# 非线性优化方法在数值模式敏感性分析中的应用*

徐 辉 穆 穆**
中国科学院大气物理研究所 LASG，北京 100029
罗德海
中国海洋大学气象系，青岛 266003

**摘要** 提出用非线性优化方法对数值模式进行敏感性分析．理论分析和数值试验表明：该方法能够对数值模式是否具有模拟能力给出一个量化的判断，并找到模拟效果最好时的初始场，即最优初始场．在模拟效果好、但模式误差和初始误差可能很大的情况下，该方法能在一定条件下识别出对预报结果起主要作用的误差类型．

**关键词** 敏感性分析 非线性优化 伴随模式 数值模式

一般而言，数值天气预报的准确率随着预报时间的增长迅速下降．原因主要有两点：一方面是数值预报系统的初始场有误差；另一方面是数值预报模式本身有一定的误差．为减小初始误差及模式误差，气象学家们用数值模拟、伴随和线性奇异向量等方法，进行了大量的敏感性分析试验[1~6]．在实际应用中，这些方法都有各自的缺陷，如数值模拟方法不能穷尽所有有意义的初始场和模式参数组合[7]，前人所用的伴随方法和线性奇异向量方法都基于线性理论，只能描述切线性模式有效时段内小扰动的发展[5]．

穆穆等[8]提出用非线性优化方法对数值模式进行敏感性分析．但是，作为非线性优化方法应用的一个子问题，他只对该方法作了简明扼要的介绍，所得到的分析结果也没有通过数值试验结果验证．

在穆穆等[8]工作的基础上，本文将对数值模式敏感性分析的非线性优化方法作比较全面和详细的分析，并进一步分析在模拟效果好、但模式误差和初始误差可能很大的情况下，如何识别出对预报结果起主要作用的误差类型．最后，以二维正压准地转位涡方程为例，用数值试验结果验证理论分析结果．

## 1 方法介绍

假定有一数值预报模式 $\Phi_t = M_t(\Phi_0)$，$t \in [0, T]$，初始时刻观测资料 $\Phi_0^o$，预报时刻观测资料 $\Phi_T^o$，想找到一个初始场 $\Phi_0$，使得模式模拟场 $\Phi_T = M_T(\Phi_0)$与观测场 $\Phi_T^o$ 最接近．这个问题可以转化成一个优化问题：确定 $\Phi_0$，使目标函数

$$J(\Phi_0) = \frac{1}{2}(M_T(\Phi_0) - \Phi_T^o)^T \boldsymbol{W}(M_T(\Phi_0) - \Phi_T^o) \tag{1}$$

取极小值，其中 $\boldsymbol{W}$ 是权重系数矩阵，取成观测误差协方差矩阵的逆矩阵．为了找到 $J(\Phi_0)$的极小值，需要知道 $J(\Phi_0)$关于 $\Phi_0$ 的梯度．在通常的气象数值模式中，变量的维数一般达到 $10^6$ 以上，这时可以用伴随方法求梯度[9]．对(1)式求变分，有

$$\delta J(\Phi_0) = \langle W(M_T(\Phi_0) - \Phi_T^o), \delta\Phi_T \rangle, \tag{2}$$

其中 $\delta\Phi_T$ 是初始扰动场 $\delta\Phi_0$ 在 $T$ 时刻的发展．引入 $M_T$ 的切线性算子 $\mathrm{M}_T$，(2)式变为

$$\delta J(\Phi_0) = \langle \boldsymbol{W}(M_T(\Phi_0) - \Phi_T^o), \mathrm{M}_T(\Phi_0)\delta\Phi_0 \rangle. \tag{3}$$

2003-01-28 收稿，2003-05-16 收修改稿
* 中国科学院知识创新工程项目(批准号：KZCX2-208)和国家自然科学基金项目(批准号：40233029，40075015)共同资助
** 联系人，E-mail：mumu@lasg.iap.ac.cn

?1994-2018 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

再引入 $\mathrm{M}_T$ 的伴随算子 $\mathrm{M}_T^*$，得到

$$\delta J(\Phi_0) = \langle \mathrm{M}_T^*(\Phi_0)(\boldsymbol{W}(M_T(\Phi_0) - \Phi_T^o)), \delta\Phi_0\rangle. \tag{4}$$

于是，$J(\Phi_0)$关于 $\Phi_0$ 的梯度为

$$\nabla J(\Phi_0) = \mathrm{M}_T^*(\Phi_0)(\boldsymbol{W}(M_T(\Phi_0) - \Phi_T^o)). \tag{5}$$

然后可以通过优化算法，找到一个最优的初始场 $\Phi_0^*$，使得 $\min J = J(\Phi_0^*)$，称 $\Phi_0^*$ 为最优初始场.

## 2 理论分析结果

令 $E = \min J$，对于一个事先确定的最大允许误差 $\varepsilon$，$E$ 有两种情况：

$$\begin{cases} E > \varepsilon \\ 0 < E \leqslant \varepsilon \end{cases},$$

调试模式时，如果出现 $E > \varepsilon$，说明即使能获得最优初始场 $\Phi_0^*$，该模式对 $\Phi_T^o$ 的模拟总是超过给定的允许误差范围. 即无论如何调节初始场，该模式都不能很好地模拟出观测场 $\Phi_T^o$，可以推断模式误差很大，还需要改进数值模式，才能提高模拟效果.

再考虑 $0 < E \leqslant \varepsilon$ 的情形，这说明可以通过调节初始场 $\Phi_0$，使得该数值模式对 $\Phi_T^o$ 有很好的模拟. 应该指出，在这种情况下，模式误差仍有可能很大，这种情形我们在下面讨论. 再定义一个最大允许初始误差 $\varepsilon_0$，在给定的某种范数下，又有：

$$\begin{cases} \| \Phi_0^* - \Phi_0^o \| \ll \varepsilon_0 & \text{(a)} \\ \| \Phi_0^* - \Phi_0^o \| \sim \varepsilon_0 & \text{(b)} \\ \| \Phi_0^* - \Phi_0^o \| \gg \varepsilon_0. & \text{(c)} \end{cases}$$

在数值模式比较准确的情况下，该模式对大气的真实运动状态具有较好的模拟能力，可以用(a)，(b)，(c)3 式评价观测资料的质量. 若情形(a)出现，说明直接利用现有观测资料 $\Phi_0^o$，该模式就可以对 $\Phi_T^o$ 有较好的模拟结果，此时对数值模式的初始场可以不做特殊处理，用一些简单的常用插值处理即可；若情形(b)出现，说明直接利用现有观测资料，该模式还得不到比较理想的模拟结果，但如对其进行资料同化处理，改进模式初始场后，也可以得到比较理想的模拟结果；情形(c)说明现有观测资料的信息不够，还不能真实地反映天气或气候过程，因此必须对现有观测网站加密，得到更加详细的观测资料，才能有好的模拟结果.

在现有观测资料比较准确的情况下，观测场可以近似作为大气的真实运动状态，可以用(a)，(b)，(c)3 式对模式误差进行评估. 若情形(a)出现，说明模式误差很小，很容易通过调试初始场，得到对 $\Phi_T^o$ 好的模拟；情形(b)说明该数值模式有一定的误差，但在一定的误差范围内调试初始场，仍可以得到对 $\Phi_T^o$ 好的模拟，这实际上是有一定误差的模式配上有一定误差的初始场，得到好的模拟结果；在(c)种情形下，由于最优初始场与实际观测资料相差太大，而观测资料又是比较准确的，这个最优初始场没有物理意义. 由此可以推断出该数值模式的模式误差很大，好的模拟效果是虚假的，建议把工作重点放在数值模式的改进上.

在实际工作中，一般选择一个相对精确的观测资料，用数值模拟结果与这个观测资料相对照，对模式误差进行评估；或是在数值模式相对准确的情况下，用数值模拟结果评价观测资料的质量. 在这两种情形下，都可以用上述的分析方法，得到一些有意义的结论. 但是，有时由于客观条件的限制，也会出现数值模式和观测资料都不太精确的情形，此时用非线性优化方法对数值模式进行敏感性分析，会有一定的局限性. 在这种情形下，如果 $\min J > \varepsilon$，正如我们前面已指出的，这时可以推断出模式误差很大，需要改进数值模式. 如果 $0 < \min J \leqslant \varepsilon$，此时模拟效果较好，但模式误差和初始误差仍有可能很大，把 $\varepsilon_0$ 取成观测资料的精度(这个精度一般是已知的)，若 $\| \Phi_0^* - \Phi_0^o \| \gg \varepsilon_0$，说明最优初始场远远偏离了大气的真实运动状态，好的模拟效果是虚假的，可推断出该数值模式有很大的模式误差. 除此之外，则不容易得出一些有意义的结论.

## 3 数值试验结果

取无量纲的二维正压准地转位涡方程

$$\begin{cases} \dfrac{\partial P}{\partial t} + \partial(\Phi, P) = 0 \\ P = \nabla^2\Phi - F\Phi + f + fh, \\ \Phi|_{t=0} = \Phi_0 \end{cases} \tag{6}$$

其中 $P$ 是位涡(PV)，$\Phi$ 是流函数，$F$ 是行星

?1994-2018 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

Froude 数，$f$ 是 Coriolis 参数，$h$ 是地形，$H$ 是正压大气垂直方向的运动特征尺度，$\partial(\Phi, P)=\Phi_x P_y-\Phi_y P_x$.

对(6)式求数值解时，取双周期边界条件. 离散 Laplacian 算子用 5 点差分方案，离散 Jacobian 算子采用 Arakawa 有限差分方案，时间离散采用 Adamas-Bashforth 方案. 流体区域为[0, 6.4]×[0, 3.2]，对应着有量纲的[0, 6400 km]×[0, 3200 km]. 空间和时间步长分别为 $d=0.2$ 和 $t=0.018$，即 200 km 和 30 min. 参数 $F=0.102$，$f=10.0$，$H=1.0$，地形取为 $h(y)=h_0\times0.112\times(\sin(4\pi y/3.2)+1.0)$. 在数值试验中通过改变 $h_0$ 的值引入模式误差，$h_0=1.0$ 时认为模式是准确的.

对于观测场的构造，先用准确的数值模式积分初始场 $\Phi_0^{tru}=\sin(2\pi y/3.2)+0.1\times\sin(2\pi x/6.4)+0.25$，得到真值场 $\Phi_t^{tru}$，再在真值场上叠加一些服从正态分布的随机扰动作为观测场，即 $\Phi_t^{o(a)}=\Phi_t^{tru}+a\times\Phi_t'$，其中 $\Phi_t'$ 是正态分布的随机扰动，$a$ 是表示误差大小的系数. 在这种情况下，$\Phi_t^{o(0.0)}$ 就是真值场 $\Phi_t^{tru}$.

取(1)式中的目标函数，权重系数矩阵 $\boldsymbol{W}$ 取对角阵，并对其进行归一化处理. $\|\ \|$ 采用欧氏范数，优化算法采用 L-BFGS (the limited memory Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanna method) 方法[10].

根据前面的理论分析结果，数值试验分为两个部分：模式误差较小时，对观测资料进行评价；观测误差较小时，评估模式误差的大小.

### 3.1 模式误差较小情形

当数值模式没有模式误差，即 $h_0=1.0$ 时，按照上述方法，分别取 $a$ 为 0.05, 1.0 和 2.0，构造 3 种误差大小不同的观测场 $\Phi_t^{o(0.05)}$、$\Phi_t^{o(1.0)}$ 和 $\Phi_t^{o(2.0)}$，做 3, 5, 7 d 的数值试验. 由于篇幅限制，这里只给出 7 d 的结果(见表 1)，其中 $\Phi_7^f$ 是以 $\Phi_0^{o(a)}$ 为初始场的 7 d 模式预报场.

**表 1 没有模式误差时 7 d 结果($\varepsilon=3.1$, $\varepsilon_0=1.6$)**

| | $E=\min J$ | $\|\Phi_0^*-\Phi_0^{o(a)}\|$ | $\|\Phi_7^f-\Phi_7^{o(a)}\|\cdot\|\Phi_7^{o(a)}\|^{-1}$/% |
|---|---|---|---|
| $a=0.05$ | $7.926\times10^{-5}$ | 0.1409 | 1.6 |
| $a=1.0$ | $4.362\times10^{-3}$ | 1.648 | 41 |
| $a=2.0$ | $4.706\times10^{-2}$ | 2.532 | 63 |

从表 1 可以看到，当 $a=0.05$ 时，对于初始观测场 $\Phi_0^{o(a)}$，在 7 d 时有 $\min J<\varepsilon$ 和 $\|\Phi_0^*-\Phi_0^{o(a)}\|\ll\varepsilon_0$，说明此时直接把 $\Phi_0^{o(a)}$ 作为模式初始场，对 $\Phi_7^{o(a)}$ 都有在允许误差范围内的模拟，这与初始观测场 $\Phi_0^{o(a)}$ 误差很小是一致的. 当 $a=1.0$ 时，对于初始观测场 $\Phi_0^{o(a)}$，有 $\min J<\varepsilon$ 和 $\|\Phi_0^*-\Phi_0^{o(a)}\|\sim\varepsilon_0$，说明如果直接把 $\Phi_0^{o(a)}$ 作为模式初始场，模拟误差会超出允许的预报误差范围，但如果对其进行某种处理(如资料同化)后改进模式初始场，对 $\Phi_7^{o(a)}$ 也可以有在允许误差范围内的模拟，与实际情况一致. 当 $a=2.0$ 时，对于初始观测场 $\Phi_0^{o(a)}$，有 $\min J<\varepsilon$ 和 $\|\Phi_0^*-\Phi_0^{o(a)}\|\gg\varepsilon_0$，虽然此时二维正压准地转模式有能力对 7 d 的观测场 $\Phi_7^{o(a)}$ 进行模拟，但是由于初始观测场信息不够，利用现有的初始观测资料，得不到比较理想的模拟结果，还需要对现有的观测资料进行较大的改进，与初始观测场 $\Phi_0^{o(a)}$ 误差很大一致.

当 $h_0=0.99$、数值模式有较小模式误差时，数值试验结果与 $h_0=1.0$、没有模式误差时类似(表略).

### 3.2 观测误差较小情形

在没有观测误差时(即 $a=0.0$，取观测场 $\Phi_t^{o(0.0)}$)，分别取 $h_0=0.99$, $h_0=1.3$, $h_0=1.8$，引入 3 种模式误差，做 3, 5, 7 d 的数值试验. 同样只给出 7 d 的试验结果(见表 2)：

**表 2 没有观测误差时 7 d 结果($\varepsilon=3.1$, $\varepsilon_0=0.90$)**

| | $E=\min J$ | $\|\Phi_0^*-\Phi_0^{o(0.0)}\|$ | $\|\Phi_7^f-\Phi_7^{o(0.0)}\|\cdot\|\Phi_7^{o(0.0)}\|^{-1}$/% |
|---|---|---|---|
| $h_0=0.99$ | $1.398\times10^{-7}$ | $3.480\times10^{-2}$ | 1.5 |
| $h_0=1.3$ | $5.998\times10^{-4}$ | 0.8891 | 61 |
| $h_0=1.8$ | $4.508\times10^{-1}$ | 1.441 | 127 |

从表 2 可以看到，$h_0=0.99$ 时，有 $\min J<\varepsilon$ 和 $\|\Phi_0^*-\Phi_0^{o(0.0)}\|\ll\varepsilon_0$，说明此时模式误差很小，很容易通过调试初始场，得到对 $\Phi_7^{o(0.0)}$ 在允许误差范围内的 7 d 模拟. $h_0=1.3$ 时，有 $\min J<\varepsilon$ 和 $\|\Phi_0^*-\Phi_0^{o(0.0)}\|\sim\varepsilon_0$，说明在一定的初始误差补偿下，对 $\Phi_7^{o(0.0)}$ 也可以有在允许误差范围内的 7 d 模拟. 但此时模拟结果虽然很好，数值模式和初始场的误差都较大. $h_0=1.8$ 时，有 $\min J<\varepsilon$ 和 $\|\Phi_0^*-\Phi_0^{o(0.0)}\|\gg\varepsilon_0$，此时最优初始场与实际观测资料相差太大，最优初始场没有物理意义，说明模式误差很大，7 d 的模拟效果是虚假的，与实际模式误差很大一致.

?1994-2018 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

在有较小观测误差的情况下(即 $a=0.05$，观测场取 $\Phi_t^{o(0.05)}$)，试验结果与没有观测误差的情况(即 $a=0.0$，观测场取 $\Phi_t^{o(0.0)}$)类似(表略).

## 4 结论

本文用非线性优化方法对数值模式进行敏感性分析，并以二维正压准地转模式为例进行数值试验. 理论分析和数值试验均表明：用非线性优化方法对数值模式进行敏感性分析，能够量化判断数值模式是否具有模拟能力，并找到模拟效果最好时的初始场，即最优初始场，这是该方法优于其他敏感性分析方法最主要的一个方面；针对模拟效果好、但模式误差和初始误差仍可能很大的情况，该方法能在一定条件下，识别出对预报结果影响较大的误差类型.

最后，本文所用的二维正压准地准模式比较简单，得到的结论只是对非线性优化敏感性分析方法的验证. 下一步的工作将要对更复杂的数值预报模式考虑该方法的适用性.

## 参 考 文 献

1 Hall M C G, et al. Sensitivity analysis of a radiative-convective model by the adjoint method. J Atmos Sci, 1982, 39: 2038
2 Hall M C G. Application of adjoint sensitivity theory to an atmospheric general circulation model. J Atmos Sci, 1986, 43: 2644
3 Errico R M, et al. Sensitivity analysis using an adjoint of the PSU-NCAR mesoscale model. Mon Wea Rev, 1992, 120: 1644
4 Rabier F, et al. An application of adjoint models to sensitivity analysis. Beitr Phys Atmosph, 1992, 65: 177
5 Rabier F, et al. Sensitivity of forecast errors to initial conditions. Quart J Roy Meteor Soc, 1996, 122: 121
6 Gelaro R, et al. Sensitivity analysis of forecast errors and the construction of optimal perturbations using singular vectors. J Atmos Sci, 1998, 15: 1012
7 Zou X, et al. Incomplete observations and control of gravity waves in variational data assimilation. Tellus, 1992, 44A: 273
8 Mu M, et al. Nonlinear optimization problems in atmospheric and oceanic sciences, East-West Journal of Mathematics, 2002, Special Volume: 155
9 Talagrand O, et al. Variational assimilation of meteorological observation with the adjoint vorticity equation, I: Theory. Quart J Roy Meteor Soc, 1987, 113: 1311
10 Liu D C, et al. On the limited memory BFGS method for large scale optimization. Mathematical Programming, 1989, 45: 503

?1994-2018 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net