第12卷 第1期
1988年3月

大 气 科 学
SCIENTIA ATMOSPHERICA SINICA

Vol. 12, No. 1
Mar., 1988

应用 Bayes 算法估计核函数误差对大气温度廓线反演的影响

黎光清　董超华
（国家气象局卫星气象中心）

提　要

核函数的误差(简称 KFE) 是引起反演方程数值解不稳定的根本原因之一，也是物理反演法用于 TOVS 资料业务处理的基本障碍．本文基于 Bayes 算法和考虑 KFE 的适当统计假定，导出了估计 KFE 效应的方法．使用 NOAA-7 气象卫星测值，依据 NESDIS 透过率资料算出的核函数，以及两年二月气候资料计算的协方差矩阵等数据，按此方法估计了 KFE 效应对温度廓线反演精度的影响，并对 KFE 引起反演解中的系统偏差和随机误差分量也作了定量计算，揭示出了系统偏差在非适定问题解中的主导作用．

一、目　　的

有关大气间接遥测反演方法一般只讨论卫星测值误差对反演精度的影响，但对触发反演解的非适定性的根本原因，即核函数误差或核函数的非确定性对反演解的作用还甚少了解．同时回归反演法的局限性在美国 NESDIS 业务反演中不断暴露，其中带根本性的问题是：用统计回归算法代替求解间接遥测方程(模式化的辐射传递方程)导致在回归解中不能反映大气温度层结的垂直分辨率[1]．此外，气候平均温度场和卫星辐射测值光谱性质之间的相关性的真实程度，几乎完全取决于对气候统计和卫星观测资料的合理时空匹配．由于不少地区基本没有常规气象观测资料，因此即使是对全球大尺度温度场而言也难于实现这样的同化，这也是间接遥感没有取得更大进展的重要原因之一．在业务统计回归反演精度进一步提高已十分困难的情况下，因此当前对着重改进间接遥感技术，提高垂直分辨率，改进透过率算法，以及发展物理反演方法等又在新的起点上受到人们的普遍重视[2,3]．

我们认为利用高分辨率多通道定量遥感和发展物理反演方法是提取气象信息的最佳途径．因此在当前透过率计算精度不高的状况下，实际上 KFE 已成为发展间接遥感和反演的基本障碍．然而若要将物理反演法代替回归法用于业务，似应把研究重点放在如何确切估计 KFE 对温度反演影响的问题上．但是，对这个问题的研究又必然会涉及到

1985年11月22日收到，1986年2月7日收到修改稿．

下列一些问题，诸如：KFE 效应的性质；KFE 和卫星辐射率测值误差之间的相互制约；KFE 和核函数宽度之间的依赖性；KFE 和平均辐射率之间的联系；能否通过反演消除 KFE 效应引起的系统偏差；卫星测值误差(简称 SME)、KFE、验前信息误差以及核函数宽度之间的联系；在间接遥测中可否合理选择 KFE 的容许误差的门阀值，以实现最佳遥测和反演系统的设计等。

二、KFE 的模拟模式

在模拟试验中的模式包含两个情况。其一是假定模式所含的核函数没有误差。在不丧失基本的真实性条件下，我们选用 NOAA-7 高分辨红外辐射计的第 2 到 8 通道(即 15 μmCO_2 带 6 个通道和 1 个窗区通道)，根据 Weinreb 等 (1981) 的透过率资料[4]分别计算了 $0.4cm^{-1}$(简称窄通道)和 $15cm^{-1}$(简称宽通道)的六个通道的核函数值，窗区通道的透过率也按 NESDIS 算法计算，以此建立十五层规范化大气层的核函数矩阵 ($\boldsymbol{A}$)。其二是相应地对无误差的核函数矩阵加上一个非常小的扰动量，构造一个含误差的核函数矩阵 ($\boldsymbol{A}+\boldsymbol{G}$)。为了检验 KFE 对估计解的影响，我们选用北京 1983—1984 年 2 月探空测温资料计算待估参数的验前信息协方差矩阵 $\boldsymbol{S}_b$，以及遵循统计假定的卫星测值误差矩阵 $\boldsymbol{S}_e$。

在此基础上设计的数值模拟模式，即对温度遥测方程实行线性化和数值求积后，将它离散化成下列的无 KFE 和含 KFE 的矩阵向量方程式：

$$\boldsymbol{A}b = R + e \tag{1}$$

$$(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{G})b = R + e \tag{2}$$

式中 $\boldsymbol{A}$ 是 $(m、n)$ 维核函数矩阵，m 表示选用的探测通道数，取 $m=1,2,\cdots,7$；n 表示数值求积离散化所选定的规范化的大气层数，取 $n=1,2,\cdots,15$。向量 b、R 和 e 分别表示待估计的 Planck 函数廓线、卫星辐射率测值及其测值误差。$\boldsymbol{A}+\boldsymbol{G}$ 表示含 KFE 的核函数矩阵算子。

三、KFE 效应的估计方法

在我们的工作中曾经讨论过反演方法的选择问题。由于 Bayes 有偏估计算法的某些优点[5]，为了估计 KFE 对反演解的影响，我们选用核函数误差不为零 ($e_A\neq 0$) 的统计假定代替核函数无误差 ($e_A=0$) 的统计假定按 Bayes 算法求解(2)式。

有关方程(1)的 Bayes 估计解已有现成算法，根据估计理论，在对方程(2)求估计解的过程中我们使用了下列统计假定：

$$R = E\{R|b\} + e \tag{3a}$$

$$e = N(0, \boldsymbol{S}_e) \tag{3b}$$

$$b = N(\bar{b}, \boldsymbol{S}_b) \tag{3c}$$

其中

$$E\{b\} = \bar{b} \qquad E\{(b-\bar{b})(b-\bar{b})^t\} \equiv \boldsymbol{S}_b$$

$$E\{e\}=0 \qquad E\{(e-\bar{e})(e-\bar{e})^t\}\equiv \boldsymbol{S}_e$$

以及

$$e_A=\boldsymbol{G} \tag{3d}$$

$$\mathrm{cov}(b,e)=0 \tag{3e}$$

式中 $E\{\cdot\}$ 表示随机变量的期望值，t 表示转置. (3a) 表示估计模式中的测值误差是可加的. 在 (3b, 3c) 中假定 e 和 b 都服从正态分布. $\boldsymbol{S}_b$ 和 $\boldsymbol{S}_e$ 分别表示待求参数验前信息和卫星测值误差的协方差矩阵，同时还假定 $E\{b\}=\bar{b}$ 和 $E\{e\}=0$. 为了实现对 KFE 效应的估计，在模式(2)中我们有目的地使用了统计假定 (3d). 和一般的 Bayes 估计解相比，这是引入的唯一不同的一个重要统计假定，它表示一个含 KFE 的矩阵算子.

因为待求参数 b 的验后概率密度 $P(b|R)$ 是通过条件概率密度 $P(R|b)$ 和验前概率密度 $P(b)$，按下式

$$P(b|R)=\mathrm{const}P(b)P(R|b) \tag{4}$$

导出的 Bayes 估计解. 简言之，由统计假定 (3c) 所确定的待估参数 b 的验前概率密度为:

$$P(b)=(2\pi)^{-N/2}|\boldsymbol{S}_b|^{-1/2}\exp\left[-\frac{1}{2}(b-\bar{b})^t\boldsymbol{S}_b^{-1}(b-\bar{b})\right] \tag{5}$$

由统计假定 (3a)、(3b) 所确定的条件概率密度的具体形式为:

$$P(R|b)=(2\pi)^{-M/2}|\boldsymbol{S}_e|^{-1/2}\exp\left\{-\frac{1}{2}[R-(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{G})b]^t\boldsymbol{S}_e^{-1}[R-(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{G})b]\right\} \tag{6}$$

对于大气参数间接遥感而论，上式中的 N、M 分别表示待求参数个数和卫星间接遥感所选定的探测通道数. 考虑 (5)、(6) 式对方程 (4) 取自然对数运算后所得的表达式中含 Bayes 泛函 $\boldsymbol{S}(b)$，其具体形式为:

$$\boldsymbol{S}(b)=(R-(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{G})b)^t\boldsymbol{S}_e^{-1}(R-(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{G})b)+(b-\bar{b})^t\boldsymbol{S}_b^{-1}(b-\bar{b})$$

因为待求解的参数为 b 而不是 $\boldsymbol{S}_e$，所以对 $P(b|R)$ 求极大，可以直接对 $\boldsymbol{S}(b)$ 求极小得到，即

$$\begin{aligned}\partial\boldsymbol{S}(b)/\partial b=2(&-\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{S}_e^{-1}R+\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{S}_e^{-1}\boldsymbol{A}\hat{b}-\boldsymbol{S}_b^{-1}\bar{b}+\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{S}_e^{-1}\boldsymbol{G}\hat{b}\\&+\boldsymbol{G}^t\boldsymbol{S}_e^{-1}\boldsymbol{A}\hat{b}+\boldsymbol{S}_b^{-1}\hat{b}+\boldsymbol{G}^t\boldsymbol{S}_e^{-1}\boldsymbol{G}\hat{b}-\boldsymbol{G}^t\boldsymbol{S}_e^{-1}R)=0\end{aligned} \tag{7}$$

整理后，有

$$\tilde{b}_1=D_1^*(\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{S}_e^{-1}R+\boldsymbol{S}_b^{-1}\bar{b}+\boldsymbol{G}^t\boldsymbol{S}_e^{-1}R) \tag{8}$$

$$\boldsymbol{D}_1^*=(\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{S}_e^{-1}\boldsymbol{A}+2\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{S}_e^{-1}\boldsymbol{G}+\boldsymbol{G}^t\boldsymbol{S}_e^{-1}\boldsymbol{G}+\boldsymbol{S}_b^{-1})^{-1} \tag{9}$$

此即我们设计的估计 KFE 效应的 Bayes 算法，式中 $\tilde{b}_1$ 表示考虑了 KFE 效应的估计解，而 $\boldsymbol{D}_1^*$ 称为含 KFE 的估计算子协方差矩阵. 显然，如果取 $\boldsymbol{G}\equiv 0$，则(8)和(9)式相应地直接退化成 Bayes 最大验后估计的原来形式:

$$\hat{b}_1=\boldsymbol{D}_1(\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{S}_e^{-1}R+\boldsymbol{S}_b^{-1}\bar{b}) \tag{10}$$

$$\boldsymbol{D}_1=(\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{S}_e^{-1}\boldsymbol{A}+\boldsymbol{S}_b^{-1})^{-1} \tag{11}$$

其中 $\hat{b}_1$ 表示无 KFE 效应的估计解，相应的 $\boldsymbol{D}_1$ 是估计算子协方差阵的逆或称为作用函数. 比较分析 (8)、(9) 和 (10)、(11) 诸式看出，在 (8) 和 (9) 式出现的三个新项，其中 $\boldsymbol{G}^t\boldsymbol{S}_e^{-1}R$ 表示 KFE 测值误差协方差矩阵以及卫星辐射率测值的相互作用效应；$\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{S}_e^{-1}\boldsymbol{G}$ 表示核函数算子、测值误差协方差矩阵、以及 KFE 的相互作用效应；$\boldsymbol{G}^t\boldsymbol{S}_e^{-1}\boldsymbol{G}$ 表示两类

误差的二次型．为简便，我们分别称两个不同的 Bayes 估计算法（8）和（10）式为 TPBD1 和 TPRD1．

四、结果分析

为了定量分析 KFE 效应的性质，通过求（10）和（8）式之差，其结果自然直接反映出 KFE 效应在估计解 TPBD1 中所引起的严重不稳定性，基本是由于 KFE 效应在估计解中所产生的系统偏差决定的．比较 TPRD1 和 TPBD1，有

$$\hat{b}_1-\tilde{b}_1=\boldsymbol{D}_{11}(R-\boldsymbol{A}\bar{b})-\boldsymbol{D}_{11}^*(R-\boldsymbol{A}\bar{b}-\Delta R) \tag{12}$$

式中

$$\boldsymbol{D}_{11}=\boldsymbol{D}_1\boldsymbol{A}'\boldsymbol{S}_c^{-1} \qquad \boldsymbol{D}_{11}^*=\boldsymbol{D}_1^*(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{G})'\boldsymbol{S}_c^{-1}$$

根据 Fleming 等（1983）[6]，$\Delta R=\boldsymbol{G}\bar{b}$，表示 KFE 效应在平均辐射场中引起的偏差可以通过扰动量 $\boldsymbol{G}$ 和平均的 Planck 函数的乘积确定．因此可将上式改写成：

$$\hat{b}_1-\tilde{b}_1=\boldsymbol{D}_{11}(R-\boldsymbol{A}\bar{b})-\boldsymbol{D}_{11}^*(R-\boldsymbol{A}\bar{b})+\boldsymbol{D}_{11}^*\boldsymbol{G}\bar{b} \tag{13}$$

很明显上式中的第一项 $\boldsymbol{D}_{11}(R-\boldsymbol{A}\bar{b})$ 表示无 KFE 的 Bayes 解，第二项 $\boldsymbol{D}_{11}^*(R-\boldsymbol{A}\bar{b})$ 表示由 KFE 在反演解中引起的主随机误差成分，而第三项 $\boldsymbol{D}_{11}^*\boldsymbol{G}\bar{b}$ 表示由 KFE 在反演解中引起的主系统偏差．

我们使用 NOAA-7 卫星 1984 年 2 月 27 日 6 时 40 分经过北京上空的晴空辐射率测值和在第二节中提到的数据按（8）、（9）式计算 KFE 对反演的影响，计算的部分结果列于表 1，分析表中数据的不同特性可以得出下列几点：

（1）从 DR1 偏差值看出，除个别气层外，使用窄通道（$0.4\mathrm{cm}^{-1}$）的反演精度明显地优于宽通道（$15\mathrm{cm}^{-1}$），而且随着通道变宽致使最大偏差变大，从而在个别气层上不稳定解加剧．这表明采用窄通道权重函数能得到更多信息．

（2）对比分析 DR1 和 BT1，由于 KFE 的原因，BT1 的偏差值比 DR1 明显地成倍增大，这充分反映出求解非适定问题完全解的基本特征．但是随着探测通道增宽，除 700 hPa 以下四个层次外，在宽通道条件下由 KFE 效应引起的反演偏差比在窄通道条件下的偏差反而有所缓和或减小，比较分析窄、宽通道的 DB1 也可看出这一点．含 KFE 的宽通道核函数为什么比相应的窄通道核函数的反演误差还小的道理，目前我们还难于作出明确的解释．这可能是因为选用的一组宽通道和与之相对应的一组核函数峰值的半宽区就越宽阔，因而核函数之间的相互重叠就越突出，从而促使反演廓线的平滑得到加强，随之削弱 KFE 效应．正因为如此，为此若希望改善间接遥测的垂直分辨率和提高探测精度，就应在采用窄通技术的同时，选用更精确的透过率（其 *rms* 误差应比 0.01 更小），否则不可能得到更佳的反演廓线．另一方面从（8）式可知，在反演过程中 KFE 效应涉及的因素复杂，对这个问题还待进一步探索．

分析由 KFE 引起反演误差的不同性质是揭示 KFE 对反演影响的关键因素．根据（13）式我们计算了 KFE 引起的系统偏差（BB1）和随机误差（DD1），并分别将窄、宽通道核函数的两类反演误差列于表 2．分析表 2 中的数据得出下列几点：

（3）比较两类通道的 BB1 看出，除较低层大气外，特别是窄通道在高层的系统偏差

表1 KFE 对温度廓线反演精度影响的估计

$e = 0.5 \mathrm{mW} \cdot \mathrm{m}^{-2} \cdot \mathrm{Sr}^{-1} \cdot \mathrm{cm}$, $G = 0.001$

温度廓线值(°K) \ $P_{(hPa)}$		NOAA-7 HIRS-2 7 通道中心波数位置 (cm⁻¹)														
		679		691		704		716		732		748		900		
反演方法	$\frac{W1}{W2}$	1000	920	850	700	500	400	300	250	200	150	100	70	50	30	20
TPRD1		276.8	268.5	256.6	243.1	232.9	224.9	226.3	225.8	223.4	220.1	217.1	223.2	225.9	225.5	227.9
		276.4	267.7	262.7	245.3	234.7	225.3	225.4	224.9	222.2	218.9	216.2	223.7	226.0	224.4	229.9
TPBD1		285.9	266.5	255.1	242.9	262.4	273.6	281.4	255.4	229.6	220.1	218.4	241.4	273.4	286.5	273.4
		287.3	270.0	257.4	244.7	246.6	260.9	263.9	251.9	235.3	224.4	220.8	226.9	253.4	268.3	261.8
TK		275.5	266.4	253.2	242.6	232.5	227.6	226.0	224.7	223.7	223.1	222.8	223.2	223.5	225.0	229.2
偏差值(°K)	DR1	1.3	2.1	3.5	0.5	0.3	−2.7	0.3	1.1	−0.4	−3.0	−5.8	−0.0	2.4	0.5	−1.3
		0.9	1.3	9.5	2.7	2.15	−2.3	−0.6	0.2	−1.5	−4.2	−6.6	0.4	2.5	−0.6	0.8
	BT1	10.4	0.1	1.9	0.3	29.9	46.0	55.4	30.7	5.9	−3.0	−4.2	18.2	49.9	61.5	44.2
		11.8	3.6	4.2	2.1	14.1	33.3	37.9	27.2	11.6	1.3	−2.0	3.7	29.9	43.3	32.6
	DB1	−9.1	2.0	1.5	0.2	−29.5	−48.7	−55.2	−29.5	−6.2	−0.1	−1.3	−18.2	−47.5	−61.0	−45.5
		−8.5	−1.1	5.7	0.8	−9.9	−30.4	−32.7	−22.4	−10.7	−9.5	−4.2	−2.0	−23.1	−38.0	−26.5

表中 DR1 = TPRD1 − TK, BT1 = TPBD1 − TK, DB1 = TPRD1 − TPBD1; $W1$、$W2$ 分别表示窄的和宽的探测通道，其中 $W1 = 0.4 \mathrm{cm}^{-1}$, $W2 = 15 \mathrm{cm}^{-1}$; TK 表示探空观测的温度廓线。

表 2　KFE 引起反演系统偏差和随机误差估计

$\varepsilon = 0.5\mathrm{mW} \cdot \mathrm{m}^{-2} \cdot \mathrm{Sr}^{-1} \cdot \mathrm{cm}, G = 0.001$

系统偏差和随机误差 \ $P_{(\mathrm{hPa})}$		NOAA-7 HIRS-2 7 通道中心波数(cm^{-1})														
			679		619		704		716		732		748		900	
误差类型	$\frac{W1}{W2}$	1000	920	850	700	500	400	300	250	200	150	100	70	50	30	20
BB1		23.7	6.7	1.9	0.7	37.3	65.4	81.0	41.1	10.3	3.0	0.9	24.5	64.6	84.7	63.1
		26.1	12.0	5.1	2.9	16.7	47.3	54.6	36.6	16.6	7.2	3.3	8.7	36.6	56.3	46.2
DD1		8.0	8.9	3.7	0.8	0.2	2.8	6.8	5.1	3.4	2.6	0.4	4.5	3.5	1.6	3.3
		7.4	7.8	11.6	3.3	2.1	3.2	6.0	4.3	2.4	1.6	1.1	4.9	3.6	0.6	5.4
TBBD1		31.7	15.6	5.6	1.5	37.5	68.2	87.8	46.2	13.7	5.6	1.3	29.0	68.1	86.3	66.4
		33.5	19.8	16.7	6.2	18.8	50.5	60.6	40.9	39.0	8.8	4.4	13.6	40.2	56.9	51.6
$\frac{\mathrm{BB1}}{\mathrm{TBBD1}}$ (%)		74.8	43.0	33.9	46.7	99.5	95.9	92.3	89.6	75.2	53.6	69.2	84.5	94.5	98.2	95.0
		77.9	60.6	30.5	46.8	88.8	93.7	90.1	89.5	87.4	81.8	75.0	64.0	91.0	99.0	89.5
$\frac{\mathrm{DD1}}{\mathrm{TBBD1}}$ (%)		25.2	57.0	66.1	53.3	0.5	4.1	7.7	11.0	24.8	46.4	30.8	15.5	5.5	1.8	5.0
		22.1	39.4	69.5	55.2	11.2	6.3	9.9	10.5	12.6	18.2	25.0	36.0	9.0	1.0	10.5

明显地大于宽通道之值.这里有一个可能是,即便存在 KFE，但如果选用适当的宽通道，KFE 效应在反演中产生的系统偏差也将小于相应的窄通道之值.

(4) 分析 DD1 两类探测通道的随机误差值可知二者相差不大. 即随着核函数宽度增宽,由 KFE 引起反演解的随机误差没有明显增大. 考虑到对两类通道的 BB1 误差性质分析，增宽谱通道对系统偏差的发展有明显的抑制作用. 由此可知 KFE 对估计解的作用主要表现在系统偏差方面,这就是KFE 的基本性质. 因此,如果可以消除系统偏差,则有可能将物理反演法投入业务反演使用,有关这个问题拟在另文讨论.

(5) 分析 BB1 和 DD1 在窄、宽两类通道中所占 TBBD1 的概率,在窄通道核函数条件下 BB1 占 TBBD1 的 80%，DD1 占 20%;在宽通道核函数条件下也类似. 由此可知,无论在窄或宽的通道条件下,由 KFE 引起的误差主要是以系统偏差 (*BB*1) 的形式传入估计解中,随之发生强烈的不稳定解.

参 考 文 献

[1] Uddstrom, M. J. and D. Q. Wark, 1985, *J. Clim and Appl. Meteor.*, 24(1).

[2] Susskind, J., J. Rosenfield and D. Reuter, 1983, *J. Geophys. Res.*, 88(C13).

[3] Chedin, A., N. A. Scott et al., 1984, The improved initialization inversion ("31") method: A high resolution physical method for temperature retrievals from the satellite of the TIROS-N Series, Conferrence on Satellite and Remote Sensing and applications, Clearwater Beach. Fla., June 25—29.

[4] Weinreb, M. P., H. E. Fleming, L. M. McMillin and A. C. Neuendorffer, 1981. Transmittances for the TIROS operational Vertical Sounder, NOAA Tech. Rep. NESS 85.

[5] 黎光清，1984，大气科学，8(4).

[6] Fleming, H. E., D. S. Crosby and A. C. Neuendorffer, 1983, Elimination of a major component in satellite temperature soundings, Fifth Conference on atmospheric radiation, oct. 31—4 November 1983, AMS.