

The Technologies for Global Four-Dimensional Variational Data Assimilation of Ozone Observations

Xiaoqun Cao*, Junqiang Song, Jun Zhao, Hongze Leng, Shuo Ma

College of Meteorology and Oceanology, National University of Defense Technology, Changsha Hunan
Email: *caoxiaoqun@nudt.edu.cn

Received: Dec. 6th, 2017; accepted: Dec. 21st, 2017; published: Dec. 29th, 2017

Abstract

In order to solve the problems of being short of stratospheric atmospheric observations, a method of improving the global numerical weather prediction (NWP) qualities is proposed by assimilating satellite ozone data. The complex problem of ozone data assimilation is transformed into a large-scale optimization problem constrained by the governing equations of atmospheric motion, and the global four-dimensional variational data assimilation of ozone from SCIAMACHY remote sensor is implemented to produce initial fields for global NWP model. The numerical experimental results show that the utilization rates of surface and sounding observations have been upgraded to a certain extent due to the introduction of satellite ozone data assimilation, and the distribution of the ozone prediction field changes obviously. Furthermore, the forecast skills in the northern and southern hemispheres are improved a lot by carrying out the statistical verification.

Keywords

Numerical Weather Prediction, Four-Dimensional Variational Data Assimilation, Satellite Ozone Observations, SCIAMACHY, Adjoint Model

臭氧观测的全球四维变分资料同化技术

曹小群*, 宋君强, 赵 军, 冷洪泽, 马 烁

国防科技大学气象海洋学院, 湖南 长沙
Email: *caoxiaoqun@nudt.edu.cn

收稿日期: 2017年12月6日; 录用日期: 2017年12月21日; 发布日期: 2017年12月29日

*通讯作者。

文章引用: 曹小群, 宋君强, 赵军, 冷洪泽, 马烁. 臭氧观测的全球四维变分资料同化技术[J]. 地球科学前沿, 2017, 7(6): 856-866. DOI: 10.12677/ag.2017.76088

摘要

针对平流层大气观测资料稀少的问题, 提出利用同化卫星臭氧观测改进全球数值天气预报效果的方法。将复杂的臭氧资料同化问题转换为一个以大气运动控制方程为约束条件的大规模最优化问题, 并实现了SCIAMACHY卫星臭氧观测的全球四维变分资料同化。试验结果表明: 由于卫星臭氧观测资料同化的引入, 一定程度上提高了地面报和探空报的同化利用率, 总气柱臭氧含量预报场的分布具有明显变化, 对南北半球形势场预报技巧评分具有一定幅度的提高。

关键词

数值天气预报, 四维变分资料同化, 卫星臭氧观测, SCIAMACHY, 伴随模式

Copyright © 2017 by authors and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

臭氧是地球大气中重要的痕量气体之一, 虽然含量十分稀少, 但是对人类、地球生物圈、大气运动及数值天气预报等影响巨大。首先, 大气臭氧层是唯一能够有效吸收 250~300 纳米紫外辐射的大气成分, 可以保护人类和地球生物免受太阳紫外辐射的伤害[1] [2] [3]。大气臭氧变化直接影响人类生存环境, 近年来全球性臭氧减少、南极上空春季出现臭氧洞的观测事实, 引起了各国政府、人民和科学家的极大关注[1] [2] [3]。其次, 大气臭氧对紫外辐射的吸收是平流层的主要热源, 臭氧浓度随高度的分布直接影响该层温度结构, 从而对大气环流和地球气候产生重要影响。在青藏高原夏秋季出现的臭氧低值中心引起高原热力和动力变化, 从而显著影响亚洲季风。再次, 在对流层中, 臭氧既是一种温室气体, 又是一种有害污染气体, 提高大气臭氧浓度的预报准确率具有重要作用。最后, 臭氧是影响全球大气资料同化效果和模式预报能力的重要因素。在模式预报区域扩展到平流层及其以上后, 臭氧作为一个重要的影响因素必须在全球数值天气预报(NWP)模式和变分资料同化系统中进行考虑[4] [5]。一方面通过为辐射传输模式提供高精度臭氧廓线而非臭氧气候值, 从而提高对臭氧敏感卫星通道辐射率的正向模拟准确度和同化应用效果。另一方面, 作为大气运动示踪物的臭氧观测蕴含了对流层顶以上区域的风场信息, 从而能弥补平流层观测信息的不足。

从历史研究来看, 国外存在两种方法来实现平流层大气成分资料同化。一种是 NWP 方法, 主要是将平流层成分资料同化作为数值天气预报系统的一部分, 采用的化学输送模式一般较简单, 目的是改进业务 NWP 产品的质量; 另外一种途径是化学模式方法, 即基于独立的化学模式进行资料同化, 化学模式可以是化学输送模式(CTM), 也可以是光化学箱状模式, 两种模式都能模拟复杂化学过程[4] [5] [6]。NWP 方法的目的是利用大气成分(特别是平流层臭氧)观测信息提高天气预报效果, 而化学模式方法的用途非常广泛[7] [8] [9] [10] [11]。我国臭氧观测和大气化学模式的不断发展为臭氧污染预报提供强有力工具[12] [13] [14]。为了减小臭氧预报误差, 张伟等[15]和唐晓等[16]结合集合预报结果和神经网络、挑选最优预报成员等方法有效提高了臭氧预报技巧。唐晓和朱江等[17]基于集合卡尔曼滤波方法和嵌套网格空气质量模式系统建立了一个区域空气质量资料同化系统, 并开展了京津冀地区 2008 年北京奥运会期间的

地面臭氧观测资料同化试验。总体而言，国内关于大气臭氧的研究主要集中在气候和环境变化、环境污染预报方面，而基于卫星臭氧资料同化改进全球数值天气预报的研究工作目前还较少。

本文主要研究臭氧观测资料的全球四维变分同化技术，为数值模式准确预报临近空间大气环境提供初始场。首先阐述了臭氧观测资料同化技术，将复杂的臭氧资料同化问题转换为一个以大气运动控制方程(由 Navier-Stokes 流体力学方程和臭氧含量变化方程组成)为约束条件的大规模最优化问题，并实现了臭氧观测的全球四维变分资料同化。然后针对 SCIAMACHY 卫星臭氧观测开展了全球资料同化试验。试验结果表明：卫星臭氧观测资料同化在一定程度上提高了地面和探空观测的同化利用率，使得总气柱臭氧含量预报场的分布具有明显变化，对南北半球形势场预报技巧评分都有一定幅度的提高。

2. 臭氧资料同化技术

2.1. 四维变分资料同化方法

同化方法是一种将时空上非规则分布的多源观测数据融合到基于物理规律的数值预报模式中的分析方法，目的是通过有效利用可获得的一切信息(包括观测、背景场、模式以及相应误差特征量等)估计非线性动力预报系统的初边值和模型参数等[18]-[23]。同化方法在大气、海洋、电离层、非线性动力系统和流体等科学领域具有广泛应用，其研究具有重要价值[18] [19]。目前先进的同化方法主要分为两大类：一类是变分资料同化方法，另一类是顺序资料同化方法[18] [19]。所谓全球四维变分资料同化法(4D-Var)，就是通过变分方法把四维气象观测资料加以充分利用，估计出全球数值预报模式所需要的某时刻大气状态值[18]。4D-Var 是目前国际上气象和海洋预报业务部门所使用的最先进同化方法，在提高数值预报准确度方面取得了巨大成功。

采用国际上先进的四维变分资料同化方法实现全球臭氧观测的定量同化。臭氧资料同化本质上是一个以大气运动控制方程和臭氧含量变化方程为约束条件的大规模最优化问题[18]-[23]。臭氧观测资料同化的目标函数 J 由背景场泛函 J_b 和观测泛函 J_o 两项组成，即目标函数为 $J = J_b + J_o$ ，具体形式为下面(1)式所示：

$$J(x_0) = \frac{1}{2}(x_0 - x_b)^T \mathbf{B}^{-1}(x_0 - x_b) + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N \left\{ H_i [M_{t_0, t_i}(x_0)] - y_i^o \right\}^T \mathbf{O}_i^{-1} \left\{ H_i [M_{t_0, t_i}(x_0)] - y_i^o \right\} \quad (1)$$

其中 x_0 是由臭氧、温度、涡度、散度、比湿和地面气压等变量组成的非线性预报模式初始状态向量，也称为分析场； y_i^o 是位于第 i 个时间槽内的观测资料，而 H_i 是观测 y_i^o 所对应的观测算子，表示将状态变量从模式格点插值到观测位置； M_{t_0, t_i} 算子表示将非线性正模式从初始时刻 t_0 积分到 t_i 时刻，因此 $x_i = M_{t_0, t_i}(x_0)$ 是由模式积分得到的 t_i 时刻模式状态。由于 t_i 时刻模式状态是从上一个时刻 t_{i-1} 到当前时刻的向前积分，因此可以表示为： $x_i = M_{t_{i-1}, t_i}(x_{i-1})$ 。公式 $y_i = H_i [M_{t_0, t_i}(x_0)]$ 表示将 t_i 时刻的模式状态映射为观测空间中的值。 \mathbf{B} 和 \mathbf{O} 分别表示背景和观测误差协方差矩阵。为了实现臭氧观测资料同化，必须给出 \mathbf{B} 和 \mathbf{O} 的误差协方差模型以及相应的误差参数。分析变量直接定义为模式变量臭氧 O_3 、涡度 ζ 、散度 η 、温度和地面气压(T, p_{surf})以及比湿 q ，垂直分层与全球大气数值预报模式分层完全一致，目标函数中的分析场 x_0 是由分布于模式空间网格点上的不同分析变量组成。

2.2. 臭氧观测算子的设计

臭氧观测主要有直接现场探测，例如：无线电臭氧探空仪，由于代价昂贵，该类观测数量较少；而卫星遥感探测能够弥补此缺陷，臭氧垂直探测器跟随卫星前进，可以无视恶劣的地理条件，获取全球任意位置的臭氧资料。目前国际上通常是对卫星观测臭氧反演量进行同化。在临近空间臭氧资料同化系统

中大气成分反演量(例如, 臭氧和水汽)都是以某一气层在垂直方向的积分(由气层顶部和底部的气压定义)形式被应用, 而气层的顶部和底部气压作为观测量的一部分给出。臭氧卫星观测反演量和无线电臭氧观测都将采用类似常规观测的同化方法进行利用, 臭氧的单位是 $\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}$ 。臭氧观测采用与可降水量相同的观测算子, 相同的思想可以被应用到所有类似种类的臭氧观测数据上, 无论是气柱总量观测(例如 TOMS 和 GOME 气柱总臭氧量观测或 MERIS 气柱总水汽观测), 还是具有较高垂直分辨率的气层总量观测(类似 SBUV)。对于臭氧观测, 需要执行变分偏差订正, NOAA 系列卫星上的 SBUV 仪器观测目前在臭氧同化变分偏差订正中被用作无偏的稳定观测, 因此在同化时不对 SBUV 观测进行偏差订正。气柱臭氧总量是从模式顶部开始进行垂直累加, 计算公式为下面(2)式所示:

$$TO_{3,k} = \frac{1}{g} \sum_{i=1}^k q_i (p_i - p_{i-1}) \quad (2)$$

上式中 q_i 表示气压层的臭氧含量, p_i 和 p_{i-1} 分别表示该气压层上下边界的气压。各层的臭氧总量采用类似方法计算得到, 然后插值到需要的观测气压层上。在模式顶部以上 TO_3 被假设为 0。在模式地形以下, 气柱臭氧总量 TO_3 值不发生变化。

2.3. 臭氧化学输运模式的切线性/伴随模式

为了计算增量形式目标函数及其梯度值, 需要引入数值预报模式相应的切线性/伴随模式[21] [22] [23]。全球大气数值预报模式的切线性/伴随模式的开发过程极为复杂, 为了避免物理过程切线性/伴随处理上的复杂性, 首先只考虑谱模式绝热框架和简单物理过程参数化方案程序的切线性/伴随模式, 这时的模式称为简单非线性模式(SNM), 相应地将包含全物理过程的模式称为全非线性模式(FNM)。在外循环的更新向量计算中使用的模式是 FNM, 而根据增量形式的四维变分公式, 内循环的切线性/伴随模式的分辨率不一定与外循环的 FNM 一致, 但为了保证收敛, 切线性/伴随模式基于相同的模式实现。为此将 SNM 的切线性/伴随模式作为增量形式目标函数及其梯度计算所需要的切线性/伴随模式[21]。

对于一般形式的大气化学物质(例如, 臭氧)的输运模式[6], 完整的基本方程可以表示为下面的(3)式:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla(\mathbf{v}c_i) - \nabla\left(\rho\mathbf{K}\nabla\frac{c_i}{\rho}\right) - \sum_{r=1}^R \left\{ k(r) [s_i(r_+) - s_i(r_-)] \prod_{j=1}^U c_j^{s_j(r_-)} \right\} \\ = E_i + D_i \end{aligned} \quad (3)$$

其中 c_i 表示化学物种 i 的浓度, $s \in \mathbb{N}_0$ 是化学计算系数。 \mathbf{v} 是风矢量, 通过大气运动数值模式与化学输运模式进行耦合而获取。 $k(r)$ 是化学反应 r 的反应速率, 对于化学物质 i , (r_+) 表示生成增加, (r_-) 表示消耗减少, U 是机制中的化学物种数量。 E_i 和 D_i 分别表示化学物种的排放速率和沉降速率, ρ 表示大气密度, \mathbf{k} 是对称的涡流扩散张量[9] [11]。平流层臭氧化学输运模式(CTM)是上面方程一个简化后的特例。通过变分运算可以证明化学输运方程的齐次伴随方程具有下面(4)式的形式:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial \delta c_i^*}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla\delta c_i^* - \frac{1}{\rho}\nabla(\rho\mathbf{K}\nabla\delta c_i^*) \\ + \sum_{r=1}^R \left\{ k(r) \frac{s_i(r_-)}{c_i} \prod_{j=1}^U c_j^{s_j(r_-)} \sum_{n=1}^U [s_n(r_+) - s_n(r_-)] \delta c_n^* \right\} = 0 \end{aligned} \quad (4)$$

实际的切线性/伴随模式通过借助从正向模拟代码到微分代码的自动微分工具实现[19]。但是, 基于自动微分工具自动生成的切线性/伴随代码不是完美的, 因此自动微分工具只能作为辅助手段, 活跃变量的确定、接口设计、检验、调试等大量和繁杂的工作需要人工完成, 同时需要采用手工方法对代码进行计算和存储上的优化。

2.4. 臭氧资料同化求解

为了减少计算量,在臭氧全球四维变分资料同化中引入多增量方法,在不同的低分辨率上计算臭氧、温度、涡度、散度、比湿和地面气压等大气场的分析增量,依次加到背景场上更新同化分析场。多增量方法采用迭代过程,开始时将背景场作为迭代起始值,即 $x_0^0 = x_b$,而对于 n 次迭代的分析 x_0^n 则由上一次分析 x_0^{n-1} 加上当前步骤的分析增量更新所得。

在计算的组织上,臭氧观测资料同化分为外循环和内循环两个部分,内循环嵌套在外循环中。内循环的分辨率随着外循环的迭代增长,由上一步低分辨率的迭代得到的代价函数信息为接下来的高分辨率迭代提供了有效的预处理,从而可以减少迭代次数。内循环中的模式算子和观测算子进行了线性化处理,确保目标函数是完全二次型,从而在内循环中采用了共轭梯度法有效地求解极小化,非线性的影响集中在外循环中。外循环在网格距 25 公里(T799)分辨率下进行,主要由大气环境数值预报非线性模式轨迹计算和更新向量计算两部分组成,模式轨迹计算直接采用非线性完全模式,更新向量是在与非线性模式相同的分辨率下进行计算。内循环完成最优化算法的迭代计算,主要由四维变分框架、切线性/伴随模式组成,内循环迭代在较低分辨率(T95/T255)下进行,采用 12 小时连续模式状态(轨迹)附近进行线性化的切线性模式的伴随模式计算目标函数的梯度,极小化算法采用共轭梯度法。最内层循环低分辨率 T95 的迭代能够为较高分辨率 T255 的迭代提供有效的预处理,以减少迭代的次数[21]。

臭氧资料四维变分同化的主要运算步骤包括:

第一步:计算臭氧等变量的高分辨率背景场轨迹,模式轨迹被插值到下一个作业步的分辨率上并输出。将高分辨率背景场轨迹转换到观测空间,计算观测相当量与观测量之间的差值,得到更新向量,存储在观测数据库中。然后进行观测资料筛选,决定在极小化过程中哪些观测量是可用的。

第二步:在低分辨率上的第一次极小化利用简化的切线性物理过程和切线性观测算子产生初步的低分辨率上分析增量。计算出分析 Hessian 矩阵的特征向量,并用于接下来最内层循环迭代的预处理。该作业步还计算出用于误差协方差循环所需的分析误差和背景误差。

第三步:更新高分辨率的轨迹,以考虑非线性的影响。新的大气状态和臭氧状态对观测的偏差存储在观测数据库中,分析问题在已更新的模式状态附近重新被线性化。计算变分质量控制,得到的质量控制权重用于接下来的极小化。更新后模式轨迹被插值到下一个作业步的分辨率上并输出。

第四步:在提高的分辨率上,用较完整的切线性物理过程,执行第二次主要的极小化计算。

第五步:生成高分辨率的分析场(包括包含臭氧、温度、涡度、散度、比湿和地面气压),计算所有观测资料与分析场之间的差值(包括没有用于分析观测资料与分析场的差,用于诊断)。

3. 臭氧资料同化数值实验

3.1. 卫星臭氧观测数据描述

目前,国内外已经研制了基于地面、航空和卫星等平台的大气臭氧观测系统,实现了对全球大气臭氧长期、连续的观测,为业务数值天气预报和气候研究提供了大量具有高价值的观测数据[4] [5]。相对于地面和航空观测技术,卫星遥感探测能够提供更高时间和空间分辨率的臭氧观测资料。尤其是卫星临边观测技术,因为能够提供近全球覆盖且高垂直分辨率的观测数据,所以在大气臭氧探测中具有较大优势。采用前面描述的卫星臭氧观测资料同化技术后,目前在全球四维变分同化系统中已经实现了对扫描成像大气吸收光谱仪(SCIAMACHY, Scanning Imaging Absorption spectrometer for Atmospheric Cartography)臭氧气柱总量观测资料的同化。SCIAMACHY 能同时进行天底、掩星和临边三种模式的大气观测,它的 8 个探测通道分布于紫外/可见光和近红外到中红外区域,可同时用于多种大气微量气体和气溶胶分布等的

反演, 能够全面地提供大气成分信息[10]。本文中同化的是基于差分光学吸收光谱方法(DOAS)反演的SCIAMACHY 臭氧气柱总量, 分辨率为 60 km× 30 km, 数据相对误差大约为 2%。DOAS 反演方法能够从大气临边散射数据反演得到大气臭氧垂直分布廓线和气柱总含量, 具有能够消除观测光谱中由瑞利散射及米散射等引起的波谱特征的优点。

3.2. 观测资料同化结果分析

采用上面的臭氧观测资料同化技术后, 在高分辨率全球四维变分资料同化系统中实现了对SCIAMACHY 臭氧气柱总量观测资料的同化, 被同化观测类型主要包括: 常规观测资料、卫星辐射率、卫星臭氧观测等, 具体如表 1, 表 2 所示。卫星辐射率资料主要是晴空微波温湿和红外辐射率探测资料, 包括的仪器有先进微波探测单元 A/B (AMSU-A/B)、微波湿度探测仪(MHS)和红外探测仪 4 型(HIRS-4)。由于资料同化方法的局限性, 目前对于云雨区域、陆地和冰面的辐射率观测数据暂不进行同化。对于卫星臭氧观测资料, 由于同化的是总气柱臭氧反演量, 所以不区分海表、陆地和冰面等下垫面情形。SCIAMACHY 仪器在高纬度和极地地区以高频方式扫描观测, 从而能够对解决该区域观测稀少问题具有一定作用。在本实验中选用的时间段是 2012 年 2 月 1 日 00 时到 2012 年 3 月 10 日 12 时, 从 2 月 1 日 00 时开始在四维变分资料同化系统中引入卫星臭氧观测, 因为同化初始时段内臭氧分析场和臭氧观测量之间有一个协调过程, 所以选用经过一段时间以后的 2012 年 2 月 20 日 00 时的同化结果进行分析。

从表 1 中可知, 由于卫星臭氧观测资料同化的引入, 一定程度上增加了常规资料中地面报和探空报观测要素的数量, 使两种类型观测利用率有所提高。通常认为探空报的观测质量较高, 被同化观测数量的增加说明了通过臭氧观测资料同化能改善同化系统的分析效果。原因是新臭氧观测数据的引入增加了新观测信息和填补了某些观测信息“盲区”, 使得分析场和背景场的质量进一步提高, 增加了与观测实况的一致性, 从而使得原来不能被同化的观测能够被同化, 从而对分析场产生正贡献。对其它两种类型的常规观测(飞机报和测风报), 因为被同化观测要素数量几乎没有变化, 所以不在此处赘述。

Table 1. Impact of satellite ozone data assimilation on the number on two kinds of conventional observations which are assimilated

表 1. 卫星臭氧观测资料同化对两类常规观测资料同化数量的影响

种类情形	地面报数量	探空报数量
不同化臭氧	81,601	79,876
同化臭氧	81,641	79,894

Table 2. Screening results of all kinds of observation used in the global 4D-Var system (statistics of 12-hour long assimilation window at 00 UTC on February 20, 2012)

表 2. 四维变分同化系统中观测元素筛选结果(2012 年 02 月 20 日 00 时 12 小时同化窗口的统计量)

观测类型	观测量	被同化观测量	利用率(%)
SYNOP	2,242,813	81,641	3.64%
AIREP	121,700	59,538	48.92%
TEMP	391,149	79,894	20.43%
PILOT	45,960	14,818	32.24%
RADIANCE	14,274,400	542,520	3.80%
OZONE	35,511	32,522	91.58%
合计	17,111,533	810,933	4.74%

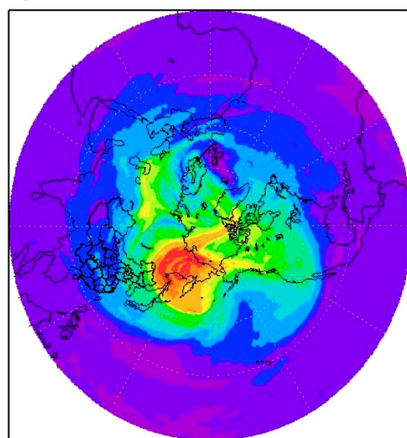
表 2 表示的是 2012 年 2 月 20 日 00 时 12 小时同化窗口内不同类型观测数据元素总数量、被同化利用的观测数量及观测利用率。目前在全球四维变分资料同化系统中, 对于 SYNOP 观测, 同化的观测要素包括 2 米湿度、2 米温度、地表气压和 10 米风矢量; 对于飞机报观测, 同化的观测要素包括温度和风分量; 对于探空观测 TEMP, 同化的观测要素包括湿度、温度和风分量; 对于测风报观测 PILOT, 同化的观测要素主要是风分量; 对于卫星辐射(RADIANCE)观测, 同化的观测要素主要是辐射率。从表 2 中可知, 就被同化的观测要素而言, 卫星臭氧气柱总含量观测的同化利用率最高; 飞机报和测风报观测数据的利用率次之; 辐射率和地面报两类观测数据利用率较低, 大部分观测数据不能通过同化系统严格的质量控制和筛选步骤。通过上面的分析可知, 就四维变分同化系统对观测要素的利用情况而言, 卫星臭氧观测要素的利用率最高, 远远高于其它种类的观测要素。一方面说明由 SCIAMACHY 仪反演的臭氧气柱总量观测质量较好, 另外一方面进一步表明本文实现的临近空间臭氧资料四维变分同化功能是正确的, 能有效同化绝大部分卫星臭氧观测资料。

3.3. 臭氧总含量分析场对比

分析场是指同化系统在融合各种信息后直接生成的与实际情况最接近的某一时刻大气状态场。本文所实现的全球四维变分资料同化系统生成的分析场包含了温度、压强、湿度、风场和臭氧含量等大气状态变量, 所得臭氧分析变量是全球三维臭氧质量混合比。全球三维臭氧质量混合比经过垂直方向的累加计算后可以获得全球分布的总气柱臭氧含量。为了说明卫星臭氧资料同化后对全球臭氧分析场的影响, 下面给出气柱臭氧总含量分析场的空间分布。

图 1, 图 2 给出了南北半球总气柱臭氧含量(单位: 千克/米²)分析场的空间分布图。在图 1 和图 2 中, 左图为不同化 SCIAMACHY 臭氧观测资料的结果, 右图为同化 SCIAMACHY 臭氧观测资料的结果。两图对比可知, 同化卫星臭氧观测资料后, 无论是北半球还是南半球总气柱臭氧含量的分布具有明显变化。首先臭氧的最大值、最小值有较大变化; 其次是总气柱臭氧含量高值区和低值区的形状在同化臭氧观测资料前后明显不同, 臭氧空间分布范围具有向极值区缩小的特征, 相对来说在同化卫星臭氧观测资料后南半球臭氧分布形式具有更大的变化, 原因是进入同化系统的 SCIAMACHY 卫星臭氧观测资料大部分

TCO Analysis without Ozone data Assimilation of 2012022000



TCO Analysis with Ozone data Assimilation of 2012022000

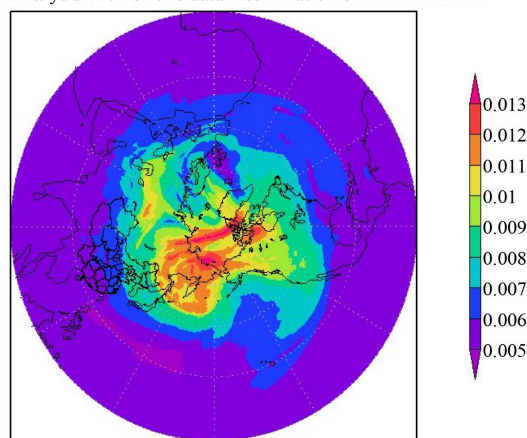


Figure 1. Analysis Fields of Total Column Ozone (TCO) for the Northern Hemisphere at 00 UTC on February 20, 2012. The left picture shows TCO distribution without assimilation of SCIAMACHY ozone observations, while the right one shows the results by assimilating ozone data.

图 1. 2012 年 2 月 20 日 00 时北半球臭氧气柱总含量分析场对比(左图为不同化 SCIAMACHY 臭氧观测资料的结果, 右图为同化 SCIAMACHY 臭氧观测资料的结果)

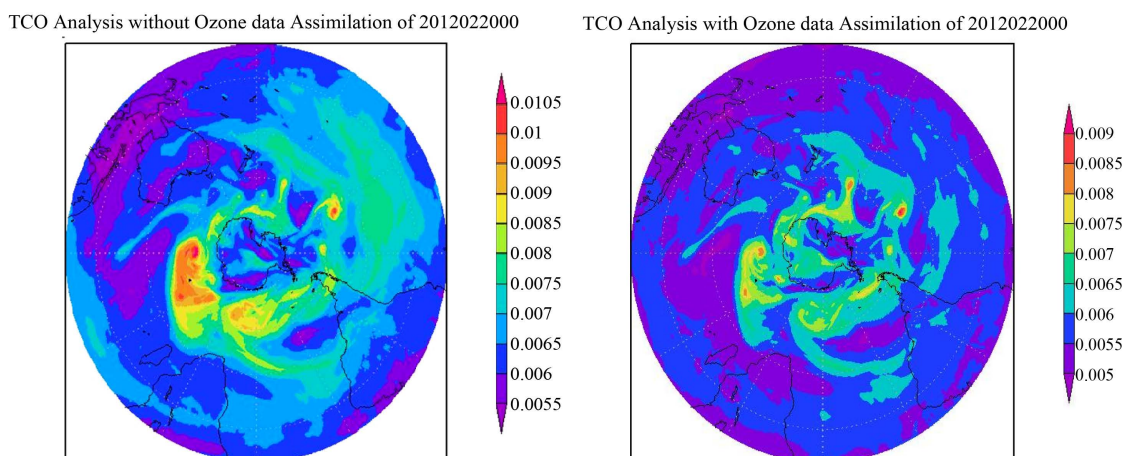


Figure 2. Analysis Fields of Total Column ozone for the Southern Hemisphere at 00 UTC on February 20, 2012. The difference of left and right graphs are same as in **Figure 1**.

图 2. 2012 年 2 月 20 日 00 时南半球臭氧气柱总含量分析场对比(左右图情形与图 1 类似)

分布在南半球；最后总的趋势是同化 SCIAMACHY 臭氧观测资料后分析场中的总气柱臭氧含量有降低的趋势。

3.4. 臭氧总含量预报场对比

全球四维变分资料同化系统生成的全球臭氧质量混合比三维格点分析场输入全球大气环境数值预报模式后，进行 10 天模式预报能生成三维臭氧质量混合比、温度、湿度、风场等的预报产品，水平方向分辨率为 25 千米，垂直方向是 91 层。全球三维臭氧质量混合比预报产品经过垂直方向的累加计算后可以获得全球分布的总气柱臭氧含量。为了进一步说明卫星臭氧资料同化后对全球臭氧预报场的影响，给出了图 3，图 4 南半球 24 和 48 小时两个不同预报时效的总气柱臭氧含量(单位：千克/米²)预报场的空间分布图。在图 3，图 4 中，左图为不同化 SCIAMACHY 臭氧观测的预报结果，右图为同化 SCIAMACHY 臭氧观测后的预报结果。两图对比可知，同化卫星臭氧观测资料后，南半球总气柱臭氧含量预报场的分布具有明显变化：臭氧预报场的最大值、最小值有较大变化，总气柱臭氧预报场的高值区和低值区形状在同化臭氧观测资料前后明显不同，在同化 SCIAMACHY 臭氧观测资料后各个预报时次的总气柱臭氧含量有下降的趋势。经仔细对比易知，南半球许多区域各个时次预报场的细微结构完全不同。综上所述，经过 20 天的全球同化后，卫星臭氧观测资料的对南半球臭氧预报场带来了较大的变化，从而进一步说明了卫星臭氧资料同化后对全球臭氧预报场的影响。

3.5. 分析预报技巧比较

为了客观定量地比较卫星臭氧测资料同化对数值预报效果的影响，采用世界气象组织推荐的标准统计检验程序针对 39 天(从 2012 年 2 月 1 日到 2012 年 3 月 10 日)的全球分析预报产品进行了统计检验对比试验。两组对比试验设计如下，同化卫星臭氧测资料的实验记为 O₃DA，将无卫星臭氧测资料同化作为控制试验(记为 NoO₃DA)。首先进行了 2012 年 02 月的同化预报批量运行试验，同化窗口设置为 12 小时，每天运行世界时 00 时和 12 时两次同化，其中 00 时次的同化结果作为 10 天预报的初始场，全球模式生成模式层上的涡度、散度、温度、地面气压、比湿、臭氧等 10 天预报产品，并进行后处理。再利用标准统计检验程序计算了在有、无卫星臭氧观测资料同化两种情况下 500 hPa 位势高度 10 天预报的距平相关(ACC)和均方根误差(RMSE)月平均值。统计检验主要对北半球区域内的网格点进行计算，文中主要的

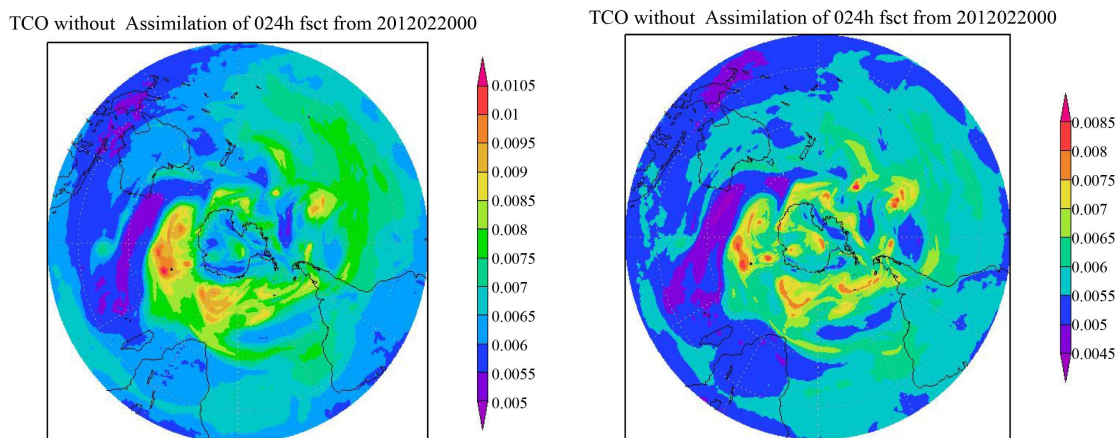


Figure 3. 24 hours Forecast Fields of Total Column ozone for the Southern Hemisphere from 00 UTC on February 20, 2012. The difference of left and right graphs are same as in **Figure 1**.

图 3. 2012 年 2 月 20 日 00 时南半球臭氧气柱总含量 24 小时预报场对比(左右图情形与图 1 类似)

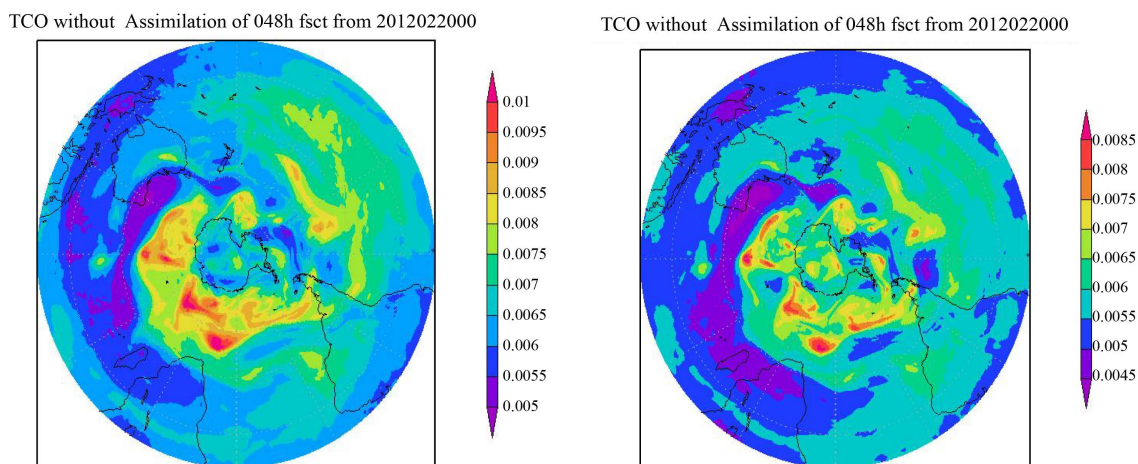


Figure 4. 48 hours Forecast Fields of Total Column ozone for the Southern Hemisphere from 00 UTC on February 20, 2012. The difference of left and right graphs are same as in **Figure 1**.

图 4. 2012 年 2 月 20 日 00 时南半球臭氧气柱总含量 48 小时预报场对比(左右图情形与图 1 类似)

检验变量是位势高度场。

统计检验对比情况如表 3, 表 4 所示, 分别展示了 2012 年 2 月北半球 500 hPa 位势高度 10 天预报的月平均距平相关值和均方根误差值。对以位势高度预报距平相关为预报技巧评分指标而言, 在同化卫星臭氧观测资料以后对北半球第一天至第十天预报都产生了一定的正效应, 而且随着预报时间延长, 预报技巧提高越大, 从而说明通过卫星观测资料同化带来的改进效果越大; 从南半球 500 hPa 位势高度 10 天预报的距平相关数值来看, 通过同化卫星臭氧观测资料对第一天至第八天预报都产生了一定的正效应, 第九天的预报技巧具有一定程度的下降, 而第十天基本持平。

对以位势高度预报均方根为预报技巧评分指标而言, 在同化卫星臭氧资料以后, 北半球第一天至第十天的月平均均方根误差值都有显著减小, 且大体呈现预报时间越长均方根误差值减小幅度越大的趋势, 从而说明通过卫星观测资料同化对北半球形势预报带来的改进效果越大; 而南半球也有明显改进, 均方根值从第一天至第十天预报都呈现一致减小, 但没有呈现明显的特征趋势。

总而言之, 由于位势高度是一个综合量, 其统计检验反映了同化预报系统整体的性能, 因此可以

Table 3. Comparison of monthly average anomaly correlation coefficient (ACC) for ten-day global forecast fields of 500 hPa geopotential height in February 2012.**表 3.** 2012 年 2 月 500 hPa 位势高度 10 天预报的月平均距平相关值

时间 实验名称	24 h	48 h	72 h	96 h	120 h	144 h	168 h	192 h	216 h	240 h	
北半球	NoO3DA	0.993	0.979	0.953	0.910	0.851	0.781	0.709	0.626	0.558	0.488
	O3DA	0.994	0.980	0.957	0.917	0.860	0.788	0.718	0.638	0.585	0.533
南半球	NoO3DA	0.988	0.965	0.924	0.867	0.789	0.696	0.595	0.479	0.387	0.287
	O3DA	0.990	0.970	0.935	0.881	0.810	0.704	0.602	0.494	0.369	0.288

Table 4. Comparison of root-mean-square error (RMSE) for ten-day global forecast fields of 500 hPa geopotential height in February 2012.**表 4.** 2012 年 2 月 500 hPa 位势高度 10 天预报的月平均均方根误差值

时间 实验名称	24 h	48 h	72 h	96 h	120 h	144 h	168 h	192 h	216 h	240 h	
北半球	NoO3DA	9.383	17.459	26.724	38.186	49.224	59.655	70.552	80.759	88.190	95.793
	O3DA	9.083	16.831	25.448	36.407	47.590	58.772	69.583	79.566	86.576	92.997
南半球	NoO3DA	10.124	18.755	29.114	40.931	52.962	64.541	75.348	86.355	95.290	101.521
	O3DA	8.948	16.976	26.769	38.472	50.390	63.186	74.624	84.528	94.848	101.290

得出如下结论：卫星臭氧资料为全球四维变分资料同化系统引入了有价值的观测信息，通过同化方法产生的更接近真实情形的臭氧分布能大幅度地改进原有辐射方案中的计算，克服了在数值天气预报中应用臭氧气候值的缺点，最终提高了南北半球数值天气预报的预报评分。

4. 结论

通过同化臭氧资料一方面可以增加观测信息，另一方面能够更好地描述数值预报模式中的辐射强迫项。本文在全球气象资料四维变分同化系统中实现了卫星臭氧资料同化功能，能提供高分辨率的三维臭氧浓度分析产品。针对 SCIAMACHY 臭氧观测开展了长时间的全球四维变分资料同化和数值预报试验。试验结果表明：通过同化卫星臭氧观测资料，一定程度上提高了地面报和探空报的同化利用率，总气柱臭氧含量预报场的空间分布具有明显变化，对南北半球形势场预报技巧评分具有较大幅度的提高，从而说明臭氧资料同化对分析和预报都产生了正贡献。

项目基金

国家自然科学基金(批准号：41475094, 41605070)资助的课题。

参考文献 (References)

- [1] 王革丽, 吕达仁, 杨培才. 人类活动对大气臭氧层的影响[J]. 地球科学进展, 2009, 24(3): 331-337.
- [2] 吕达仁, 陈洪滨. 平流层和高层大气研究的进展[J]. 大气科学, 2003, 27(4): 750-769.
- [3] 施春华, 陈月娟, 郑彬, 等. 平流层臭氧季节变化的动力和光化学作用之比较[J]. 大气科学, 2010, 34(2): 399-406.
- [4] Morcrette, J.J. (2003) Ozone-Radiation Interactions in the ECMWF Forecast System. Tech. Memo. 375, ECMWF, Reading, UK.
- [5] Dethof, A. and Holm, E. (2004) Ozone Assimilation in the ERA-40 Reanalysis Project. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **131**, 2851-2872. <https://doi.org/10.1256/qj.03.196>

- [6] Bregman, A., Krol, M.C. and Teysdre, H. (2001) Chemistry Transport Model Comparison with Ozone Observations in the Midlatitude Lowermost Stratosphere. *Journal of Geophysical Research*, **106**, 17479-17496. <https://doi.org/10.1029/2000JD900752>
- [7] Dethof, A. (2003) Assimilation of Ozone Retrievals from the MIPAS Instrument on Board ENVISAT. Tech. Memo. 428, ECMWF, Reading, UK.
- [8] Errera, Q. and Fonteyn, D. (2001) Four-Dimensional Variational Chemical Assimilation of CRISTA Stratospheric Measurements. *Journal of Geophysical Research*, **106** (D11), 12253-12265. <https://doi.org/10.1029/2001JD900010>
- [9] Eskes, H.J., Van Velthoven, P.F.J. and Valks, P.J.M. (2003) Assimilation of GOME Total Ozone Satellite Observations into a Three Dimensional Tracer Transport Model. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **129**, 1663-1681. <https://doi.org/10.1256/qj.02.14>
- [10] Eskes, H.J., van der A.R.J. and Brinksma, E.J. (2005) Retrieval and Validation of Ozone Columns Derived from Measurements of SCIAMACHY on Envisat. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 4429-4475. <https://doi.org/10.5194/acpd-5-4429-2005>
- [11] Geer, A.J., Lahoz, W.A. and Jackson, D.R. (2007) Evaluation of Linear Ozone Photochemistry Parametrizations in a Stratosphere-Troposphere Data Assimilation System. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **7**, 939-959. <https://doi.org/10.5194/acp-7-939-2007>
- [12] 王自发, 谢付莹, 王喜全. 嵌套网格空气质量预报模式系统的发展与应用[J]. 大气科学, 2006, 30(5): 778-790.
- [13] 张凯, 徐大海, 朱蓉. CAPPS 多箱模式中光化学模式的嵌套与城市大气臭氧数值预报[J]. 应用气象学报, 2005, 16(1): 1-12.
- [14] 张美根. 多尺度空气质量模式系统及其验证 I: 模式系统介绍与气象要素模拟[J]. 大气科学, 2005, 29(5): 805-813.
- [15] 张伟, 王自发, 安俊岭. 利用 BP 神经网络提高奥运实时预报系统预报效果[J]. 气候与环境研究, 2010, 15(5): 595-601.
- [16] 唐晓, 王自发, 朱江. 北京地面臭氧的集合预报试验[J]. 气候与环境研究, 2010, 15(5): 677-684.
- [17] Tang, X., Zhu, J. and Wang, Z.F. (2011) Improvement of Ozone Forecast over Beijing Based on Ensemble Kalman Filter with Simultaneous Adjustment of Initial Conditions and Emissions. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **11**, 12901-12916. <https://doi.org/10.5194/acp-11-12901-2011>
- [18] 黄思训, 伍荣生. 大气科学中的数学物理问题[M]. 北京: 气象出版社, 2001.
- [19] 邹晓蕾. 资料同化理论与应用(上册)[M]. 北京: 气象出版社, 2009.
- [20] 曹小群, 黄思训, 杜华栋. 变分同化中水平误差函数的正交小波模拟新方法[J]. 物理学报, 2008, 57(3): 1984-1989.
- [21] 张卫民, 曹小群, 宋君强. 以全球谱模式为约束的四维变分资料同化系统 YH4DVAR 的设计和实现[J]. 物理学报, 2012, 61(24): 249202-13.
- [22] 曹小群, 皇群博, 刘柏年. 基于对偶数理论的资料同化新方法[J]. 物理学报, 2015, 64(13): 130502-12.
- [23] 曹小群, 宋君强, 张卫民. 一种基于复数域微分的资料同化新方法[J]. 物理学报, 2013, 62(17): 170504-9.

知网检索的两种方式:

1. 打开知网页面 <http://kns.cnki.net/kns/brief/result.aspx?dbPrefix=WWJD>
下拉列表框选择: [ISSN], 输入期刊 ISSN: 2163-3967, 即可查询
2. 打开知网首页 <http://cnki.net/>
左侧“国际文献总库”进入, 输入文章标题, 即可查询

投稿请点击: <http://www.hanspub.org/Submission.aspx>
期刊邮箱: ag@hanspub.org