Argo 研究论文集

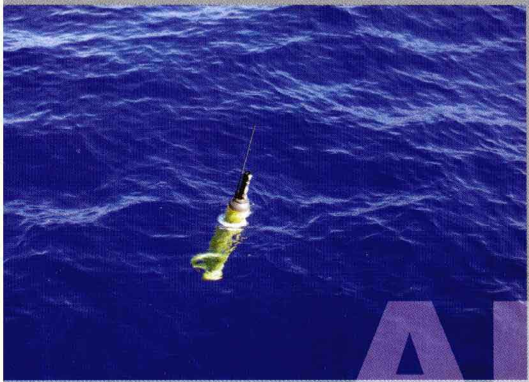
A COLLECTION OF ARGO RESEARCH PAPERS

陈大可 主编

海洋出版社

国家重点基础研究发展规划(973)项目
基于全球实时海洋观测计划(Argo)的上层海洋结构、变异及预测研究
项目编号(2007CB816000)

Argo 研究论文集



主编：陈大可

编委：王桂华　韩桂军　陈显尧
王　伟　马继瑞

ARGO 973

海洋出版社

2011年 · 北京

图书在版编目(CIP)数据

Argo 研究论文集 / 陈大可　主编.
—北京：海洋出版社，2011.10

ISBN 978-7-5027-8113-2

Ⅰ.①A…　Ⅱ.①陈…　Ⅲ.①海洋监测-文集
Ⅳ.①P715-53

中国版本图书馆CIP数据核字(2011)第196392号

责任编辑：白　燕　苏　勤
特约编辑：章向明　裴玉华
责任印制：刘志恒

海洋出版社 出版发行
http://www.oceanpress.com.cn
北京市海淀区大慧寺路8号　邮编：100081
北京画中画印刷有限公司印刷　新华书店经销
2011年10月第1版　2011年10月北京第1次印刷
开本：889mm×1194mm　1/16　印张：13
字数：220千字　定价：88.00元
发行部：010-62147016　邮购部：010-68038093　专著图书中心：010-62113110

序 言 PREFACE

海洋科学至今仍是一门以观测为主要手段的科学，海洋领域几乎所有重大科学进展都与观测手段的创新密切相关。而观测资料的匮乏，特别是大尺度、准同步、深层次、实时观测资料的缺少，一直是制约其发展的瓶颈。全球实时海洋观测网（Array for Real-time Geostrophic Oceanography，简称Argo）的建立使这一局面完全改观。作为一种新型的海洋观测系统，国际Argo计划于2000年正式启动，在2007年底完成了由3000多个自动剖面浮标组成的全球观测网，能快速、准确、大范围地收集上层海洋（0–2000米）的温、盐度剖面和浮标漂移轨迹资料。Argo观测网是目前唯一能立体观测全球上层海洋的实时观测系统，为研究海洋提供了前所未有的深广视角，可以说是海洋观测的一场划时代革命。

为了把握这一崭新的全球大洋观测系统带来的发展机遇，我国于2001年加入国际Argo计划，是该计划较早的成员国之一。在国家有关部门特别是科技部的支持下，我国的Argo工作在观测技术、数据处理和应用研究方面取得了长足的进展。特别是于2007年启动的国家重点基础研究发展计划前沿领域项目，“基于全球实时海洋观测计划（Argo）的上层海洋结构、变异及预测研究”（简称Argo973），抓住Argo观测网初步建成的契机，选择对我国近海环境和气候变化影响最为明显的西北太平洋、热带太平洋和印度洋为重点海区，结合其它观测资料和数值模式，在数据同化和再分析产品、太平洋与中国近海水交换、上层海洋对台风的响应、大洋温盐结构与气候变异等方面取得了相当可观的研究成果。

Argo973项目迄今已完成相关科技论文150余篇，这本基础研究论文集中的16篇文章只是一个缩影。文集中的论文都经过了同行评议，其选取原则除了科学标准外，还须满足三个条件：一是与Argo观测资料的应用直接相关；二是对Argo973项目的成果具有一定代表性；三是文章必须用中文撰写。文集中的前面5篇论文带有综述的性质，大致上针对Argo973项目的5个课题，分别对多源海洋资料的同化方法、北太平洋上层海洋温盐结构及

其中尺度特征、太平洋与中国近海的热盐交换、热带太平洋和印度洋上层海洋的季内到年际变化、吕宋海峡Argo观测试验等方面的工作进行介绍。其余的11篇论文则针对具体的科学问题进行分析和讨论，特别强调Argo观测资料对于海洋研究和预报的重要作用。

基于Argo观测的海洋和气候研究工作方兴未艾，大有可为。我们希望这本论文集不仅能在一定程度上展示Argo973项目的成果，而且能对促进我国Argo相关研究的进一步发展起到抛砖引玉的作用。最后，借此机会对科技部、国家海洋局、浙江省科技厅对Argo973项目的大力支持表示感谢；对项目专家组成员苏纪兰院士、巢纪平院士、胡敦欣院士、袁业立院士、黄荣辉院士、李崇银院士、任建国研究员和周宁研究员的关心和指导表示感谢；对项目咨询责任专家崔俊芝院士和许世远教授的宝贵意见和建议表示感谢。当然，Argo973项目的顺利实施离不开项目全体研究人员的共同努力，这本论文集从策划到出版离不开论文作者和编辑人员的辛勤劳动，在此一并致谢。

陈大可

2011年8月20日

目 录 CONTENTS

海洋多尺度三维变分的基本原理与统一理论框架分析

韩桂军[1]，李冬[1]，李威[1]，张学峰[1]，王喜冬[1]，吴新荣[1]

（1.国家海洋局海洋环境信息保障技术重点实验室，国家海洋信息中心，天津 300171）

摘要： 本文针对作者研究发展的海洋多尺度三维变分数据同化方法，包括多重网格三维变分、顺次递归滤波三维变分、多尺度递归滤波三维变分、多尺度高阶递归滤波三维变分和多尺度扩散滤波三维变分五种方法，首先介绍其基本原理和算法，然后对其理论框架进行分析探讨，证明上述各种方法都可归于变分形式的Barnes逐步订正方案的统一框架内，但又具有各自的特点。这些方法目前已被应用于Argo温盐资料同化的研究工作。

关键词： 三维变分；多尺度；多重网格；递归滤波；扩散滤波

1. 引言

对于目前的海洋观测网，观测资料可以给出海洋要素多种波长尺度的信息。例如，在观测资料稀疏的地方可以提供长波信息，而在观测资料密集的地方既可以提供长波信息又可以提供短波信息。一个理想的海洋数据同化系统应该可以从海洋观测资料中提取这些多尺度信息。然而，传统的海洋三维变分数据同化方法，例如基于相关尺度[1]或递归滤波[2]的三维变分同化方法，均只能利用观测资料纠正同化过程中某种波长（与给定的相关尺度或滤波系数有关）的误差。而且研究[3]表明：在数据同化过程中，如果长波误差得不到很好的纠正，短波误差也不可能得到很好的纠正。因此，研究如何从长波到短波依次提取海洋观测资料中的多尺度信息，是目前国内外海洋数据同化领域的前沿方向[4-6]。

Xie等[3]通过对递归滤波三维变分和Barnes客观分析方案[7,8]单次迭代过程的频响分析，首先提出了从长波至短波依次对不同尺度的观测信息进行同化的思想以及多重网格三维变分和顺次递归滤波三维变分的初步实现，并应用于地面二维气象常规观测资料的同化。本文作者基于多尺度分析思想，研究发展了一系列多尺度三维变分数据同化方法。例如，李威等[9,10]将多重网格三维变分引入海洋领域，同化Argo等现场观测资料以及卫星测高和卫星遥感海表面温度资料，

基金项目： 国家重点基础研究发展计划课题（2007CB816001），国家自然科学基金项目（41030854、40906015和40906016）。

作者简介： 韩桂军（1970－），女，辽宁省新民市，研究员，现主要从事海洋数据同化、海洋再分析和数值预报研究。

E-mail: gjhan@mail.nmdis.gov.cn

并将其由二维空间扩展到了三维空间同化，应用于中国海及其邻近海域的海洋再分析和数值预报中，同时对其理论进行了进一步的完善。何忠杰等[11,12]设计了适合于海洋的顺次递归滤波三维变分方法，并将其应用于中国海及其邻近海域的数值预报系统中，同化Argo等现场观测资料以及卫星测高和卫星遥感海表面温度资料，有效提高了海洋三维温度和盐度场，尤其是海洋中尺度涡的分析和预报精度。李冬等[13,14]基于对三维变分目标函数梯度的分析，将尺度信息融入最优化算法，发展了多尺度递归滤波三维变分，并将扩散滤波以及高阶递归滤波引入三维变分分析，发展了相应的多尺度分析方法。

本文将对作者研究发展的以上多尺度三维变分方法进行回顾，介绍它们的基本原理，并对其统一的理论框架和各自的特点进行分析探讨。

2. 各种多尺度三维变分方法简介

2.1 多重网格三维变分

多重网格[15]最初用于椭圆型差分方程的求解，近年来已经发展成为数值计算领域内的一种加速迭代收敛技术。其思想基于以下事实：在迭代过程中，高频分量快速衰减，影响收敛速度的主要因素是低频分量。多重网格技术将低频误差在粗网格上校正，从而可使迭代加速。Xie等[3]将多重网格方法引入多尺度三维变分方法设计，采用一系列由粗到细的网格依次进行三维变分分析，在粗网格上对长波误差进行校正，在细网格上对短波进行分析。因此，多重网格三维变分作为一种多尺度三维变分方法，除具有多重网格技术收敛速度快的优点以外，还可从长波至短波依次提取多尺度的海洋观测。

海洋三维变分数据同化的目标函数通常有如下形式[16,17]：

$$J(x)=\frac{1}{2}(x-x_b)^{\mathrm{T}}\mathbf{B}^{-1}(x-x_b)+\frac{1}{2}(\mathbf{H}x-y)^{\mathrm{T}}\mathbf{O}^{-1}(\mathbf{H}x-y) \tag{1}$$

式中，x_b 为背景场，y 为观测场，$\mathbf{B}$ 为背景误差协方差矩阵，$\mathbf{O}$ 为观测误差协方差矩阵，$\mathbf{H}$ 通常为从模式网格到观测点的插值算子。

多重网格三维变分在每一层网格上的目标泛函为[10]：

$$J^{(n)}(x)=\frac{1}{2}x^{(n)^T}x^{(n)}+\frac{1}{2}(\mathbf{H}^{(n)}x^{(n)}-y^{(n)})^T\mathbf{O}^{(n)^{-1}}(\mathbf{H}^{(n)}x^{(n)}-y^{(n)}) \tag{2}$$

式中，$n=1,2,3,\cdots,N$ 表示第 n 重网格。

$$\begin{cases} y^{(1)}=y^{obs}-\mathbf{H}x^{b} \\ y^{(n)}=y^{(n-1)}-\mathbf{H}^{(n-1)}x^{(n-1)},\ (n=2,3,\cdots,N) \end{cases} \tag{3}$$

最终分析结果为：

$$x^a = x^b + \sum_{n=1}^{N} x^{(n)} \tag{4}$$

可见，本方法是在一组由粗到细的网格上依次对观测场相对于背景场的增量进行三维变分分析，在每次分析中，将粗网格上的分析场作为下次较细网格的背景场，将各重网格的分析结果叠加即得最终的分析结果。由于相关尺度由网格的粗细来表达，因此背景场误差协方差矩阵退化为简单的单位矩阵。

在观测分布较均匀且观测质量较高的情况下，上述方法可得到比较准确的分析场。但是，海洋中观测分布通常是非常不均匀的，而且有些观测的误差较大，因此分析结果可能产生“双格距波”（$2\Delta x$ wave）或“牛眼”（bull’s eye）现象。对此，李威[10]在目标函数中加入控制变量的二阶导数项作为惩罚项，从而达到对分析结果进行平滑的效果，并对改进方案的解的唯一性、平滑项的物理意义以及平滑项与递归滤波的关系等进行了探讨。

下面从另一个角度来理解这个问题，当目标函数中加入控制变量的导数项后，事实上三维变分问题就等价于椭圆型偏微分方程的求解问题。为简单起见，考虑如下二维情形的目标泛函：

$$J(u) = \iint_{\Omega} (u - u^o)^2 \,\mathrm{d}\Omega + \lambda \iint_{\Omega} (u_x^2 + u_y^2) \mathrm{d}\Omega \tag{5}$$

式中，u^o 为观测，u_x、u_y 为 u 的一阶导数。

根据不动边界泛函极值化为欧拉方程的方法，得欧拉方程（边界条件略）：

$$u_{xx} + u_{yy} - \frac{1}{\lambda}(u - u^o) = 0 \tag{6}$$

式（6）即为椭圆型方程。如前所述，多重网格方法最显著的应用之一就是进行椭圆型方程的求解，这也从另一个侧面解释了多重网格三维变分的合理性和有效性。

同样的，若在目标函数中加入控制变量的二阶导数项，则得四阶椭圆型方程：

$$u_{xxxx} + u_{yyyy} - \frac{1}{\lambda}(u - u^o) = 0 \tag{7}$$

2.2 顺次递归滤波三维变分

先简单回顾一下传统的递归滤波三维变分方法。

定义新的控制变量[1,18] $w = \mathbf{B}^{-1}(x - x_b)$（也有人做变换 $w = \mathbf{C}^{-1}(x - x_b)$，其中，$\mathbf{B} = \mathbf{C}^{\mathrm{T}}\mathbf{C}$），则目标函数（1）式转化为：

$$J(w) = \frac{1}{2} w^{\mathrm{T}} \mathbf{B} w + \frac{1}{2}(\mathbf{HB}w - d)^{\mathrm{T}} O^{-1} (\mathbf{HB}w - d) \tag{8}$$

式中，$d = y - \mathbf{H}x_b$，为观测与背景场的偏差。

J 关于 w 的梯度为：

$$\nabla J = \mathbf{B}(w - \mathbf{H}^{\mathrm{T}}\mathbf{O}^{-1}(d - \mathbf{HB}w)) \tag{9}$$

若 $\mathbf{B}$ 为高斯型，则（8）式中 $\mathbf{B}$ 与向量 w 的乘积 $\mathbf{B}w$ 等效于在空间上对 w 进行高斯滤波，在实际应用中通常采用递归滤波[2,19]来模拟高斯滤波，这就是递归滤波三维变分。以一维情形为例，设输入向量为 $w_{M\times1}$，输出向量为 $u_{M\times1}$，递归滤波过程如下：

① $n=1,\ u_i^{(0)}=w_i$

② 右行滤波： $u_i^{(n)}=\alpha u_{i+1}^{(n)}+(1-\alpha)v_i \qquad i=M,M-1,\ldots,1$ （10）

③ 左行滤波： $v_i=\alpha v_{i-1}+(1-\alpha)u_i^{(n-1)} \qquad i=1,2,\ldots,M$ （11）

④ $n=n+1$，转②。循环N次，$u=u^{(N)}$，退出。

式中，v 为中间变量，α为滤波系数。

理论上可以证明，当 w 、u 为无限长序列，$N\to+\infty$时，上述递归滤波相当于高斯低通滤波。对高维情形，由于高斯滤波的可分离性，可转化为多个一维递归滤波，例如，对二维情形，可以先对每一行进行滤波，再对每一列滤波。滤波参数α，反映了相关长度，也决定了递归滤波器的带宽。α越大，带宽越窄，只有低频信息（长波）可通过；α越小，带宽越宽，使得高频信息（短波）也可通过。

递归滤波法的优点是不需显式地构造 $\mathbf{B}$ 矩阵，可显著减少因 $\mathbf{B}$ 矩阵的存储和相关运算带来的内存和计算开销。但在实际应用中，其困难在于滤波参数α的选取。以各向同性递归滤波为例，若选取的滤波参数α过大，则同化结果过于平滑，无法提取观测的短波信息；相反，若α过小，又不能准确地提取长波信息，于是短波信息也不可能很好地提取。

顺次递归滤波三维变分方法[11,12]与多重网格三维变分一样，基于多尺度分析的思想，用一组由大到小变化的滤波参数α依次进行三维变分分析，从长波至短波逐次提取不同尺度的观测信息。基本算法如下：

① $n=1,\ \alpha=\alpha^{(1)}, x=x_{\mathrm{b}}, w=0$；

② 通过递归滤波计算 $\mathbf{B}w$，并计算目标函数 $J(w)$ 以及梯度$\nabla J(w)$；

③ 利用最小化算法优化得 w^{new}；

④ 通过递归滤波计算 $x^{\mathrm{new}}=\mathbf{B}w^{\mathrm{new}}$；

⑤ $d=d-\mathbf{H}x^{\mathrm{new}},\ x=x+x^{\mathrm{new}},\ n=n+1$；

⑥ 调整α的值，使其变小，即令$\alpha=\alpha^{(n)}<\alpha^{(n-1)}$；

⑦ 转至②，直至满足收敛条件，x 即为所求分析场。

2.3 多尺度递归滤波三维变分

如前所述，多重网格三维变分和顺次递归滤波三维变分与传统三维变分的主要区别在于：传统三维变分方法只进行单次的三维变分分析，难以提取多尺度的观测信息；而这两种方法是

通过一系列的三维变分分析，从长波至短波依次提取多尺度观测信息。本节介绍的多尺度递归滤波三维变分，则是一种可通过单次三维变分分析实现多尺度信息提取的方法。

作者研究发现，由于海洋观测在空间的不均匀分布，将导致计算得到的目标函数梯度在空间分布不连续。若将此梯度应用于传统的最优化算法（例如共轭梯度法、L-BFGS[20]方法等），在观测稀疏的海区将可能造成长波的缺失。对此，简要分析如下：

假定观测误差协方差矩阵$\mathbf{O}$为单位矩阵，（9）式变为：

$$\nabla J = \mathbf{B}(w - \mathbf{H}^{\mathrm{T}}(d - \mathbf{HB}w)) \tag{12}$$

另外，不妨假定观测位于分析网格点上，设d为$m\times1$维，w为$n\times1$维，且$m<n$，又记$s=\mathbf{H}^{\mathrm{T}}(d-\mathbf{HB}w)$。则总可以将分析网格点按照观测顺序编号，使得$\mathbf{H}$矩阵具有如下形式：

$$\mathbf{H}_{m\times n} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ & & 0 & & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \tag{13}$$

由于$m<n$，故$\mathbf{H}$矩阵的后$n-m$列均为0，因此s的最后$n-m$个元素为0。也即，对无观测的分析网格点，s向量相应位置的元素一定为0；而对有观测的分析网格点，s却有相应的数值，即s在空间分布上存在“跃变”。由（12）式，由于$\mathbf{B}$相当于滤波算子，故梯度∇J等价于对$w-s$进行滤波。当滤波参数α较大时，滤波较强，可滤掉s在空间的“跃变”，使得梯度比较平滑并保持物理上的连续性，但滤波参数α较大，同时意味着将滤除许多有价值的短波信息，使得无法有效提取短波观测；而当α较小时，则无法滤除s在空间的“跃变”，就会导致梯度在空间上也存在“跃变”。若将此梯度应用于传统的最优化算法（例如共轭梯度法、L-BFGS方法等）进行三维变分分析，在观测稀疏的区域将造成观测长波的缺失。

基于以上分析，李冬等[13]利用递归滤波法，将观测的尺度信息融入最优化算法中，重新设计了多尺度三维变分分析方法。其主要思想为：目标函数中采用较小的递归滤波参数α，以保证所有尺度的信息均可通过滤波器，不会遗漏；对目标函数的负梯度进行递归滤波，做为下一次迭代的搜索方向，此滤波器的滤波参数β开始取较大的值，并随优化算法迭代次数的增加而减小，从而可从长波至短波依次提取各个波段的信息。算法基本流程如下：

① 给定w的初猜值；目标函数中递归滤波参数α选取较小的值。

② 通过递归滤波计算$\mathbf{B}w$，并计算目标函数$J(w)$以及梯度$\nabla J(w)$。

③ 采用滤波参数β对负梯度$-\nabla J(w)$进行递归滤波，得到$\mathbf{E}(-\nabla J(w))$，其中$\mathbf{E}$表示递归滤波算子。β在迭代开始时取较大的值。

④ 将$\mathbf{E}(-\nabla J(w))$作为优化算法中新的搜索方向（由于$\mathbf{E}$正定，$\mathbf{E}(-\nabla J(w))$必为下降方向），并采用线性搜索算法[21]得到步长l，更新w，即$w = w + l * \mathbf{E}(-\nabla J(w))$。

⑤ 减小β的值。

⑥ 转至②直到满足收敛条件，$x = x_b + \mathbf{B}w$ 。

2.4 多尺度高阶递归滤波三维变分

在海洋领域，递归滤波三维变分中通常使用的递归滤波器［（10）式和（11）式］实际是用一阶滤波器反复进行多次滤波（即多个一阶滤波器的级联）来模拟高斯滤波。但是，这样构造的滤波器精度比较低。此外，级联的递归滤波器会带来的问题是：在右行滤波过程中，理论上应计算到无穷远，但实际输入序列却是有限长度的，若进行截断，则此后左行滤波计算结果将会有较大误差。对此问题，通常有两种解决办法：一是对有限长度的序列进行延拓，即右行滤波时多计算一段长度，但这个延拓的长度与相关长度L有关，当L较大时会增加很多的计算量；另一种做法[2]是，每次左行滤波完成后，在下一次右行滤波之前，给出此时输入序列的左边界的估计，但随滤波次数增多，边界的估计很难给出。

作者将计算机图形图像领域广泛应用的Van Vliet递归高斯滤波器[22]引入海洋多尺度三维变分分析，并将级联形式的高阶递归滤波器转化为低阶递归滤波器的并联。由于采用高阶的滤波器，故无需如一阶滤波器那样进行多次右行、左行滤波；同时，由于将高阶滤波器转化为并联形式，右行滤波和左行滤波相互独立，不存在级联关系。因此，这样构造的高阶递归滤波器可很好地避免前面所述的边界问题，而且对高斯滤波器的逼近效果也比一阶滤波器好（即使是用一阶滤波器进行多次右行和左行滤波）。

对冲激响应为如下形式的高斯滤波器：

$$h(t;\sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{\frac{-t^2}{2\sigma^2}} \tag{14}$$

Van Vliet四阶数字滤波器的传递函数可表示为：

$$\begin{aligned} &\mathrm{H}(z) = \mathrm{H}_+(z) \cdot \mathrm{H}_-(z) \\ &\mathrm{H}_+(z) = \frac{\alpha}{1 + \sum_{i=1}^{4} b_i z^{-i}}，\ \mathrm{H}_-(z) = \frac{\alpha}{1 + \sum_{i=1}^{4} b_i z^{i}} \end{aligned} \tag{15}$$

其中，

$$\begin{aligned} &b = \prod_{i=1}^{4} d_i^{-1}，\ b_1 = -b \sum_{i=3}^{4} \sum_{j=2}^{i-1} \sum_{k=1}^{j-1} d_i d_j d_k, \\ &b_2 = b \sum_{i=2}^{4} \sum_{j=1}^{i-1} d_i d_j，\ b_3 = -b \sum_{i=1}^{4} d_i，\ b_4 = b \\ &\alpha = 1 + \sum_{i=1}^{4} b_i \end{aligned} \tag{16}$$

（16）式中，d_1、d_2、d_3和d_4为$H_-(z)$的极点，当$\sigma = 2$时，

$$
\begin{aligned}
&d_1(\sigma_0) = 1.13228 + 1.28114i, \quad d_2(\sigma_0) = d_1^* \\
&d_3(\sigma_0) = 1.78534 - 0.46763i, \quad d_4(\sigma_0) = d_3^*
\end{aligned} \tag{17}
$$

式中，$(\cdot)^*$ 表示共轭。

当$\sigma \neq 2$时，设 $q = \dfrac{\sigma}{\sigma_0}$ ，由傅立叶变换的尺度变换特性，有

$$
\begin{aligned}
&d_1(\sigma) = d_1(\sigma_0)^{\frac{1}{q}}, \; d_2(\sigma) = d_1^*(\sigma) \\
&d_3(\sigma) = d_3(\sigma_0)^{\frac{1}{q}}, \; d_4(\sigma) = d_3^*(\sigma)
\end{aligned} \tag{18}
$$

由（15）式，Van Vliet四阶递归高斯滤波器也要经过右行和左行滤波过程，这相当于两个四阶递归滤波器的级联。下面通过分解滤波器的传递函数$H(z)$，将其转化为并联形式。$H_+(z)$各极点为$H_-(z)$极点的倒数，简便起见，这里仍记为$d_i(i=1,2,3,4)$。由于$H(z)$的极点共轭成对出现，所以必有如下分解形式：

$$
H(z) = H_1(z) + H_2(z) + H_3(z) + H_4(z) \tag{19}
$$

其中，

$$
\begin{aligned}
&H_1(z) = \frac{e_1 z + f_1}{(z-d_1)(z-d_2)}, \quad H_2(z) = \frac{e_2 z + f_2}{(z-d_3)(z-d_4)} \\
&H_3(z) = \frac{e_3 z + f_3}{(1-d_1 z)(1-d_2 z)}, \; H_4(z) = \frac{e_4 z + f_4}{(1-d_3 z)(1-d_4 z)}
\end{aligned} \tag{20}
$$

（15）式中e_i 、 $f_i(i=1,2,3,4)$为待定系数，经计算可得：

$$
\begin{aligned}
e_1 &= 2\,\mathrm{Re}(c_1), & f_1 &= -2\,\mathrm{Re}(c_1 d_2) \\
e_2 &= 2\,\mathrm{Re}(c_2), & f_2 &= -2\,\mathrm{Re}(c_2 d_4) \\
e_3 &= -2\,\mathrm{Re}(c_3 d_2), & f_3 &= 2\,\mathrm{Re}(c_3) \\
e_4 &= -2\,\mathrm{Re}(c_4 d_4), & f_4 &= 2\,\mathrm{Re}(c_4)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
c_1 &= H_-(d_1) \cdot \frac{\alpha d_1^4}{(d_1-d_2)(d_1-d_3)(d_1-d_4)} \\
c_2 &= H_-(d_3) \cdot \frac{\alpha d_3^4}{(d_3-d_1)(d_3-d_2)(d_3-d_4)} \\
c_3 &= c_1 d_1^{-1} \\
c_4 &= c_2 d_3^{-1}
\end{aligned}
$$

式中，$\mathrm{Re}(\cdot)$表示取复数的实部。

由（19）式和（20）式，对一维的高斯滤波，就分解为4个二阶递归滤波器的并联。其中，$H_1(z)$ 与 $H_2(z)$ 为左行滤波，$H_3(z)$ 与 $H_4(z)$ 为右行滤波，4个滤波过程可独立并行执行。由于 d_1、d_2、d_3、d_4 在复平面中均位于单位圆内，因此这4个滤波过程均为稳定的。

（19）式和（20）式构造的滤波器可应用于前面介绍的顺次递归滤波三维变分和多尺度递归滤波三维变分。需要注意的是，这里要依次改变σ的值，来提取不同尺度的观测信息，而用一阶递归滤波器实现的顺次递归滤波三维变分是通过调整滤波参数α，多尺度递归滤波三维变分是通过调整滤波参数β。

2.5 多尺度扩散滤波三维变分

递归滤波三维变分中，递归滤波的实质是高斯滤波。由于高斯滤波最早即来源于扩散方程的求解，我们将扩散滤波引入三维变分分析，设计了基于扩散滤波的多尺度三维变分方法。其多尺度分析过程与多尺度递归滤波三维变分相同，只是用高斯滤波代替了递归滤波。

高斯滤波可以通过求解扩散方程实现。考虑如下一维扩散方程的柯西问题：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = a\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} & \\ u = w(x) & t = 0 \end{cases} \tag{21}$$

式中，$a \succ 0$ 为热扩散系数，为常数，t 为时间。此问题的解为：

$$u(x,t) = w(x) * \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

其中，$\sigma = \sqrt{2at}$，（ * ）代表卷积。

由上式可以看出，扩散方程的解 $u(x,t)$ 就表示对初值 $w(x)$ 进行高斯滤波，高斯滤波器的冲激响应为$\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$。此外，还可以看出，扩散系数$a$和积分时间$t$决定了滤波器的频窗宽度（为$4\sigma$），也即代表了尺度。$a$越大，扩散越快，滤波越强，结果越平滑，得到的是低频信息；同理，积分时间t越长，结果也越平滑。另外，需要说明的是，这里的t并不是真正的时间，而是为用扩散方程进行滤波而引入的“虚拟时间”。

推广至二维有限区域，扩散方程可改写为：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = a\left(\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) & (x,y) \in \Omega, t \in (0,S] \\ u = w(x,y) & (x,y) \in \overline{\Omega}, \mathrm{t} = 0 \\ \dfrac{\partial u}{\partial n} = 0 & (x,y) \in \Gamma \end{cases} \tag{22}$$

其中，$\overline{\Omega}=[0,D]\times[0,H],\Omega=\overline{\Omega}\setminus\Gamma,\Gamma$为$\overline{\Omega}$的边界，$n$为$\Gamma$的外法向方向。

引入扩散方程后，问题转化为优化扩散方程的初值$w(x,y)$，同时，目标函数（8）式变为：

$$J(w)=\frac{1}{2}w^{\mathrm{T}}u^{S}+\frac{1}{2}\left(\mathbf{H}u^{S}-d\right)^{\mathrm{T}}\mathbf{O}^{-1}\left(\mathbf{H}u^{S}-d\right) \tag{23}$$

其中，u^{S}表示扩散方程（22）积分至S时刻的u值。

采用合适的最优化算法极小化目标函数（23）式，得到解w，则$x=x_b+\mathbf{B}w$即为最终分析值，其中$\mathbf{B}w$仍用扩散方程求解。

同时，由于引入了热扩散方程，三维变分就变为四维变分的特殊情形，因此可利用伴随方法推导出梯度的表达式。限于篇幅，本文仅给出连续形式的伴随方程及梯度表达式，并略去推导过程。同时，为便于叙述，假设观测点位于分析网格点上，$\mathbf{O}$为单位矩阵，并略掉背景项。可以证明，基于上述假设，伴随方程有如下形式：

$$\begin{cases}-\dfrac{\partial R}{\partial t}-\alpha\left(\dfrac{\partial^2 R}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 R}{\partial y^2}\right)=f(t,w) & (x,z)\in\Omega,0<t\le S\\ R(x,z,S)=0 & (x,z)\in\overline{\Omega}\\ \dfrac{\partial R}{\partial n}=0 & (x,y)\in\Gamma\end{cases} \tag{24}$$

目标函数的梯度为

$$g(w)=-R^{0}(w) \tag{25}$$

当$t=S$且网格点有观测时，(24)式右端项$f(t,w)=d-u^{S}(w)$，其他情况下（$t<S$或网格点无观测时）$f(t,w)=0$。

3. 多尺度三维变分方法统一理论框架

本节将对以上介绍的各种多尺度三维变分方法的统一理论基础进行分析。将会看到，在一定条件下，它们均可归为变分形式的Barnes逐步订正客观分析方法[7,8]。

3.1 多重网格三维变分与顺次递归滤波三维变分关系的等价性分析

在递归滤波三维变分中，极小化目标函数（8）式得到w后，则得分析解$x=x_b+\mathbf{B}w$，其中，$\mathbf{B}w$是对w进行滤波。由此可见，对不同的递归滤波参数α，将得到不同尺度的分析结果。顺次递归滤波三维变分，正是通过从大到小依次改变α的值，提取不同尺度的观测信息。

多重网格三维变分基于同样的多尺度分析思想，但机制不同，其尺度体现在网格的粗细上。数值解与精确解之间的误差与傅立叶分析中不同频率分量有关，不同的频率分量具有不同

的误差和不同的收敛速度。在某一层网格上利用最优化算法迭代求解时，只能消除与波长和网格间距同一量级的那部分误差分量，对于波长较长或较短的误差分量在该网格中是无法消除的。因此，对某一层网格进行三维变分分析，将只能提取一定尺度的观测信息，这与顺次递归滤波三维变分中取某一固定的滤波参数α的分析效果是等价的。因此，多重网格三维变分中从粗到细变换网格，就相当于顺次递归滤波三维变分中从大到小改变滤波参数，从分析结果上看二者是等效的。

3.2 顺次递归滤波三维变分与Barnes客观分析方法的等价性分析

Xie等[3]通过对递归滤波三维变分和Barnes客观分析方案[7,8]单次迭代过程的频响分析发现，Barnes单次迭代的分析结果与某一尺度的递归滤波三维变分分析结果基本相吻合。由于Barnes客观分析方法只进行一次迭代的分析结果是不够好的，因而证明三维变分分析也需要进行多次，从而提出了多尺度分析的思想，发展了顺次递归滤波三维变分。因此，Xie等[3]指出：顺次递归滤波三维变分实际是变分形式的逐步订正客观分析方法，而正是由于其采用变分方案，由此具有了客观分析方法所没有的一些优点，比如同化雷达、卫星探测等非常规气象观测资料。

3.3 多尺度递归滤波三维变分与Barnes客观分析方法的等价性分析

Barnes[7,8]逐步订正客观分析方法迭代公式如下：

$$x_i^{(n+1)} = x_i^{(n)} + \frac{\sum_{k=1}^{M} w_{ik}^{(n)} \left(x_k^o - x_k^{(n)}\right)}{\sum_{k=1}^{M} w_{ik}^{(n)}} \tag{26}$$

式中，$x_i^{(n)}$ 表示网格点i的第n次迭代的值；x_k^o 为搜索圆内的第k个观测值；$x_k^{(n)}$ 为搜索圆内的$x_i^{(n)}$插值到第k个观测的值；权重$w_{ik}^{(n)} = e^{-\frac{r_{ik}^2}{\gamma c^2}}$，其中的参数取经验值。

多尺度递归滤波三维变分中，其多尺度分析过程主要体现在最优化过程中对梯度进行不同尺度的滤波，而目标函数中的递归滤波参数α取很小的值，甚至可以取为0。下面我们分析当$\alpha = 0$时，多尺度递归滤波三维变分与Barnes客观分析方法的关系。

若不考虑背景项，当$\alpha = 0$时，（8）式变为：

$$J(w) = \frac{1}{2}\left(\mathbf{H}w - d\right)^{\mathrm{T}} \mathbf{O}^{-1}\left(\mathbf{H}w - d\right) \tag{27}$$

为便于与Barnes方案比较，避免变量混淆，对上式中的变量符号做一下替换：

$$J(x) = \frac{1}{2}\left(\mathbf{H}x - x^o\right)^{\mathrm{T}} \mathbf{O}^{-1}\left(\mathbf{H}x - x^o\right) \tag{28}$$

目标函数的梯度为：

$$\nabla J = -\mathbf{H}^{\mathrm{T}}\mathbf{O}^{-1}(x^o - \mathbf{H}x) \tag{29}$$

多尺度递归滤波三维变分的迭代过程为：

$$x^{(n+1)}=x^{(n)}-l^{(n)}\mathbf{E}^{(n)}\nabla J(x^{(n)}) \tag{30}$$

式中，l 为线性搜索的步长，$\mathbf{E}$ 代表递归滤波算子。

将（29）式代入（30）式，并记权重

$$w^{(n)}=l^{(n)}\mathbf{E}^{(n)}\mathbf{H}^{\mathrm{T}}\mathbf{O}^{-1} \tag{31}$$

得

$$x^{(n+1)}=x^{(n)}+w^{(n)}(x^{o}-\mathbf{H}x^{(n)}) \tag{32}$$

比较（26）式和（32）式可知：若（26）式写成向量形式，两者形式完全相同，只是权重 $w^{(n)}$ 取值不同。在Barnes方法中，$w^{(n)}$ 取经验值；而在多尺度递归滤波三维变分方法中，$w^{(n)}$ 由最优化算法中的线性搜索算法计算得到（计算 $l^{(n)}$）。因此，当不考虑背景项时，多尺度递归滤波三维变分也是变分形式的逐步订正客观分析方法。相比于顺次递归滤波三维变分，多尺度递归滤波三维变分是Barnes方法的更加自然的推广，从数学形式到计算步骤都很相似，只是具体实现不同。

3.4 扩散滤波与递归滤波的等价性分析

记 Δ_x、Δ_y、$\overline{\Delta}_x$、$\overline{\Delta}_y$ 分别为 x、y 方向上的向前、向后差商算子。利用ADI格式（交替方向隐格式）对扩散模型（22）式进行离散，得：

$$\frac{u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}-u_{i,j}^{n}}{\tau/2}-a\Delta_x(\overline{\Delta}_x u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}})-a\Delta_y(\overline{\Delta}_y u_{i,j}^{n})=0 \tag{33}$$

$$\frac{u_{i,j}^{n+1}-u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\tau/2}-a\Delta_x(\overline{\Delta}_x u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}})-a\Delta_y(\overline{\Delta}_y u_{i,j}^{n+1})=0 \tag{34}$$

式中，$n\in[0,N-1];\ i\in[1,I-1];\ j\in[1,J-1]$。

由于不影响下文的讨论，这里对初始条件和边界条件的离散从略。

（33）式、（34）式求解时先逐行解三对角方程组，再逐列解三对角方程组。以（33）式为例，第 j 行对应的三对角方程组为

$$\mathbf{A}u=\gamma$$

其中，