

调整方法反演大气温度廓线的比较研究

黎光清 董超华

(国家气象局卫星气象中心)

提 要

本文定量地分析了一个改进的有偏估计调整算法的特性,并对此法和流行的 Тихонов-Twomey 调整算法的反演结果作了对比研究,证明前者的反演精度和对测值误差的适应能力均优于后者。

一、引 言

从空间间接遥测地球大气参数的反演方程是典型的非适定问题,有关非适定问题的概念已在《非适定问题解》^[1]英译本译者序言中讲得十分深透了。

随着电脑、对地观测卫星技术以及定量分子光谱和大气辐射理论的迅速发展,从六十年代初以来,发现有越来越多的应用物理和工程技术问题不满足 Hadamard 经典提法。例如,有很多实际问题(包括数值预报)在对测值不完全了解时,也要求确定问题的“效应”(即问题的解),甚至有的问题,例如大气间接遥测反演还试图探索产生“效应”的原因,即由一组选定的光谱辐射测值反演大气参数的空间物理结构。

由于反演问题的非适定性,迄今尚有大量物理数学问题有待解决。本文的目的拟进一步估计此算法的精度,并将它和广泛流行的 Тихонов-Twomey 调整方法作对比分析。

二、改进的 Bayes 估计调整算法

原则上,根据提出的某一非适定问题,为使其转化为适定问题,可以按数学问题的物理性质,使用不同的限制算法把问题适定化。一般称此对待求的解的限制为调整(regularization)。目前流行的有 Тихонов-Twomey 调整和估计调整。

在对反演方程实行离散化的同时对测值引入随机误差概念,可以确立下列的估计模式:

$$R^{m,1} = A^{m,n} b^{n,1} + \varepsilon^{m,1} \quad (1)$$

式中上标 $m, 1; n, 1; m, n$ 表示向量或矩阵的维数, R 是辐射测值, A 是权重函数, b 是待求参数, ε 是测值的随机噪声。

所谓 Bayes 算法就是通过待求参数向量 b 使概率密度 $f(R|b)$ 达到最大的估计。 $f(R|b)$ 和 $f(b|R)$ 通过下列 Bayes 公式与随机参数 $f(b)$ 建立联系,即

$$f(b|R) = \frac{f(R|b)f(b)}{f(R)} \quad (2)$$

在对方程 (1) 求估计解的过程中,我们使用了下列统计假定:

$$R = E\{R|b\} + \varepsilon \quad (3a)$$

$$\varepsilon = N(0, S_\varepsilon) \quad (3b)$$

$$b = N(\mu_b, S_b) \quad (3c)$$

其中

$$\mu_b = E\{b\}, S_b = E\{(b - \mu_b)(b - \mu_b)^t\}$$

$$0 = E\{\varepsilon\}, S_\varepsilon = E\{(\varepsilon - \mu_\varepsilon)(\varepsilon - \mu_\varepsilon)^t\}$$

以及

$$\varepsilon_A \equiv 0 \quad (3d)$$

$$\text{cov}(b, \varepsilon) = 0 \quad (3e)$$

式中 $E\{\cdot\}$ 表示随机变量的期望值, t 表示向量的转置。(3a) 表示估计模式 (1) 中的测值误差是可加的。在 (3b, c) 中假定 b 和 ε 都是正态分布。 S_b 和 S_ε 分别表示待求参数验前信息和测值误差的协方差矩阵。为简化反演的估计解还假定权重函数不含任何误差,此即 (3d) 式。实际上不含误差的核是不可能的,有关考虑权重函数误差对反演精度的影响的估计方法,我们将在另文讨论。

根据 (3c) 式完全可以确定待求参数 b 的密度函数 $f(b)^{[2]}$, 即

$$f(b) = (2\pi)^{-N/2} |S_b|^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} (b - \mu_b)^t S_b^{-1} (b - \mu_b) \right] \quad (4)$$

式中 N 表示待求参数的个数,因为 $f(R)$ 不是待求参数 b 的函数,因而不需确定其概率密度。

如果在 (2) 式中不考虑验前信息,就可将 $f(R|b)$ 确定为最大似然的概率密度,即

$$f(R|b) = (2\pi)^{-M/2} |S_\varepsilon| \exp \left[-\frac{1}{2} (R - Ab)^t S_\varepsilon^{-1} (R - Ab) \right] \quad (5)$$

式中 M 表示气象卫星的探测通道数。因为按 Bayes 公式所确定的 $f(b|R)$ 的最大值和取其自然对数所得到的极大值相同,因此

$$L_s[f(b|R)] = -\frac{1}{2} [(M + N)L_s 2\pi + L_n |S_\varepsilon| + L_n |S_b| + S] \quad (6)$$

式中

$$S = (R - Ab)^t S_\varepsilon^{-1} (R - Ab) + (b - \mu_b)^t S_b^{-1} (b - \mu_b) \quad (7)$$

由于拟估计的参数为 b 而不是 S_ε , 因而对 $f(b|R)$ 求极大,可以通过求 S 的极小实现。将 (7) 式展开,有

$$S = R^t S_\varepsilon^{-1} R - R^t S_\varepsilon^{-1} Ab - b^t A^t S_\varepsilon^{-1} R + b^t A^t S_\varepsilon^{-1} Ab \\ + b^t S_b^{-1} b - b^t S_b^{-1} \mu_b - \mu_b^t S_b^{-1} b + \mu_b^t S_b^{-1} \mu_b \quad (8)$$

继而按 b 求 S 的极小, 并定义 b_1 为待求参数 b 的最大验后估计量, 有

$$\nabla_b S = -A'S_b^{-1}R + A'S_b^{-1}Ab_1 + S_b^{-1}b_1 - S_b^{-1}\mu_b = 0 \quad (9)$$

为了有可能更充分地使用不同形式的验前信息, 再对 (9) 式作一定运算, 得:

$$b_1 = \mu_b + D_1 A'S_b^{-1}(R - A\mu_b) \quad (10)$$

$$D_1 = (A'S_b^{-1}A + S_b^{-1})^{-1} \quad (11)$$

这就是我们设计的改进的有偏估计算法, 或改进的 Bayes 算法, 以下简称 A 法。此法的特点之一是通过 (10) 式中右端第二项 (即所谓的有效信息项) 对待估参数的验前统计平均值进行订正, 直接给待估参数提供新的信息。它的第二个特点表现在按所用的统计假定, 可以证明使用 (10) 式得到 b_1 的期望值为

$$E\{b_1\} = \mu_b \quad (12)$$

而不是待求的参数 b , 由估计理论可知 b_1 是有偏估计, 并已证明在线性估计模式中设计待估参数的有偏估计量, 可以改进无偏估计, 得到更小的均方误差^[3]。它的第三个特点还表现在, 由于这个算法比较合理地考虑了验前信息的结构, 因而不同于当前反演界所采用的估计算法^[4-6], 实际上由 (10)、(11) 式组成的估计算法是对 Тихонов-Twomey 算法的改进。在本文中还将通过对两法的精度分析证明这一点。

三、Тихонов-Twomey 调整算法

为了将方程 (1) 的一类非适定问题适定化, 可以引入调整算子对待求的解加上一个限制, 克服计算不稳定的困难。所谓 Тихонов-Twomey 调整, 实际上就是把直接求解方程 (1) 的问题转化成在 $\|Lb\|^2 = \text{const}$ 的限制条件下求二次范数 $\|Ab - R\|^2$ 的极小化问题, 其中 L 是拟选定的线性算子。因此有

$$\text{ArgMin}_b \{ \|Ab - R\|^2 + \mu^2 \|Lb\|^2 \} \quad (13)$$

这里 $\text{ArgMin}_b F(b)$ 表示函数 $F(b)$ 的极小点, μ^2 起着 Lagrange 乘子的作用。如果将 L 取成恒同算子, 则 $\|\mu^2\|$ 具有特定值。通过 (13) 式可以求得在此调整为极小概念下的近似解, 即

$$b_2 = D_2 A'R \quad (14)$$

$$D_2 = (A'A + \alpha H)^{-1} \quad (15)$$

这就是所谓的 Тихонов-Twomey 调整算法, 以下简称 B 法。根据我们的数值试验, 算子 H 的形式可以取成对称矩阵、单位矩阵、甚至非对称矩阵形式, 关键是只要适当选择 α 均可得到相当精度的近似解。

四、 A 、 B 两法的统一性

我们知道, 估计解的变化是随选定的统计假定而定, 因此估计解之间的联系是通过适当改变统计假定直接实现的。例如对 A 法而论, 如果使用的验前信息协方差矩阵 S_b 很坏, 则它就有相当大的对角元。因此 $S_b^{-1} \approx 0$, 随之由 (10) 式确定的 b_1 自然退化成最大

似然估计 b_{ML} , 即

$$b_{ML} = (A'S_0^{-1}A)^{-1}A'S_0^{-1}R \quad (16)$$

再者如果统计假定 (3) 式都成立, 并取 $S_0 = \sigma_0^2 I$, 则有

$$b_1 = b_{ML} = b_{LS} \quad (17)$$

式中 b_{LS} 表示最小二乘估计。特别是如果在 (13) 式中假定 $\mu_0 = 0$, $S_0^{-1} = 0$, 并用单位矩阵 I 代替 S_0^{-1} , 还可直接从 (10) 式退化成 Тихонов-Twomey 调整 (14) 式、最小信息解^[7]或山脊 (Ridge) 回归^[8]。

由此可知, 在一定条件下 A 、 B 两法也是相互联系的, 通过改变统计假定将二者统一起来。因此, 从统一观点看 A 法是最普遍的估计方法。同时, B 法、最小信息法和 Ridge 回归在算法上也具有等效性。

五、精度分析

反演温度廓线的精度取决于很多因素, 诸如光谱带的选择、谱通道的位置和宽度 (谱分辨率)、谱线强度测值的精度、透过率算法精度、温度层结验前信息统计以及反演算法精度等。本文只分析反演算法和辐射测值误差对反演廓线精度的影响。

通过对调整解和真解之偏差的频散矩阵分析, 可以对反演算法精度作出估计。定义调整解 b_i (取下标 $i = 1$ 为 A 法的解, $i = 2$ 为 B 法的解) 和真解 b 的偏差为 $\delta_i b$, 即

$$\delta_i b = b_i - b = P_i b + Q_i \varepsilon \quad (18)$$

据此, 使用调整解 (10)、(14), 当 $i = 1, 2$, 则分别有

$$P_1 = D_1 A' S_0^{-1} A - I \quad (19)$$

$$Q_1 = D_1 A' S_0^{-1} \quad (20)$$

相应地

$$P_2 = D_2 A' A - I \quad (21)$$

$$Q_2 = D_2 A' \quad (22)$$

根据向量 b 和 ε 的随机性质, 并假定二者之间不相关, 作一定的统计运算, 可以导出表示解的偏差的频散矩阵测度

$$d_i = P_i S_b P_i' + Q_i S_\varepsilon Q_i' \quad (23)$$

其中下标 $i = 1$ 或 2 , 分别表示 A 法和 B 法的频散矩阵。式中第一项依赖于反演廓线的物理结构, 第二项表示辐射测值误差对反演精度的作用。

比较分析表 1. A 和 1. B 中各项之值可以看出, 两法所含的 $PS_b P'$ 值对每层等压面上的反演误差均给以主要的影响。一般 $PS_b P'$ 的绝对值比 $QS_\varepsilon Q'$ 大一个数量级以上, 这一项反映出初始积分算子的权重函数和验前信息的主要贡献。除个别大气层外方法 A 的频散总偏差 d_1 明显地小于 d_2 , 因而 A 法的精度高于 B 法。这一点还可以通过比较 A 法和 B 法的反演廓线和实况偏差得到验证。同时表 1 示出, 随着测值误差的增大两法的反演精度也随之下降, 但 B 法比 A 法突出。

在图 1 中示出 A 、 B 两法解的偏差平均频散度对辐射测值误差的依赖性, 其中

表 1.A 两种方法反演温度在不同气压层上的频数估计 ($\epsilon = 0.1 \text{ erg S}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ St}^{-1} (\text{cm}^{-1})^{-1}$)

标准气压层(hPa)		1000	850	700	500	400	300	250	200	150	100	70	50	30	20	10
方法	改进的有偏估计调整(A法)	0.1304 2.5221 2.6525	0.1359 3.3577 3.4936	0.0236 0.4038 0.4274	0.0596 0.5394 0.599	0.0194 0.0787 0.0982	0.0406 0.0631 0.1037	0.0444 0.1066 0.151	0.0258 0.0802 0.106	0.1635 0.3069 0.4704	0.0771 0.462 0.5391	0.0376 0.115 0.1527	0.0047 0.1349 0.1396	0.0195 0.0693 0.0889	0.039 0.1015 0.1405	0.0582 0.0003 0.0585
	Тихонов -Twomey 调整(B法)	0.0679 2.4513 2.5192	0.0092 3.2925 3.3017	0.0511 2.4831 2.5342	0.0335 0.533 0.5665	0.024 0.5215 0.5455	0.0278 0.5925 0.6203	0.0215 0.0341 0.0556	0.0226 0.183 0.2056	0.0437 0.5544 0.5981	0.0251 0.8732 0.8983	0.0355 0.5157 0.5511	0.02 0.0464 0.0664	0.0342 0.1638 0.1981	0.0189 0.4301 0.449	0.0427 0.1375 0.1802

表 1.B 两种方法反演温度在不同气压层上的频数估计 ($\epsilon = 0.5 \text{ erg S}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ St}^{-1} (\text{cm}^{-1})^{-1}$)

标准气压层(hPa)		1000	850	700	500	400	300	250	200	150	100	70	50	30	20	10
方法	改进的有偏估计调整(A法)	0.1143 5.0202 5.1345	0.1029 3.364 3.4669	0.035 0.3041 0.3391	0.0669 0.6149 0.6818	0.0554 0.3192 0.3746	0.0191 0.0688 0.088	0.0457 0.0049 0.0505	0.0562 0.044 0.1002	0.1171 0.676 0.7931	0.1722 0.844 1.0162	0.0319 0.0864 0.1183	0.0368 0.0609 0.0978	0.0812 0.0359 0.1171	0.0631 0.4101 0.4732	0.3116 0.2316 0.5432
	Тихонов -Twomey 调整(B法)	0.0709 1.0610 1.1319	0.0243 2.6497 2.674	0.0179 3.685 3.7029	0.0406 2.0805 2.121	0.037 0.5021 0.5391	0.0232 0.5731 0.5964	0.0214 0.0715 0.0929	0.0271 0.1609 0.188	0.0387 0.7908 0.8295	0.0459 1.093 1.1389	0.0337 0.4571 0.4908	0.0415 0.0243 0.0657	0.0519 0.1782 0.2301	0.0231 0.5942 0.6173	0.1145 0.6337 0.7483

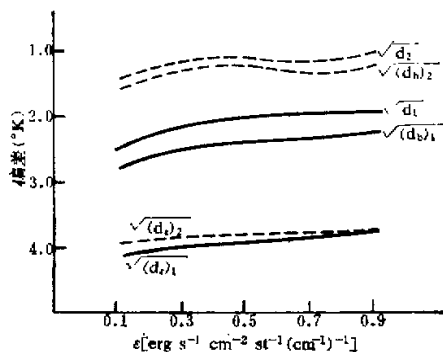


图 1 A法(实线)、B法(虚线)的频散度对测值误差的依赖性

$$(d_b)_i = \frac{1}{14} t_r(PS_b P^t)_i \quad (24a)$$

$$(d_e)_i = \frac{1}{14} t_r(QS_e Q^t)_i \quad (24b)$$

$$\bar{d}_i = (d_b)_i + (d_e)_i \quad (24c)$$

描写温度廓线反演的平均精度, 式中 t_r 表示矩阵的迹, $i = 1$ 或 2 分别表示 A 法或 B 法的估计量。清楚看出随测值误差增大, 两法的频散度偏差也随之增大。由于 $(d_b)_2 > (d_b)_1$, $(d_e)_1 \approx (d_e)_2$, 因此 $\bar{d}_2 > \bar{d}_1$, 自然 A 法的精度高于 B 法。

从图 2 A 和 2 B 进而看出 A 法的精度明显地优于 B 法, 特别是 A 法对测值误差增大

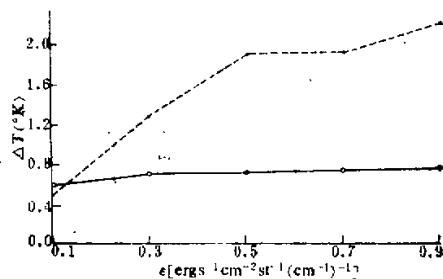


图 2 A 1000hPa 层上 A、B 两法反演温度偏差对测值误差的依赖性

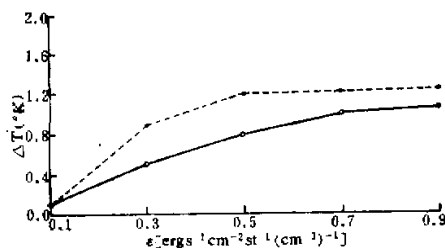


图 2 B 100hPa 层上 A、B 两法反演温度偏差对测值误差的依赖性

的适应能力也比 B 法强, 因此 A 法的稳定性超过 B 法。

通过以上分析可知当前广泛流行的 Тихонов-Twomey 调整法, 在大气间接遥测反演中的应用并不完全成功, 其主要原因之一就在于 B 法不太适于求解随机性强的一类非适应问题, 但它独立于验前统计的重要特性仍具有根本重要意义。

参 考 文 献

- [1] Tikhonov, A. N., and Arsenin, V. Y., 1977, Solution of ill-posed Problems.
- [2] Priestley, M. B., 1981, Spectral analysis and time Series, Vol. 1: Univariate Series.
- [3] 黎光清, 1984, 地球大气红外间接遥测方程的估计解和验前限制, 大气科学, Vol. 8, No.4.
- [4] Fleming, H. E., and Smith, W. L., 1972, Inversion techniques for remote Sensing atmospheric temperature profiles, presented at the 5th Symposium on temperature.
- [5] Турчин, В. Ф., Козлов, В. П., И Малкевич М. С., 1970, Успехи Физич. Наук, Т. 102, Вып.3.
- [6] 曾庆存, 1974, 大气红外遥测原理, 科学出版社.
- [7] Foster, M., 1961, J. Industr. and Appl. Mathematics, 9, 387.
- [8] Hoerl, A. E., and Kennard, R. W., 1970, Technometrics, 12, 55.

USING REGULARIZATION METHODS FOR RETRIEVING ATMOSPHERIC TEMPERATURE PROFILES: A COMPARATIVE STUDY

Li Guangqing Dong Chaohua

(Satellite Meteorology Center, State Meteorological Administration)

Abstract

In this paper a biased estimation regularizing algorithm is analysed, and the quantitative comparison between the retrievals of the algorithm and current Tihonov-Twomey regularization algorithm is made. We come to the conclusion that the former algorithm is much better than the latter for the resolution in retrievals and stability to measurement errors.