

李昊睿, 张述文, 邱崇践, 等. 2010. 四维变分同化和集合平方根滤波联合反演土壤湿度廓线的研究 [J]. 大气科学, 34 (1): 193–201. Li Haorui, Zhang Shuwen, Qiu Chongjian, et al. 2010. A study of retrieving the soil moisture profile by combining the four-dimensional variational data assimilation with the ensemble square root filter [J]. Chinese Journal of Atmospheric Sciences (in Chinese), 34 (1): 193–201.

四维变分同化和集合平方根滤波联合反演 土壤湿度廓线的研究

李昊睿^{1,2} 张述文^{1*} 邱崇践¹ 张卫东¹

1 兰州大学大气科学学院, 甘肃省干旱气候变化与减灾重点实验室, 兰州 730000
2 中国气象局广州热带海洋气象研究所, 广州 510080

摘 要 提出将集合平方根滤波 (EnSRF) 估计的预报误差协方差用于四维变分 (4DVAR) 的同化方案 (文中称混合四维变分同化方法, 简称混合方法) 来反演土壤湿度廓线, 该方法由两个同化时段构成: 第一时段为 EnSRF, 第二时段为 4DVAR, 此种组合可以充分发挥每一同化方法的优势。通过同化表层土壤湿度观测反演土壤湿度廓线这一理想试验来验证方法的可行性, 并与 EnSRF 和 4DVAR 的反演结果进行比较, 结果表明, 混合方法反演的分析时刻土壤湿度廓线都优于 EnSRF 和 4DVAR 的结果。与此同时, 为了克服小样本在估算背景场误差协方差矩阵时出现的虚假相关对反演的干扰, 提出在原有协方差矩阵中加入具有高斯指数函数成分来降低其影响; 与修正前结果相比, 反演的中下层 (地下 34~100 cm) 土壤湿度的均方根误差从 $0.036 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ 降到 $0.016 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$, 降幅为 55.6%, 更重要的是大大降低了部分深度处反演土壤湿度的误差, 如地下 90 cm 处误差从 $0.085 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ 降到 $0.024 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$, 降幅达 71.8%。

关键词 土壤湿度 集合平方根滤波 四维变分 混合四维变分数据同化

文章编号 1006-9895 (2010) 01-0193-09

中图分类号 P413

文献标识码 A

A Study of Retrieving the Soil Moisture Profile by Combining the Four-Dimensional Variational Data Assimilation with the Ensemble Square Root Filter

LI Haorui^{1, 2}, ZHANG Shuwen^{1*}, QIU Chongjian¹, and ZHANG Weidong¹

1 Key Laboratory of Arid Climate Change and Reducing Disaster of Gansu Province, College of Atmospheric Sciences, Lanzhou University, Lanzhou 730000

2 Institute of Tropical and Marine Meteorology, China Meteorological Administration, Guangzhou 510080

Abstract A hybrid four-dimensional variational (H4DVAR) data assimilation approach is proposed by combining the Ensemble Square Root Filter (EnSRF) with the Four-Dimensional Variational (4DVAR) data assimilation method, which is composed of two time windows with the first using EnSRF and the second using 4DVAR, and this combination can make good use of both EnSRF and 4DVAR. An Observing System Simulation Experiment (OSSE) is set up to investigate the ability to retrieve the true soil moisture profile with the new method by only assimilating

收稿日期 2008-11-11, 2009-06-24 收修定稿

资助项目 国家自然科学基金项目资助 40775065、40475012, 科技部公益性行业 (气象) 科研专项 GYHY200806029

作者简介 李昊睿, 女, 1978 年出生, 博士, 主要从事陆面数据同化研究。E-mail: hrli@grmc.gov.cn

* 通讯作者 E-mail: zhangsw@lzu.edu.cn

the near-surface soil moisture observations into a land surface model. After comparing the performance of the three data assimilation schemes (i. e., EnSRF, 4DVAR, and H4DVAR), it is shown that the H4DVAR is superior to the rest two methods because it can quickly retrieve the soil moisture profile with less error. However, when small ensembles are used to calculate the background error covariance, the spurious long-range vertical error correlation between an observation and a state variable will have a bad influence on the estimation of soil moisture. Therefore the authors propose a method to tackle this issue by adding a correlation matrix with the elements defined by the Gaussian function into the original background error covariance. By this way, the rms error of the estimated soil moisture reduces from $0.036 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ to $0.016 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ with a relative reduction of 55.6%, and the most important is the large reduction of the errors in some soil moisture estimates, for example, the error at the depth of 90 cm reducing from $0.085 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ to $0.024 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ with a relative reduction of 71.8%.

Key words soil moisture, EnSRF, 4DVAR, hybrid four-dimensional variational data assimilation

1 引言

土壤湿度尤其是地球表面 1~2 m 深的土壤湿度作为陆面过程研究中一个非常重要的物理量越来越受到大气科学、水文学和农林业等诸多学科领域的高度重视 (Shukla and Mintz, 1982; 林朝晖等, 2008)。土壤湿度的变化直接影响着陆面与大气之间能量和水分的再分配, 影响后期大气环流结构, 可能使得短期气候发生异常, 对区域环境产生重要影响 (王万秋, 1991; Koster et al., 2000; 郭维栋等, 2007)。由于实际土壤湿度常规业务观测站点稀少, 观测时间间隔也过大, 而遥感 (如微波) 也只能提供表层土壤湿度观测信息, 因此, 它们都不足以模式预报提供完备的土壤湿度初始场。陆面数据同化方法则提供了解决上述困难的一种新途径: 它可以同化不同形式的观测资料, 特别是大范围的微波遥感资料, 通过在离线运行 (指不与大气模式耦合) 的陆面模型中融入观测资料, 提高了模型预报精度; 另外, 对基于集合样本的卡曼滤波同化方法, 驱动资料的不确定性所带来的误差还可以通过扰动驱动定量化 (Crow and Wood, 2003; De Lannoy et al., 2006)。

随着大气和海洋数据同化系统的发展和完善以及陆面模式对地表过程描述能力的不断提高, 土壤湿度数据同化算法的研究也成为热点, 这方面研究工作较多, 如: Entekhabi et al. (1994) 用扩展卡曼滤波同化模拟亮温来估算土壤温、湿廓线; Galantowicz et al. (1999) 改用实际亮温资料进行同化试验; Reichle et al. (2002) 把集合卡曼滤波引入陆面数据同化领域; Zhang et al. (2004) 采用自适应卡曼滤波由易于观测的土壤温度来估算土壤湿度廓

线; Tian et al. (2008) 考虑了网格变异和土壤冻融对估算土壤湿度的影响, 提出双无迹卡曼滤波同时估算土壤湿度和土壤参数。与此同时, 一些以反演土壤湿度为核心内容的区域和全球陆面同化系统也逐渐建立起来, 如全球陆面数据同化系统 (Rodell et al., 2004)、北美陆面数据同化系统 (Cosgrove et al., 2003)、欧洲陆面数据同化系统 (van der Hurt, 2002) 以及中国西部陆面数据同化系统 (Li et al., 2007)。从同化方法来看, 集合卡曼滤波运用较多 (如 Reichle et al., 2002; Zhang et al., 2005; 张生雷等, 2008; Tian and Xie, 2008), 而四维变分运用较少 (如 Hess et al., 2008)。四维变分在整个同化时间窗内进行最优分析, 它的初始化能力很强; 不足之处需求伴随模式和预先指定背景场误差的协方差阵, 这可能是在陆面数据同化研究领域运用较少的一个主要原因。集合卡曼滤波是各观测时刻的最优分析, 不需模式的切线性算子及伴随模式, 而直接由集合样本估算背景场误差的协方差阵, 因而具有随流型而变的特性, 但当样本过小时会出现远距离虚假相关及滤波发散等问题。关于集合卡曼滤波和四维变分间详细比较, 可参见 Kalnay et al. (2007) 和 Lorenc (2003) 的文章。

综上所述, 四维变分与集合卡曼滤波各有优势, 但又存在一定缺陷, 为此, Lorenc (2003) 提出把两方法结合在一起。在具体做法上, 人们已提出了不少方案, 如四维集合卡曼滤波 (Hunt et al., 2004; Fertig et al., 2007) 和无需伴随、基于预报集合的显式四维变分同化 (邱崇践等, 2007; Qiu et al., 2007), 但是这些方法都是针对大气模式进行的数值试验, 在陆面数据同化领域还没有该方面比较研究。本文针对两类方法在反演土壤湿度廓线的不

同表现(具体见第5节),提出一种混合四维变分同化算法:先由集合卡曼滤波提供背景场的误差协方差阵,然后用四维变分来加速同化,达到快速估算土壤湿度廓线目的。为了全面比较上述三类同化算法,文中设计了一系列模拟试验,通过同化表层土壤湿度观测来估算整层土壤湿度这一经典陆面数据同化方案来考察四维变分、集合卡曼滤波和混合方法在估算土壤湿度速度、精度等方面的不同,探讨新方法的优缺点。

2 土壤湿度预报模型

陆面模式采用欧洲中期预报中心的模式(Viterbo and Beljaars, 1995; van den Hurk and Viterbo, 2003),这里只对本文用到的土壤湿度方程作简要介绍:假设土壤温度对土壤水运动参数和土壤水势没有影响,土壤湿度仅是土壤导水率和土壤水扩散率的函数,不考虑植被根系影响,则一维竖向土壤湿度 θ 方程为

$$\rho_w \frac{\partial \theta}{\partial t} = - \frac{\partial f}{\partial z}, \quad (1)$$

其中, ρ_w 为土壤水分密度(单位: kg/m^3), f 为土壤中的水通量(向下为正,单位: $\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$),根据Darcy定律, f 可表示为:

$$f = -\rho_w \left(\lambda \frac{\partial \theta}{\partial z} - \gamma \right), \quad (2)$$

其中, λ (单位: m^2/s)和 γ (单位: m/s)分别为土壤水的扩散率和导水率。

与原模式对土壤离散化不同,本文取土壤深度为1 m,均匀分成50层,此种划分也被其他研究人员所采用(Entekhabi et al., 1994; Walker et al., 2001)。具体离散化方案采用有限体积法(Versteeg and Malalasekera, 1998),土壤湿度定义为所在层的平均值,而水分通量则定义在层间交界处,具体第 i 层的差分方程为:

$$\rho_w \frac{(\theta_i^{n+1} - \theta_i^n)}{\Delta t} = - \frac{(f_{i+1/2}^* - f_{i-1/2}^*)}{D_i}, \quad (3)$$

其中,上标 n 表示第 n 个时间步, D_i 为每 i 层土壤厚度, $f_{i+1/2}^*$ 为水分通量,其差分格式为:

$$f_{i+1/2}^* = -\rho_w \left[\lambda_{i+1/2} \frac{\theta_{i+1}^* - \theta_i^*}{0.5(D_i + D_{i+1})} - \gamma_{i+1/2} \right]. \quad (4)$$

这里, $\theta_i^* = \epsilon \theta_i^{n+1} + (1-\epsilon) \theta_i^n$, $\epsilon = 1.5$ (Viterbo and Beljaars, 1995), $\lambda_{i+1/2}$ 和 $\gamma_{i+1/2}$ 分别为第 i 层和第 $i+1$ 层间土壤水的扩散率和导水率,定义为:

$$\begin{cases} \gamma_i = \gamma_{\text{sat}} \left(\frac{\theta_i}{\theta_{\text{sat}}} \right)^{2b+3}, \gamma_{i+1/2} = \gamma[\max(\theta_i^n, \theta_{i+1}^n)], \\ \lambda_i = \frac{b \lambda_{\text{sat}} (-\psi_{\text{sat}})}{\theta_{\text{sat}}} \left(\frac{\theta_i}{\theta_{\text{sat}}} \right)^{b+2}, \lambda_{i+1/2} = \lambda[\max(\theta_i^n, \theta_{i+1}^n)]. \end{cases} \quad (5)$$

3 数据同化方法

3.1 四维变分

基本思想是调整初始场,使预报在同化时间窗内与观测场的距离最小,可表述为极小化目标泛函。本文仅同化表层观测,目标函数定义为:

$$J(\theta_0) = \frac{1}{2} R^{-1} \sum_{i=1}^N (\theta_{i,1}^p - \theta_{i,1}^o)^2 + \frac{1}{2} (\theta^p - \theta^b)^T \mathbf{B}^{-1} (\theta^p - \theta^b), \quad (6)$$

其中, N 为观测次数, $\theta_{i,1}^p$ 、 $\theta_{i,1}^o$ 表示第 i 时间步、第一层(即表层)土壤湿度的预报值和观测值, θ^p 和 θ^b 表示由各层土壤湿度组成的土壤湿度(向量)的预报值和背景值, θ_0 为待反演的初始土壤湿度(向量)。由于表层土壤湿度可由微波遥感资料反演得到(Jackson et al., 1999),本文就直接同化表层土壤湿度。 R 为表层土壤湿度观测误差的方差,文中取为常数, $\mathbf{B}$ 为背景场误差协方差矩阵。在极小化目标函数的过程中通过求解相应的伴随模式导出所需目标函数相对于初值的梯度,由于篇幅所限,伴随模式及相应切线性模式的推导过程不再给出。

3.2 集合平方根滤波

传统卡曼滤波的分析量 θ^a 为

$$\theta^a = \theta^b + \mathbf{K}(\theta^o - \mathbf{H}\theta^b), \quad (7)$$

其中, $\mathbf{H}$ 为观测算子, θ^o 为观测值, $\mathbf{K}$ 为卡曼增益矩阵:

$$\mathbf{K} = \mathbf{P}^b \mathbf{H}^T (\mathbf{H} \mathbf{P}^b \mathbf{H}^T + \mathbf{R})^{-1}, \quad (8)$$

其中, $\mathbf{R}$ 为观测误差协方差阵,分析误差协方差阵 $\mathbf{P}^a$ 由下式得到

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^a &= (\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H}) \mathbf{P}^b (\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})^T + \mathbf{K} \mathbf{R} \mathbf{K}^T = \\ &(\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H}) \mathbf{P}^b, \end{aligned} \quad (9)$$

其中, $\mathbf{P}^b$ 为背景场误差协方差阵。

为了克服传统卡曼滤波要求模式的切线性算子和计算量巨大的弊端,Evensen(2003)提出由预报集合样本统计出背景场误差协方差矩阵。集合卡曼滤波具有两种形式:一种是随机方法,另一种是确定性方法。随机方法采用对观测加扰动生成观测样

本, 然后逐个同化观测样本生成分析样本 (Burgers et al., 1998), 而确定性方法不需对观测加随机扰动, 如采用对协方差矩阵进行平方根分解来生成分析样本, 由于分解不唯一, 可得出不同形式的集合卡曼滤波, 如集合变换卡曼滤波 (Bishop et al., 2001)、集合调整卡曼滤波 (Anderson, 2001) 和集合平方根滤波 (Whitaker and Hamill, 2002) 等。考虑到陆面数据同化的特点, 本文选用集合平方根滤波。

集合平方根滤波采用两个不同的卡曼增益矩阵 $\mathbf{K}$ 和 $\tilde{\mathbf{K}}$ 分别对样本均值 $\bar{\theta}$ 以及相对于均值的每个样本偏差 (或扰动) θ' 进行更新, 即

$$\bar{\theta}^a = \bar{\theta}^b + \mathbf{K}(\theta^o - \mathbf{H}\bar{\theta}^b), \quad (10)$$

$$\theta'^a = \theta'^b + \tilde{\mathbf{K}}(\theta'^o - \mathbf{H}\theta'^b). \quad (11)$$

由于不需对观测加扰动, 所以观测扰动量 θ'^o 为零。若只有一个观测 (如本文只有表层土壤湿度观测), 观测误差协方差阵 $\mathbf{R}$ 简化为一个标量 R , 若再假设 $\tilde{\mathbf{K}} = \alpha \mathbf{K}$, 可以直接得出 α 表达式 (Whitaker and Hamill, 2002):

$$\alpha = \left(1 + \sqrt{\frac{R}{\mathbf{H}\mathbf{P}^b\mathbf{H}^T + R}}\right)^{-1}. \quad (12)$$

注意: 此时 $\mathbf{H}\mathbf{P}^b\mathbf{H}^T$ 也简化为一标量, 非常便于计算, 这就是我们选用集合平方根滤波的主要原因。

3.3 混合四维变分同化方法

混合四维变分同化方法具体计算步骤如下:

(1) 首先给出土壤湿度的初估值及初始扰动样本, 然后用 EnSRF 方法进行第一时段数据同化。

(2) 用第一时段末的土壤湿度估算值 [即 (10) 式求得的均值 $\bar{\theta}^a$] 及分析误差协方差阵 [即 (9) 式求得的 $\mathbf{P}^a$] 分别作为 4DVAR 的初估值 θ_0 和背景场误差协方差阵 $\mathbf{B}$, 然后进行第二时段的 4DVAR 数据同化。目标函数仍为 (6) 式, 其相对于初值的梯度为:

$$\nabla \mathbf{J}(\theta_0) = \mathbf{B}^{-1}(\theta^p - \theta^b) + \nabla \mathbf{J}^o(\theta_0), \quad (13)$$

其中, $\nabla \mathbf{J}^o(\theta_0)$ 的求解要对伴随模式进行时间反向积分。由样本统计得出的协方差矩阵可能不满秩, 为此, 我们采用 Lorenc (1988) 的方法引入变换来避免求逆, 令 $\mathbf{z} = \mathbf{B}^{-1}(\theta^p - \theta^b)$, 则 $\theta^p = \theta^b + \mathbf{B}\mathbf{z}$, (13) 式变为

$$\nabla \mathbf{J}(\mathbf{z}) = \mathbf{B}^T \mathbf{z} + \nabla \mathbf{J}^o(\mathbf{z}). \quad (14)$$

4 试验条件与试验方案

4.1 试验条件

为了消除上边界与大气作用可能引起的误差, 与其它陆面数据同化试验一样, 本文上边界条件采用固定蒸发率 0.5 cm/d (Entekhabi et al., 1994; Walker et al., 2001), 而下边界条件则采用陆面过程模式较为通用的做法, 假设土壤基质势 ψ 的梯度为零 (Viterbo and Beljaars, 1995; van den Hurk and Viterbo, 2003)。土壤类型为粘沃土, 饱和基质势为 -63.0 cm, 饱和导水率为 0.00025 cm/s, 无量纲量 b 取 8.52, 饱和土壤湿度为 0.476 cm³/cm³ (Pielke, 2002)。

试验中所用数据均为模式生成的模拟数据, 包括土壤湿度“真值”以及表层土壤湿度观测资料。其中, 真值是初始时刻土壤湿度廓线为常值 0.40 cm³/cm³ 时的模式预报场; 观测资料是在表层土壤湿度真值上添加一组均值为零、标准差等于 0.05 cm³/cm³ (Reece, 1996; Schneider et al., 2003)、时间无关的高斯序列生成的。

4.2 试验方案

EnSRF 所需样本数要试验才能确定, 为此选取样本数为 20、50 和 100 来试验, 假设每 24 小时同化一次观测, 图 1 绘出了反演的土壤湿度廓线的均方根误差的变化曲线。可以看出集合数越大, 均方根误差越小, 但随着同化进行, 集合数为 50 和 100 间相差逐渐减小。集合数从 20 增加到 50, 均方根误差减小的程度远大于集合数从 50 增加到

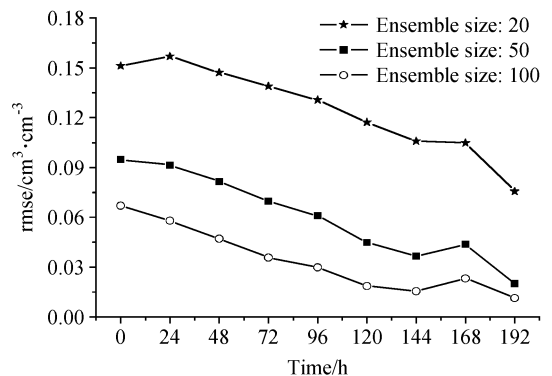


图1 样本数为 20、50 和 100 时反演的土壤湿度廓线的均方根误差随同化时次的变化

Fig. 1 Change of the rms errors of the estimated soil moisture with the updating times for three different ensemble sizes of 20, 50, and 100

100。当然, 集合数越大, 计算量也越大, 但为了消除抽样误差对方法比较间的干扰, 在下面 Exp-A、Exp-B 和 Exp-C 三个试验中均取 100 个样本。

具体同化试验方案包括以下五组:

Exp-A: 用混合方法进行同化, 样本数为 100;

Exp-B: 用 EnSRF 进行同化, 样本数为 100 且假设初始样本无空间关联;

Exp-C: 用 4DVAR 进行同化, 为了与 EnSRF 初始同化条件一致, 也假设背景场误差间无空间关联, 且不同深度处背景误差方差相等, 若初估值为 $0.24 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$, 背景场的误差方差为 0.16^2 ; 若为 $0.3 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$, 则方差变为 0.10^2 ;

Exp-D: 样本数减小为 50, 其它条件与 Exp-A 完全一样;

Exp-E: 改用修正的背景误差协方差矩阵 B 进行同化, 其它条件与 Exp-D 完全一样。

上述方案中, 同化总时长均取 120 小时, 每 24 小时有一次观测, 共 6 次 (包括初始时刻)。假设无先验信息, 土壤湿度初估值取为饱和值的一半, 上边界条件也加入随机误差。为了评估初估值对同化速度的影响, 也选取另一个较好的初估值 $0.3 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ (即与真值较靠近) 作为对比。

5 同化结果比较与分析

5.1 三种同化方法反演结果间比较

图 2 比较了三种同化方法反演的土壤湿度的均方根误差随时间的变化。对 EnSRF 来说, 由于每隔 24 小时就会有新的观测同化进来, 所以该方法估算值的均方根误差随时间逐渐减少。对 4DVAR 来说, 一次融合同化窗内所有观测来更新初始值,

而其它时刻值是根据新的初始条件由模式预报的: 就图 2a 来说, A 点对应于 4DVAR 反演的初始土壤湿度的均方根误差, 而 B1、B2、B3、B4 和 B5 点分别为第 24、48、72、96 和 120 小时模式预报值的均方根误差。对混合方法, 120 小时同化时段分为两段: 前 48 小时用 EnSRF, 后 72 小时用 4DVAR, 因此第 48 小时 (在图 2a 横坐标上用黑色方框标出) 出现两个误差值 (对应图中 C 和 D 点), 其中 C 点是 EnSRF 同化 3 次观测后得出的, 而 D 点为第 48~120 小时同化窗口内由混合方法反演得出的 (以下为简便叙述, 将 48 小时定义分析时刻), 后续值则有模式预报出, 其误差对应于 E1、E2 和 E3 点。图 2b 与图 2a 相似, 不同之处只是初估值改为 $0.3 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ 。

相对于 EnSRF 方法, 因为混合方法在分析时刻之后采用 4DVAR, 吸收了分析时刻之后的所有观测信息, 所以反演的分析时刻土壤湿度的均方根误差明显减小 (从 C 点下降到 D 点), 而且在同化窗末端误差也明显小于 EnSRF 的结果。同样, 由于混合方法利用了 EnSRF 得到的背景场, 同化结果好于一般的 4DVAR 结果 (注: 此处 4DVAR 结果未考虑背景误差的空间关联, 见 Exp-C 的条件)。

为了更进一步比较三种同化方法估算深层土壤湿度的效果, 绘制了估算土壤湿度在 48 小时 (分析时刻) 的廓线图 (图 3)。可以看出混合方法得到的土壤湿度廓线与真值较为接近, 尤其是对中下层土壤湿度的反演上, 但是混合方法得到的廓线有个明显不足就是“摆动”太大, 即不是一致地接近真值, 而是与真值廓线有多个交叉点, 尤其当初估值与真值偏离较大时会更加严重 (如初估值为 0.24

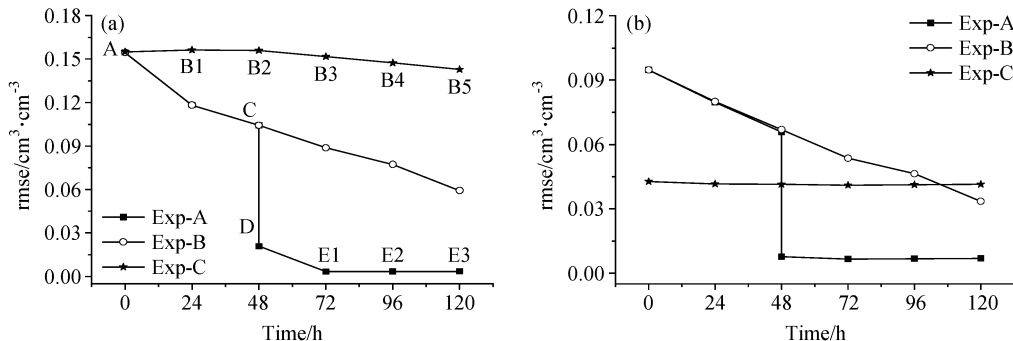


图 2 三种同化方法反演的土壤湿度廓线的均方根误差随同化时间的变化: 初估值为 (a) $0.24 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ 和 (b) $0.3 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$

Fig. 2 Comparisons of the rms errors of soil moisture estimated with the three data assimilation schemes with the initial soil moisture guesses of (a) $0.24 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ and (b) $0.30 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$

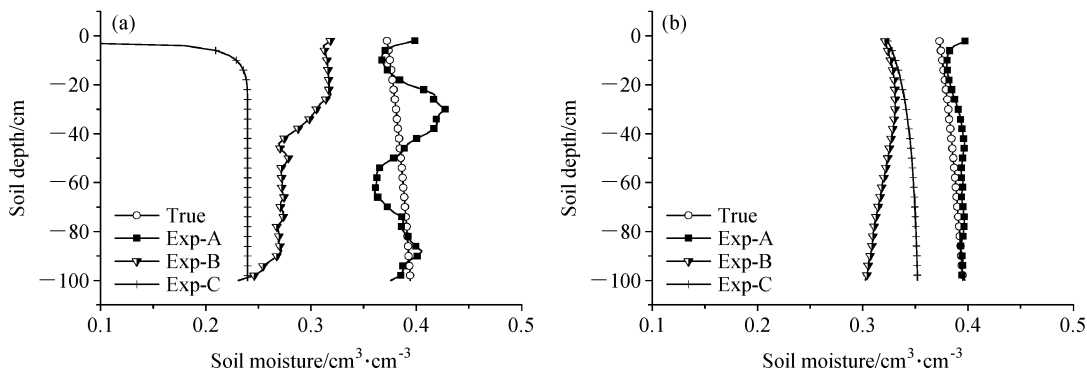


图3 在分析时刻(48小时)三种同化方法反演的土壤湿度廓线与真值的比较。其余同图2

Fig. 3 Comparison of the three estimated soil moisture profiles with the true profile at simulation time 48 h for the initial soil moisture guesses of (a) $0.24\text{ cm}^3/\text{cm}^3$ and (b) $0.30\text{ cm}^3/\text{cm}^3$

表1 两同化时段不同组合时三类方法反演的分析时刻土壤湿度廓线的均方根误差

Table 1 The rms errors of the estimated soil moisture from the three schemes under different combinations of the two time-windows respectively for EnSRF and 4DVAR

	72 h			96 h			120 h			144 h		
	H4DVAR	EnSRF	4DVAR	H4DVAR	EnSRF	4DVAR	H4DVAR	EnSRF	4DVAR	H4DVAR	EnSRF	4DVAR
EnSRF 24 h	0.027	0.118	0.999	0.029	0.118	0.156	0.027	0.118	0.156	0.041	0.118	0.156
EnSRF 48 h	0.022	0.103	0.156	0.022	0.103	0.156	0.066	0.103	0.156			
EnSRF 72 h	0.013	0.086	0.152	0.069	0.086	0.152						
EnSRF 96 h	0.057	0.073	0.147									

cm^3/cm^3)。

为了进一步考察两个同化时段长短对估算精度的影响,在保持整个同化时长不超过一周(即168小时)情况下,进行了一系列同化试验。分析时刻的均方根误差见表1,其中第一列表示EnSRF的同化时长分别为24、48、72和96小时,也代表对应的分析时刻,第一行表示4DVAR的同化时长分别为72、96、120和144小时,H4DVAR代表混合方法。比较可知:不管EnSRF和4DVAR的同化时长如何组合,在分析时刻混合方法反演的土壤湿度廓线均方根误差均最小。

5.2 修正B矩阵后混合方法的反演结果

实际同化中不可能采用非常大的样本,而有限样本统计出的背景场误差协方差阵会出现虚假关联,影响反演精度,我们的试验结果也证实了该点:如把样本数从100(结果见图3a中Exp-A)减小到50(结果见图4b中Exp-D)时,反演的土壤湿度廓线相对于真实廓线的左右“摆动”现象加剧。在大气和海洋数据同化领域,克服上述虚假相关的

一种较为可行做法是采用“局地化”(主要指水平方向)办法,但是不能借用到本研究,原因是我们所关心的问题就是反演土壤各层(尤其是中、下层)的土壤湿度,一旦采用竖直方向“局地化”,反演的下层土壤湿度的误差反而会加大(图略)。鉴于此,我们提出对背景场误差协方差阵的一种修正办法来降低虚假相关的影响。首先,由高斯指数函数构建一个新矩阵 $\mathbf{B}_G$,其元素 $b_{i,j}$ 由下式确定:

$$b_{i,j} = \sigma_E^2 \exp[-(r_{i,j}/L)^2], \tag{15}$$

其中, $r_{i,j}$ 为土壤第*i*、*j*层间距离, $L=50\text{ cm}$ 为特征尺度, σ_E 为分析时刻集合平方根滤波反演的土壤湿度的均方根误差。其次,计算分析时刻由集合平方根滤波生成的背景误差协方差阵 $\mathbf{B}_E$ 。最后,得出如下修正的背景误差协方差阵:

$$\mathbf{B} = \beta \mathbf{B}_E + (1 - \beta) \mathbf{B}_G, \tag{16}$$

其中, $0 < \beta \leq 1$,可通过数值试验确定出最优值。试验表明:如果初始扰动的均方根误差越小, β 就越大,甚至为1.0,如初估值为 $0.3\text{ cm}^3/\text{cm}^3$,与真实土壤湿度偏差较小(见图3b),所以不需对 $\mathbf{B}$ 进

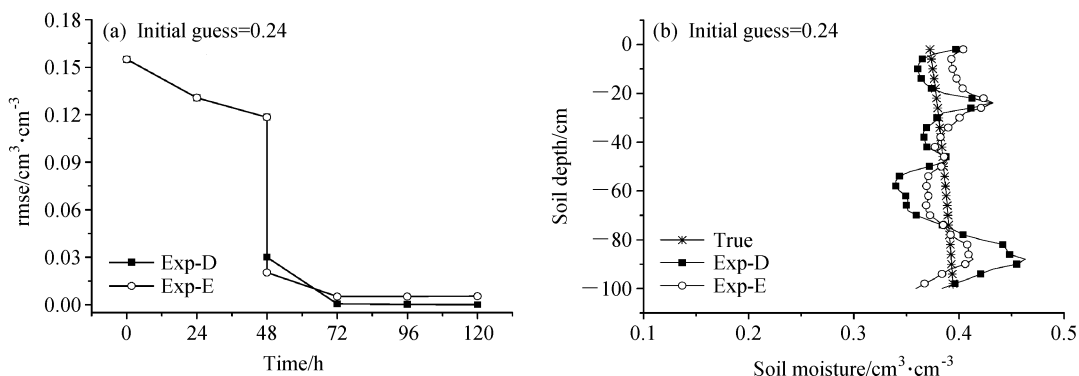


图4 背景场误差协方差阵修正前后混合方法反演结果间比较: (a) 均方根误差的比较; (b) 分析时刻土壤湿度廓线的比较

Fig. 4 Comparison of results before and after the revision of the error covariance: (a) The rms error; (b) the soil moisture profile at the analysis time

行修正, 取 $\beta = 1.0$ (图略); 而当初估值为 $0.24 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ 时, 初估值非常差, 初始扰动的方差也应增大, 需对 $\mathbf{B}$ 进行修正。试验中 β 分别取 0.0、0.5、0.7 和 1.0, 得出分析时刻土壤湿度的均方根误差为 0.031、0.023、0.021 和 $0.033 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$, 因此在 Exp-E 中 β 取 0.7 (结果见图 4)。与不修正协方差阵的 Exp-D 相比, 虽然反演的整个廓线均方根误差的差别不是特别显著, 仅从 $0.033 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ 降到 $0.021 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$, 相对降幅为 36.4% (图 4a), 而对应的中下层 (地下 34~100 cm) 土壤湿度的均方根误差从 $0.036 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ 降到 $0.016 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$, 降幅达到 55.6%。与此同时, 反演的土壤湿度廓线与真实值相比更加合理, 有效地克服了部分反演值与真值的过分偏离现象, 例如地下 56 cm 处误差从 $0.049 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ 减小为 $0.018 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$, 而地下 90 cm 处误差从 $0.085 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ 降到 $0.024 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$, 降幅达到 71.8% (图 4b)。

6 讨论与总结

虽然集合平方根滤波和四维变分都可以同化表层土壤湿度观测来反演深层土壤湿度, 但是前者估算速度过慢, 后者需要预先指定背景场误差协方差, 本文提出混合四维变分方法把二者融合起来, 充分发挥它们各自优点。该方法把同化时段分为两段, 第一时段用集合平方根滤波, 既可以提供分析场, 又可以提供较为真实反映背景场误差结构的协方差矩阵, 从而为第二时段四维变分提供较好的初估值及背景误差协方差。数值模拟试验表明: 混合方法反演的分析时刻土壤湿度廓线均好于集合平方

根滤波和四维变分。原因是: 与集合平方根滤波比较, 它利用了分析时刻之后所有观测; 与四维变分相比, 它吸收了经过集合平方根滤波更新的背景场。

当样本数变小后, 由集合样本估算的背景场误差协方差阵的远距离虚假相关对反演干扰较大。为此, 提出修正协方差阵方法来降低反演的中下层土壤湿度与真实廓线的过分偏离, 但是对上层土壤湿度的估算并没有显著改进。原因与增加的协方差阵形式有关, 它是高斯指数函数形式, 具有随格点间距增大而关联减小的特点, 它可以部分抵消由小样本统计出的误差协方差阵中的远距离虚假相关, 但它对近距离关联修正不大。一个可能解决途径是增大样本数, 但对于区域或全球陆面同化业务系统而言会导致计算量大增, 这显然不现实。因此, 如何采用较为简便的方法构造出随流型而变化的背景场误差协方差阵仍将是数据同化研究中难点问题之一。

本文所用模型较为简单, 没有考虑土壤的冻融过程, 也没有包括土壤性质参数的不确定等。相对来说, 集合平方根滤波对上述问题易于处理, 但四维变分就比较困难, 此时混合方法是否仍具有优势难于断定, 值得更深入地研究。最后需要说明的是: 由于集合平方根滤波和四维变分都与背景场及其误差协方差阵的初估值密切相关, 因此不能根据 Exp-B 和 Exp-C 的结果来推断这两类同化算法在土壤湿度反演方面的优劣。本文只想表明当背景场及其误差协方差阵的初估值都很差时 (如本文 Exp-B 和 Exp-C 的条件), 采用混合方法将有助于

提高土壤湿度反演的精度。

致谢 感谢两位审稿人提出的宝贵意见。

参考文献 (References)

- Anderson J L. 2001. An ensemble adjustment Kalman filter for data assimilation [J]. *Mon. Wea. Rev.*, 129: 2884–2903.
- Bishop C H, Etherton B J, Majumdar S J. 2001. Adaptive sampling with the ensemble transform Kalman filter. Part I: Theoretical aspects [J]. *Mon. Wea. Rev.*, 129: 420–436.
- Burgers G, van Leeuwen P J, Evensen G. 1998. Analysis scheme in the ensemble Kalman filter [J]. *Mon. Wea. Rev.*, 126: 1719–1724.
- Cosgrove B A, Lohmann D, Mitchell K E, et al. 2003. Real-time and retrospective forcing in the North American Land Data Assimilation System (NLDAS) project [J]. *J. Geophys. Res.*, 108 (D22), 8842, doi: 10.1029/2002JD003118.
- Crow W T, Wood E F. 2003. The assimilation of remotely sensed soil brightness temperature imagery into a land surface model using Ensemble Kalman filtering: A case study based on ESTAR measurements during SGP97 [J]. *Adv. Water Resour.*, 26: 137–149.
- De Lannoy G J M, Houser P R, Pauwels V R N, et al. 2006. Assessment of model uncertainty for soil moisture through ensemble verification [J]. *J. Geophys. Res.*, 111, D10101, doi: 10.1029/2005JD006367.
- Entekhabi D, Nakamura H, Njoku E G. 1994. Solving the inverse problem for soil moisture and temperature profiles by sequential assimilation of multi-frequency remotely sensed observations [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 32: 438–448.
- Evensen G. 2003. The ensemble Kalman filter: Theoretical formulation and practical implementation [J]. *Ocean Dynamics*, 53: 343–367.
- Fertig E J, Harlim J, Hunt B R. 2007. A comparative study of 4D-VAR and a 4D Ensemble Kalman Filter: Perfect model simulations with Lorenz-96 [J]. *Tellus (A)*, 59 (1): 96–100.
- Galantowicz J F, Entekhabi D, Njoku E G. 1999. Tests of sequential data assimilation for retrieving profile soil moisture and temperature from observed L-band radiobrightness [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 37: 1860–1870.
- 郭维栋, 马柱国, 王会军. 2007. 土壤湿度——一个跨季度降水预测中的重要因子及其应用探讨 [J]. *气候与环境研究*, 12: 20–28.
- Guo Weidong, Ma Zhuguo, Wang Huijun. 2007. Soil moisture—An important factor of seasonal precipitation prediction and its application [J]. *Climatic and Environmental Research (in Chinese)*, 12: 20–28.
- Hess R, Lange M, Wergen W. 2008. Evaluation of the variational soil moisture assimilation scheme at Deutscher Wetterdienst [J]. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 134: 1499–1512.
- Hunt B R, Kalnay E, Kostelich E J, et al. 2004. Four-dimensional ensemble Kalman filtering [J]. *Tellus (A)*, 56: 273–277.
- Jackson T J, Vine D M L, Hsu A Y, et al. 1999. Soil moisture mapping at regional scales using microwave radiometry: The Southern Great Plains hydrology experiment [J]. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 37: 2136–2151.
- Kalnay E, Li H, Miyoshi T, et al. 2007. 4D-Var or ensemble Kalman filter? [J]. *Tellus (A)*, 59: 758–773.
- Koster R D, Suarez M J, Heiser M. 2000. Variance and predictability of precipitation at seasonal to interannual timescales [J]. *J. Hydrometeor.*, 1: 26–46.
- Li Xin, Huang Chunlin, Che Tao, et al. 2007. Development of a Chinese land data assimilation system: its progress and prospects [J]. *Progress in Natural Science*, 17 (8): 881–892.
- 林朝晖, 刘辉志, 谢正辉, 等. 2008. 陆面水文过程研究进展 [J]. *大气科学*, 32 (4): 935–949.
- Lin Zhaohui, Liu Huizhi, Xie Zhenghui, et al. 2008. Recent progress in the land surface and hydrological process studies [J]. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences (in Chinese)*, 32 (4): 935–949.
- Lorenc A C. 1988. Optimal nonlinear objective analysis [J]. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 114: 205–240.
- Lorenc A C. 2003. The potential of the ensemble Kalman filter for NWP—A comparison with 4D-Var [J]. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 129: 3183–3203.
- Pielke R A. 2002. *Mesoscale Meteorological Modeling* [M]. Academic Press. San Diego, California, 675pp.
- 邱崇践, 张蕾, 邵爱梅. 2007. 一种显式四维变分资料同化方法 [J]. *中国科学 (D)*, 37 (5): 698–704.
- Qiu Chongjian, Zhang Lei, Shao Aimei. 2007. An explicit four-dimensional variational data assimilation method [J]. *Science in China (D) (in Chinese)*, 37 (5): 698–704.
- Qiu Chongjian, Shao Aimei, Xu Qin, et al. 2007. Fitting model fields to observations by using singular value decomposition: An ensemble-based 4DVar approach [J]. *J. Geophys. Res.*, 112 (D11): 11105.
- Reece C F. 1996. Evaluation of a line heat dissipation sensor for measuring soil matric potential [J]. *Soil Sci. Soc. Amer. J.*, 60: 1022–1028.
- Reichle R H, McLaughlin D B, Entekhabi D. 2002. Hydrologic data assimilation with the ensemble Kalman filter [J]. *Mon. Wea. Rev.*, 130: 103–114.
- Rodell M, Houser P R, Jambor U, et al. 2004. The global land data assimilation System [J]. *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, 85: 381–394.
- Schneider J M, Fisher D K, Elliott R L, et al. 2003. Spatiotemporal variation in soil water: First results from the ARM SGP CART network [J]. *J. Hydrometeor.*, 4: 106–120.
- Shukla J, Mintz Y. 1982. The influence of land-surface evaporation on the earth's climate [J]. *Science*, 215: 1498–1501.
- Tian Xiangjun, Xie Zhenghui, Dai Aiguo. 2008. A land surface soil

- moisture data assimilation system based on the dual-UKF method and the Community Land Mode [J]. *J. Geophys. Res.*, 113: D14127, doi: 10.1029/2007JD009650.
- Tian Xiangjun, Xie Zhenghui. 2008. A land surface soil moisture data assimilation framework in consideration of the model sub-grid-scale heterogeneity and soil water thawing and freezing [J]. *Science in China (D)*, 51 (7): 992–1000.
- van den Hurk B. 2002. European LDAS established [J/OL]. *GEWEX Newsletter*, 12 (2): 9. http://www.gewex.org/gewex_nwsltr.html
- van den Hurk B, Viterbo P. 2003. The Torne-Kalix PILPS 2 (e) experiment as a test bed for modifications to the ECMWF land surface scheme [J]. *Global Planet. Change*, 38: 165–173.
- Versteeg H K, Malalasekera W. 1998. An Introduction to Computational Fluid Dynamics [M]. Longman Group Ltd. Edinburgh Gate, Harlow, 257 pp.
- Viterbo P, Beljaars A C M. 1995. An improved land surface parameterization scheme in the ECMWF model and its validation [J]. *J. Climate*, 8: 2716–2748.
- Walker J P, Willgoose G R, Kalma J D. 2001. One-dimensional soil moisture profile retrieval by assimilation of near-surface observations: A comparison of retrieval algorithms [J]. *Adv. Water Resour.*, 24: 631–650.
- 王万秋. 1991. 土壤温湿异常对短期气候影响的数值模拟试验 [J]. *大气科学*, 15 (5): 115–123. Wang Wanqiu. 1991. Numerical experiments of the soil temperature and moisture anomalies' effects on the short term climate [J]. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences (Scientia Atmospherica Sinica) (in Chinese)*, 15 (5): 115–123.
- Whitaker J S, Hamill T M. 2002. Ensemble data assimilation without perturbed observations [J]. *Mon. Wea. Rev.*, 130: 1913–1924
- 张生雷, 谢正辉, 师春香, 等. 2008. 集合 Kalman 滤波在土壤湿度同化中的应用 [J]. *大气科学*, 32: 1419–1430. Zhang Shenglei, Xie Zhenghui, Shi Chunxiang, et al. 2008. Applications of ensemble Kalman filter in soil moisture assimilation [J]. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences (in Chinese)*, 32: 1419–1430.
- Zhang Shuwen, Qiu Chongjian, Xu Qin. 2004. Estimating soil water contents from soil temperature measurements by using an adaptive Kalman filter [J]. *J. Appl. Meteor.*, 43: 379–389.
- Zhang Shuwen, Li Haorui, Zhang Weidong, et al. 2005. Estimating the soil moisture profile by assimilating near-surface observations with the ensemble Kalman filter (EnKF) [J]. *Adv. Atmos. Sci.*, 22: 936–945.