

基于无导数优化方法的数值模式误差估计*

黄启灿¹⁾²⁾ 胡淑娟^{1)†} 邱春雨¹⁾²⁾ 李宽²⁾ 于海鹏¹⁾ 丑纪范¹⁾

1)(兰州大学大气科学学院, 兰州 730000)

2)(兰州大学数学与统计学院, 兰州 730000)

(2014年1月5日收到; 2014年3月17日收到修改稿)

初始场误差和模式误差是制约数值预报准确率的两个关键因素, 本文主要考虑利用历史观测资料实现时空演变的模式误差的估计问题. 通过把模式误差综合考虑成为准确模式中的未知项, 把历史资料看作是带有未知项的准确模式的特解, 构造了求解时空演变的模式误差项的反问题及其最优控制问题. 给出了一个解决最优控制问题的无导数优化方法, 该方法的优点是不需要建立原数值模式的切线性模式与伴随模式, 它只需在增加一个外强迫项的基础上运行原数值模式即可实现模式误差项的最优估计. 关于 Burgers 方程的算例表明, 无论模式的初始状态是否准确已知, 无导数优化方法都能有效解决时空演变的模式误差的最优估计问题, 它为实际业务模式利用历史数据提取模式误差信息并显著地改进预报效果提供了一种方便可行的数值方法与理论依据.

关键词: 模式误差, 历史资料, 反问题, 无导数优化

PACS: 92.60.Wc

DOI: 10.7498/aps.63.149203

1 引言

制约数值预报准确率的因素主要有两个: 一是模式变量初始场误差; 二是由于描述实际大气的模式动力方程组及各种物理过程的不准确性所产生的模式误差. 资料同化技术^[1,2]、集合预报手段^[2-4]以及条件非线性最优扰动法^[5-7]等是减少初始场误差对预报结果影响的重要方法. 这些方法的一个共同特点就是假设预报模式是完美的, 认为相较于系统中其他误差, 模式误差很小, 可以忽略. 然而, 实际中, 模式方程和各种物理化过程都不可能准确给出, 这就使得传统变分同化方法在利用动力模式提供的信息滤除初始场误差的过程中, 一部分模式误差也被吸收到初始场中^[8]. 因此, 在模式初始场精度得到很大提高的同时, 模式误差的影响应该引起关注.

目前, 关于减小模式误差所做的工作主要体现

在提高模式的分辨率、改进物理过程的参数化方案等精细化过程中, 研究取得了显著成效. 然而, 这方面的工作是从传统的观点出发, 认为数值预报本质上是一个偏微分方程组的初边值问题, 不能有效利用我们所积累的大量历史实况资料. 顾震潮^[9]早在 1958 年就指出, 把数值预报问题提为初边值问题是一个根本缺陷. 丑纪范^[10]从信息论的视角指出, 初边值问题由于仅利用一个时刻的数据而导致输入的信息量不足, 应考虑利用历史数据以增加输入数据中所包含的预报量信息, 并进一步论证了数值模式误差信息隐藏在过去的历史数据中, 建议将数值预报问题提为反问题, 实现历史数据的内在使用, 使得统计方法和动力方法有机结合. 基于此观点, 我国学者提出了有别于传统方法的动力相似预报方法, 建立了基于相似离差的动力相似预报模式^[11,12]和相似误差订正方法^[13]. 以上工作是在不改变现有模式的前提下, 利用历史资料实现了预报

* 公益性行业(气象)科研专项(批准号: GYHY201206009)、中央高校基本科研业务费专项资金(批准号: lzujbky-2013-11)和国家重点基础研究发展计划(批准号: 2012CB955902, 2013CB430204)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: hushuju@lzu.edu.cn

误差和模式误差的订正过程,并在 T63L16 月动力延伸业务预报模式的模拟中取得了较好的预报技巧^[14].然而,以上工作多数是基于动力相似理论框架的模式误差订正问题的研究,并没有真正解决模式误差的时空演变的估计问题.

与此同时,基于反问题思想的数据同化过程开始考虑模式误差的影响^[15,16],提出了弱约束四维变分同化方法.然而,此类方法往往需要预先给出模式误差的协方差矩阵及其动力学特征,但实际中模式误差的特征是难以得知的.因此,通常假设模式误差具有与同化背景场相同的协方差矩阵,或者假设模式误差具有简单的动力学特征,例如服从一阶马尔可夫链分布等^[15,16].另一方面,在基于资料同化方法的模式误差估计中,往往需要计算原数值模式的切线性模式或伴随模式^[17,18],这也大大限制了这些方法在复杂模式中的应用.

针对模式误差的准确动力学特征数学描述的困难性^[19,20],本文将模式误差综合考虑成为准确模式中丢失了的^[21]、不知道其数学模型的外强迫项,将历史资料(不计观测误差)看作是带有未知模式误差项的准确模式的一组特解,将数值预报问题转化成为已知方程的解反过来确定方程中未知项的微分方程反问题,在这一过程中,模式误差的动力学特征完全由历史资料所表达的实际大气客观决定.因此,如果能够有效解决模式误差项所对应的微分方程反问题,并将求得的反问题解代入数值模式,必然能够大大改进原有数值模式的预报效果.为了克服现有的梯度类方法在求解微分方程反问题过程中使用原模式的切线性模式或伴随模式的缺陷,本文构造了一类无导数优化方法.该方法的最大特点是它只需在增加一个外强迫项的基础上运行原数值模式,即可完成微分方程反问题所对应的最优控制问题的求解过程.该方法的易实现性为复杂业务模式利用所积累的大量历史数据估计模式误差的时空演变信息提供了可能.

2 模式误差反问题及最优控制问题

一般来说,在不考虑边界条件影响的情况下,数值预报模式可以表示成如下的初值问题:

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} + L(\psi(x, t)) \\ = 0 & x \in D, t > t_0, \\ \psi|_{t=t_0} = \psi_0(x) \end{cases} \quad (1)$$

其中 D 表示空间变量 x 的取值范围, ψ 和 ψ_0 分别表示模式变量(包括风速、温度、气压、湿度等)及其初值, L 是表征模式的非线性算子.由于动力方程组及各种物理过程参数化的不准确性,模式(1)仅是实际大气的一个近似.假设实际大气所满足的准确模式为

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} + A(\psi(x, t)) \\ = 0 & x \in D, t > t_0, \\ \psi|_{t=t_0} = \psi_0(x) \end{cases} \quad (2)$$

其中 A 是表征真实大气运动的非线性算子.模式(2)可看作是各种数值模式逼近实际大气的极限.若假设

$$E(\psi(x, t)) = A(\psi(x, t)) - L(\psi(x, t)),$$

则准确模式(2)可改写为

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} + L(\psi(x, t)) \\ + E(\psi(x, t)) = 0 & x \in D, t > t_0, \\ \psi|_{t=t_0} = \psi_0(x) \end{cases} \quad (3)$$

其中的 $E(\psi(x, t))$ 表示实际大气存在但未能被模式(1)所描述的外强迫项,我们称它为数值模式(1)的模式误差项.

从动力学的观点来看,现有的观测资料可以看作是描述实际大气的动力系统.因此,包括初值在内的历史资料

$$\begin{aligned} \psi|_{t=t_0} &= \psi_0(x), \\ \psi|_{t=t_1} &= \psi_1(x), \dots, \psi|_{t=t_K} = \psi_K(x) \end{aligned}$$

实际上是准确模式(3)的一系列特解,未知的模式误差项 $E(\psi(x, t))$ 的信息就包含在这些历史资料 $\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_K$ 中,我们需要从这些历史数据中提取模式误差项 $E(\psi(x, t))$ 的时空演变特征.

具有未知项 $E(\psi(x, t))$ 的模式(3)是一个标准的偏微分方程反问题.与正问题不同,已知特解 $\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_K$ 的问题(3)往往是超定的.为了解决它的这种不稳定性,在假设初值 $\psi_0(x)$ 准确已知的情况下,根据反问题的正则化理论^[22],可将已知特解 ψ_1, \dots, ψ_K 的问题(3)转变成为最优控制问题:

$$\begin{aligned} \min_E \frac{1}{2} \iiint_D \sum_{k=1}^K |\psi(x, t_k) - \psi_k(x)|^2 dx \\ + \frac{\alpha}{2} \int_{t_0}^{t_K} \iiint_D |E(\psi(x, t))|^2 dx dt, \end{aligned} \quad (4)$$

其中 $\psi(x, t_k)$ 是初值问题 (3) 在 t_k 时刻的解, $\psi_k(x)$ 是对应 t_k 时刻的观测, $\alpha > 0$ 是正则化参数. 问题 (4) 中的目标泛函第一项表示所求得的 $E(\psi(x, t))$ 能够使模式 (3) 的预报结果 $\psi(x, t_k)$ 与已有的观测 $\psi_k(x)$ 最接近, 保证了反问题解的存在性; 第二项则表明现有的数值模式 (1) 是基本可靠的, 所求得的误差项 $E(\psi(x, t))$ 是模式 (3) 中的小量. 同时, 问题 (4) 中的第二项也解决了反问题的不适定性, 保证了解的惟一性以及计算过程中的稳定性.

当初值 $\psi_0(x)$ 不准确或未知时, 我们把 $\psi_0(x)$ 和 $E(\psi(x, t))$ 同时看作是已知特解 ψ_1, \dots, ψ_K (历史资料) 的反问题 (3) 的未知项, 此时的最优控制问题为

$$\begin{aligned} \min_{E, \psi_0} & \frac{1}{2} \iint \iint_D \sum_{k=1}^K |\psi(x, t_k) - \psi_k(x)|^2 dx \\ & + \frac{\alpha_1}{2} \int_{t_0}^{t_K} \iint \iint_D |E(\psi(x, t))|^2 dx dt \\ & + \frac{\alpha_2}{2} \iint \iint_D |\psi_0(x)|^2 dx, \end{aligned} \quad (5)$$

这里的 $\psi(x, t_k)$ 和 $\psi_k(x)$ 的意义同问题 (4), $\alpha_1 > 0$ 和 $\alpha_2 > 0$ 是正则化参数. 同样, 问题 (5) 中的目标泛函第一项解决了反问题解的存在性, 第二项和第三项解决了反问题解的惟一性与稳定性.

据以上论述, 模式 (3) 所约束的优化问题 (4) 与 (5) 的解分别对应了初值 $\psi_0(x)$ 准确已知与未知情况下的模式误差项 $E(\psi(x, t))$. 下面, 我们介绍一类无导数优化方法解决非线性系统 (3) 约束的优化问题 (4) 和 (5) 的求解问题.

3 优化问题的求解

由于我们通常无法求得非线性系统 (3) 约束的优化问题 (4) 与 (5) 的解析解, 只能求其离散形式的数值解. 事实上, 我们能够很容易地将模式 (3) 约束的问题 (4) 或 (5) 离散为

$$\min_E f(\psi, E), \quad \text{s.t. } c(\psi, E) = 0, \quad (6)$$

或者

$$\min_{E, \psi_0} f(\psi, \psi_0, E), \quad \text{s.t. } c(\psi, \psi_0, E) = 0, \quad (7)$$

其中 $f(\psi, E)$ 和 $f(\psi, \psi_0, E)$ 分别表示优化问题 (4) 和 (5) 的目标泛函离散形式. $c(\psi, E) = 0$ 和 $c(\psi, \psi_0, E) = 0$ 分别表示模式 (3) 在初值 $\psi_0(x)$ 准确已知或未知情况下的离散形式, 可以将它们看作是数

值模式 (1) 在考虑了模式误差项之后的改进模式. 由于预报变量 ψ 实际上可表示成 $\psi = \psi(E)$ 或者 $\psi = \psi(\psi_0, E)$, 因此, 问题 (6) 和 (7) 实际上可表示成为无约束优化问题:

$$\min_E f(\psi(E), E) = \hat{f}(E), \quad (8)$$

或者

$$\min_{E, \psi_0} f(\psi(\psi_0, E), \psi_0, E) = \hat{f}(\psi_0, E). \quad (9)$$

目前, 求解有约束的优化问题 (6) 和 (7) 的常用方法是先借助于它们的无约束形式 (8) 与 (9), 计算目标泛函 $\hat{f}(E)$ 与 $\hat{f}(\psi_0, E)$ 关于扰动量 E 及 ψ_0 的梯度, 再构造梯度类的下降法获得它们的极小值解. 在这个过程中, 不可避免地需要建立数值模式 (1) 的伴随模式. 国际上已有很多通过伴随模式来求解目标泛函关于扰动量的梯度的研究, 并建立了很多模式 (如二维准地转模式、MM5 模式、WRF 模式等) 的伴随模式 [17]. 我们知道, 建立一个复杂模式的伴随模式也是一个巨大的工程, 要耗费和原数值模式相当的工作量.

为了克服梯度类方法需要模式 (1) 的伴随模式的缺陷, 本文引入了如下所述的无导数优化方法. 实际上, 无导数优化的意义在于求解问题 (6) 和 (7) 的过程中并不需要通过计算目标泛函关于扰动量 E 及 ψ_0 的梯度来确定当前迭代点上目标泛函的下降方向, 而是预先给定一个分布均匀的搜索方向集合, 取定搜索步长, 在当前迭代点运行数值模式 $c(\psi, E) = 0$ 或者 $c(\psi, \psi_0, E) = 0$, 估计目标泛函在当前迭代点沿着各个搜索方向的下降情况. 如果目标泛函能够充分下降, 则沿当前方向利用给定的搜索步长更新当前迭代点, 否则缩小搜索步长重新估计目标函数值. 如此重复下去, 可以证明, 对于某些确定的问题, 可以得到全局收敛的泛函极小值点 [23]. 由于最优控制问题 (6) 和 (7) 本质上是同一类问题, 因此, 为了方便, 下面仅给出问题 (6) 的无导数最优化的求解过程, 关于问题 (7) 的求解过程可类似描述.

算法 1 最优控制问题 (6) 的无导数优化方法 [23]

1) 给定算法终止参数 γ_{tol} 、收缩参数 θ_{max} 以及充分递减函数 $\rho(t)$ 使满足 $\rho(t)/t \rightarrow 0$ 当 $t \rightarrow 0$ 时, 选取初始迭代点 E_0 、初始搜索步长 $\gamma_0 > \gamma_{\text{tol}}$ 以及搜索方向集合 $V = \{p_1, p_2, \dots, p_m\}$, 令 $k = 0$;

2) 如果 $\gamma_k < \gamma_{\text{tol}}$, 则停止计算;

3) 运行数值模式 $c(\psi_k, E_k) = 0$ 和 $c(\tilde{\psi}_k, E_k + \gamma_k p_j) = 0$, 计算目标泛函值 $f(\psi_k, E_k)$ 及 $f(\tilde{\psi}_k, E_k + \gamma_k p_j)$, 其中 $p_j \in V, j = 1, 2, \dots, m$;

4) 如果 $f(\tilde{\psi}_k, E_k + \gamma_k p_j) < f(\psi_k, E_k) - \rho(\gamma_k)$, 则

(a) 令 $E_{k+1} = E_k + \gamma_k p_j$ (迭代点更新);

(b) 选取 $\lambda_k \geq 1$, 令 $\gamma_{k+1} = \lambda_k \gamma_k$ (增大搜索步长);

5) 否则, 令 $E_{k+1} = E_k, \gamma_{k+1} = \theta_k \gamma_k$, 其中 $0 < \theta_k \leq \theta_{\max} < 1$ (保持原迭代点不动, 缩小迭代步长), 转第2步.

必须注意的是, 在算法1中, 搜索方向集合 $V = \{p_1, p_2, \dots, p_m\}$ 的选取对于整个计算过程至关重要. 预先选取搜索方向集合的一个基本准则是确保每步迭代过程中至少有一个搜索方向是目标泛函在当前迭代点上的下降方向. 我们知道, 若当前迭代点 E_k 不是目标泛函的极小值点, 必然有 $\nabla \hat{f}(E_k) \neq 0$, 则 $-\nabla \hat{f}(E_k)$ 的方向一定是泛函 $\hat{f}(E)$ 在当前迭代点 E_k 的下降方向. 因此有

$$\cos \theta = \frac{-\nabla \hat{f}(E_k)^T p_j}{\|\nabla \hat{f}(E_k)\| \|p_j\|}, \quad (10)$$

这里的 p_j 表示 V 中可能的搜索方向, θ 表示 $-\nabla \hat{f}(E_k)$ 与 p_j 的夹角. 如果在每步迭代中都有方向 p_j 使得 $\cos \theta \geq \delta > 0$ 成立, 则说明搜索方向集合 V 能够保证每步迭代必有下降方向. 这一条件实际上可表示为^[23]

$$\kappa(V) = \min_{v \in R^n} \max_{p \in V} \cos \theta = \frac{v^T p}{\|v\| \|p\|} \geq \delta, \quad (11)$$

另一方面, 为了能够在以当前迭代点为中心、以搜索步长为半径的搜索域内实现各个方向的搜索, 应该尽可能使得 V 中的方向向量长度基本相等, 这意味着对于任何 $p \in V$, 需满足

$$\beta_{\min} \leq \|p\| \leq \beta_{\max}, \quad (12)$$

其中的 β_{\min} 和 β_{\max} 是预先选定的非负常数.

满足条件(11)和(12)的搜索方向集合 V 能够保证算法1收敛到目标泛函的极小值点. 事实上, 下列坐标向量集合就是满足条件(11)和(12)的例子:

$$V = \{e_1, e_2, \dots, e_n, -e_1, -e_2, \dots, -e_n\}, \quad (13)$$

其中 e_i 表示 R^n 空间中第 i 个单位向量. 另外, 算法1中的充分下降函数 $\rho(t)$ 一般可取为 $\rho(t) = Mt^{3/2}$, 其中 M 是一个预先取定的正常数.

4 数值算例

在以上两节里, 我们从理论上给出了利用历史数据估计模式误差的最优控制问题及其无导数优化方法. 在这一节里, 我们以 Burgers 方程为例开展相应的数值试验, 以验证无导数优化方法的可行性与准确性. Burgers 方程通常具有下列形式:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} \\ -\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = E(x, t) \quad 0 < x < 1, 0 < t < 1, \\ u|_{t=0} = u_0(x) \end{cases} \quad (14)$$

其中的 ν 表示耗散系数, $u_0(x)$ 是初值, $u(x, t)$ 和 $E(x, t)$ 分别表示模式的状态变量与未知的外强迫项.

由于我们只考虑模式误差项与初始条件对模式预报结果的影响程度, 因此, 这里不妨选取齐次的边界条件. 在以下的讨论中, 均假设当初始条件取为

$$u_0(x) = \sin 2\pi x \quad 0 < x < 1, \quad (15)$$

外强迫项取为

$$\begin{aligned} E(x, t) \\ = A \cos t \sin 2\pi x \quad 0 < x < 1, 0 < t < 1 \end{aligned} \quad (16)$$

时, 模式(14)是准确模式, 它所对应的数值模式为

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} \\ -\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t < 1, \\ u|_{t=0} = u_0(x) \end{cases} \quad (17)$$

则数值模式(17)的模式误差实际上就是准确模式(14)的外强迫项 $E(x, t)$, 它表示实际中存在却未能被模式(17)所表示的过程. 下面将分初始条件准确已知与未知两种情形, 分别说明基于无导数优化方法的数值模式误差估计过程.

4.1 初始条件准确已知的情形

假设模式(14)与(17)的初始条件均已知, 且为(15)式. 为了阐明利用历史数据估计模式误差项 $E(x, t)$ 的时空演变过程, 我们首先要求解具有外强迫项(16)的准确模式(14), 以产生理想的“观测”数据 $u|_{t=t_1} = u_1(x), \dots, u|_{t=t_K} = u_K(x)$, 再利用这些理想“观测”, 据第2节的(4)式, 构造模式误差

项 $E(x, t)$ 所满足的最优控制问题:

$$\min_E \frac{1}{2} \int_0^1 \sum_{k=1}^K |u(x, t_k) - u_k(x)|^2 dx + \frac{\alpha}{2} \int_0^1 \int_0^1 |E(x, t)|^2 dx dt, \quad (18)$$

使得 $u(x, t_k)$ 与 $E(x, t)$ 满足初值问题 (14), 且 $u(x, t_k)$ 是 (14) 在 t_k 时刻的解, $u_k(x)$ 是对应 t_k 时

刻的“观测”.

为了得到由历史“观测”所确定的模式误差项 $E(x, t)$ 的时空演变值, 我们先需要将问题 (14) 与 (18) 完全离散化, 再利用无导数优化算法 1 求解它. 在空间变量离散时, 我们选用 Galerkin 法, 将 $[0, 1]$ 区间 n 等分, 记 $x_i = ih$ ($i = 1, \dots, n$), $h = 1/n$, 定义线性有限元基函数

$$\varphi_i(x) = \begin{cases} (x - x_{i-1})/h & x \in [x_{i-1}, x_i] \cap [0, 1] \\ (x_{i+1} - x)/h & x \in [x_i, x_{i+1}] \cap [0, 1] \\ 0 & \text{其他} \end{cases} \quad i = 0, \dots, n, \quad (19)$$

因 (14) 的边界条件齐次, 故 $u(x, t)$ 和 $E(x, t)$ 可分别近似为

$$u_h(x, t) = \sum_{j=1}^{n-1} \alpha_j(t) \varphi_j(x), \quad (20)$$

$$E_h(x, t) = \sum_{j=0}^n e_j(t) \varphi_j(x). \quad (21)$$

记

$$\mathbf{u}(t) = (\alpha_1(t), \dots, \alpha_{n-1}(t))^T,$$

$$\mathbf{E}(t) = (e_0(t), e_1(t), \dots, e_n(t))^T,$$

将 (20) 和 (21) 式代入初值问题 (14), 并用 $\varphi_i(x)$ 乘以方程 (14) 两端后在 $[0, 1]$ 上积分, 利用有限元基函数表达式 (19), 很容易计算得

$$\begin{cases} M \frac{d}{dt} \mathbf{u}(t) + A \mathbf{u}(t) + N(\mathbf{u}(t)) \\ -B \mathbf{E}(t) = 0 & 0 < t < 1, \\ \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0 \end{cases} \quad (22)$$

其中

$$Q = \frac{h}{6} \begin{pmatrix} 2 & 1 & & & & \\ & 1 & 4 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & 1 & 4 & 1 \\ & & & & & 1 & 2 \end{pmatrix} \in R^{(n+1) \times (n+1)}, \quad B = \frac{h}{6} \begin{pmatrix} 1 & 4 & 1 & & & \\ & 1 & 4 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & 1 & 4 & 1 \\ & & & & & 1 & 4 & 1 \end{pmatrix} \in R^{(n-1) \times (n+1)},$$

$$M = \frac{h}{6} \begin{pmatrix} 4 & 1 & & & & \\ & 1 & 4 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & 1 & 4 & 1 \\ & & & & & 1 & 4 \end{pmatrix} \in R^{(n-1) \times (n-1)}, \quad A = \frac{\nu}{h} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \in R^{(n-1) \times (n-1)},$$

$$N(\mathbf{u}(t)) = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} \alpha_1(t)\alpha_2(t) + \alpha_2^2(t) \\ -\alpha_1^2(t) - \alpha_1(t)\alpha_2(t) + \alpha_2(t)\alpha_3(t) + \alpha_3^2(t) \\ \vdots \\ -\alpha_{i-1}^2(t) - \alpha_{i-1}(t)\alpha_i(t) + \alpha_i(t)\alpha_{i+1}(t) + \alpha_{i+1}^2(t) \\ \vdots \\ -\alpha_{n-3}^2(t) - \alpha_{n-3}(t)\alpha_{n-2}(t) + \alpha_{n-2}(t)\alpha_{n-1}(t) + \alpha_{n-1}^2(t) \\ -\alpha_{n-2}^2(t) - \alpha_{n-2}(t)\alpha_{n-1}(t) \end{pmatrix} \in R^{(n-1)},$$

再将 (20) 和 (21) 式代入问题 (18) 的目标泛函后得

$$\min_{\mathbf{E}(t)} \sum_{k=1}^K \left(\frac{1}{2} \mathbf{u}(t_k)^T M \mathbf{u}(t_k) + \mathbf{g}_k^T \mathbf{u}(t_k) \right) + \frac{\alpha}{2} \int_0^1 \mathbf{E}(t)^T Q \mathbf{E}(t) dt, \quad (23)$$

其中 $\mathbf{u}(t_k)$ 是初值问题 (22) 在 t_k 时刻的解, $\mathbf{g}_k \in R^{(n-1)}$ 是对应 t_k 时刻的“观测”, 即 $(\mathbf{g}_k)_i = -hu_k(ih)$ ($i = 1, 2, \dots, n-1$).

下面再对问题 (22) 和 (23) 进行时间变量离散. 划分时间区间 $[0, 1]$ 为 $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_{mK} = 1$, 记 $\Delta t_i = t_{i+1} - t_i$ ($i = 0, \dots, mK-1$), $\Delta t_{-1} = \Delta t_{mK} = 0$, 其中 m 为取定的正整数. 对方程 (22) 关于时间变量分别做向前、向后一阶差分后再平均, 并对 (23) 式的目标泛函用复化梯形公式求积分, 得

$$\min_{\mathbf{E}_0, \dots, \mathbf{E}_{mK}} \sum_{k=1}^K \left(\frac{1}{2} \mathbf{u}_{mk}^T M \mathbf{u}_{mk} + \mathbf{g}_{mk}^T \mathbf{u}_{mk} \right) + \frac{\alpha}{2} \sum_{i=0}^{mK} \frac{\Delta t_{i-1} + \Delta t_i}{2} \mathbf{E}_i^T Q \mathbf{E}_i, \quad (24)$$

其中 $\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_i(t_i)$ ($i = 0, 1, \dots, mK$), $\mathbf{u}_{mk} = \mathbf{u}(t_{mk})$ ($k = 1, \dots, K$) 是下列方程的解

$$\left(M + \frac{\Delta t_i}{2} A \right) \mathbf{u}_{i+1} + \frac{\Delta t_i}{2} N(\mathbf{u}_{i+1}) - \frac{\Delta t_i}{2} B \mathbf{E}_{i+1} + \left(-M + \frac{\Delta t_i}{2} A \right) \mathbf{u}_i + \frac{\Delta t_i}{2} N(\mathbf{u}_i) - \frac{\Delta t_i}{2} B \mathbf{E}_i = 0, \quad (25)$$

这里的 $i = 0, 1, \dots, mK-1$, \mathbf{u}_0 是已知的. 问题 (24) 与 (25) 就是最优控制问题 (14) 与 (18) 的完全离散形式.

为了叙述方便, 令

$$\mathbf{E} = (\mathbf{E}_0^T, \mathbf{E}_1^T, \dots, \mathbf{E}_{mK}^T)^T, \quad \mathbf{u} = (\mathbf{u}_1^T, \dots, \mathbf{u}_{mK}^T)^T,$$

则 $\mathbf{E} \in R^{(n+1)(mK+1)}$, $\mathbf{u} \in R^{(n-1)mK}$, 且问题 (24) 与 (25) 的目标泛函与约束方程可分别表示为 $f(\mathbf{u}, \mathbf{E})$ 和 $c(\mathbf{u}, \mathbf{E}) = 0$. 结合 (11) 与 (12) 式, 我们可选取 $(n+1)(mK+1)$ 维空间中的 $2(n+1)(mK+1)$ 个正负坐标轴单位向量作为无导数优化算法 1 的搜索方向集合, 即令

$$V = \{p_1, \dots, p_{2(n+1)(mK+1)}\} = \{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_{(n+1)(mK+1)}, -\mathbf{e}_1, -\mathbf{e}_2, \dots, -\mathbf{e}_{(n+1)(mK+1)}\}, \quad (26)$$

其中 \mathbf{e}_i 表示 $R^{(n+1)(mK+1)}$ 空间中的第 i 个单位向量. 我们选取算法 1 的终止参数 $\gamma_{\text{tol}} = 0.001$, 收缩参数 $\theta_{\text{max}} = 0.5$ 以及充分递减函数 $\rho(t) = 0.1t^{3/2}$, 取初始迭代点 $\mathbf{E}^{(0)} = (0, \dots, 0)^T$, 初始搜索步长 $\gamma_0 = 1$. 利用算法 1 就可求得 (24) 与 (25) 式的解 $\mathbf{E} = (\mathbf{E}_0^T, \mathbf{E}_1^T, \dots, \mathbf{E}_{mK}^T)^T$, 将其代入表达式 (21), 即可得到数值模式 (17) 的模式误差项 $E(x, t)$ 的数值解 $E_h(x, t)$, 完成利用历史数据估计模式误差项 $E(x, t)$ 的时空演变过程.

为了表明无导数优化方法估计模式误差的有效性, 我们需要将 $E(x, t)$ 的数值解与精确解 (16) 式相比较, 也要将模式的预报结果与“观测”相比较. 为方便叙述, 我们称模式 (17) 的解为“预报”, 称以 (21) 式的数值解 $E_h(x, t)$ 为外强迫项的模式 (14) 的解为“改进预报”. 为了体现模式预报和“观测”之间的误差, 我们定义状态变量 $u(x, t)$ 的相对误差与均方差分别为

$$e(t_j) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (u(x_i, t_j) - \tilde{u}(x_i, t_j))^2}{\sum_{i=1}^n \tilde{u}^2(x_i, t_j)}}, \quad (27)$$

$$e'(t_j) = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (u(x_i, t_j) - \tilde{u}(x_i, t_j))^2}, \quad (28)$$

其中 $u(x_i, t_j)$ 表示“预报”或“改进预报”, $\tilde{u}(x_i, t_j)$ 表示观测.

在实际计算中, 取参数 $\nu = 0.1$, $\alpha = 0.05$, $A = 0.1$, 时间步长为 $\delta t = 0.05$, 空间步长为 $\delta x = 0.025$. 图 1 表示模式误差项 $E(x, t)$ 的数值解与精确解, 图 2 则表示将 $E(x, t)$ 的数值解代入模式 (14) 之后的预报量 $u(x, t)$ 的相对误差与均方差. 由图 1 和图 2 可看出, 当初始条件准确已知时, 模式误差项 $E(x, t)$ 的数值解在整个时空区域上都能够较好地符合精确解 (图 1), 预报量也较好地逼近了实况“观测”结果 (图 2), 且实际计算中使用的历史观测数据越多 (如图中的 $K = 10$), 模式误差及预报量的误差越小, 计算结果越接近实际状态.

4.2 初始条件未知的情形

假设模式 (14) 与 (17) 的初始条件均未知, 则除了未知的模式误差项外, 初始条件的信息也隐藏在历史数据中. 同样, 我们首先需要求解具有准确初

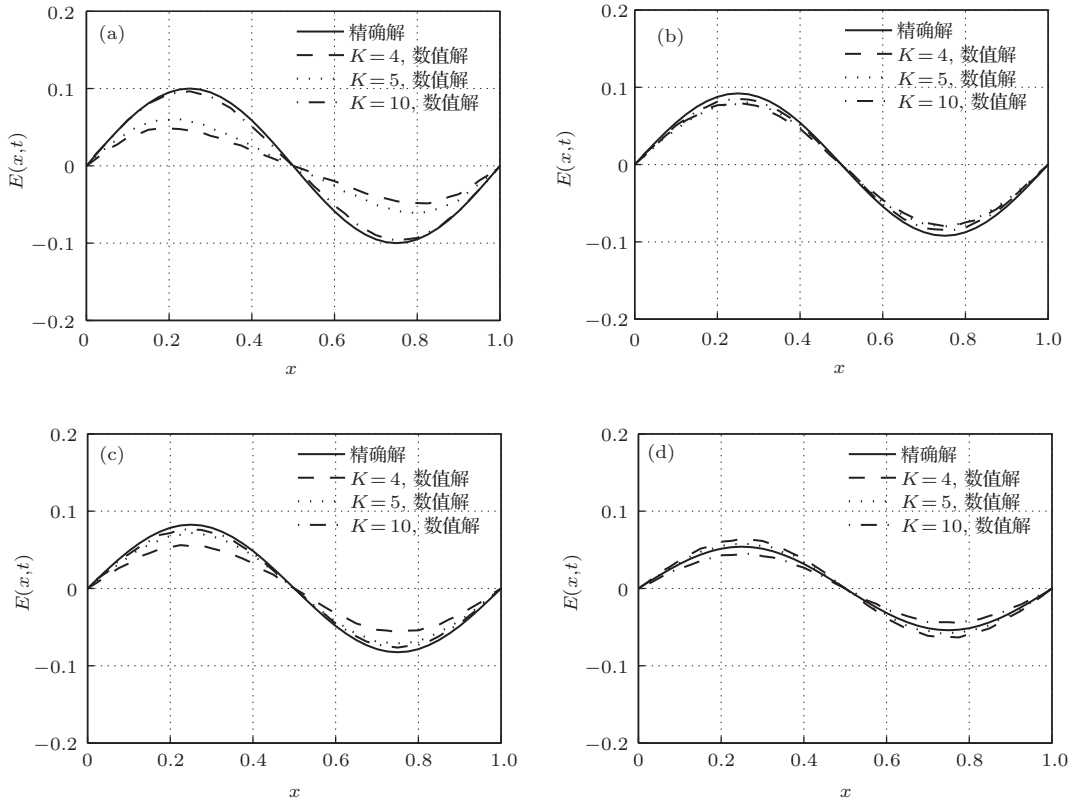


图1 初始条件准确已知时, 模式误差项 $E(x, t)$ 的精确解 (实线) 与数值解 (虚线), 其中 K 表示所使用的历史观测个数 (下同) (a) $t = 0$; (b) $t = 0.4$; (c) $t = 0.6$; (d) $t = 1.0$

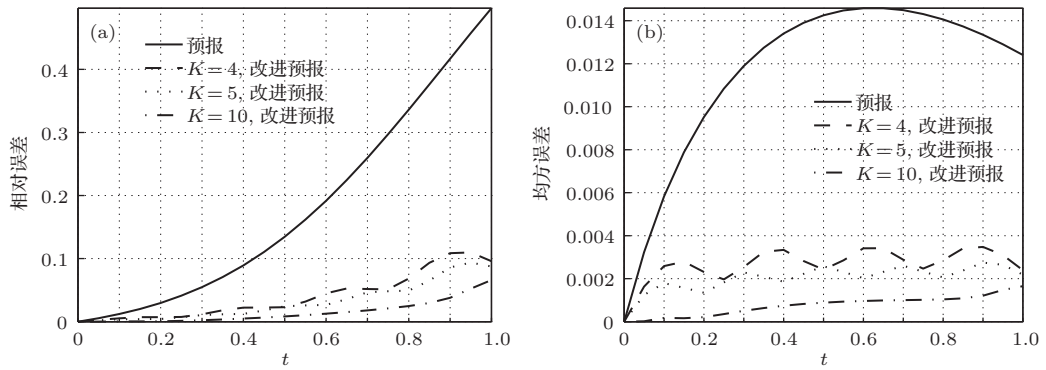


图2 初始条件准确已知时, 预报量 $u(x, t)$ 的相对误差 (a) 与均方误差 (b)

始条件 (15)、外强迫项 (16) 的准确模式 (14), 产生理想的“观测”数据 $u|_{t=t_1} = u_1(x), \dots, u|_{t=t_K} = u_K(x)$, 再利用这些理想“观测”, 根据 (5) 式, 构造模式误差项 $E(x, t)$ 及初始条件 $u_0(x)$ 所满足的最优控制问题

$$\begin{aligned} & \min_{u_0, E} \frac{1}{2} \int_0^1 \sum_{k=1}^K |u(x, t_k) - u_k(x)|^2 dx \\ & + \frac{\alpha_1}{2} \int_0^1 \int_0^1 |E(x, t)|^2 dx dt \\ & + \frac{\alpha_2}{2} \int_0^1 |u_0(x)|^2 dx, \end{aligned} \quad (29)$$

使得 $u(x, t_k)$, $u_0(x)$ 与 $E(x, t)$ 满足模式 (14), 且 $u(x, t_k)$ 是初值问题 (14) (以 $u_0(x)$ 为初值) 在 t_k 时刻的解, $u_k(x)$ 是对应 t_k 时刻的“观测”。

我们选用与 4.1 节相同的方法, 可将问题 (14) 与 (29) 离散成为

$$\begin{aligned} & \min_{u_0, E_0, \dots, E_{mK}} \sum_{k=1}^K \left(\frac{1}{2} \mathbf{u}_{mk}^T M \mathbf{u}_{mk} + \mathbf{g}_{mk}^T \mathbf{u}_{mk} \right) \\ & + \frac{\alpha_1}{2} \sum_{i=0}^{mK} \frac{\Delta t_{i-1} + \Delta t_i}{2} \mathbf{E}_i^T Q \mathbf{E}_i \\ & + \frac{\alpha_2}{2} \mathbf{u}_0^T M \mathbf{u}_0, \end{aligned} \quad (30)$$

其中 $\mathbf{u}_{mk} = \mathbf{u}(t_{mk})$ 是下列方程的解

$$\begin{aligned} & \left(M + \frac{\Delta t_i}{2} A \right) \mathbf{u}_{i+1} + \frac{\Delta t_i}{2} N(\mathbf{u}_{i+1}) - \frac{\Delta t_i}{2} B \mathbf{E}_{i+1} \\ & + \left(-M + \frac{\Delta t_i}{2} A \right) \mathbf{u}_i + \frac{\Delta t_i}{2} N(\mathbf{u}_i) - \frac{\Delta t_i}{2} B \mathbf{E}_i \\ & = 0, \end{aligned} \quad (31)$$

这里的 $i = 0, 1, \dots, mK - 1$, \mathbf{u}_0 表示未知的初值, 其他符号与问题 (24) 和 (25) 相同.

与 (24) 和 (25) 式的过程类似, 令

$$(\mathbf{u}_0^T, \mathbf{E}^T)^T = (\mathbf{u}_0^T, \mathbf{E}_0^T, \mathbf{E}_1^T, \dots, \mathbf{E}_{mK}^T)^T,$$

则 $(\mathbf{u}_0^T, \mathbf{E}^T) \in R^{(n-1)+(n+1)(mK+1)}$, 且问题 (30) 和 (31) 的目标泛函与约束方程可分别表示为 $f(\mathbf{u}, \mathbf{u}_0, \mathbf{E})$ 和 $c(\mathbf{u}, \mathbf{u}_0, \mathbf{E}) = 0$. 因此, 我们可选取 $(n-1) + (n+1)(mK+1)$ 维空间中的 $2((n-1) + (n+1)(mK+1))$ 个正负坐标轴单位向量作为无导数优化算法 1 的搜索方向集合, 即令

$$\begin{aligned} V = & \{p_1, \dots, p_{2((n-1)+(n+1)(mK+1))}\} \\ = & \{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_{((n-1)+(n+1)(mK+1))}, \\ & -\mathbf{e}_1, -\mathbf{e}_2, \dots, \\ & -\mathbf{e}_{((n-1)+(n+1)(mK+1))}\}, \end{aligned} \quad (32)$$

其中 \mathbf{e}_i 表示 $R^{(n-1)+(n+1)(mK+1)}$ 空间中的第 i 个单位向量. 利用算法 1 就可求得 (30) 和 (31) 式的解

$$(\mathbf{u}_0^T, \mathbf{E}^T)^T = (\mathbf{u}_0^T, \mathbf{E}_0^T, \mathbf{E}_1^T, \dots, \mathbf{E}_{mK}^T)^T,$$

将其代入表达式 (20) 与 (21) 式, 即可得到模式 (17) 的初始条件 $u_0(x)$ 与模式误差项 $E(x, t)$ 的数值解.

同样地, 为了表明当初始条件未知时无导数优化方法同时估计初始场和模式误差项的有效性, 我们需要将 $u_0(x)$ 和 $E(x, t)$ 的数值解与精确解相比较, 将模式的预报结果与“观测”相比较. 与 4.1 节有所区别, 我们称以 $u_0(x)$ 的数值解为初始条件的模式 (17) 的解为“预报”, 称以 $u_0(x)$ 的数值解为初始条件式、以 (21) 式的数值解 $E_h(x, t)$ 为外强迫项的模式 (14) 的解为“改进预报”. 关于状态变量 $u(x, t)$ 的相对误差与均方误差的定义同 (27) 和 (28) 式.

在实际计算中, 取参数 $\nu = 0.1$, $\alpha_1 = 0.05$, $\alpha_2 = 0.005$, $A = 0.1$, 时间步长为 $\delta t = 0.05$, 空间步长为 $\delta x = 0.025$. 当初始条件未知时, 模式误差项 $E(x, t)$ 的数值解及其精确解见图 3, 初始条件 $u_0(x)$ 的数值解与精确解见图 4, 图 5 则表示将 $E(x, t)$ 及 $u_0(x)$ 的数值解代入模式 (14) 后的预报量

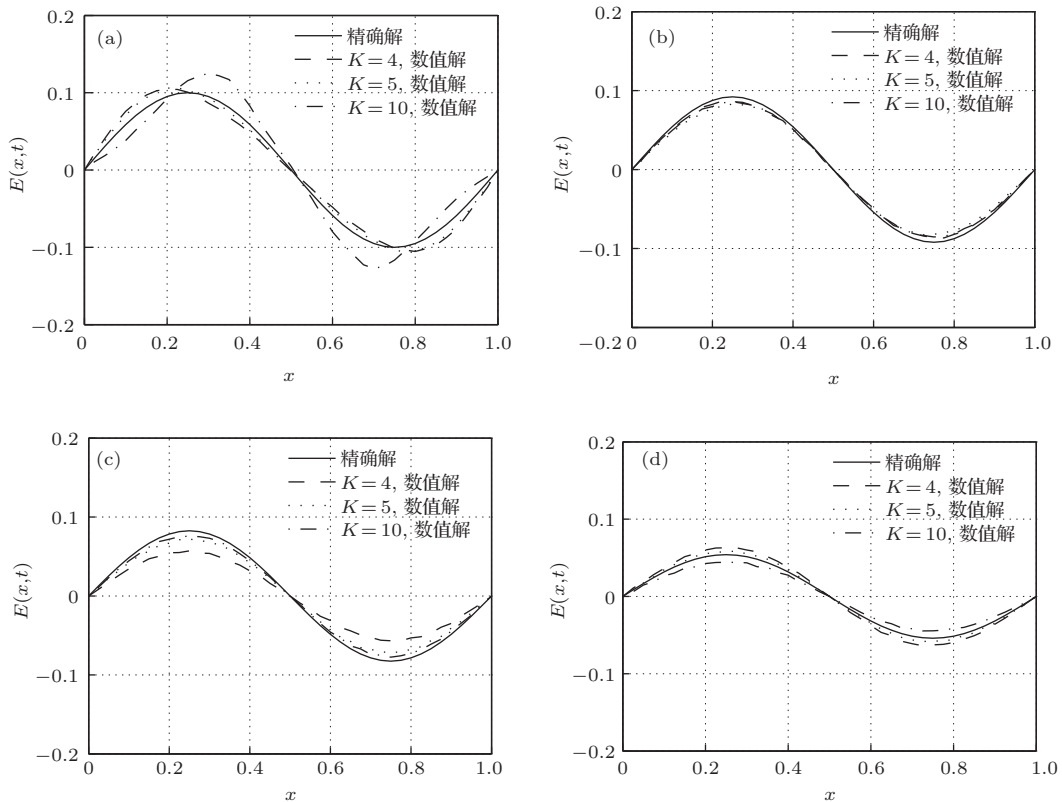


图 3 当初始条件未知时, 模式误差项 $E(x, t)$ 的精确解(实线)与数值解(虚线) (a) $t = 0$; (b) $t = 0.4$; (c) $t = 0.6$; (d) $t = 1.0$

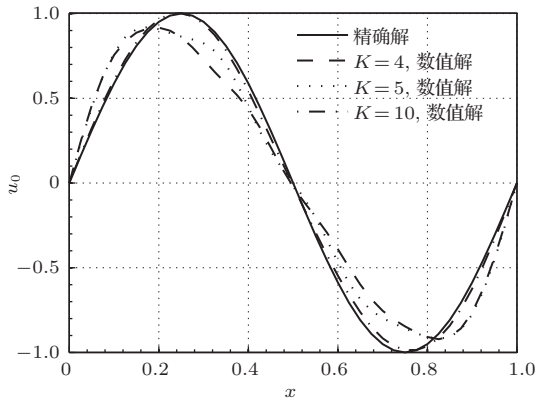


图4 初始条件 $u_0(x)$ 的精确解(实线)与数值解(虚线)

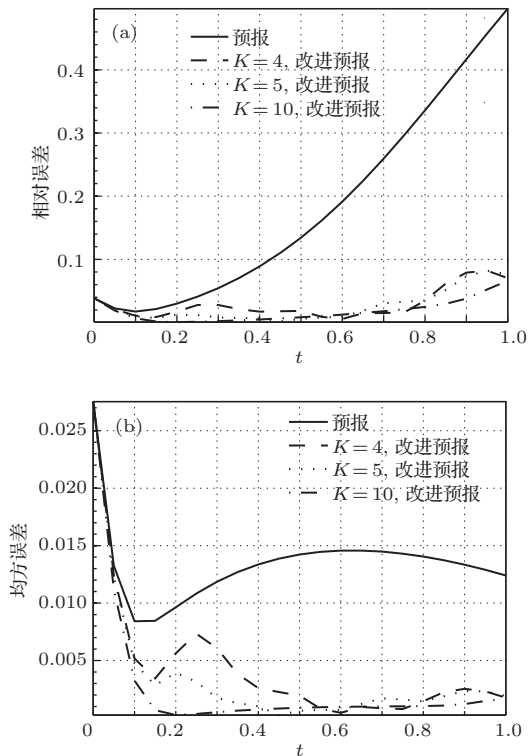


图5 当初始条件未知时, 预报量 $u(x, t)$ 的相对误差(a)与均方误差(b)

$u(x, t)$ 的相对误差与均方误差. 结合图1和图2可以发现, 无论模式的初始状态是否准确已知, 以无导数优化方法为工具的反问题模式都能够有效解决时空演变的模式误差的估计问题, 且在实际计算中使用的历史观测数据越多(如图中的 $K = 10$), 模式误差及预报量的误差越小, 计算结果越接近实际状态. 进一步分析还发现, 当初始条件准确已知时, 模式误差项 $E(x, t)$ 的数值解在整个区间上都能够较好地符合准确形式(图1), 但当初始条件未知时, 由于从初始时刻至第一个观测值点之间(如当 $K = 5$ 时, 在 $0 < t < 1/K = 0.2$ 之间)没有实况信息的输入, 使得在这段时间内模式误差的数值解

偏离了精确解(图3), 这就导致在这段时间内预报量的相对误差与均方误差都比初值已知情况下偏大一些(图2和图5). 另外, 图4的结果表明, 在考虑了模式误差影响的情况下, 利用历史观测资料与模式的预报信息能够有效地滤除初始场的误差, 为模式提供一个较准确的初始信息(如图4中 $K = 10$ 的结果).

5 结 论

为了研究随时空演变的模式误差的估计问题, 本文将数值模式误差综合考虑成为一个准确模式中的未知项, 在不计观测误差的情况下, 把现有的历史资料看作是准确模式的一系列特解, 构造了模式误差项所满足的反问题及最优控制问题, 并给出了它的无导数优化求解算法. 无导数优化方法使得在由历史资料提取模式误差信息的过程中, 不需要计算目标泛函的梯度, 因此也不需要建立原数值模式的切线性模式或伴随模式, 它只需要在增加一个外强迫项的基础上运行原有数值模式即可. 这一点是与四维变分同化过程考虑模式误差的作用所不同, 它使得利用历史观测资料提取模式误差的时空演变信息过程在复杂业务模式中的应用成为可能.

文中以 Burgers 方程为例, 数值试验了基于无导数优化方法的模式误差估计过程在改进数值预报中的作用. 研究表明, 无论模式的初始状态是否准确已知, 本文中所描述的模式误差估计方法都能够有效解决时空演变的模式误差项的估计问题. 计算中输入的观测数据越多, 模式误差及预报量的误差越小, 计算结果越接近真实状态, 但当输入的观测信息不足或较少时, 模式误差及预报量的误差偏大, 计算结果会偏离真实状态, 这一点与模式误差信息隐藏在历史观测数据中的观点相一致. 同时, 当模式的初值未知时, 本文所提供的方法因为考虑了模式误差的影响, 它使得利用历史观测资料与模式的预报信息滤除初始场误差的过程更有效, 为模式提供的初始场信息也更准确一些.

参考文献

- [1] Toth Z, Kalnay E 1993 *Bull. Amer. Meteor. Soc.* **74** 2317
- [2] Molteni F, Buizza R, Palmer T N, Petroliagis T 1996 *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.* **122** 73

- [3] Zheng Z H, Feng G L, Huang J P, Chou J F 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 199203 (in Chinese) [郑志海, 封国林, 黄建平, 丑纪范 2012 物理学报 **61** 199203]
- [4] Dong W J, Feng G L 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2347 (in Chinese) [董文杰, 封国林 2003 物理学报 **52** 2347]
- [5] Mu M, Jiang Z N 2007 *Chin. Sci. Bull.* **52** 1457 (in Chinese) [穆穆, 姜智娜 2007 科学通报 **52** 1457]
- [6] Duan W S, Mu M 2009 *Sci. China Ser. D* **52** 884
- [7] Mu M, Duan W S, Wang Q, Zhang R 2010 *Nonlin. Process. Geophys.* **17** 211
- [8] Du Q, Shen T L 2007 *J. Trop. Meteor.* **23** 182 (in Chinese) [杜钦, 沈桐立 2007 热带气象学报 **23** 182]
- [9] Gu Z C 1958 *Acta Meteor. Sin.* **29** 176 (in Chinese) [顾震潮 1958 气象学报 **29** 176]
- [10] Chou J F 2007 *Acta Meteor. Sin.* **65** 673 (in Chinese) [丑纪范 2007 气象学报 **65** 673]
- [11] Huang J P, Yi Y H, Wang S H, Chou J F 1993 *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.* **119** 547
- [12] Xiong K G, Zhao J H, Feng G L, Huang J P, Hu J G 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 149204 (in Chinese) [熊开国, 赵俊虎, 封国林, 黄建平, 胡经国 2012 物理学报 **61** 149204]
- [13] Ren H L, Chou J F 2005 *Acta Meteor. Sin.* **63** 988 (in Chinese) [任红利, 丑纪范 2005 气象学报 **63** 988]
- [14] Bao M, Ni Y Q, Chou J F 2004 *Chin. Sci. Bull.* **49** 1296
- [15] Sasaki Y 1970 *Mon. Wea. Rev.* **98** 875
- [16] Carrassi A, Vannitsem S 2010 *Mon. Wea. Rev.* **138** 3369
- [17] Zhong J, Fei J F, Huang S X, Du H D 2012 *Acta Phys. Sin.* **14** 149203 (in Chinese) [钟剑, 费建芳, 黄思训, 杜华栋 2012 物理学报 **14** 149203]
- [18] Huang J P, Yi Y H 1991 *Sci. China Ser. B* **34** 1246
- [19] Zhang Z S, Gong Z Q, Zhi R, Feng G L, Hu J G 2011 *Chin. Phys. B* **20** 019201
- [20] Feng G L, Gong Z Q, Zhi R, Zhang D Q 2008 *Chin. Phys. B* **17** 2745
- [21] Xue H L, Shen X S, Chou J F 2013 *Adv. Atmos. Sci.* **30** 1249
- [22] Adrian D, Thomas T, Franz S 2010 *Numerical Regularization for Atmospheric Inverse Problem* (Berlin: Springer-Verlag) pp163–217
- [23] Jorge N, Stephen W 2006 *Numerical Optimization* (Berlin: Springer-Verlag) pp220–244

Numerical model error estimation by derivative-free optimization method*

Huang Qi-Can¹⁾²⁾ Hu Shu-Juan^{1)†} Qiu Chun-Yu¹⁾²⁾ Li Kuan²⁾
Yu Hai-Peng¹⁾ Chou Ji-Fan¹⁾

1) (College of Atmospheric Sciences, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China)

2) (School of Mathematics and Statistics, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China)

(Received 5 January 2014; revised manuscript received 17 March 2014)

Abstract

Initial error and model error are key factors restricting the accuracy of numerical weather prediction (NWP). The purpose of the present study is to estimate the errors of spatiotemporal evolution model by using recent observations. By considering the continuous evolution of atmosphere, the observed data (ignoring the measurement error) can be viewed as a series of solutions of accurate model governing the actual atmosphere, and the model errors can be objectively assumed to be an unknown functional term (a missing forcing term) of the numerical model, thus the NWP can be considered as an inverse problem to uncover the unknown model error term by using the long periods of observed data. In this study, we first construct an inverse problem model with its optimization problem, which is constrained by the numerical model, to estimate the errors of spatiotemporal evolution model, then we present a derivative-free optimization (DFO) method to find the minimum solution of the optimization problem by running the numerical model with an external forcing term. The DFO method does not need to compute the gradient of the objective functional and the tangent linear model or adjoint model of the original numerical model. The numerical study of Burgers equation indicates that the presented methods can effectively uncover the model errors from the past data and evidently improve the numerical prediction. The procedures described in this paper open up possibilities for utilizing the past observation data to extract useful information about model errors and enhance the prediction efficiency in the operational models.

Keywords: model error, past data, inverse problem, derivative-free optimization

PACS: 92.60.Wc

DOI: 10.7498/aps.63.149203

* Project supported by the Special Scientific Research Project for Public Interest of China (Grant No. GYHY201206009), the Fundamental Research Funds for the Central Universities, China (Grant No. lzujbky-2013-11) and the National Basic Research Program of China (Grant Nos. 2012CB955902, 2013CB430204).

† Corresponding author. E-mail: hushuju@lzu.edu.cn