arXiv:2303.05154v1 [cs.CV] 9 Mar 2023

来自高光谱探测仪的三维风场剖面：从气象学视角重新审视光流

P. H ´EAS*、O. HAUTECOEUR†和 R. BORDE‡

摘要。 本文提出了一种高效的光流算法，用于从红外探测仪测得的不完整高光谱图像数据中提取垂直分辨的三维大气运动矢量（AMV）场。待最小化能量函数的核心模型符合大气动力学，并纳入热力学、流体静力平衡和统计湍流等要素。我们采用现代优化技术，为这一具有非凸、不可微、高维且受物理约束等特点的能量最小化问题设计了一个低复杂度求解器。具体而言，借助交替方向乘子法（ADMM），我们展示了如何将原始高维问题拆分为一系列递归步骤，其中包含一组标准且易于处理的光流子问题。通过与欧洲中期天气预报中心（ECMWF）业务数值模拟提供的真实值进行比较，我们表明，在真实的红外大气探测干涉仪（IASI）观测场景中，所提出方法的表现优于当前最先进的光流算法。

关键词。三维大气运动矢量场、红外大气探测干涉仪、资料同化、输运方程、垂直风、约束优化、基于小波的光流。

1. 引言。数值天气预报（NWP）模式需要同化气象观测。NWP 模式必须持续接收各类原位观测，例如无线电探空仪、雷达、浮标、飞机测量，以及从卫星数据中提取的观测。近年来，同化到数值天气预报模式中的卫星数据比例显著增加，因为这些数据覆盖地球的所有区域，尤其是海洋和极地地区，而这些区域可用的原位测量很少 [14]。从卫星图像中获取的大气运动矢量（AMVs）是唯一具有良好全球覆盖范围的风观测 [6]。

尽管大气运动矢量对预报评分有显著的正面影响，但它们仅提供大气单一层次的信息，且其反演高度依赖云的存在。因此，它们无法满足世界气象组织在《全球数值天气预报应用》报告中提出的用户对水平风的要求：水平分辨率为 50 km，垂直分辨率为 1 km [1]。另一方面，目前还没有可靠的替代方案能够基于卫星图像提取垂直风剖面，因此只能依靠传统的无线电探空测量、民航飞机爬升和下降过程中的风廓线，以及多普勒雷达网络。与卫星图像相比，这些观测数据分布稀疏，主要采集自北半球和陆地区域。因此，水平风和垂直风廓线已被确定为当前或计划中的系统未能充分测量的最关键大气变量 [2]。

*INRIA Rennes & IRMAR，博利厄大学，35042 雷恩，法国（Patrick.Heas@inria.fr）

†Exostaff GmbH, Riedstrasse 6, 64404 比肯巴赫，德国
‡欧洲气象卫星开发组织，Eumetsat Allee，64295 达姆施塔特，德国

红外探测仪测量在水平风廓线反演方面被列为第二优先事项，仅次于多普勒风激光雷达测量 [1]。这一排序综合考量了多个因素，例如不确定性、水平和垂直分辨率，以及反演测量的频率；这些因素主要由观测技术和卫星轨道（地球静止轨道或低轨道）决定。已有多项研究探讨了如何从这些高光谱仪器反演得到的水汽场和温度场中提取大气运动矢量廓线 [32]。这些研究指出，提取大气运动矢量时常用的技术存在困难和局限。大多数大气运动矢量提取算法都会对连续图像序列应用互相关技术 [5]。高光谱探测仪反演得到的水汽场常常缺乏对比度，导致无法明确识别图像中的特征。此外，水汽场中存在大面积缺失观测数据，使追踪任务更加困难 [4]。这往往会导致匹配效果不佳，从而限制大气运动矢量的整体生成量。

能量最小化方法在计算机视觉文献中被称为光流算法。由于这类方法能够很好地适应图像固有的物理特性，并能处理低对比度和缺失观测数据，因此在大气科学领域展现出良好的应用前景；有关光流的综述，参见 [15] 。除其他气象研究外，这些技术还被用于识别流动边界 [3], ，或经调整后，根据卫星测得的云顶温度，估计对流层不同高度上的分层大气运动矢量场 [23]。随后，研究者又基于后一种方法，将该方法扩展至大气运动矢量的三维分层估计 [21]。最后， [8]开展了利用高光谱观测估计稠密三维大气运动矢量场垂直廓线的初步研究。

承接后一项研究，本文提出一种改进的光流方法，用于表征三维大气运动矢量场的垂直廓线，并处理含噪且不完整的高光谱卫星观测数据。这项改进体现在三个方面。首先，光流技术的核心模型基于对大气动力学的一致性物理建模。具体而言，一方面，数据项纳入了静力平衡约束，并加入一项用于惩罚偏离热力学方程的项，从而为两种广为人知的垂直运动估计气象方法——运动学方法和绝热方法——提供了统一框架 [24]。另一方面，正则化项根据大气湍流的统计模型进行了调整 [22, 19]。其次，通过将大气运动矢量场估计与温度、湿度和臭氧浓度稠密图重建相结合，处理噪声和缺失的图像观测数据。最后，采用现代优化技术来处理光流问题；该问题可表述为一个受物理约束的高维、非凸且不可微的最小化问题。具体而言，我们设计了交替方向乘子法（ADMM），将受约束的高维问题拆分为一组无约束、可微且可并行执行的最小化问题 [9]。这些子问题仍然是非凸且高维的。我们利用大气运动矢量场的小波展开 [12, 26, 20, 33, 28] ，并采用大规模拟牛顿法 [29]，以高效求解这些问题。

本文的组织结构如下。第2节介绍我们的方法所基于的大气模型。随后，第3节将光流估计问题形式化，第4节则提出专门设计的高效求解器。一项

数值评估将在第5节中，以红外大气探测干涉仪（IASI）的真实观测为基础，将所提出方法的性能与当前最先进水平的光流算法基准进行比较。评估过程中使用的真实值是由欧洲中期天气预报中心（ECMWF）的业务数值模型提供的同步数据。最后一节总结全文。

2. 地球物理建模。下文提出一组约束，用于关联大气运动矢量场的垂直廓线（以下简称三维AMV）与三维空间中三种气象量——温度、比湿和臭氧浓度——空间分布的时间演变。该模型基于 [24] 中介绍的标准大气动力学。

2.1. 压力平均大气状态。考虑一个等压坐标系，其空间坐标记为 $(s,\ p) \in \Omega \times \mathcal{Z} \subset \mathbb{R}^3$。感兴趣的三种气象量在时刻 $t \in \mathbb{R}$ 的空间分布由有界多元函数 $\boldsymbol{\rho}(s,\ p,\ t)$ 表示，该函数定义在 $\Omega \times \mathcal{Z} \times \mathbb{R}$ 上，取值属于 $\mathbb{R}^3$。我们关注函数 $\boldsymbol{\rho}(s,\ p,\ t)$ 的时间演变与水平风函数 $\mathbf{v}(s,\ p,\ t)$ 的时间演变之间的关系；这两个函数均定义在 $\Omega \times \mathcal{Z} \times \mathbb{R}$ 上，取值分别属于 $\mathbb{R}^3$ 和 $\mathbb{R}^2$。为此，我们将气压区间 $\mathcal{Z}$ 离散为有限个递减的气压层 $\{p^k\}_{k=0}^{K}$，其中 $p^k > p^{k+1}$，由此得到气压增量 $\delta p^k = p^k - p^{k+1}$，适用于 $k \in \mathcal{K} = \{0, \ldots, K-1\}$。采用这种垂直离散化后，三维空间中的气象量空间分布可表示为压力平均函数$\boldsymbol{\rho}^k$ 的堆栈 $\{\boldsymbol{\rho}^k\}_{k\in\mathcal{K}}:\ \Omega \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^3$，其定义如下：

$$\boldsymbol{\rho}^k(s,t) = \frac{1}{\delta p^k} \int_{p^{k+1}}^{p^k} \boldsymbol{\rho}(s,p,t)dp, \tag{2.1}$$

以及一组 $\{\mathbf{v}^k\}_{k\in\mathcal{K}}$ 气压平均水平风$\mathbf{v}^k:\ \Omega \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^2$ 上的

$$\mathbf{v}^k(s,t) = \frac{1}{\delta p^k} \int_{p^{k+1}}^{p^k} \mathbf{v}(s,p,t)dp. \tag{2.2}$$

此外，我们引入定义在 $\Omega \times \mathcal{Z} \times \mathbb{R}$上且取值于 $\mathbb{R}$的垂直风函数 $\omega(s,\ p,\ t)$。在离散气压层上取值的垂直风构成一组 $\{\omega^k(s,\ t)\}_{k=0}^{K}$，其元素为 $\omega^k(s,\ t) = \omega(s,\ p^k,\ t)$。

2.2. 时间积分大气动力学。如附录 A 所述，描述温度和比湿随时间变化的简化地球物理模型，可以通过在热力学第一定律中忽略绝热加热而得到。此外，采用臭氧浓度作为随流场输运的被动标量演化这一常见假设，也可以得到类似的简化模型。这些动力学模型具有下文所述的输运方程形式。假设满足一定的光滑性条件[1]，，则可将二元组 $(\mathbf{x}_{t_0}^k, \mathbf{x}_{t_1}^k)$ 视为解 $\boldsymbol{\rho}^k(s,t)$ 在网格 Ω_m各点处、时刻 t_0 的取值

[1] $k\ s\ t\ \in\ \mathcal{C}^1\ \times\mathbb{R}^{\ 2}\ \omega^k\ .\ t\ \in$假设水平风场和垂直风场为 $\mathcal{C}^1\ \times\mathbb{R}$ $\mathbf{v}(,\ )((\Omega)),(,\ )(\Omega)$，且为 Lipschitz 连续。

以及初始条件 $\boldsymbol{\rho}_{t_0}^k(s)$ 的输运方程 t_1 （含 $t_0 < t_1$）

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \boldsymbol{\rho}^k}{\partial t}(s,t) + \mathbf{v}^k(s,t) \cdot \nabla_s \boldsymbol{\rho}^k(s,t) + \dfrac{1}{2}(\gamma^k \omega^k(s,t) + \gamma^{k+1}\omega^{k+1}(s,t)) = 0, \\ \boldsymbol{\rho}^k(s,t_0) = \boldsymbol{\rho}_{t_0}^k(s) \end{cases}, \tag{2.3}$$

其中，$\mathbf{v}^k(s,t) \cdot \nabla_s \boldsymbol{\rho}^k(s,t)$ 表示 $\boldsymbol{\rho}^k(s,t)$ 的三个分量各自的梯度与$\mathbf{v}^k(s,t)$ 的标量积，且 $\gamma^k \in \mathbb{R}^3$ 为已知的物理常数。众所周知，在温和条件下，当 $\delta t \triangleq t_1 - t_0$ 是一个小增量时，对式 (2.3) 进行时间积分，可得到动力学的拉格朗日形式，我们将其称为变形约束[2]

$$\boldsymbol{\rho}_{t_0}^k(s) = \boldsymbol{\rho}_{t_1}^k(s + \delta t\, \mathbf{v}^k(s,t_0)) + \frac{\delta t}{2}(\gamma^k \omega^k(s,t_0) + \gamma^{k+1}\omega^{k+1}(s,t_0)). \tag{2.4}$$

2.3. 流体静力平衡约束。 此外，质量守恒除了提供式 (2.4) 外，还对水平风和垂直风的结构提供了地球物理约束。事实上，在等压坐标中，质量守恒可写为:

$$-\frac{\partial \omega(s,p,t)}{\partial p} = \nabla_s \cdot \mathbf{v}(s,p,t). \tag{2.5}$$

对式 (2.5) 在气压区间 $[p^k, p^{k+1}]$ 上进行垂直积分，可得在时刻 t_0 、对于 $k \in \mathcal{K}$ 的 [3] ，我们将其称为静力约束

$$\omega^k(s,t_0) - \omega^{k+1}(s,t_0) = \delta p^k \nabla_s \cdot \mathbf{v}^k(s,t_0), \tag{2.6}$$

边界条件为 $\omega^0(s,t_0) = 0$，以及 $\omega^K(s,t_0) = 0$，适用于任意 $s \in \Omega$。垂直风的这些边界条件可以如下解释：对于最低层（k=0），地球边界条件意味着垂直风为零；对于最高层（k=K），一个合理的假设是，在起到覆盖作用的对流层顶处，垂直风可以忽略不计。

2.4. 空间离散化。现在，我们描述前几节中引入的连续函数的空间离散化。考虑图像网格

$$\Omega_m = \{s \in \Omega : s = \varkappa(j), j = 1, \ldots, m\},$$

[2]设函数 $t \to \mathbf{X}_{t_0}^t(s)$ 为偏微分方程 (2.3) 的特征曲线，它是以下系统的解:

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}\mathbf{X}_{t_0}^t(s) = \mathbf{v}^k(\mathbf{X}_{t_0}^t(s), t) \\ \mathbf{X}_{t_0}^{t_0}(s) = s \end{cases}.$$

由 (2.3) 可知，初始时刻的场满足 [31]

$$\boldsymbol{\rho}_{t_0}^k(s) = \boldsymbol{\rho}^k(\mathbf{X}_{t_0}^{t_1}(s), t_1) + \int_{t_0}^{t_1} \frac{1}{2}(\gamma^k \omega^k(\mathbf{X}_{t_0}^{t'}(s), t') + \gamma^{k+1}\omega^{k+1}(\mathbf{X}_{t_0}^{t'}(s), t'))dt'.$$

于是，假设 $\int_{t_0}^{t_1} \mathbf{v}^k(\mathbf{X}_{t_0}^{t'}(s)\ t')dt' = \delta t \mathbf{v}^k(s,t_0)$，且垂直风 ω^k 和 ω^{k+1} 在时间区间 $[t_0, t_1]$内为常量，即可得到 (2.4)。

[3]基于前文提到的垂直风函数假设。

其中，$\varkappa(j)$ 是返回与索引 j 对应空间位置的函数。利用二维域 Ω 的这种空间离散化，我们最终定义时刻 t 的图像堆栈 $\mathbf{x}_t^\star$，其位于 $\mathbb{R}^{3Km}$ 中；第 k 层是一个包含 m 个三元分量的向量 $\mathbf{x}_t^k(j) = \boldsymbol{\rho}^k(\varkappa(j)\ t) \quad \forall j\colon \varkappa(j) \in \Omega_m$。我们关注时刻 t_0 和 t_1 的气压平均图像堆栈对，即 $(\mathbf{x}_{t_0}^\star, \mathbf{x}_{t_1}^\star) \in (\mathbb{R}^{3Km})^2$。对于图像网格 Ω_m，我们还定义大气运动矢量：气压平均水平位移场堆栈 $\mathbf{d}^\star \in \mathbb{R}^{2Km}$，其第 k 层是一个包含 m 个二元分量的向量，定义为 $\mathbf{d}^k(j) = \delta t \mathbf{v}^k(\varkappa(j)\ t_0) \quad \forall j\colon \varkappa(j) \in \Omega_m$；以及位于各层边界处的垂直位移场堆栈 $\boldsymbol{\omega}^\star \in \mathbb{R}^{(K+1)m}$，其第 k 个分量是一个包含 m 个分量的向量，定义为$\boldsymbol{\omega}^k(j) = \omega^k(\varkappa(j)\ t_0) \quad \forall j\colon \varkappa(j) \in \Omega_m$。根据边界条件，对于任意 j，均满足条件 $\boldsymbol{\omega}^0(j) = 0$ 和 $\boldsymbol{\omega}^K(j) = 0$。

2.5. 三维 AMV 模型。现在可以定义三维 AMV 模型了。该模型依赖于压力平均、时间积分且经过空间离散化的物理守恒定律。

定义三维大气运动矢量离散模型的第一个约束基于质量守恒，其压力平均和空间离散形式由静力约束 (2.6) 给出。将其应用于像素网格，可得 $k \in \mathcal{K}$ 形式：

$$\boldsymbol{\omega}^k - \boldsymbol{\omega}^{k+1} = \delta p^k \mathrm{div}(\mathbf{d}^k). \tag{2.7}$$

请注意，向量 $\mathrm{div}(\mathbf{d}^k)$ 在 $\mathbb{R}^m$ 处的分量表示连续表示 $\mathbf{d}^k$ 在二维域 Ω 上的位置 Ω_m 处的散度。

然后，为了补充这一质量约束，对于每一对 $(\mathbf{x}_{t_0}^k, \mathbf{x}_{t_1}^k)$，我们需要假设一个连续模型，以便在 Ω_m之外对图像 $\mathbf{x}_{t_1}^k$ 进行插值。在 Ω_m内各点应用变形约束 (2.4)，将第 k 层的变形模型改写为：

$$\mathbf{x}_{t_0}^k = \mathcal{W}(\mathbf{x}_{t_1}^k, \mathbf{d}^k, \boldsymbol{\omega}^k, \boldsymbol{\omega}^{k+1}), \tag{2.8}$$

其中，算子 $\mathcal{W}\colon \mathbb{R}^{3m} \times \mathbb{R}^{2m} \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^{3m}$ 在 (2.8) 中根据大气运动矢量的压力平均水平分量 $\mathbf{d}^k$，以及上、下层边界处的垂直风 $\boldsymbol{\omega}^k$ 和 $\boldsymbol{\omega}^{k+1}$，将图像堆栈$\mathbf{x}_{t_1}^k$ 变形为 $\mathbf{x}_{t_0}^k$。算子 $\mathcal{W}$ 的第 j 个输出分量 $\mathcal{W}_j\colon \mathbb{R}^{3m} \times \mathbb{R}^{2m} \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^3$ 是定义如下的函数：$\mathcal{W}_j(\mathbf{x}_{t_1}^k, \mathbf{d}^k, \boldsymbol{\omega}^k, \boldsymbol{\omega}^{k+1}) =$

$$\sum_{i \in \mathcal{V}(\varkappa(j) + \mathbf{d}^k(j))} \mathbf{x}_{t_1}^k(i) \varphi_i(\varkappa(j) + \mathbf{d}^k(j)) - \frac{\delta t}{2}(\gamma^k \boldsymbol{\omega}^k(j) + \gamma^{k+1} \boldsymbol{\omega}^{k+1}(j)), \tag{2.9}$$

其中，$\mathcal{V}(\varkappa(j)+\mathbf{d}^k(j))$ 表示与点 $\varkappa(j) + \mathbf{d}^k(j)$ 的“邻域”相对应的索引子集。选取由 $\varphi_i\colon \Omega_m \to \mathbb{R}$ 的 $\{\varphi_i\}_{i=1}^m$ 组成的族，使其成为二维三次基数样条插值函数 [37]。注意，图像堆栈 $\mathbf{x}_{t_0}^k$ 是 $\mathbf{x}_{t_1}^k$、$\mathbf{d}^k$、$\boldsymbol{\omega}^k$ 和 $\boldsymbol{\omega}^{k+1}$ 的确定性函数。我们指出，只要 φ_i 是非线性的，$\mathcal{W}$ 对其第一个、第三个和第四个自变量是线性的，而对第二个自变量是非线性的。

总而言之，三维 AMV 模型为 (2.7)–(2.9)。

3. 估计问题的表述。本节介绍我们用于估计三维 AMV 场气压平均垂直廓线的方法。该估计依赖于温度、比湿和臭氧的垂直分辨且部分观测场。

3.1. 部分观测。我们将满足三维 AMV 模型 (2.7)–(2.9) 的 K 个三元组组成的集合（$\mathbf{d}^\star$，$\boldsymbol{\omega}^\star$，$\mathbf{x}^\star_{t_1}$）称为“真实值”。该集合中与第 k 层相关的真实值记为三元组（$\mathbf{d}^{k,\star}$，$\boldsymbol{\omega}^{k\star}$，$\mathbf{x}^{k,\star}_{t_1}$）。当然，真实值通常是未知的，但我们可以假设存在某种生成模型，将真实值与可用的含噪部分观测联系起来。更具体地说，令 $\Omega^{t_0,k}_{obs}$，$\Omega^{t_1,k}_{obs} \subseteq \Omega_m$ 表示图像网格上与$\mathbf{x}^{k,\star}_{t_0}$ 和$\mathbf{x}^{k,\star}_{t_1}$ 的观测分量相关的空间位置集合。观测集合为

$$\mathbf{y} = \{\mathbf{y}^k_t(j) \in \mathbb{R}^3 : \varkappa(j) \in \Omega^{t,k}_{obs}; t \in \{t_0, t_1\};\, k \in \mathcal{K}\} \in \mathcal{Y},$$

其中，$\mathcal{Y} \in \mathbb{R}^{3Km}$ 而$\mathbf{y}^k_t(j)$ 的三个分量与$\mathbf{x}^{k,\star}_t(j)$ 的对应分量相同，但还叠加了协方差为$\mathbf{I}_{\sigma^2_{obs}} = \mathrm{diag}(\sigma^2_{obs}, \sigma^2_{obs}, \sigma^2_{obs})$ 的额外中心化高斯噪声。因此，根据变形模型 (2.8)，第 k层的观测由真实值生成如下：

$$\begin{aligned}
\mathbf{y}^k_{t_0}(j) &= \mathcal{W}_j(\mathbf{x}^{k,\star}_{t_1}, \mathbf{d}^{k,\star}, \boldsymbol{\omega}^{k\star}, \boldsymbol{\omega}^{k+1,\star}) + \mathcal{N}(0, \mathbf{I}_{\sigma^2_{obs}}), \quad \varkappa(j) \in \Omega^{t_0,k}_{obs},\\
\mathbf{y}^k_{t_1}(j) &= \mathbf{x}^{k,\star}_{t_1}(j) + \mathcal{N}(0, \mathbf{I}_{\sigma^2_{obs}}), \quad \varkappa(j) \in \Omega^{t_1,k}_{obs}.
\end{aligned}$$

更复杂的方案会采用其他噪声假设，以考虑噪声相关性和非二次偏差，参见 [10]中的参考文献。

3.2. 优化问题。给定温度、湿度和臭氧的不完整观测$\mathbf{y}$，问题是估计三维大气运动矢量（3D AMV），即，$(\mathbf{d}^\star, \boldsymbol{\omega}^\star) \in \mathbb{R}^{K2m} \times \mathbb{R}^{(K-1)m}$，并同时估计图像堆栈 $\mathbf{x}^\star_{t_1} \in \mathbb{R}^{3Km}$。因此，用于参数化三维 AMV 模型 (2.7)–(2.9) 的向量为$\boldsymbol{\theta}^\star = (\mathbf{d}^\star, \boldsymbol{\omega}^\star, \mathbf{x}^\star_{t_1}) \in \mathbb{R}^n$，其中

$$n = (6K - 1)m.$$

需要指出的是，三维 AMV 模型的维度 n 通常非常庞大：考虑包含 $K = 2^4$ 层、图像尺寸为 $m = 2^9 \times 2^9$的现实情形，三维 AMV 模型的自由度数量 n 超过 2400 万。设优化变量 $\boldsymbol{\theta} = (\mathbf{d}, \boldsymbol{\omega}, \mathbf{x}_{t_1}) \in \mathbb{R}^n$ 的维度与 $\boldsymbol{\theta}^\star$相同。我们的方法基于求解以下硬约束优化问题

$$\begin{cases}
\underset{(\mathbf{d},\boldsymbol{\omega},\mathbf{x}_{t_1})}{\arg\min}\, \mathcal{J}(\mathbf{d}, \boldsymbol{\omega}, \mathbf{x}_{t_1}, \mathbf{y}) + \boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{d}} \mathcal{R}_d(\mathbf{d}) + \boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{x}} \mathcal{R}_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}_{t_1}),\\
\text{s.t.} \quad h(\mathbf{d}, \boldsymbol{\omega}) = 0,
\end{cases} \tag{3.1}$$

其中，代价函数 $\mathcal{J}$表示数据项，$\mathcal{R}_d$ 和 $\mathcal{R}_{\mathbf{x}}$ 表示一些正则化项，h表示某个约束。参数向量 $\boldsymbol{\alpha}_d = (\alpha^1_d, \cdots, \alpha^K_d)$ 和 $\boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{x}} = (\alpha^1_{\mathbf{x}}, \cdots, \alpha^K_{\mathbf{x}})$ 的分量均为正实数，我们假设这些数值已由专家知识预先确定。

或者，将式 (3.1) 中的硬约束替换为二次惩罚项，我们也可以考虑以下软约束最小化问题

$$\underset{(\mathbf{d},\boldsymbol{\omega},\mathbf{x}_{t_1})}{\arg\min}\, \mathcal{J}(\mathbf{d}, \boldsymbol{\omega}, \mathbf{x}_{t_1}, \mathbf{y}) + \boldsymbol{\alpha}_d \mathcal{R}_d(\mathbf{d}) + \boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{x}} \mathcal{R}_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}_{t_1}) + \rho h(\mathbf{d}, \boldsymbol{\omega})^2, \tag{3.2}$$

其中，ρ是给定的正实数。下面对问题 (3.1) 和 (3.2) 的组成部分作进一步说明。

3.2.1. 线性约束。(3.1) 中的约束或 (3.2) 中的函数是线性的，定义如下：

$$h(\mathbf{d}, \boldsymbol{\omega}) = \mathbf{D}\mathbf{d} - \mathbf{L}\boldsymbol{\omega} \tag{3.3}$$

其中矩阵 $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{Km\times(K-1)m}$ 和 $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{Km\times 2Km}$。在垂直风边界条件下，静力平衡式 (2.7) 可通过选取特定矩阵$\mathbf{L}$ 和 $\mathbf{D}$，改写为矩阵-向量乘积的形式 (3.3)。我们指出，在此情况下，该线性约束在 $\boldsymbol{\omega}$ 中形成一个超定系统：对于 K m 维约束，存在 ($K-1$) 个未知的 m 维垂直风场。然而，$\mathbf{L}$ 中有 m 行线性相关。因此，对于$\mathbf{D}\mathbf{d}$的任意取值，都存在唯一的 $\boldsymbol{\omega}$ 满足该线性约束。因此，在问题 (3.1) 中，$\boldsymbol{\omega}$ 可表示为$\mathbf{d}$的确定性函数：$\boldsymbol{\omega} = \mathbf{L}^{\dagger}\mathbf{D}\mathbf{d}$。正如我们将看到的，与使用确定性函数 $\boldsymbol{\omega} = \mathbf{L}^{\dagger}\mathbf{D}\mathbf{d}$ 相比，采用线性约束 $\mathbf{L}\,\boldsymbol{\omega} = \mathbf{D}\,\mathbf{d}$ 进行优化在算法实现方面更为可取，因为它能够并行化优化过程。

3.2.2. 数据项。式 (3.1) 中的数据项 $\mathcal{J}$ 是依赖于向量 $\boldsymbol{\theta} = (\mathrm{d} \quad \boldsymbol{\omega}, \mathrm{x}_{t_1}) \in \mathbb{R}^n$ 和观测 $\mathrm{y} \in \mathcal{Y}$ 的函数。其目的是惩罚给定状态 x_t 在时间 $t = t_0$ 和 t_1 与相关观测（若有）的差异。这里回顾一下，x_{t_0} 是通过变形模型 (2.8) 对 x_{t_1} 的确定性映射。更确切地说，我们定义残差函数$\boldsymbol{\delta}$：$\mathbb{R}^n \times \mathcal{Y} \to \mathbb{R}^{6m}$，使得 $\boldsymbol{\delta}(\boldsymbol{\theta}, \mathrm{y}) = \begin{pmatrix}\boldsymbol{\delta}_{t_0}(\boldsymbol{\theta}, \mathrm{y}) (\boldsymbol{\theta}, \mathrm{y})\end{pmatrix}$，其中$\boldsymbol{\delta}_t(\boldsymbol{\theta}, \mathrm{y})$ 的第 (k, j) 个分量定义为：对于 $k \in \mathcal{K}$ 和 $\varkappa(j) \in \Omega_m$：

$$\boldsymbol{\delta}_t^{k,s}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{y}) = \begin{cases} \mathbf{x}_t^k(j) - \mathbf{y}_t^k(j) & \text{if} \quad \varkappa(j) \in \Omega_{obs}^{t,k} \\ 0 & \text{else} \end{cases}. \tag{3.4}$$

我们假设观测噪声服从高斯分布且彼此不相关。在这一高斯假设下，最可能的状态是使残差函数范数的平方最小的状态。因此，我们将数据项简单地定义为

$$\mathcal{J}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{y}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{\delta}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{y})\|_2^2. \tag{3.5}$$

3.2.3. 正则化项。众所周知，在不进行正则化的情况下求解问题 (3.1) 或 (3.2)，即将正则化参数设为零，会导致问题严重病态。在当前气象背景下，某些正则化项比其他正则化项更适合地球物理流的特性。

事实上，计算机视觉文献中已提出许多适用于 $\mathcal{R}_d$ 的方法，最早可追溯到著名的一阶光流正则化 [25]。然而，该模型并不适用于流体流动，因为它会平滑掉涡旋和散度结构。二阶方案更适用于流体流动。常见方法包括平滑散度和涡度的梯度 [34]，或平滑高阶导数 [26]。近期方案 [35, 20]，提出了一种二次正则化，其形式为

$$\boldsymbol{\alpha}_d\mathcal{R}_d(\mathbf{d}) = \frac{1}{2}\sum_{k=0}^{K-1}\alpha_d^k\|\boldsymbol{\Delta}_m\mathbf{d}^k\|_2^2. \tag{3.6}$$

其中，算子 $\mathbf{\Delta}_m$ ： $\mathbb{R}^{2m} \to \mathbb{R}^m$ 定义为对位移场$\mathbf{d}^k$应用双二维拉普拉斯算子的有限近似。正则化（3.6）为地球物理流提供了一种相关的先验结构，可刻画二维湍流中的各向同性自相似结构 [19, 20]。

关于 $\mathcal{R}_{\mathbf{x}}$ 正则化项，从不完整地图的观测中重建稠密场的一种标准方法是依赖稀疏先验 [16]。具体而言，温度、湿度和臭氧浓度这些地球物理变量是形式如（2.3）的输运方程的解，正如 [11]所述，它们在某个精心选择的基下具有稀疏分解。具体来说，我们假设 $\mathbf{x}^{t_1}$ 堆栈中的温度、湿度和臭氧浓度图像在二维插值函数的字典中是稀疏的。为此，我们用三个级数表示状态 $\mathbf{x}_{t_1}^k \in \mathbb{R}^{3m}$ 的各个分量。令 $\mathbf{x}_{t_1}^{k\,\ell} \in \mathbb{R}^m$表示堆栈 $\mathbf{x}_{t_1}^k$的第 ℓ幅图像，其中 $\ell = 1$为 2、3。我们定义 $\mathbf{x}_{t_1}^{k\,\ell} = \bar{\mathbf{\Phi}}$、$\mathbf{c}^{k,\ell}$，其中_$\mathbf{\Phi} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ 是一个正交归一基 $\{\phi_i\}_{i=1}^m$ ，其定义域为 $\phi_i : \Omega_m \to \mathbb{R}$，系数向量为 $\mathbf{c}^{k,\ell} \in \mathbb{R}^m$。将 $\mathbf{c}^{k,\ell}$在$\ell = 1$为 2、3 时的各项串接起来，记为 $\mathbf{c}^k \in \mathbb{R}^{3m}$ ；进一步将 $\mathbf{c}^k$在$k \in \mathcal{K}$时的各项串接起来，记为 $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^{3Km}$。我们定义算子 $\mathbf{\Phi}$: $\mathbb{R}^{3Km} \to \mathbb{R}^{3Km}$ ，使得 $\mathbf{x}_{t_1} = \mathbf{\Phi}\mathbf{c}$。系数 $\mathbf{c}^k$ 通过上述分解与图像堆栈 $\mathbf{x}_{t_1}^k$ 相关联。现在已普遍认可，在某些特定假设下，稀疏假设可以通过 ℓ_1 范数惩罚来建模 [16], ，即

$$\boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{x}}\mathcal{R}_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}_{t_1}) = \frac{1}{2}\sum_{k=0}^{K-1} \alpha_{\mathbf{x}}^k \|\mathbf{c}^k\|_1. \tag{3.7}$$

4. 高效求解器。 如前所述，约束最小化问题 (3.1) 涉及的变量数量通常极其庞大。此外，目标函数是非凸的（由于数据项 $\mathcal{J}$），且不可微（由于正则化项 $\mathcal{R}_{\mathbf{x}}$）。在这种情况下，求解约束最小化问题显然是一项艰巨的任务。尽管任何确定性优化过程通常都难以收敛到全局最小值，但局部极小值仍可作为有意义的近似解。不过，只有专门设计的过程才能高效处理这种高维、非凸、不可微且受约束的优化问题。

下文中，我们提出基于交替方向乘子法 （ADMM） [9]的优化方法。我们还将说明针对本问题的 ADMM 过程所涉及的一些收敛问题。十多年前，ADMM 出现在优化领域，用于处理大规模、受约束且不可微的优化问题。这类方法以鲁棒性著称（在非常宽松的条件下即可确保收敛到局部最小值），并且能够快速收敛到可接受的精度（通常只需几十次迭代）。关于 ADMM 框架的简要介绍，请参见附录 B.1。

4.1. 处理约束与不可微性。为了求解不可微约束优化问题，ADMM 将其转化为一个三阶段递推过程，其中前两个阶段是标准的无约束最小化问题。为推导 ADMM递推式，我们重新表述约束优化问题 (3.1)。为此，我们在问题中加入一个新变量： $\tilde{c}$ 由向量 $\tilde{c}^0$、.....、$\tilde{c}^{K-1}$拼接而成，并由

加入一个新约束 $\tilde{\boldsymbol{c}} = \boldsymbol{c}$ 加以平衡。于是，问题 (3.1) 可以重写为

$$\begin{cases} \underset{\mathbf{d},\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{c},\tilde{\boldsymbol{c}}}{\arg\min}\, \mathcal{J}(\mathbf{d},\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{c}) + \boldsymbol{\alpha}_d \mathcal{R}_d(\mathbf{d}) + \boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{x}} \mathcal{R}_{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\Phi}\tilde{\boldsymbol{c}}), \\ \text{s.t.} \quad \begin{pmatrix} \mathbf{D} & -\mathbf{L} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{d} \\ \boldsymbol{\omega} \\ \boldsymbol{c} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ -\mathbf{I} \end{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{c}} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}. \end{cases} \tag{4.1}$$

如附录 B.2 所述，这个约束优化问题符合附录 B.1 中介绍的通用 ADMM过程。通过反复执行以下三个步骤直至收敛，即可得到解:

$$(\mathbf{d}^{(i+1)}, \boldsymbol{\omega}^{(i+1)}, \boldsymbol{c}^{(i+1)}) = \underset{\boldsymbol{d},\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{c}}{\arg\min}\, \mathcal{J}(\mathbf{d},\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{c}) + \boldsymbol{\alpha}_{\boldsymbol{d}} \mathcal{R}_d(\mathbf{e}_{\boldsymbol{d}}) + \frac{\rho}{2} \|\mathbf{c} - \tilde{\mathbf{c}}^{\,(i)} + \mathbf{u}_{\mathbf{c}}^{\,(i)}\|_2^2 + \frac{\rho}{2} \|\mathbf{D}\mathbf{d} - \mathbf{L}\,\boldsymbol{\omega} + \mathbf{u}_{\mathbf{d}}^{(i)}\|_2^2, \tag{4.2}$$

$$\tilde{\mathbf{c}}^{k,\ell\,(i+1)}(s) = \operatorname{soft}_{\frac{\alpha_{\mathbf{x}}^k}{\rho}} \left(\mathbf{c}^{k,\ell\,(i+1)}(s) + \mathbf{u}_{\mathbf{c}}^{k,\ell\,(i)}(s) \right), k \in \mathcal{K}, \ell \in \{1,2,3\}, s : \chi(s) \in \Omega_m, \tag{4.3}$$

$$\begin{cases} \mathbf{u}_{\mathbf{d}}^{(i+1)} = & \mathbf{u}_{\mathbf{d}}^{(i)} + \mathbf{D}\,\mathbf{d}^{(i+1)} - \mathbf{L}\,\boldsymbol{\omega}^{(i+1)} \\ \mathbf{u}_{\boldsymbol{c}}^{(i+1)} = & \mathbf{u}_{\boldsymbol{c}}^{(i)} + \boldsymbol{c}^{(i+1)} - \tilde{\boldsymbol{c}}^{(i+1)} \end{cases}, \tag{4.4}$$

其中 $\rho > 0$，且其中

$$\operatorname{soft}_\lambda(a) = \begin{cases} a - \lambda & \text{if } a \geq \lambda, \\ a + \lambda & \text{if } a \leq -\lambda, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{4.5}$$

下面对 ADMM递推的各个步骤作几点说明。首先，问题 (4.2) 是一个可微但非凸的 n 维最小化问题。其次，(4.3) 对应于 ℓ_1 范数的近端算子的定义，并基于简单的软阈值算子 (4.5)。需要指出的是，(4.3) 的解通常是稀疏的，因为软阈值处理会将较小的系数置为零。

值得注意的是，软约束问题 (3.2) 的解也可以通过相同的步骤 (4.2)-(4.4) 计算，只需将 (4.4) 中的第一项更新替换为 $\mathbf{u}^{(i+1)}{}_{\mathbf{d}} = 0$。

请注意，由于该过程的步骤 (4.3)–(4.4) 仅涉及向量加法，因此将 ADMM 应用于我们的问题后，只要第一步 (4.2) 的复杂度随问题维度线性增长，每次迭代的复杂度也会随问题维度线性增长，为 $\mathcal{O}(Km)$。我们将在第 4.3.2 节中看到，第一步实际上可以在对数线性时间内求解。然而，重要的是要注意，步骤 (4.2) 是 ADMM 过程中的计算瓶颈，因为与另外两个 ADMM 步骤不同，高维问题无法拆分为复杂度与 K 无关的低维子优化问题。事实上，K 变量子集 $\{\boldsymbol{d}^k, \boldsymbol{c}^k\}$ 都通过垂直风的作用相互依赖 $\boldsymbol{\omega}$。因此，该 ADMM 过程并未提供适合并行化的自然结构，而这对于这个高维优化问题至关重要。

4.2. 通过分裂处理高维性。如前所述，ADMM 递推 (4.2)–(4.4) 汇集了 K 组高维变量，这些变量通过（$K-1$）垂直风场相互作用。基于最优控制的策略能够有效处理变量在不同垂直层之间的这种依赖关系 [7]。然而，ADMM算法也因能够通过算子分裂利用变量依赖关系的结构，而广受欢迎，成为快速求解大规模优化问题的高效工具 [17]。不失一般性，假设 K 为偶数。如下所述，变量分裂可通过独立求解 $K/2$ 个子问题来求解 (3.1)，从而实现复杂度与 K 无关的并行计算。

问题 (4.1) 等价地可写为

$$\begin{cases} \underset{\mathbf{d},\boldsymbol{\omega},\tilde{\boldsymbol{\omega}},\boldsymbol{c},\tilde{\boldsymbol{c}}}{\arg\min}\ \mathcal{J}(\mathbf{d},\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{c})+\boldsymbol{\alpha_d}\mathcal{R}_d(\boldsymbol{d})+\boldsymbol{\alpha_x}\mathcal{R}_{\mathbf{x}}(\tilde{\boldsymbol{c}}), \\ \text{s.t.} \quad \begin{pmatrix}\mathbf{D} & -\mathbf{L} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{d}\\ \boldsymbol{\omega}\\ \boldsymbol{c}\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\mathbf{0} & \mathbf{0}\\ -\mathbf{I} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & -\mathbf{I}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\tilde{\boldsymbol{\omega}}\\ \tilde{\boldsymbol{c}}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mathbf{0}\\ \mathbf{0}\\ \mathbf{0}\end{pmatrix}, \end{cases} \tag{4.6}$$

其中，我们为问题 (4.1) 添加了一个新变量：$\tilde{\boldsymbol{\omega}}$，它由向量 $\tilde{\boldsymbol{\omega}}^1$、.....、$\tilde{\boldsymbol{\omega}}^{K-1}$ 依次拼接而成；与此同时，也加入了新的约束 $\tilde{\boldsymbol{\omega}}=\boldsymbol{\omega}$。

如附录B.3所述，根据变量的高度层索引将其划分为两个子集（分别属于 $\mathcal{K}'=\{0,2,4,\ldots,K-2\}$ 或 $\mathcal{K}''=\{1,3,5,\ldots,K-1\}$），约束优化问题 (4.6) 符合附录 B.1 中介绍的通用交替方向乘子法框架。

Let

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(\mathbf{d}^k,\boldsymbol{\omega}^k,\boldsymbol{\omega}^{k+1},\boldsymbol{c}^k)=&\frac{\alpha_d^k}{2}\|\boldsymbol{\Delta}_m\mathbf{d}^k\|_2^2+\frac{1}{2}\|\boldsymbol{\delta}(\boldsymbol{\omega}^k,\boldsymbol{\omega}^{k+1})\|_2^2\\&+\frac{\rho}{2}\|\delta p^k\operatorname{div}\mathbf{d}^k-\boldsymbol{\omega}^k+\boldsymbol{\omega}^{k+1}+\mathbf{u}_{\mathbf{d}^k}^{(i)}\|_2^2+\frac{\rho}{2}\|\mathbf{c}^k-\tilde{\mathbf{c}}^{k\,(i)}+\mathbf{u}_{\mathbf{c}^k}{}^{(i)}\|_2^2,\end{aligned}$$

并令

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(\mathbf{d}^k,\boldsymbol{\omega}^k,\boldsymbol{\omega}^{k+1},\boldsymbol{c}^k)&=\mathcal{F}(\mathbf{d}^k,\boldsymbol{\omega}^k,\boldsymbol{\omega}^{k+1},\boldsymbol{c}^k)+\sum_{k'\in\{k,k+1\}}\frac{\rho}{2}\|\boldsymbol{\omega}^{k'}-\tilde{\boldsymbol{\omega}}^{k'\,(i)}+\mathbf{u}_{\boldsymbol{\omega}^{k'}}{}^{(i)}\|_2^2,\\ \tilde{\mathcal{G}}(\mathbf{d}^k,\tilde{\boldsymbol{\omega}}^k,\tilde{\boldsymbol{\omega}}^{k+1},\boldsymbol{c}^k)&=\mathcal{F}(\mathbf{d}^k,\tilde{\boldsymbol{\omega}}^k,\tilde{\boldsymbol{\omega}}^{k+1},\boldsymbol{c}^k)+\sum_{k'\in\{k,k+1\}}\frac{\rho}{2}\|\boldsymbol{\omega}^{k'\,(i+1)}-\tilde{\boldsymbol{\omega}}^{k'}+\mathbf{u}_{\boldsymbol{\omega}^{k'}}{}^{(i)}\|_2^2,\end{aligned}$$

其中，我们将式 (3.5) 中定义的数据项 $\frac{1}{2}\|\boldsymbol{\delta}(\boldsymbol{\theta},\ \mathbf{y})\|_2^2$ 记为 $\frac{1}{2}\|\boldsymbol{\delta}(\boldsymbol{\omega}^k,\ \boldsymbol{\omega}^{k+1})\|_2^2$，以简化记号，并明确显示其对垂直风（$\boldsymbol{\omega}^k,\ \boldsymbol{\omega}^{k+1}$）或（$\tilde{\boldsymbol{\omega}}^k,\ \tilde{\boldsymbol{\omega}}^{k+1}$）的依赖关系，具体取决于 k 是否属于 $\mathcal{K}'$ 或 $\mathcal{K}''$。利用所提出的分裂方法，可通过交替方向乘子法迭代求解问题 (4.6) 的一个局部最小值：

重复以下三个步骤，直至收敛

$$\begin{cases} (\mathbf{d}^{k\,(i+1)}, \boldsymbol{\omega}^{k\,(i+1)}, \boldsymbol{\omega}^{k+1\,(i+1)}, \boldsymbol{c}^{k\,(i+1)}) = \underset{\mathbf{d}^k, \boldsymbol{\omega}^k, \boldsymbol{\omega}^{k+1}, \boldsymbol{c}^k}{\arg\min} \mathcal{G}(\mathbf{d}^k, \boldsymbol{\omega}^k, \boldsymbol{\omega}^{k+1}, \boldsymbol{c}^k),\ k \in \mathcal{K}' \\ (\mathbf{d}^{k\,(i+1)}, \tilde{\boldsymbol{\omega}}^{k\,(i+1)}, \tilde{\boldsymbol{\omega}}^{k+1\,(i+1)}, \boldsymbol{c}^{k\,(i+1)}) = \underset{\mathbf{d}^k, \tilde{\boldsymbol{\omega}}^k, \tilde{\boldsymbol{\omega}}^{k+1}, \boldsymbol{c}^k}{\arg\min} \tilde{\mathcal{G}}(\mathbf{d}^k, \tilde{\boldsymbol{\omega}}^k, \tilde{\boldsymbol{\omega}}^{k+1}, \boldsymbol{c}^k),\ k \in \mathcal{K}'' \end{cases}, \tag{4.7}$$

$$\tilde{\mathbf{c}}^{k,\ell\,(i+1)}(s) = \mathrm{soft}_{\frac{\alpha_k}{\rho}}\left(\mathbf{c}^{k,\ell\,(i+1)}(s) + \mathbf{u}_{\mathbf{c}}^{k,\ell\,(i)}(s)\right), k \in \mathcal{K}, \ell \in \{1,2,3\}, s : \chi(s) \in \Omega_m, \tag{4.8}$$

$$\begin{cases} \mathbf{u}_{\mathbf{d}^k}^{(i+1)} = \mathbf{u}_{\mathbf{d}^k}^{(i)} + \delta p^k \mathrm{div}\mathbf{d}^{k\,(i+1)} - \boldsymbol{\omega}^{k\,(i+1)} + \boldsymbol{\omega}^{k+1\,(i+1)}, & k \in \mathcal{K}', \\ \mathbf{u}_{\mathbf{d}^k}^{(i+1)} = \mathbf{u}_{\mathbf{d}^k}^{(i)} + \delta p^k \mathrm{div}\mathbf{d}^{k\,(i+1)} - \tilde{\boldsymbol{\omega}}^{k\,(i+1)} + \tilde{\boldsymbol{\omega}}^{k+1\,(i+1)}, & k \in \mathcal{K}'', \\ \mathbf{u}_{\mathbf{c}}^{(i+1)} = \mathbf{u}_{\mathbf{c}}^{(i)} + \boldsymbol{c}^{(i+1)} - \tilde{\boldsymbol{c}}^{(i+1)}, & \\ \mathbf{u}_{\boldsymbol{\omega}^k}^{(i+1)} = \mathbf{u}_{\boldsymbol{\omega}^k}^{(i)} + \boldsymbol{\omega}^{k\,(i+1)} - \tilde{\boldsymbol{\omega}}^{k\,(i+1)}, & k \in \mathcal{K}. \end{cases} \tag{4.9}$$

系统 (4.7) 中出现的两个连续子步骤内的 $K/2$ 最小化问题可以独立执行。换言之，这种独立性使我们能够依次执行这两个子步骤，每个子步骤都由 $K/2$个并行最小化过程构成。另两个步骤，即 (4.8) 和 (4.9)，可针对不同的索引 $k \in \mathcal{K} = \mathcal{K}' \cup \mathcal{K}''$ 独立执行。因此，只要能够并行求解 $K/2$ 最小化问题，所提出的方案就能以与 K 无关的总计算时间 $\mathcal{O}(m)$ 求解 (3.1)。

对于第 4.1 节提出的求解器，我们注意到，软约束问题 (3.2) 可以通过步骤 (4.7)-(4.9) 求解，但需将 (4.9) 中前两个更新替换为 $\mathbf{u}^{(i+1)}{}_{\mathbf{d}_k} = 0$。

4.3. 处理非凸性。

4.3.1. ADMM 收敛。 在温和条件下，ADMM算法收敛到局部最小值这一结论，对于非凸目标函数是有保证的，详见 [38]。对于我们的优化问题 (3.1)，一个充分假设是目标函数具有强制性。由于正则化项 (3.7) 和 (3.1) 中的线性约束，很容易证明对于固定的 $\mathbf{d}$，目标函数关于变量 $\boldsymbol{\omega}$ 和 $\mathbf{x}^{t_1}$具有强制性。然而，对于形式如 (3.6) 的正则化项，无法保证其关于 $\mathbf{d}$ 的强制性。为验证强制性假设，可以在代价函数中添加一项形式为$\delta\|\mathbf{d}\|_2^2$ 的 Tikhonov 正则项，其中 δ 为一个高于机器精度的微小正数。

4.3.2. 高效优化。 (4.7) 中的两个并行最小化问题均为非凸但可微的问题。可以使用梯度下降法高效求解，例如采用有限内存拟牛顿下降法，即 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (L-BFGS) 方法，并结合基于强 Wolfe 条件的线搜索程序 [29]。这类下降方法每次迭代的复杂度随 m线性增长，此外还需计算 (4.7) 中目标函数梯度的复杂度。值得一提的是，有趣的是，在非常宽松的条件下，为保证 ADMM 收敛，(4.7) 中的最小化问题不必精确求解，参见例如， [13, 定理 8]。

然而，众所周知，由于代价函数的非线性，大位移很难估计。为解决这一问题，按照 [12] 和

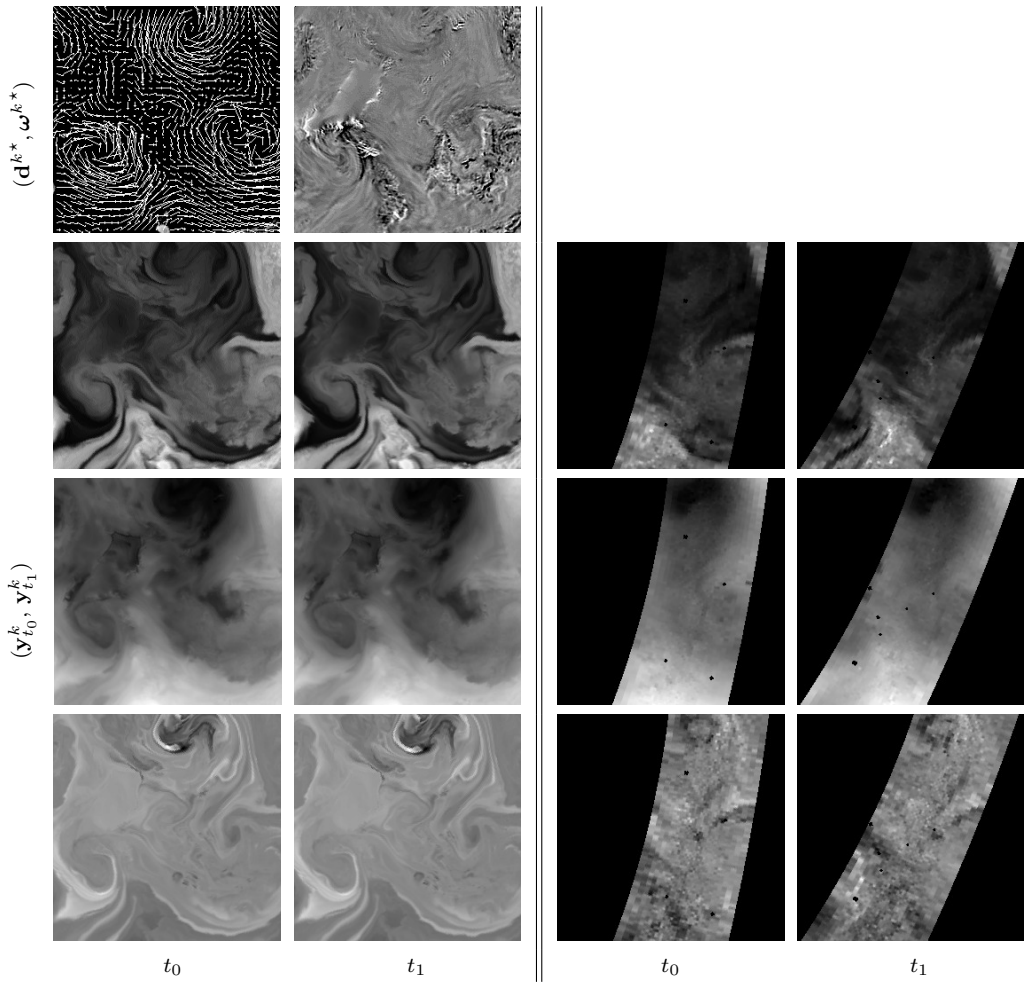


FIG. 4.1. *Horizontal AMVs at altitude 800-850 hPa with the vertical wind at the lower boundary (800 hPa) from the ECMWF simulation (first row). Pairs of image observations (3 lats rows): humidity (above), temperature (middle), ozone concentration (below) for ECMWF or IASI datasets (black pixels correspond to missing data).*

后者在 [26, 20, 33, 28],中研究过的优化过程避免了启发式的标准多分辨率光流初始化，转而依赖对位移变量 $\mathbf{d}$ 的小波展开进行估计（使用具有 10 个消失矩的 Coiflet 小波）。该策略是在算法的迭代过程中，估计项数逐渐增加的小波级数，新增项对应于越来越精细的空间尺度。随后利用小波分解，高效计算正则化项（3.6） [26]中的拉普拉斯算子。相应地，还使用类似的小波展开来扩展图像变量 $\mathbf{x}^{t_1}$ 。计算代价函数梯度的快速求值过程与 [20]中提出的方法相似。快速求值依赖于快速小波变换，以及以对数线性时间计算的快速傅里叶变换。总之，该算法的整体复杂度为 $\mathcal{O}(m \log m)$。

5. 数值评估。

5.1. 数据基准。 下文将详细介绍两个基于真实世界气象观测构建的不同数据集。

- **ECMWF 数据**。 欧洲中期天气预报中心（ECMWF）的业务数值模式提供了观测数据，以及相应的三维运动场真实廓线 [36]。其中既没有噪声，也没有缺失的图像观测。

- **IASI 数据**。 Metop-A 和 Metop-B 卫星搭载的红外大气探测干涉仪（IASI）提供了不完整的观测数据 [8],，而同步的 ECMWF 数值模式则被视为真实值的替代参照。利用该数据集估计稠密三维大气运动矢量场的垂直廓线极具挑战性，因为图像中存在大量缺失观测数据，且剩余观测还受到严重噪声污染。

在这两个数据集中，观测由两个连续的垂直廓线组成，涵盖 3 种物理量，即气压平均大气湿度、温度和臭氧浓度。观测数据汇集为两个由三变量（可能不完整）图像构成的层堆栈。从 1000 百帕到 400 百帕等压面的高度被离散为 $K = 8$ 层。具体而言，8 幅气压平均湿度、温度和臭氧浓度图像，是对高度区间 $(p^{k+1},\ p^k) \in \{$ (1000，950)，(950，900)，(900，850)，(850，800)，(800，700)，(700，600)，(600，500)，(500，400)}计算式 (2.1) 所得的积分，其中被积函数是分段常数近似，由 ECMWF 或 IASI 提供的 137 个图像波段构建。每幅图像的维度为 $m = 256 \times 256$。

IASI数据包含不完整的观测图，而ECMWF数据则提供密集的观测。因此，对于IASI数据集，需要联合估计图像变量$\mathbf{x}^{t_1}$ 和三维AMV（$\mathbf{d}\ \boldsymbol{\omega}$）；而对于ECMWF数据集，只需估计后两种变量。

如前所述，在ECMWF数据的情形下，我们拥有生成观测$\mathbf{y}$的真实参数 $\boldsymbol{\theta}^\star$。在IASI数据的情形下，同步的欧洲中期天气预报中心数据将作为真实参数$\boldsymbol{\theta}^\star$的替代。我们特别指出，该真实值仅用于分析算法的性能，不会作为所提出方法的输入。

5.2. 算法基准测试与评估标准。我们将提出的用于求解问题（3.1）和（3.2）的求解器与三种当前最先进的算法进行比较。

- **2D 模型**。 该算法估计水平二维大气运动矢量，并在垂直风设为零 $\boldsymbol{\omega} = 0$ 且满足 $\rho = 0$的条件下求解问题 (3.2)，即不施加约束 (3.3)。该估计器构成我们的参考方法：在每个大气层上独立进行二维光流估计 [12], ，并结合缺失图像观测的重建，其思路与文献 [18]一致。

- **2D 不可压缩模型（软约束）**。该算法估计水平二维大气运动矢量，在垂直风矢量保持为零的条件下求解问题 (3.2) $\boldsymbol{\omega} = 0$。在这种垂直风为零的情况下，(3.3) 简化为软零散度约束。该估计器构成了另一种版本的

参考二维模型，我们在其中添加了无散约束，类似于 [26, 20]。

- **3D 模型**。 该算法估计三维AMV，通过求解问题 (3.2) 并满足$\rho = 0$，即不施加静力约束 (3.3)。该估计器实现了 [21]，中提出的三维模型的增强版本，其中运动估计与缺失观测重建相结合[4]。
- **3D 静力模型（软约束）**。 该算法实现了针对问题 (3.2) 的所提求解器。
- **3D 静力模型（硬约束）**。 该算法实现了针对问题 (3.1) 的所提求解器。

变形约束 (2.9) 和静力约束 (2.7) 的自由参数，即 γ^k 和 δp^k，通过 ECMWF 数据以最小均方误差的方式学习得到。代价函数 (3.1) 或 (3.2) 中的正则化参数 $\boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{d}}$、$\boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{x}}$ 和 ρ 根据专家知识设定。值得一提的是，所有算法均从将未知的大气运动矢量和图像场初始化为零开始。

比较第 k层估计的水平 AMV 分量精度时，常用的准则是归一化平均水平端点误差（EPE） [10]，我们将其记为向量 $\hat{}\mathbf{d^k}$

$$\text{Horizontal EPE}(k) = \frac{\sum_{j:\varkappa(j)\in\Omega_{obs}} \|\mathbf{d^{k\star}}(j) - \hat{\mathbf{d}}^{\mathbf{k}}(j)\|_2}{\sum_{j:\varkappa(j)\in\Omega_{obs}} \|\mathbf{d^{k\star}}(j)\|_2}, \tag{5.1}$$

其中，Ω_{obs} 在此处及下文均表示具有连续观测的像素网格，即，$\Omega_{obs} = \Omega_{obs}^{t_0\ k} \cap \Omega_{obs}^{t_1\ k}$，。为全面评估三维大气运动矢量估计的精度，我们还采用垂直风的归一化均方根误差（RMSE）作为补充准则

$$\text{Vertical RMSE}(k) = \left(\frac{\sum_{j:\varkappa(j)\in\Omega_{obs}} |\boldsymbol{\omega^{k\star}}(j) - \hat{\boldsymbol{\omega}}^{\boldsymbol{k}}(j)|^2}{\sum_{j:\varkappa(j)\in\Omega_{obs}} |\boldsymbol{\omega^{k\star}}(j)|^2} \right)^{1/2}, \tag{5.2}$$

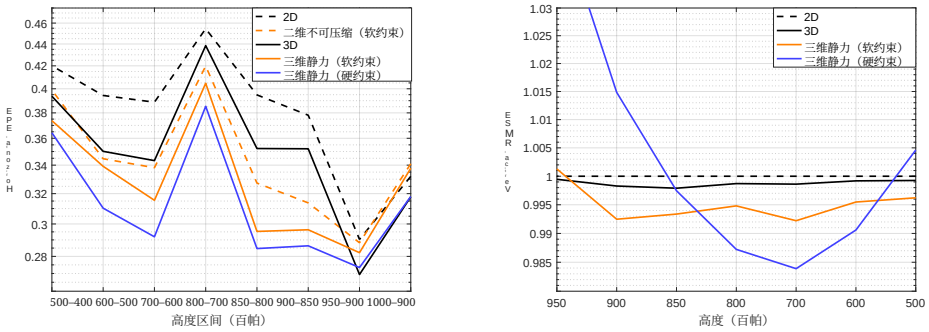
其中，$\hat{}\boldsymbol{\omega^k}$ 表示第 k层的垂直风估计值向量。

5.3. 结果。 图 5.1 绘出了第 5.2 节基准测试中各算法在两个数据集上的误差准则 (5.1) 和 (5.2) 随高度变化的剖面。

我们关注上方的图，即 ECMWF 数值天气模拟所提供的无噪声且完整的观测情境。我们看到，三维模型相较于二维模型，以及引入约束（二维模型中的不可压缩性约束，或三维模型中的静力平衡约束）都具有重要意义。具体而言，在三维模型中通过垂直风考虑相互作用的水平大气运动矢量，可使归一化水平端点误差系统性地改善约 5%。我们发现，三维模型也能系统性地降低垂直均方根误差。不过，误差降幅仅为一小部分。事实上，尽管估计得到的垂直风场的空间结构总体上与真实值一致（如图 5.2 所示），但垂直风速大小被严重低估，导致归一化均方根误差略低于 1。接下来，

[4]除了三维模型有所不同外，我们的求解器还与 [21]的算法有所区别：它采用基于 ADMM 分裂的高效高维优化过程（见第 4.2 节），并使用众所周知的 L-BFGS 过程进行高效最小化，同时采用基于小波的多分辨率框架（见第 4.3.2 节）。

ECMWF



IASI

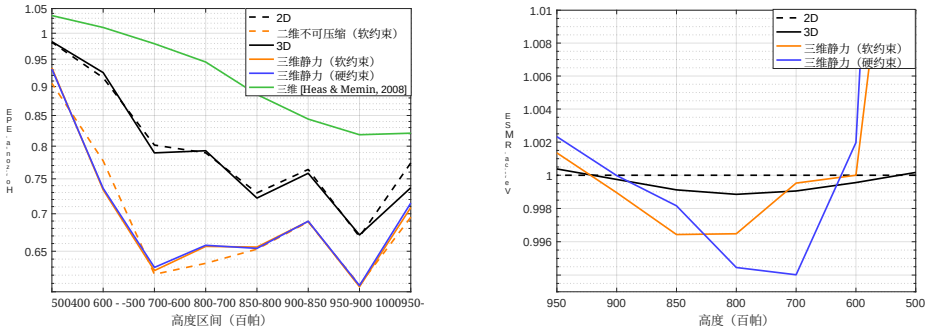


FIG. 5.1.

Profiles of error criteria 5 1 *and* 5 2 *computed for the proposed and state-of-the-* (.) (.) *art algorithms using the ECMWF or the IASI observations.*

在二维模型中引入不可压缩性的软约束，或在三维模型中引入静力平衡的软约束，可进一步略微降低误差准则；与参考二维模型相比，受约束三维模型的归一化水平端点误差最多可改善 10%。最后，静力平衡的硬约束能够得到 EPE 指标下最佳的水平大气运动矢量估计。我们注意到，对于远离地球表面及对流层顶边界层处的垂直风估计而言，这些约束在均方根误差方面具有意义，这表明零风边界条件的假设多少有些不妥。

下面来看下方的图，即由 IASI 测得的含噪且不完整的观测。对于这一数据情境，我们可以使用 [21] 中提出的三维模型求解器所取得的当前最先进成果。该求解器是目前用于从 IASI 数据中提取三维AMV的当前最先进算法，欧洲业务卫星机构（EUMETSAT）现将其作为演示原型，用于从太空监测天气、气候和环境。我们立即注意到，该当前最先进算法的结果与我们的三维模型求解器结果不同（关于模型和求解器之间差异的更多详情，请参见第 5.2 节及其脚注）。具体而言，在两个评估标准上，我们基准测试中的所有算法都显著优于当前最先进方法（请注意，相应的垂直均方根误差未显示，因为其值远高于 1）。在这种含噪且观测缺失的情境下，水平端点误差显然

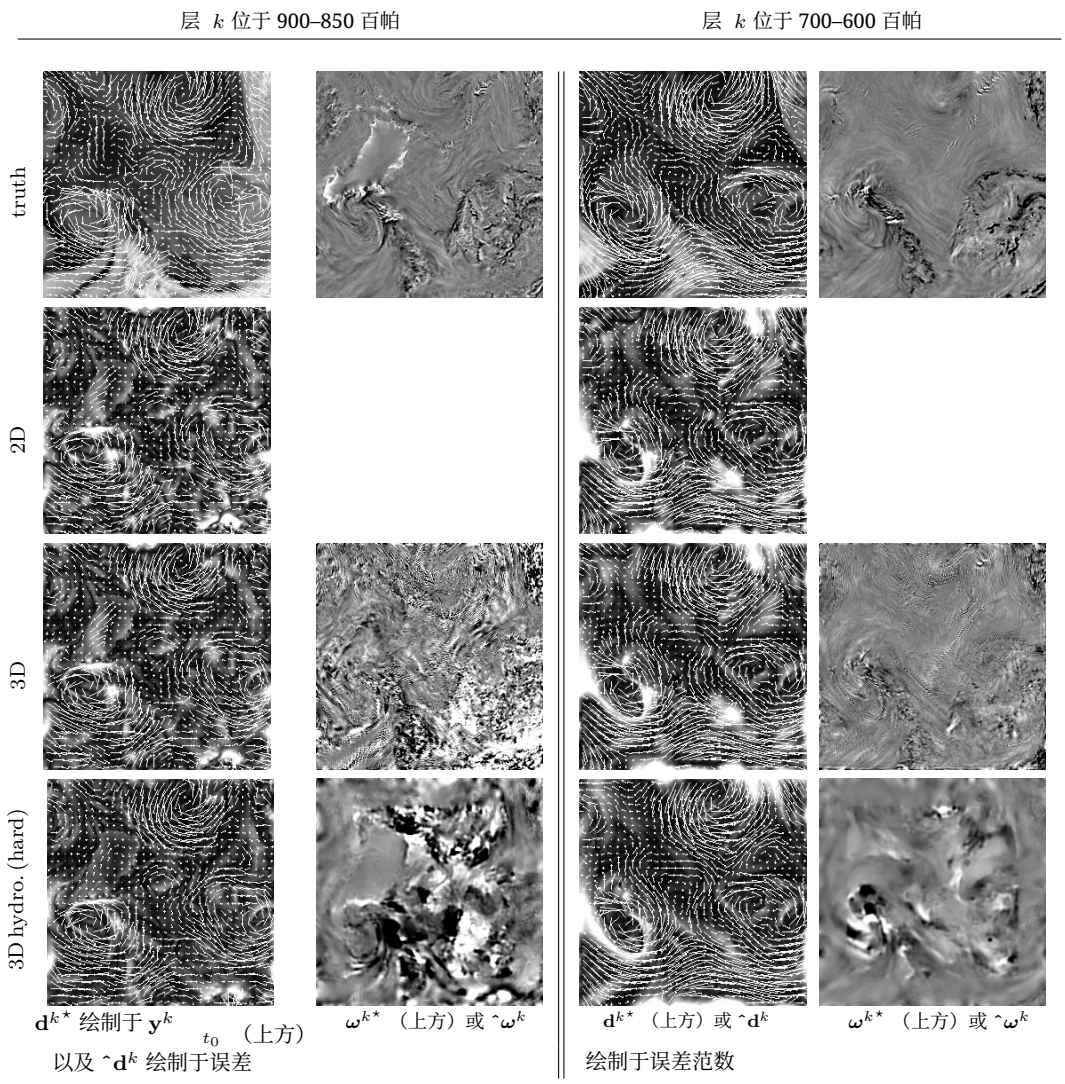


FIG. 5.2。 *Horizontal and vertical components of AMV fields estimated from the ECMWF data at two different altitudes. Estimated vector fields* $\mathbf{d}^k$ *for the 2D 3D or 3D hydrostatic models* $\hat{}\mathbf{d}$*,(three last rows) are superimposed on their related map of horizontal EPE whose* j*-th component is* $\| \mathbf{d}^{k\star} j - \mathbf{d}^k j \|_2$*. The ground truth vector fields* $\mathbf{d}^{k\star}$ *(row above) are superimposed on the related humidity field component of observations* $\mathbf{y}^k_{t_0}$*.*

高于 ECMWF 的结果（约高 40%）。具体来说，在评论基准测试中的算法时，我们注意到，就水平端点误差而言，二维模型和三维模型的表现非常相似，与当前最先进方法相比提升约 15%。加入不可压缩性或静力（软或硬）约束后，误差可降低约 35%。精度的显著提升表明，含噪且不完整的观测，加上先验约束所提供的散度突增信息，足以刻画流场中的主要无散结构。然而，二维模型与三维模型之间差异很小，也就是说，垂直风对水平大气运动矢量的相互作用影响甚微；这表明，与 ECMWF 数据集不同，IASI 观测并不丰富

不足以准确刻画较弱的散度结构（无散分量的平均幅度约为散度的两倍），也不足以刻画大气流的垂直分量。尽管如此，我们观察到垂直RMSE剖面呈现出与ECMWF数据相同的趋势，但变化范围较小。

完成定量评估后，我们转向定性分析，比较不同算法估计的大气运动矢量与真实值在空间结构上的差异。

对于ECMWF数据，图5.2显示，所有算法都能准确估计水平风中的大型涡旋结构；而从二维模型转向三维模型，再加入静力平衡约束后，中小尺度上的误差往往会消失。我们观察到，三维模型大致恢复了大气运动矢量垂直分量中的大尺度结构，尽管这些结构受到强噪声的干扰。静力平衡约束平滑了这些噪声，并显现出垂直风中大部分大到中尺度结构。图5.1所示结果表明，采用三维模型能提高水平风估计的准确性；然而，鉴于垂直RMSE剖面显示的准确度提升有限，我们原本并未预期该模型能够捕捉垂直风的整体空间结构。一种可能的解释是，所提方法核心处的高维、强非凸优化陷入了反映微弱垂直风状态的局部极小值。这会使其无法获得真实值所示的幅度，但仍能捕捉垂直风的整体空间趋势。

最后，我们通过图 5.3 对 IASI观测背景下的大气运动矢量估计进行了定量分析。我们很快便意识到，要从这组含噪且不完整的数据中提取三维大气运动矢量，面临着巨大挑战。更确切地说，二维和三维模型只能部分捕捉到观测附近水平流的主要涡旋结构。引入静力平衡约束后，结果显著改善：大多数涡旋都能在观测区域内得到准确估计，并且还能外推至这些区域之外。大气运动矢量的垂直分量与此前使用ECMWF 数据进行的实验所得估计呈现相同趋势。不同之处在于，使用 IASI 数据时，只有在存在连续观测的区域内才能估计空间结构，而且垂直风结构受到的噪声干扰更强。

6. 结论与展望。本研究基于大气热力学和流体静力平衡，提出了一种方法，用于根据高光谱探测仪采集的不完整图像观测，估计三维大气运动矢量场的垂直廓线。本文的贡献包括：*i)* 构建一种符合地球物理规律的光流逆模型，其形式为约束能量最小化；*ii)* 设计一种高效且复杂度较低的算法，以解决这一难题。

待最小化的能量基于绝热大气热力学。更确切地说，该能量衡量由气压平均水平风驱动的温度、湿度和臭氧浓度场分层输送所产生的偏差；这些场通过垂直层边界处的垂直风相互作用。AMV 场应*in sus* 处于静力平衡：流场的气压平均水平散度必须补偿层的下边界和上边界处垂直风之差。

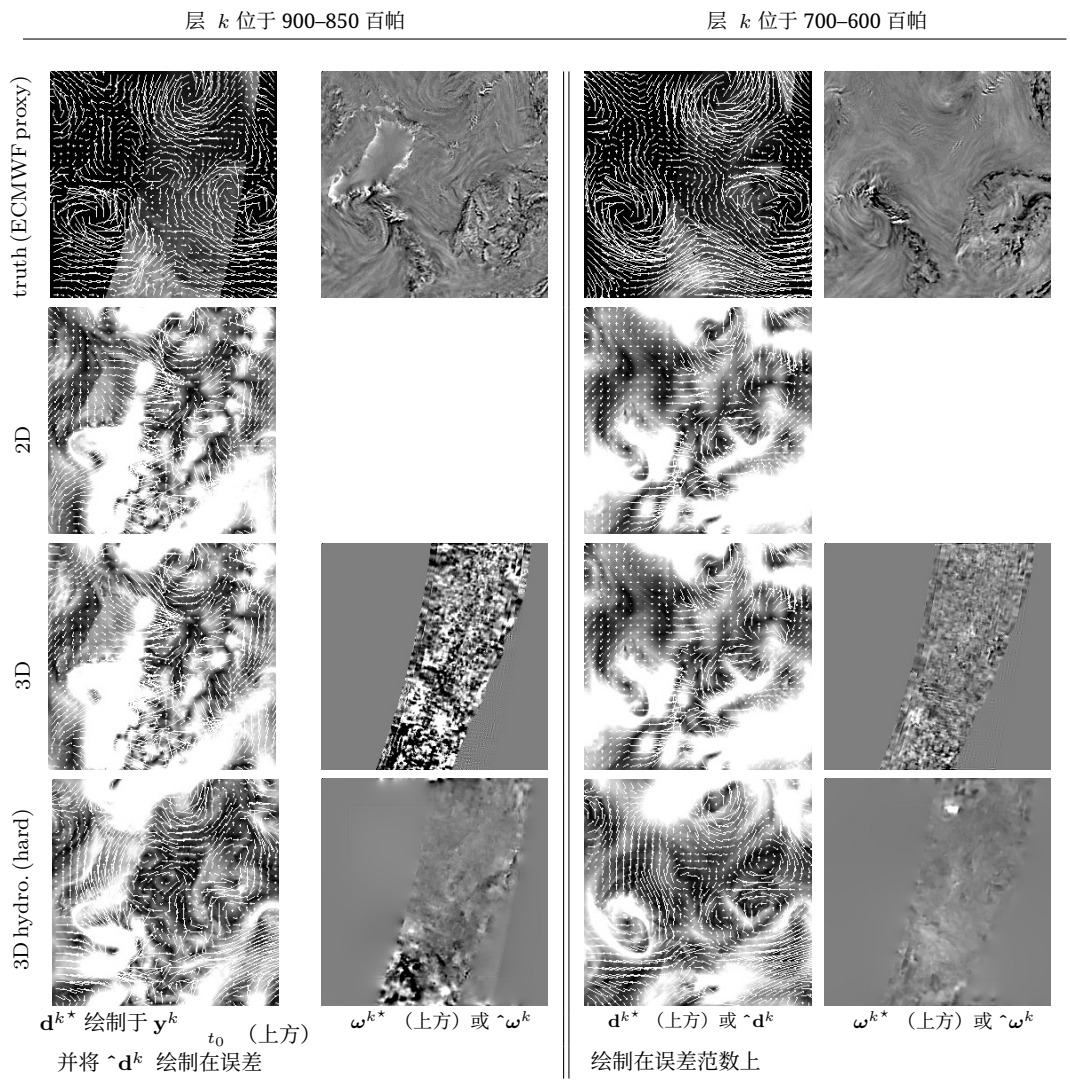


FIG. 5.3。 *Horizontal and vertical components of AMV fields estimated from the IASI data at two different altitudes. Estimated vector fields* $\hat{\mathbf{d}}^k$ *for the 2D 3D or 3D hydrostatic models, (three last rows) are superimposed on their related map of horizontal EPE whose* j*-th component is* $\|\mathbf{d}^{k\star}(j) - \hat{\mathbf{d}}^{k}(j)\|_2$*. The ground truth vector fields, the proxy ECMWF horizontal AMVs fields* $\mathbf{d}^{k\star}$ *(row above) are superimposed on the related humidity field component of noisy and incomplete observations* $\mathbf{y}^k_{t_0}$*.*

基于不完整观测进行 AMV 估计，可表述为一个线性约束的非凸高维能量最小化问题，其中需要联合优化的变量包括三维 AMV 场廓线，以及温度、湿度和臭氧浓度场的廓线。我们将全局估计问题拆分为一组独立的光流子问题，并添加一组匹配约束，强制拆分后的变量彼此一致；借助 ADMM框架，我们转而求解一组相互独立的低维无约束可微最小化问题。通过结合 AMV 的多分辨率小波展开与 L-BFGS 优化方案，可以高效处理这些子问题的非凸性。由此得到的

全局算法具有较优的复杂度：其复杂度与层数无关，并随图像像素数量呈对数线性增长。

得益于 Metop卫星上 IASI 提供的真实高光谱观测，以及 ECMWF 提供的同步真实数值天气预报数据，我们在数值评估中表明，地球物理建模和优化在定量与定性方面均具有重要意义。具体而言，与当前最先进水平相比，我们发现估计误差降低了约 35%。

尽管全面评估所提出算法的能力超出了本文的范围，但在投入业务应用之前，仍需开展此类评估。一项尚待开展的重要研究，是实证评估估计得到的 AMV廓线 对正则化参数廓线及层数的敏感性。对于 IASI观测而言，这项研究尤为关键，有助于校准一组最优参数（即能够使估计误差最小化的参数）。鉴于在 ECMWF数据集上获得的结果，我们预计，此类研究将使二维模型与三维模型之间的性能差异更加显著。当然，未来的工作还将涉及在更长测试时段内验证该算法。

附录 A. 大气守恒定律。本节介绍由大气守恒定律在气压区间 $[p^k, p^{k+1}]$ 内进行垂直积分得到的二维连续模型。

A.1. 与运动学方法相关的约束。通过采用等压坐标系（x， y， p），可以推导出适用于红外图像测量的三维可压缩大气运动模型。与标准高度坐标（x， y， z）相比，等压坐标具有优势：它能够以简单的方式处理大气流的可压缩性。在此坐标系中，气压函数 p 充当垂直坐标。请注意，当气压用作垂直坐标时，计算水平偏导数必须保持 p 不变。在等压坐标系中，垂直风定义为 $\omega = \frac{dp}{dt}.$ 。采用静力假设 $\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g,$ （该假设将气压与密度 ρ 和重力 g 联系起来），在（x， y， z）高度坐标系中展开 ω， 可得

$$\omega = \frac{\partial p}{\partial t} + u\frac{\partial p}{\partial x} + v\frac{\partial p}{\partial y} - \mathrm{w}\rho g, \tag{A.1}$$

其中偏导数算子和垂直速度 w 均处于 z 坐标系中。

根据 (A.1)，值得注意的是，质量守恒约束 (2.6) 构成了所谓运动学方法的核心，该方法应用于气象学中以求解垂直运动[5]

A.2. 与绝热方法相关的约束。假设我们忽略非绝热加热，并像大气研究中通常所做的那样，不对平流层以下的大气化学进行建模 [27]。那么，将.....表示为

[5]对于天气尺度运动，一个很好的近似是令 $\omega \simeq -\mathrm{w}\rho g.$ 因此，使用这一近似——垂直运动可表示为：

$$\mathrm{w}(s^{k+1}) = \frac{\rho(s^k)\mathrm{w}(s^k)}{\rho(s^{k+1})} - \frac{\delta p^k}{g\rho(s^{k+1})}\nabla_s \cdot (\mathbf{v}^k), \tag{A.2}$$

其中，就气压层 p^k 和 p^{k+1}而言，我们在高度坐标系 (x, y, z) 中定义等压面 $s^k(x, y)$ 和 $s^{k+1}(x, y)$。由 (A.2) 给出的垂直风恰好对应于 $kinematic$ 估计，见 [24]。

等压系统中的热力学第一定律和臭氧动力学，二者均可得到形式为 [24] 的输运方程

$$\frac{\partial \boldsymbol{\rho}}{\partial t} + u\frac{\partial \boldsymbol{\rho}}{\partial x} + v\frac{\partial \boldsymbol{\rho}}{\partial y} + \gamma\omega = 0, \tag{A.3}$$

分别为 $\gamma = \left(\frac{\partial T}{\partial p} - \frac{1}{c_p\rho}\right)$、$\gamma = \frac{\partial q}{\partial p}$ 和 $\gamma = \frac{\partial o}{\partial p}$，对应温度 $\boldsymbol{\rho} = T$、湿度 $\boldsymbol{\rho} = q$ 或臭氧浓度 $\boldsymbol{\rho} = o$ 变量。c_p 表示定压干空气比热。使用式（A.3）估计温度 $\boldsymbol{\rho} = T$ 对应的垂直风，称为绝热方法。[6] 我们感兴趣的是对式（A.3）进行垂直积分，以关联压力平均温度场的演变与气压平均水平位移。从这一角度出发，我们假设气压区间 $[p^k, p^{k+1}]$ 内的水平位移等于气压平均水平位移，即，$(u,\ v) \simeq \mathbf{v}^k$ 在 $[p^k, p^{k+1}]$中。利用梯形法则近似计算式（A.3）最后一项的垂直积分，并对式（A.3）其余项中的导数和积分进行反序运算（假设满足光滑性条件），通过对式（A.3）进行垂直积分，我们得到偏微分方程（2.3）的（三个分量之一）。γ^k 的各个分量分别对应于 $\frac{\partial T}{\partial p}(p^k)$ $-\frac{1}{c_p\rho}(p^k)$ $\frac{\partial q}{\partial p}(p^k)$ 或 $\frac{\partial o}{\partial p}(p^k)$。我们指出，垂直积分采用梯形法则，是为了确保模型变量之间的一致性：垂直积分后的动力学取决于层界面处的垂直风，这与质量守恒约束（2.6）相同。

附录 B. ADMM 求解器。

B.1. ADMM 通用过程。交替方向乘子法（ADMM）关注以下类型的优化问题：

$$\min_{\boldsymbol{z}_1\in\Xi_1, \boldsymbol{z}_2\in\Xi_1} \mathcal{G}_1(\boldsymbol{z}_1) + \mathcal{G}_2(\boldsymbol{z}_2), \quad \text{s.t. } \mathbf{A}\boldsymbol{z}_1 = -\mathbf{B}\boldsymbol{z}_2, \tag{B.1}$$

其中 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{r\times n_1}$、$\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{r\times n_2}$, $\mathcal{G}_1 : \mathbb{R}^{n_1} \to \mathbb{R}$, $\mathcal{G}_2 : \mathbb{R}^{n_2} \to \mathbb{R}$ 是闭、适当的凸函数，Ξ_1, Ξ_2 是非空凸集。ADMM 是一种迭代过程，受著名的乘子法 [7]启发。它通过依次针对每个原始变量 $\boldsymbol{z}_1$ 和 $\boldsymbol{z}_2$最小化相应的增广拉格朗日函数，然后更新对偶变量 $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^r$，以求解 (B.1) 的极小值。形式上，ADMM递推式如下：

$$\boldsymbol{z}_1^{(i+1)} = \arg\min_{\boldsymbol{z}_1\in\Xi_1} \mathcal{G}_1(\boldsymbol{z}_1) + \frac{\rho}{2}\|\mathbf{A}\boldsymbol{z}_1 + \mathbf{B}\boldsymbol{z}_2^{(i)} + \mathbf{u}^{(i)}\|_2^2, \tag{B.2}$$

$$\boldsymbol{z}_2^{(i+1)} = \arg\min_{\boldsymbol{z}_2\in\Xi_2} \mathcal{G}_2(\boldsymbol{z}_2) + \frac{\rho}{2}\|\mathbf{A}\boldsymbol{z}_1^{(i+1)} + \mathbf{B}\boldsymbol{z}_2 + \mathbf{u}^{(i)}\|_2^2, \tag{B.3}$$

$$\mathbf{u}^{(i+1)} = \mathbf{u}^{(k)} + \mathbf{A}\boldsymbol{z}_1^{(i+1)} + \mathbf{B}\boldsymbol{z}_2^{(i+1)}, \tag{B.4}$$

其中 $\rho > 0$。

B.2. 对问题的具体化 (4.1)。为求解非凸且不可微的问题 (4.1)，我们使用附录 B.1 中介绍的形式体系，并令 $\boldsymbol{z}_1 = \begin{pmatrix} \boldsymbol{d} \\ \boldsymbol{\omega} \\ \boldsymbol{c} \end{pmatrix}$，

[6] 使用自然坐标，垂直运动为 $\mathrm{w} = {}^{1}\left(\frac{g}{c_p} + \frac{\partial T}{\partial z}\right)\left(\frac{\partial T}{\partial t} + u\frac{\partial T}{\partial x} + v\frac{\partial T}{\partial y}\right)$，其中，低层大气中的干绝热直减率 $\frac{\partial T}{\partial z}$ 可近似视为常数 [24]。

$\boldsymbol{z}_2 = \tilde{\boldsymbol{c}}$, $\Xi_1 = \mathbb{R}^{2Km} \times \mathbb{R}^{(K-1)m} \times \mathbb{R}^{3Km}$, $\Xi_2 = \mathbb{R}^{3Km}$, $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{D} & - & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \\ \mathbf{L}\ \mathbf{I} & & \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{4Km\times(6K-1)m}$ 和 $\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ - \\ \mathbf{I} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{4Km\times 3Km}$。由此得到 ADMM 优化步骤 (4.2) 和 (4.4)，并辅以 $\tilde{\boldsymbol{c}}^{(i+1)} = \arg\min_{\tilde{\boldsymbol{c}}} \|\tilde{\boldsymbol{c}}\|_1 + \frac{\rho}{2\boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{x}}} \|\boldsymbol{c}^{(i+1)} - \tilde{\boldsymbol{c}} + \mathbf{u}_{\tilde{\boldsymbol{c}}}^{(i)}\|_2^2$.后者所定义的优化问题有一个非常简单的解析解。事实上，右侧对应于ℓ_1 范数的近端算子的定义。相关研究已十分广泛（参见例如， [30, 第 6.5 节2]），并可通过软阈值算子 (4.5) 得到简单的解析解 (4.3)。

B.3. 问题 (4.6) 的具体化。我们将优化变量集合（ $\boldsymbol{\omega}$除外）拆分为两个子集 $\{\mathbf{d}\ \boldsymbol{c}、\ \tilde{\boldsymbol{c}}\} = \{\mathbf{d}'、\ \boldsymbol{c}'、\ \tilde{\boldsymbol{c}}'\} \cup \{\mathbf{d}''、\ \boldsymbol{c}''、\ \tilde{\boldsymbol{c}}''\}$，其中下标 $\cdot'$和 $\cdot''$分别表示由高度层编号 k 在 $\mathcal{K}' = \{0, 2, 4, \ldots, K-2\}$ 和 $\mathcal{K}'' = \{1, 3, 5, \ldots, K-1\}$ 中索引的变量子集。利用这一拆分，问题 (4.6) 可改写为

$$\begin{cases} \underset{\mathbf{d},\boldsymbol{\omega},\tilde{\boldsymbol{\omega}},\boldsymbol{c},\tilde{\boldsymbol{c}}}{\arg\min}\ \mathcal{J}'(\mathbf{d}', \boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{c}') + \mathcal{J}''(\mathbf{e}_{\mathbf{d}}'', \tilde{\boldsymbol{\omega}}, \boldsymbol{c}'') + \boldsymbol{\alpha}_{\boldsymbol{d}}\mathcal{R}_d(\boldsymbol{d}) + \boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{x}}\mathcal{R}_{\mathbf{x}}(\tilde{\boldsymbol{c}}), \\ \text{s.t.} \quad \begin{pmatrix} \mathbf{D} & -\mathbf{L} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{d} \\ \boldsymbol{\omega} \\ \boldsymbol{c} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{\omega}} \\ \tilde{\boldsymbol{c}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \end{cases} \tag{B.5}$$

其中 $\mathcal{J} = \mathcal{J}' + \mathcal{J}''$是将代价函数 $\mathcal{J}$分解为两个子代价函数 $\mathcal{J}'$和 $\mathcal{J}''$的分解，它们由向量分量 $\{\boldsymbol{\delta}_t^{k,\ell,s}(\boldsymbol{\theta},\ \mathbf{y})\}_{k,\ \ell,\ s,\ t}$的平方 ℓ_2范数定义，这些分量在式 (3.4) 中定义，索引 k 分别属于 $\mathcal{K}'$和 $\mathcal{K}''$（其他索引 $\ell \in \{1, 2, 3\}$、$s : \chi(s) \in \Omega_m$ 和 $t \in \{t_0, t_1\}$）。然后我们采用附录 B.1 中介绍的形式体系，其中

$$\boldsymbol{z}_1 = \begin{pmatrix} \boldsymbol{d}' \\ \boldsymbol{\omega} \\ \boldsymbol{c}' \\ \tilde{\boldsymbol{c}}'' \end{pmatrix},\ \boldsymbol{z}_2 = \begin{pmatrix} \boldsymbol{d}'' \\ \tilde{\boldsymbol{\omega}} \\ \tilde{\boldsymbol{c}}' \\ \boldsymbol{c}'' \end{pmatrix},\ \mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{D} & -\mathbf{L} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & -\mathbf{I} \end{pmatrix},\ \mathbf{B} = \begin{pmatrix} \mathbf{D} & -\mathbf{L} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & -\mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix},$$

$\Xi_1 = \mathbb{R}^{Km} \times \mathbb{R}^{(K-1)m} \times \mathbb{R}^{\frac{3Km}{2}} \times \mathbb{R}^{\frac{3Km}{2}}$, $\Xi_2 = \Xi_1$，其中 $\mathbf{A}$，$\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{(4K-1)m\times(5K-1)m}$。另外，为简化记号，对于定义在两个变量子集上的算子$\mathbf{D}$ 和$\mathbf{L}$ ，我们用相同的符号表示。由此得到以下 ADMM递推式:

$$\begin{cases} (\mathbf{d}'^{(i+1)}, \boldsymbol{\omega}^{(i+1)}, \boldsymbol{c}'^{(i+1)}) \\ \quad = \underset{\boldsymbol{d}',\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{c}'}{\arg\min}\ \mathcal{J}'(\mathbf{d}', \boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{c}') + \sum_{k\in\mathcal{K}'} \frac{\alpha_d^k}{2} \|\boldsymbol{\Delta}_m\, \mathbf{d}'^k\|_2^2 + \frac{\rho}{2}\|\mathbf{c}' - \tilde{\mathbf{c}}'^{\,(i)} + \mathbf{u}_{\mathbf{c}'}{}^{(i)}\|_2^2 \\ \qquad\qquad + \frac{\rho}{2}\|\boldsymbol{\omega} - \tilde{\boldsymbol{\omega}}^{(i)} + \mathbf{u}_{\boldsymbol{\omega}}^{(i)}\|_2^2 + \frac{\rho}{2}\|\mathbf{D}\mathbf{d}' - \mathbf{L}\,\boldsymbol{\omega} + \mathbf{u}_{\mathbf{d}'}^{(i)}\|_2^2 \\ \tilde{\boldsymbol{c}}''^{(i+1)} = \underset{\tilde{\boldsymbol{c}}''}{\arg\min} \|\tilde{\boldsymbol{c}}''\|_1 + \sum_{k\in\mathcal{K}''} \frac{\rho}{2\alpha_{\mathbf{x}}^k} \|\boldsymbol{c}''^{k(i+1)} - \tilde{\boldsymbol{c}}''^k + \mathbf{u}_{\boldsymbol{c}''^k}^{(i)}\|_2^2, \end{cases} \tag{B.6}$$

$$
\begin{cases}
(\mathbf{d}''^{(i+1)}, \tilde{\boldsymbol{\omega}}^{(i+1)}, \boldsymbol{c}''^{(i+1)}) \\
\qquad = \underset{\boldsymbol{d}'', \tilde{\boldsymbol{\omega}}, \boldsymbol{c}''}{\arg\min}\, \mathcal{J}''(\mathbf{d}'', \tilde{\boldsymbol{\omega}}, \boldsymbol{c}'') + \sum_{k\in\mathcal{K}''} \frac{\alpha_d^k}{2} \|\boldsymbol{\Delta}_m\, \mathbf{d}''^k\|_2^2 + \frac{\rho}{2}\|\mathbf{c}'' - \tilde{\mathbf{c}}''^{\,(i)} + \mathbf{u}_{\mathbf{c}''}^{\,(i)}\|_2^2 \\
\qquad\qquad + \frac{\rho}{2}\|\boldsymbol{\omega}^{(i+1)} - \tilde{\boldsymbol{\omega}} + \mathbf{u}_{\boldsymbol{\omega}}^{(i)}\|_2^2 + \frac{\rho}{2}\|\mathbf{D}\mathbf{d}'' - \mathbf{L}\,\tilde{\boldsymbol{\omega}} + \mathbf{u}_{\mathbf{d}''}^{(i)}\|_2^2 \\
\tilde{\boldsymbol{c}}'^{(i+1)} = \underset{\tilde{\boldsymbol{c}}'}{\arg\min} \|\tilde{\boldsymbol{c}}'\|_1 + \sum_{k\in\mathcal{K}'} \frac{\rho}{2\alpha_{\mathbf{x}}^k} \|\boldsymbol{c}'^{k(i+1)} - \tilde{\boldsymbol{c}}'^{k} + \mathbf{u}_{\boldsymbol{c}'^k}^{(i)}\|_2^2,
\end{cases}
\tag{B.7}
$$

$$
\begin{cases}
\mathbf{u}_{\boldsymbol{\omega}}^{(i+1)} = \mathbf{u}_{\boldsymbol{\omega}}^{(i)} + \boldsymbol{\omega}^{(i+1)} - \tilde{\boldsymbol{\omega}}^{(i+1)}, \\
\mathbf{u}_{\mathbf{d}'}^{(i+1)} = \mathbf{u}_{\mathbf{d}'}^{(i)} + \mathbf{D}\mathbf{d}'^{(i+1)} - \mathbf{L}\,\boldsymbol{\omega}^{(i+1)}, \\
\mathbf{u}_{\mathbf{d}''}^{(i+1)} = \mathbf{u}_{\mathbf{d}''}^{(i)} + \mathbf{D}\mathbf{d}''^{(i+1)} - \mathbf{L}\,\tilde{\boldsymbol{\omega}}^{(i+1)}, \\
\mathbf{u}_{\boldsymbol{c}'}^{(i+1)} = \mathbf{u}_{\boldsymbol{c}'}^{(i)} + \boldsymbol{c}'^{(i+1)} - \tilde{\boldsymbol{c}}'^{(i+1)}, \\
\mathbf{u}_{\boldsymbol{c}''}^{(i+1)} = \mathbf{u}_{\boldsymbol{c}''}^{(i)} + \boldsymbol{c}''^{(i+1)} - \tilde{\boldsymbol{c}}''^{(i+1)}.
\end{cases}
\tag{B.8}
$$

系统 (B.6) 和 (B.7) 中出现的第一个最小化问题涉及 $K/2$ 个相互独立的优化过程，详见 (4.7)，可以很自然地并行化。ADMM步骤 (B.8) 中的向量加法也可以按照 (4.9) 所述进行分解。基于软阈值算子 (4.5)，(B.6) 和 (B.7) 中指定的 ℓ_1范数的近端算子具有简单的解析形式，如 (4.8) 所示。

参考文献

[1] Oscar，观测系统能力分析与评估工具。世界气象组织（2011–2023）[2] 面向2040年的世界气象组织综合全球观测系统愿景。WMO第1243号文件（2020）[3] Apke, J.M., Hilburn, K.A., Miller, S.D., Peterson, D.A.：面向下一代地球静止卫星图像中对流外流边界的客观识别与追踪。《大气测量技术》**13**(3), 1593–1608 (2020) [4] Apke, J.M., Mecikalski, J.R., Bedka, K., McCaul, E.W., Homeyer, C.R., Jewett, C.P.：深对流上升气流特征与基于卫星的超快速扫描中尺度大气运动矢量所推导流场之间的关系。《月刊天气评论》**146**(10), 3461–3480 (2018) [5] Bedka, K.M., Mecikalski, J.R.：利用卫星反演大气运动矢量估计中尺度流场。《应用气象与气候学杂志》**44**(11), 1761–1772 (2005) [6] Bedka, K.M., Velden, C.S., Petersen, R.A., Feltz, W.F., Mecikalski, J.R.：卫星反演大气运动矢量、无线电探空仪和 NOAA 风廓线仪观测结果的比较。《应用气象与气候学杂志》**48**(8), 1542–1561 (2009) [7] Bertsekas, D.P.：《非线性规划》，第2版。Athena Scientific (1999) [8] Borde, R., Carranza, M., Hautecoeur, O., Barbieux, K.：欧洲气象卫星开发组织未来业务大气运动矢量的发展变革。《遥感》**11**(18), 2111 (2019) [9] Boyd, S., Parikh, N., Chu, E., Peleato, B., Eckstein, J.：通过交替方向乘子法实现分布式优化与统计学习。机器学习基础与趋势 **3**(1), 1–122 (2011) [10] Butler, D.J., Wulff, J., Stanley, G.B., Black, M.J.：用于光流评估的自然场景开源电影。载于：A. Fitzgibbon 等（编），《欧洲计算机视觉会议》（ECCV），第 IV 部分，LNCS 7577，第611–625页。Springer-Verlag (2012) [11] Candes, E.J., Demanet, L.：波传播算子的曲波表示具有最优稀疏性。《纯粹与应用数学通讯》**58**(11), 1472–1528 (2005) [12] D´erian, P., H´eas, P., Herzet, C., M´emin, E.：小波与光流运动估计。《数值数学：理论、方法与应用》**6**(1), 116–137 (2013) [13] Eckstein, J., Bertsekas, D.P.：关于极大单调算子的 Douglas-Rachford 分裂方法与近端点算法。《数学规划》**55**(3), 293–318 (1992) [14] English, S., McNally, T., Bormann, N., Salonen, K., Matricardi, M., Moranyi, A., Rennie, M.,

Janiskov´a, M., Di Michele, S., Geer, A., 等：卫星数据的影响。ECMWF 研究部技术备忘录 711 (2013) [15] Fortun, D., Bouthemy, P., Kervrann, C.：光流建模与计算：综述。《计算机视觉与图像理解》134, 1–21 (2015) [16] Foucart, S., Rauhut, H.：《压缩感知数学导论》。应用与数值调和分析丛书。Springer New York (2013) [17] Glowinski, R., Osher, S., Yin, W.：《通信、成像、科学与工程中的分裂方法》。科学计算丛书。Springer International Publishing (2017) [18] H´eas, P., Dr´emeau, A., Herzet, C.：基于序贯模型的视频超分辨率高效算法。《SIAM成像科学杂志》9(2), 537–572 (2016) [19] H´eas, P., Herzet, C., M´emin, E., Heitz, D., Mininni, P.D.：湍流运动的贝叶斯估计。《IEEE模式分析与机器智能汇刊》35(6), 1343–1356 (2012) [20] Heas, P., Lavancier, F., Harouna, S.K.：用于隐藏的不可压缩湍流运动的自相似先验与小波基。《SIAM成像科学杂志》7(2), 1171–1209, (2014) [21] H´eas, P., M´emin, E.：根据图像序列对大气层进行三维运动估计。《IEEE地球科学与遥感汇刊》46(8), 2385–2396 (2008) [22] Heas, P., Memin, E., Heitz, D., Mininni, P.：幂律与逆运动建模：其在利用卫星图像进行湍流测量中的应用。Tellus A 64, 1–24 (2012) [23] H´eas, P., M´emin, E., Papadakis, N., Szantai, A.：根据卫星图像对大气中尺度动力学进行分层估计。《IEEE地球科学与遥感汇刊》45(12), 4087–4104 (2007) [24] Holton, J.：《动力气象学导论》。Academic Press (1992) [25] Horn, B., Schunck, B.：确定光流。《人工智能》17, 185–203 (1981) [26] Kadri Harouna, S., D´erian, P., H´eas, P., M´emin, E.：无散小波与高阶正则化。《国际计算机视觉杂志》103(1), 80–99 (2013) [27] Lahoz, W., Khattatov, B., Menard, R.：《资料同化：理解观测》。Springer Berlin Heidelberg (2010) [28] Nicolas, A., Zentgraf, F., Linne, M., Dreizler, A., Peterson, B.：评估并应用基于小波的光流测速（wofv）测量壁面约束湍流。《流体实验》64(3), 50 (2023) [29] Nocedal, J., Wright, S.J.：《数值优化》。运筹学丛书。Springer-Verlag, New York (1999) [30] Parikh, N., Boyd, S.：近端算法。《优化基础与趋势》1(3), 127–239 (2014) [31] Raviart, P., Thomas, J.：《偏微分方程数值分析导论》。应用数学硕士丛书。Masson (1983) [32] Santek, D., Nebuda, S., Stettner, D.：展示并评估通过追踪由 AIRS 探空反演得到的水汽场和臭氧场特征而生成的三维风场。《遥感》11(22), 2597 (2019) [33] Schmidt, B., Sutton, J.：利用基于小波的光流方法，根据示踪粒子场进行高分辨率测速。《流体实验》60, 1–17 (2019) [34] Suter, D.：运动估计与向量样条。载于：计算机视觉与模式识别会议论文集，第939–942页。美国西雅图 (1994) [35] Tafti, P.D., Unser, M.：关于矢量场的正则化重建。《IEEE图像处理汇刊》20(11), 3163–3178 (2011) [36] Temperton, C., Hortal, M., Simmons, A.：双时间层半拉格朗日全球谱模式。《英国皇家气象学会季刊》127(571), 111–127 (2001) [37] Unser, M., Aldroubi, A., Eden, M.：用于连续图像表示与插值的快速 B 样条变换。《 IEEE 模式分析与机器智能汇刊》 13(3), 277–285 (1991) [38] Wang, Y., Yin, W., Zeng, J.：非凸非光滑优化中 ADMM 的全局收敛性。《科学计算杂志》78(1), 29–63 (2019)