

卫星探测辐射率在数值天气预报中的直接应用

王宗皓

(国家卫星气象中心,北京 100081)

提 要

该文叙述在数值天气预报中直接应用辐射率而不经反演的原因,变分法在辐射率直接应用中的作用,以及介绍变分问题计算中的伴随方法.还指出 ATOVS 辐射率同样可以在 NWP 中直接应用.最后,介绍业务 NWP 直接应用辐射率的情况.

关键词:卫星辐射率;NWP;直接应用.

1 引 言

当前,在 NWP 中应用泰罗斯业务垂直探测器(TOVS)的信息有两种办法:一是间接途径,即所谓的“卫星到模式”的反演途径.另一种是直接途径,也称“模式到卫星”的途径.后者是本文要介绍的主要内容.用模式预报值代入辐射传递方程计算模拟辐射率,及其与探测辐射率之差,附加约束条件构成一种泛函,用优化方法,如变分法求出这种泛函达到极小的模式变量^[1,2,3,4].

地球科学中提出许多“反理论”(Inverse Theory)和“正理论”(Forward Theory).相应的解法称为反算法和正算法,经常求解反问题、正问题和正反混合问题.反理论提供未知的模式参数估计,而不是模式本身.用卫星仪器 TOVS 和 ATOVS 探测辐射率确定大气温、湿变量、地面温度以及其它地球物理参数,是反问题,也就是常称的反演问题.而由温、湿参数模拟观测辐射率称为正问题,也就是正演问题.解算正演问题比反演问题简单.反演问题是不适定问题,依赖初估值.有无数条大气温、湿廓线对应同一组辐射探测值,必须附加约束条件从中挑选需要的廓线,即参数估计.用变分法可作参数估计.变分法有许多优点,过去由于计算量大,无法业务应用.70年代提出用伴随方法(adjoint method)求评价函数的梯度,减少计算量,使得多数天气预报业务中心的计算机能承受变分法的大计算量.在 NWP 中除利用变分方法直接应用辐射率之外,在线性情况下也可用最内插方法(OI方法)^[5,6,7]直接同化卫星探测辐射率.辐射率直接应用,实际是将以往的反演过程

和数据同化过程合并进行,或者说是正演取代反演.构成辐射率转换成NWP变量/模式预报的相互循环作用过程.

2 直接应用卫星探测辐射率

目前,“卫星到模式”的反演途径,按W. L. Smith的看法^[8]:“探测和反演方法的发展,没有跟上模式模拟和数据同化方法的发展.相对其它信息而言,卫星数据的信息量趋于减少”.TOVS的垂直探测分辨率约3~6km,比模式垂直分辨率1.7到2.5km低.1979年(FGGE期间)卫星温度探测精度一般超过全球NWP;到1989年情况相反.反演温度精度(2~3K)低于模式预报精度(1K).卫星反演数据对北半球NWP产生负影响,使预报质量降低.因此,人们在积极改进探测器的垂直分辨率和全天候探测能力(如HIS、ATOVS、AIRS)的同时,寻找NWP中应用卫星探测信息的新途径新方法.其中辐射率直接应用是途径之一,特点有:

(1)避免计算复杂的不适定问题所引起的计算误差;(2)加快卫星探测注入分析/预报业务系统的同化循环;(3)使卫星探测信息转换过程考虑预报模式物理约束,控制转换误差;(4)通过正演模式的物理精确化,用背景场模拟探测辐射率,相互质量控制;(5)反演数据有相关性,同化处理不善,能降低NWP的质量.而原始辐射率(raw radiance)没有水平和垂直相关性.(6)用正演过程取代反演,避开反演问题求解的困难.

但是,与物理反演方法一样,辐射率直接应用正演过程是不可缺少的.正演过程隐含假定:可以用大气温、湿廓线模拟卫星探测辐射率,具有零偏差和低噪声.若不满足此假定,直接应用辐射率会造成不良影响.减少正演误差有两方面:一是经验统计调整正演误差^[9],用类似岭回归法调整正演误差,达到假设要求条件;二是物理上精确描写正演模式,如CO₂,O₃,SO₂和气溶胶浓度变化的作用.

3 辐射率直接转换的变分法

3.1 四维同化与变分法

四维数据按照物理约束、模式约束和误差结构等原则混合在一起,构成四维大气状态的最优估计,这就是四维数据同化.数据同化有两种方式:间断同化和连续同化.前者每隔6小时或12小时,将收集的数据和模式演变数据同化一次.而连续同化则是将随时收集到的数据进行同化.连续同化的问题在于新注入的数据,引起前6小时模式降水太多或太少.所以常用间断同化方式.

新注入的数据对运行中的模式有“扰动”作用.变分法就是寻找物理系统的扰动能量极小时的平衡状态.扰动能量通常表示为齐次二次型(泛函^[1]).因而变分法的基本问题是寻求这种泛函的极值(局部极小或极大),即泛函的梯度等于零的状态变量.用共轭斜量法可求解泛函极值.

数据同化和辐射率转换在数学物理上可统一为变分问题^[2],包括四部分:(1)预报模

式或观测模式及其伴随方程;(2)选择二次泛函(本文称评价函数);(3)计算梯度及起始点;(4)极小算法。

变分同化和辐射转换变分法的优点:(1)直接应用卫星探测辐射率;(2)同化非常规数据和历史数据;(3)考虑非线性关系;(4)应用模式预报值;(5)缩短模式 Spin-up 时间,抑制不实际的重力波;(6)避免模式初值化;(7)构成一维到四维同化/辐射转换方案;(8)研究其它方案的理论背景及其相互间的关系。

3.2 选择评价函数

广义能量泛函的一般形式^[1]

$$J(X, M, Z) = \sum_{j=1}^N J_j \quad (1)$$

式中 J_j 为分系统的能量泛函(评价函数)

$$J_j = \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_n} (X_j^T Q_j X_j + M_j^T R_j M_j + Z_j^T C_j Z_j) dt$$

上式 X 是系统扰动状态向量, M 是控制扰动向量, Z 是输入向量; Q 、 R 、 C 为加权矩阵, 其约束作用是调整扰动能量达到极小, M 是分系统数目. 上标“ T ”表示矩阵转置. 常用正态分布条件下的评价函数:

$$J(X) = \frac{1}{2} \{ (X - X_b)^T Q^{-1} (X - X_b) + (R - R_0)^T C^{-1} (R - R_0) \}$$

此处 X 表示输入的大气变量向量(探空、模式预报值等), X_b 是背景变量向量, R 是经过辐射转换模式

$$R = H(X) \quad (2)$$

计算的模拟辐射率, R_0 是探测辐射率, Q 是初估值误差协方差矩阵, C 是观测误差协方差矩阵. 评价函数 $J(X)$ 是 X 和 R 的泛函.

根据内积 $\langle \cdot, \cdot \rangle_F$ 和 $\langle \cdot, \cdot \rangle_G$ 空间连续算子转换性质, 有:

$$\langle H' \cdot \delta X, \delta R \rangle_G = \langle \delta X, H' \cdot \delta R \rangle_F \quad (3)$$

其中, 变分 δX 和 δR 有

$$\delta R = H'(X) \cdot \delta X \quad (4)$$

对评价函数同样有变分关系

$$\delta J = \langle \nabla_X J, \delta X \rangle_F = \langle \nabla_R J, \delta R \rangle_G \quad (5)$$

此处 $H' \cdot$ 是 $H(X)$ 的切线算子 $H'(X)$ 的伴随算子. $\nabla_X J$ 和 $\nabla_R J$ 分别表示评价函数 $J(X)$ 对 X 和 R 的梯度. 将式(4)代入式(5)得

$$\begin{aligned} \langle \nabla_X J, \delta X \rangle_F &= \langle \nabla_R J, H'(X) \cdot \delta X \rangle_G \\ &= \langle H' \cdot (X) \nabla_R J, \delta X \rangle_F \end{aligned}$$

由此得出

$$\nabla_X J = H' \cdot (X) \nabla_R J \quad (6)$$

因为 R 的分量(维数)远小于 X 的分量, 先算出 $\nabla_R J$, 再执行矩阵乘法, 即得评价函数 $J(X)$ 的梯度. 这样可节省大量的计算. 然后利用 $\nabla_X J$ 和极小算法:

$$X_{n+1} = X_n - (J'')^{-1}J' \quad (7)$$

求出使 $J(X)$ 达到极小的 X_{\min} . 式(7)中 $J' = \nabla_X J$, J'' 是 Hessian 矩阵, 且是 J 的二阶导数. 对于正态条件的评价函数 $J(X)$ 有^[10]

$$J' = Q^{-1}(X - X_b) + H'^*(X)C^{-1}(H(X) - R_0)$$

$$J'' = Q^{-1} + H'^*(X)C^{-1}H' + H''^*C^{-1}(H(X) - R_0) \quad (8)$$

3.3 一维变分反演试验

为了检验用正演模式的伴随方程作一维变分反演的可行性, 取 HIRS 19 个通道和 MSU 4 个通道的探测数据构成 R 的 23 个分量. 取 15 层温度、地面温度和 15 层湿度构成 X 的 31 个分量. 选用 NWP(法国, 模式名 PERIDOT) 分析的大气廓线 X_i , 用正演模式计算相应的模拟辐射率 R_i . 并将 X_i 和 R_i 作为“真值”, 叠加扰动 δX 和 δR 作为背景场和探测辐射率

$$X_b = X_i + \delta X$$

$$R_0 = R_i + \delta R$$

采用协方差矩阵 $Q = \langle \delta X^T, \delta X \rangle$ 和 $C = \langle \delta R^T, \delta R \rangle$ 生成约 100 根背景廓线和相应的“观测”辐射率, 执行一维变分反演试验, 即辐射率的同化转换试验. 用背景廓线作为初估状态, 用共轭斜量法确定 $J(X)$ 达到极小的 X_{\min} . 比较初估场的均方根误差和反演的均方根误差, 判断反演效果.

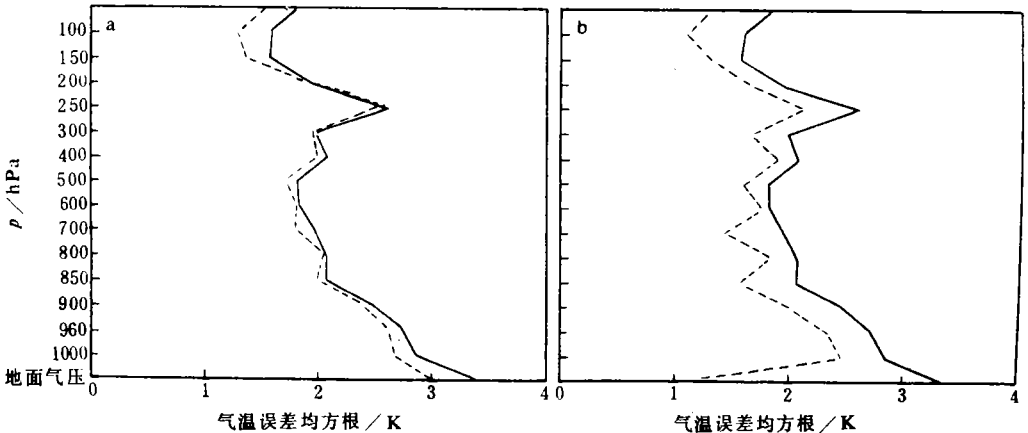


图1 辐射率变分转换温度均方根误差的垂直分布(a) 仅用 MSU 探测转换的温度误差
(b) 用 HIRS 和 MSU 探测转换的温度误差

图1是晴空 HIRS 和 MSU 辐射率变分反演廓线. 实线是背景误差, 虚线是反演误差. 从图中看出各层的反演误差都有明显减小, 大部分层次的误差在 1~2K 之内.

试验说明: ①变分法能考虑非线性; ②伴随方法可减少变分同化中无法承受的大计算量; ③不必简化正演模式. HIRS 和 MSU 的变分反演问题的数值计算用伴随方法是可行的; ④一维变分可引入微波表面比辐射率、云量、地面气压、云顶气压和云顶温度, 以及液态水作为控制变量, 容易推广到三维变分反演.

3.4 线性辐射率转换模式及算例

上节讨论 $H(X)$ 的非线性情形. 若 $H(X)$ 是 X 的线性算子, 则有

$$H(X) = H(X_b) + H'(X - X_b) \quad (9)$$

式中 H' 与 X 无关. 代入式(8)中, 并令

$$J' = O = Q^{-1}(X - X_b) + H' \cdot C^{-1}(H(X) - R_0)$$

得出 $J(X)$ 达到极小时的

$$X_{\min} = W(H(X_b) - R_0)$$

式中

$$W = QH' \cdot (H'QH' \cdot + C)^{-1} \quad (10)$$

式(10)相当最优内插客观分析(OI)方案, 是变分法的线性情况.

Durand 等曾用法国 PERIDOT 中尺度分析系统进行了六种试验. 方法是将辐射率观测与其模拟值之差直接嵌入“OI”分析方案, 用来作比较的反演值是 NESDIS 的反演厚度, 用卫星 NOAA-9 和 NOAA-10 探测辐射率. 分析/预报时间是 1987 年 1 月 30 日到 2 月 3 日. 六种试验用 A, S, T, N, I, R 表示, 其中: A 为仅用常规数据集, 作参照试验; S, T 和 N 均为 A 试验加上不同水平分辨率的 STAEM 数据, 这三种试验的水平分辨率依次为 500km、250km、80km; I 为 $A+3I$ 反演数据(Chedin 等, 1985); R 为 $A+$ 晴空辐射率. 试验目标是比较辐射率直接应用与不同分辨率的反演数据的分析/预报的差别. 我们分析了三个 σ 模式层 5 种温度情况与 A 试验之差的均方根误差, 发现卫星数据的作用与水平分辨率成正比. 辐射率直接应用的作用较 500km 分辨率的 SATEM 的作用大, 与 250km 分辨率的 SATEM 作用相似. 为进一步检查卫星数据的作用, 作了两组 24 小时的预报. 两组的开始时间分别是 1987 年 2 月 1 日 12UTC 和 2 日 00UTC, 并用对照观测值、对照分析图和对照天气图等三种方式检查预报结果. 第一组结果是: 开始时 I 分析最差, 12 小时预报也最差. R 接近 A 和 S . 24 小时预报 R 与 S 和 T 相当. 第二组结果是开始时 N 和 I 相当, R 最小, 12 小时预报则是 R 和 S 相当, I 最差, T 和 N 最好, 24 小时预报是 R 和 N, A, S 的水平一样, I 最差, T 最好.

以上试验说明, 辐射率直接应用, 避开反演的复杂计算, 能达到 S 和 N 的分析 / 预报水平, 是非常可取的. 王子厚等的试验^[7], 按权重和相关系数大小选择 HIRS 通道, 用 OI 方案作辐射率直接应用 NWP 分析 / 预报. 从结果看出达到反演数据的分析 / 预报水平, 某些层次上略好. 也说明辐射率的直接应用是可取的.

4 辐射率直接同化分析/预报循环应用

4.1 循环过程

辐射率直接应用实际上是正演和同化分析合并在一起进行, 避开反演的复杂计算. 用模式预报值和常规探空数据, 代入正演模式计算模拟辐射率, 将其与探测辐射率之差注入变分同化方案或其线性情况 OI 方案之中, 得出 NWP 模式预报的初始值. 继而用下一时

刻的预报值和探空数据,由正演模式计算辐射率之差,注入下一时刻的同化分析方案,作为模式预报的初始值,作出下一时刻的预报.如此循环,相互作用.这就是用正演过程代替反演过程.即用正演方法解算反演问题的方法.

4.2 ATOVS 探测辐射率循环应用

以上讨论的辐射率转换变分方案可应用于许多类型的遥感测量.目前已经用在 ATOVS 探测辐射率转换(即反演)模拟研究.用 NWP 模拟 ATOVS 探测信息,转换方案如同对 TOVS 探测一样,用伴随方法计算评价函数的梯度,用求极小值算法定 $J(X)$ 的极小值 X_{\min} . 正演模式 $R=H(X)$ 要作调整以适用于 ATOVS 的探测.背景场误差协方差 Q 可用短期预报的温、湿、海平面气压的预报误差作出估算.但是预报模式不能提供云和表面比辐射率 $\epsilon(\nu)$,其先验值只能取某种平均值.微波表面比辐射率 $\epsilon(\nu)$ 要对不同物质面作测量,并对 AMSU 频谱波段作必要的参数化.构造观测误差协方差矩阵 C 时,要对不同纬度、不同云况、不同陆地海洋微波面比辐射率,模拟探空噪声和正演误差.

ATOVS 只改进 TOVS 探测仪器的 MSU,保留 HIRS 和 SSU.改进的微波探测器有 A 和 B 两部分.低频部分 AMSU-A,通道为 1~15,频率在 23~89GHz 之间,水平分辨率约 50km,主要探测温度;高频部分 AMSU-B 通道为 16~24,频率在 89~183GHz 之间.水平分辨率约 17km,主要探测水汽信息,扩大有效探测区到部分云区.

根据 TOVS 和 ATOVS 通道的组合反演模拟试验^[10]可知,组合 AMSU-A、AMSU-B、HIRS 的反演比组合 HIRS、MSU 的反演结果有明显改进,接近理论上能达到的信息内容^[10].

如同 TOVS 辐射率参与同化/预报循环,ATOVS 辐射率也可同化/预报循环应用.

5 四维辐射率变分转换

5.1 伴随方法

伴随方法也叫模式拟合方法,即用模式预报值拟合卫星观测和背景数据.设有卫星探测时间序列 $R_0(t)$ 、模式预报时间序列 $X(t)$ 和背景数据时间序列 $X_b(t)$,三者之间时间对应匹配.由 t 时间的辐射转换模式

$$R(t) = H(X(t)), \quad t_0 \leq t \leq t_n \quad (11)$$

和数值预报动力模式

$$\frac{dX}{dt} = F(X(t)), \quad t_0 \leq t \leq t_n \quad (12)$$

和背景数据 $X_b(t)$ 组成 t 时间的评价函数:

$$J(X(t), t) = \frac{1}{2} \{ [X(t) - X_b(t)]^T Q^{-1} [X(t) - X_b(t)] + [R(t) - R_0(t)]^T C^{-1} [R(t) - R_0(t)] \} \quad (13)$$

从 t_0 到 t_n 的总评价函数为

$$J(X) = \sum_{i=t_0}^{t_n} J(X(t), t) \quad (14)$$

为书写简单,下面用 W 表示 Q^{-1} 和 C^{-1} ; $X(t)$ 表示 $X(t)$ 和 $R(t)$; $\hat{X}(t)$ 表示 $X_b(t)$ 和 $R_0(t)$; 下标 i 表示时间 $t, i = 0, 1, \dots, n$. 这样, $J(X)$ 对每个 $X_i = X(t)$ 的变分之和为

$$\begin{aligned} \delta J(X) &= \sum_{i=0}^n \langle \nabla_{x_i} J(X_i, i), \delta X_i \rangle \\ &= \sum_{i=0}^n \langle H' * W(X_i - \hat{X}_i), \delta X_i \rangle \end{aligned} \quad (15)$$

当 X 表示 R 时,式中 $H' *$ 是 $H(X_i)$ 对 X_i 的导数伴随;当 X 表示 $X(t)$ 时, $H' * = J$. 注意到 $J(X)$ 对 $X_0 = X(t_0)$ 的变分为

$$\delta J(X) = \langle \nabla_{X_0} J(X), \delta X_0 \rangle \quad (16)$$

以上各式中的 $\delta X(t) = \delta X_i, i = 1, 2, \dots, n$, 由式(12)的扰动线性化方程(切线方程)

$$\frac{\partial \delta X}{\partial t} = F'(t) \delta X \quad (17)$$

给出. 式(17)中 $F'(t)$ 是 $F(X(t))$ 对 $X(t)$ 的导数. 仍用 W 表示 $H' * W$, 用向前时间差分代替式(17)中的时间微商, 有

$$\begin{aligned} \delta X_i &= (I + \Delta t F'_{i-1}) \delta X_{i-1} \\ &= (I + \Delta t F'_{i-1})(I + \Delta t F'_{i-2}) \cdots (I + \Delta t F'_0) \delta X_0 \end{aligned}$$

以之代替式(15)中的 $\delta X(t) \equiv \delta X_i$, 可得

$$\begin{aligned} \delta J(X) &= \langle \sum_{i=1}^n (I + \Delta t F'_0) \cdots \\ &\quad (I + \Delta t F'_{i-1}) W(X_i - \hat{X}_i), \delta X_0 \rangle \end{aligned} \quad (18)$$

比较看出此式中的求和项相当式(16)中的梯度 $\nabla_{X_0} J(X)$. 其中 $F' *$ 是 F' 的伴随算子. 可由式(17)的伴随方程

$$-\frac{\partial \delta' X}{\partial t} = F' * (t) \delta' X \quad (19)$$

在初始条件 $\delta' X = W(X_i - \hat{X}_i)$ 下, 反方向从 i 到 0 积分求得. 从 t_n 到 t_0 反方向积分伴随方程(19), 并在时刻 t_i , 加 $W(X_i - \hat{X}_i)$ 到 $\delta' X$ 上. 当 $t = t_0$ 时, 积分值 $\delta' X$ 等于梯度 $\nabla_{X_0} J(X)$.

5.2 辐射率变分转换的计算机要求

ECMWF 于 1991 年将 TOVS 辐射率快速转换模式的计算方案编成 FORTRAN-77 程序. TOVS 的 19 个通道 50 根廓线组成处理模块, 用 ECMWF 的 CRAY-YMP 的单个 CPU 试算, 正演模式用 67.5 毫微秒; 切线方程和伴随方程用 169 毫微秒. 用这些基本试算数据估计全球 TOVS 数据处理对计算机的要求. 说明, 即使用最大计算量的同化/反演变分方案, 全球 TOVS 探测辐射变分转换的计算量, 对多数业务中心现有的计算机不是很重的负担^[5].

参考文献

- 1 王宗皓. 天气分析预报系统工程理论模型. 中期数值天气预报文集. 北京: 气象出版社, 1982. 160~167.
- 2 王宗皓, 王子厚. 卫星探测反演和数据四维同化问题的统一观. 国家卫星气象中心技术报告, 1993. 第 9306 期.
- 3 The paut J-N and Moll P. Variational inversion of simulated TOVS radiances using the adjoint technique. *Q. J. Roy. Met. Soc.*, 1990, **116**: 1425~1448.
- 4 王宗皓, 朱宗申等. 数据同化/卫星反演/数值预报相互循环作用. 国家卫星气象中心技术报告, 1993. 第 9311 期.
- 5 Eyre J R. A new fast radiative transfer model for TOVS. Sixth ITOVS Conference, Airlie, Virginia, U. S. A. 1~6 May 1991. 118~133.
- 6 Durand Y, et al. Use and impact of satellite data in the PERIDOT system. Workshop on the use of satellite data in NWP, 9~12 May 1989, 1: 107~137.
- 7 王子厚. TOVS 亮温直接应用于 NWP 的试验研究(硕士论文). 1993.
- 8 Smith W L. Atmospheric soundings from satellites: false expectation or the key to improved weather prediction. *Q. J. Roy. Met. Soc.*, 1991, **117**: 267~297.
- 9 Fleming H E, et al. A retrieval/forecast interactive system, Joint ECMWF/EUMETSAT Workshop, ECMWF, Reading, U. K. 1989.
- 10 Eyre J R. TOVS Retrievals at U. K. Meteorological Office. ECMWF/EUMETSAT Workshop on the use of satellite data in operational NWP: 1989 - 1993, 9~12 May 1989.

DIRECT USE OF SATELLITE SOUNDING RADIANCES IN NUMERICAL WEATHER PREDICTION

Wang Zonghao

(National Satellite Meteorology Center, Beijing 100081)

Abstract

The paper described comprehensively that the satellite sounding radiances can be used directly in NWP, not have to be retrieved by use of profiles of temperature and humidity. The roles of variational algorithm for the direct use of radiances and the calculation of the adjoint equation are presented. The direct method is very flexible and can in principle be applied to ATOVS' radiance inversion. And, the some aspects the direct use in operational NWP are also introduced.

Key words: Satellite radiance; NWP; Direct use.