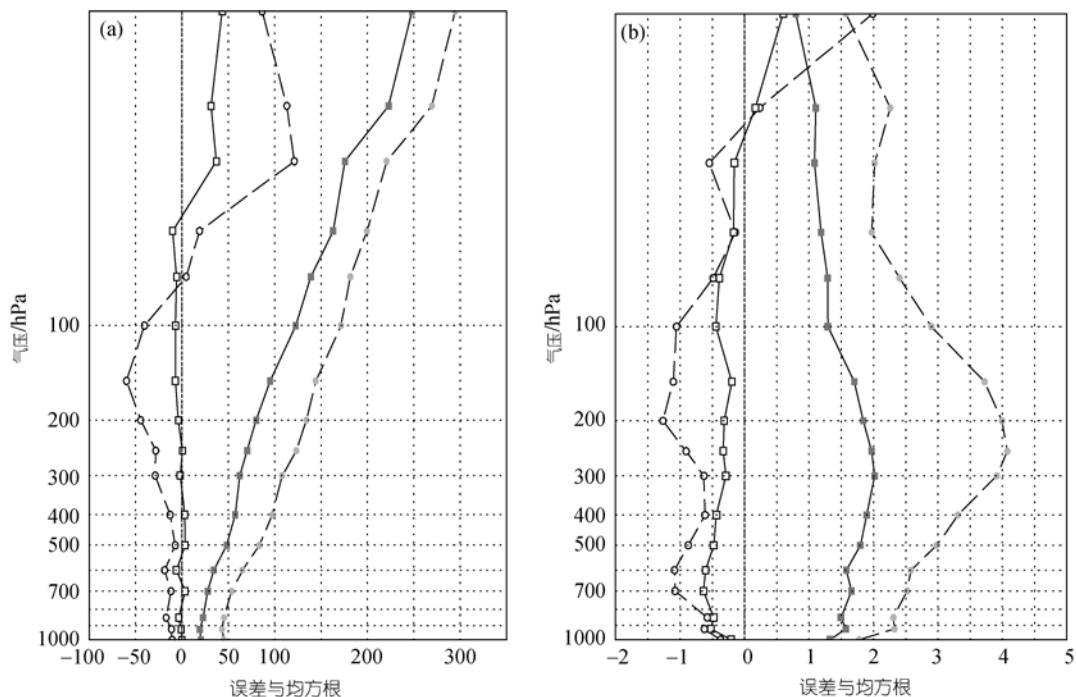


图 7 同化效果检验图(2004 年 6 月 10~30 日平均统计结果)

(a) 位势高度的分析与探空资料之差的全场平均值及均方根值随气压的变化曲线; (b) 矢量风的分析与探空资料之差的全场平均值及均方根值随气压的变化曲线

观测与背景场的差异也就较多地被保留下来。

总的来说同化使预报有改进。图 8 是利用国家气象中心的原有分析系统与新建立的三维变分同化系统所提供的模式初值所做的中国区域降水短期预报的技巧评分的对比。两套系统所使用的观测资料相同,但由于对观测资料的质量控制的方案存在差异(关于 GRAPES-3DVar 的观测资料质量控制问题将在关于观测资料使用的论文中做专门讨论),所以有可能被剔除的“坏资料”不完全一致。这一试验表明了变分同化方法在改进预报中的潜力。GRAPES 的同化方案还曾应用到其他预报模式,同样取得比传统的客观分析更好的预报效果。

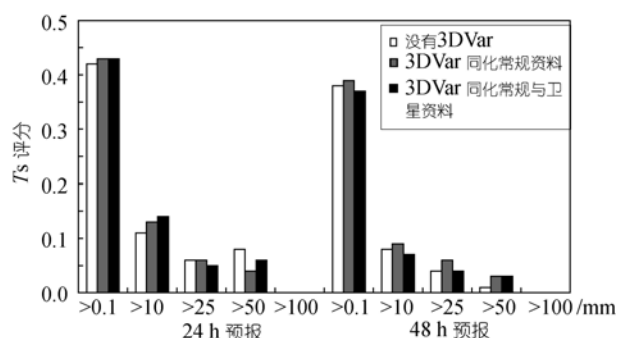


图 8 2004 年 6 月 10~30 日 24 和 48 h 降水预报 Ts 评分检验
全国平均

5 小结与讨论

本文完整给出了一个变分同化系统的设计方案与试验的结果。为了与预报模式一致,分析变量定义在离散格点上。将分析变量分解为动力平衡与不平衡两个部分,并引入简单的递归滤波或谱变换滤波进行变量变换,得到与分析变量相异的控制变量,它们使目标函数的极小化过程的性状得以大大改善。而平衡关系的选择可以根据分析变量的尺度特征来确定,其在总分析方差中所占的比例则由背景场的误差方差所控制。理想试验的结果与解析求解一致,表明了系统数值方案的正确性。利用实际观测资料

进行连续同化试验,结果表明即使在使用常规资料条件下,变分同化方案与过去通行的同化方案相比也有突出的优势,并在批量试验中已经显示了业务应用的能力。系统设计中还涉及其他一些重要的问题,限于本文的篇幅没有作深入的讨论,在此作一些说明:

(1) 前面没有具体提及质量变量的选取,我们实际提供了位势高度与温度两种分析变量的选择。两者符合静力平衡关系。试验表明分析变量的选择对分析结果并不产生明显的影响,因此实际的选择取决于模式需要。由于目前 GRAPES 预报模式的初值形成方案是以气压变量为基础的,故在连续同化的运行中,选择了位势高度。对于相当多的观测资料,采用气温作为状态变量构造观测算子更为方便,需要在今后更多的试验。

(2) 平衡关系的选择对于分析结果有比较明显的影响,在中尺度系统与流场曲率较大的情况下,利用非线性平衡方程是必要的,否则会产生虚假的分析结果,例如单个风的观测产生出过强的气压梯度。这方面的分析可参见文献[7, 19]。

(3) 变分同化方法的突出优点是可以直接同化遥感资料[18]。由于本文集中在同化系统基本框架的设计,而遥感资料的同化涉及完全不同的科学问题,我们将在关于观测资料使用的另一篇论文中作专门讨论。这里只指出本系统的建立是遥感资料直接同化的最重要的基础。

(4) 作为本系统的发展,我们还进行了两方面的工作。一方面是将 GRAPES-3DVar 扩展为 GRAPES-4DVar 也就是将(2.5)恢复为(2.3),此时需要引进预报模式及其切线性与伴随模式,同化系统的其他部分基本没有变化。另一方面是采用随天气形势变化(flow dependent)的背景场误差的协方差矩阵,为此发展了一个结合集合 Kalman 滤波的三维变分系统。由于背景场误差在三维变分同化中起着关键的作用,更符合实际的随着天气形势而变化的背景场误差结构是目前一个研究的热点。

致谢 本三维变分同化系统发展过程中得到中国气象科学研究院、国家气象中心、国家卫星气象中心的同事们多方支持,作者在此一并表示感谢。

参考文献

- 1 Xue J S. Progresses of researches on numerical weather prediction in China: 1999-2002. *Adv Atmos Sci*, 2004, 21: 467—474[[doi](#)]
- 2 Cote J, Gravel S, Patonie A, et al. The operational CMC-MRB global environmental multiscale (GEM) model, Part 1: Design considerations and formulation. *Mon Weather Rev*, 1998, 126: 1373—1395[[doi](#)]
- 3 Davies T, Cullen M, Malcolm A, et al. A new dynamical core for the Met Office's global and regional modeling of the atmosphere. *Q J R Meteorol Soc*, 2005, 131: 1759—1782[[doi](#)]
- 4 Eyre J R, Kelly G A, McNally A P, et al. Assimilation of TOVS radiance information through one-dimensional variational analysis. *Q J R Meteorol Soc*, 1993, 119: 1427—1463[[doi](#)]
- 5 Lorenc A. Analysis methods for numerical weather prediction. *Q J R Meteorol Soc*, 1986, 112: 1177—1194[[doi](#)]
- 6 Ido K, Courtier P, Ghil M, et al. Unified notation for data assimilation: Operational, sequential and variational. *J Meteor Soc Japan*, 1997, 75: 181—189
- 7 庄照荣, 薛纪善, 朱宗申, 等. 非线性平衡方程方案在三维变分同化系统中的应用. *气象学报*, 2006, 64(2): 137—148
- 8 Hollingsworth A, Lonnberg P. The statistical structure of short-range forecast errors as determined from radiosonde data, Part 1 and Part 2. *Tellus*, 1986, 38A: 111—161
- 9 Franke R. Three dimensional covariance functions for NOGAPS data. *Mon Weather Rev*, 1999, 127: 2293—2308[[doi](#)]
- 10 Parrish D F, Derber J C. The national meteorological center's spectral statistical interpolation analysis system. *Mon Weather Rev*, 1992, 120: 1743—1763
- 11 庄照荣, 薛纪善, 庄世宇, 等. 资料同化中背景场误差统计结构的研究. *大气科学*, 2006, 30(3): 533—544
- 12 Holm E V. Revision of the ECMWF humidity analysis: Construction of a Gaussian control variable. In: *ECMWF Workshop Proceedings: ECMWF/GEWEX Workshop on Humidity Analysis*, 2002. 1—6
- 13 Boer G J. Homogeneous and isotropic turbulence on the sphere. *J Atmos Sci*, 1983, 40: 154—164[[doi](#)]
- 14 Lorenc A C. Iterative analysis using covariance functions and filters. *Q J R Meteorol Soc*, 1992, 118: 569—591
- 15 Navon I M, David M L. Conjugate gradient methods for large scale minimization in meteorology. *Mon Weather Rev*, 1987, 115: 1479—1502[[doi](#)]
- 16 庄世宇, 薛纪善, 朱国富, 等. GRAPES 全球三维变分同化系统—基本设计方案与理想试验. *大气科学*, 2005, 29(6): 872—884
- 17 张华, 薛纪善, 庄世宇, 等. GRAPES 三维变分同化系统的理想试验. *气象学报*, 2004, 62: 31—41
- 18 Zhuang H, Xue J S, Zhu G F, et al. Application of direct assimilation of ATOVS microwave radiances to typhoon track prediction. *Adv Atmos Sci*, 2004, 21: 283—290[[doi](#)]