

求解大气红外间接遥测反演问题的最佳途径*

黎光清

(国家气象局卫星气象中心)

本文根据遥测方程的非适定性,讨论了反演方法的选择问题。针对问题的特点,着重分析我们提出使用的最佳有偏估计算法。为检验此法的有效性,同时使用其它流行的估计方法作模拟比较试验。结果表明 TPRDI(和相应的 TPRD 4)具有 Bayes 估计解的最普遍性质,即不但满足可解性条件,而且比其它估计方法具有更高的精度。当然该法是否肯定,还有待卫星实测资料的反演检验。

1. 反演方法的选择问题

使用分离变量和数值求积技术可将大气温度遥测方程化成下列线性代数方程式组

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

式中 R 是 $(m \times 1)$ 维的辐射测值向量; A 是 $(m \times n)$ 维的权重函数矩阵; 而 $\epsilon^{(m \times 1)}$ 是 $(m \times 1)$ 维辐射测值误差向量。我们认为反演方程(1)的问题,实际上就是求解非适定问题。就大气温度间接遥测而论产生非适定的原因有三: 1. 待求的温度廓线 $T(P)$ 是 P 的连续函数,但是作为初值的一组辐射测值又仅是有限的离散样本。因此在确定 planck 函数的空间分布中对 P 的分层有任意性,从而引起解的非唯一性。2. 核函数对反演解有显著的变平作用。3. 测值中含有微小噪声通过反演运算可使误差无限扩大。其中反演解的多值性和不稳定性是遥测方程的根本物理数学性质。因此,在选择反演方法时首先就要注意这类问题的非适定性。我们选择估计方法求解方程(1)的根据也有三点: 1. 任何测值总是伴有误差,而且误差又总是随机性质的,通过对随机误差的处理引入概率概念,可以扩大可解域获得更多的信息。2. 考虑验前信息可将非适定问题转化成适定问题,随之对测值误差引起的计算不稳定可以通过估计调整加以限制,实现计算稳定化。3. 利用有偏估计改进无偏估计或用最佳的有偏估计改进一般的有偏估计,从而得到精度更高的温度廓线。本文的目的试图通过模拟数值比较试验,检验第三点论断。

2. 反演温度廓线的估计方法

为了探索求解大气热探测一类非适定问题的最佳途径。根据上节中的分析,在本节中拟简要介绍一个改进的有偏估计方法及其序贯估计,并结合另外两个流行的估计方法作些比较,以便了解它们之间的差别和联系。

1) 改进的最佳有偏估计方法

按估计理论,所谓最大验后估计,就是通过待估参数向量 b 使概率密度 $f(R|b)$ 达到

* 本文于 1982 年 12 月 5 日收到, 1983 年 7 月 13 日收到修改稿。

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

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

从上式出发, 在用 Bayes 分析对方程(1)求估计解的过程中, 我们首先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

$$\begin{aligned} E\{b\} &= \mu_b, \quad E\{(b - \mu_b)(b - \mu_b)'\} \equiv S_b \\ E\{\varepsilon\} &= 0, \quad E\{(\varepsilon - \mu_\varepsilon)(\varepsilon - \mu_\varepsilon)'\} \equiv S_\varepsilon \\ \varepsilon_A &= 0 \end{aligned} \quad (3d)$$

t 表示转置, 以及

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

式中 $E\{\cdot\}$ 表示随机变量的期望值。(3a) 表示估计模式中的测值误差是可加的。在(3b, 3c)中假定 b 和 ε 都是正态分布, 而 S_ε 和 S_b 分别表示测值误差和待求参数验前信息的协方差矩阵。为简化估计解, 我们还假定权重函数不含任何误差, 即(3d)。(3e) 表示 b 和 ε 之间的协方差无关。在另文^[1]中已对所用上述假定作过验证。

从(2)式出发, 经过一定统计运算, 最后得

$$\hat{b}_1 = \mu_b + D_1 A' S_\varepsilon^{-1} (R - A \mu_b) \quad (4)$$

$$D_1 = (A' S_\varepsilon^{-1} A + S_b^{-1})^{-1} \quad (5)$$

这就是我们提出使用的改进的有偏估计方法。其特点之一是通过(4)式右端第二项(即有效信息项)对待估参数的验前统计平均值 μ_b 进行订正, 直接给 \hat{b}_1 提供新的信息。第二个特点是根据所用的统计假定, 可以证明使用(4)式所得到 \hat{b}_1 的期望值为

$$E\{\hat{b}_1\} = \mu_b \quad (6)$$

而不是待求的参数 b , 由此可知 \hat{b}_1 是有偏估计。它的第三个特点是由于此算法较合理地考虑了验前信息的结构, 因而不同于当前流行的估计方法^[2,3,4]。实质上由(4)、(5)式组成的估计算法是对最小方差估计和岭回归(Ridge regression)的改进。因此我们称(4)、(5)式算法为改进的最佳有偏估计方法, 或简称 TPRD 1。

2) 最小方差估计方法

根据估计理论, 使用下列形式的无偏估计量 \hat{b}_2 代替风险函数 (Risk function) 极小估计

$$\hat{b}_2 = D^{(n \times m)} R^{(m \times 1)} \quad (7)$$

并按方差极小原理, 通过 D 使 $\text{Risk}(D)$ 达到极小, 有

$$\text{Risk}(D) = E\{(\hat{b}_2 - b)'(\hat{b}_2 - b)\} \quad (8)$$

将(7)式代入上式, 结合考虑一些适当的统计假定, 之后对 $\text{Risk}(D)$ 按 D 求极小, 得

$$\hat{b}_2 = S_b A' D_2 R \quad (9)$$

$$D_2 = (A S_b A' + S_\varepsilon)^{-1} \quad (10)$$

此即在反演中广泛采用的 Rodgers-Турчин 的最佳无偏估计方法, 简称 TPRD 2。

3) 序贯估计方法

我们根据估计加迭代的概念, 即在求得估计解后, 再使用迭代算法不断对估计值进行修正。在试验中直接用 TPRD 1 的 D_1 构造下列的序贯估计算法

$$b^{(n)}(T(P)) = b^{(n-1)}(T(P)) + D_1 \{ S_b^{-1} [b(\bar{T}(P)) - b^{(n-1)}(T_0(P))] + A' S_e^{-1} A [b(T(P)) - b^{(n-1)}(T_0(P))] \} \quad (11)$$

式中角标 n 表示迭代次数。当 $n=1$ 时可直接取解的 Planck 辐射值, 或取某一预报的 Planck 廓线 $b(T_0(P))$ 作为迭代的初值。同时根据平均温度 Planck 函数 $b(\bar{T}(P))$ 和观测的 Planck 函数 $b(T(P))$ 按 (11) 式算出 $b^{(1)}$, 之后用 $b^{(1)}(T(P))$ 代替原 $b^{(0)}$ 再算出 $b^{(2)}, \dots$ 。我们称此算法为 TPRD 4。

4) 岭回归估计^[5]

岭回归估计由下式确定

$$\hat{b}_5 = D_5 A' R \quad (12)$$

$$D_5 = (A' A + kI)^{-1} \quad (13)$$

此法在六十年代初提出得到广泛应用, 至今仍有发展。 \hat{b}_5 也是有偏估计量, 它和美国 NESS 业务反演所用的最信息估计方法相似, 在试验中简称为 TPRD 5。

因为估计解的变化是随选定的统计假定而定, 即估计解之间的内在联系是通过改变统计假定实现的。例如, 如果 S_b 很坏, 则它有相当大的对角元素。因此, $S_b^{-1} \approx 0$, 随之由 (4) 式所确定的 \hat{b}_1 自然退化成最大似然估计

$$\hat{b}_{ML} = (A' S A)^{-1} A' S_e^{-1} R \quad (14)$$

再退一步, 如果取 $S_e = \sigma_e^2 I$ (I 是单位矩阵), 还可得到最小二乘估计

$$\hat{b}_1 = \hat{b}_{ML} = \hat{b}_{LS} = (A' A)^{-1} A' R \quad (15)$$

特别是假定 $\mu_b = 0, S_b^{-1} = 0$, 并用单位矩阵代替 S_e^{-1} 也可直接从 (4) 式化为岭回归 (12) 式。由此可知, 所有不同的估计方法都是相互联系的, 通过统计假定将它们统一起来。因此, 从统一观点看 TPRD 1 是一个最普遍的最佳有偏估计方法。

3. 模拟数值试验结果

根据 NOAA-2 15 μm CO₂ 六通道的权重函数值^[6] 和不同形式的验前信息限制矩阵, 用估计解 (4)、(9)、(11) 和 (12) 求解大气遥测线性方程组 (1)。在计算中为构造模拟辐射值, 取测值误差 $\varepsilon = 0.125 \text{ erg/sec. cm. sr.}$, 和 $S_e = \sigma_e^2 I = 0.083 I$ 。

分析反演和实况的绝对偏差分布是相当直观的。图 1 示出 TPRD 1 (和 TPRD 4), TPRD 2, TPRD 5 六次反演和实况的温度绝对平均偏差廓线。从偏差分布的总趋势看, 四个方法的结果都是稳定的。特别是 TPRD 1 和 TPRD 4 (因二者的结果只在小数第二位后才有区别, 因此只示出 TPRD 1) 的平均偏差均在 0.5—1.2°C 之间。TPRD 5 的偏差约 0.7—2.5°C, 并且各层的偏差均大于其它方法。TPRD 2 的偏差界于二者之间。为了进一步分析解的精度, 我们示出表 1。从表 1 看出 TPRD 1 (和 TPRD 4) 的精度高于 TPRD 2, 更明显地优于 TPRD 5。各个不同的估计解均优于相应的非对称验前限制矩阵解。从表 1 还看出在 1000—850 mb 之间 TPRD 1, TPRD 2 的偏差约 1°C; 而 TPRD 5 约 2.0—

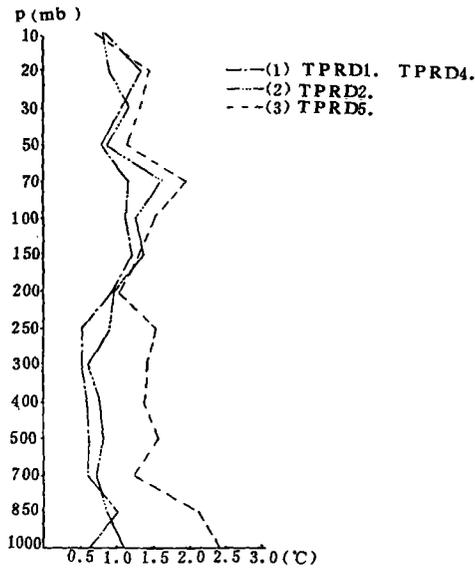


图1 反演和实况的绝对平均偏差

从图1,3还可看出虽然TPRD1,TPRD2和TPRD5均用月平均温度廓线作初值,但得到的结果仍有显著的差别,这表明不但有偏估计(TPRD1或TPRD4)可以改进无偏估计(TPRD2)。

2.5°C。另一个偏差较大区出现在200—70 mb。

从图1表1结合图2,3分析,可看出使用TPRD1(和TPRD4)所得的结果最佳,其主要原因是TPRD1的频散矩阵 D_1 所含对角元具有最小的方差和相应较小的协方差。TPRD1和TPRD4的区别有二:1.在TPRD4中除用平均廓线外,还用预报的任一温度廓线作为初值。而TPRD4只用平均温度廓线。试验表明预报廓线对反演精度的改善不太显著。2. TPRD4是在求出TPRD1的最佳解之后,再以此作初值继续进行十次迭代后得到的解。因为TPRD1已接近真解,故二者的差别很小。但如果辐射测值变化较大时,可能TPRD4优于TPRD1。从

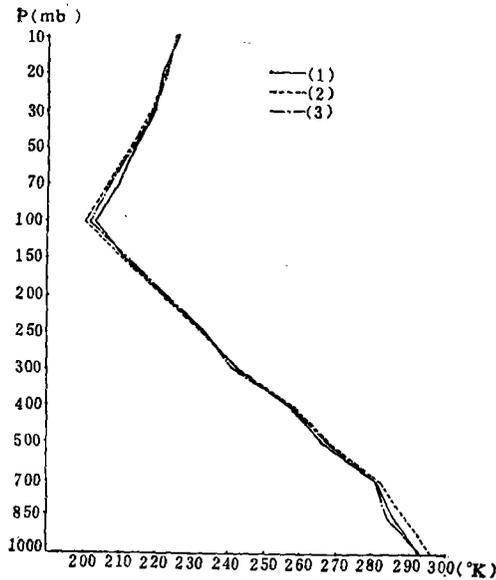


图2 六通道反演结果

- (1) 1979年9月2日20时杭州无线电探空
- (2) 1979年9月平均温度廓线
- (3) TPRD1反演

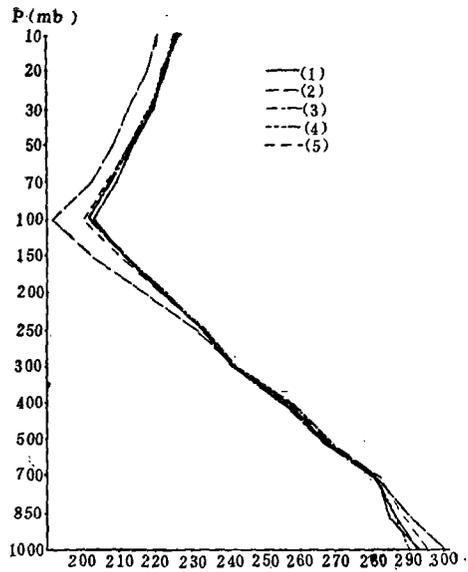


图3 六通道四个估计方法反演结果

- (1) 1979年9月2日20时杭州无线电探空
- (2) 预报的温度廓线
- (3) TPRD1, TPRD4反演
- (4) TPRD2反演
- (5) TPRD5反演

表 1 四个估计方法的温度绝对平均偏差

估计调整方法	绝对平均偏差 (°C)	V T P R 6 通道探测频率 (cm ⁻¹) 位置																整层总的绝对平均偏差(°C)
		P(mb)																
		1		2		3		4		5		6						
		747.4		725.35		708.25		694.95		672.40		667.50						
	S ₀ 类型	1000	850	700	500	400	300	250	200	150	100	70	50	30	20	10		
TPRD1	对 称	0.63	1.02	0.60	0.61	0.60	0.53	0.52	0.95	1.21	1.14	1.18	0.80	1.09	1.35	0.85	13.08	
	非对称	2.69	1.92	1.07	1.31	0.69	1.28	0.87	1.02	1.18	1.49	2.24	0.95	0.87	1.20	0.91	19.69	
TPRD2	对 称	1.10	0.88	0.71	0.82	0.77	0.61	0.92	0.98	1.37	1.29	1.68	0.88	1.16	0.92	0.86	14.95	
	非对称	2.84	1.74	1.03	1.51	1.11	1.06	6.30	1.62	5.36	2.30	2.86	3.52	2.75	2.46	2.91	39.37	
TPRD4	对 称	同 TPRD1 对称类型																
	非对称	同 TPRD1 非对称类型																
TPRD5	对 角	2.41	2.14	1.24	1.59	1.38	1.42	1.53	1.02	1.33	1.52	1.95	1.15	1.33	1.46	0.72	22.19	
	非对称	3.23	2.59	0.66	1.75	1.53	2.02	2.22	2.90	2.26	2.73	2.28	2.27	2.08	1.92	2.14	32.58	

而且不同精度的有偏估计(如 TPRD 1 和 TPRD 5)的反演结果的差别也相当显著。从而证实了在 1 节中所指出的第三点论断。

参 考 文 献

- [1] 黎光清、董超华, 地球大气温度层间接遥测中的非适定问题, 待发表。
- [2] 曾庆存, 大气红外遥测原理, 110—114, 科学出版社, 1974。
- [3] Rodgers, C. D., Retrieval atmospheric temperature and Composition from remote measurements of thermal radiation, *Rev. Geophys. Space phys.* 14, 609—624, 1976。
- [4] Twomey, S., Introduction to the mathematics of inversion in remote sensing and indirect measurements, Elsevier, New York, 1977。
- [5] Hoerl, A. E., and R. W. Kennard, Ridge regression, biased estimation for nonorthogonal problems, *Technometrics*, 12, 55—67, 1970。
- [6] McMillin, L. M., et al., Satellite infrared soundings from NOAA spacecraft, Tech. Rep. NESS 65, 112 pp., NOAA Dep. of Commer, Washington, D. C., 1973。