中国科学: 地球科学 2014 年 第 44 卷 第 7 期: 1532 ~ 1543
www.scichina.com earth.scichina.com
《中国科学》杂志社
SCIENCE CHINA PRESS

论 文

基于多正则化参数约束的四维变分同化方法及其对台风预报的影响

钟剑[①*], 费建芳[②], 程小平[②], 黄小刚[②]

① 中国卫星海上测控部, 江阴 214431;
② 解放军理工大学气象海洋学院, 南京 211101
* E-mail: zhj_zhongjian@163.com

收稿日期: 2013-09-22; 接受日期: 2013-11-14; 网络版发表日期: 2014-06-20
国家公益性行业专项(编号: GYHY201106004)和国家自然科学基金项目(批准号: 41230421, 41005029, 41105012, 41375106, 41105065)资助

摘要 Tikhonov 正则化反问题思想应用于变分同化时, 通常引入的单正则化参数并不能同时满足不同观测资料的误差特性. 针对传统四维变分同化(4D-Var)中不同观测资料分别引入不同正则化参数, 提出基于多正则化参数约束的 4D-Var(Tikh-4D-Var); 同时, 鉴于实际维数巨大同化系统中多正则化参数难于计算问题, 基于同化系统后验估计信息, 引入一种新的多正则化参数选择方法, 相比于传统正则化参数选择方法, 该方法计算量较小. 基于 WRF3.3.1 4D-Var 同化系统, 利用 2010 年 Chaba 台风个例开展 bogus 资料同化台风初始化应用试验, 结果表明: 结合引入的多正则化参数选择方法, Tikh-4D-Var 方法相比于传统 4D-Var 方法更快达到收敛标准, 迭代次数更少; 同时, 相比于传统 4D-Var 方法, Tikh-4D-Var 方法呈现出更优的同化和预报效果, 使得 72 h 路径和强度预报误差减小的同时, 进一步改善了台风的内部结构信息; 多正则化参数在一定程度上可反应同化系统中观测资料误差方差给定的准确性.

关键词
多正则化参数
四维变分同化
台风初始化

初始场是影响数值天气预报的一个重要因素, 目前业务应用中大多采用变分同化方法构造模式初始场(Huang 等, 2009). 变分同化方法, 通过将观测资料和背景场信息有效结合, 产生更优初始场. 观测资料和背景场信息的有效结合需要利用观测误差协方差和背景场误差协方差矩阵, 误差协方差矩阵的准确性是影响最终同化效果的关键因素(邱崇践等, 2007; 田向军和谢正辉, 2009; 钟剑等, 2012).

变分同化问题, 实际上可以归结为反问题(黄思训和伍荣生, 2001). Tikhonov 正则化方法解决反问题一直是数学领域的研究重点, 最早由前苏联 Tikhonov 提出用以解决线性不适定性问题, 随着其推广应用, 在卫星遥感反演等领域应用较多(李俊和黄思训, 2001; 黄思训等, 2003; Steinwagner 等, 2006; Zhong 等, 2011), 在变分同化中的应用也逐渐引起了相关学者关注.

Johnson 等(2000, 2004)指出, 四维变分同化(4D-Var)中, 观测误差方差和背景场误差方差比是影

中文引用格式: 钟剑, 费建芳, 程小平, 等. 2014. 基于多正则化参数约束的四维变分同化方法及其对台风预报的影响. 中国科学: 地球科学, 44: 1532–1543
英文引用格式: Zhong J, Fei J F, Cheng X P, et al. 2014. The four dimensional variational data assimilation with multiple regularization parameters as a weak constraint (Tikh-4D-Var) and its preliminary application on typhoon initialization. Science China: Earth Sciences, doi: 10.1007/s11430-014-4873-9

响同化效果的重要因素, 实际应用中, 由于背景场误差方差不能准确确定, 往往需要借助于正则化方法来更优给定观测误差方差和背景场误差方差比, 同时利用低维系统数值试验验证了引入单正则化参数的有效性. 之后, Johnson 等(2005)进一步指出, 4D-Var 经过一定形式变换等价于 Tikhonov 正则化, 观测误差和背景场误差方差比等价于正则化参数. Budd 等(2011)指出, 给定观测资料的动力系统最优状态估计问题即资料同化问题为不适定 Tikhonov 正则化反问题, 背景场项对应正则化项, 并对不同的正则化项进行了讨论分析. 然而, 上述研究中, 正则化思想应用于变分同化中均基于简单模型, 并未应用于实际同化系统, 主要原因在于实际维数庞大的同化系统中正则化参数难于计算.

赵延来等(2011)将单正则化参数思想引入到实际数值模式三维变分同化(3D-Var)系统中, 基于 L 曲线准则单正则化参数选择方法, 通过一次局地暴雨个例试验, 研究表明正则化思想结合 3D-Var 方法可改善雷达资料同化效果, 进而改善降雨预报. 然而, 实施 L 曲线准则单正则化参数选择方法时, 其进行了 14 次不同设置 3D-Var 试验以获取相对较优正则化参数, 对于 3D-Var 计算量已非常大, 对于 4D-Var 完全不可行, 并且其仅局限于单正则化参数选择.

实际同化系统中, 由于不同观测资料误差特性并不相同, 引入单正则化参数并不最优, 针对不同观测资料分别引入正则化参数进而引入多正则化参数显得尤为重要. 此时, 针对计算量更大的 4D-Var, 是否可以引入多正则化参数、如何在有效控制计算量前提下获取相对较优的多正则化参数仍有待进一步研究. 尤其是在台风初始化中, 大多需要同化人造 bogus 资料以改善台风路径和强度预报. Bogus 资料观测误差往往通过经验人为给定, 实际上, 不同的 bogus 资料构造方法不同台风个例对应的 bogus 资料观测误差是不相同的, 如何更合理给定 bogus 资料观测误差直接影响着 bogus 资料在同化系统中的合理充分利用, 进而影响同化和最终预报效果. 因此, 讨论引入多正则化参数的 4D-Var 在 bogus 资料同化台风初始化中的应用具有重要的研究意义和价值.

本文在正则化思想应用到 4D-Var 同化基础上, 针对每种观测资料分别引入正则化参数, 提出基于多正则化参数约束的 4D-Var 同化方法(Tikh-4D-Var); 同时, 基于同化系统后验估计信息, 引入一种适合维数巨大 4D-Var 同化系统, 且计算量相对较小的多正则化参数选择方法; 最后, 以 2010 年 Chaba 台风为例, 针对常规观测资料和 bogus 资料同化, 初步讨论分析 Tikh-4D-Var 和 4D-Var 方法在台风初始化中的应用效果.

1 多正则化参数约束 4D-Var 理论

1.1 基本理论

正则化参数约束变分同化理论可以从带有偏差的极小模解原理推导得到(黄思训和伍荣生, 2001; Budd 等, 2011). 在观测误差范围内寻找与初始猜测背景场 x^b 距离最小的解, 满足

$$\begin{cases}\left\|y^o-H\left(x\right)\right\|\leqslant\delta,\\ \left\|x-x^b\right\|=\min!,\end{cases}\tag{1}$$

式中, y^o 表示观测资料, x 表示模式状态变量, H 表示观测算子, δ表示观测误差(包括观测资料误差和观测算子误差), $\|\bullet\|$ 表示范数, 其定义见方程(4). 方程(1)等价于

$$\left\|x^\delta-x^b\right\|=\min\left\{\left\|x-x^b\right\|\mid\left\|y^o-H\left(x\right)\right\|\leqslant\delta\right\},\tag{2}$$

式中, x^δ表示具有δ观测误差的极小模解. 利用 Lagrange 乘子法, 方程(2)表示为泛函

$$J\left(x\right)=\left\|x-x^b\right\|^2+\lambda\left(\left\|y^o-H\left(x\right)\right\|^2-\delta^2\right)=\min!,\tag{3}$$

式中, λ为 Lagrange 乘子. 其范数定义为

$$\begin{cases}\left\|y^o-H\left(x\right)\right\|^2=\left\langle y^o-H\left(x\right),R^{-1}\left(y^o-H\left(x\right)\right)\right\rangle,\\ \left\|x-x^b\right\|^2=\left(x-x^b,B^{-1}\left(x-x^b\right)\right),\end{cases}\tag{4}$$

式中, $\langle\cdot,\cdot\rangle$ 和 $(\cdot,\cdot)$ 分别表示定义在观测资料和模式状态变量所属欧式空间的内积, 上标$^{-1}$表示矩阵的逆, 即 R^{-1}和 B^{-1}分别为观测误差协方差 R 和背景场误差协方差 B 矩阵的逆.

目前, 正则化方法应用于变分同化中通常引入单正则化参数, 即考虑λ为标量而非矢量, 泛函(3)等价于

$$J^\alpha\left(x\right)=\frac{1}{2}\alpha\left\|x-x^b\right\|^2+\frac{1}{2}\left\|y^o-H\left(x\right)\right\|^2=\min!,\tag{5}$$

式中, α为正则化参数, $\left\|x-x^b\right\|^2$ 为 Tikhonov 正则化稳定函数, $J^\alpha\left(x\right)$为 Tikhonov 正则化泛函. 方程(5)

为变分同化中引入单正则化参数的一般形式, 也是本文引入多正则化参数的理论基础. 正则化参数的引入, 可以保证代价函数(5)存在唯一解, 并使得迭代速度加快, 进而迅速得到全局最优解; 同时, 正则化参数的引入还可以消除分析解的不稳定性(黄思训和伍荣生, 2001; 赵延来等, 2011).

实际同化系统中, 往往同化多种观测资料, 由于不同观测资料误差特性并不相同, 引入单正则化参数并不能达到最优. 本文中, 考虑针对不同观测资料分别引入正则化参数, 即引入多正则化参数. 此时, 考虑 λ 为矢量, 泛函(3)转换为

$$J^{\alpha}(x)=\frac{1}{2}\alpha\left\|x-x^{b}\right\|^{2}+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n_{obs}}\Gamma_{i}\left\|y_{i}^{o}-H_{i}(x)\right\|^{2}=\min!, \quad (6)$$

式中, 转换算子Γ_i 的引入是考虑正则化参数α对观测项 $\left\|y^{o}-H(x)\right\|^{2}$ 中各个部分影响不同, 也即对每一种观测资料 i 分别引入正则化参数; n_{obs} 表示观测资料种类数. 方程(6)即为多正则化参数约束的 3D-Var 同化代价函数.

对于考虑多时刻观测资料同化的 4D-Var, 多正则化参数约束代价函数可表示为

$$J\left(x,\alpha,\Gamma_{1},...,\Gamma_{n_{obs}}\right)$$

$$=\frac{1}{2}\alpha\left\|x-x^{b}\right\|^{2}+\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{n_{obs}}\Gamma_{i}\left\|y_{i,j}^{o}-H_{i}\left(x_{j}\right)\right\|^{2}=\min!, \quad (7)$$

式中, N 表示同化窗区长度, $y_{i,j}^{o}$ 表示第 j 个时次第 i 种观测资料的观测值. 可见, 相对于传统 4D-Var, 多正则化参数约束 4D-Var 多了 n_{obs}+1 个正则化参数需要计算.

对于正则化参数约束变分同化, 正则化参数的选择是该方法成功的关键. 单正则化参数的选择, 目前广泛应用的方法包括广义交叉检验准则和 L 曲线准则(赵延来等, 2011). 由于这些方法的实施会使得计算量显著增大, 目前仅在遥感反演等变量维数相对较小的数值系统中应用较多. 赵延来等(2011)将基于代价函数(5)的单正则化参数约束应用到实际 3D-Var 同化系统中, 其中采用 L 曲线准则选择单正则化参数使得计算量显著增大, 以至不适合 4D-Var 同化系统及多正则化参数选择.

1.2 多正则化参数选择方法

本文基于同化系统后验估计信息(Desroziers 和 Ivanov, 2001; Chapnik 等, 2004, 2006), 引入一种多正则化参数选择方法. 其具体理论如下:

Talagrand(1999)指出, 背景场可作为一种观测资料, 此时代价函数(6)转化为

$$J\left(x,\alpha,\Gamma_{1},...,\Gamma_{n_{obs}}\right)=\frac{1}{2}\left(z^{0}-\Phi x\right)^{\mathrm{T}}S^{-1}\left(z^{0}-\Phi x\right), \quad (8)$$

式中, $z^{0}=\left(x^{bT},y^{oT}\right)^{\mathrm{T}}$, $\Phi=\left(I_{n},H^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}$ 和 $S=\begin{pmatrix}B_{T} & 0\\ 0 & R_{T}\end{pmatrix}$ 分别表示转换后的状态变量、观测算子和误差协方差矩阵; n 表示背景场维数; 上标 T 表示矩阵的转置; 下标 T 表示矩阵的真实值, 即 B_T 和 R_T 表示真实背景场误差和观测误差协方差矩阵. 实际应用过程中, 假设 B_T=αB, R_T=ΓR, 其中, α和 $\Gamma=\Gamma_{1},\cdots,\Gamma_{n_{obs}}$ 为正则化参数, B 和 R 分别为估计的背景场和观测误差协方差. 从该层意义来说, 正则化参数引入的另一作用在于对观测误差方差和背景场误差方差进行调整, 使其更加逼近于真实误差的方差.

假定某一种观测在状态矢量 z^0 中对应的变量 z_i^0 可通过对状态矢量进行 Π_i 投影得到, 即 $z_i^0=\Pi_i z^0$, 其相应的投影观测算子和代价函数分别为 $\Phi_i=\Pi_i\Phi$ 和 $J_i\left(x,\Gamma_i\right)=\left(z_i^0-\Phi_i x\right)^{\mathrm{T}}S_i^{-1}\left(z_i^0-\Phi_i x\right)$. Talagrand(1999)指出, 当 S_i 为真实误差协方差矩阵时, 投影代价函数满足

$$E\left\{J_i\left(x^{a}\right)\right\}=\frac{1}{2}\left\{m_i-Tr\left(\Phi_i P_a \Phi_i^{T}S_i^{-1}\right)\right\}, \quad (9)$$

式中, $P_a=\left(B_T^{-1}+H^{\mathrm{T}}R_T^{-1}H\right)^{-1}$ 表示误差协方差矩阵最优情况下的分析误差协方差矩阵, $Tr(\cdot)$ 表示迹, m_i 表示第 i 种观测资料数量, $E\{\cdot\}$ 表示统计意义的平均. 假设背景场和观测资料及观测资料之间不相关, 则有

$$E\left\{J^{b}\left(x^{a}\right)\right\}=\frac{1}{2}Tr(KH),$$

$$E\left\{J_k^{o}\left(x^{a}\right)\right\}=\frac{1}{2}Tr\left\{\Pi_k^{o}\left(I_p-HK\right)\Pi_k^{oT}\right\}, \quad (10)$$

式中, J^b 和 J^o 分别表示代价函数背景场项和观测项, K 为 Kalman 增益矩阵, $K=B_T H^{\mathrm{T}}\left(HB_T H^{\mathrm{T}}+R_T\right)^{-1}$.

定义 Tikhonov 正则化参数矢量为 $s=(\alpha,\Gamma)$, 将多正则化参数从真实背景场误差协方差和观测误差协方差中分离出来, 方程(10)等价于

$$E\left\{J^b\left(x^a(s)\right)\right\}=\frac{1}{2}\alpha\, Tr\left(K(s)H\right),$$

$$E\left\{J_k^o\left(x^a(s)\right)\right\}=\frac{1}{2}\Gamma_k Tr\left\{\Pi_k^o\left(I_p-HK(s)\right)\Pi_k^{oT}\right\}. \quad (11)$$

式中, $K(s)$ 表示利用估计的背景场误差协方差和观测误差协方差计算的增益矩阵,

$$K(s)=B(s)H^{\mathrm{T}}\left(HB(s)H^{\mathrm{T}}+R(s)\right)^{-1}, \quad (12)$$

式中, $B(s)=\alpha B$, $R(s)=\sum_{k=1}^{n_{obs}}\Gamma_k\Pi_k^{oT}R_k\Pi_k^o$.

利用方程(11), 多正则化参数计算表达式为

$$\alpha=\frac{2E\left\{J^b\left(x^a(s)\right)\right\}}{Tr\left(K(s)H\right)},$$

$$\Gamma_k=\frac{2E\left\{J_k^o\left(x^a(s)\right)\right\}}{Tr\left\{\Pi_k^o\left(I_p-HK(s)\right)\Pi_k^{oT}\right\}},\quad k=1,\ ...,\ n_{obs}. \quad (13)$$

方程(13)中多正则化参数求解需要多次迭代(Tarantola, 1987), 本文采用一次迭代思想近似计算正则化参数.

1.3 迹的计算

由方程(13)可知, 多正则化参数的求解关键在于迹的计算. 本文采用 Girard(1987)提出的随机思想求解迹, 其基本思想为: 对于矩阵 A 及服从平均值和方差分别为 0 和 1 高斯分布的随机矢量 ξ, 矩阵 A 的迹可表示为

$$Tr(A)=E\left(\xi^{\mathrm{T}}A\xi\right). \quad (14)$$

将该思想应用于迹 $Tr(HK)$ 计算, 有

$$Tr(HK)=Tr\left(R^{-1/2}HKR^{1/2}\right)=\left(R^{-1/2}\xi\right)^{\mathrm{T}}HK\left(R^{-1/2}\xi\right), \quad (15)$$

其中, 增益矩阵 K 并不能直接计算得到, 利用

$$H\left(\delta x^a_{\left(y^o+\delta y^o\right)}\right)-H\left(\delta x^a_{y^o}\right)\approx HK\delta y^o. \quad (16)$$

式中, $\delta x^a_{\left(y^o+\delta y^o\right)}$ 和 $\delta x^a_{y^o}$ 分别表示采用扰动的观测资料和未扰动的观测资料计算得到的分析增量, $\delta y^o=R^{1/2}\xi$. 此时, $Tr(HK)$ 表示为

$$Tr(HK)=\left(R^{-1/2}\xi\right)^{\mathrm{T}}\left(H\left(\delta x^a_{\left(y^o+\delta y^o\right)}\right)-H\left(\delta x^a_{y^o}\right)\right). \quad (17)$$

该思想计算矩阵迹的精度不仅取决于 $Tr(HK)$ 的值本身, 还取决于观测资料数量(Girard, 1987). 上述多正则化参数选择方法具体计算流程如下: (1) 对于给定的背景场 x^b, 观测资料 y^o, 观测算子 H 及背景场误差协方差和观测误差协方差, 实施 4D-Var 同化试验; (2) 对观测资料进行扰动 $\delta y^o=R^{1/2}\xi$, 利用扰动的观测资料实施 4D-Var 同化试验, 得到 $x^{a*}=x^b+\Phi\left(y^{o*}-H\left(x^b\right)\right)$, 其中, $y^{o*}=y^o+\delta y^o$. (3) 利用 Step1 和 Step2 两次 4D-Var 同化试验后验统计信息, 及(13)式计算多正则化参数; (4) 利用 Step3 计算的多正则化参数, 采用 Tikh-4D-Var 方法实施同化试验.

可见, 采用一次迭代计算多正则化参数, Tikh-4D-Var 方法计算量为传统 4D-Var 方法的 3 倍(实际小于 3 倍, 因为 Step4 中运行多正则化参数约束的 Tikh-4D-Var 计算量相对于传统 4D-Var 要小, 3.1 节中说明); 在计算条件允许的前提下, Step1 和 Step2 两个步骤可以同时实施, 从而 Tikh-4D-Var 方法计算时间为传统 4D-Var 方法的(小于)2 倍.

2 试验设计

本文以 2010 年 Chaba 台风为例开展研究. 数值试验采用两重网格嵌套方案, 区域中心为(27.5°N, 127.5°E), 水平分辨率为 30 km 和 10 km, 水平格点数为 105×135 和 241×322, 垂直方向为 28 层. 同化试验仅在粗网格区域实施, 同化窗区为 6 h, 同化窗区中时间间隔为 1 h, 同化时段为 10 月 25 日 06~12 h; 预报试验在粗细网格同时进行, 细网格区域初始场由粗网格同化结果插值得到, 并进行 72 h 预报. 同化试验基于 WRFDA3.3.1 版本、预报试验基于 WRF3.3.1 版本实施. 由于 4D-Var 中需要用到切线性和伴随模式, 而 WRFDA3.3.1 中仅提供了表面拖曳边界层方案, 一个对流参数化方案和大尺度浓缩微物理参数化方案(WRFDA3.3.1 中将上述参数化方案选择均设置为 98)三个物理参数化方案的切线性和伴随模式代码(Wang 等, 2012), 本文在同化试验中采用上述三种物理方案进行试验; 预报试验中采用物理方案分别为 YSU 边界层方案、Kain-Fritsch 对流参数化方案和 WSM-6 微物理参数化方案. 同化试验中背景场误差协方差采用 NCEP(National Centers for Environmental Prediction)提供的 cv3.

本文设计三组对比试验, 控制试验将 NCEP

1°×1°再分析资料(http://rda.ucar.edu/datasets/ds083.2)作为初始场、对比试验一将 4D-Var 同化结果作为初始场、对比试验二将 Tikh-4D-Var 同化结果作为初始场. 其中, 同化试验中同化常规观测资料和 bogus 资料. Bogus 资料包括水平面气压场和风场, 构造时需提供台风中心位置和最大风速(由中国台风年鉴资料提供)及最大风速半径(本文中最大风速半径设置为 80 km). 其具体构造方法如下:

Bogus 资料水平面气压场构造方案基于 Fujita 公式, 距离台风中心 r 处水平面气压计算表达式为

$$p(r)=p_{\infty}-(p_{\infty}-p_c)/\sqrt{1+\frac{1}{2}\left(\frac{r}{r_{\max}}\right)^2},\quad r\leqslant r_{\text{out}},\quad (18)$$

$$p_{\infty}=\frac{p_{\text{out}}(r_{\text{out}})\left[1+\frac{1}{2}\left(\frac{r_{\text{out}}}{r_{\max}}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}}-p_c}{\left[1+\frac{1}{2}\left(\frac{r_{\text{out}}}{r_{\max}}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}}-1},\quad (19)$$

式中, p_c 表示台风中心气压, $r_{\max}$ 为最大风速半径, r_{out} 为台风涡旋最外层水平面气压 p_{out} 半径.

Bogus 资料非对称风场是在 Chan 等(1987)提出的利用台风切向风廓线来构造台风区域的水平风场方案的基础上得到的, 方程如下:

$$v(r)=v_{\max}\left(\frac{r}{r_{\max}}\right)\exp\left\{\frac{1}{b}\left[1-\left(\frac{r}{r_{\max}}\right)^b\right]\right\},\quad (20)$$

式中, $v(r)$ 为切向风, $v_{\max}$ 为近地面最大风速, b 为控制台风外围风速分布的因子. 以往 $v_{\max}$, $r_{\max}$ 和 b 通常均取为常数, 因此该方案只能得到对称风场涡旋. 为了得到非对称风场, 通过引入非对称分布的台风最大风速、最大风速半径等因子, 利用最佳权系数方案来得到非对称的台风外围风速分布因子, 进而得到非对称风场中随方位角变化的 $v_{\max}$, $r_{\max}$ 和 b 参数, 其具体计算表达式见文献黄小刚等(2004).

3 试验结果分析

3.1 收敛特性分析

图 1 表示 4D-Var 和 Tikh-4D-Var 同化试验代价函数和梯度随迭代次数变化. 同化试验中, 收敛标准均为 eps=0.01(即代价函数梯度小于初始梯度的 0.01 倍时迭代中止). 图中显示, 结合本文多正则化参数选择方法, Tikh-4D-Var 试验更快达到收敛标准, 这与 1.1 节中理论是相符合的. Tikh-4D-Var 试验仅需要 29 次迭代, 而 4D-Var 试验需要迭代 38 次. 同时, 图 1 中亦显示, Tikh-4D-Var 试验前 2 次迭代代价函数和梯度值均显著增大, 5 次迭代后, 梯度值基本与 4D-Var 试验相当. 这可能是由于 Tikh-4D-Var 试验通过引入正则化参数更合理设置代价函数中观测项和背景场项相对权重, 使得初始时刻代价函数值显著增大; 同时, 由于 Tikh-4D-Var 方法的有效性, 其可有效加快收敛速度, 更快达到收敛标准.

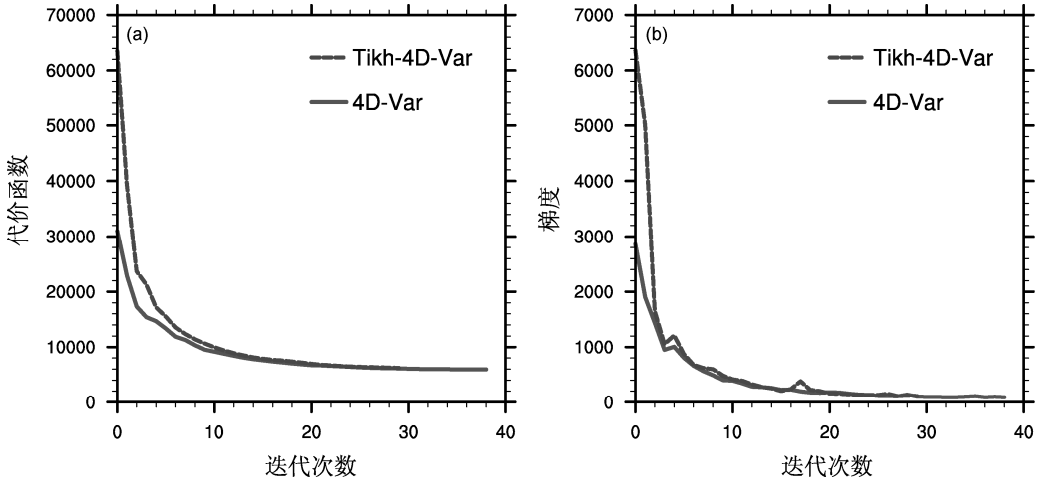

图 1 代价函数(a)和梯度(b)随迭代次数演变

3.2 正则化参数估计分析

图 2 表示 Tikh-4D-Var 试验中, 针对每种观测资料和背景场分别引入正则化参数, 采用 1.2 节多正则化参数选择方法计算的正则化参数及相应观测资料数量(括号里数值). 图中显示, 不同观测资料对应的正则化参数并不相同, 进一步说明引入多正则化参数的必要性, 仅引入单正则化参数并不能对每种观测资料进行最优权重调整. 同时, 1.2 节中指出, 正则化参数引入的另一作用在于对观测误差方差和背景场误差方差进行调整, 使其更加逼近于真实误差的方差. 从而, 正则化参数的大小也在一定程度上反应 4D-Var 试验中观测误差方差的准确性. 以 bogus 资料为例, 4D-Var 试验中, 采用 Xiao 等(2009)方法定义 bogus 资料误差:

$$E_{slp}(r)=1+\frac{3}{R_b}r, \tag{21}$$

$$E_{v}(r)=1+\frac{4}{R_b}r. \tag{22}$$

式中, E_{slp}, E_v 分别表示水平面气压和水平面风场误差, R_b 表示影响半径, 本文个例取为 800 km, r 表示数据点与台风中心的距离.

图 2 中显示, bogus 资料水平风场分量(u 和 v)和水平面气压(slp)正则化参数明显小于 1. 鉴于 3.3 节分析将表明 Tikh-4D-Var 试验在台风路径和强度预报方面均优于 4D-Var 试验, 两种方法的差别仅在于 Tikh-4D-Var 试验针对每种观测资料引入了正则化参数调整, 从而可认为引入正则化参数调整的观测资料误差方差更接近于真实观测误差方差, 也即: 对于本次台风个例, 采用(21)和(22)定义的 bogus 资料误差比实际 bogus 资料观测误差大. 同时, 对于 bogus 资料, 水平风场分量 u, v 和水平面气压对应的正则化参数也均不相同, u 分量正则化参数最小, 水平面气压正则化参数最大, 可见针对同一平台不同变量观测资料分别引入不同正则化参数非常重要. 通过针对 bogus 资料引入小于 1 的正则化参数, 将会使得 bogus 资料的权重增大, 进而增大 bogus 资料对同化效果的影响, 这也是本次台风个例 Tikh-4D-Var 试验初始时刻呈现出更低中心水平面气压和更强最大风速的缘故.

3.3 台风路径和强度影响分析

图 3 表示 Chaba 台风最佳路径(中国气象协会发布的最佳台风路径集)和三组对比试验模拟台风路径分布. 表 1 表示三组对比试验台风 72 h 数值模拟内每间隔 6 h 计算的平均路径误差、中心水平面气压误差和最大风速误差. 图 4 表示 4D-Var 和 Tikh-4D-Var 试验台风数值模拟路径预报误差随时间演变.

对于 72 h 平均路径误差(表 1), 4D-Var 试验相对 NCEP 试验有所增大, 分别为 66.6 和 58.9 km, Tikh-4D-Var 试验相对于 4D-Var 试验有明显减小, 减小到 59.1 km, 与 NCEP 试验相当. 72 h 预报时段内, 相对于 4D-Var 试验, Tikh-4D-Var 试验在预报初期(前 24 h)和预报后期(60~72 h)预报误差相对更小, 尤其是在预报后期, 路径预报改善更加明显.

表 1 中显示, 对于 72 h 平均中心水平面气压, 4D-Var 和 Tikh-4D-Var 试验相对 NCEP 试验均有明显改善, 平均误差由 17.5 hPa 分别减小到 12.0 和 8.5 hPa, 改善非常明显; 同时, Tikh-4D-Var 试验改善效果更加显著, 相对 4D-Var 试验, 平均中心水平面气压误差减小了 3.5 hPa. 图 5 亦显示, Tikh-4D-Var 试验相对 4D-Var 试验在 72 h 预报时段内所有时刻中心水平面气压预报均有明显改善, 对于预报后期的改善更加明显.

对于 72 h 平均最大风速(表 1), 4D-Var 试验和 Tikh-4D-Var 试验相对 NCEP 试验均有明显改善, 同时 Tikh-4D-Var 试验与 4D-Var 试验平均误差相当, 均

表 1 72 h 数值模拟(间隔 6 h)平均路径误差、中心水平面气压误差和最大风速误差

	NCEP	4D-Var	Tikh-4D-Var
平均路径误差(km)	58.9	66.6	59.1
平均中心水平面气压误差(hPa)	17.5	12.0	8.5
平均最大风速误差(m s^{-1})	8.6	4.8	4.8

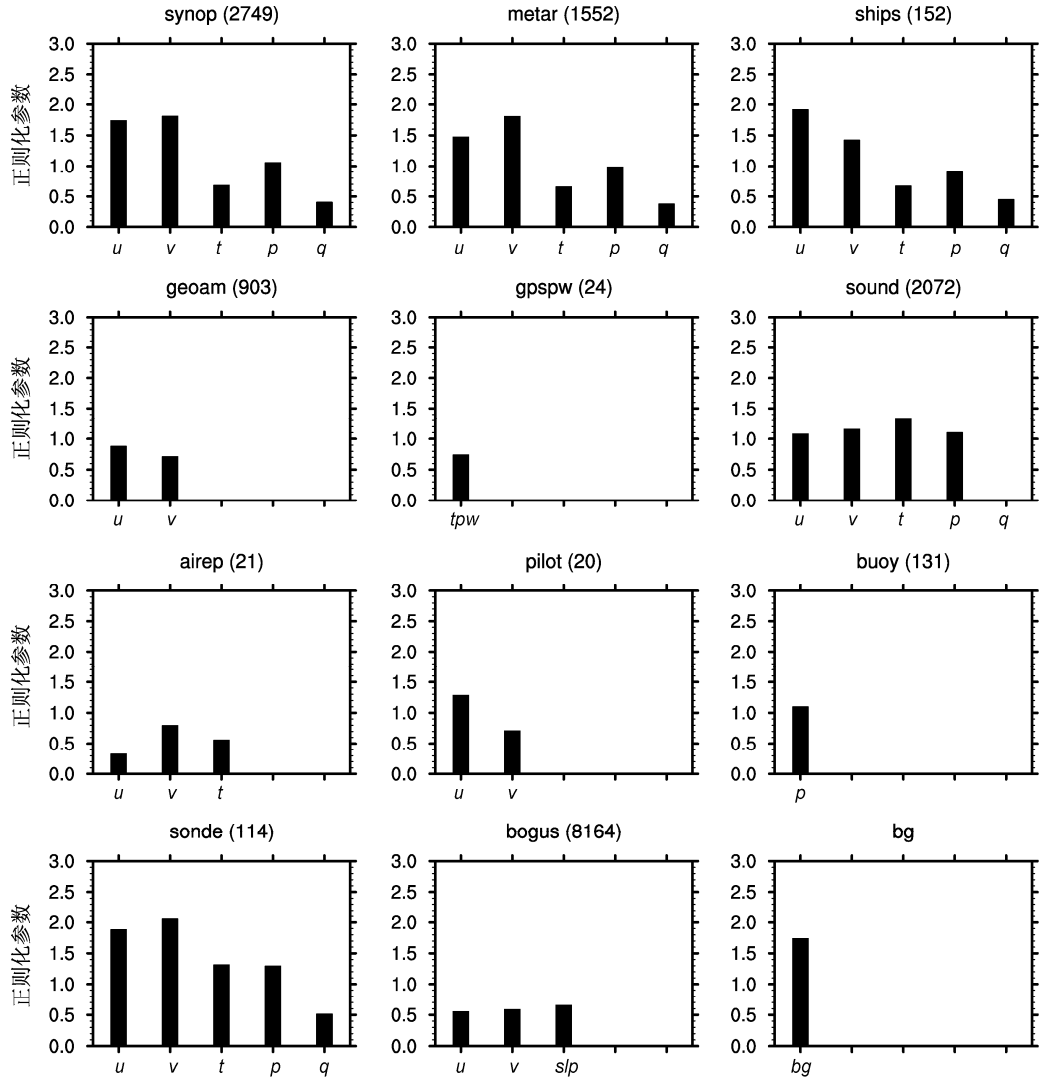

图 2　各种观测资料、背景场项正则化参数分布及相应观测资料数量(括号里数值)

由 8.6 减小到 4.8 m s^{-1}. 72 h 预报时段内最大风速误差(图 6)显示, 相对 4D-Var 试验, Tikh-4D-Var 试验在预报初期(前 6 h)和预报中后期(30~72 h, 第 48 h 除外)误差相对较小. Tikh-4D-Var 试验平均预报误差与 4D-Var 试验相当主要原因在于 Tikh-4D-Var 试验预报中期(12~24 h)预报明显偏强. 总体来说, 相对于 4D-Var 试验, Tikh-4D-Var 试验最大风速预报有一定程度改善, 但没有中心水平面气压预报改善明显.

数值试验结果表明, 对于本次台风个例, 相对于 NCEP 试验, 4D-Var 试验明显改善台风强度预报, 路径预报并未改善; 相对于 4D-Var 试验, 引入合理正则化参数的 Tikh-4D-Var 试验在一定程度上改善了台风路径和强度预报, 强度预报中对中心水平面气压改善更明显.

3.4　台风内部结构影响分析

3.4.1　初始时刻

表 2 表示 4D-Var 和 Tikh-4D-Var 试验初始时刻分析增量绝对值区域平均. 表中显示, 除湿度场(Q)外的所有变量, Tikh-4D-Var 试验相对 4D-Var 试验呈现出更大的分析增量, 这是由于 Tikh-4D-Var 试验通过引入正则化参数, 合理给定各种观测资料相对权重, 使得初始状态变量场更合理逼近观测资料, 与背景场差异增大的缘故. 而湿度场分析增量 4D-Var 试

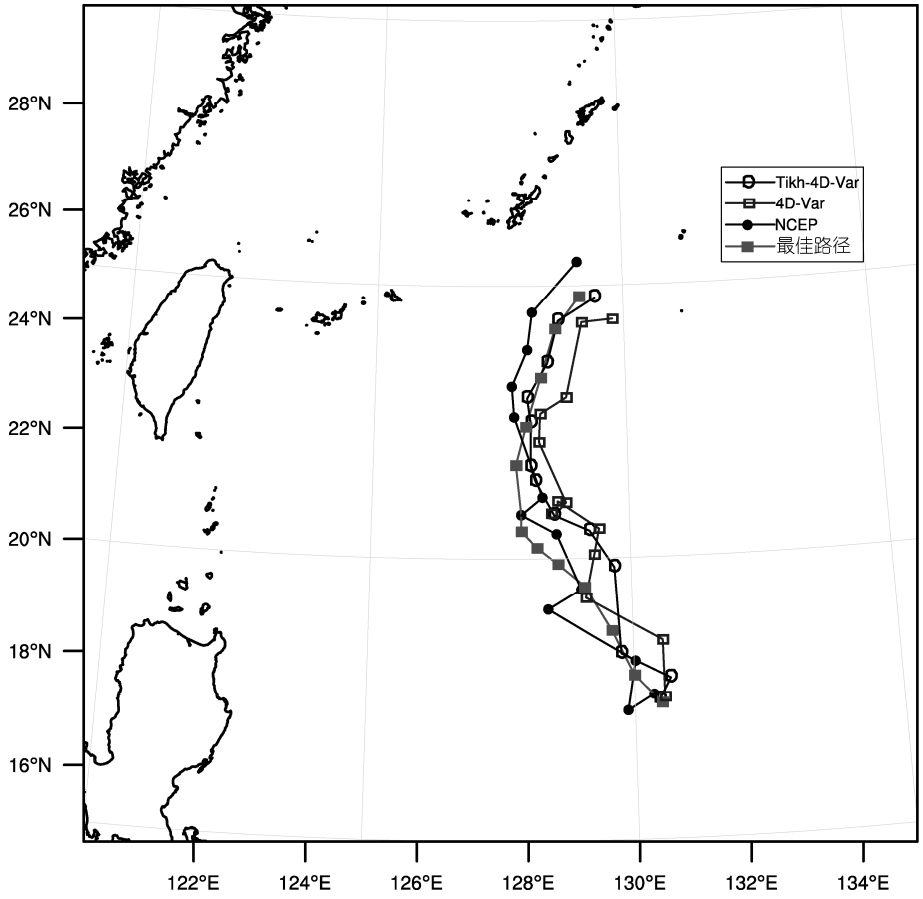

图 3　72 h 数值模拟台风路径分布

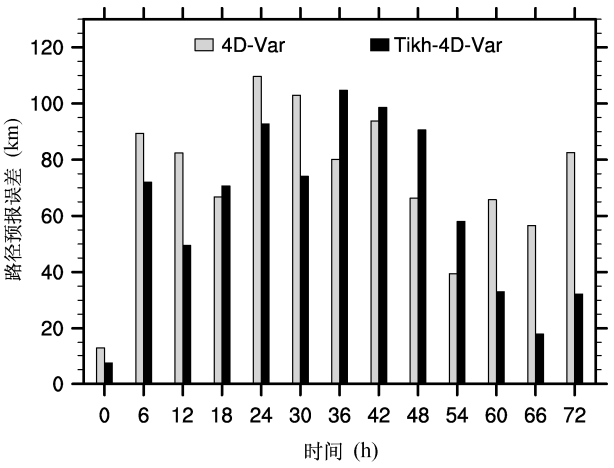

图 4　72 h 数值模拟台风路径预报误差随时间演变

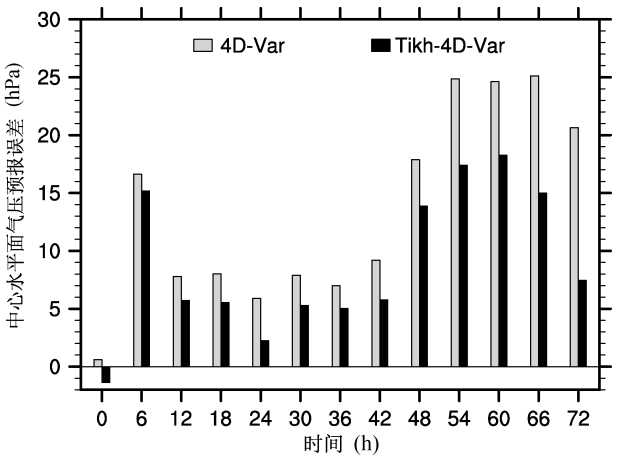

图 5　72 h 数值模拟台风中心水平面气压误差随时间演变

验相对更大原因主要在于 4D-Var 试验在模式顶层存在相对更大的虚假不合理分析增量(图 7).

图 7 表示 4D-Var 和 Tikh-4D-Var 试验初始时刻台风中心沿纬向温度和湿度分析增量垂直分布. 图中显示, 台风中心(17.4°N, 130.5°E)处, 两组同化试验均存在明显的温度和湿度分析增量区; 同时, Tikh-

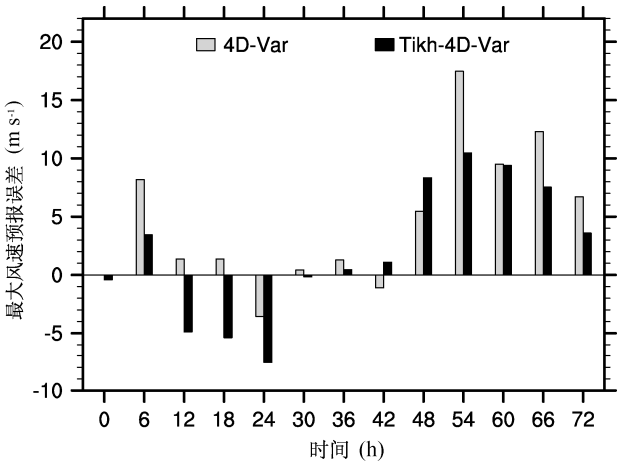

图 6　72 h 数值模拟台风最大风速误差随时间演变

4D-Var 试验分析增量更大, 最大值相对 4D-Var 试验分别增加了 2 K 和 2 g kg^{-1}. 对于湿度场, Tikh-4D-Var 在一定程度上削弱了模式顶层不合理的虚假分析增量. 这表明, Tikh-4D-Var 试验进一步改善了初始时刻台风中心的暖心结构及湿度场结构.

3.4.2　预报时段

下面通过对台风暖心结构和二级环流分析两组同化试验对台风内部结构预报的影响.

图 8 表示台风中心半径 50 km 以内温度距平的径向和方位角方向平均随预报时间和高度分布. 图中显示, 两组对比试验均呈现出明显的暖心结构, 暖心结构不断加强直至台风发展成熟. 总体而言, 两组对

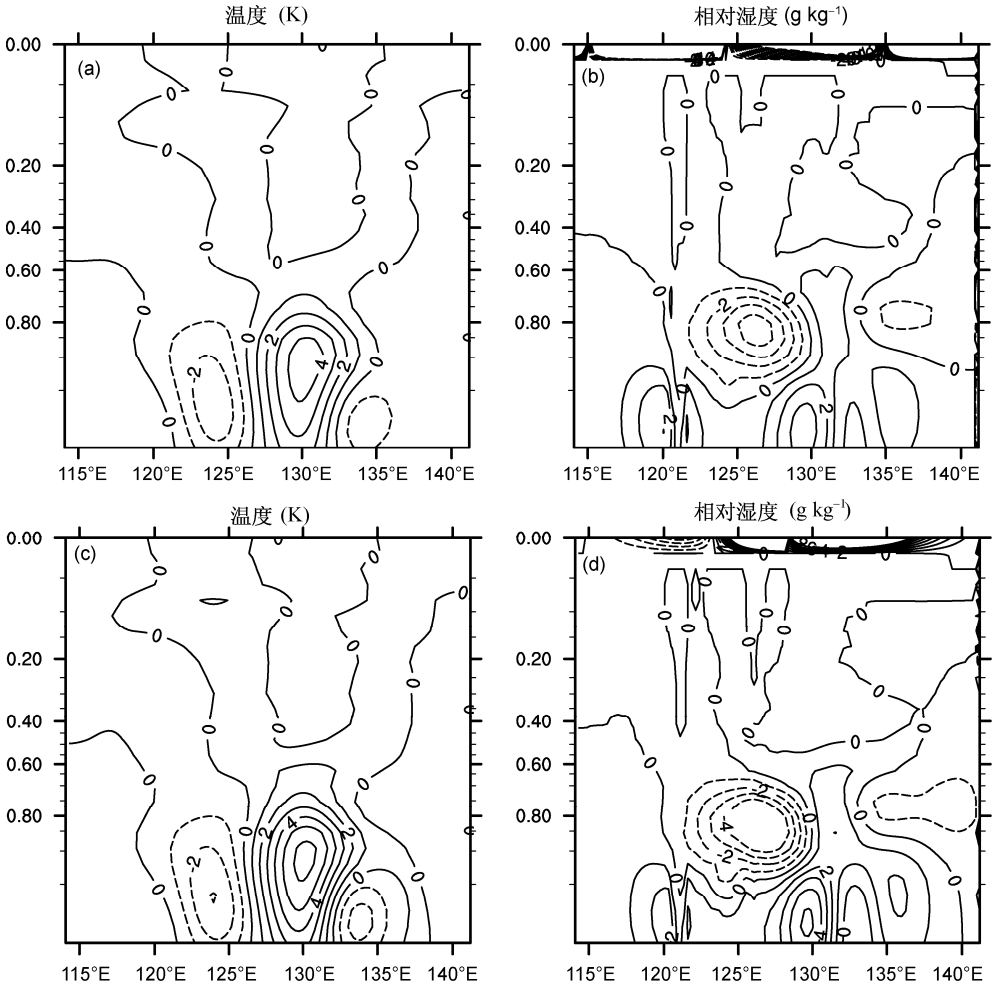

图 7　初始时刻台风中心沿纬向温度((a), (c))和相对湿度((b), (d))分析增量垂直分布

(a), (b) 4D-Var 试验; (c), (d) Tikh-4D-Var 试验. 垂直坐标为 Eta 坐标

表 2　初始时刻分析增量绝对值平均

	U(m s^{-1})	V(m s^{-1})	T (K)	Q (g kg^{-1})
4D-Var	1.98	1.87	0.35	3.65
Tikh-4D-Var	2.21	2.00	0.36	1.07

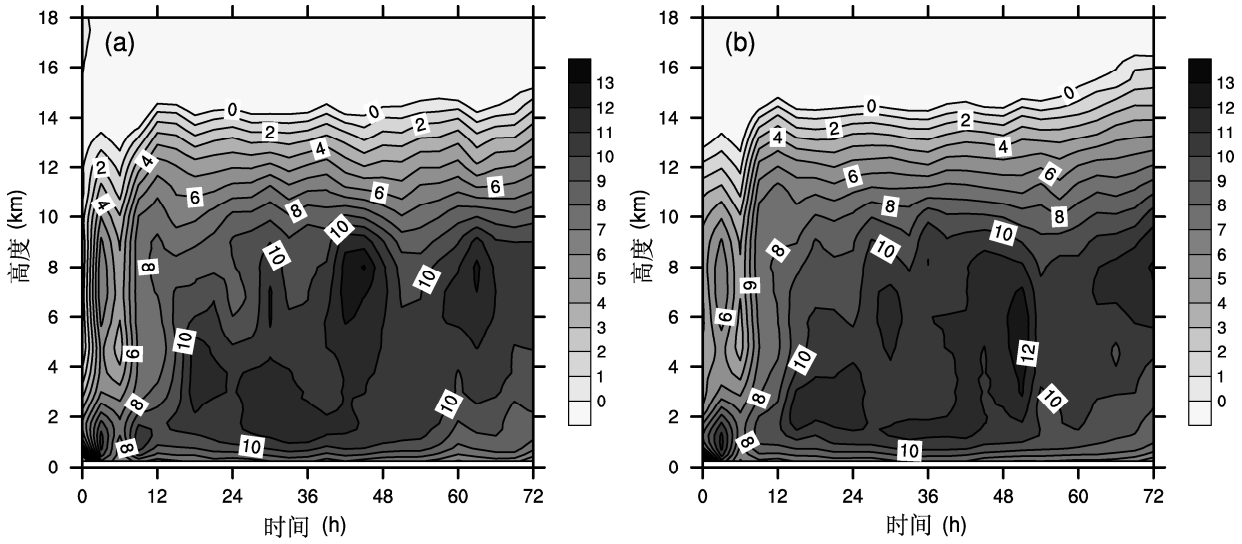

图 8　台风中心半径 50 km 以内温度距平的径向和方位角方向平均随预报时间和高度分布

(a) 4D-Var 试验; (b) Tikh-4D-Var 试验

比试验最大温度距平均为 12 K, 相差并不明显. 但相对于 4D-Var 试验, Tikh-4D-Var 试验在一定程度上增大了模式中层(12~24 和 54~72 h, 6~9 km)的温度距平; 同时, 4D-Var 试验最大温度距平出现在第 42 h, 而 Tikh-4D-Var 试验出现在第 54 h, 与 Chaba 台风在第 54~60 h 达到最强(成熟)更加接近, 更合理. 这表明, 相对于 4D-Var 试验, Tikh-4D-Var 试验可在一定程度上改善台风预报时段内的暖心结构.

图 9 表示数值模拟 60~66 h, 径向风和垂直速度沿方位角内平均随高度和距离台风中心半径演变. 图中显示, 两组对比试验均呈现出典型的二级环流特征: 模式上层(12~17 km)具有明显正值径向风(外流径向风), 模式下层(0~2 km)具有明显负值径向风(内流径向风), 在 2 km 左右存在相对较小的正值径向风. 相对于 4D-Var 试验, Tikh-4D-Var 试验明显增大了模式上下层径向风速度, 均增大了 6 m s^{-1}.

对于垂直速度, 两组对比试验在离台风中心 50 km 处均存在明显的上升区, 在台风中心存在较弱的下沉区; 同时, 相对于 4D-Var 试验, Tikh-4D-Var 试验垂直上升速度有明显的增大. 上述分析表明, Tikh-4D-Var 试验相对于 4D-Var 试验呈现出更强的二级环流形式, 这是因为 Tikh-4D-Var 试验通过改善台风风场预报, 更强的径向流将会在边界层产生更多的向内绝对角动量输送, 进而产生更强的垂直速度而形成更强的二级环流(Ma 等, 2012).

4　总结和结论

传统 4D-Var bogus 资料同化台风初始化中, 如何更合理刻画观测资料误差特性尤其是 bogus 资料误差进而最优综合观测资料信息显得尤为重要. 本文基于 Tikhonov 正则化方法应用于变分同化思想, 鉴于单正则化参数不能很好刻画不同观测资料误差特性的局限性, 通过对不同观测资料和背景场项分别引入正则化参数, 提出基于多正则化参数约束的 4D-Var 同化方法. 同时, 针对维数巨大同化系统多正则化参数难以计算问题, 基于 4D-Var 同化系统后验估计信息, 引入一种计算量较小的多正则化参数选择方法. 针对 bogus 资料同化台风初始化, 利用 2010 年 Chaba 台风个例进行数值试验, 主要结论如下:

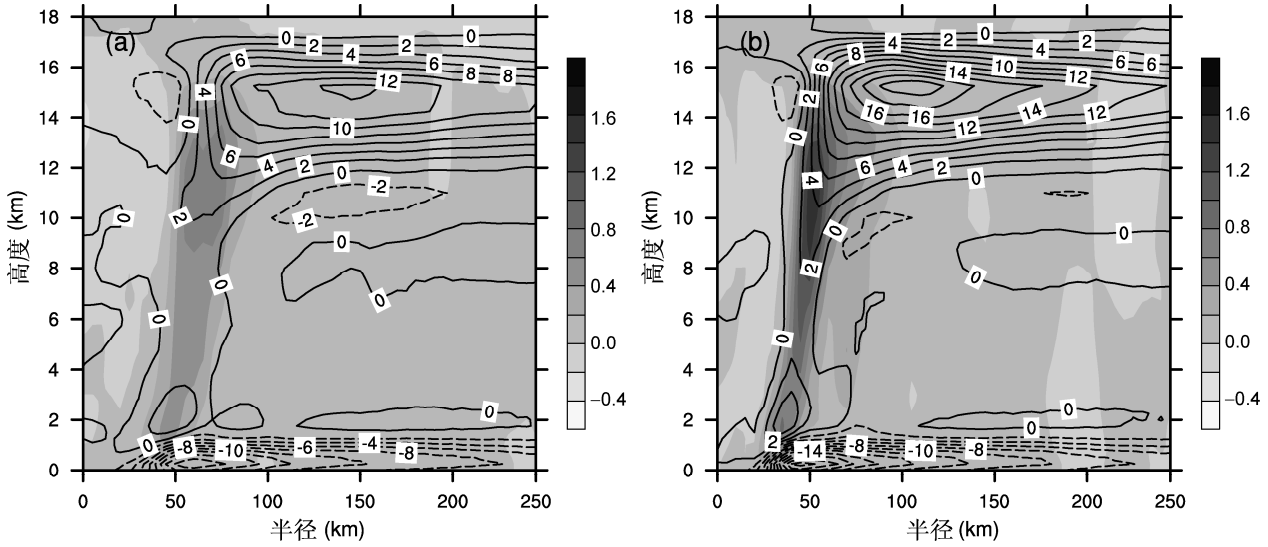

图 9　台风预报 60~66 h 时段内径向风和垂直速度的时间和方位角平均随高度和距离台风中心半径分布

(a) 4D-Var 试验; (b) Tikh-4D-Var 试验. 等值线示径向风, 色标示垂直速度, 单位: m s^{-1}

(1) 结合本文多正则化参数选择方法, Tikh-4D-Var 试验相对于 4D-Var 试验更快达到收敛标准.

(2) Tikh-4D-Var 试验中引入的多正则化参数可在一定程度上反应同化系统中观测资料误差方差给定的准确性, 使调整后的观测误差方差更接近于真实观测误差方差.

(3) 相比于 4D-Var 试验, Tikh-4D-Var 试验通过引入多正则化参数合理调整观测资料和背景场相对权重, 更充分利用观测资料信息, 可在一定程度上改善台风路径和强度预报, 使得 72 h 模拟时段内路径、中心水平面气压和最大风速预报误差有一定程度减小; 同时, 其在初始时刻呈现出更大的分析增量, 并可以有效削弱模式顶层不合理分析增量, 在 72 h 模拟时段内呈现出更强的暖心结构和二级环流, 有效改善台风内部结构信息.

Bogus 资料同化台风初始化中, 由于不同台风个例不同 bogus 资料构造方法 bogus 资料误差特性不同, 不同个例的正则化参数均需重新计算, 采用本文多正则化参数选择方法使得 Tikh-4D-Var 方法实施计算量为(小于)传统 4D-Var 计算量的三倍, 计算量仍然相对较大, 计算量更小的多正则化参数选择方法或计算实施方法仍有待进一步研究. 本文仅针对同一平台不同变量观测资料分别引入正则化参数, 实际上, 同一变量不同高度的观测资料误差特性也并不完全相同, 针对不同变量不同高度观测资料和背景场不同变量分别引入正则化参数调整也非常有必要. 下一步工作还将开展大量台风个例初始化统计试验, 以便更全面分析 Tikh-4D-Var 方法的相关特性.

致谢　特此感谢黄思训教授对正则化方法的相关理论指导以及审稿专家提出的宝贵意见.

参考文献

黄思训, 韩威, 伍荣生. 2003. 结合反问题技巧对一维海温模式变分资料同化的理论分析与数值试验. 中国科学 D 辑: 地球科学, 33: 903–911

黄思训, 伍荣生. 2001. 大气科学中的数学物理问题. 北京: 气象出版社. 411

黄小刚, 费建芳, 张根生, 等. 2004. 一种台风海面非对称风场的构造方法. 热带气象学报, 20: 129–136

李俊, 黄思训. 2001. 改进的偏差原则在大气红外遥感及反演中的应用. 中国科学 D 辑: 地球科学, 31: 70–80

邱崇践, 张蕾, 邵爱梅. 2007. 一种显式四维变分资料同化方法. 中国科学 D 辑: 地球科学, 37: 698–704

田向军, 谢正辉. 2009. 基于本征正交分解的显式思维变分同化方法: 理论与验证. 中国科学 D 辑: 地球科学, 39: 529–536

赵延来, 黄思训, 杜华栋, 等. 2011. 正则化方法同化多普勒天气雷达资料及对降雨预报的影响. 物理学报, 60: 882–893
钟剑, 费建芳, 黄思训, 等. 2012. 模式误差弱约束四维变分同化研究. 物理学报, 61: 149203
Budd C J, Freitag M A, Nichols N K. 2011. Regularization techniques for ill-posed inverse problems in data assimilation. Comput Fluids, 46: 168–173
Chapnik B, Desroziers G, Rabier F, et al. 2004. Properties and first application of an error-statistics tuning method in variational assimilation. Q J R Meteorol Soc, 130: 2253–2275
Chapnik B, Desroziers G, Rabier F, et al. 2006. Diagnosis and tuning of observational error in a quasi-operational data assimilation setting. Q J R Meteorol Soc, 132: 543–565
Desroziers G, Ivanov S. 2001. Diagnosis and adaptive tuning of information error parameters in a variational assimilation. Q J R Meteorol Soc, 127: 1433–1452
Girard D. 1987. A fast Monte Carlo cross-validation procedure for large least-squares problems with noisy data. Technical Report. IMAG
Huang X Y, Xiao Q N, Barker D M, et al. 2009. Four dimensional variational data assimilation for WRF: Formulation and preliminary results. Mon Weather Rev, 137: 299–314
Johnson C, Hoskins B J, Nichols N K. 2005. A singular vector perspective of 4D-Var: Filtering and interpolation. Q J R Meteorol Soc, 131: 1–19
Johnson C, Nichols N K, Hoskins B J. 2000. Very large inverse problems in atmosphere and ocean modeling. Int J Numer Methods Fluids, 00: 1–6
Johnson C, Nichols N K, Hoskins B J. 2004. Very Large Inverse Problems in Atmosphere and Ocean Modeling. Technical Report. Reading: University of Reading
Ma Z H, Fei J F, Huang X G, et al. 2012. Sensitivity of tropical cyclone intensity and structure to vertical resolution in WRF. Asia Pac J Atmos Sci, 48: 67–81
Steinwagner J, Schwarz G, Hilgers S. 2006. Use of a maximum entropy method as a regularization technique during the retrieval of trace gas profiles from limb sounding measurements. J Atmos Ocean Technol, 23: 1657–1667
Talagrand O. 1999. A posteriori verification of analysis and assimilation algorithms. Proceedings of Workshop on Diagnosis of Data Assimilation System. 17: 28
Tarantola A. 1987. Inverse Problem Theory: Methods for Data Fitting and Model Parameter Estimation. Amsterdam: Elsevier. 5–22
Wang W, Cindy B, Michael D, et al. 2012. ARW Version 3 Modeling system User's Guide
Xiao Q N, Chen L Q, Zhang X Y. 2009. Evaluations of BDA scheme using the Advanced Research WRF (ARW) model. J Appl Meteor Climatol, 48: 680–689
Zhong J, Huang S X, Fei J F, et al. 2011. Application of Tikhonov regularization method to wind retrieval from scatterometer data II: Cyclone wind retrieval with consideration of rain. Chin Phys B, 20: 064301