中国科学: 地球科学 2015 年 第 45 卷 第 3 期: 366 ~ 376
www.scichina.com earth.scichina.com
《中国科学》杂志社
SCIENCE CHINA PRESS

论 文

基于奇异值分解的计算条件非线性最优扰动的集合投影算法

陈磊[①②], 段晚锁[①], 徐辉[①*]

① 中国科学院大气物理研究所, 北京 100029;
② 中国科学院大学地球科学学院, 北京 100049
* 联系人, E-mail: xuh@lasg.iap.ac.cn

收稿日期: 2014-04-11; 接受日期: 2014-08-09; 网络版发表日期: 2015-02-11
国家自然科学基金项目(批准号: 41176013, 41230420 和 41006007)资助

摘要 条件非线性最优扰动(CNOP)是线性奇异向量(LSV)在非线性领域的拓展, 它代表了在一定物理约束条件下且在预报时刻导致最大预报误差的一类初始误差. CNOP类型的初始误差在天气和气候的可预报性研究中具有重要作用. 在求解复杂数值模式的 CNOP 中, 一般通过数值计算目标函数关于初始扰动的梯度, 并沿着梯度下降方向在相空间搜索极值点而得到 CNOP. 计算梯度常用的一个方法是利用伴随模式得到梯度, 然而发展一个复杂模式的伴随模式是困难且非常繁琐的, 大大限制了 CNOP 方法在复杂数值模式中的广泛应用. 本文在前人工作的基础上, 提出了一种基于奇异值分解(SVD)的集合投影算法. 该算法避免了集合投影算法中采用的局地化步骤, 从而克服了局地化半径的经验性选择带来的不确定性. 将该算法应用于中等复杂程度的 ENSO 预报模式中计算CNOP. 结果表明, 用新集合投影算法得到的CNOP能够有效地逼近用伴随算法得到的 CNOP, 抓住了 CNOP 的主要空间特征. 因此, 本文提出的基于 SVD 的集合投影算法是计算 CNOP 的一种有效近似算法.

关键词
奇异值分解
集合投影算法
ENSO
条件非线性最优扰动

寻找最快增长的初始误差是数值天气预报和气候预测可预报性研究中的重要问题之一. 最优化方法是寻找最快增长初始误差的有效方法. Lorenz(1965)率先将数学中估计最优初始扰动的线性奇异向量(LSV)方法引入到气象学中探讨最快增长初始误差问题. 随后, LSV 方法被广泛地应用于天气和气候的可预报性研究中(Palmer 等, 1998; Buizza 和 Montani, 1999). 然而, LSV 代表了线性模式的最快增长方向, 在非线性模式中, LSV 只在初始扰动较小、预报时间较短的情形下才有效. 也就是说, LSV 不能刻画非线性模式中最快增长的初始扰动, 不能充分反映数值模式中非线性物理过程对初始误差增长的影响.

为了克服 LSV 的局限性, Mu 等(2003)提出了条件非线性最优化扰动(CNOP)方法. CNOP 是在一定的初始扰动大小范围内, 在未来预报时刻具有最大非

中文引用格式: 陈磊, 段晚锁, 徐辉. 2015. 基于奇异值分解的计算条件非线性最优扰动的集合投影算法. 中国科学: 地球科学, 45: 366–376
英文引用格式: Chen L, Duan W S, Xu H. 2015. A SVD-based ensemble projection algorithm for calculating the conditional nonlinear optimal perturbation. Science China: Earth Sciences, 58: 385–394, doi: 10.1007/s11430-014-4991-4

线性发展的一类初始扰动. 物理上, CNOP 代表了在预报时刻能够导致最大预报误差的一类初始误差. Mu 等(2003, 2007), Duan 等(2004, 2009, 2012)和 Yu 等(2009, 2012)先后利用 CNOP 方法研究了 El Niño 事件的最优前期征兆、最快增长初始误差和春季预报障碍等问题, 充分揭示了非线性物理过程对 El Niño 可预报性的影响, 为提高 El Niño 的预报技巧提供了有用的信息. CNOP 方法还被用于台风目标观测敏感区的确定(Qin 等, 2013; Qin 和 Mu, 2011)和生态系统平衡态转移等问题的研究(Sun 和 Mu, 2011). 总之, CNOP 方法正逐步成为天气和气候可预报性研究的重要方法之一.

CNOP 方法的应用首先需要求解 CNOP. 在数学上, 求解 CNOP 是一个求解非线性泛函全局极大值的问题, 因而需要一个合适的非线性优化算法. 优化算法一般分为两类: 需要计算梯度的传统优化算法(如 Conjugate Gradient, LBFGS 和 SPG2 等)和不需要计算梯度的进化算法(如遗传算法、粒子群算法等). 但是对于大气和海洋科学研究中的复杂海气耦合数值模式, 其维数一般超过 10^6~10^7, 用智能算法求解 CNOP, 其计算代价是不可接受的. 对于需要计算梯度的传统优化算法, 数值计算梯度最有效率的方法是利用伴随模式, 然而, 许多数值模式没有现成的伴随模式, 特别对于复杂数值模式, 编写伴随模式的工作量是非常巨大和繁琐的, 且耗时很长. 这些困难都制约了 CNOP 方法的进一步推广应用.

为了克服上述 CNOP 计算的困难, Wang 等(2010)利用集合投影方法(Monte Carlo 方法)近似统计切线性矩阵, 计算目标函数关于初始扰动的梯度, 进而求解 CNOP. 该算法避免了利用伴随模式计算梯度, 又具有较高的计算效率, 推广了 CNOP 方法的使用范围. 然而, 该算法的一个关键技术是利用局地化技术缓解观测站点和模式格点间的虚假相关性. 在这个过程中, 局地化半径需要人为确定, 带有一定的经验性. 本文基于 Wang 等(2010)算法, 提出了一种基于 SVD 的新集合投影算法. 该算法利用数值模式中有关变量的历史时间序列的主要模态构造 CNOP, 把求解 CNOP 的问题, 转化为求解 SVD 主要模态的最优权重系数问题, 这不仅考虑了 CNOP 的物理意义, 而且由于控制变量由物理量转为 SVD 主要模态的权重系数, 避免了 Wang 等(2010)算法中局地化半径的经验性选择, 同时降低了优化问题的维数.

1　CNOP 方法和集合投影算法

1.1　CNOP 方法

CNOP 是非线性模式中具有一定物理约束条件、且在预报时刻具有最大非线性发展的一类初始扰动. CNOP 由下列优化问题求得

$$J(x_{0\delta})=\max_{\|x_0\|_a\leqslant\delta}\left\|\boldsymbol{M}(X_0+x_0,t_0,t)-\boldsymbol{M}(X_0,t_0,t)\right\|^2, \quad (1)$$

式中, X_0 是参考态的初始场, x_0 是初始场 X_0 的扰动, t_0 和 t 分别是模式系统演变的初始时刻和终止时刻, δ 是初始场扰动的约束半径, $\boldsymbol{M}$ 代表非线性传播算子. CNOP 可以用非线性优化算法计算. 通常的优化算法(如 LBFGS, SQP 和 SPG2 等)都是用于求解目标函数的极小值. 为了方便利用现有的优化算法计算 CNOP, 令 $J_1(x_0)$=–$J(x_0)$, 可以等价地求解优化问题:

$$J_1(x_{0\delta})=\min_{\|x_0\|_a\leqslant\delta}J_1(x_0). \quad (2)$$

对于传统的非线性优化算法来说, 关键是获取目标函数关于初始扰动 x_0 的梯度. 对于上述的目标函数, 其关于初始场扰动的梯度是 $-2\boldsymbol{H}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{M}(X_0+x_0,t_0,t)-\boldsymbol{M}(X_0,t_0,t))$. 其中 $\boldsymbol{H}^{\mathrm{T}}$ 是切线性模式 $\boldsymbol{H}$ 的伴随模式. 对于一个复杂的数值模式, 发展其伴随模式工作量巨大且非常耗时, 大大限制了 CNOP 方法的使用范围. 为了克服这个困难, Wang 等(2010)提出了一种基于集合投影的算法来计算 CNOP, 该算法不使用伴随模式计算梯度, 方便了 CNOP 的广泛使用.

1.2　集合投影算法

Wang 等(2010)集合投影算法的主要思想是: 利用集合方法, 统计出梯度公式中所需要的切线性矩阵 $\boldsymbol{H}$, 进而求解 CNOP. 在该算法中, 切线性矩阵的近似表达式为:

$$\boldsymbol{H}\approx p_y(p_x^{\mathrm{T}}p_x)^{-1}p_x^{\mathrm{T}}, \quad (3)$$

式中, p_x=(x_0^1, x_0^2, ... , x_0^n)是在预报初始时刻的 n 个扰动样本, p_y=(y^1, y^2, ... , y^n)对应于扰动样本 p_x 在预报终止时刻的发展. Houtekamer 等(2001)指出, 如果样本规模远远小于模式中物理量的自由度(格点数×物理量个数), 在距离比较远的格点上, 初始误差和对应的预报误差场间会产生虚假相关性. 为了缓解这些虚假相关性, 可以采用局地化步骤.

Wang 等(2010)的具体做法为: 用 $\boldsymbol{H}\approx\rho\circ p_y(p_x^Tp_x)^{-1}p_x^{\mathrm{T}}$ 近似代表切线性矩阵, 式中∘代表

矩阵逐元相乘的舒尔积. 矩阵 ρ 中的元素为 $\rho_{i,j}=C_0(d_{i,j}^h/d_0^h)\times C_0(d_{i,j}^v/d_0^v)$, 其中 $d_{i,j}^h$, d_0^h, $d_{i,j}^v$ 和 d_0^v 分别代表格点之间的水平距离、水平局地化半径、垂直距离和垂直局地化半径, 而 C_0 是一个单调递减的光滑滤波函数, 可以采用如下形式:

$$C_0(r)=\begin{cases}-\dfrac{r^5}{4}+\dfrac{r^4}{2}+\dfrac{5r^3}{8}-\dfrac{5r^2}{3}+1, & 0\leqslant r<1,\\ \dfrac{r^5}{12}-\dfrac{r^4}{2}+\dfrac{5r^3}{8}+\dfrac{5r^2}{3}-5r+4-\dfrac{2r^{-1}}{3}, & 1\leqslant r<2,\\ 0, & r\geqslant 2,\end{cases} \tag{4}$$

式中, r 可以是 $d_{i,j}^h/d_0^h$ 或者是 $d_{i,j}^v/d_0^v$. 从式(3)中可以看出, 用集合投影算法获得的切线性矩阵 $\boldsymbol{H}$ 的近似依赖于局地化半径大小的选取, 而局地化半径大小的选取一定程度上又依赖于样本的质量和数量. 这些因素都使得切线性矩阵的近似效果受人为经验的影响. 考虑到上述局限性, 本文提出一种基于 SVD 的新集合投影算法. 通过该新算法得到的 CNOP 能反映数值模式的动力特征, 并且不依赖于局地化半径的选取.

2 基于 SVD 的集合投影算法

一个受到外力驱动的耗散系统, 经过长期演变其状态会趋向于一个低维的吸引子(Teman, 1991; Osborne 和 Pastorello, 1993; Foias 和 Teman, 1997), 表达式如下:

$$X=\sum_{i=1}^{\infty}a_i(t)u_i, \tag{5}$$

式中, X 是模式中某些物理量的状态空间, u_i 是希尔伯特空间中的空间模态基函数, 当 $i\to\infty$时, $a_i(t)\xrightarrow{\mu}0$, μ 是概率测度.

把连续系统投影到离散的数值模式, 对应的表达式为

$$\boldsymbol{M}(X^*,t^*,t)=\sum_{i=1}^{N}\sigma_i u_i v_i^{\mathrm{T}}, \tag{6}$$

式中, N 是数值模式的自由度, σ_i 是从大到小排列的奇异值, 而 u_i 是奇异值 σ_i 对应的空间模态, v_i 是模态 u_i 的时间序列. 可以找到一个整数 $m(m\leqslant N)$, 使得当 $i\geqslant m$ 时, $|\sigma_i|<\varepsilon$, (ε 是一个接近 0 的数), 进而把 N 维系统截断为 m 维的近似系统.

为了考察 m 维截断系统对原始 N 维系统的近似程度, 可以应用概率论中的一个基本不等式:

$$P\left\{\left|x-\sum_{i=1}^{m}a_iu_i\right|>\varepsilon\right\}=P\left\{\left|\sum_{i=m+1}^{N}a_iu_i\right|>\varepsilon\right\}<\frac{\sum_{i=m+1}^{N}\sigma_i^2}{N\varepsilon^2}. \tag{7}$$

式(7)近似地给出了对模式进行降维而造成的信息损失. 严格来说, 这个公式只能应用于无限维($N\to\infty$)的系统, 但从该公式可以看到: 如果选取合适的空间模态 u_i, 使得$|\sigma_i|$随着 i 的增大而单调下降地足够快, 那么可以选取数目较小的 m 个空间模态作为基底去近似地构建整个系统的状态空间. 对于这个问题, SVD 提供了一个在统计意义上有效选取空间模态的标准降维方法.

选取有限的 m 个空间模态的线性组合近似表达离散系统的状态向量, 则目标函数关于模式初始场的优化问题(2)转化为关于所选取基底线性组合权重系数的优化问题(8):

$$\begin{cases}J_1(x_{0\delta})=\min\limits_{\|x_0\|_\delta\leqslant\delta}(-\left\|\boldsymbol{M}(X_0+x_0,t_0,t)-\boldsymbol{M}(X_0,t_0,t)\right\|^2),\\ x_0=\sum\limits_{i=1}^{m}a_iu_i,\end{cases} \tag{8}$$

式中, m 是选取基底的截断数目, a_i 是选取基底的权重系数.

令 $F(a)=\boldsymbol{M}(X_0+\sum_{i=1}^{m}a_iu_i,t_0,t)-\boldsymbol{M}(X_0,t_0,t)$, 则优化问题(8)可表达为

$$J_1(a_\delta)=\min_{\|a\|_\delta\leqslant\delta}(-\left\|F(a)\right\|^2). \tag{9}$$

目标函数关于系数的梯度为

$$\frac{\partial(-F(a)^2)}{\partial a}=-2\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}F(a). \tag{10}$$

模式针对于系数的切线线性矩阵 $\boldsymbol{L}$ 满足:

$$\begin{cases}(\Delta y_1,\cdots,\Delta y_i,\cdots,\Delta y_m)\\ \quad\approx\boldsymbol{L}\mathrm{diag}(\Delta a_{1,1},\cdots,\Delta a_{i,i},\cdots,\Delta a_{m,m}),\\ \Delta y_i=\boldsymbol{M}(X_0+\Delta a_{i,j}u_j,t_0,t)-\boldsymbol{M}(X_0,t_0,t).\end{cases} \tag{11}$$

为了求逆方便, 可以取 $\Delta\bar{a}_{i,j}=\delta_{i,j}$. 也就是说, 将直接利用差分($\Delta y_1$, …, Δy_i, …, Δy_m)和($\Delta a_{1,1}$, …, $\Delta a_{i,i}$, …, $\Delta a_{m,m}$)去近似计算梯度. 该方法计算梯度的代价直接依赖于选取基底的数目. 在一般情况下, 计算代价是大于直接用伴随方法的. 但是由于可以选取较少数目的基底, 从而在一定程度上降低计算代价. 本文将用 Birgin 等(2000)提出的求解目标函数极

小值算法(SPG2), 在用上述思路计算梯度的基础上, 通过获取所选择基底的最优权重系数组合, 进而得到 CNOP.

3　基于 SVD 的集合投影算法在求解 CNOP 中的应用

本节以研究 ENSO 事件的最优前期征兆这一物理问题为例, 考察 SVD 集合投影算法计算 CNOP 的有效性. 即考察海表温度距平(SSTA)和斜温层深度距平(THA)具有什么样的初始模态, 使得热带太平洋 SSTA 有最大发展, 导致 ENSO 事件的发生. 为了寻找最容易发展成ENSO事件的最优前期征兆, 分别用 SVD 集合投影算法和伴随算法, 计算以气候平均态为参考态的 CNOP, 并比较两种算法得到的最优前期征兆和 SSTA 在预报时刻的发展, 以检验 SVD 集合投影算法计算 CNOP 的有效性. 前人许多工作用 LSV 方法, 研究 ENSO 事件的最优前期征兆问题(Blumenthal, 1991; Thompson 和 Battisti, 1995; Moore 和 Kleeman, 1996). 因此, 本文也计算了 Zebiak-Cane 模式(ZC 模式; Zebiak 和 Cane, 1987)的 LSV, 其作为前期征兆信号以及导致的 SSTA 发展, 也参与了数值试验结果比较. 本文所采用的数值模式是中等复杂程度的 ZC 海气耦合模式.

3.1　模式和数值试验方案

ZC 模式因成功地预报出 1986~1987 年的 El Niño 事件而被广泛承认, 随后被广泛应用于 ENSO 预测、ENSO 可预报性及其动力学的研究(Mantua 和 Battisti, 1995; Thompson, 1998; Cai 等, 2003). 近来, ZC 模式也被用来计算 CNOP 研究 ENSO 事件误差增长的动力学机制(Mu 等, 2003, 2007; Duan 等, 2004, 2009, 2012; Yu 等, 2009, 2012). 前人计算 ZC 模式的 CNOP 使用伴随方法, 然而伴随方法限制了 CNOP 方法在其他模式中的应用. 为了拓展 CNOP 的应用, 本节尝试将基于 SVD 的集合投影算法应用于 ZC 模式计算 CNOP.

ZC 模式有三个模块组成: (1) 大气模块, 包含区域为 101.25°E~73.125°W 和 29°S~29°N; (2) 海洋动力模块, 包含区域为 124°E~80°W 和 28.75°S~28.75°N; (3) 海表温度距平(SSTA)发展方程, 区域为 129.375°E~84.375°W 和 19°S~19°N. 其中海洋动力模块的水平分辨率为 2°×0.5°, 大气模块和 SSTA 发展方程的分辨率为 5.625°×2°. 本文选取的初始场是海表温度异常(SSTA)和斜温层深度异常(THA), 其有效范围都是 129.375°E~84.375°W 和 19°S~19°N. 这样相关的物理量是一个 1080 维的向量.

对于 ENSO 事件的最优前期征兆问题, 考虑这样的优化问题:

$$J(x_{0\delta})=\max_{\|x_0\|_\delta\leqslant\delta}\|T_\tau\|^2, \tag{12}$$

式中, $x_0=(w_1T_0, w_2H_0)$, 是无量纲化的SSTA和THA, $w_1=(2.0℃)^{-1}$, $w_2=(50\ \mathrm{m})^{-1}$, 分别是对应特征尺度的倒数, $\|x_0\|_\delta\leqslant\delta$ 是约束条件, 本文取为 $\|x_0\|_\delta\leqslant 1.0$, $\|x_0\|_\delta=\sqrt{\sum_{i,j}[(w_1T_{0\,i,j})^2+(w_2H_{0\,i,j})^2]}$, 这里$(i, j)$代表了所选区域的格点, $T_{0\,i,j}$和$H_{0\,i,j}$分别代表了格点(i, j)上的初始 SSTA 和 THA. SSTA 的发展用 $\|T_\tau\|=\sqrt{\sum_{i,j}(w_1T_{\tau\,i,j})^2}$ 来衡量, 其中 $T_{\tau\,i,j}$ 是在预报 τ 时刻 SSTA 的发展. 这样, 通过寻找最优的初始场 $x_{0\delta}$, 使得目标函数在预报时刻发展最大.

在应用新集合投影算法计算 CNOP 前, 需要先检验数值模式的长期积分行为是否能近似用部分比较稳定且数目有限的模态来代表. 将 ZC 模式的所有初始距平场设置为零, 用风强迫数值模式, 5 个月后撤去风强迫, 将模式继续积分 200 年, 得到一组样本, 对该样本进行无量纲化. 再对无量纲化后的样本进行奇异值分解, 得到一系列空间模态 $u_i(i=1, \cdots, m)$. 这些空间模态彼此之间是单位正交的, 因此可以把 CNOP 中约束初始场扰动大小的约束条件转化为用线性组合的权重系数来表示: $\|a\|_\delta\leqslant 1.0$, 其中 a 代表了上述线性组合中各空间模态的系数组成的权重系数向量. 在此基础上, 计算目标函数关于权重系数的梯度, 进而得到 CNOP.

图 1 给出了 ZC 模式长期积分样本前 100 个 SVD 奇异值平方的分布. 可以看出, 其奇异值呈现快速下降趋势. 根据第三节的讨论, 此情形下可以选取较少的基底来近似表示整个状态空间.

3.2　数值结果

为了评估基于 SVD 集合投影算法的有效性, 本文针对不同的初始月份和不同的基底数目, 用新集

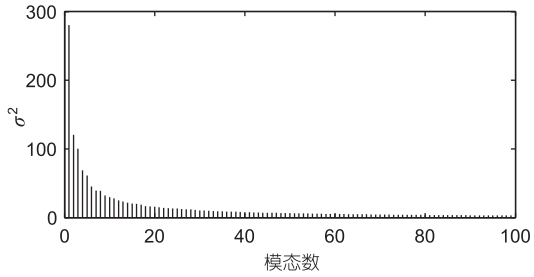

图 1　对 ZC 模式长期积分时间序列 SVD 分解所得到的前 100 个奇异值平方的分布图

σ是奇异值

合投影算法分别进行了优化时间长度为 9 个月的数值试验, 并把试验结果与其他方法找到的最优前期征兆结果进行对比.

(1) 目标函数值极大值的比较. 本文首先比较了分别用新集合投影算法和伴随算法计算 CNOP 导致的预报时刻 SSTA 最大发展的范数, 即优化结束时目标函数的极大值.

图 2 给出了在不同优化初始时刻选取不同基底数目时, 新集合投影算法得到的最优目标函数值 J^* 与伴随算法得到的最优目标函数值 J 之间的比值, 比值越大, 说明前者对后者的近似效果越好. 图中横轴是新集合投影算法选取的基底数量, 纵轴是优化初始月份, 粗虚线是逼近效果为 70%的等值线.

从图 2 可以看到, 对于所有的优化初始时间, 当所选基底数量逐渐增加时, 用新集合投影算法得到的目标函数极大值, 一致逐渐逼近于用伴随算法的结果, 并且当所选基底的数量达到 80 个时, 前者对后者的逼近效果都可以达到 70%以上. 对于不同的优化初始时间, 当基底数量从 10 个增加到 30 个时, 近似效果改善明显, 而基底数量从 30 个增加到 100 个时, 计算量大大增加, 改善速度变缓. 图中蓝色水平直线标注了逼近效果最理想的初始优化时刻 4 月份的情况, 当基底数从 10 个增加到 30 个时, 新集合投影算法目标函数的逼近程度从 40%提高到 70%, 当基底数从 30 个增加到 100 个时, 目标函数的逼近程度没有达到 90%. 以上结果说明, 通过选取合适的基底数目, 用新集合投影算法计算 CNOP, 可以导致预报时刻 SSTA 的较大发展, 并且选取的基底数目越大, SSTA 发展的范数越逼近基于伴随方法得到的范数.

从图 2 还可以看到, 对于不同的优化初始时间, 新集合投影算法为了达到对伴随算法一致的逼近效

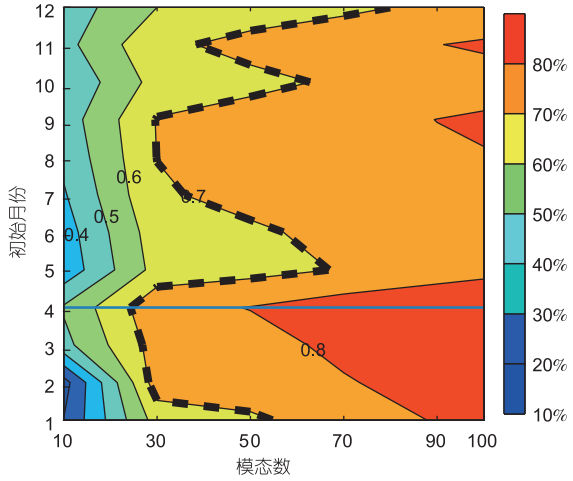

图 2　新集合投影算法得到的目标函数值与伴随算法得到的目标函数值的比值

横轴表示基底数量, 纵轴表示优化的初始月份, 粗虚线是 70%等值线, 蓝色实线标注了优化初始时间为 4 月份的情况

果, 需要的基底数量不同. 以粗虚线标注的达到 70%的近似效果为例, 优化初始时间为 2, 3, 4, 8 和 9 月份时, 需要约 30 个基底, 优化初始时间为 1, 5, 6, 7, 10 和 11 月份时, 需要 40~70 个基底, 而 12 月份则需要 80~90 个基底. 在后面的分析中, 本文将重点以 4 月份(选取 30 个基底)和 10 月份(选取 70 个基底)为例, 考察用几种算法得到的目标函数极大值、ENSO 最优前期征兆信号以及预报时刻 SSTA 非线性发展空间结构的异同.

LSV 方法也经常被用来研究 ENSO 事件的最优前期征兆问题. 因此, 也把新集合投影方法的数值结果和 LSV 方法的结果进行了比较, 考察用这两种方法找到的最优前期征兆, 与基于伴随算法结果的接近程度. 图 3 给出了初始月份为 4 月份时, 基于三种算法得到的预报时刻 SSTA 最大发展范数随约束半径大小的变化, 这里重点比较三种算法得到的最优前期征兆的非线性发展. 可以看到, 对于不同的约束半径, 利用伴随算法得到的最优前期征兆, 使得 SSTA 在预报时刻的范数始终发展最大; 当约束半径较小时, LSV 的在非线性模式中的发展更接近基于伴随模式的结果; 随着约束半径的增大, ZC 模式中的非线性作用增强, 基于新集合投影算法的结果更接近基于伴随模式的结果. 由此可见, 用新集合投影算法计算 CNOP 得到的目标函数极大值, 其有效性不低于 LSV 方法.

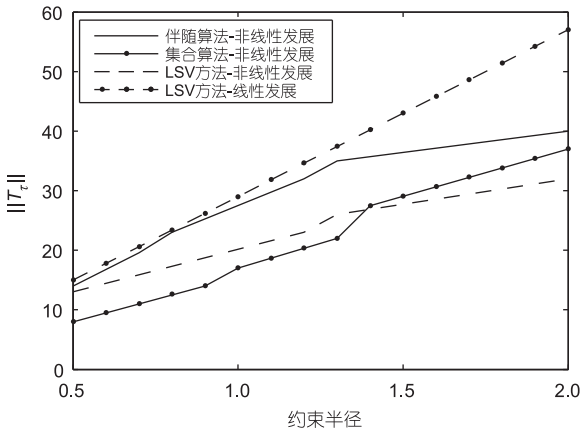

图 3　初始月份为 4 月份，分别基于 SVD 新集合投影算法、伴随算法和 LSV 方法得到的目标函数值

黑色实线是伴随算法得到的结果，黑点标记的黑色实线是新集合投影算法的结果(选取 30 个基底)，黑色虚线是 LSV 在非线性模式中的发展，黑点标记的黑色虚线是 LSV 在切线性模式的发展

值得指出的是，这里新集合投影算法选取的基底数是 30 个，可以通过增加基底数量，进一步提高新集合投影算法对伴随算法结果的逼近效果．另外，由于新集合投影算法计算 CNOP 时，不需要切线性模式和伴随模式，扩大了 CNOP 方法的应用范围和灵活性．

(2) 最优前期征兆及 SSTA 发展空间结构的比较．上节内容通过比较用新集合投影算法、伴随算法和 LSV 方法计算目标函数极大值的大小，评估了新集合投影算法计算 CNOP 的有效性．本节将通过比较三种方法得到的 ENSO 最优前期征兆信号和及其导致的预报时刻 SSTA 最大发展的空间结构，来评估新集合投影算法计算 CNOP 的有效性．

图 4 和 5 给出了约束半径为 1.0、初始时刻分别是 4 和 10 月份时，利用三种算法得到的最优前期征兆及其导致的 9 个月后 SSTA 非线性发展．从图 4 和 5 可以看到，三种算法得到的最优前期征兆 9 个月后都发展成 El Niño 事件．比较其强度，基于伴随算法的最优前期征兆发展的 El Nino 事件强度最大，基于 LSV 方法的 El Niño 事件强度次之，基于新集合投影算法的 El Nino 事件最弱．这个结果和图 3 中比较三者范数大小的结论一致，说明用新集合投影算法寻

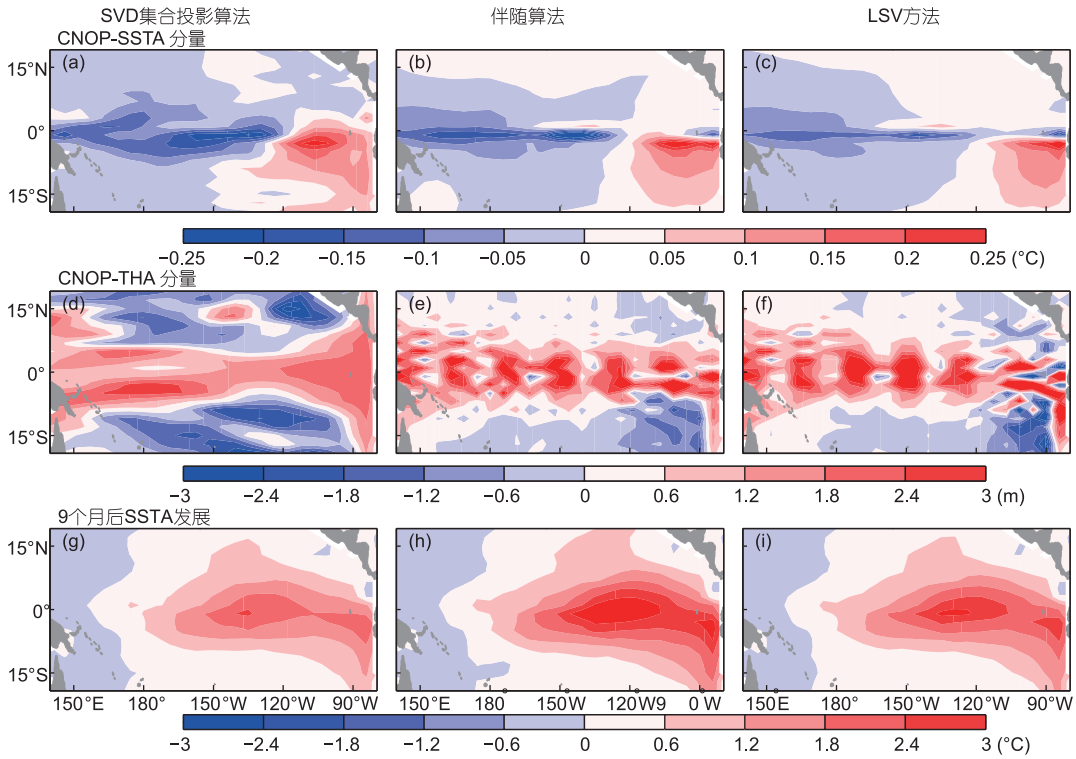

图 4　优化初始时间为 4 月份时，基于不同算法得到的最优前期征兆及 SSTA 的发展图

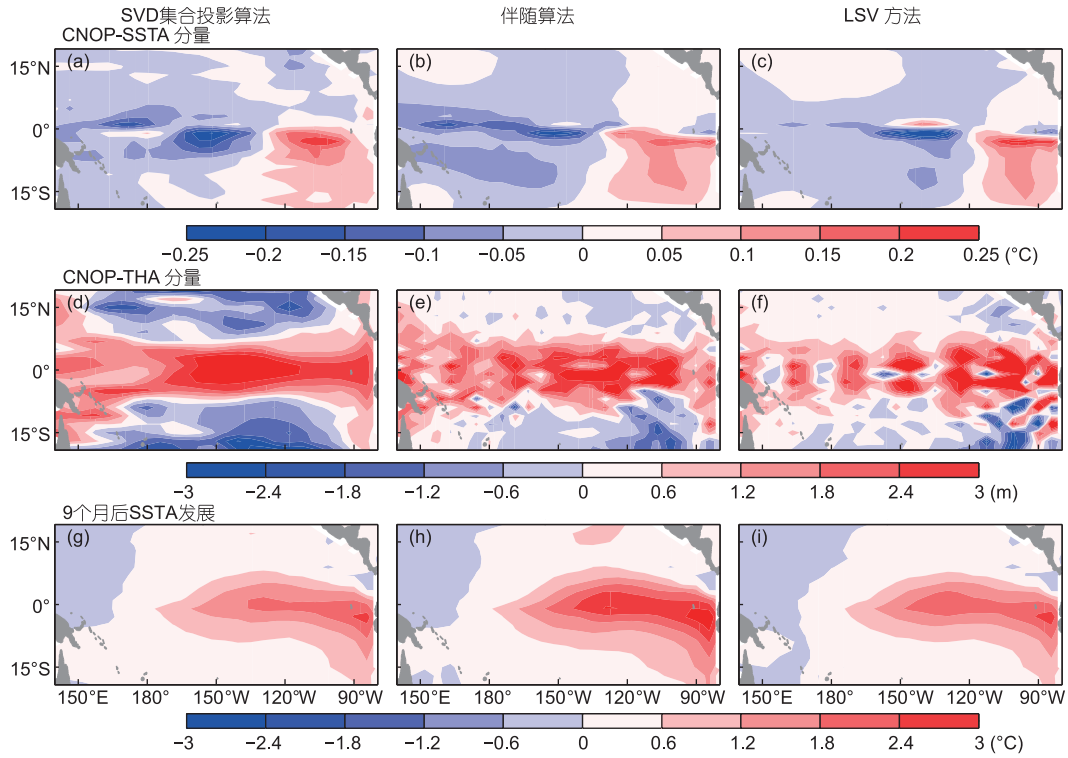

图 5　优化初始时间为 10 月份，基于不同算法得到的最优前期征兆及 SSTA 的发展图

找 ENSO 事件的最优前期征兆信号是有效的，其结果能发展成 El Niño 事件.

从图中还可以看到，相对于基于伴随算法得到的最优前期征兆信号，基于新集合投影算法的前期征兆基本抓住了其主要大尺度特征，对于 SSTA 分量，都呈现出赤道东太平洋正距平、中西太平洋负距平的偶极子结构，对于 THA 分量，都表现为赤道太平洋斜温层的一致加深.

然而，我们也不难看出，基于新集合投影算法和伴随算法得到的最优前期征兆 THA 分量，其结构存在一定的差异. 伴随算法得到的 THA 小尺度信号较多，而新集合投影算法得到的 THA 相对比较光滑，并在离赤道纬度较高的热带地区出现较大的距平，这可能是由于新集合投影算法选取了在系统长期行为中解释方差比较大的部分基底，并用这些基底构建 CNOP. 这种截选方式使得新集合投影算法即使没有伴随模式，也可以通过降维近似计算 CNOP，但其局限性是过滤了一些尽管解释方差较小但可能有贡献的信号，并把这部分信号的能量转移分布到所选解释方差较大的基底上，导致用新集合投影算法得到的最优前期征兆和伴随算法的结果之间存在差异. 尽管如此，可以看到，SVD 集合投影算法抓住了 ZC 模式最优前期征兆信号的大尺度结构特征，对于突出 CNOP 的主要结构特征具有重要作用.

为了验证上述猜想，我们分别计算了两种算法得到的 CNOP 型扰动在新集合投影算法所选取基底上投影系数的分布(图 6)，进一步比较两种算法计算 CNOP 的异同. 从图 6 可以看到，两种算法得到的 CNOP 在选定模态上的投影系数呈现比较一致的分布，只是相对于伴随算法，基于新集合投影算法的投影系数其绝对值一致较大. 由此可见，新集合投影算法计算的 CNOP 确实在所选基底上具有较大的能量，而伴随算法计算的 CNOP 把这部分能量分配到被新集合投影算法舍弃的模态上，并且这部分能量在其本身总能量中所占比例越小，则新集合投影算法对伴随算法的逼近效果越好.

为此，我们考察了伴随算法得到的 CNOP 在被新集合投影算法舍弃的模态上投影系数的分布情况. 图 7 给出了优化初始时间分别是 4 和 10 月份时，基于伴随算法得到的 CNOP 型扰动，在所有 1080 个模

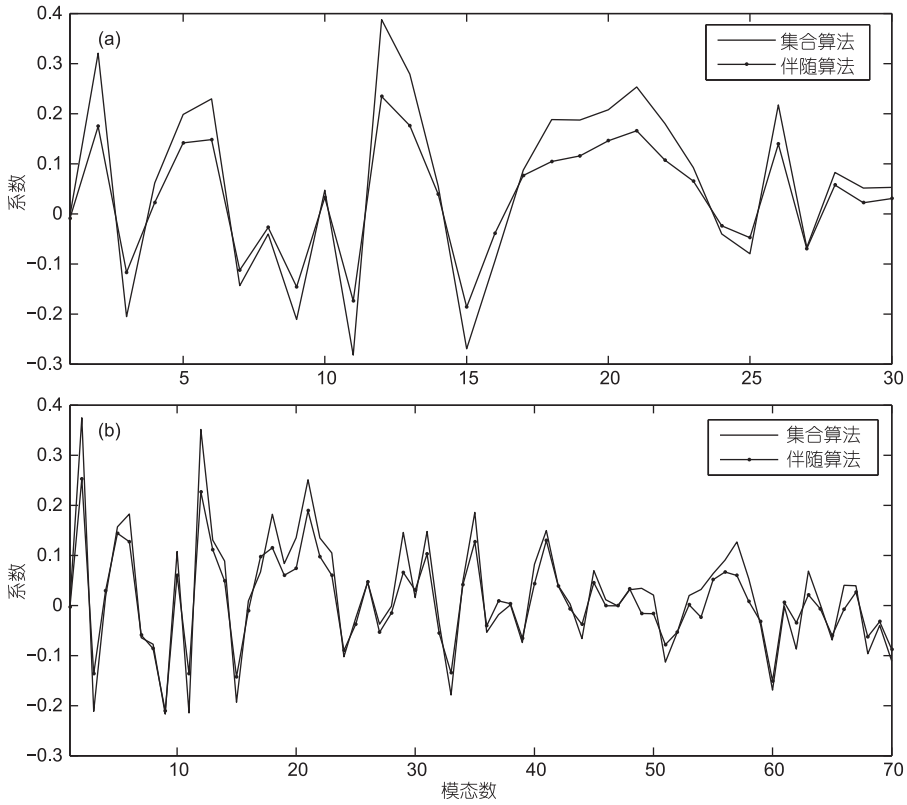

图 6　CNOP 型扰动在所选取的模态上的投影系数

实线是基于 SVD 分解集合投影算法的结果, 黑点标记的实线是基于伴随算法的结果. (a) 优化初始时间为 4 月份; (b) 优化初始时间为 10 月份

态上的投影系数. 可以看出, 伴随算法得到的 CNOP, 在新集合投影算法所选基底(4 月份时选取 30 个基底, 10 月份时选取 70 个基底)上的投影系数较大, 大部分能量集中在这些模态上, 在被新集合投影算法舍弃的模态上投影系数较小, 在这些模态上的能量分布较少.

以上内容重点分析了优化初始时刻为 4 和 10 月份时, 两种算法得到的 CNOP 及其导致的预报时刻 SSTA 发展的异同, 下面比较了所有 12 个月份作为优化初始时间时, 两种算法数值结果的逼近程度见表 1. 从表中可以看出, 无论在哪一个月份, 对于用伴随算法得出的 CNOP 型扰动, 其能量大部分集中在新集合投影算法所选的解释方差较大的部分基底上, 而在被新集合投影算法舍弃的基底上, 所占的能量较少. 这使得新集合投影算法得到的 CNOP 和伴随算法得到的 CNOP 在空间结构上具有较高程度的相似性, 导致前者的目标函数极大值, 对后者有较好的逼近效果. 这个结论和前面的分析一致.

表 1　SVD 集合投影算法和伴随算法数值结果的逼近程度

优化初始月份	所选基底数目 a)	比值(%) b)	相似系数(%) c)	目标函数比值(%) d)
1	70	72	72	75
2	30	68	68	71
3	30	68	68	72
4	30	63	63	73
5	70	69	69	73
6	60	69	69	70
7	50	70	70	73
8	30	66	66	70
9	30	65	65	70
10	70	73	73	71
11	40	64	64	71
12	90	73	73	72

a) 以约 70%逼近效果情形下截取的基底数目; b) 伴随算法得到的 CNOP 型扰动, 在新集合投影算法截取基底上所占能量与其本身总能量的比值; c) 分别用新集合投影算法和伴随算法计算得到的 CNOP 空间结构的相似系数; d) 两种算法计算的目标函数值极大值之间的比值

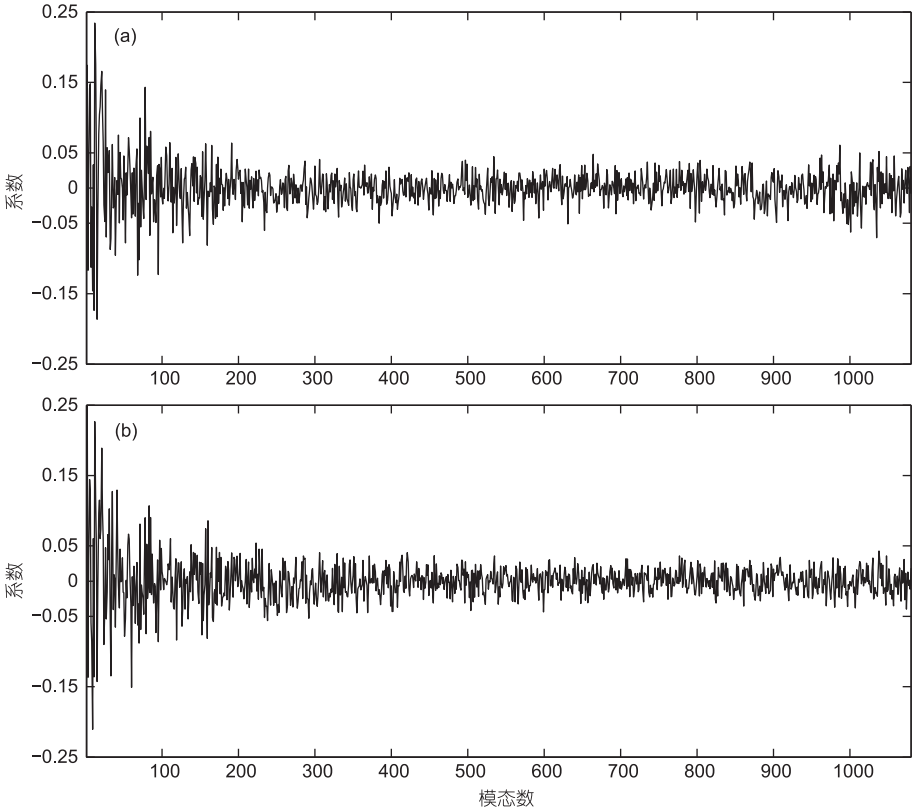

图 7　基于伴随算法得到的 CNOP 型扰动在所有 1080 个模态上的投影系数

(a) 优化初始时间为 4 月份; (b) 优化初时间为 10 月份

本节从目标函数的最优极值、最优前期征兆以及预报时刻 SSTA 发展的空间结构几个方面, 比较了基于 SVD 分解的新集合投影算法、伴随算法和 LSV 方法对应的数值试验结果, 评估了新集合投影算法计算 CNOP 的有效性. 结果表明, 用新集合投影算法计算 CNOP, 对基于伴随模式得到的 CNOP 具有较好的近似效果, 因此用集合投影算法计算 CNOP 是有效的. 不过需要指出的是, 该算法的梯度是直接利用差分近似计算, 其计算量比利用伴随技术大. 但考虑到编写伴随的困难和耗时, 采用上述集合算法计算 CNOP, 对于拓展 CNOP 的应用仍不失为一个有效可行的途径.

4　讨论和结论

本文提出了一种基于奇异值分解(SVD)的新集合投影算法. 该算法避免了上述集合投影算法中局地化的步骤, 从而避免了局地化半径的经验性选择. 该算法的主要思路是: 对系统的长期历史资料进行奇异值分解, 得到一组能充分反映系统动力性质的基底. 把系统的物理变量看作是这些所选择基底的线性组合, 从而把对物理变量的最优化问题转化为对组合系数的最优化问题. 而对于一个受到外力驱动的耗散系统, 可以选出一组较少的基底就能充分反映系统的动力性质, 从而对系统进行降维, 进而通过优化得到 CNOP.

将上述 SVD 集合投影算法应用到中等复杂程度的 ZC 模式中计算 CNOP, 研究 ENSO 事件的最优前期征兆问题. 数值试验结果表明, 对于不同的优化初始时间, 当所选基底数量逐渐增加时, 用新集合投影算法得到的目标函数极大值, 一致逐渐逼近于用伴随算法的结果; 为了达到对伴随方法计算的目标函数有较好的逼近效果, 新集合投影算法对于不同的起始月份, 需要的基底数量不同, 以达到 70%的逼近效果为例, 需要的基底数量为 30~90 个不等. 比较用伴随模式和 SVD 集合投影算法得到的 CNOP 型扰动及其预报时刻 SSTA 发展的空间结构, 发现相对于伴

随算法得到的最优前期征兆信号, 新集合投影算法得到的结果基本抓住了其主要大尺度特征, 对于 SSTA 分量, 都呈现出赤道东太平洋正距平、中西太平洋负距平的偶极子结构, 对于 THA 分量, 都表现为赤道太平洋斜温层一致加深, 这样的初始距平模态成功发展成一次 El Nino 事件. 这个结果说明用新集合投影算法计算 CNOP 是有效的, 而且由于不需要伴随模式计算梯度, 新集合投影算法计算的 CNOP 可以在很大程度上近似伴随算法得到的 CNOP, 从而可以将 CNOP 方法拓展到更加复杂的海气耦合模式中研究天气和气候的可预报性问题.

由于新集合投影算法选取了在系统长期行为中解释方差比较大的部分基底, 并用这些基底构建 CNOP. 这种截选方式使得新集合投影算法即使没有伴随模式, 也可以通过降维近似计算 CNOP, 但其局限性是过滤了一些系统行为中尽管解释方差较小但可能有贡献的信号, 并把这部分信号的能量转移分布到所选解释方差较大的基底上, 导致用新集合投影算法得到的 CNOP 和伴随算法的结果之间存在差异. 实际应用中, 在可接受的计算代价前提下, 可以通过增加基底的数量, 使得在舍弃的模态上被转移的能量占本身总能量的比重尽量较小, 以提高新集合投影算法对伴随算法的逼近程度.

SVD 集合投影算法的应用效果与所研究动力系统的特征有重要关系, 如果动力系统的吸引子是低维的, 用新集合投影算法计算 CNOP, 对基于伴随算法的结果可能有较好的逼近效果. 因此, 对于随时间变化较快的现象, 如果快过程具有维数较低的吸引子并且系统能快速收敛到稳定的状态, 那么可以采用 SVD 集合投影算法. 但快过程可能没有简单的低维吸引子结构, 这就需要选择大量的基底来构建 CNOP, 大大增加了计算量, 而且这种情况下, 用新算法不太合适.

SVD 集合投影算法所截取的基底数量关系到该算法实际应用中的计算时间代价, 其大小除了与研究对象本身动力系统吸引子的复杂程度有关, 还与数值模式自身的特征有关, 比如分辨率、离散格式等等. 但 SVD 集合投影算法所截取的基底数量, 与分辨率提高导致的模式中变规模的增加, 并不是简单的成比例关系. 对于一个特定的研究对象, 比如 ENSO 事件, 以分辨率不同的两个数值模式为例. 对于同样的模式区域, 比如高分辨率模式在一个方向上的格点数是低分辨率模式格点数的 4 倍, 那么前者一个变量的三维矩阵数是后者的 64 倍. 但对两个数值模式历史积分的样本进行奇异值分析, 通常发现对于同等百分比的累积解释方差, 高分辨率数值模式所需要的模态数量可能大于低分辨率模式所需要的数量, 但这个数量远远低于低分辨率模式所需模态数量的 64 倍. 也就是说, 虽然模式分辨率增加了, 新集合投影算法基底的数量可能增加, 但增加的幅度远远小于变量规模增加的幅度.

特别是, 如果一个数值模式能比较完美地描述连续动力系统的行为, 那么数值模式多年积分的样本, 其解释方差较大的模态数量将由连续动力系统本身决定, 与模式分辨率关系不大, 此时可以选择这部分解释方差较大的基底来构建 CNOP. 在这种情形下, 对于高分辨率的数值模式, 新集合投影算法的计算代价增加有限, 非常适合新集合投影算法的应用.

SVD 集合投影算法选取的基底如此重要, 需要用大量样本产生基底. 因此, 如何针对具体的物理问题更有效地选取样本, 可能是今后要研究的一个重要问题. 另外, 用新算法计算目标函数关于初始场的梯度时, 有多少个基底, 就要积分多少次非线性模式, 这导致了较大的计算代价. 因此, 合理选取尽可能少的基底, 并且利用并行计算, 将大大降低计算时间代价.

参考文献

Birgin E G, Martínez J M, Raydan M. 2000. Nonmonotone spectral projected gradient methods on convex sets. SIAM J Optim, 10: 1196–1211

Blumenthal M B. 1991. Predictability of a coupled ocean-atmosphere model. J Clim, 4: 766–784

Buizza R, Montani A. 1999. Targeting observations using singular vectors. J Atmos Sci, 56: 2965–2985

Cai M, Kalnay E, Toth Z. 2003. Bred vectors of the Zebiak-Cane model and their potential application to ENSO predictions. J Clim, 16: 40–56

Duan W S, Mu M, Wang B. 2004. Conditional nonlinear optimal perturbation as the optimal precursors for El Niño-Southern Oscillation events. J Geophys Res, 109: 1984–2012

Duan W S, Xue F, Mu M. 2009. Investigating a nonlinear characteristic of ENSO events by conditional nonlinear optimal perturbation. Atmos

Res, 94: 10–18
Duan W S, Yu Y S, Xu H, et al. 2012. Behaviors of nonlinearities modulating El Niño events induced by optimal precursory disturbance. Clim Dyn, 40: 1399–1413
Foias C, Teman R. 1997. Structure of the set of stationary solution of the Novier-Stokes equations. Commun Pur Appl Math, 30: 149–164
Houtekamer P L, Mitchell H L. 2001. A sequential ensemble Kalman filter for atmospheric data assimilation. Mon Weather Rev, 129: 123–137
Lorenz E N. 1965. A study of the predictability of a 28-variable atmospheric model. Tellus, 17: 321–333
Mantua N J, Battisti D S. 1995. Aperiodic variability in the Zebiak-Cane coupled ocean-atmosphere model: Air-sea interactions in the western equatorial Pacific. J Clim, 8: 2897–2927
Moore A M, Kleeman R. 1996. The dynamics of error growth and predictability in a coupled model of ENSO. Q J R Meteorol Soc, 122: 1405–1446
Mu M, Duan W S, Wang B. 2003. Conditional nonlinear optimal perturbation and its applications. Nonlinear Process Geophys, 10: 493–501
Mu M, Xu H, Duan W S. 2007. A kind of initial errors related to “spring predictability barrier” for El Niño events in Zebiak-Cane model. Geophys Res Lett, 34: L03709, doi:10.1029/2006GL027412
Osborne A R, Pastorello A. 1993. Simultaneous occurrence of low-dimensional chaos and colored random noise in nonlinear physical systems. Phys Lett A, 181: 159–171
Palmer T N, Gelaro R, Barkmeijer J, et al. 1998. Singular vectors, metrics, and adaptive observations. J Atmos Sci, 55: 633–653
Qin X H, Duan W S, Mu M. 2013. Conditions under which CNOP sensitivity is valid for tropical cyclone adaptive observations. Q J R Meteorol Soc, 139: 1544–1554
Qin X H, Mu M. 2011. Influence of conditional nonlinear optimal perturbations sensitivity on typhoon track forecasts. Q J R Meteorol Soc, 138: 185–197
Sun G D, Mu M. 2011. Nonlinearly combined impacts of initial perturbation from human activities and parameter perturbation from climate change on the grassland ecosystem. Nonlinear Process Geophys, 18: 883–893
Teman R. 1991. Approximation of attractors, large eddy simulations and multiscale methods. Proc R Soc A-Math Phys Eng Sci, 434: 23–29
Thompson C J, Battisti D S. 1995. A linear stochastic dynamical model of ENSO. Part I: Model development. J Clim, 8: 2897–2927
Thompson C J. 1998. Initial conditions for optimal growth in a coupled ocean-atmosphere model of ENSO. J Atmos Sci, 55: 537–557
Wang B, Tan X W. 2010. Conditional nonlinear optimal perturbations: Adjoint-free calculation method and preliminary test. Mon Weather Rev, 138: 1043–1049
Yu Y S, Duan W S, Xu H. 2009. Dynamics of nonlinear error growth and season-dependent predictability of El Niño events in the Zebiak-Cane model. Q J R Meteorol Soc, 135: 2146–2160
Yu Y S, Mu M, Duan W S, et al. 2012. Contribution of the location and spatial pattern of initial error to uncertainties in El Nino predictions. J Geophys Res, 117: 1–13
Zebiak S E, Cane M A. 1987. A model El Niño-Southern oscillation. Mon Weather Rev, 115: 2262–2278