

应用一维变分法反演 GPS 掩星大气温度湿度廓线*

毕研盟[†] 廖蜜 张鹏 马刚

(国家卫星气象中心, 北京 100081)

(2013 年 2 月 16 日收到; 2013 年 4 月 1 日收到修改稿)

GPS 掩星观测的折射率是大气温度、湿度状态的函数, 应用一维变分方法 (1DVAR) 可以从折射率资料中同时反演出大气温度、湿度廓线, 利用 COSMIC 2011 年中国区域掩星观测数据对这一方法进行了测试, 背景场采用 ECMWF 大气廓线, 反演结果与相匹配的探空观测有较好一致性. 重点研究了一维变分反演方法中非理想气体效应 (non-ideal effect) 对温度、湿度反演误差的影响, 不同月份的比较结果表明, 非理想气体效应对掩星反演大气廓线是一种系统性影响, 考虑这一效应可对温度反演改进 0.1 K 的偏差 (bias), 对比湿可改进约 0.5% 偏差. 掩星资料作为数值天气预报资料同化中少数无需偏差改正的卫星遥感资料, 非理想气体效应改正无疑是重要的, 此外, 考虑这一效应对掩星资料的气候应用也有重要价值.

关键词: 一维变分, 掩星, 非理想气体效应

PACS: 93.85.Pq

DOI: 10.7498/aps.62.159301

1 引言

无线电掩星技术应用于太阳系行星大气研究已超过 40 年^[1]. 随着上世纪 90 年代全球定位系统 (The Global Positioning System, GPS) 的建成, 这一方法开始应用于地球大气的研究. GPS 卫星属于高轨道 (约 20000 km) 卫星, 通过在低轨道 (Low Earth Orbit, LEO) 卫星上放置 GPS 接收机, 可以利用临边观测 (limb-viewing) 的掩星技术观测地球大气, 用以获取大气温度、湿度等状态参数廓线^[2].

上述 GPS 掩星探测地球大气原理被美国 GPS/MET^[3]、德国 CHAMP^[4] 等试验所证实, 随后美国进行了更进一步的科学试验 COSMIC 计划^[5], 欧洲也在业务卫星 Metop 上放置了掩星探测仪 GRAS^[6], 以上计划目的是实施全球掩星探测, 以应用于数值天气预报. 中国气象卫星 FY3 系列 02 批次的卫星也准备实施掩星探测计划, 掩星探测仪 GNOS 将首先搭载于 FY-3C 卫星上, 计划于 2013 年下半年发射^[7].

利用 GPS 掩星接收机接收到的 $L1/L2$ 频率上

的相位信息, 结合卫星位置速度信息, 可计算出由大气延迟引起的附加相位 (excess phase) 信息^[8], 然后进一步计算信号弯曲角, 基于 Abel 变换和大气球对称假设可得到大气折射率廓线信息^[9,10]. 在水汽影响可忽略的平流层, 温度廓线可单独解出; 但是在对流层中, 仅从折射率却无法同时计算出大气温度及湿度廓线, 这称之为温、湿信息的模糊性, 必须考虑其他方法同时解算出温度、湿度随高度分布. 为解决上述模糊性问题, 最优估计或一维变分反演方法开始发展起来^[11,12]. 这种方法结合观测值、先验值以及误差信息同时反演温度与湿度垂直分布信息. 当前, 在欧洲 Metop/GRAS、美国 and 台湾合作的 COSMIC 数据处理中, 皆采用一维变分反演方法获得大气廓线.

无线电掩星资料不同于传统辐射率遥感资料, 显著优势之一是其观测资料的“绝对性”, 这是因为掩星探测的时间基准是高精度的原子钟, 因此, 在数值天气预报资料同化中, 掩星资料无需偏差改正. 另外, 掩星资料不依赖于我们了解不充分的光谱信息、大气成分组成信息, 这使得掩星资料正演算子更为直接. 但是, 掩星资料的同化算子并不是

* 国家自然科学基金 (批准号: 41175023, 40705010) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: biym@cma.gov.cn

完全精确, 比如, 折射率的计算系数尽管比较准确可靠, 但仍然带有一定的经验性. 2009 年, Aparicio 等^[13] 在综合利用 COSMIC, CHAMP 和 GRACE 数据同化中发现, 大气非理想气体效应 (大气可压缩性) 对数值天气预报模式有不可忽略的影响, 这一效应引出两个值得研究的问题, 第一是背景场高度与观测场高度的不一致性, 这种不一致性超出了模式可容忍的限度 (2 m); 另一个问题是大气可压缩性会影响折射率与大气温度及湿度等参量的关系表达式. 上述两个问题对模式预报皆有不可忽略的影响. 随后, 美国 NCEP^[14] 和欧洲 ECMWF^[15] 专家相继对这一问题展开了研究, 认为非理想气体效应在掩星资料的同化应用中不可忽略.

尽管上述问题是从掩星资料同化应用中发现的, 我们认为, 立足掩星资料反演应用的角度, 上述非理想气体效应是否应该予以考虑, 同样是一个值得研究的问题. 利用中国区域 COSMIC 掩星观测的折射率数据, 基于 ECMWF 背景场, 本文首先实现了掩星温度、湿度廓线的一维变分反演, 在此基础上, 研究了非理想气体效应对掩星折射率资料反演大气温度、湿度垂直分布的影响.

2 一维变分反演原理

本文反演大气廓线方法基于一维变分 (one-dimensional variational, 1DVAR) 分析方法, 在此简要介绍这一方法原理. 在上世纪 90 年代, 许多学者都对这一方法应用于地球物理参数的反演作过介绍^[16], 本世纪开始, 这一方法开始应用于无线电掩星大气参数反演中. 相应于一个大气状态矢量 x , 我们可以定义一个价值函数 J , J 表达式为

$$J(x) = (h(x) - y^0)^T (O + F)^{-1} (h(x) - y^0) + (x - x^b)^T B^{-1} (x - x^b), \quad (1)$$

其中 y^0 是观测矢量, h 是观测算子, x^b 是背景信息, O , F 和 B 分别对应于观测数据、观测算子和背景场的误差协方差矩阵, 因此, $h(x)$ 是利用大气状态 x 对观测量的一个估计. 对应于不同大气状态 x , 可得到不同的 J 值, 当 J 取最小值或达到收敛时, 所对应的 x 即为我们所求的状态.

获得 J 值最小的方法有多种, 比如 Levenberg-Marquardt 迭代方法、准牛顿 (quasi-Newton) 迭代方法. 相比较而言, 在本文对掩星数据的反演处理

中, 准牛顿迭代法表现出了更高的效率, 其计算可表达为

$$x_{i+1} = x^b + D_i^y (y^0 - h(x_i) + H_i(x_i - x^b)), \quad (2)$$

其中, 下标 i 代表迭代次数, H 是观测算子 h 的切线性算子或雅可比, D^y 表达式为

$$D^y = (H^T R^{-1} H_i + B^{-1})^{-1} H^T R^{-1}. \quad (3)$$

(3) 式中 $R = O + F$. 当迭代收敛时, 即大气状态的变化或价值函数变化小于设定阈值时, 迭代终止, 即 (2) 式给出了最优解. 如果观测和背景误差是无偏正态分布, 那么最优解代表了观测和背景之间最佳位置上的解.

3 掩星折射率表达式

GPS 掩星获取大气折射率廓线的基本原理基于 GPS 无线电信号在大气中传输时会受到地球大气的延迟影响. 延迟量是地球大气气压、温度、湿度以及电离层电子密度等参数的函数, 对中性大气来说, 电离层影响需要消除, 实际反演中可利用双频效应加以改正.

无线电掩星信号弯曲程度由信号路径上折射指数 n 决定, 实际应用中, 用折射率 N 计算更为方便, 二者关系式为

$$N = (n - 1) \times 10^6. \quad (4)$$

在早期研究中广泛采用 Smith (1953) 给出的表达式 (简称 SW53)^[17], 其中大气可压缩因子 Z 是忽略的, 但随着反演技术和数据应用的不断深入, 开始有学者认识到, 尽管 Z 趋向于 1, 但其影响不能忽略, 尤其这种影响是作为系统性误差出现的时候. 针对理想气体与非理想气体两种情况, 掩星折射率表达式并不相同, 下面分两种情况具体表述.

3.1 理想气体

忽略非理想气体效应, 大气折射率 N 可以用一个三项表达式表达为

$$N = \frac{k_1 P_d}{T} + \frac{k_2 e}{T} + \frac{k_3 e}{T^2}, \quad (5)$$

其中, P_d 是干空气气压 (hPa), e 是水汽分压 (hPa), T 是温度 (K), k_1, k_2, k_3 是经验系数, 如果不显式应用干空气气压, 而用总气压 $P (P = P_d + e)$ 表达, 那么 (5) 式可表达为

$$N = \frac{k_1 P}{T} + \frac{k'_2 e}{T} + \frac{k_3 e}{T^2}, \quad (6)$$

(6) 式中 $k'_2 = k_2 + k_1$. SW53 即采用 (6) 式的形式, 具体表达如下:

$$N = \frac{77.6P}{T} - \frac{6.0e}{T} + \frac{3.75 \times 10^5 e}{T^2}. \quad (7)$$

对 (7) 式进行进一步整理, 得到 N 的两项表达式

$$N \cong \frac{77.6P}{T} + \frac{3.73 \times 10^5 e}{T^2}. \quad (8)$$

尽管在 Smith 给出上述结果以后, 许多学者对 N 的表达式进行了更多研究 [18], 以得到精度更高的表达式, 但 (8) 式仍然应用最为广泛, 成为 GPS 气象领域广泛采用的折射率的“标准”表达式, 在我们的变分反演中也采用了这一表达式作为正演算子的基本表达式.

3.2 非理想气体

实际大气变化复杂, 理想气体的假设往往不能成立. 考虑非理想气体效应后, 大气状态方程、流体静力方程和折射率计算公式都要发生变化.

按照 Aparicio 等 [12] 给出的公式, 考虑非理想气体效应后, 大气状态方程可表达为

$$P = \rho RT_v Z, \quad (9)$$

其中 P 是总气压, ρ 是密度, R 是干空气气体常数, T_v 是虚温, Z 是湿空气的压缩系数 (compressibility factors). 压缩系数主要由空气分子有限尺度及相互吸收力引起, 在不同地点不同高度层上其值并不相同, 与具体大气状态有关. 考虑非理想气体效应下, 高度 h 处静力方程也需要进行相关修正, 在 100 hPa 高度处, 改正量可达 7 m [12].

压缩系数的确定是一件困难的事情, 因为要保证 $(Z - 1)$ 精度要达到 10^{-4} 量级, 不同人用不同方法给出了适用于不同区域的总压缩系数 Z 值. 在本项研究中, 总压缩系数的确定, 采用 Picard 等 (2008) 建议的多项式方法

$$Z = 1 - \frac{P}{T} [a_0 + a_1 t + a_2 t^2 + (b_0 + b_1 t)x + (c_0 + c_1 t)x^2] + \frac{P^2}{T^2} (d + ex^2), \quad (10)$$

式中 T, t 是温度, 分别以 kelvin, Celsius 为单位, x 是水汽的摩尔数, $a \cdots e$ 为系数, 一般情况下, Z 值小于 1. (10) 式考虑了干空气、水汽及二者的相互作用, 精度较高, 并且适用的气象条件范围宽广.

考虑 Z 的影响后, 折射率表达式相应修正为

$$N = \frac{k_1 P_d}{Z_d T} + \frac{k_2 e}{Z_w T^2} + \frac{k_3 e}{Z_d T}, \quad (11)$$

其中, P_d 是干空气分压, Z_d, Z_w 分别是与干空气、水汽相对应的压缩系数 [19]. 也有学者 (Thayer, 1974) [20] 在研究 N 表达时, 将可压缩性包含到 (11) 式右边项 K 系数中, 这样 (11) 式的 K 系数会与 (7) 式有所不同, 比如在 $0^\circ\text{C} = 273.15\text{K}$ 时, $Z_d = 1.000588, N = 288.04 \pm 0.05$, 计算的 $K1$ 系数为 77.604.

在本文研究中, 非理想气体效应引起的大气廓线反演精度改进是我们研究的重点, 因此, 本文采用 (11) 式形式显式表达出非理想气体效应影响.

4 反演试验

理论和相关研究表明, 大气非理想气体效应在气温较低或水汽含量较大时表现明显 [12], 因此, 我们选择中国区域冬季、夏季有代表性的月份数据进行分析. 利用 2011 年 COSMIC 折射率观测资料进行了一维变分反演试验, 其中基于理想气体假设下的反演作为控制试验, 基于非理想气体效应的 1DVAR 反演作为对比试验, 反演结果与探空比较进行误差评价.

一维变分背景场来自 ECMWF 模式分析格点场, 垂直范围从地面至 60 km, 分为 60 层. 在背景场与观测场的时空匹配上, 匹配原则是空间范围 $< 300\text{ km}$, 时间差在 3 h 以内.

表 1 给出了一维变分试验相关参数

| 方案 | 参数 |
|---------|----------------|
| 区域 | 5—53N, 75—135E |
| 背景场 | ECMWF (60 层) |
| 空间匹配/km | < 300 |
| 时间匹配/h | < 3 |
| 观测误差 | 不相关 |
| 背景场误差 | 相关固定 |

5 结果分析

利用第 4 节介绍的试验方案, 分别对 2011 年 1 月, 6 月 COSMIC 中国区域掩星观测数据进行了一维变分反演大气温度、湿度廓线试验, 为便于比较, 1DVAR 分理想和非理想气体两种方案进行.

5.1 理想气体反演

首先假设大气遵守理想气体定律,反演出了中国区域 2011 年 1 月和 6 月份大气温、湿廓线,应用相匹配的探空观测对反演结果进行检验,二者时空匹配原则与背景场匹配原则相同.图 1 给出的是 1 月份温度、湿度廓线反演结果.尽管掩星探测可至 60 km 高度,但二者比较时受探空探测高度限制,比较的最高高度约在 30 km 高度左右.从图 1(a)中可见,应用一维变分法反演的掩星温度廓线在不同高度范围内误差的特点不同,在 0—4 km 范围内,偏差(bias)较小,有效消除了传统“干温度”导致的对流层温度负偏差现象,但标准差较大,分析原因,主要是由于掩星信号在探测至近地面层时受多路径影响较大,信号容易失锁,导致反演误差较大所致;在 5—20 km 范围内基本没有偏差,标准差稳定在

2 K 左右;在 25 km 之上,二者存在系统性偏差.理论上讲,大气中高层应该是掩星探测比较准确的地方,25 km 以上出现的这种偏差的原因比较复杂,可能是由于掩星事件切点和探空高层探测空间范围差异太大,而且探空在 25 km 左右高度上探测性能下降导致.

在对流层,一维变分法可有效反演出湿度廓线,图 1(b)给出了比湿反演误差.由于是冬季探测结果,相比夏季而言,空气中水汽含量较低,与探空相比存在一个小的正偏差,整层标准差小于 $0.5 \text{ g}\cdot\text{kg}^{-1}$.

图 2 给出了代表夏季的 6 月份反演结果.反演误差整体特点与冬季相似,但由于夏季天气系统的多变,温度绝对偏差相比冬季略大,30 km 以下的偏差仍然保持在 1 K 范围内,比湿标准差在 $2 \text{ g}\cdot\text{kg}^{-1}$ 范围内 ($< 20\%$).

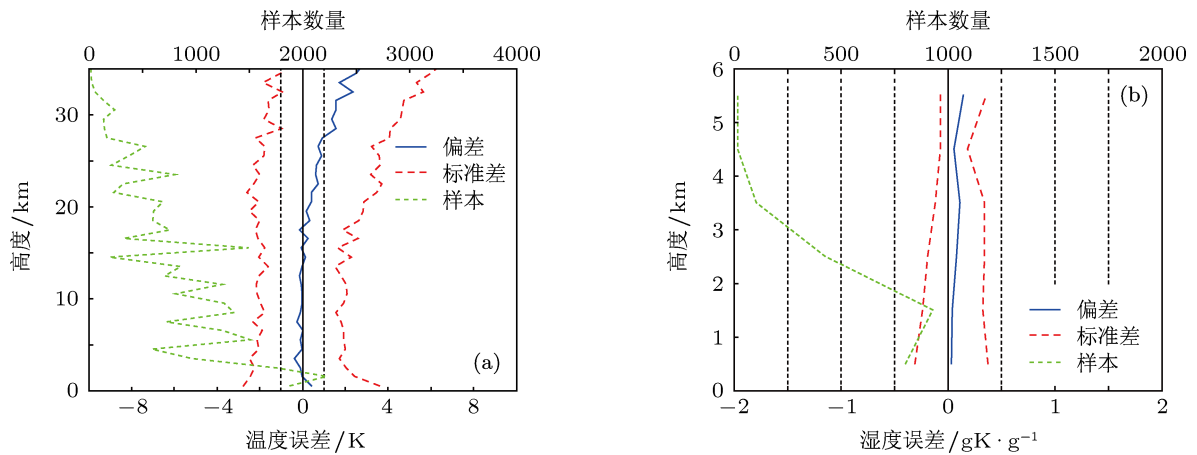


图 1 2011 年 1 月 (冬季)COSMIC 掩星温度反演结果纵坐标为海拔高度 (km),下方横坐标为温度误差 (K),上方横坐标为比较样本点数.绿实线代表偏差,红色虚线代表标准差,绿色点线代表样本数;(b) 比湿廓线反演误差图.单位 $\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$

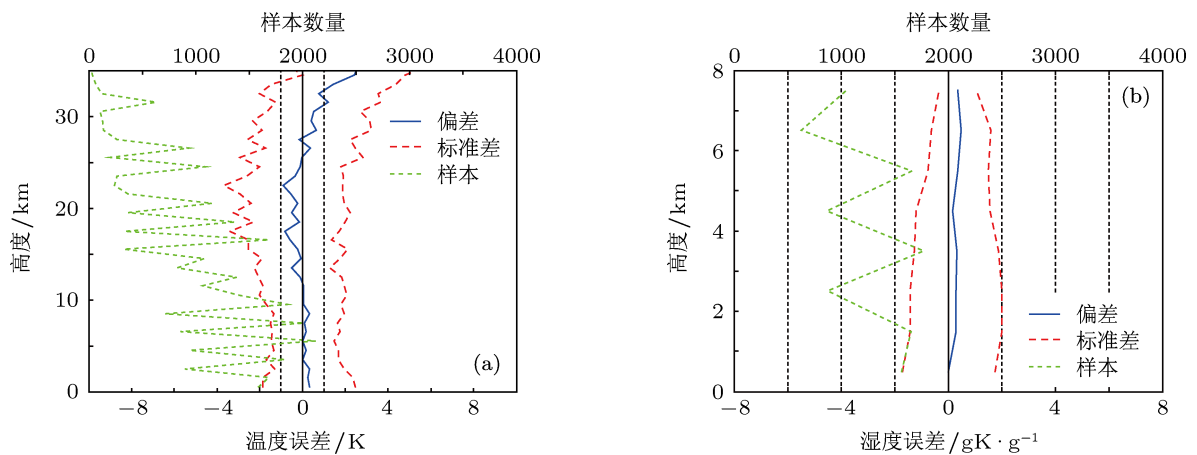


图 2 (a) 2011 年 6 月 (夏季) COSMIC 掩星温度反演结果,图例说明同图 1;(b) 比湿廓线反演误差图.单位 $\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$

5.2 考虑非理想气体效应

假设大气遵守理想气体定律, 1DVAR 反演结果在 5.1 节中得到了检验. 基于与 5.1 节相同的数据处理流程, 考虑大气非理想气体效应进行掩星大气温、湿度廓线反演, 然后将反演误差与 5.1 节结果进行比较, 用以评价非理想气体效应.

从非理想气体效应显著的两个冬、夏季节来看, 非理想气体效应对温度(图 3)、湿度(图 4)廓线的影响是系统性误差, 即对偏差有影响, 对标准偏差的影响可以忽略. 从图 3 可见, 两种情形下的反演偏差可以分辨, 最大影响约为 0.1 K. 在 10 km 以下的对流层, 两种反演差异非常小, 说明理想气体定律可较好描述对流层大气. 在 10—15 km 范围内, 非理想气体效应对温度反演偏差影响较为明显, 相对于理想气体反演, 冷偏差最大改进约 0.05 K; 在 20 km 以上, 改正暖偏差最大约 0.1 K. Healy(2009) 的研究结果也表明, 非理想气体效应影

响约在 0.1 K 范围^[14].

与温度反演偏差相比, 考虑非理想气体效应后, 湿度偏差的改正更为明显. 图 4 给出了夏季比湿廓线反演相对偏差情况, 由图可见, 考虑非理想气体效应后, 系统性减小了整层比湿的系统性湿偏差, 约为 0.5%. 尽管从数值上看, 考虑非理想气体效应后, 对温、湿度廓线反演误差的改正较小, 但由于这一改正是系统性的, 因此在气候研究和数值天气预报中, 我们认为应该考虑这一效应的影响.

上述所有误差分析是按不同层次分层统计的, 以便观察不同层次误差特点. 另外, 我们将反演的掩星产品分别与探空进行了整体比较, 统计了二者之间的均方根误差(RMS)和平均误差(bias), 结果示于表 2 和表 3. 每个月温度比较样本量约为 25000, 湿度约为 7500, 不同月份略有差异. 由表可见, 对整层大气反演误差而言, 非理想气体效应主要影响 bias 误差项, 而且对湿度产品反演影响比温度更为明显.

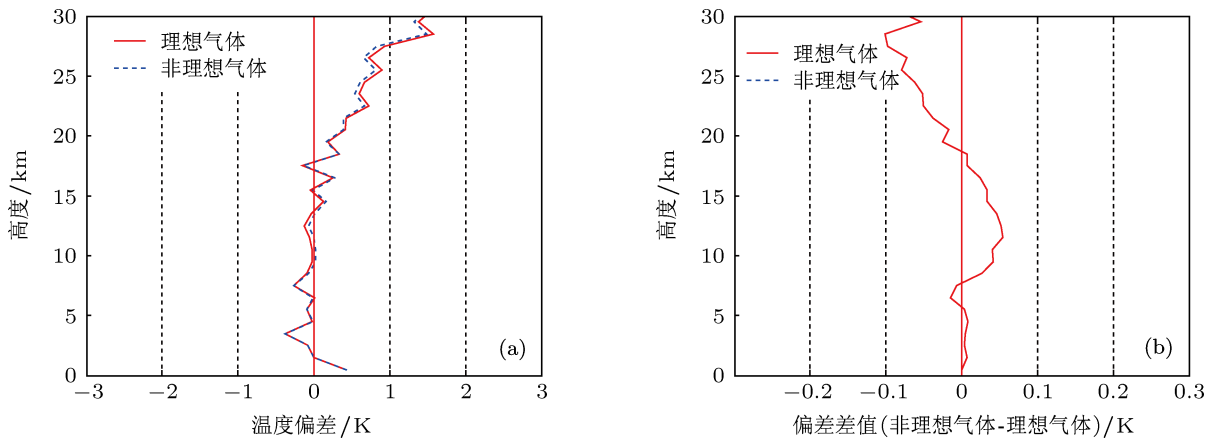


图 3 2011 年 1 月考虑非理想气体效应下温度反演偏差 (a) 与探空相比得到的偏差; (b) 考虑与不考虑非理想气体效应下偏差的差值

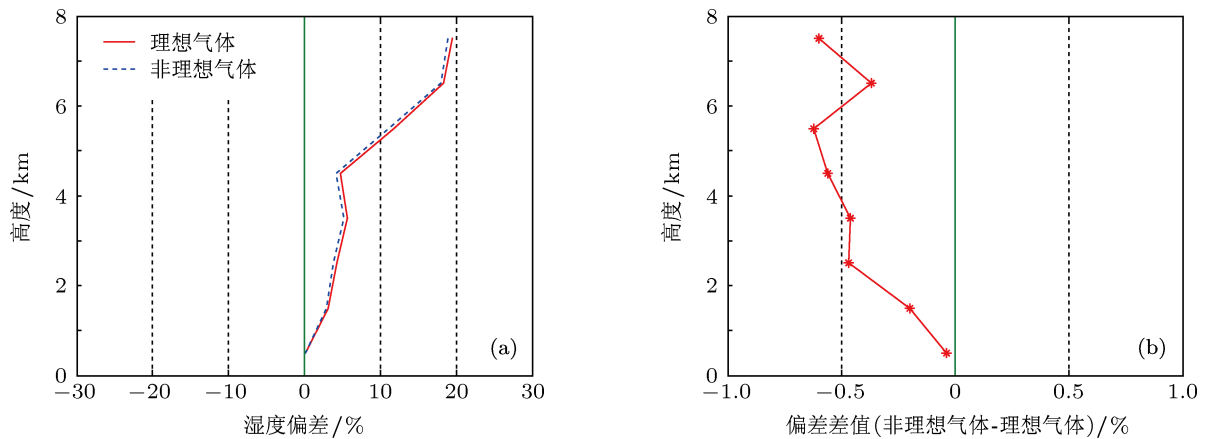


图 4 2011 年 6 月考虑非理想气体效应下湿度反演相对偏差 (a) 与探空相比得到的偏差; (b) 考虑与不考虑非理想气体效应下偏差的差值

表2 2011年1月理想气体(Ideal)与非理想气体效应(Non-ideal)两种情况下COSMIC掩星产品与探空的统计比较

| 产品 | | bias | RMS |
|-----------------------|-----------|-------|-------|
| 温度/K | Ideal | 0.184 | 2.332 |
| | Non-ideal | 0.182 | 2.327 |
| 湿度/g·kg ⁻¹ | Ideal | 0.080 | 0.312 |
| | Non-ideal | 0.060 | 0.306 |

表3 2011年6月理想气体(Ideal)与非理想气体效应(Non-ideal)两种情况下COSMIC掩星产品与探空的统计比较

| 产品 | | bias | RMS |
|-----------------------|-----------|--------|-------|
| 温度/K | Ideal | -0.027 | 2.678 |
| | Non-ideal | -0.021 | 2.677 |
| 湿度/g·kg ⁻¹ | Ideal | 0.307 | 1.746 |
| | Non-ideal | 0.288 | 1.743 |

6 结论

假设大气遵守理想气体定律,应用一维变分法反演出了COSMIC无线电掩星大气温度及湿度廓线资料,这一方法结合观测场、先验背景场误差信息,可获取整层大气温度廓线以及对流层湿度廓线,有效克服了传统“干温度”反演的局限性,与探空相比温度偏差小于1 K,湿度偏差 < 20%. 为提高GPS无线电掩星产品反演精度,研究了非理想气体效应对温、湿度廓线产品反演精度的影响,结果表明,考虑非理想气体效应后,可减少温、湿度廓线反演的系统性误差,在对流层上部可改进温度反演约0.1 K的偏差,对流层湿度廓线改进约0.5%的偏差. 尽管误差改正数值不大,但由于是系统性误差,因此,在一维变分反演中,考虑非理想气体效应有利于提高产品在气候研究及数值天气预报中的应用.

- [1] Fjeldbo G, Sweetnam D, Brenkle J, Christensen E, Farless D, Mehta J, Seidel B 1977 *Journal of Geophysical Research* **82** 4317
- [2] Kursinski E R, Hajj G A, Schofield J T, Linfield R P, Hardy K R 1997 *Journal of Geophysical Research* **102** 23429
- [3] Gorbunov M, Schreiner W, Feng D, Herman B, Kuo Y H, Zou X 1997 *Journal of Geophysical Research* **102** 29849
- [4] Wickert J, Reigber C, Beyerle G, König R, Marquardt C, Schmidt T, Grunwaldt L, Galas R, Meehan T K, Melbourne W G 2001 *Geophys Res. Lett.* **28** 3263
- [5] Schreiner W, Rocken C, Sokolovskiy S, Syndergaard S, Hunt D 2007 *Geophys Res. Lett.* **34** L4808
- [6] Luntama J, Kirchengast G, Borsche M, Foelsche U, Steiner A, Healy S, von Engel A, O’Clerigh E, Marquardt C 2008 *Bull Amer Meteor Soc.* **89** 1863
- [7] Bi Y, Yang Z, Zhang P, Sun Y, Bai W, Du Q, Yang G, Chen J, Liao M 2012 *Adv. Space Res.* 1191
- [8] Bi Y, Chen J, Yang G L, Liao M, Wu R H 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 149301 (in Chinese) [毕研盟, 陈洁, 杨光林, 廖蜜, 吴荣华 2012 物理学报 **61** 149301]
- [9] Guo P, Yan H J, Hong Z J, Liu M, Huang C 2005 *Acta Astronomica Sin.* **46** 96 (in Chinese) [郭鹏, 严豪健, 洪振杰, 刘敏, 黄城 2005 天文学报 **46** 96]
- [10] Guo P, Yan H J, Hong Z J, Liu M, Huang C 2004 *Acta Astronomica Sin.* **45** 330
- [11] Poli P, Joiner J, Kursinski E R 2002 *Journal of Geophysical Research* **107** 4448
- [12] Palmer P I, Barnett J J, Eyre J R, Healy S B 2000 *Journal of Geophysical Research* **105** 17513
- [13] Aparicio J M, Deblonde G, Garand L, Laroche S 2009 *Journal of Geophysical Research* **114** D16114
- [14] Cucurull L 2010 *Weather Forecast* **25** 749
- [15] Healy S B 2011 *Journal of Geophysical Research* **116** D1106
- [16] Rodgers C D 2000 *Inverse methods for atmospheric sounding* (World Scientific)
- [17] Smith E K, Weintraub S 1953 *Proceedings of the IRE* **41** 1035
- [18] Bevis M, Businger S, Chiswellv, Herring T A, Anthes R A, Rocken C, Ware R H 1994 *J. Appl. Meteorol.* **33** 379
- [19] Picard A, Davis R S, Glaser M, Fujii K 2008 *Metrologia* **45** 149
- [20] Thayer G D 1974 *Radio Sci.* **9** 803

1DVAR retrieval method for GPS radio occultation measurements of atmospheric temperature and humidity profiles*

Bi Yan-Meng[†] Liao Mi Zhang Peng Ma Gang

(National Satellite Meteorological Center, Beijing 100081, China)

(Received 16 February 2013; revised manuscript received 1 April 2013)

Abstract

GPS radio occultation observed refractivity is a function of atmospheric temperature and humidity. One-dimensional variational (1DVAR) analysis can be used to retrieve temperature and humidity profiles simultaneously from refractivity data. Profiles derived from 1DVAR method with COSMIC 2011 data occurred in China area are compared with the collocated radiosondes. The background data are ECMWF profiles and the retrieval results show good agreement with radiosondes. The effect of non-ideal gas compressibility on temperature and humidity retrieval errors is focused on in the 1DVAR analysis. Results compared with different months data show that non-ideal gas compressibility has a systematic effect on radio occultation retrieved atmospheric profiles. Including non-ideal gas effect correction the temperature bias to radiosondes is around 0.1 K, while the specific humidity bias is 0.5%. Because radio occultation data can be assimilated into operational numerical weather prediction system without bias correction, taking into consideration non-ideal gas effect is clearly very important. In addition, including this effect in radio occultation retrieval has important impact on climate applications.

Keywords: one-dimensional variation, GPS occultation, non-ideal gas effect

PACS: 93.85.Pq

DOI: 10.7498/aps.62.159301

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 41175023, 40705010).

[†] Corresponding author. E-mail: biym@cma.gov.cn