

用变分法修正边界层资料的数值试验^{*}

马 刚

(国家卫星气象中心, 北京, 100081)

邱崇践

王强

(兰州大学大气科学系, 兰州, 730000) (北京气象学院, 北京, 100081)

摘 要

文中用变分方法修正边界层资料及模误差, 目标函数相对于控制变量的梯度用扰动法计算, 对利用小扰动求取梯度的方法进行了理论推导和试验分析。利用模式资料所作的数值试验表明, 该方法能有效地修正模式自身误差, 使模式能精确描述边界层物理过程, 从而使调整后的初始场最好地拟合“观测资料”。

关键词: 变分, 边界层, 数值试验。

1 引 言

近年来进行的天气和环境野外试验获得了大量的边界层要素时空分布资料。但这些资料在时间上有不少间断, 同时, 一些资料也存在较大误差, 从而影响了对其进一步应用。由于边界层下垫面情况复杂, 要素场的时间、空间变化都很剧烈, 插值分析和平滑的方法会产生较大误差。但是, 边界层大气的演变也遵循一定的物理规律, 即给定初始场, 积分适当的大气模式即可模拟出它们的演变过程。这就是当前数值天气预报中流行的变分四维同化的基本思想。它可以归结为求解一个以数值模式为约束条件的泛函极小问题, 这里目标函数表示模式输出与观测的距离, 因此变分四维同化可以看作是将模式输出与实际观测相拟合。本文将利用一个一维边界层数值预报模式, 利用数值模式提供的信息弥补了“观测资料”的种种缺陷, 以达到修正“观测资料”的最终目的。

2 理论概述

2.1 变分同化方法

变分四维同化方法的基本原理是通过修正模式的输入量(控制变量), 使在同化时段内的模式输出量(或是它们的某些函数)与相应观测之间距离最小。因此, 我们将目标函数写成最小二乘形式, 将其定义为模式预报值与相应的观测值间的距离。于是, 这便构成了

^{*} 初稿时间: 1998 年 12 月 10 日; 修改稿时间: 1999 年 5 月 28 日。
资助课题: 国家自然科学基金项目“黑河实验资料优化处理研究”49575249。

一个约束条件(数值模式)下的泛函极小化问题,通过种种途径计算出目标函数相对于控制变量的梯度,然后运用某种极小化算法(如共轭梯度法、拟 NEWTON 方法),使其达到极小点。

一个经空间离散化后的大气边界层数值模式可以表达为下面的常微分方程组

$$\frac{dX}{dt} = F(X, P) \quad (1)$$

其中, X 是 N 维向量,它表示模式输出,包含所有模式变量在所有格点上的值; P 是模式参数。同时,定义目标函数表征模式输出与相应观测之间的距离:

$$J = \sum_{t=0}^n [C(X(t_r)) - y(t_r)^{\text{obs}}]^T W_1(t_r) [C(X(t_r)) - y(t_r)^{\text{obs}}] \quad (2)$$

这里, n 是同化时段内有观测场的次数, $y(t_r)^{\text{obs}}$ 是观测场,并满足 $y(t_r)^{\text{obs}} = C[X(t_r)]$, C 表示模式输出 $X(t_r)$ 到观测场的映射。这是因为观测场并不一定都是模式变量。 $W_1(t_r)$ 是一个 $N \times N$ 维的权重系数矩阵。

有 3 种选择控制变量的方案^[1], 方案一是以初始场 X_0 作为控制变量,这相当于认为模式是精确的,而初始场有误差;方案二是以参数 P 作为控制变量,这相当于认为初始场是精确的,而模式有误差。实际上,数值模式和初始场都有误差,因此方案三将参数 P 与初始值 X_0 同时作为控制变量,看上去,似乎方案三应该更为合理。对于一般三维模式而言,水平平流对模式变量局地变化的贡献是很大的,由于本文采用的是一个一维垂直模式,略去了水平平流项,因此可认为模式误差主要源于水平平流项的忽略,若 P 表示要素场空间水平的梯度分布,则模式误差项可表示为:

$$\delta = V \frac{\partial X}{\partial S} = V P \quad (3)$$

这里, V 表示合成风速, $\frac{\partial X}{\partial S}$ 表示模式变量沿水平风的梯度。修正模式误差时,取 $P \left[= \frac{\partial X}{\partial S} \right]$ 作为控制变量,并假设其不随时间变化。通过调整参数 P 使模式输出与观测场最接近,即 J 最小。但从物理上考虑,还应对参数施加以必要的限制^[2]:

$$|P_j - \bar{P}_j| \leq \delta P_j \quad j = 1, 2, \dots, m \quad (4)$$

其中, $\bar{P}_j$ 是 P_j 的估计值, δP_j 为参数 P_j 的允许误差。利用泛函数技术可以将这一带不等式约束的极小化问题转化为无约束极小化问题,由此,对于第二、三种方案,只须将目标函数式(2)扩展为:

$$L = J + \sum_{r=1}^m (P_r - \bar{P}_r)^T W_{2,r} (P_r - \bar{P}_r) \quad (5)$$

选择适当的权重系数 $W_{2,r}$ 即可保证式(4)的满足。在本文中,我们采用准 Newton 型的最优化方法^[3]求解上述极小化问题;采用扰动法计算目标函数相对控制变量的梯度。对如下形式的目标函数

$$J = J(X_1, X_2, \dots, X_n) \quad (6)$$

若给第 i 个控制变量加上一个扰动量 δX_i , 则第 i 个梯度分量可以按下式计算(单向差分格式):

$$\frac{\partial J}{\partial X_i} \approx \frac{J(X_1, X_2, \dots, X_i + \delta X_i, \dots, X_n) - J(X_1, X_2, \dots, X_i, \dots, X_n)}{\delta X_i} \quad (7)$$

或(中央差分格式):

$$\frac{\partial J}{\partial X_i} \approx \frac{J(X_1, X_2, \dots, X_i + \delta X_i, \dots, X_n) - J(X_1, X_2, \dots, X_i - \delta X_i, \dots, X_n)}{2\delta X_i} \quad (8)$$

试验证明(图 1), 中央差分格式较单向格式具有更快的收敛速度。本文中, 我们采用中央差分格式计算梯度。这意味着若有 n 个控制变量时, 为计算一组梯度我们需用模式作 $2n$ 次模拟计算, 当模式控制变量维数较高(即 n 很大)时, 其工作量很大的。

2.2 模式和资料

试验采用的一维边界层垂直扩散模式方程是

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} K \frac{\partial X}{\partial z} + S \quad (9)$$

$X = X(u, v, \theta, q)$, 这里, 温度场采用位温形式, S 是所有剩余项, 令其形同式(3)。为减少控制变量个数, 我们将模式层顶和层底的参数 P 作为控制变量, 用线性插值计算各层的参数值。模式中, 垂直扩散系数根据 Louis 等^[4]的参数化方案计算。在模式上界($z = z_g + H$), 假设动量和感热通量为零, 在下边界($z = z_g$), 取

$$K_{mv} \frac{\partial u}{\partial z^*} = C_m |V_0| u_0 \quad (11)$$

$$K_{mv} \frac{\partial v}{\partial z^*} = C_m |V_0| v_0 \quad (12)$$

$$K_{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial z^*} = C_m |V_0| (\theta_0 - \theta_g) \quad (13)$$

表面交换系数 C_m 和 C_{θ} 亦按 Louis 等的参数化方案计算; θ_g 是地表位温, 通过积分下垫面地温预报方程得到。

$$C_g \rho_g \frac{\partial T_g}{\partial t} = -K_g \frac{\partial^2 T_g}{\partial z^2} \quad (14)$$

在计算地表有效辐射通量 R 时, 我们采用的是一个高度简化的未考虑云效应的辐射参数化方案。模式垂直划分为 12 层(相对高度分别为 1.5, 10, 25, 75, 125, 225, 450, 750, 1000, 1500, 2250, 3000 m)积分时段为 6 h, 时间步长为 60 s。在数值试验中, 任意给出同化的初始时刻以及测站的经纬度坐标和海拔高度, 并根据边界层要素场垂直分布规律, 给定初始时刻要素场垂直分布廓线, 将模式积分, 每小时输出的要素场垂直廓线作为数值试验的“观测值”。

2.3 权重系数和尺度化量

目标函数中权重系数的选取根据资料的精度而定, 一个变量的精度愈高, 则它就越加可信, 权重系数的值也相应较大^[5]。这里, 我们给出目标函数中各项的误差估计, 以其倒数的平方作为相应的权重系数。

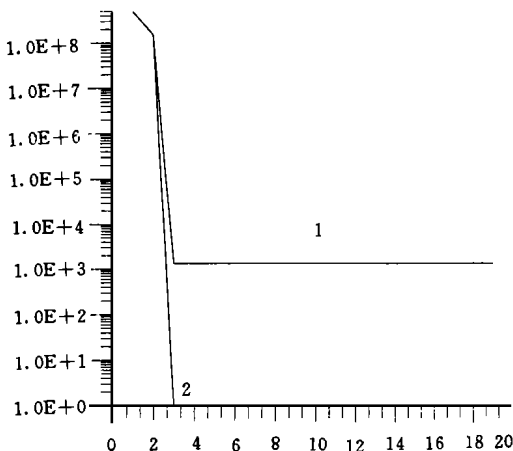


图 1 采用单向差分法和中央差分

格式时目标函数的下降情况

(曲线 1 为单向差, 曲线 2 为中央差分格式)

由于各控制变量的量级差别很大,若不对其作预处理,计算出的梯度量级差别也会很大,使目标函数在多维空间呈现极度扁的“椭圆球”,造成目标函数难于下降。解决办法是利用尺度化方法使目标函数相对各控制变量的梯度有大体相同的量级。本文取尺度化因子 $S_j = X_j^{\max} - X_j^{\min}$ 。

3 利用模式资料的模拟试验

3.1 数值试验设计

根据前面所述的不同控制变量选择方法,我们考虑以下几种同化试验方案^[6]:

- 1) IC 试验: 仅对初始场进行调整。在同化过程中,假设数值模式是精确的,误差是由于初始场不精确造成,目标函数仅是初始场的函数,同化的基本思路是调整初始场使得目标函数收敛。
- 2) ME 试验: 仅对模式误差进行调整。在同化过程中,假设初始场是精确的,误差是由于模式不精确造成的。
- 3) 对模式及初始场均作调整的试验。这里,我们考虑以下几种情况:
 - a) ICME 试验: 先对初始场进行调整,然后继续调整模式误差;
 - b) TIM 试验: 同时调整初始场和模式误差。

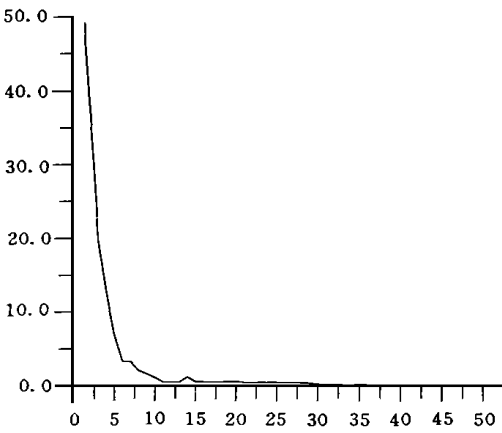


图2 IC 实验中目标函数的下降情况

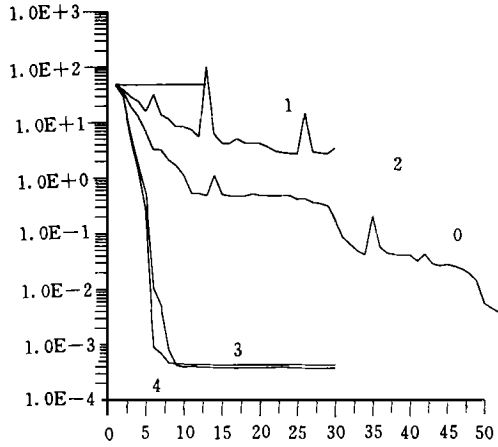


图3 不同扰动步长时目标函数的下降情况
(曲线0, 1, 2, 3, 4依次代表扰动步长为 1.0E-3, 1.0E-4, 6.0E-4, 1.0E-2, 1 五种情形)

为检验同化结果的有效性,我们将同化后的预报结果与观测资料作比较,所有的偏差都是以均方根误差(RMS)表示的。

3.2 IC 试验(仅对初始场进行调整)

首先,我们检验算法的有效性,假设扰动步长对于每个控制变量为常量, $u = v = 0.001 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, $T = 0.001 \text{ K}$, $q = 1 \times 10^{-5} \text{ g} \cdot \text{g}^{-1}$ 。取权重系数 $W_u = W_v = 1.0 \text{ m}^{-1} \cdot \text{s}$, $W_T = 1.0 \text{ K}^{-1}$, $W_q = 1000 \text{ g}^{-1} \cdot \text{g}$; 尺度因子 $S_u = S_v = 1.0 \text{ m}^{-1} \cdot \text{s}$, $S_T = 1.0 \text{ K}^{-1}$, $S_q = 0.1 \text{ g}^{-1} \cdot \text{g}$ 。取 $\tilde{u} = u_0 + 1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, $\tilde{v} = v_0 - 1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, $\tilde{T} = T_0 + 0.5 \text{ K}$, $\tilde{q} = q_0 + 0.001 \text{ g} \cdot \text{g}^{-1}$, 作为初猜值, 其中, u_0, v_0, T_0, q_0 为“观测场”, $\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{T}, \tilde{q}$ 为存在误差的初始场。经过迭代, 目标

函数连续下降 5 个量级(图 2), 各控制变量的均方差也下降 3 个量级, 同化后控制变量的垂直廓线与同化前的廓线基本重合。

由于我们用扰动法计算目标函数对控制变量的梯度, 扰动值不同可能影响收敛速度。取 分别为0.0001, 0.0006, 0.001, 0.01, 1, 令 u 、 v 和 T 的数值与 相同, $q=0.01$ 。图 3 表示 5 种情形下目标函数的收敛情况。

当 $=0.0001$ 或 $=0.0006$ 时, 目标函数不下降或下降很少; 当 $=0.01$ 和 $=1.0$ 时, 目标函数下降极为迅速(迭代到第 10 次, 目标函数下降 6 个量级)。这表明, 目标函数收敛速度与扰动量大小关系密切, 太小, 计算的梯度代表性不好, 特别是当它接近计算机的舍入误差时更是失去了其原有意义; 过大, 计算的梯度误差太大, 结果也不好。下面列出了 5 种情况下控制变量均方差的收敛结果(表 1)。

表 1 不同扰动步长计算梯度时得到的初始场方差收敛结果

	$u(\text{m} \cdot \text{s}^{-1})$	$v(\text{m} \cdot \text{s}^{-1})$	$T(\text{K})$	$q(\text{g} \cdot \text{g}^{-1})$
调用前	1.0	1.0	0.5	0.001
$=0.0001$	0.9999924	0.9999977	0.5000026	0.001
$=0.0006$	0.2674771	0.2462061	0.1887793	0.0001828
$=0.001$	0.0006842	0.0115847	0.0092698	0.0000651
$=0.01$	0.0001468	0.0002221	0.0002216	0.000042

3.3 ME 试验(仅对模式误差进行调整)

IC 试验中, 我们证明, 只要模式能够精确描述大气边界层要素场垂直结构的时间演变过程, 目标函数都能有效的下降, 使调整后的初始场逼近真实值。ME 试验中, 我们将考察同化系统修正模式误差的能力。取 u_0, v_0, T_0, q_0 作为模式初始场, 再将任意给定的模式误差系数 P_0 (模式层顶和层底) 作为初猜值代入同化系统。

图 4 反映了目标函数在迭代过程中下降的情形。目标函数从第 2 次迭代开始连续下降, 到第 30 次时下降 3 个量级。表 2 给出了模式误差系数的“真实值”(pt)、初猜值(po) 以及迭代后的最优值(pp) 的比较结果。

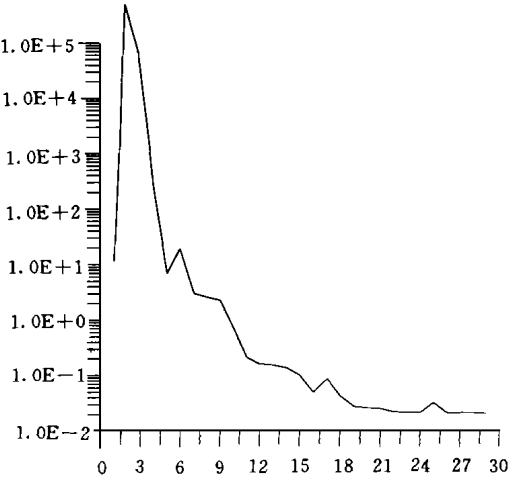


图 4 ME 实验中目标函数下降的情况

表 2 模式误差系数 P 的“真实值”(pt)、初猜值(po) 以及反演值(pp) 的比较

模式层底	u	v	T	q
pt	0.00001	0.00001	0.00001	0.0000006
po	0.00040	0.00040	0.00040	0.0000009
pp	- 0.00003601	0.00008931	- 0.00001482	0.00000056
模式层顶	u	v	T	q
pt	0.0001	0.0001	0.0001	0.0000001
po	0.0050	0.0050	0.0050	0.0000050
pp	0.00004901	0.00012817	- 0.00003133	- 0.00000039

3.4 同时调整初始场和模式误差的数值试验

考虑实际情况,无论是观测资料还是数值模式都存在误差,仅考虑初始场的误差而忽略模式的误差,或是仅考虑模式的误差而忽略初始场的误差都是片面的,必须同时考虑这两种误差。我们曾经指出,可以有 ICME 和 TIM 两种方案。这里,对初始场变量,取 $\alpha = 0.05$,对模式误差系数,取 $\beta = 0.001$ 。最后我们将 ME 试验中的“观测资料”作为本次试验的观测场。在 ICME 试验中,首先修正初始场,然后固定初始场修正模式参数,各迭代 20 次。将上述过程重复 4 次,即共进行 160 次迭代计算。目标函数在迭代过程从 2662.83 下降到了 53.58,其下降速度是很慢的。迭代结束以后,水平风场的迭代值与“观测场”拟较好,温度场在近地层的拟合效果也比较好,但在边界层上部,位温偏差为 3 K;水汽场随高度的递减率明显高于“观测场”的递减率,以致于在 75 m 以上,水汽场已经衰减为负值,这显然是不合理的。

本次试验中,迭代结果不仅没有使各控制变量“真实值”收敛,反而使它们与“真实值”间的距离增大了。这是因为,当修正初始场时,模式误差造成的影响部分转嫁到初始场上,又于模式误差较大,使修正后的初始场误差比原来还大,在随后修正模式误差时,过大的初始场的影响由于干扰了反演过程。

从前面试验我们分析出这类方法的局限性。下面,我们把模式误差系数和初始场变量同时作为控制变量,使二者在反演中同时修正。在此,取迭代次数为 25 次,图 5 为目标函数在迭代中收敛的情形,目标函数初始值为 22500,迭代以后,其值收敛了一个量级。 u 的均方差从 $1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 下降到 $0.23 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, v 的均方差从 $1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 下降到 $0.15 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, T 的均方差从 0.5 K 下降到 0.39 K, q 的均方差从 $0.001 \text{ g} \cdot \text{g}^{-1}$ 下降到 $0.0002 \text{ g} \cdot \text{g}^{-1}$ 。

当初始场和数值模式都存在误差时,单一考虑初始场误差或是模式误差都把由两种误差造成的影响用一种误差来表示,使二者的迭代效果可能比原来还大。当然,这依赖于二者的相关性和相对大小,但将二者同时修正应是我们的最佳选择。

4 结果推论

本文利用一个一维变分同化系统分别进行了理想资料的同化试验,可以得出如下结论:

1) 用扰动法进行变分同化实验,使用何种差分格式求取目标函数相对于控制变量的梯度关系到目标函数的收敛速度,也就是系统计算量的大小。试验证明,计算一个梯度时中央差分格式的计算量比单向差分格式大一倍,但用中央差分格式计算梯度时要比用单向差分格式时目标函数下降更快,并且可以收敛到更小。最终,使用中央差分格式的全部计算量要远小于使用单向差分格式的计算量,同时收敛效果也更好。

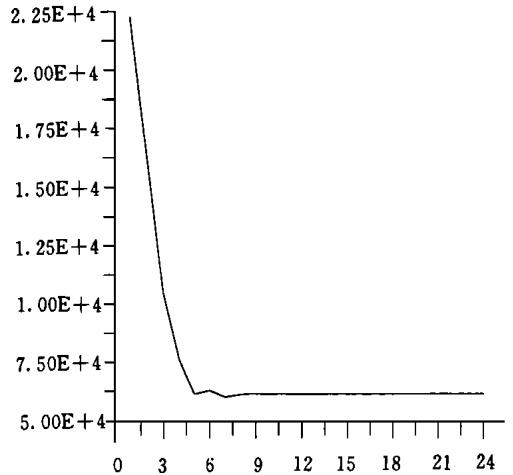


图 5 TIM 实验时目标函数下降的情况

- 2) 扰动法求取梯度时, 扰动步长取值对结果有一定影响。过小的扰动步长使计算的梯度缺少稳定性, 过大的扰动步长则使计算的梯度误差偏大。不过, 在一个不小的范围内, 同化结果对扰动步长取值并不敏感。
- 3) 在仅存在初始场误差的情况下, 同化系统能对其作出合理的调整。
- 4) 在‘观测场’和模式变量的初始场都精确, 而模式存在误差的情况下(这里, 我们只考虑水平平流项对模式变量演变的影响), 同化系统可以滤除误差影响, 使同化后模式在积分时段内的输出与‘观测场’的距离达到极小。
- 5) 当模式和初始场都有误差时, 同时修正二者比仅修正其中之一或二者轮流修正要好。轮流修正方案中, 修正一种误差时另一种误差的作用回混淆其中, 虽然能使目标函数部分收敛, 但有可能作过度修正, 甚至使修正后误差比不修正时还要大, 这又会影晌随后对另一种误差的修正。

参考文献

1 郇吉东, 丑纪范. 数值天气预报中的两类反问题及一种数值解法——理想试验. 1994, 52(2): 129 ~ 137

2 余金香, 邱崇践. 用数值模拟与观测资料相拟合的方法构造边界层流场. 应用气象学报, 1997, 8(3): 302 ~ 308

3 Gilbert j-c , Lemarechal C sone. Numerical experiments with variable storage quasi-Newton algorithms. Math Program, 1989, 13, 25: 407– 435

4 Louis J. A parametric model of vertical eddy fluxes in the atmosphere. Bound-Layer Meteor, 1979, 17: 187 ~ 202

5 龚建东, 邱崇践. 变分四维同化方法的研究: [学位论文]. 兰州: 兰州大学大气科学系, 1996, 4

6 Zipanski M. Regional four-dimensional variational data assimilation in a quasi-operational forecasting environment. Mon Wea Rev, 1993, 121: 2396– 2408

A NUMERICAL EXPERIMENT FOR MODIFYING
THE OBSERVATION DATA IN BOUNDARY
LAYER THE VARIATIONAL METHOD

Ma Gang

(National Satellite Meteorological Center, Beijing, 100081)

Qiu Chongjian

(Atmospheric Sciences Department of Lanzhou University, Lanzhou, 730000)

Wang Qiang

(Beijing Meteorological College, Beijing, 100081)

Abstract

The observational fields in planet boundary layer and the model error are modified here in variational assimilation. The gradients of the cost function with respect to control variables are calculated in the way of perturbation. Then the inference in theory and experiment analysis is produced to the method how to obtain the gradient in he way of

perturbation. It is the results of numerical experiment using model data that indicate a better modify to model error in this way. It makes the model describing the physical process more correctly. Then the initial fields to the model after modifying can be fit the "observational data" best.

Key Words: Variational, Planet boundary layer, Numerical experiment.

青年科学家论坛第 56 次活动 ——研讨大气科学若干前沿热点问题

中国科协主办的青年科学家第 56 次活动以“大气科学若干前沿问题”为主题, 于是 1999 年 12 月 3—4 日在北京中国科协科技会堂举行。中国科学院大气物理研究所钟青研究员、国家气候中心李维京研究员、中国科学院大气物理研究所王会军研究员、南京大学大气科学系谈哲敏教授担任本次活动的执行主席。来自中国科学院、中国气象局、高等院校、有关军事部门、香港特别行政区和美国的共 36 位青年专家、学者参加了这次活动, 中国科协书记处书记常志海出席会议并作了重要讲话, 出席会议的还有中国科协学会部副部长、“青年科学家论坛”秘书长周济、“青年科学家论坛”秘书处的黄钰、国家自然科学基金委地学部罗云峰、中国气象学会秘书处刘宗秀等同志应邀出席了此次活动。

本论坛以“大气、海洋数值模式发展、大气海洋变化的预测与模拟研究”、“大气探测、数据处理(同化)与应用研究”、“地球流体力学”、“相关交叉学科研究成果及进展”等 4 个单元主题。

本论坛保持了很好的学术风气, 针对大气若干前沿热点问题进行了激烈、深入的讨论。与会 25 位代表简要地、突出重点地介绍了自己的科研成果和所思考的具有挑战性、热点的学术问题, 还回答了其他代表的提出的尖锐问题; 37 位代表提交了书面论文。会议安排了较多的时间供大家探讨问题, 整个过程进行得有序、紧张、激烈、生动活泼。充分体现了良好的学术氛围和对科学技术的尊重。

与会的学者在以下几方面达成共识:

1) 青年大气科学家要承担历史的重任, 勇于探索, 在基础理论研究中追求第一。同时要根据中国的实际情况, 理论与实践相结合, 解决中国的问题。

2) 随着科学技术的发展, 大气科学所涉及的领域越来越多, 青年大气科学家应拓宽自己的知识面, 打破过去的小圈子, 多合作, 大联合, 合力为中国的大气科学事业作出更大的贡献, 不辜负时代对我们的重托。

3) 与会的学者呼吁有关部门能在资料共享、科研的软环境(人才、环境)和硬件环境投入比例、科研成果评价等方面做出更加科学的规划。

通过这次科学论坛活动, 与会学者都感到收获很大: 开阔了眼界, 激发了思维, 加深了相互了解, 结交了朋友, 并在许多方面达成共识。为今后科研创新和合作打下了基础。

(钟青)