伴随方程在水汽资料四维同化中的应用*

I. 理论

王必正 曾庆存 穆 穆

(中国科学院大气物理研究所大气科学和地球流体力学数值模拟国家重点实验室)

摘 要 由于水汽相变等过程为快过程、再考虑到水汽观测误差不服从正态分布，可以认为将水汽资料与其他观测误差进行正态分布的气象资料联合同化是一种不合适的方法。故应单独对水汽资料进行同化。在下边界为第三类边界条件下，推导了适合于数值天气预报的水汽方程的伴随方程；利用目标函数的极值性，得出了水汽的四维资料同化问题的伴随算法；证明了目标函数给出的极值点为最小值点、且是惟一的。

关键词: 伴随算法；水汽方程；四维资料同化

1 引言

在做天气预报和气候预测时，必须有协调的初始场。水汽的初始值是有本质重要性的。一方面，目前的常规及非常规观测、已能提供不同时次不同种类的水汽资料，但在将这些资料放到具体模式中之前，必须作同化处理；另一方面，水汽的同化对于大气动力、热力和辐射过程都是十分重要的。因为水汽相变等过程为快过程，并考虑到水汽观测误差不服从正态分布，所以将水汽资料与其他观测误差进行正态分布的气象资料联合同化是一种不合适的方法。本文假定其他气象场资料已给定，利用水汽方程，单独讨论水汽资料的四维变分同化问题。在数学上利用曾庆存[1]的球面泛函空间知识，在第 2 节给出了适合于数值天气预报的水汽方程的伴随方程，第 3 节讨论用伴随方程解决水汽的四维同化问题，第 4 节证明了目标函数给出的极值点为最小值点，且是惟一的。

2 水汽方程的伴随算子

为了方便，水汽的微物理项采用如下简单参数化公式：

$$s_q = -\alpha(q - q_s), \tag{1}$$

其中，α 为常数且 $\alpha > 0$。当$q \geqslant q_s$时，有水汽凝结（华），$s_q < 0$；当$q < q_s$时，则有其他源项蒸发升华使水汽增加，如非对流云和降水蒸发。

由于水汽相变等过程的变化比其他大尺度过程快得多，故在做数值天气预报时，水

1998-09-24 收到，1999-03-23 收到修改稿

* 本研究得到国家重点基础研究发展规划项目G1998040904"我国重大气候灾害的形成机理和预测理论的研究"、国家自然科学基金资助项目 49805005 和 49735160 的联合资助

汽方程的求解是独立于其他部分的。所以，在同化时段内，假设大尺度场与水汽场无关，水汽预报方程在球坐标系中可以写成

$$\frac{\partial q}{\partial t}+\frac{v_\theta}{a}\frac{\partial q}{\partial \theta}+\frac{v_\lambda}{a\sin\theta}\frac{\partial q}{\partial \lambda}+\dot{\sigma}\frac{\partial q}{\partial \sigma}=-\alpha(q-q_s)+\frac{k_h}{a^2}\Delta_2 q+\frac{k_v}{H^2}\frac{\partial^2 q}{\partial \sigma^2}, \tag{2}$$

其中，H 为长度量纲。为了方便和不失一般性，取 H 为常数:

$$H=\frac{p_s}{\rho g}, \tag{3}$$

其余为常见符号。

边值条件为:

(1) 上边界

$$\dot{\sigma}\big|_{\sigma=0}=0, \qquad \frac{\partial q}{\partial \sigma}\bigg|_{\sigma=0}=0. \tag{4}$$

(2) 下边界

$$\dot{\sigma}\big|_{\sigma=1}=0, \qquad \left(\frac{\partial q}{\partial \sigma}+cq\right)\bigg|_{\sigma=1}=d \qquad (c>0). \tag{5}$$

由于研究的是全球水汽，故不考虑侧边界条件。(5) 式的边界条件为第三类边界条件，包含了下边界水汽的梯度输送，并保证水汽方程解的适定性。

在数值天气预报中，水汽方程是采用通量形式的方程，故本文利用连续方程，将 (2) 改写成

$$\frac{\partial}{\partial t}p_s q+\nabla_2\cdot(p_s q\vec{v}_2)+\frac{\partial}{\partial \sigma}p_s q\dot{\sigma}+\alpha p_s q=p_s s+\frac{k_h}{a^2}P_s\Delta_2 q+\frac{k_v}{H^2}p_s\frac{\partial^2 q}{\partial \sigma^2}, \tag{6}$$

其中，$s=\alpha q_s$。初始值为

$$q\big|_{t=0}=q_0. \tag{7}$$

研究的区域 Ω 为（数学处理参考了文献[1]）

$$\Omega=\{(\lambda,\theta,\sigma):\ 0\leqslant\lambda\leqslant 2\pi,\ 0\leqslant\theta\leqslant\pi,\ 0\leqslant\sigma\leqslant 1\}. \tag{8}$$

记

$$A=\nabla_2\cdot(p_s\vec{v}_2(\ ))+\frac{\partial}{\partial \sigma}p_s\dot{\sigma}(\ )+\alpha p_s(\ )-\frac{k_h}{a^2}p_s\Delta_2-\frac{k_v}{H^2}p_s\frac{\partial^2}{\partial \sigma^2}.$$

现推导 A 的伴随算子。考察积分，分部积分之，有

$$\begin{aligned}\int_\Omega Aq\cdot q^*\,\mathrm{d}\Omega=&-\int_\Omega q\vec{v}_2\cdot(p_s\nabla_2 q^*)\mathrm{d}\Omega-\int_\Omega qp_s\sigma\frac{\partial q^*}{\partial\sigma}\mathrm{d}\Omega\\&+\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}a^2\sin\theta(p_s\dot{\sigma}qq^*\ )\big|_{\sigma=0}^{\sigma=1}+\int_\Omega\alpha p_s qq^*\,\mathrm{d}\Omega-\int_\Omega q\Delta_2\left(\frac{k_h}{a^2}p_s q^*\right)\mathrm{d}\Omega\\&-\int_\Omega q\frac{k_v}{H^2}\frac{\partial^2}{\partial\sigma^2}(p_s q^*)\mathrm{d}\Omega-\frac{k_v}{H^2}p_s\frac{\partial q}{\partial\sigma}\ q^*\ \big|_{\sigma=0}^{\sigma=1}+\frac{k_v}{H^2}(p_s q^*\ )\big|_{\sigma=0}^{1}.\end{aligned}$$

为了消去上式中在 $\sigma=0$ 和 $\sigma=1$ 处的边界项，q 与q^* 应分别满足条件：

$$\begin{cases} \left.\dfrac{\partial q}{\partial \sigma}\right|_{\sigma=0}=0, \\ \left.\left(\dfrac{\partial q}{\partial \sigma}+cq\right)\right|_{\sigma=1}=0. \end{cases} \tag{9}$$

$$\begin{cases} \left.\dfrac{\partial q^*}{\partial \sigma}\right|_{\sigma=0}=0, \\ \left.\left(\dfrac{\partial q^*}{\partial \sigma}+cq^*\right)\right|_{\sigma=1}=0. \end{cases} \tag{10}$$

由此，有

$$\int_\Omega Aq\cdot q^*\,\mathrm{d}\Omega=\int_\Omega q\cdot A^*q^*\,\mathrm{d}\Omega. \tag{11}$$

这里，A^* 为 A 的伴随算子：

$$A^*q^*=-p_s\vec{v}_2\cdot\nabla_2 q^*-p_s\dot{\sigma}\frac{\partial q^*}{\partial\sigma}+\alpha p_s q^*-\frac{k_h}{a^2}\Delta_2(p_s q^*)-\frac{k_v}{H^2}\frac{\partial^2}{\partial\sigma^2}(p_s q^*).$$

3　用伴随方程来解决水汽的四维同化问题

从物理角度来看，水汽的四维同化问题，其实质是利用初始时刻以后的观测值来修正初始观测值，以进行预测，并保证修正后的初值具有某种最优性。

根据曾庆存[2]的研究，水汽垂直分布的遥测，可归结为"在已知气温垂直分布条件下，能否通过测量射出辐射量而间接推出辐射物质含量的垂直分布"（辐射物质含量在本文中指水汽）。关于这个问题，曾庆存已作过系统研究。本文假设已知观测的水汽场的时间和空间分布，讨论其同化问题。

文献[3]指出，一个量是正态分布，其前提是该量必须是由大量独立的而且均匀小的变量相加而成。这就是所谓的中心极限定理。就实际气象资料的观测误差而言，可以认为风场、气压场和温度场的观测误差的分布是正态分布。但对于水汽而言，其观测误差并不服从正态分布。这是因为水汽是一个快变化的物理量，并且水汽q_v满足

$$0\leqslant q_v\leqslant 1.$$

也就是说，它是一个有界非负的物理量，并且水汽q_v对温度变化、相变过程和辐射过程等是很敏感的。因此，从时间和空间角度看，水汽都不是大量独立而且均匀小的变量相加而成，并且其观测误差可能也是这样的，故不能认为水汽及其观测误差服从正态分布。基于以上考虑，本文认为将水汽资料与其他观测误差进行正态分布的气象资料联合同化是一种不合适的方法。故本文单独对水汽观测资料进行同化。

做目标函数[4]

$$J(q_0)=\frac{\gamma}{2}\int_\Omega p_s|q_0-q_b|^2\mathrm{d}\Omega+\frac{\alpha}{2}\int_0^T\int_\Omega p_s|q-q_{obs}|^2\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}t, \tag{12}$$

其中，q_b是背景场，q_{obs}是观测值，权重γ、α是（λ,θ,σ）的函数，且$\gamma>0$，$\alpha>0$，q由（6）、（7）给出。

其一阶变分为

$$\delta J=\nabla_{q_0}J\cdot\delta q_0=\gamma\int_\Omega p_s(q_0-q_b)\delta q_0+\alpha\int_0^T\int_\Omega p_s(q-q_{obs})\cdot\delta q\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}t.$$

原模式

$$\begin{cases}\dfrac{\partial}{\partial t}(p_s q)+Aq=p_s s,\\ \left.\dfrac{\partial q}{\partial\sigma}\right|_{\sigma=0}, \quad \left.\left(\dfrac{\partial q}{\partial\sigma}+cq\right)\right|_{\sigma=1}=d,\\ q|_{t=0}=q_0\end{cases} \tag{6}$$

的切线性模式（TLM）为

$$\begin{cases}\dfrac{\partial}{\partial t}(p_s\delta q)+A\delta q=0,\\ \left.\dfrac{\partial\delta q}{\partial\sigma}\right|_{\sigma=0}=0, \quad \left.\left(\dfrac{\partial\delta\sigma}{\partial\sigma}+c\delta q\right)\right|_{\sigma=1}=0,\\ \delta q|_{t=0}=\delta q_0.\end{cases} \tag{13}$$

切线性模式（13）的伴随模式为

$$\begin{cases}-p_s\dfrac{\partial}{\partial t}\delta q^*+A^*\delta q^*=p,\\ \left.\dfrac{\partial\delta q^*}{\partial\sigma}\right|_{\sigma=0}=0, \quad \left.\left(\dfrac{\partial\delta q^*}{\partial\sigma}+c\delta q^*\right)\right|_{\sigma=1}=0,\\ \delta q^*|_{t=T}=0.\end{cases} \tag{14}$$

将方程（13）乘以δq^*，分部积分、利用边界条件及初始条件，有

$$\begin{cases}\displaystyle\int_0^T\int_\Omega p_s\delta q\frac{\partial\delta q^*}{\partial t}\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}t+\int_\Omega(p_s\delta q_0\delta q^*)|_{t=0}\mathrm{d}\Omega=\int_0^T\int_\Omega A^*\delta q^*\cdot\delta q\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}t,\\ \displaystyle\int_0^T\int_\Omega\left(p_s\left(-\frac{\partial}{\partial t}\right)+A^*\right)\delta q^*\cdot\delta q\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}t=\int_\Omega p_{s0}\cdot\delta q_0\delta q_0^*\mathrm{d}\Omega.\end{cases} \tag{15}$$

其中，$p_{s0}=p_s|_{t=0}$，$\delta q_0^*=\delta q^*|_{t=0}$。

若在（15）中令$p=\alpha p_s(q-q_{obs})$，则

$$-p_s\frac{\partial}{\partial t}\delta q^*+A^*\delta q^*=\alpha p_s(q-q_{obs}).$$

将上式代入（12）式，并应用（15）式，有

$$\delta J = \nabla q_0 J \cdot \delta q_0 = \gamma \int_\Omega p_{s0}(q_0 - q_b)\delta q_0 \mathrm{d}\Omega + \int_\Omega p_{s0}\delta q_0 \delta q_0^* \mathrm{d}\Omega$$
$$= \int_\Omega p_{s0}[\gamma(q_0 - q_b) + \delta q_0^*]\delta q_0 \mathrm{d}\Omega.$$

从$\delta J = 0$可知

$$q_0 = q_b - \delta q_0^* / r. \tag{16}$$

综上所述，水汽的四维同化问题，就转化成：极值点由（16）给出，其中δq_0^*是(14) 式的解在 $t=0$ 时之值，而（14）中的$p = \alpha p_s(q - q_{\mathrm{obs}})$，$q$ 由（6）给出。

一般而言，极值点q_0未必为最小值点，即使为最小值点也未必惟一。但对于水汽方程而言，下文将证明极值点即为最小值点，并且是惟一的。

4 关于极值点惟一性的讨论

首先，证明由（16）给出的极值点q_0为最小值点。这只须证明，对任何δq_0，都有

$$J(q_0 + \delta q_0) - J(q_0) \geqslant 0. \tag{17}$$

事实上

$$J(q_0 + \delta q_0) - J(q_0) = \delta J(q_0) + \gamma \int_\Omega p_s |\delta q_0|^2 \mathrm{d}\Omega + \alpha \int_0^T \int_\Omega p_s |\delta q|^2 \mathrm{d}\Omega \mathrm{d}t. \tag{18}$$

由（16）式知$\delta J(q_0) = 0$。因而，(17）式成立。

再来说明，满足（6）、(14)、(16）的最小值点q_0是惟一的。明确这一点对数值解法极有帮助。

若q_{10}、q_{20}是两个最小值点，利用（18）式容易证明

$$J(q_{10}) = J(q_{20}).$$

若$q_{10} - q_{20} \neq 0$，再次利用（18）式，可知（18）式左边为 0，而右边大于零，这就导致矛盾。因而，一定有$q_{10} = q_{20}$。这就证明了最小值点q_0是惟一的。

一般地，很难确定极值点的惟一性，但在本文所讨论之情形，容易证明这一点，这为数值求解提供了指导。

5 结论

本文的结论如下：

(1) 根据水汽相变等过程为快过程和水汽观测误差不服从正态分布，指出将水汽资料与其他观测误差进行正态分布的气象资料联合同化，是一种不合适的方法。故本文单独对水汽资料进行同化。

(2) 在下边界为第三类边界条件下，推导了适合于数值天气预报的水汽方程的伴随算子。

(3) 利用目标函数的极小值性，建立了水汽方程的四维资料同化问题的伴随算法。

(4) 证明了目标函数给出的极值点为最小值点，且是惟一的。为数值试验（本文的第二部分）作好了准备。

参 考 文 献

1 曾庆存．数值天气预报的数学物理基础，第一卷，北京：科学出版社，1979.

2 曾庆存，大气红外遥测原理，北京：科学出版社，1974.

3 王梓坤，概率论基础及其应用，北京：北京师范大学出版社，1996.

4 Talagrand, O. and Courtier, P., Variation assimilation of meteorological observations with the adjoint vorticity equation. I: Theory, *Q. J. R. Meteor. Sci.*, 1987, **113**, 1311～1328.

The Four–Dimension Assimilation Problem of Water Vapour by Means of the Adjoint Equation Part I. Theory

Wang Bizheng, Zeng Qingcun and Mu Mu

(*State Key Laboratory of Numerical Modeling Atmospheric Sciences and Geophysical Fluid Dynamics, Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100029)

Abstract This is Part I of the study on the four–dimension variation data assimilation of water vapour equation. Because the phase change of water vapour is much faster than other physical processes and the error of water vapour data observation does not have Guassian distribution, the water vapour assimilation is carried out seperately. The adjoint equation of the water vapour equation is derived in the spherical coordinate system. A method of computing the minimum of the objective (cost) function is presented by using the adjoint method. The uniqueness of the minimum of the objective function has been proven, which provides the framework of the Part II of this study, i.e. the numerical experiments.

Key words: adjoint equation; water vapour equation; 4–D variation assimilation