

GRAPES 全球三维变分同化系统 —— 基本设计方案与理想试验

庄世宇¹ 薛纪善¹ 朱国富¹ 赵 军² 朱宗申³

¹ 中国气象科学研究院数值预报研究中心和灾害天气国家重点实验室, 北京 100081

² 国防科技大学计算机研究所, 长沙 410073

³ 国家气象中心, 北京 100081

摘 要 中国气象局数值预报研究中心开发了一个全球和区域统一框架的格点三维变分资料同化系统 (GRAPES 3D-Var)。作者给出全球版本的方案设计, 采用单点观测试验检验方案设计的合理性和正确性。全球方案选择流函数、速度势、非平衡高度和相对湿度作为分析求解的控制变量, 用线性平衡方程作为质量场和风场的动力约束, 通过预调方法解决背景误差协方差矩阵阶数过大和难以求逆的问题, 其中垂直变换和物理变换以及观测算子设计等方面与区域方案相同, 但预调的水平变换采用球谐函数谱滤波表示背景误差协方差的水平相关模型, 避免了递归滤波在高纬和极区因相关尺度过大无法实施的问题。另外, 设计了一个使极区插值和差分计算完全闭合的网格以及相应的算法, 解决了极点分析问题。单点观测理想试验结果表明, GRAPES 3D-Var 系统能够合理给出全球任何地区的分析。

关键词 全球/区域同化预报系统 全球三维变分资料同化系统 谱滤波 理想试验

文章编号 1006-9895(2005)06-0872-13 **中图分类号** P468 **文献标识码** A

GRAPES Global 3D-Var System—Basic Scheme Design and Single Observation Test

ZHUANG Shi-Yu¹, XUE Ji-Shan¹, ZHU Guo-Fu¹, ZHAO Jun², and ZHU Zong-Shen³

¹ State Key Laboratory of Severe Weather and Center for Numerical Prediction Research, Chinese Academy of Meteorological Sciences, Beijing 100081

² Institute of Computer, National University of Defence Technology, Changsha 410073

³ National Meteorological Center, Beijing 100081

Abstract With the necessity of improving both medium range and mesoscale numerical weather prediction (NWP) in China, especially solving the problem of merging the remote sense observations into NWP, a 3D variational data assimilation (3D-Var) system with a unified framework for both global and regional model has been developing since April 2001. It is a subsystem of Global and Regional Assimilation and Prediction System (GRAPES) in Center for Numerical Prediction and Research (CNPR).

GRAPES 3D-Var is a grid analysis model with flexible horizontal Arakawa A grid and vertical pressure levels, in which the horizontal grid is designed to make differential and interpolation algorithms easily implemented over the polar region for global version. For the purpose of achieving the ultimate goal of four-dimensional data assimilation (4D-Var) algorithms in the future, the incremental method is used to enable the implementation of 3D-Var on a different grid and resolution to that of full model. In order to reduce the tremendous cost of minimization and make it

收稿日期 2004-10-10, 2005-01-11 收修定稿

资助项目 十五国家重点科技攻关计划项目 2001BA607B

作者简介 庄世宇, 男, 1965 年出生, 博士, 研究方向: 数值预报变分资料同化。E-mail: zhuangsy@cma.gov.cn

easier to be converged, a preconditioning transform or control variable transform is performed. The preconditioning transform generally consists of horizontal, vertical and change of physical variable transforms. As for the horizontal transform, the recursive filter is used for regional version, while the harmonic spectral filter is used for global version to approximately represent the horizontal background error correlations. The vertical transform is applied via a projection from eigenvector of Empirical Orthogonal Functions (EOFs) of the vertical component of background error onto model levels. Finally, the physical variable transformation converts control variables to model variables. The control variables used in the current version are streamfunction, velocity potential, unbalanced mass variable and humidity variable.

This univariate and multivariate experiments with single observation over different area are performed to test the validity of the system and the dynamic constraints between the mass field and wind field. The results show that GRAPES 3D-Var is a robust system.

Key words Global and Regional Assimilation and Prediction System (GRAPES), global 3D-Var, spectral filter, single observation test

1 引言

数值天气预报(NWP)在很大程度上是一个初值问题^[1], 准确的天气预报必须以高质量的模式初值为基础。为数值预报模式产生初值的方法称为资料同化, 资料同化是数值天气预报系统的重要组成部分, 其目的是通过融合不同来源的观测信息和大气的背景信息估计得到最优的模式初始状态。背景信息一般通过大气状态的先验估计获得, 目前的业务同化系统多用 NWP 模式的短期预报作为背景状态。在资料同化问题中, 需要建立每一种观测类型的观测算子(或向前模式)来建立模式状态和观测之间的联系。同样重要的是, 需要对观测和背景状态的精度(或误差)进行正确的估计, 事实上, 分析的质量在很大程度上受背景和观测误差协方差的控制。

长期以来, 我国业务数值天气预报系统主要采用最优插值(OI)方案作为分析同化方案^[2], 然而, 近些年来, 变分[三维变分(3D-Var)或四维变分(4D-Var)]同化方案成为主流的分析同化方案, 被国际上主要的业务数值预报中心所采用。事实证明, 变分同化方案的应用使数值天气预报的质量得到了明显改善。虽然, 从理论上讲变分同化与 OI 基于相同的统计估计原理, 仅仅在求解方式上不同^[3], 但在实际实施过程中, 与变分同化方案相比, OI 有着明显的缺陷。尤其是随着卫星探测和雷达探测等遥感技术的飞速发展, 各种有价值的非常规观测信息日益增多, 这些信息提高了观测的空间和时间覆盖率, 在很大程度上填补了大洋上和无观测区域的资料空缺, 而 OI 却无法直接同化这些信息, 只能利用其反演的结果。Andersson 等^[4]指

出, 变分同化方法可以直接同化卫星辐射率, 无需同化反演得到的温度和湿度。此外, 变分分析是全局进行的, 所有观测可同时融合到分析之中, 不会像局地分析的 OI 那样容易产生不连续性。

从 2001 年 4 月开始, 中国气象科学研究院数值预报研究中心(CNPR)致力于研究和开发一个全球和区域统一框架的 3D-Var 同化系统, 作为新一代全球和区域 NWP 系统(GRAPES)^[5]的重要组成部分, 其目的是通过直接同化各种常规观测和非常规观测(如卫星和雷达探测资料), 解决我国数值预报系统中长期以来在海洋上和高原地区缺乏资料的问题, 提高我国中短期数值预报的质量。GRAPES 区域 3D-Var 系统已有另文介绍^[6], 这里着重描述 GRAPES 3D-Var 全球方案, 主要研究结果按姊妹篇形式成文, 本文是第一部分, 给出系统的方案设计和单点观测试验结果。第二部分给出背景误差协方差矩阵的统计结果以及实测资料的试验和分析结果。

本文的主要内容: 第 2 节描述全球三维变分分析的基本方案, 包括变分分析的一般表达式、增量分析方法、预调和变量变换、网格设计和极区处理、观测预处理和观测算子以及软件实施; 第 3 节给出水平背景误差协方差的谱滤波表示方法; 第 4 节给出不同区域(极区、热带和中高纬)的单点观测试验结果; 第 5 节是总结。

2 全球 3D-Var 分析系统基本方案

2.1 变分分析的一般表达式

对于多元高斯问题, 变分分析的目的是寻求最优的模式状态解 $\mathbf{x}$, 使得由背景项和观测项构成的目标函数(或罚函数)极小^[7], 目标函数的标准表达

式^[8]如下:

$$J(\mathbf{x}) = J_b + J_o = \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_b)^T \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_b) + \frac{1}{2}[\mathbf{H}(\mathbf{x}) - \mathbf{y}_o]^T \mathbf{O}^{-1}[\mathbf{H}(\mathbf{x}) - \mathbf{y}_o], \quad (1)$$

式中, $\mathbf{x}$ 是由模式状态变量构成的分析向量, $\mathbf{x}_b$ 是 $\mathbf{x}$ 的先验估计, 或称背景场向量, 一般用预报模式的 6 小时预报场表示。 $\mathbf{B}$ 是背景误差协方差矩阵。 $\mathbf{H}$ 称为观测算子, 它将格点上的分析变量通过空间插值和物理模型变换到观测空间与观测相当的量, 以便于和观测比较。 $\mathbf{y}_o$ 是观测值, $\mathbf{O}$ 是观测误差协方差矩阵。

原则上, 通过计算目标函数 J 及其梯度 $\partial J / \partial \mathbf{x}$, 可采用下降算法(共轭梯度法或准牛顿法)迭代求解变分分析方案的极小化问题^[9]。

2.2 增量分析方法

Courtier 等^[10]的研究表明, 不直接求解 $\mathbf{x}$, 而是求解对初始猜测场的修正——分析增量, 可大大减小 4D-Var 的计算开销, 因为增量计算可以在较低分辨率上实施。采用增量法使得分析过程中引入的非平衡限制在很小的范围, 因此, 分析结果要比采用全量时变量间更趋协调。此外, 在方案中可以灵活表示分析增量, 使得 3D-Var 能够为模式提供不同格点和分辨率的分析结果。

GRAPES 资料同化系统的开发目标定位于从三维变分向四维变分升级的技术路线, 因此, GRAPES 3D-Var 采用了增量分析方法。

设 $\delta \mathbf{x} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_b$, 目标函数及其梯度的表达式可以改写为如下形式:

$$\begin{cases} J(\delta \mathbf{x}) = \frac{1}{2} \delta \mathbf{x}^T \mathbf{B}^{-1} \delta \mathbf{x} + \frac{1}{2} (\mathbf{H}' \delta \mathbf{x} + \mathbf{d})^T \mathbf{O}^{-1} (\mathbf{H}' \delta \mathbf{x} + \mathbf{d}), \\ \nabla_{\delta \mathbf{x}} J = \mathbf{B}^{-1} \delta \mathbf{x} + \mathbf{H}'^T \mathbf{O}^{-1} (\mathbf{H}' \delta \mathbf{x} + \mathbf{d}), \end{cases} \quad (2)$$

其中, $\mathbf{d} = \mathbf{H}(\mathbf{x}_b) - \mathbf{y}_o$ 为更新向量或观测余差向量 (Innovation), $\mathbf{H}'$ 是观测算子 $\mathbf{H}$ 在 $\mathbf{x}_b$ 附近的线性近似, 又称切线性算子。

2.3 预调和变量变换

对一个典型的数值预报格点模式来说, 自由度的个数超过了 10^6 , 由于模式变量之间存在动力约束和空间相关, 背景误差协方差矩阵 $\mathbf{B}$ 的大小超过 $10^6 \times 10^6$, 如此大的矩阵的求逆计算在现有的计算机条件下几乎是不可能的, 极小化求解就变得困难

而且昂贵。退一步说, 即便计算机内存满足需求, 我们也没有足够的统计信息去确定背景误差协方差矩阵的每一个元素。另外, $\mathbf{B}^{-1}$ 多是病态的, 目标函数的条件数很大, 这使得极小化计算难以收敛。凡此种种, 我们不得不对问题进行简化。解决该问题的一个切实可行的方案是进行所谓的预调, 即定义 $\delta \mathbf{x} = \mathbf{U} \mathbf{w}$, 其中 $\mathbf{w}$ 称为控制变量, 是极小化迭代求解的对象, 算子(或矩阵) $\mathbf{U}$ 的构造务必满足关系 $\mathbf{B} = \mathbf{U} \mathbf{U}^T$ 。采用预调后, 目标函数的背景项变为控制变量的完全内积形式, 从而无需计算 $\mathbf{B}$ 的逆, 转成在观测目标函数中计算 $\mathbf{B}^{1/2}$, 极小化的条件得到了极大改善。Lorenz 等^[11]的研究表明, 对于高分辨率格点分析, 预调是不可或缺的。经过预调后, 目标函数及其梯度表达式重构如下:

$$\begin{cases} J(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{w} + \frac{1}{2} (\mathbf{H}' \mathbf{U} \mathbf{w} + \mathbf{d})^T \mathbf{O}^{-1} (\mathbf{H}' \mathbf{U} \mathbf{w} + \mathbf{d}), \\ \nabla_{\mathbf{w}} J = \mathbf{w} + \mathbf{U}^T \mathbf{H}'^T \mathbf{O}^{-1} (\mathbf{H}' \mathbf{U} \mathbf{w} + \mathbf{d}). \end{cases} \quad (3)$$

实际上, 预调是通过一系列变量变换或者说由一系列算子来实现: $\delta \mathbf{x} = \mathbf{U}_p \mathbf{U}_v \mathbf{U}_h \mathbf{w}$, 其目的是将控制空间的变量 $\mathbf{w}$ 变换到模式空间的变量 $\delta \mathbf{x}$ 。按照变换的顺序, 单个变换算子依次为水平变换 $\mathbf{w}_v = \mathbf{U}_h \mathbf{w}$ 、垂直变换 $\mathbf{w}_p = \mathbf{U}_v \mathbf{w}_v$ 和物理变换 $\delta \mathbf{x} = \mathbf{U}_p \mathbf{w}_p$ 。

水平变换是利用易实施的数学工具来近似描述背景误差水平相关模型。变分分析中各向同性和均匀的背景误差相关函数不能显式求解, 其作用可以用它的卷积算子来表示, 这可以通过沿着一行行计算格点进行一系列递归滤波^[12]运算来实现。因此, 在 GRAPES 3D-Var 区域版本中, 水平变换采用递归滤波是合适的 [目前的递归滤波算法还不能描述非均匀和各向异性(或依赖天气形势)的情况, 这是中尺度资料同化需要进一步考虑的问题]。

对全球分析, 两极极点在经纬度坐标中是奇异点, 这使得各向同性的背景误差相关无法用沿着至少两个格点顺序进行的准高斯型递归滤波来表示。在极区, 格点距离非常短, 而递归滤波的相关尺度以距离为单位, 其大小甚至可能超过极区整个纬圈的长度, 这也使得递归滤波难以实施。因此, 在 GRAPES 3D-Var 全球版本中, 水平变换采用了球谐函数谱滤波, 谱系数之间的无关性使得水平背景误差相关自然成为一个对角矩阵, 谱滤波内在的均

匀性也符合天气尺度中短期预报误差的分布特性。在下一节将专门讨论谱滤波问题。

垂直变换的过程是这样的, 首先, 通过 NMC 方法^[13]估计背景误差协方差的垂直分量 B_v , 然后, 通过经验正交函数 EOF 的特征模分解

$$B_v = E \Lambda E^T,$$

得到特征向量 E 和特征值 Λ , 再由

$$w_p = U_v w_v = E \Lambda^{-\frac{1}{2}} w_v,$$

得到控制变量空间的分析增量 w_v 投影到模式层上的 w_p 。

物理变换主要是控制变量到模式变量增量的转换。在本方案中, 基本的模式空间变量是位势高度 Φ 或温度 T , 风分量 u 、 v , 相对湿度 h_r 或比湿 q 。而控制变量采用流函数 Ψ 、速度势 χ 、非平衡位势高度 Φ_a 、湿度(相对湿度或比湿)。控制变量之间是互不相关的, 分析得到的控制变量(非平衡部分)加到平衡部分上就还原成模式变量的增量, 这中间利用了流函数与位势高度场之间的平衡关系, 目前的版本采用了线性平衡方程:

$$\nabla^2 \Phi_b = (\nabla \cdot f \nabla \Psi) = \nabla f \cdot \nabla \Psi + f \nabla^2 \Psi, \quad (4)$$

式中, Φ_b 是位势高度的平衡部分, f 是地转参数。

2.4 网格设计和极区处理

尽管方案局部采用了谱变换, 但从全局看, GRAPES 全球 3D-Var 仍是一个经纬度网格格点分析方案, 因为分析变量和控制变量都定义在网格点上。由于采用了增量方法, 分析增量的格点和分辨率可以不同于分析全量。背景场和分析全量的计算网格沿袭了 GRAPES 模式的“Arakawa A”格点。而对于分析增量, 为了解决插值和差分在南北极的计算问题, 我们设计了一套不同于分析全量的网格和极区的插值和差分计算方案(如图 1 所示)。其特点是东西方向格点均匀, 在南北方向, 网格跨越赤道和极地, 并且等距, 网格纬圈的第一圈(南极)和最后一圈(北极)的直径(ab)等于其余纬圈之间的间距 Δx 。这样设计的目的是为了使插值算法和差分算法在极区易于计算。在进行落在极区内的观测点的插值计算和极圈上格点的差分运算时, 利用了跨极点与极圈本身对称的格点上的值。这样, 运算完全闭合, 无需指定边界条件, 而且也充分利用了邻近点的信息。东西方向的插值和差分则利用东西方向

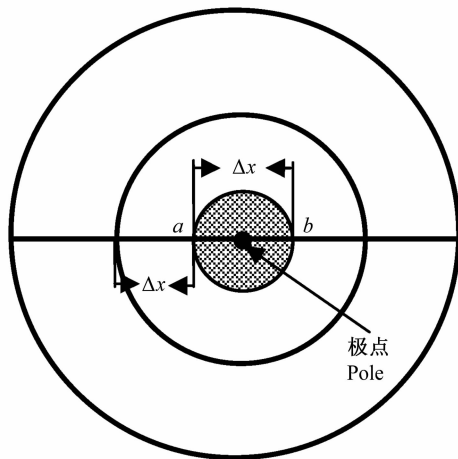


图 1 GRAPES 3D-Var 极区分析网格示意图

Fig. 1 The sketch map of analysis grid over the polar area for GRAPES 3D-Var

的周期边界条件, 也是完全闭合的。

另外, 极区相邻的网格点上风分量 u 的方向变化较大, 观测算子中格点风场直接插值到观测点会有较大的误差。因此, 在插值计算时, 我们先将 u 分解到笛卡尔坐标, 然后将分量分别计算, 计算结果再通过合成变换回到经纬度坐标系。

在垂直方向, 采用了标准等压面坐标。这样做的好处是观测算子的垂直计算比较简单。分析结果应用到模式垂直层时需要经过一个标准接口系统(SI)的转换^[14]。

2.5 观测预处理和观测算子

用于 GRAPES 3D-Var 的观测分为两部分, 一部分是常规或反演观测, 来源于全球通讯系统(GTS), 质量控制采用国家气象中心的业务方案^①。经过质量控制后的观测经预处理分解为探空(TEMP)、地面(SYNOP)、船舶(SHIP)、飞机(AIREP)、卫星导风(SATOB)和卫星测厚(SATEM)等 6 个类型。另一部分是 NOAA16 和 NOAA17 两颗卫星三个传感器(AMSUA、AMSUB 和 HIRS)的 ATOVS 辐射率资料, 这些资料经过定标、定位以及云检测和格式转换等处理, 提供给分析系统。

对每一种观测类型, 都设计了专门的观测算子模块, 如 TEMP 模块、SYNOP 模块等。凡是涉及同一类观测计算的程序, 如观测及误差的输入、观测余差(innovation)的计算、观测目标函数及其梯

①国家气象中心编. 区数值预报业务系统. 1994, 7~6(内部交流)

度的计算以及相应的伴随程序等,都归入同一观测算子模块。在卫星资料直接同化的观测算子里,引入了 ECMWF 的 rttov7 快速辐射传输模式及其切线性模式和伴随模式。观测算子的水平插值采用了双线性插值、垂直采用线性插值和样条插值。

2.6 软件实施

按照标准化和模块化的要求,本方案的实施采用了 Fortran 90 编程。计划中的并行版本将采用与 GRAPES 模式相同的大规模并行处理(MPP)方式。目标函数的极小化算法采用了有限记忆的变尺度方法(LBFGS)^[15]。依照增量分析的原则,模式空间和分析空间采用了不同的分辨率(模式高分辨率、分析低分辨率),通过开关灵活设置。另外,同类分析变量也通过开关设置来选择,例如,质量场要么分析位势高度要么分析温度,湿度场要么分析相对湿度要么分析比湿。

GRAPES 3D-Var 的程序在 ALPHA、IBM-SP、SGI、PC/LINUX、PC/WINXP(编译器为 Visual Fortran)以及国产银河、神威等多种计算机平台上作过测试,均可以正常运行。

3 背景误差协方差模型

背景误差协方差矩阵 $\mathbf{B}$ 对分析系统来说至关重要,它控制信息从观测位置向外传播的方式,在邻近的模式格点和垂直层上给出统计一致的分析增量,确保模式变量之间在动力上协调一致。然而,背景误差是无法确切计算的,因为我们不知道大气的真实状态。在实际中,往往通过以下三种方法来解决这一问题。(1)观测方法或 Hollingsworth-Lönnberg 方法^[16]。(2)NMC 方法。(3)分析集合方法^[17]。

在本方案中,假定背景误差协方差是水平和垂直可分离的,水平和垂直可分离意味着每个自协方差和交叉协方差的水平结构与垂直坐标无关。另外,水平协方差之间的关系要求所有协方差的垂直结构相同,Hollingsworth 等^[16]讨论了可分离假设的合理性。再假定水平背景误差协方差方差和相关也是可分离的,我们采用 NMC 方法统计水平背景误差方差,余下的问题只是考虑背景误差相关模型。

根据定义,预调算子的水平变换还可以写成:

$$\mathbf{w}_v = \mathbf{U}_h \mathbf{w} = \mathbf{R}^{\frac{1}{2}} \mathbf{w}, \quad (5)$$

其中, $\mathbf{R}$ 表示水平相关矩阵。在 2.3 节提到,在区域版本中,用递归滤波近似求解 $\mathbf{R}^{\frac{1}{2}} \mathbf{w}$,而在全球版

本中,用谱滤波来表示 $\mathbf{R}^{\frac{1}{2}} \mathbf{w}$ 。

可以证明,采用谱滤波方法,水平变换可以分解为以下算子:

$$\mathbf{R}^{\frac{1}{2}} \mathbf{w} = \mathbf{Y} \mathbf{R}_s^{\frac{1}{2}} \mathbf{Y}^* \mathbf{D} (\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{w}) = \mathbf{Y} \mathbf{R}_s^{\frac{1}{2}} [\mathbf{Y}^* \mathbf{D} (\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{w})], \quad (6)$$

式中, $\mathbf{Y}$ 表示球谐函数矩阵, $\mathbf{Y}^T$ 是球谐函数的共轭矩阵, $\mathbf{D}$ 是球面积分面积元矩阵。 $\mathbf{R}_s$ 是谱空间的背景误差相关矩阵(详细的推导参见附录)。下面给出计算 $\mathbf{R}_s$ 的方法。

假定背景误差分布是各向同性和均匀的,则在球坐标下空间任意两点的背景误差协方差(或相关)只是距离角的函数,它可以用高斯型分布函数来描述:

$$\mathbf{R}(\alpha) = e^{-\frac{\alpha^2}{2L^2}}, \quad (7)$$

其中, α 为球面上任意两点的距离角; L 为影响半径或水平相关特征尺度,在这里是地球表面实际距离(弧长)所对应的弧度数,如相关尺度为 500 km,则

$$L = 500.0 \times \frac{10^3}{r},$$

$r = 6378.15 \times 10^3$ m 为地球半径。

根据 Boer^[18]的研究,如果相关函数仅仅依赖于点之间的距离角,它可以用 Legendre 级数展开到谱空间。具体步骤是,首先给出以北极点为中心的相关函数在全球格点上的分布,即各个高斯格点上的值(如图 2 所示),然后运用谱变换得到谱空间

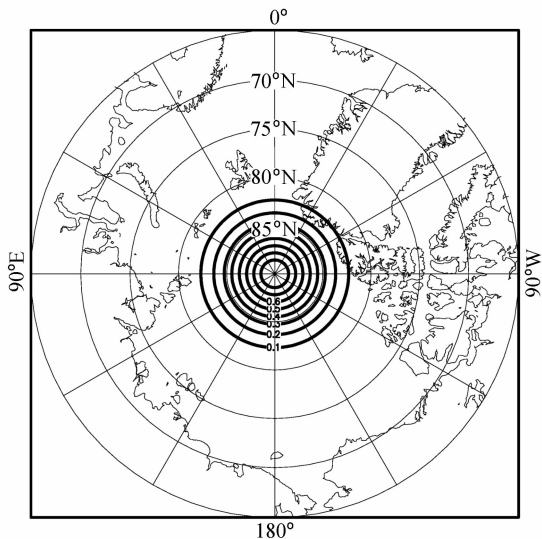


图2 中心点在北极点的高斯相关函数分布(等值线间隔: 0.1)
Fig. 2 The distribution of Gaussian correlation function centered at the North Pole (the contour interval is 0.1)

的相关函数 R_s 。需要注意的是,在指定相关函数格点值时,距离角参数 α 的变化范围为 $[0, \pi]$ (单位为弧度),而在谱变换中使用纬度 ϕ ,其变化范围为 $[\pi/2, -\pi/2]$ (单位为弧度,即 $[90^\circ\text{N}, 90^\circ\text{S}]$)。为此,我们需要做一个变换,以便能够直接利用谱变换中已计算好的 Legendre 系数。令

$$\alpha = \frac{\pi}{2} - \phi,$$

则相关函数变换为

$$R(\phi) = e^{-\frac{(\frac{\pi}{2}-\phi)^2}{2L^2}}. \quad (8)$$

需要说明的是,相关函数除了采用上述高斯型分布外,还可以用二阶自回归函数或贝塞尔函数等其他形式的分布。

4 单点观测试验

在这一节,我们将给出单点观测的理想试验结果。通过单点观测试验可以检验三维变分同化系统正确性和考察背景误差协方差的性质。

试验的背景场设为均匀场,模式分辨率为 0.5625° 网格距,格点数为 640×321 ; 分析分辨率为 2.25° 网格距,格点数为 160×81 。谱变换采用三角截断,截断波数为 T63。

4.1 解析解

假定单个观测位于分析网格点上,而且观测的物理量正好是分析变量,在这种情况下,观测算子非常简单, $\mathbf{H}' = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$, 这时,可以给出分析增量的解析形式。由(2)式,当有极小值时,目标函数梯度为零,即

$$\mathbf{B}^{-1}\delta\mathbf{x} + \mathbf{H}'^T\mathbf{O}^{-1}(\mathbf{H}'\delta\mathbf{x} + \mathbf{d}) = 0,$$

由此可得:

$$\delta\mathbf{x} = -\frac{\mathbf{H}'^T\mathbf{O}^{-1}\mathbf{H}}{\mathbf{B}^{-1} + \mathbf{H}'^T\mathbf{O}^{-1}\mathbf{H}}\mathbf{d}. \quad (9)$$

可以看出,背景误差越大,分析越趋近观测,反之,观测误差越大,分析越趋近背景场。

4.2 单变量分析

单变量分析反映了背景误差相关的基本结构特征以及背景误差和观测误差的相对大小对分析结果的影响。

在观测点与分析格点重合的位置,由(9)式,若对于单变量分析,则分析增量为

$$\delta x = \frac{\sigma_b^2}{\sigma_b^2 + \sigma_o^2}d, \quad (10)$$

其中, σ_b 和 σ_o 分别为背景场和观测误差均方差。

用单点相对湿度观测进行单变量分析试验,取观测余差 $d=60$ 。将观测分别置于赤道、北半球中纬度、南半球中纬度、北极点和南极点等几个特殊地区的点上,由于本方案的网格跨越赤道和极地,因此,观测点并没有落在网格点上,分析结果会有一些因插值带来的偏差;另外,经纬格点到高斯格点的变换,不可避免会带来一定的插值误差。

图 3 是当背景误差均方差等于观测误差均方差时,不同纬度的单变量单点观测试验结果(经度是 0°)。由(10)式可知,解析解应该是 $\delta x=30$, 数值解的结果分别是:

(a) 北极点: $\delta x > 27.7$;

(b) 45°N : $\delta x = 29.05$;

(c) 45°S : $\delta x = 29.05$;

(d) 赤道: $\delta x > 28.5$;

(e) 南极点: $\delta x > 27.7$ 。

数值解略小于解析解,其误差的大小取决于插值的精度和谐截断的精度。

对于背景误差均方差和观测误差均方差取不同值的情况,也进行了对比试验。试验结果与解析解结果同样相符(图略)。

4.3 多变量分析

GRAPES 3D-Var 是一个多变量(或多元, multivariate)分析系统。多变量分析的形式取决于要分析的状态变量以及它们之间的物理约束关系,这些约束关系必然反映到背景误差协方差的结构特征中。在我们选择的分析变量中,除了湿度变量是单变量,其余三个变量位势高度 Φ 和风分量 u 、 v 彼此满足某种物理约束。背景误差协方差中存在 9 种形式的交叉或自协方差形式,包括风分量之间的协方差和风与位势高度之间的协方差。多变量分析增量在结构上应该符合背景误差协方差的结构特征。

多变量观测试验的重点在于考察多变量物理约束关系在不同区域的表现形式。观测位置分别设在 500 hPa 极区、赤道($0^\circ, 0^\circ$)和中纬($45^\circ\text{N}, 0^\circ$),在每个位置上,分别取单个位势高度 Φ 和风分量 u 、 v 观测进行分析试验。

图 4 是 500 hPa 位势高度观测和风分量位于北极圈内时的分析增量结果。由于风在极点难以定义,所以观测位置没有设在极点,而是放在($89^\circ\text{N}, 0^\circ$)

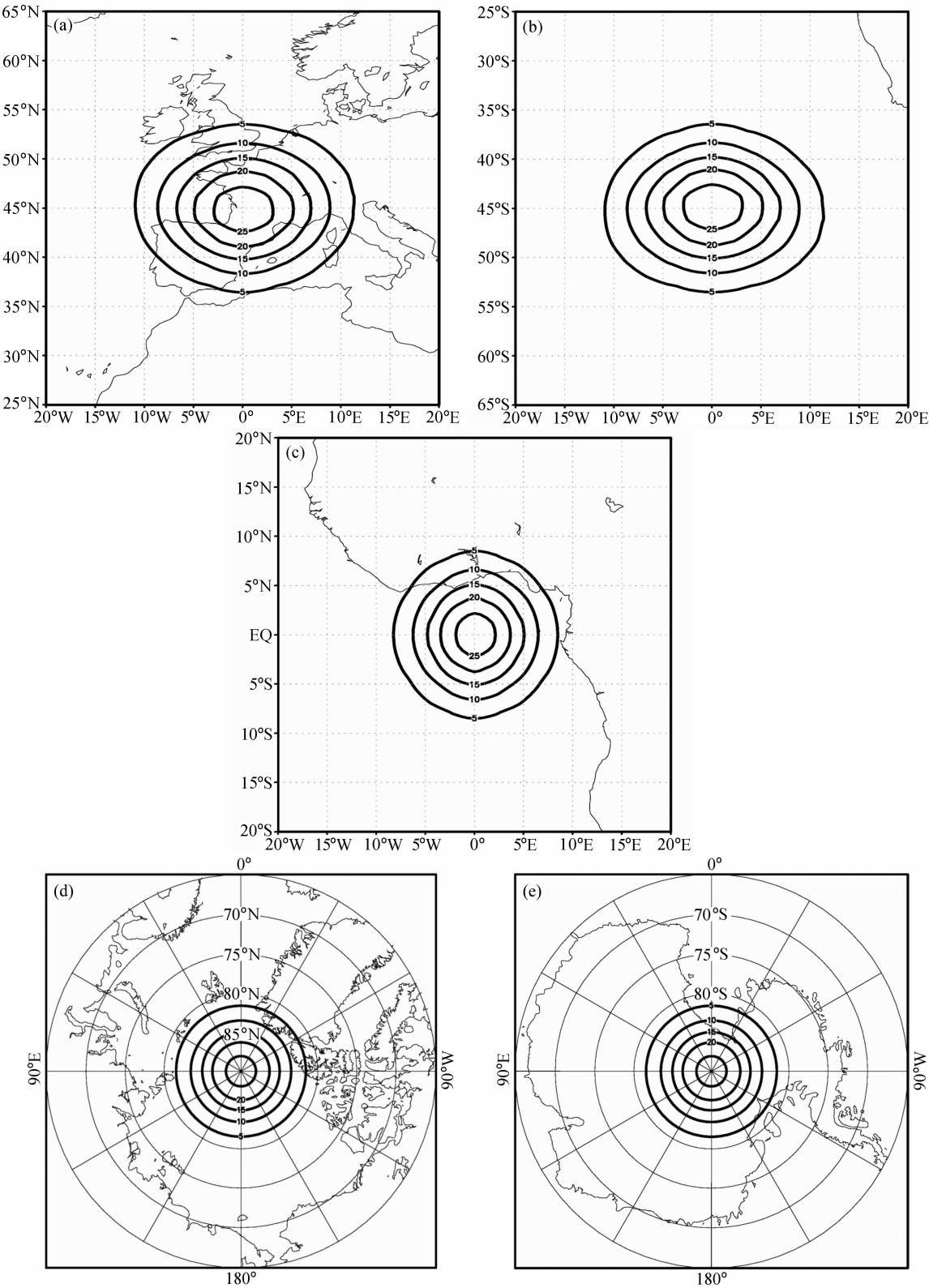


图 3 背景误差均方差等于观测误差均方差时单变量(相对湿度)单点观测分析试验: (a) 45°N; (b) 45°S; (c) 赤道; (d) 北极点; (e) 南极点.
Fig. 3 Experiment of univariate analysis with single relative humidity located respectively at (a) 45°N, (b) 45°S, (c) the equator, (d) the North Pole, and (e) the South Pole

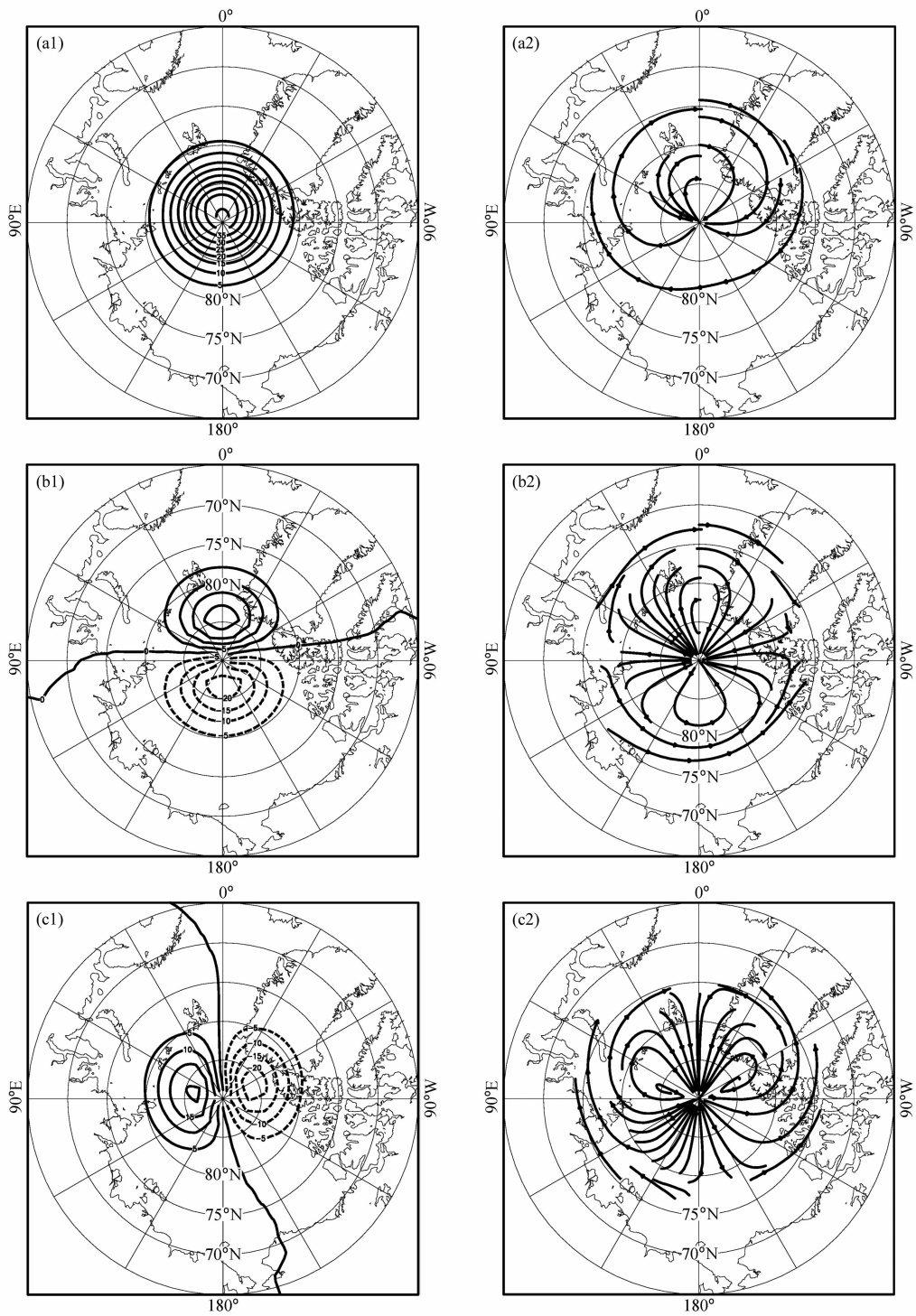


图 4 北极区内(89°N, 0°)多变量单点观测分析增量结构: (a1) $\Phi-\Phi$; (a2) $\Phi-V$; (b1) $u-\Phi$; (b2) $u-V$; (c1) $v-\Phi$; (c2) $v-V$ 。符号的含义为: 前一个字母表示观测, 后一个字母表示分析, Φ 为位势高度(单位: gpm), u 为纬向风分量, v 为经向风分量, V 为风流线矢量(风的单位: $m \cdot s^{-1}$)

Fig. 4 Multivariate analysis increment structure with single observation over the arctic pole area: (a1) $\Phi-\Phi$; (a2) $\Phi-V$; (b1) $u-\Phi$; (b2) $u-V$; (c1) $v-\Phi$; (c2) $v-V$. The front letters represent observation and the back ones represent analysis. Φ is the geopotential height (units: gpm). u is the longitudinal component of wind, v is the latitudinal component of wind, and V is wind streamline vector (units of wind : $m \cdot s^{-1}$)

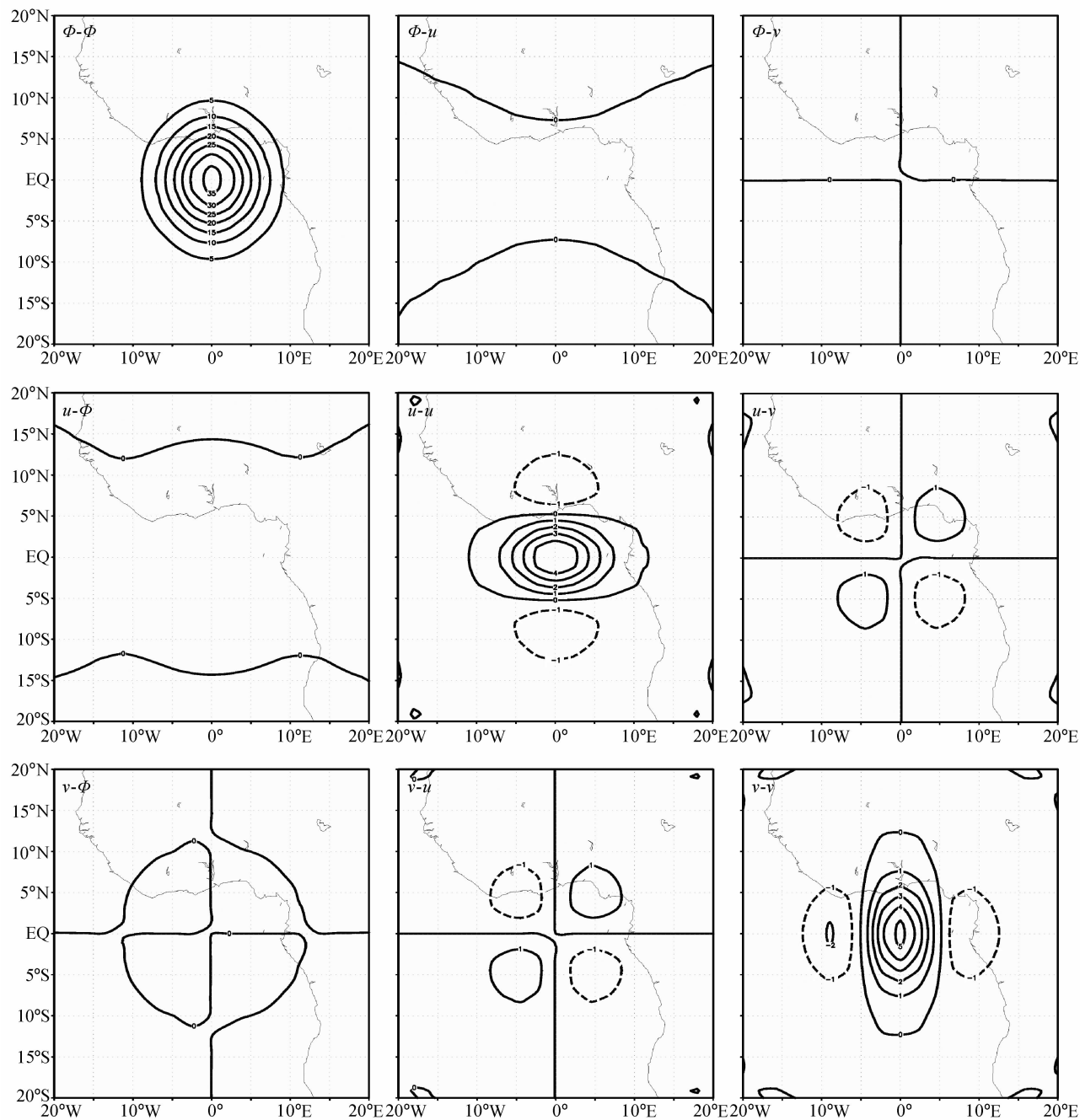


图 5 赤道地区(0°, 0°)分析增量的水平结构。等值线间隔: Φ : 5 gpm; u 、 v : 1 m/s。符号说明同图 4
Fig. 5 Multivariate analysis increment structure with single observation over the equator. The contour interval is 5 gpm for Φ and 1 m/s for u and v respectively. The descriptions of notations are the same as Fig. 4

从分析结果可以看出, 位势高度和风的分析增量满足准地转关系, 其结构同时反映了背景误差相关结构在极区的形态。

图 5 是赤道地区的试验结果。根据方程(4), 描述风和高度场关系的线性平衡方程可改写为

$$\nabla^2 \Phi_b = -\beta u_\phi + f \nabla^2 \Psi,$$

在热带和赤道地区, 地转参数 f 接近于零。高度场与风场的耦合主要决定于 β 项与旋转风分量的乘积, 而赤道地区大尺度辐散远大于大尺度涡旋, 所以, 位势高度场和风场耦合在赤道地区非常弱。上述结果与 ECMWF 全球 3D-Var 的结果非常相似^[18]。

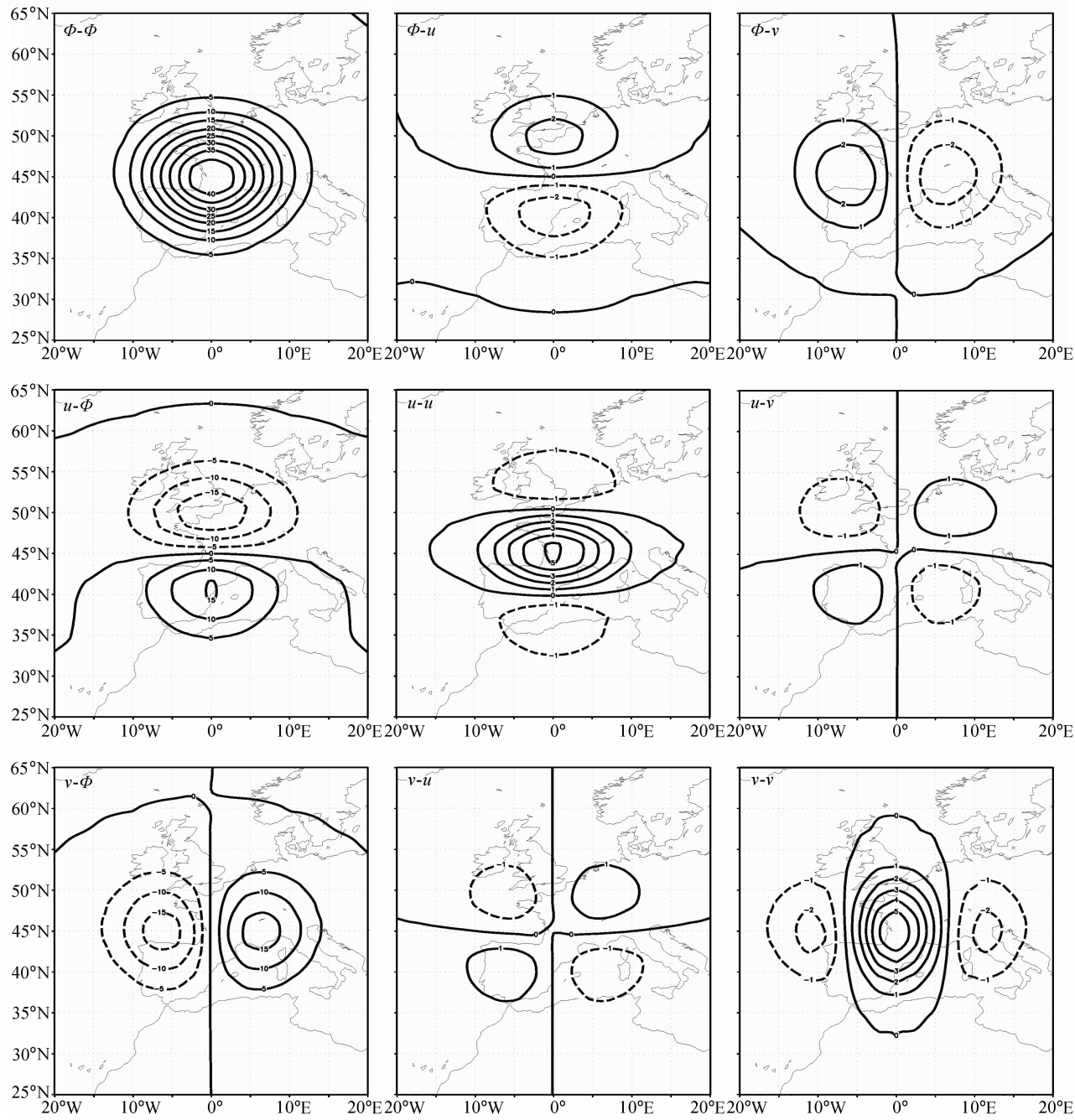


图 6 (45°N, 0°)分析增量的水平结构,其他同图 5

Fig. 6 Multivariate analysis increment structure with single observation at (45°N, 0°). Others are the same as Fig. 5

在图 6 中,观测位于 60°N。分析结果表明,中高纬地区的风和质量场的耦合满足准地转关系,这一结果类似于 Daley^[19]和 Mitchell 等^[20]给出的图像。观测点南边的 $U-H$ 和 $H-U$ 相关比北边稍大的现象是由于地转参数 f 随纬度变化的缘故。

另外,南极区内和南半球中纬度的试验结果与北半球的结果完全相似(图略)。

以上结果均证实了背景误差协方差在水平方向对观测资料的传播和过滤的性质以及风压场的动力结构在分析中的体现。背景误差在垂直方向的相关性采用了国家气象中心业务 OI 方案的相关模型,

$$c = \frac{1}{1 + k_p \log^2(p_k/p_k')},$$

其中 k_p 为垂直相关尺度, p 为气压。图 7 给出了分

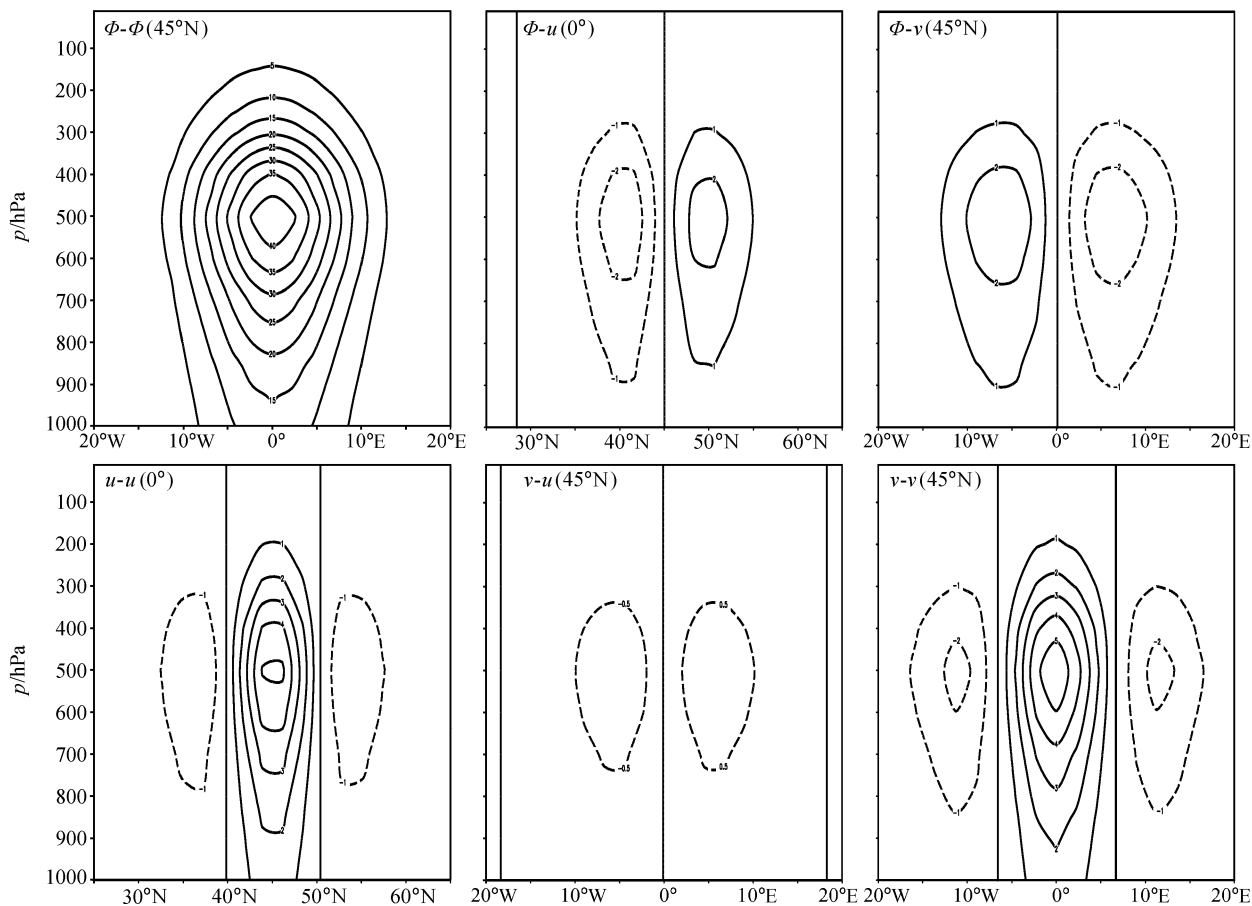


图7 分析增量的垂直剖面结构 [单点观测位于(45°N, 0°, 500 hPa)]

Fig. 7 Cross section of analysis increment for a single observation at the location (45°N, 0°, 500 hPa)

析增量在 45°N 的垂直结构,从图中可以看出,分析增量的垂直结构与统计模型相当一致。

5 总结

本文描述了中国气象科学研究院数值预报研究中心自主设计的 GRAPES 全球 3D-Var 同化系统的技术方案及实施方法,给出了单变量和多变量单点观测试验的结果。

GRAPES 3D-Var 是一个集全球和区域于一体的统一框架结构的格点分析系统,全球版本与区域版本的技术方案在许多方面相同,如分析变量的选择、预调的垂直变换和物理变换、质量场和风场的约束关系、极小化算法以及观测算子设计等。但对于预调的水平变换,全球版本没有采用区域版本的递归滤波方案,而是采用了球面谐波函数(谱)滤波方案,这主要是因为对于全球分析,递归滤波在极点会出现奇异点,在极区因相关特征尺度远大于格

点距离而无法实施。谱滤波本身的特点也适合中短期天气预报误差分布均匀和各向同性的性质。正文和附录较为详细地给出了谱滤波算子在三维变分分析中的表示和计算方案。

单点观测试验用于检验系统的正确性和分析背景误差相关特性。全球不同区域的单变量试验的结果都接近于解析解,赤道和极地误差稍大,考虑到赤道和极地并非处在分析网格上,而分析中要反复用到模式空间到观测空间的插值以及高斯网格和规则网格之间的来回插值,加上谱变换的截断误差,这些都是造成分析误差,特别是在极地和赤道出现较大误差的原因。可以预见,随着分析分辨率和截谱分辨率的提高,可以减小分析误差,这是我们下一步要试验的事情,它非常依赖于算法(并行考虑)和计算机资源。多变量分析的结果表明,在中高纬和极地,质量场和风场的分析结果符合背景误差多元相关的准地转性质,而在赤道地区,质量场和风

场的地转耦合非常弱。这些结果说明 GRAPES 全球 3D-Var 系统能够较好地描述不同区域大气的动力特性, 可以给出协调一致的分析结果。

附录 全球三维变分谱滤波算子的向量和矩阵表示

GRAPES 3D-Var 方案中, 谱滤波部分涉及谱变换的计算。由于系统基本框架的公式源于向量和矩阵表示, 在程序的实施过程中, 谱变换算子若用向量和矩阵表示, 要考虑球面积分的面积元因子。下面将详细导出谱变换算子的向量和矩阵表示。

令 ${}_M\mathbf{S}_1$ 表示谱系数向量, 其中 M 为谱系数个数。 ${}_N\mathbf{G}_1$ 表示格点向量, 其中 N 是(高斯)网格点数(左边是行数, 右边是列数)。 ${}_N\mathbf{Y}_M$ 表示球谐函数的格点值, ${}_N\mathbf{Y}_M$ 可以看成是一个 $N \times M$ 的矩阵。而 ${}_M\mathbf{Y}_N^*$ 表示球谐函数的共轭矩阵。 ${}_N\mathbf{D}_N$ 表示面积元, 它是一个 $N \times N$ 对角矩阵。

(1) 对任意谱变换关系, 可以用以下的矩阵形式表示:

$${}_M\mathbf{S}_1 = {}_M\mathbf{Y}_N^* {}_N\mathbf{D}_N {}_N\mathbf{G}_1, \quad (\text{A1})$$

$${}_N\mathbf{G}_1 = {}_N\mathbf{Y}_{MM} \mathbf{S}_1. \quad (\text{A2})$$

球谐函数是正交的, 其正交性定义为

$${}_M\mathbf{Y}_N^* {}_N\mathbf{D}_N {}_N\mathbf{Y}_M = {}_M\mathbf{I}_M. \quad (\text{A3})$$

(2) 格点空间和谱空间的背景误差相关矩阵的一般表示和关系:

格点水平背景误差相关矩阵(省略了下标)一般可表示为

$$\mathbf{R} = \langle \mathbf{G}\mathbf{G}^* \rangle. \quad (\text{A4})$$

如果考虑谱变换运算, 将(A2)代入(A4), 可得

$$\mathbf{R} = \mathbf{Y} \langle \mathbf{S}\mathbf{S}^* \rangle \mathbf{Y}^*. \quad (\text{A5})$$

记 $\mathbf{R}_s = \langle \mathbf{S}\mathbf{S}^* \rangle$ 为谱空间相关矩阵, 则

$$\mathbf{R} = \mathbf{Y}\mathbf{R}_s\mathbf{Y}^*. \quad (\text{A6})$$

由(A3)、(A6)式, 得

$$\mathbf{R}_s = \mathbf{Y}^* \mathbf{R} \mathbf{D} \mathbf{R} \mathbf{D} \mathbf{Y}. \quad (\text{A7})$$

(3) 均匀、各向同性的相关矩阵表示

对于均匀、各向同性的相关矩阵 $\mathbf{R}$, 其中的任一元素表示球面上任意两点 i 和 j 的相关, 它可以用球谐函数的谱展表示:

$$\begin{aligned} r_{ij} &= \sum_n r_n P_n(\cos\theta_{ij}) \\ &= \sum_n r_n \sqrt{\frac{2}{2n+1}} \sum_{m=-n}^n Y_n^m(i) Y_n^m(j). \end{aligned} \quad (\text{A8})$$

(A8)式也可以用矩阵表示:

$$\mathbf{R} = \mathbf{Y}\mathbf{A}\mathbf{Y}^*, \quad (\text{A9})$$

其中, $\mathbf{A} = (\lambda_n^m)$ 是一个对角矩阵, 且对于相同的 n , 所有的 λ_n^m 都相同,

$$\lambda_n^m = \sqrt{\frac{2}{2n+1}} r_n.$$

很容易证明(A9)与(A8)的一致性。

由(A7)和(A9), 有:

$$\mathbf{R}_s = \mathbf{Y}^* \mathbf{D} \mathbf{Y} \mathbf{A} \mathbf{Y}^* \mathbf{D} \mathbf{Y} = \mathbf{A}. \quad (\text{A10})$$

(4) 3D-Var 中的球面谱滤波算子

格点 3D-Var 中经过预调后, 水平变换归结为 $\mathbf{R}^{\frac{1}{2}} \mathbf{w}$ 的运算, 在区域方案中, 采用递归滤波近似表示 $\mathbf{R}^{\frac{1}{2}}$, 对全球方案, 采用谱滤波表示 $\mathbf{R}^{\frac{1}{2}}$ 。由(A6), 有

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= \mathbf{Y}\mathbf{R}_s\mathbf{Y}^* = \mathbf{Y}\mathbf{R}_s^{\frac{1}{2}} \mathbf{R}_s^{\frac{1}{2}*} \mathbf{Y}^* = \mathbf{Y}\mathbf{R}_s^{\frac{1}{2}} \mathbf{Y}^* \mathbf{D} \mathbf{Y} \mathbf{R}_s^{\frac{1}{2}*} \mathbf{Y}^* = \\ &= \mathbf{Y}\mathbf{R}_s^{\frac{1}{2}} \mathbf{Y}^* \mathbf{D}^{\frac{1}{2}} \mathbf{D}^{\frac{1}{2}} \mathbf{Y}\mathbf{R}_s^{\frac{1}{2}*} \mathbf{Y}^*. \end{aligned}$$

记

$$\begin{cases} \mathbf{Y}\mathbf{R}_s^{\frac{1}{2}} \mathbf{Y}^* \mathbf{D}^{\frac{1}{2}} = \mathbf{R}^{\frac{1}{2}}, \\ \mathbf{R} = \mathbf{R}^{\frac{1}{2}} \mathbf{R}^{\frac{1}{2}*}, \end{cases} \quad (\text{A11})$$

$$\mathbf{R}^{\frac{1}{2}} \mathbf{w} = \mathbf{Y}\mathbf{R}_s^{\frac{1}{2}} \mathbf{Y}^* \mathbf{D} (\mathbf{D}^{\frac{1}{2}} \mathbf{w}) = \mathbf{Y}\mathbf{R}_s^{\frac{1}{2}} [\mathbf{Y}^* \mathbf{D} (\mathbf{D}^{\frac{1}{2}} \mathbf{w})]. \quad (\text{A12})$$

根据(A12)和以上各式, 可以总结谱滤波的计算步骤:

(1) 由(A10)计算 $\mathbf{R}_s$;

(2) 计算 $\mathbf{R}_s^{\frac{1}{2}}$;

(3) 由(A11)计算 $\mathbf{R}^{\frac{1}{2}}$;

(4) 计算 $\bar{\mathbf{w}} = \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{w}$;

(5) 计算 $\mathbf{S}\bar{\mathbf{w}} = \mathbf{Y}^* \mathbf{D} \bar{\mathbf{w}}$;

(6) 谱滤波 $\mathbf{f} = \mathbf{R}_s^{1/2} \mathbf{S}\bar{\mathbf{w}}$;

(7) 逆谱变换 $\mathbf{R}^{1/2} \mathbf{w} = \mathbf{Y}\mathbf{f}$ 。

在 3D-Var 中, 计算目标函数梯度时需要计算谱滤波的伴随, 它表示为

$$\mathbf{R}^{\frac{1}{2}*} \mathbf{x} = \mathbf{D}^{\frac{1}{2}} \mathbf{Y}\mathbf{R}_s^{\frac{1}{2}*} \mathbf{Y}^* \mathbf{x} = \mathbf{D}^{\frac{1}{2}} \mathbf{Y}\mathbf{R}_s^{\frac{1}{2}*} \mathbf{Y}^* \mathbf{D} (\mathbf{D}^{-1} \mathbf{x}), \quad (\text{A13})$$

其计算步骤如下:

(1) 求 $\mathbf{D}^{-1} \mathbf{x}$;

(2) 谱变换 $\mathbf{Y}^* \mathbf{D} (\mathbf{D}^{-1} \mathbf{x})$;

(3) 谱滤波 $\mathbf{R}_s^{\frac{1}{2}*} [\mathbf{Y}^* \mathbf{D} (\mathbf{D}^{-1} \mathbf{x})]$;

(4) 逆谱变换 $\mathbf{Y}\mathbf{R}_s^{\frac{1}{2}*} \mathbf{Y}^* \mathbf{D} (\mathbf{D}^{-1} \mathbf{x})$;

(5)与 $D^{\frac{1}{2}}$ 相乘。

参考文献 (References)

- [1] Charney J, Fjortoft R, von Neumann J. Numerical integration of the barotropic vorticity equation. *Tellus*, 1950, **2**: 237~54
- [2] 朱宗申, 汪厚君, 张跃堂. 国家气象中心准业务有限区域客观分析方案. 应用气象学报, 1992, **3**(4): 459~467
Zhu Zongshen, Wang Houjun, Zhang Yuetang. Pre-operational limited area objective analysis scheme in national meteorological center. *J. Appl. Meteor. Sci.* (in Chinese), 1992, **3**(4): 459~467
- [3] Lorenc A C. Analysis methods for numerical weather prediction. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 1986, **112**: 1177~1194
- [4] Andersson E, Pailleux J, Thépaut J N, et al. Use of cloud-cleared radiances in 3D and 4D variational data assimilation. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 1994, **120**: 627~653
- [5] Xue Jishan. Progresses of researches on numerical weather prediction in China: 1999 - 2002. *Advances in Atmospheric Sciences*, 2004, **21**(3): 467~474
- [6] 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**(1): 30~41
Zhang Hua, Xue Jishan, Zhuang Shiyu, et al. Ideal experiments of GRAPeS three-dimensional variational data assimilation system. *Acta Meteor. Sinica* (in Chinese), 2004, **62**(1): 30~41
- [7] Lorenc A. Iterative analysis using covariance functions and filters. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 1992, **118**: 569~591
- [8] Ide K, Courtier P, Ghil M, et al. Unified notation for data assimilation: Operational, sequential and variational. *J. Meteor. Soc. Japan*, 1997, **75**: 181~189.
- [9] Gilbert J C, Lemaréchal C. Some numerical experiments with variable-storage quasi-Newton algorithms. *Math. Programming.*, 1989, **45**: 407~435
- [10] Courtier P, Thépaut J-N, Hollingsworth A. A strategy for operational implementation of 4D-VAR, using an incremental approach. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 1994, **120**: 1367~1387
- [11] Lorenc A C, Ballard S P, Bell R S, et al. The Met. Office global 3-dimensional variational data assimilation scheme. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 2000, **125**: 1~21
- [12] Hayden C M, Purser R J. Recursive filter objective analysis of meteorological fields: Applications to NESDIS operational processing. *J. Appl. Meteor.*, 1995, **34**: 3~15
- [13] Parrish D, Derber J C. The National Meteorological Center's spectral statistical interpolation analysis system. *Mon. Wea. Rev.*, 1992, **120**: 1747~1763
- [14] 黄丽萍, 伍湘君, 金之雁. GRAPES 模式标准初始化方案设计与实现. 应用气象学报, 2005, **16**(3): 374~383
Huang Liping, Wu Xiangjun, Jin Zhiyan. Scheme and applications of GRAPES model standard initialization, *J. Appl. Meteor. Sci.* (in Chinese), 2005, **16**(3): 374~383
- [15] Liu D C, Nocedal J. On the limited memory BFGS method for large-scale optimization. *Math. Programm.*, 1989, **45**: 503~528
- [16] Hollingsworth A, Lönnberg P. The statistical structure of short-range forecast errors as determined from radiosonde data. Part I: The wind field. *Tellus*, 1986, **38A**: 111~136
- [17] Fisher M. Assimilation techniques (3): 3dVar. ECMWF Meteorological Training Course Lecture Series. 2001
- [18] Boer G J. Homogeneous and isotropic turbulence on the sphere. *J. Atmos. Sci.*, 1983, **40**: 154~163
- [19] Daley R. Atmospheric Data Analysis (Cambridge Atmospheric and Space Sciences Series). Cambridge University Press, 1991
- [20] Mitchell H-L, Charette C, Chouinard C, et al. Revised interpolation statistics for Canadian data assimilation procedure: Their derivation and application. *Mon. Wea. Rev.*, 1990, **118**: 1591~1614