应用数学和力学, 第 26 卷 第 5 期(2005 年 5 月)
Applied Mathematics and Mechanics
应用数学和力学编委会编
重 庆 出 版 社 出 版

文章编号: 1000_0887(2005) 05_0585_10

非线性优化方法在大气和海洋科学数值研究中的若干应用*

段晚锁, 穆 穆

(中国科学院 大气物理研究所 大气科学和地球
流体力学数值模拟国家重点实验室, 北京 100029)

(我刊原编委黄敦推荐)

摘要: 控制大气和海洋运动的模式是复杂的非线性模式, 在考虑到线性奇异向量和线性奇异值只能描述切线性模式有效时段内小扰动发展的情况下, 介绍了作者们近年来用非线性优化方法数值研究大气和海洋科学的有关工作, 其中包括非线性奇异向量和非线性奇异值、条件非线性最优扰动、以及它们在数值天气和气候可预报性研究中的应用• 结果表明, 上述非线性优化方法在很大程度上揭示了大气和海洋运动的非线性特征; 此外, 对可预报性问题的新分类也做了详细介绍, 即最大可预报时间、最大预报误差和最大允许初始误差• 这种分类的应用背景是针对数值天气预报和气候预测产品的评价; 最后, 讨论了数值模式敏感性分析的非线性优化方法, 该方法在一定条件下可以定量识别模式误差和初始误差, 量化判断数值模式的模拟能力•

关 键 词: 非线性优化; 天气; 气候; 可预报性; 敏感性分析
中图分类号: P456.7 文献标识码: A

引 言

数值天气预报和气候预测本质上是解一组非线性偏微分方程的初(边)值问题, 即求满足恰当初始场和边界条件的数值模式的解•

自 20 世纪下半叶以来, 数值模式正逐渐成为天气预报和气候预测的主要工具之一• 由于初始资料场总存在误差, 数值模式(模型)也永远不可能完全准确地描述天气与气候的发展变化规律, 这两类误差及其综合作用, 导致了数值预报结果的不确定性• 对于这种不确定性的研究, 就是数值模式对所关心的天气和气候事件的可预报性问题• 关于可预报性的研究可追溯到文献[1]和[2]及其以后丑纪范等[3]的重要工作• 现在, 数值天气预报和气候预测的可预报性问题仍然是一个重要的研究课题, 例如, 国际上有著名的"气候变率及可预报性研究计划

* 收稿日期: 2003_11_21; 修订日期: 2004_11_04
基金项目: 国家自然科学基金资助项目(40233029, 40221503); 中国科学院创新项目资助课题(KZCX2_208)
作者简介: 段晚锁(1973—), 男, 山西阳城人, 博士(Tel: +86_10_62043317; Fax: +86_10_62043526; E_mail: duanws@mail.iap.ac.cn);
穆穆(1954—), 男, 安徽定远人, 研究员, 博士(联系人. Tel: +86_10_62043317; Fax: +86_10_62043526; E_mail: mumu@lasg.iap.ac.cn)•

(CLIVAR)”等•

线性奇异向量和线性奇异值是研究大气和海洋可预报性的重要方法之一[4, 5]• 这一方法的思路是, 首先将非线性模式关于某一特解进行线性化, 得到切线性模式[6], 然后, 在初始扰动充分小, 切线性模式能够近似刻划它发展的情况下, 寻找发展最快的扰动, 从误差增长的角度研究可预报性• 对于一个离散的切线性模式, 模式的传播算子可以表示成一个矩阵的形式, 这时, 发展最快的扰动就是该矩阵最大奇异值对应的奇异向量, 一般称为线性奇异向量• 自从文献[6]提出用奇异向量和奇异值的线性扰动理论研究大气的可预报性以来, 该方法也被用于线性稳定性等问题的研究[7]以及构造天气集合预报的初始场• 近来, 文献[8]和[9]还用它研究了厄尔尼诺– 南方涛动海气耦合模式的可预报性•

大气和海洋系统是复杂的物理系统, 目前较完整的并且能够描述其运动变化的模式一般是复杂的非线性模式• 用线性奇异值和线性奇异向量来研究大气和海洋系统, 必须研究切线性模式的有效性问题• 关于这些问题, 已经有一些文献研究[10~ 12], 但结论一致认为: 预先确定切线性模式的有效性是非常困难的, 一般还要凭经验加以修正• 因此, 为了有效考察非线性对大气和海洋可预报性的影响, 穆穆和段晚锁等人在多年工作的基础上, 提出了非线性奇异向量[13]和条件非线性最优扰动[14]等概念, 并将其应用于大气和海洋科学的研究中• 关于这些内容, 将在本文第 1、2 节作详细介绍• 关于模式的可预报性问题, 按照产生预报误差原因的不同, 目前国际上将其分成第一类与第二类可预报性问题, 前者是由初始误差引起的预报结果的不确定性, 后者是由模式误差导致的[15]• 模式误差的定义在不同文献中有所不同[16]• 本文采用下面的定义: 如果初始值是真实值, 那么模式在预报时刻的预报值和真实值之间的差异叫做模式误差[17]• 导致模式误差的因素很多, 本文仅考虑起重要作用的模式参数的误差[16]• 穆穆等[16]根据可预报性定量化研究的需要, 提出了可预报性的三类子问题, 这些内容将在第 3 节详细介绍•

初始误差和模式误差是导致数值模式预报结果不确定性的主要因素• 为鉴别和减小初始误差和模式误差, 气象学家们做了大量的工作, 其中, 对数值模式进行敏感性分析是必不可少的• 传统的敏感性分析方法主要有 3 种[18~ 20]: 数值模拟方法、伴随方法和线性奇异向量方法• 然而, 数值模拟方法在选取控制实验的过程中带有一定的经验性和盲目性[21]; 伴随方法和线性奇异向量方法却是基于线性理论, 它们只能描述切线性模式有效时段内小扰动的发展[22]• 在第 4 节详细介绍了作者们用非线性优化方法进行敏感性分析的初步工作•

1 非线性奇异向量和非线性奇异值

考虑偏微分方程组的初值问题:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \boldsymbol{w}}{\partial t} + F(\boldsymbol{w}) = 0, \\ \boldsymbol{w}|_{t=0} = \boldsymbol{w}_0, \end{cases} \tag{1}$$

其中, $\boldsymbol{w}(\boldsymbol{x}, t) = (w_1(\boldsymbol{x}, t), w_2(\boldsymbol{x}, t), \cdots, w_n(\boldsymbol{x}, t))$, $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)$, t 代表时间, F 是非线性算子, $\boldsymbol{w}_0$ 是初始态, $(\boldsymbol{x}, t) \in \Omega \times [0, T]$, $T < +\infty$, Ω 是欧氏空间 R^n 中的一个区域•

假设 $\boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}(\boldsymbol{x}, t)$ 是基态, $\boldsymbol{U}_0 = \boldsymbol{U}(\boldsymbol{x}, 0)$ 为其相应的初始态, 如果 $\boldsymbol{u}_0(\boldsymbol{x})$ 是对 $\boldsymbol{U}_0$ 的初始扰动, 那么, $\boldsymbol{U}_0 + \boldsymbol{u}_0$ 在时刻 T 将发展成为 $\boldsymbol{U}(\boldsymbol{x}, T) + \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, T)$, 从而, $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, T)$ 就是初始扰动 $\boldsymbol{u}_0(\boldsymbol{x})$ 的非线性发展• 在上述条件下, 选取适当的范数, 可以定义,

$$I(\boldsymbol{u}_{10}^*) = \max_{\boldsymbol{u}_0} \frac{\| \boldsymbol{u}(T) \|^2}{\| \boldsymbol{u}_0 \|^2}, \tag{2}$$

其中, 初始扰动 $\boldsymbol{u}_{10}^*$ 是第一非线性奇异向量, $I(\boldsymbol{u}_{10}^*)$ 的算术平方根是非线性奇异值[13]• 除了第1非线性奇异向量和奇异值, 我们还可以定义第2非线性奇异向量和奇异值• 第2非线性奇异向量 $\boldsymbol{u}_{20}^*$ 是下一极值问题的极值点:

$$I(\boldsymbol{u}_{20}^*) = \max_{\boldsymbol{u}_0 \perp \boldsymbol{u}_{10}^*} \frac{\| \boldsymbol{u}(T) \|^2}{\| \boldsymbol{u}_0 \|^2}, \tag{3}$$

其中 $\boldsymbol{u}_0 \perp \boldsymbol{u}_{10}^*$ 表示初始扰动 $\boldsymbol{u}_0$ 和所有的第1非线性奇异向量正交, $I(\boldsymbol{u}_{20}^*)$ 的算术平方根是第2非线性奇异值•

类似的还可以通过上述方法定义第3, 第4, ..., 第 n 非线性奇异向量和奇异值• 值得指出的是, 相应于每一个奇异值可以有多个奇异向量存在•

文献[23]采用一个二维正压准地转模式, 用数值方法求得了不同基态的非线性奇异向量和非线性奇异值, 结果表明如果第一非线性奇异向量充分小, 可用第一线性奇异向量来近似代替, 但对于比较大的第一非线性奇异向量, 线性奇异向量与非线性奇异向量有较大的差别, 相应的切线性模式不能很好的近似非线性模式• 另外, 对于一些基态, 还可能出现局部非线性最优扰动, 这一类扰动通常具有较大的能量和相对较小的增长率, 对可预报性的影响可能比第一非线性奇异向量大, 在可预报性研究中可以扮演更重要的角色•

最近, Durbiano[24] 在博士论文中, 对于浅水模式, 在文献[23]的基础之上, 也计算了前6个非线性奇异向量, 并且比较了与线性奇异向量之间的差异•

从文献[23]和[24]的结果可以清楚的看到, 考察模式的可预报性, 必须首先计算所有的局部非线性最优扰动, 然后研究它们对可预报性的影响, 然而, 这在实际应用中是很不方便的• 此外, 具有较大范数的局部非线性最优扰动在物理上也可能是不合理的•

所以, 为更好的考察非线性对模式可预报性的影响, 我们应该研究具有一定约束条件的非线性最优扰动•

2 条件非线性最优扰动

假设 $\boldsymbol{U}(\boldsymbol{x}, t)$ 和 $\boldsymbol{U}(\boldsymbol{x}, t) + \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t)$ 是初值为 $\boldsymbol{U}_0$ 和 $\boldsymbol{U}_0 + \boldsymbol{u}_0$ 的(1)的解, 其中, $\boldsymbol{u}_0$ 是初始扰动• 对于适当选取的范数 $\|\cdot\|$, 初始扰动 $\boldsymbol{u}_{0\delta}$ 称为条件非线性最优扰动(CNOP), 当且仅当

$$J(\boldsymbol{u}_{0\delta}) = \max_{\|\boldsymbol{u}_0\| \leqslant \delta} \| M_T(\boldsymbol{U}_0 + \boldsymbol{u}_0) - M_T(\boldsymbol{U}_0) \|, \tag{4}$$

这里, M_T 代表数值模式, 一些文献也称之为模式从0到 T 时刻的传播算子, 不等式 $\|\boldsymbol{u}_0\| \leqslant \delta (\delta > 0)$ 是初始扰动的约束条件, 易见, 在此约束条件下, 条件非线性最优扰动 $\boldsymbol{u}_{0\delta}$ 在 T 时刻增长最大•

上面用范数 $\|\cdot\|$ 给出了初始扰动的约束条件, 显然, 约束条件也可取为初始扰动属于某一类函数集合, 或满足某一物理规律, 等等•

2.1 条件非线性最优扰动在厄尔尼诺_南方涛动(ENSO)可预报性研究中的应用

厄尔尼诺(拉妮娜)是发生在赤道东太平洋的一种短期气候变化现象• 通常, 赤道东太平洋在偏东信风及赤道平均涌流作用下呈舌状冷水团, 在某些年份, 由于某种原因, 赤道东太平洋Nino_3区异常偏暖(冷), 海表温度出现较强的正(负)距平, 使某些地区的气候发生异常变化, 进而影响到人类的社会活动, 这就是厄尔尼诺(拉妮娜)现象; 另外, 随着大气中Walker环

流的东西移动, 赤道太平洋海平面气压呈"跷跷板"式的振荡变化, 这就是上世纪30年代Walker命名的"南方涛动"• 南方涛动实际是东西半球大气质量年际交换的结果, 20世纪60年代末, Bjerknes[25]将大气的南方涛动现象和赤道东太平洋的厄尔尼诺(拉妮娜)现象有机的统一起来, 形成了大尺度海气相互作用的ENSO理论•

文献[26]采用一个理论海气耦合模式研究了ENSO的最优前期征兆, 结果表明, 具有合适约束条件的条件非线性最优扰动(CNOP)比同一约束范围内的线性奇异向量更容易发展成ENSO事件, 因而, 该文将具有合适约束条件的CNOP作为ENSO事件的最优前期征兆• 近20年海洋资料的诊断分析定性地验证了上述结论•

此外, 作者使用CNOP的方法也研究了ENSO事件的"春季可预报性障碍"问题[14]• "春季可预报性障碍"是ENSO事件的基本特征之一, 它是指许多数值模式跨春季预测ENSO事件时, 出现的预报技巧明显下降的一种现象• 文献[14]通过计算厄尔尼诺和拉妮娜事件的条件非线性最优扰动(条件非线性最优初始误差), 结果发现厄尔尼诺事件在春季对条件非线性最优初始误差的增长有促进作用, 而La Nina事件对它的增长有抑制作用, 也就是说, El Nino事件容易发生春季可预报性障碍现象, 而La Nina事件却不发生• 此外, 随着扰动的增大, 厄尔尼诺的这种现象越来越明显• 该文的结果还表明, 线性奇异向量只能描述切线性模式有效时间内小扰动的发展, 对于较大的初始扰动和较长的优化时间区间, 它不能刻划非线性对春季可预报性障碍的影响, 而且在很大程度上过小或过大地估计ENSO事件误差的增长•

什么原因导致ENSO事件容易发生春季可预报性障碍, 这是ENSO可预报性研究中亟待解决且又具有一定争议的问题• 为探讨该问题, 文献[14]考察了春季海气耦合不稳定性强和弱两种条件下ENSO事件CNOP的增长, 结果表明, 春季强海气耦合不稳定性是ENSO事件产生春季可预报性障碍的原因之一• 此外, CNOP方法也揭示了ENSO事件可预报性障碍的锁相特征•

2.2 条件非线性最优扰动在温盐环流敏感性分析中的应用

海洋温盐环流的敏感性问题是气候变化研究中的重要问题之一• 温盐环流中因为存在多个控制其发展变化的非线性物理反馈机制, 比如盐度平流反馈过程, 而呈现出对有限振幅扰动的强敏感性, 这种强敏感性大大地限制了温盐环流的可预报性• 许多作者采用线性奇异向量研究了温盐环流对初始扰动的强敏感性[27], 但这种方法不能解释为什么温盐环流对淡水通量增加或减少具有不同的敏感性, 原因在于温盐环流对淡水通量扰动的响应是非线性影响的结果, 而使用的线性奇异向量方法是基于线性理论•

为研究非线性对温盐环流敏感性分析的影响, Mu *et al*[28]使用CNOP的方法研究了温盐环流对淡水通量扰动的不同敏感性• 该文通过一个简单的温盐环流模式, 考察了对应于淡水和盐度的CNOP的非线性发展对温盐环流的影响• 研究表明, 温盐环流对淡水通量扰动增加或减少的响应是非线性的, 一个有限大小的扰动可能导致温盐环流从一个平衡态转向另一个平衡态•

3 可预报性的三类子问题

Lorenz[15]根据预报结果不确定性产生的原因, 将可预报性问题分成由初始误差和模式误差引起的两大类• 但是, 在实际应用中, 随着人类社会和经济的发展, 人们越来越想知道: 对于某一天气事件或气候事件, 最大预报误差是多少、在给定精度的情况下, 最大可预报多长时间

以及所允许的初始资料场的精度• 为此, Mu *et al* 人[14]按照上述实际需要, 提出了可预报性研究的下述三类子问题•

问题 1 假设初始观察 $\boldsymbol{u}_0^{\mathrm{obs}}$ 和参数 μ^{g} 的初始给定值是已知的, M_t, M_T 分别是模式 0 到 t 和 T 时刻的传播算子, 那么, 在预报时刻, 对于选定的范数 $\|\cdot\|_A$, 最大允许的预报误差是

$$\|M_T(\boldsymbol{u}_0^{\mathrm{obs}}, \mu^{\mathrm{g}}) - \boldsymbol{u}_T^{\mathrm{t}}\|_A \leqslant \varepsilon, \tag{5}$$

其中, $\boldsymbol{u}_T^{\mathrm{t}}$ 是 T 时刻状态的真实值• 在此条件下, 我们可以通过一个非线性优化问题研究最大可预报时间 T_ε:

$$T_\varepsilon = \max\left\{\tau \,\|\, M_t(\boldsymbol{u}_0^{\mathrm{obs}}, \mu^{\mathrm{g}}) - \boldsymbol{u}_t^{\mathrm{t}}\|_A \leqslant \varepsilon, 0 \leqslant t \leqslant \tau\right\}. \tag{6}$$

然而, 真实值 $\boldsymbol{u}_t^{\mathrm{t}}$ 不能确切知道, 上述优化问题不可解• 但如果知道关于初始误差和模式参数误差的信息, 我们就可以通过一些方法给出最大可预报时间有用的估计• 例如, 若知道下列关于误差的信息,

$$\|\boldsymbol{u}_0^{\mathrm{t}} - \boldsymbol{u}_0^{\mathrm{obs}}\|_A \leqslant \delta_1, \quad \|\mu^{\mathrm{t}} - \mu^{\mathrm{g}}\|_B \leqslant \delta_2, \tag{7}$$

其中, $\|\cdot\|_B$ 是度量模式参数误差的范数, 考察非线性优化问题

$$T_{\varepsilon l} = \min_{\boldsymbol{u}_0 \in B_{\delta_1}, \mu \in B_{\delta_2}} \Big\{ T_{\boldsymbol{u}_0, \mu} \mid T_{\boldsymbol{u}_0, \mu} = \max \tau, \\ \|M_t(\boldsymbol{u}_0, \mu) - M_t(\boldsymbol{u}_0^{\mathrm{obs}}, \mu^{\mathrm{g}})\| \leqslant \varepsilon, 0 \leqslant t \leqslant \tau\Big\}, \tag{8}$$

这里, B_{δ_1} 和 B_{δ_2} 分别是以 $\boldsymbol{u}_0^{\mathrm{obs}}$ 和 μ^{g} 为球心, δ_1 和 δ_2 为半径的球• 可以证明

$$T_{\varepsilon l} \leqslant T_\varepsilon.$$

这样, 我们就给出了最大可预报时间的下界估计•

问题 2 假定初始观察 $\boldsymbol{u}_0^{\mathrm{obs}}$ 和参数 μ^{g} 是已知的, 对于给定的预报时间 T, 预报误差可以表示为

$$E = \|M_T(\boldsymbol{u}_0^{\mathrm{obs}}, \mu^{\mathrm{g}}) - \boldsymbol{u}_t^{\mathrm{t}}\|_A. \tag{9}$$

因为真实值 $\boldsymbol{u}_t^{\mathrm{t}}$ 是不能确切知道的, 要通过上式精确求解预报误差 E 是不可能的• 但如果(7)成立, 预报误差 E 能通过下面的优化问题来估计•

$$E_{\mathrm{u}} = \max_{\boldsymbol{u}_0 \in B_{\delta_1}, \mu \in B_{\delta_2}} \|M_T(\boldsymbol{u}_0, \mu) - M_T(\boldsymbol{u}_0^{\mathrm{obs}}, \mu^{\mathrm{g}})\|_A. \tag{10}$$

可证, $E \leqslant E_{\mathrm{u}}$• 这样, E_{u} 给出了预报误差的上界估计•

问题 3 给定初始观察 $\boldsymbol{u}_0^{\mathrm{obs}}$, 参数的初始给定值 μ^{g} 以及在预报时刻 T 允许的最大预报误差(5)式, 那么, 允许的最大初始误差和参数误差就可以归结为下面的优化问题:

$$\delta_{\max} = \max_{\delta}\Big\{\delta \,\|\, \boldsymbol{u}_0 - \boldsymbol{u}_0^{\mathrm{obs}}\|_A \leqslant \delta_1, \quad \|\mu - \mu^{\mathrm{g}}\|_B \leqslant \delta_2, \\ \text{如果 } \delta_1 + \delta_2 = \delta, \text{ 那么 } \|M_T(\boldsymbol{u}_0^{\mathrm{obs}}, \mu^{\mathrm{g}}) - \boldsymbol{u}_T^{t}\|_A \leqslant \varepsilon\Big\},$$

这个表达式中同样存在不能确切知道的真实值 μ_T^{t}, 所以, 对于允许的最大初始误差和参数误差, 只能通过允许的预报误差的信息给出估计•

$$\delta_{\max} = \max_{\delta}\Big\{\delta \,\|\, M_T(\boldsymbol{u}_0^{\mathrm{obs}}, \mu^{\mathrm{g}}) - M_T(\boldsymbol{u}_0, \mu)\|_A \leqslant \varepsilon, \\ \boldsymbol{u}_0 \in B_{\delta_1}, \mu \in B_{\delta_2}, \delta_1 + \delta_2 = \delta\Big\}, \tag{11}$$

可以推出

$$\delta_{\max} \leqslant \delta_{\max}.$$

以上就是可预报性的 3 个子问题, 如果忽略参数的误差, 或者更进一步说预报模式是精确

的, 那么, 上述 3 个问题就是第一类可预报性的 3 个子问题; 另一方面, 如果不考虑初始误差引起的预报结果的不确定, 那么, 问题就变为与模式误差有关的第二类可预报性的 3 个子问题•

文献[16] 采用 Lorenz 模式[2] 作为一个简单的例子说明了如何用数值的方法研究这三类子问题•

4 数值模式敏感性分析的非线性优化方法

假定(1) 是一个预报模式, 且有一定的模式误差, M_t 是其传播算子; $\boldsymbol{U}_0^{obs}$ 和 $\boldsymbol{U}_T^{obs}$ 分别是 0 和 T 时刻带有一定误差的观测资料, 那么, 如何确定初始场 $\boldsymbol{U}_0$, 使得 T 时刻模式模拟结果 $\boldsymbol{U}_T = M_T(\boldsymbol{U}_0)$ 与观测场 $\boldsymbol{U}_T^{obs}$ 最接近• 这个问题可以转化为下面的非线性优化问题[29]:

$$E = \min_{U_0} J(\boldsymbol{U}_0), \tag{12}$$

其中, $J(\boldsymbol{U}_0) = 0.5(M_T(\boldsymbol{U}_0) - \boldsymbol{U}_T^{obs})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{W}(M_T(\boldsymbol{U}_0) - \boldsymbol{U}_T^{obs})$ 是目标函数, $\boldsymbol{W}$ 是权重系数矩阵•

对于一个事先给定的最大允许误差界 ε, E 有两种情况:

$$\begin{cases} E > \varepsilon, \\ 0 \leqslant E \leqslant \varepsilon. \end{cases} \tag{13}$$

在模式调试过程中, 如果出现 $E > \varepsilon$, 说明即使模式能够获得最优的初始场 $\boldsymbol{U}_0^*$, 它对实际观测场的模拟总是超出给定的允许误差的范围• 也就是说, 无论怎样调节模式的初始场, 该模式都不能很好的模拟实际观测场 $\boldsymbol{U}_T^{obs}$• 这种情况下, 可以推断该数值模式的模式误差很大, 还需要在数值模式中改变或增加一些物理过程、或者调试一些参数, 从而改进模式•

再考虑 $0 \leqslant E \leqslant \varepsilon$ 的情况, 即目标函数的极小值 E 小于给定的最大允许误差界, 这说明可以通过调节初始场 $\boldsymbol{U}_0$, 使得数值模式能够很好的模拟实际观测场 $\boldsymbol{U}_T^{obs}$, 但是应当指出, 这种情况下, 模式误差仍有可能很大• 为进一步分析此种情形, 下面从模式最优初始场和初始观测场之间的差异大小展开进一步讨论•

再定义一个最大允许的初始误差界 ε_0, 在给定的范数意义下, 关于最优初始场 $\boldsymbol{U}_0^*$ 和实际初始观测场 $\boldsymbol{U}_0^{obs}$ 有下列 3 种情况:

$$\begin{cases} \| \boldsymbol{U}_0^* - \boldsymbol{U}_0^{obs} \| \ll \varepsilon_0, \\ \| \boldsymbol{U}_0^* - \boldsymbol{U}_0^{obs} \| \approx \varepsilon_0, \\ \| \boldsymbol{U}_0^* - \boldsymbol{U}_0^{obs} \| \gg \varepsilon_0. \end{cases} \tag{14}$$

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(14a)、(14b)、(14c) 这 3 式评价观测资料的质量• 若情形(14a) 出现, 说明直接利用现有观测资料 $\boldsymbol{U}_0^{obs}$, 该模式就可以对 $\boldsymbol{U}_T^{obs}$ 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(14b) 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(14c) 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(14a)、(14b)、(14c) 这 3 式对模式误差进行评估• 若情形(14a) 出现, 说明模式误差很小, 很容易通过调试初始场, 得到对 $\boldsymbol{U}_T^{obs}$ 好的模拟; 情形(14b) 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 U_T^{obs} 好的模拟, 这实际上是有一定误差的模式配上

一个合适的、有一定误差的初始场, 得到好的模拟结果; 在(14c)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, 所以, 这个最优初始场是没有物理意义的• 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 $E > \varepsilon$, 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 $0 < E \leqslant \varepsilon$, 此时模拟效果较好, 但模式误差和初始误差仍有可能很大, 此时把 ε_0 取成观测资料的精度(这个精度一般是已知的), 若 $\| \boldsymbol{U}_0^* - \boldsymbol{U}_0^{\mathrm{obs}} \| \gg \varepsilon_0$, 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, 则不易得出其它有意义的结论•

可见, 用非线性优化方法对数值模式进行敏感性分析, 可以得出一些对模式调试工作者有指导意义的结论• 文献[30]对二维正压准地转模式用非线性优化的方法开展了敏感性试验的研究• 在双周期边界条件和固壁边界条件两种情况下, 定量考察了该模式对初始误差和模式误差的敏感性, 结果表明, 用上述非线性优化方法可以对数值模式的模拟能力给予一个量化判断, 并且能够找到模拟效果最好时的最优初始场, 这是优于其它方法的主要方面; 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•

5 结论和讨论

本文介绍了作者们近年来用非线性优化方法研究大气和海洋科学的有关工作•

首先, 为考察非线性对大气和海洋可预报性的影响, 作者们首先使用非线性奇异向量, 继而又用条件非线性最优扰动研究大气或海洋的可预报性, 希望深入理解模式的非线性效应• 研究结果表明, 在揭示非线性对大气和海洋可预报性的影响方面, 非线性奇异向量和条件非线性最优扰动是非常有效地•

其次, 文中也介绍了可预报性问题的新分类• 这种分类给出的信息不仅定量估计了天气和气候事件的最大可预报时间、最大预报误差和最大允许初始误差, 而且目的在于直接评价数值天气和气候预测的产品•

第三, 在数值模式的敏感性试验中, 作者们也使用了非线性优化方法• 结果表明: 非线性优化方法不仅能够定量判断数值模式的模拟能力, 而且, 能够找出产生数值模式最佳模拟时的最优初始场•

上述是使用简单模式, 研究相应天气和气候可预报性的热点问题而得到的结果• 从所得结论知, 非线性优化方法不仅能够在一定程度上考察大气或海洋的运动机理, 而且可以探讨非线性对模式可预报性的影响• 因此, 在较复杂的模式中, 我们有理由相信, 非线性优化方法会有更好的应用前景•

当然, 应用中会遇到一些困难: 对于可预报性三类子问题, 目前还没有成熟的算法来解决

相应的非线性优化问题• 文献[16]在求解Lorenz模式的最大可预报时间和最大允许初始误差的下界估计时,针对简单模型,采用了逐步筛选的方法,但是,控制大气和海洋运动的模式是复杂的非线性模式,仍然使用该方法求解相应的优化问题存在着很大困难• 因此,我们期望更多的科学家们能参与发展更成熟、更有效的算法,以便更好地解决上述优化问题;关于最大预报误差估计(在计算方法上等同于求解基态的条件非线性最优扰动),对于线性的、和简单的二次等式或不等式约束条件,可以分别采用比较成熟的有限记忆算法[31]和SQP算法[32]求解,但类似地,对于高维数的、且具有复杂约束条件的非线性优化问题,甚至在某些条件下还可能是不光滑的非线性优化问题,上述算法不能解决该类优化问题• 关于这些问题,数学家们在不同方面已经有一些研究,但还有待于较成功地将其应用到大气和海洋科学研究中•

此外,文中也介绍了敏感性分析的非线性优化方法,这个问题属于无约束的非线性优化问题,一般采用有限记忆算法来求解,然而对于高维数的复杂非线性模式,在非线性优化时,必须考虑计算机的内存、速度等方面的问题,这也是在工作中须要迫切解决的问题•

致谢　本工作受中国科学院创新项目(KZCX2- 208)和国家自然科学基金项目(批准号:40233029,40221503)资助• 在此衷心感谢!

[参　考　文　献]

[1] Thompson P D. Uncertainty of initial state as a factor in the predictability of large_scale atmospheric flow patterns[J]. Tellus, 1957, **9**(3): 275—295.

[2] Lorenz E N. Deterministic nonperiodic flow[J]. J Atmos Sci, 1963, **20**(2): 130—141.

[3] 丑纪范,郜吉东. 长期数值天气预报[M]. 北京: 气象出版社, 1995.

[4] Buizza R, Palmer T N. The singular vector structure of the atmospheric global circulation[J]. J Atmos Sci, 1995, **52**(9): 1434—1456.

[5] Thompson C J, Initial conditions for optimal growth in couple ocean atmosphere model of ENSO [J]. J Atmos Sci, 1998: **55**(4): 537—557.

[6] Lorenz E N. A study of the predictability of a 28_variable atmospheric model[J]. Tellus, 1965, **17**(4): 321—333.

[7] Farrell B F. The growth of disturbance in a barodinic flow[J]. J Atmos Sci, 1982, **39**(8): 1663—1686.

[8] Xue Y, Cane Y M A, Zebiak S E, Predictability of a coupled model of ENSO using singular vector analysis, Part I: Optimal growth in seasonal background and ENSO cycles[J]. Mon Wea Rev, 1997, **125**(12): 2043—2056.

[9] Roger M, Samelson E T. Instability of the Chaotic ENSO: The growth_phase predictability barrier[J]. J Atmos Sci, 2001, **58**(23): 3613—3625.

[10] Lacarra J F, Talagrand O. Short_range evolution of small perturbation in a baratropic model[J]. Tellus, 1988, **40**A(1): 81—95.

[11] Tanguay M, Bartello P. Four_dimensional data assimilation with a wide range of scales[J]. Tellus, 1995, **47**A(6): 974—997.

[12] MU Mu, GUO Huan, WANG Jia_feng, et al. The impact of nonlinear stability and instability on the validity of the tangent linear model[J]. Adv Atmos Sci, 2000, **17**(3): 375—385.

[13] MU Mu. Nonlinear singular vectors and nonlinear singular values[J]. Science in China, Ser D, 2000, **43**(4): 375—385.

[14] MU Mu, DUAN Wan_suo. A new approach to studying ENSO predictability: conditional nonlinear op-

timal perturbation[J]. Chinese Science Bulletin, 2003, **48**(10): 1045—1047.

[15] Lorenz E N. Climate predictability: the physical basis of climate modeling[J]. WMO, GARP Pub Ser, 1975, **16**(1): 132—136.

[16] MU Mu, DUAN Wan_suo, WANG Jia_cheng. The predictability problems in numerical weather and climate prediction[J]. Adv Atmos Sci, 2002, **19**(2): 191—204.

[17] Talagrand O. Assimilation of observations, an introduction[J]. J Meteor Soc Japan, 1997, **1**B(2): 191—209.

[18] Hollingsworth A, Lorenc A C, Tracton M S, et al. The response of numerical weather prediction systems to FGGE level Iib data_Part I: Analyses Quart J Roy Meteor Soc, 1985, **111**(1): 1—66.

[19] Errico R M, Vukicevic T. Sensitivity analysis using an adjoint of the PSU_NCAR mesoscale model[J]. Mon Wea Rev, 1992, **120**(8): 1644—1660.

[20] Ehrendorfer M, Errico R M. Mesoscale predictability and the spectrum of optimal perturbations[J]. J Atmos Sci, 1986, **52**(20): 3475—3500.

[21] Zou X, Navan I M, Dimet Le F X. Incomplete observations and control of gravity waves in varational data assimilation[J]. Tellus, 1992, **44**A(2): 273—298.

[22] Rabier F, Klinker E, Courtier P, et al. Sensitivity of forecast errors to initial conditions[J]. Quart J Roy Meteor Soc, 1996, **122**(1): 121—150.

[23] MU Mu, WANG Jia_cheng. Nonlinear fastest growing perturbation and the first kind of predictability [J]. Science in China (D), 2001, **44**(12): 1128—1139.

[24] Durbiano S. Vecteurs caract ristiques de mod les oc aniques pour la r duction d' ordre er assimilation de donn es [D]. Doctor Dissertation, Universit Joseph Fourier_Grenoble Science Et G ographie, 2001, 1—214.

[25] Bjerknes J. A possible response of the atmospheric Hadley circulation to equatorial anomalies of ocean temperature[J]. Tellus, 1966, **18**(5): 820—829.

[26] MU Mu, DUAN Wan_suo, WANG Bin. Conditional nonlinear optimal perturbation and its applications [J]. Nonlinear Processes in Geophysics, 2003, **10**(6): 493—501.

[27] Lohmann G, Schneider J. Dynamics and predictability of Stomel' s box model. A phase_space perspective with implications for decadal climate variability[J]. Tellus, 1999, **51**A(2): 326—336.

[28] MU Mu, SUN Liang, Dijkstra H A. Applications of conditional nonlinear optimal perturbation to the sensitivity of the thermohaline circulation to finite amplitude freshwater perturbations[J]. J Physical Oceanography, 2004, **34**(10): 2305—2315.

[29] MU Mu, DUAN Wan_suo, WANG Jia_feng. Nonlinear optimization problems in atmospheric and oceanic sciences[J]. East_West Journal of Mathematics. Thailand, 2002, 155—164.

[30] XU Hui, MU Mu, LUO De_hai. An application of nonlinear optimization method to sensitivity analysis of numerical model[J]. Progress in Natural Sciences, 2004, **14**(6): 546—549.

[31] Liu D C, Nocedal J. On the memory BFGS method for large_scale optimization[J]. Mathematical Programming, 1989, **45**(3): 503—528.

[32] Powell M J D, VMCWD: A FORTRAN subroutine for constrained optimization[R]. DAMTP Report 1982/NA4, University of Cambridge, England, 1982, 1—89.

Applications of Nonlinear Optimization Method to the Numerical Studies of Atmospheric and Oceanic Sciences

DUAN Wan_suo, MU Mu
(LASG, Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029, P.R.China)

Abstract: Linear singular vector and linear singular value can only describe the evolution of sufficiently small perturbations during the period in which the tangent linear model is valid. With this in mind, the applications of nonlinear optimization methods to the atmospheric and oceanic sciences are introduced, which include nonlinear singular vector (NSV) and nonlinear singular value (NSVA), conditional nonlinear optimal perturbation (CNOP), and their applications to the studies of predictability in numerical weather and climate prediction. The results suggest that the nonlinear characteristics of the motions of atmosphere and oceans can be explored by NSV and CNOP. Also attentions are paid to the introduction of the classification of predictability problems, which are related to the maximum predictable time, the maximum prediction error, and the maximum allowing error of initial value and the parameters. All the information has the background of application to the evaluation of products of numerical weather and climate prediction. Furthermore the nonlinear optimization methods of the sensitivity analysis with numerical model are also introduced, which can give a quantitative assessment whether a numerical model is able to simulate the observations and find the initial field that yield the optimal simulation. Finally, the difficulties in the lack of ripe algorithms are also discussed, which leave future work to both computational mathematics and scientists in geophysics.

Key words: nonlinear optimization; weather; climate; predictability; sensitivity analysis