

中央氣象局四維變分資料同化(4DVAR)之初步測試與分析

江晉孝¹、張昕²、馮欽賜¹、黃向宇²

¹中央氣象局 ²美國國家大氣科學研究中心

摘要

中央氣象局 WRF 模式目前使用之資料分析方法為三維變分資料同化 (Three-Dimensional Variational Data Assimilation, 3DVAR)，此技術是假定觀測資料與模式控制變數皆屬同一時間，優點為所需之計算機資源較低，但其背景誤差協方差矩陣不隨時間變化與無法同化不同時間的觀測資料則為極大之劣勢。配合中央氣象局新一代超級電腦之建置，大幅提升的計算機資源，讓我們能嘗試運用四維變分資料同化 (Four-Dimensional Variational Data Assimilation, 4DVAR) 技術評估與分析其對 WRF 模式預報的效益。

研究結果發現，(1)在 2008 年(THORPEX Pacific Asian Regional Campaign, T-PARC)實驗期間，格點校驗結果顯示 4DVAR 相較於 3DVAR 得到略差的表現，但在颱風路徑預報上，則呈現優劣互現的結果。(2)由高解析度網格之降水結果顯示，4DVAR 比 3DVAR 更能掌握較佳的降水分布型態與極值，而由公正預兆得分(ETS)及偏離指數(Bias)校驗結果，4DVAR 亦得到較高的得分值與較佳的偏離值，顯示 4DVAR 較有潛力與優勢在未來同化時空密集度較高的降水資料。

關鍵字：變分資料同化、颱風路徑預報、多重增量、格點校驗、公正預兆得分、偏離指數

一、前言

數值天氣預報範疇中，除了持續改進預報模式解析度、物理參數化與動力架構外，如何得到一個準確的初始分析場來描述實際天氣狀態是氣象學家持續努力的目標，而要獲取一個較佳的初始分析場則著重在改進資料分析與初始化技術。

四維變分資料同化(Four-Dimensional Variational Data Assimilation, 4DVAR)概念最早由 (Lewis and Derber 1985；Le dimet and Talagrand 1986)提出，首先將 4DVAR 系統成功應用於日常作業預報的氣象單位為歐洲中期天氣預報中心(European Centre for Medium-Range Weather Forecasts, ECMWF)。在 ECMWF 之後，全世界各個氣象單位皆致力於在其預報模式中發展 4DVAR 系統，包含法國氣象局 (Météo-France)，英國氣象局(Met Office)，日本氣象廳 (Japan Meteorological Agency)，加拿大環境部 (Environment Canada)以及瑞典氣象與水文研究所 (Swedish Meteorological and Hydrological institute)。

WRF4DVAR 系統雛形建立於 2005 年，至今仍持續改進與透過切線性(tangent linear)、伴隨(adjoint)等方法驗證其程式架構之正確性(Huang et al. 2006)，但其程式內部資源分配與資料交換方式仍待改善。Zhang et al. (2013)重新發展新一代 WRF4DVAR，此版本將各程式套件間的資料交換改由記憶體存取並重新分配中央處理器運算資源，大幅提升計算效能與資料交換之效率。

4DVAR 相較於 3DVAR 有以下幾項優點：1)能同化不同時間的觀測資料，2)隱含與流場相關

(flow dependent)的背景場誤差統計特性，3)能利用預報模式的約束來增加初始分析場的動力平衡效益。

本研究主要目的希望藉由 4DVAR 可同化不同時間觀測資料的特性，透過模式非線性原始方程與伴隨(adjoint)方程之反覆來回疊代運算，再依據誤差協方差矩陣調整模式中的變數，使得同化後的初始場充分包含觀測資料的訊息，同時也能符合模式動力的一致性。

二、WRF4DVAR 概念與架構

(一) 4DVAR 概念

WRF4DVAR 中定義一價值函數 J ，經由反覆疊代使其極小化藉以獲得模式最佳初始場：

$$J = J_b + J_o + J_c \quad (1)$$

(1)式中包含了背景場項(J_b)、觀測場項(J_o)、平衡控制項(J_c)。背景場項(J_b)定義如下：

$$\begin{aligned} J_b &= \frac{1}{2} (x^n - x^b)^T B^{-1} (x^n - x^b) \\ &= \frac{1}{2} [(x^n - x^{n-1}) + (x^{n-1} - x^b)]^T B^{-1} [(x^n - x^{n-1}) + (x^{n-1} - x^b)] \\ &= \frac{1}{2} \left[(x^n - x^{n-1}) + \sum_{i=1}^{n-1} (x^i - x^{i-1}) \right]^T B^{-1} \left[(x^n - x^{n-1}) + \sum_{i=1}^{n-1} (x^i - x^{i-1}) \right] \end{aligned} \quad (2)$$

x^b ：背景場。

x^n ：經過 n 次外迴圈所得之分析值。

n 為外迴圈之總數， i 表示第 i 次外迴圈， $i = 1 \sim n$ 。

B 為背景場誤差協方差矩陣。

$-I$ 表示反矩陣， T 表示伴隨矩陣。

x^b 與 x^0 僅在第一次外迴圈時才會相等。

觀測場項(J_o)定義如下：

$$\begin{aligned}
J_o &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K \{H_k[M_k(\mathbf{x}^n)] - \mathbf{y}_k\}^T \mathbf{R}^{-1} \{H_k[M_k(\mathbf{x}^n)] - \mathbf{y}_k\} \\
&\approx \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K \{H_k[M_k(\mathbf{x}^{n-1})] + \mathbf{H}_k \mathbf{M}_k(\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^{n-1}) - \mathbf{y}_k\}^T \\
&\quad \times \mathbf{R}^{-1} \{H_k[M_k(\mathbf{x}^{n-1})] + \mathbf{H}_k \mathbf{M}_k(\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^{n-1}) - \mathbf{y}_k\} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K [\mathbf{H}_k \mathbf{M}_k(\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^{n-1}) - \mathbf{d}_k]^T \mathbf{R}^{-1} \\
&\quad \times [\mathbf{H}_k \mathbf{M}_k(\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^{n-1}) - \mathbf{d}_k]. \quad (3)
\end{aligned}$$

$$\mathbf{d}_k = \mathbf{y}_k - H_k[M_k(\mathbf{x}^{n-1})] \quad (4)$$

\mathbf{y}_k : 同化窗區 k 時的觀測值。

k ($k = 1 \sim K$): 同化時間窗區(k 個觀測窗區)。

H_k 及 \mathbf{H}_k : 非線性與切線性觀測算符, 在觀測窗區中利用其轉換模式大氣變數至觀測的變數及空間上, 才能與觀測變數相比較。

M_k 及 \mathbf{M}_k : 非線性與切線性模式, 將猜測向量(guess vector, \mathbf{x}^{n-1})及分析增量($\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^{n-1}$)自同化窗區初始傳遞至第 k 個觀測時間窗區。

\mathbf{d}_k : 位於同化窗區 k 時的創新向量(innovation vector)。

\mathbf{R} : 觀測誤差協方差矩陣。

由(3)式, 我們可以了解4DVAR在觀測算符(H_k, \mathbf{H}_k)中加入了預報模式(M_k, \mathbf{M}_k)的資訊, 使得不同時間的觀測資料可以同時影響初始時間的模式控制變量。

平衡控制項(J_c)定義如下:

$$\begin{aligned}
J_c &= \frac{1}{2} \gamma_{df} [\mathbf{M}_{N/2}(\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^{n-1}) \\
&\quad - \sum_{i=0}^N f_i \mathbf{M}_i(\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^{n-1})]^T \mathbf{C}^{-1} [\mathbf{M}_{N/2}(\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^{n-1}) \\
&\quad - \sum_{i=0}^N f_i \mathbf{M}_i(\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^{n-1})] \\
&= \frac{1}{2} \gamma_{df} \left[\sum_{i=0}^N g_i \mathbf{M}_i(\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^{n-1}) \right]^T \mathbf{C}^{-1} \\
&\quad \times \left[\sum_{i=0}^N g_i \mathbf{M}_i(\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^{n-1}) \right], \quad (5)
\end{aligned}$$

r_{df} 為 J_c 項之權重。

N 為同化窗區之總積分步長。

g_i 為修正係數。

\mathbf{C} 為對角矩陣, 包含風場、溫度場、地面乾氣壓。

上述(1)~(5)公式中, 我們可以得知4DVAR之觀測算符會跟隨時間變化, 同時也假設觀測誤差與背景誤差不相關, 且不同時刻之觀測誤差也不相關, 因為4DVAR在分析時刻與整個同化窗區內都有觀測值, 使得其控制變數的數量相當龐大, 必須採用伴隨模式才能計算價值函數之梯度。

(二) Full resolution 4DVAR 與 多重增量 (Multi-incremental) 4DVAR

Full resolution 4DVAR 主要是內外迴圈皆使用相同解析度進行運算, 其優點為內外迴圈使用之地形完全一致且沒有高網格解析度的初始場差分至較低網格解析度產生的誤差, 缺點則為需要相當龐大的記憶體資源進行儲存與交換, 在實際作業上較不具時效性。

而為了使4DVAR能符合氣象單位作業時效上之需求, 進而發展出多重增量形式的4DVAR, 其主要技巧是以較低網格解析度執行內迴圈極小化價值函數之流程, 而外迴圈仍維持較高網格解析度的方式, 因此不影響創新向量之計算與非線性結果之更新。目前ECMWF與JMA等氣象單位皆運用此技術在日常數值天氣預報, 而其使用之內外迴圈網格解析度之比例為3:1。

三、模式系統設定與實驗設計

(一)、模式系統設定

本研究實驗模式的版本是WRF 3.3.1版、WRFDA 3.3.1版與WRFDA 3.5版(即2013年最新版的4DVAR)。網格設定部份(圖1), 使用單層網格, 網格解析度為 45 公里, 水平點數為 223×130, 垂直分層為 45 層, 選擇223×130, 主要是為了符合多重增量4DVAR必須搭配網格點數除3餘1之特性, WRF模式使用相關參數化資訊請參照(表1, 與CWBWRF OP24設定相同)。所有實驗均使用NCEP分析場(0.5°x0.5°)為初始猜測場、NCEP預報場為CWBWRF模式的邊界, 採用12小時局部循環(12 hour partial cycle), 並分別在0000/0012 UTC進行72小時預報。

(二)、個案介紹

本文選取T-PARC實驗期間三個颱風(Sinlaku、Hagupit、Jangmi), 作為實驗研究的分析個案。

Sinlaku颱風為2008年第13號颱風, 本實驗模擬時間自2008年9月9日0000 UTC至9月13日0000 UTC。Hagupit颱風為第14號颱風, 實驗模擬時間自2008年9月19日0012 UTC至9月24日0000 UTC。Jangmi颱風為第15號颱風, 實驗模擬時間自2008年9月24日0012 UTC至9月28日0000 UTC。

四、分析結果

(一)、綜觀尺度校驗

為了解4DVAR在綜觀尺度上預報之能力, 本研究針對T-PARC實驗期間三個颱風(Sinlaku、Hagupit、Jangmi)做長期積分實驗, 三組實驗分別是1)3DVAR, 實驗代號為3dvar, 2)Full resolution 4DVAR, 實驗代號為f-4dvar, 3)多重增量4DVAR, 實驗代號為m-4dvar。三組實驗均使用NCEP分析場

(0.5°x0.5°)為初始猜測場、NCEP預報場為CWBWRF模式的邊界，採用12小時局部循環(12 hour partial cycle)，分別在0000/0012 UTC進行72小時預報，並且以NCEP分析場為校驗之依據。

為充分顯示4DVAR與3DVAR在T-PARC三個颱風期間對於綜觀尺度預報之效益，本研究將三個颱風個案在垂直層上之均方根誤差(Root Mean Square Error)取平均並繪出橫槓表示個案中的最大值與最小值，圖中以虛線表示為3dvar之三個颱風的均方根誤差之平均；實線為Full resolution 4DVAR；點線則為多重增量4DVAR。(圖2)為高度場之校驗結果，結果顯示3DVAR在分析時刻皆優於4DVAR，尤其以850百帕以上最為明顯，但隨著預報時間增加至24小時差異逐漸縮小，72小時預報三組實驗在850百帕以上之差異又開始稍微加大。兩種4DVAR在分析與預報時刻則呈現互有優劣之情況。溫度場之校驗結果(圖略)，分析時刻3DVAR在850百帕至500百帕呈現稍佳的結果，其次是多重增量4DVAR以及Full resolution 4DVAR，隨著預報時間增加，三組實驗之間的差異逐漸縮小。風場(圖略)，3DVAR在分析時刻皆優於4DVAR，隨預報時間增長仍看得出3DVAR在850百帕至300百帕仍比4DVAR稍佳，而兩種4DVAR之間的差異則較不明顯。

由綜觀尺度校驗結果顯示，3DVAR在分析時刻三個颱風實驗期間表現較佳，預報之後則呈現三組實驗優劣互現的結果。而高度場雖與溫度場之關係密不可分，但由結果顯示，在分析時刻Full resolution 4DVAR之高度場誤差較多重增量4DVAR小(850百帕至500百帕)，但是其溫度誤差卻較大，而從風場卻看不出兩者之間之差異，值得更深入探討與研究。

(二)、4DVAR對颱風路徑預報之效益

提升颱風路徑預報之準確性，一直是氣象學家持續努力改進的目標，本節探討不同形式的4DVAR(Full resolution & 多重增量)對於T-PARC實驗期間三個颱風(Sinlaku、Hagupit、Jangmi)的路徑預報之表現。

在Sinlaku颱風實驗模擬期間，(圖3-a)為三組實驗預報路徑誤差之統計結果，在42小時預報之前，Full resolution 4DVAR呈現較低的預報誤差，42小時到60小時預報呈現三組實驗相近的結果，60小時預報之後仍以Full resolution 4DVAR較佳。

(圖3-b) 為Hagupit颱風實驗模擬期間，三組實驗預報路徑誤差之統計結果，在18小時預報之前，多重增量4DVAR有較佳的表現，但預報18小時之後就以3DVAR表現較好。儘管Hagupit颱風路徑走向較為單純，但由路徑誤差統計結果我們發現三組實驗對於Hagupit颱風之預報表現並不佳。

T-PARC期間最後一個颱風為Jangmi颱風，(圖3-c)之路徑誤差統計結果顯示，30小時預報後以

3DVAR表現最為突出，72小時預報誤差低於150公里。

由上述颱風路徑預報實驗結果發現，4DVAR在Sinlaku颱風之路徑預報上表現較佳，而3DVAR則是對於Hagupit與Jangmi颱風的預報有較好的表現。多重增量4DVAR在颱風路徑預報上之趨勢及效益與Full resolution 4DVAR呈現相似的表現，由此顯示儘管多重增量4DVAR在內迴圈使用較低網格解析度做價值函數極小化運算，仍不影響其颱風路徑預報之趨勢，且其節省時間與計算資源之特性，對於將4DVAR應用在日常作業上有極大之助益。

(三)、4DVAR在高解析度網格下對降水之效益

為了瞭解4DVAR在高解析度網格使用之效益，我們使用單層高解析度網格，其解析度為5公里，水平點數為151×181，垂直分層為45層，點數配置符合多重增量4DVAR必須搭配網格點數除3餘1之特性，WRF非線性模式使用相關參數化設定與表1相同，但不使用積雲參數化(CU_PHYSICS=0)，而切線性與伴隨模式也不使用微物理參數化與積雲參數化，相關實驗均使用NCEP分析場(0.5°x0.5°)為初始猜測場、NCEP預報場為CWBWRF模式的邊界，同樣採用12小時局部循環，分別在0000/0012 UTC進行72小時預報，圖4(a)為網格設定範圍。本研究原欲依上述實驗方式測試在高解析度網格下3DVAR、Full resolution 4DVAR、多重增量4DVAR之效能，但Full resolution 4DVAR在此高解析網格設定下，因為必須存取每個時步(time step)的相關資訊需要極高記憶體資源，由測試結果顯示，若使用64核心需要搭配960GB記憶體才能跑完一次資料同化，且耗時約20小時；若提高至192核心，以目前建置之超級電腦，並無如此高的記憶體資源能夠支援，因此在考量運算資源與效能之下，本節不將Full resolution 4DVAR納入考慮。而多重增量4DVAR因執行一次資料同化約耗時1小時(192核心)，且使用記憶體資源相對較低，因此仍可研究其效能。

本研究使用的台灣自動雨量觀測站共有425個，其分布比5公里解析的細網格格點分布密集，在計算校驗降水預報得之前，必須先做出一個模式網格點與自動雨量站相對應之測站列表，因為是在模式網格點上做校驗，所以必須計算出格點上的觀測降水，此方法為在格點上以一半網格間距(2.5公里)為半徑內觀測雨量之平均，例如該選取範圍內有兩個雨量站資料，則該網格點上之觀測降水即為此兩個雨量站資料之平均。圖4(b)為選取的模式網格點與雨量站位置之相對應示意圖，其中選取的模式網格點(藍圈)共322點，自動雨量站(紅點)共425站。

定性的累積降水分佈結果，由Sinlaku颱風(圖5)結果顯示，在12~24小時與36~48小時，多重增量4DVAR能掌握到較好的降水分佈，且其極大值之掌

握也較佳，尤其是在北部山區、宜蘭地區、中南部山區，但相較於觀測仍呈現低估降雨的現象。由Hagupit颱風之結果(圖略)，3DVAR在12~24小時之降水分布與極大值掌握稍佳，但60~72小時兩組實驗之降水分布則比較集中在中央山脈且屬於零星的雨量分布，與觀測之降水分布集中在東部沿岸不盡相同。Jangmi颱風之結果(圖略)，多重增量4DVAR在12~24小時之表現較3DVAR好，尤其掌握到嘉義以及高雄山區的雨量分布以及極大值的位置；36~48小時雖然兩組實驗都掌握到宜蘭地區的降水分布，但是卻未能預報到中南部地區之降水，48小時之後兩組實驗預報降水都在臺灣東部沿岸以及西部平原與觀測降水有極大之出入。

校驗降水預報之得分與指數方面，我們利用廣被氣象作業及研究單位所採用的公正預兆得分ETS (Equitable Threat Score, Schaefer 1990) 及偏離指數Bias 進行降水預報校驗。ETS 是在計算除了模式與觀測皆無降水且不是隨機猜中的情況下，模式正確預測降水的機率，ETS 分數愈高代表模式降雨預報愈準確，其定義如下：

$$ETS = \frac{H - R}{F + O - H - R}$$

上式的F為預測降雨的次數，O為觀測降雨的次數，H 代表預報與觀測皆有降雨的次數， $R = FO/N$ 為隨機可正確預測降水的次數，N為預報次數與觀測次數之和。而偏離係數Bias = F/O，即模式預測降水次數與觀測降水次數之比，當Bias 值大於1 代表模式高估降水次數，小於1則代表模式低估降水次數，綜合ETS 與Bias得分的結果，可判斷降水預報的正確性。由於模式預報長度為72 小時，而我們的校驗對象是12 小時累積降水，因此將預報長度分為0~12、12~24、24~36、36~48、48~60、60~72小時等六個時段，分別稱為A、B、C、D、E、F 時段，其中模式開始預報的A時段為spin-up 階段，其降水預報較不可靠，因此本研究不加以著墨A時段的降雨預報。另外，為了校驗不同降雨強度的預報準確度，我們使用13種降水門檻值分別是0.5、1、2、5、10、20、30、40、50、75、100、125、150mm，根據各個門檻值判斷是否有降雨，以檢驗模式對該門檻值降水強度的預報能力。

圖6為Sinlaku颱風之降水校驗結果，由B、F時段之降水ETS得分可見，在10mm以下的小雨預報3DVAR比多重增量4DVAR稍佳，但20mm以上大雨的ETS得分則以多重增量4DVAR勝出，C、D、E時段皆呈現多重增量4DVAR從小雨至大雨預報之ETS得分皆優於3DVAR。而由Bias之結果顯示，兩組實驗之模式降水皆呈現低估(小於1)之狀態，但多重增量4DVAR之值較接近於1，由此可知多重增量4DVAR在Sinlaku颱風實驗期間降雨預報表現較佳。

Hagupit颱風之降水校驗(圖略)，在B、C、D、E、F 時段兩組實驗在10mm以下小雨預報之ETS得分非常相近，而在20mm以上大雨預報則以3DVAR略佳。Bias結果亦與ETS得分結果相似，但兩組實驗的E與F 時段在75mm以上大雨預報皆呈現高估的情況。Jangmi颱風之降水校驗(圖略)，在B、C、E、F 時段多重增量4DVAR從小雨至大雨預報之ETS得分皆較3DVAR高，僅在D時段在20mm大雨以上預報稍差，由Bias結果亦能得到相似的結果，而且此兩組實驗降水皆呈現低估狀態。

整體而言，多重增量4DVAR對於颱風降水預報呈現較佳的表現，特別是在雨區分布與極大值掌握能力皆優於3DVAR。

五、結論

本研究首次在中央氣象局新一代超級電腦(Fujitsu FX10)上建置4DVAR系統，期望能評估與了解4DVAR在氣象局作業上之可行性與效能，因此本文針對4DVAR執行所需電腦資源需求做完整之評估，另外對於4DVAR之理論基礎與WRF4DVAR主要架構亦有深入的探討。

本研究主要結論為：1)效能評估之結果，多重增量4DVAR使用之記憶體資源與運算效率較能符合實際作業上之需求，且其結果與Full resolution 4DVAR相似，不因內迴圈使用較低網格解析度而受影響，2)由綜觀尺度天氣之校驗以及颱風路徑預報之結果，4DVAR與3DVAR系統呈現優劣互現的狀態，顯示4DVAR未來仍有調整之空間，3)在高解析度網格(5公里)下，4DVAR在降水分布型態與極值之掌握皆優於3DVAR，顯示其未來同化高時空分布的觀測資料(如:雷達回波、徑向風)有其優勢與潛力。

六、參考文獻

- Huang, X.-Y., Q. Xiao, W. Huang, D. M. Barker, J. Michalakes, J. Bray, Z. Ma, Y.-R., Guo, H.-C. Lin, and Y.-H. Kuo, 2006. Preliminary results of WRF 4D-Var. WRF users' workshop, Boulder, Colorado, 19-22 June 2006.
- Zhang, X., X.-Y. Huang, and N. Pan, 2013: Development of an efficient regional four-dimensional variational data assimilation system for WRF. JTECH-S-13-00098(3).

七、附圖

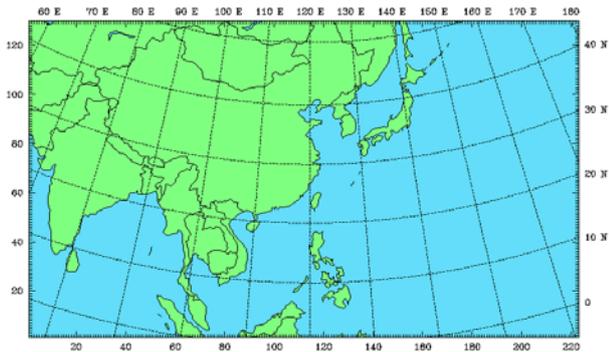


圖1. 本研究WRF模式選取範圍。

Model Physics	
Microphysics	Goddard GCE
Cumulus	Kain-Fritsch scheme with new trigger function
PBL	YSU
Surface layer	Monin-Obukhov
Land process	NOAH land-surface model
Long wave radiance	RRTM
Short wave radiance	Goddard short wave

表1. 本研究WRF模式使用相關參數化設定。

Geopotential Height

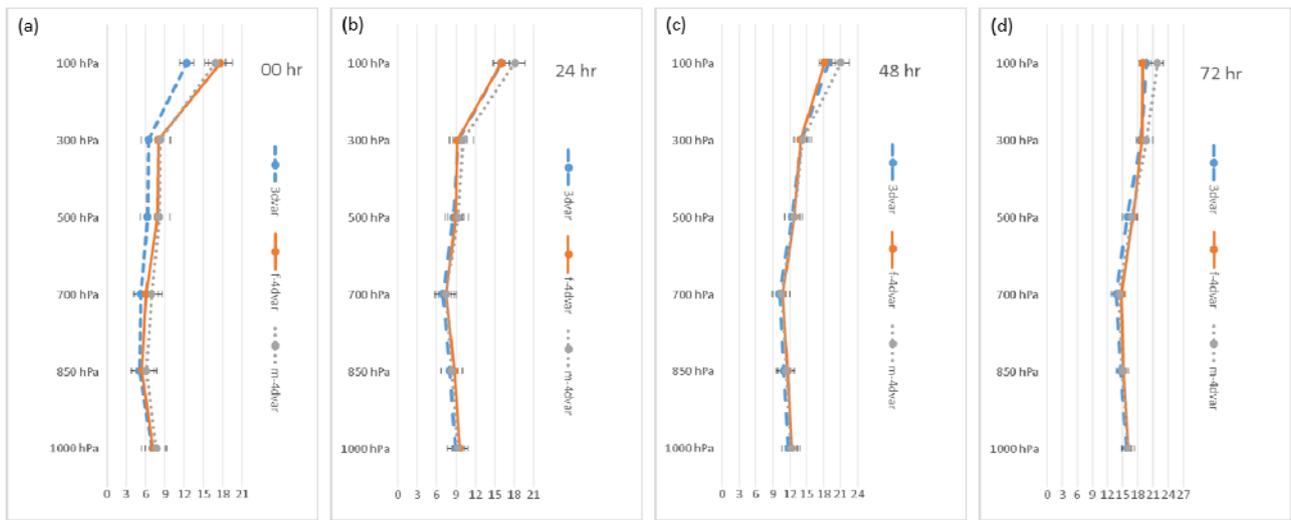


圖2. 三組實驗的高度場(H)在垂直層上之個案平均均方根誤差，(a)分析場，(b)24小時預報，(c)48小時預報，(d)72小時預報。虛線為3DVAR；實線為Full resolution 4DVAR；點線為多重增量4DVAR，橫橫表示個案中的最大值與最小值。

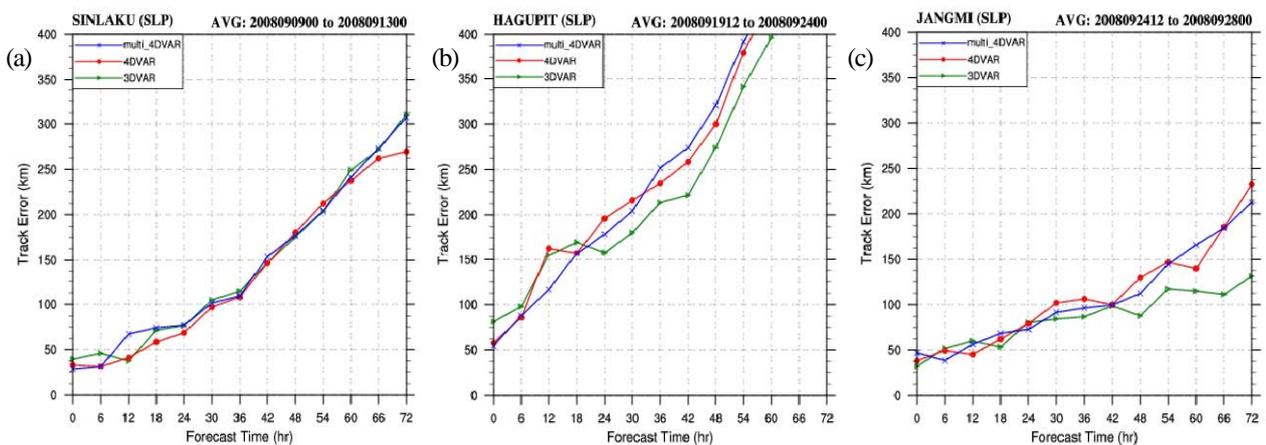


圖3. Sinlaku、Hagupit、Jangmi 颱風實驗模擬期間，3DVAR與4DVAR (Full resolution & 多重增量)之路徑誤差統計圖。▲為3DVAR，●為Full resolution 4DVAR，x為多重增量4DVAR。

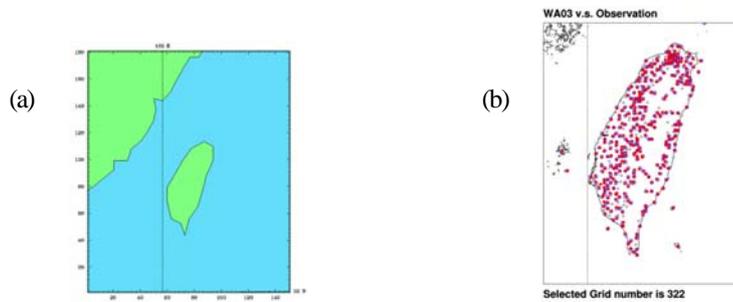


圖 4. (a)本研究高解析度網格選取範圍，解析度為5公里，(b)選取之模式網格點(藍圈，共322點)與自動雨量站(紅點，共425點)相對應示意圖。

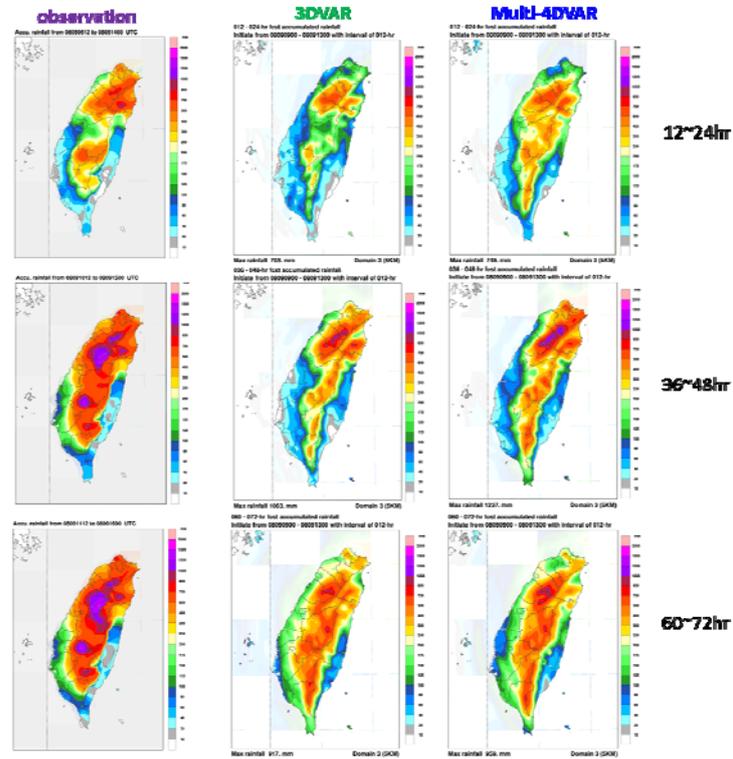


圖 5. Sinlaku 颱風實驗期間觀測與模式降水分布。

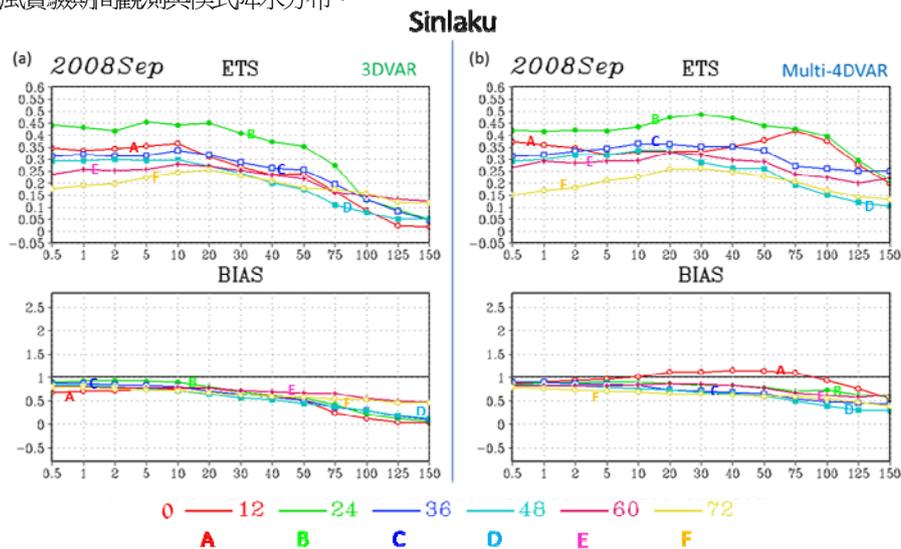


圖 6. Sinlaku 颱風降水校驗結果，(a)3DVAR，(b)多重增量4DVAR，橫軸為降水門檻值(mm)，縱軸為ETS得分值與偏離值。A、B、C、D、E、F分別為0~12小時、12~24小時、24~36小時、36~48小時、48~60小時、60~72小時之累積降水。