

论文

一种求解贝叶斯模型平均的新方法

田向军^{①*}, 谢正辉^①, 王爱慧^①, 杨晓春^{②③}

① 中国科学院大气物理研究所, 北京 100029;

② 南京信息工程大学大气科学学院, 南京 210044;

③ 西安市气象局, 西安 710016

* E-mail: tianxj@mail.iap.ac.cn

收稿日期: 2010-12-20; 接受日期: 2011-03-31

国家自然科学基金(批准号: 41075076)、国家重点基础研究发展计划(编号: 2009CB421407, 2010CB428403)和中国科学院知识创新工程重要方向项目(编号: KZCX2-EW-QN207)资助

摘要 贝叶斯模型平均(Bayesian model averaging, BMA)是最近提出的一种用于多模式集合预报的统计方法. 进行贝叶斯模型平均需要准确估算模型集合中每个竞争模型的权重与方差, 经常采用的方法是期望最大化(Expectation-Maximization, EM)方法与马尔可夫链蒙特卡洛(Markov Chain Monte Carlo, MCMC)方法, 两种方法各有优劣. 本文首先对BMA的(对数)似然函数进行改进使之无需BMA权重之和为1的显式约束, 并利用一种有限记忆的拟牛顿优化算法(LBFGS-B)对其进行极大化, 由此提出了一种求解贝叶斯模型平均的新方法(BMA-BFGS). 采用三个陆面模式进行的土壤湿度多模式数值模拟试验表明: 在计算精度方面, BMA-BFGS的精度与MCMC方法几乎一致, 优于EM算法; 在计算耗时性方面, BMA-BFGS的计算耗时与EM算法相当, 远小于MCMC方法.

关键词

贝叶斯模型平均
多模式集合预报 BMA-BFGS
有限记忆的拟牛顿优化算法
陆面过程模式
土壤湿度

近年来, 多模式集合预报系统已成为多家数值天气与气候预报中心进行天气、气候预测的基础平台^[1~4]. 多模式集合预报系统着眼于捕捉数值天气预报中的多种不确定性, 包括初边界条件的不确定, 侧边界条件的不确定性以及物理过程的不确定性, 以期提高数值模式的预报技巧. 但简单的模型集合平均无法显式地考虑各种预报的不确定性, 一般难以给出较准确的预报结果.

贝叶斯模型平均(Bayesian model averaging)是最近由 Raftery 等^[5]提出的一种利用多模式集合进行概率预报的统计后处理方法. BMA 对某一特定变量的

预报概率密度分布函数(pdf)是经过偏差校正的单个模型预报概率分布的加权平均, 其权重是相应模型的后验概率, 代表着每个模型在模型训练阶段相对的预报技巧. 很多已经开展的利用 BMA 方法进行集合预报的研究表明 BMA 的预报结果准确可靠, 具有现行其他多模式方法无法比拟的优势^[5~9].

进行贝叶斯模型平均需要准确估算模型集合中每一个竞争模型的权重与方差. Raftery 等^[5]建议采用期望最大化(Expectation-Maximization, EM)方法估算 BMA 权重与方差. EM 算法易操作, 经济省时, 其算法设计还可满足所有的 BMA 权重非负且之和为 1.

已有的很多文献表明 EM 算法效果不错, 能够生成比较稳定的 BMA 权重与方差的估计。

尽管 EM 算法的应用取得了不错的进展, 但遗憾的是该方法无法保证得到全局最优解, 这种情况在高维情形(模型集合预报中包含大量不同的成员预报)下尤为突出。另外 EM 算法中还有一个预报变量正态分布的潜在假设, 这一假设对某些变量(如降水以及跟降水有关的一些物理变量)的概率预报是不适合的, 很多时候这些变量分布难以满足正态分布。马尔可夫链蒙特卡洛 (Markov Chain Monte Carlo, MCMC)^[10,11]方法是另外一种估算 BMA 权重与方差的优化方法, 与 EM 算法不同, MCMC 方法使用多个不同马尔可夫链(Markov Chain)根据 BMA 权重与方差在似然函数中的权重进行随机采样, 能有效处理复杂的高维参数估计问题, 同时也无需预报变量正态分布的假设, 可得到 BMA 似然函数的全局最优解, 但该方法的缺点是计算效率不高。

有限记忆的拟牛顿算法是解决大规模非线性最优化问题常用方法。Byrd 等^[12]和 Zhu 等^[13]发展了一种可解决具有简单边界约束的大型非线性最优化问题的有限记忆的拟牛顿算法(LBFGS-B), 该方法建立在梯度投影与使用有限记忆的 BFGS 矩阵逼近目标函数的 Hessian 矩阵的基础之上, 不需要目标函数的显式表达与二阶导数信息, 其目标函数的梯度也可用四点差分方法近似逼近, 存储需要仅为线性, 优化精度高, 方法稳定有效。估算 BMA 权重与方差的问题在数学上属于似然函数的极大值优化问题, 原则上也可以用 LBFGS-B 来求解。但 LBFGS-B 方法只适合于具有形如 $l \leq x \leq u$ 简单边界约束(或无约束)的非线性最优化问题, 而 BMA 权重(待优化参数)非负还需满足之和为 1, 因而无法直接应用 LBFGS-B 对 BMA 的似然函数进行优化。因此, 首先对 BMA 似然函数进行改进, 使之不需要优化变量之和等于 1 的显式约束, 进而将 LBFGS-B 应用于改进后的似然函数极值优化以估算 BMA 权重与方差, 由此提出了一种求解贝叶斯模型平均的新方法(BMA-BFGS)。与 MCMC 方法一样, BMA-BFGS 也无须预报变量的正态分布假设。为了检验 BMA-BFGS 方法的有效性, 本文采用三个陆面模式开展了土壤湿度多模式的数值模拟试验, 分别采用 EM, MCMC 以及 BMA-BFGS 方法并利用观测的土壤湿度资料进行贝叶斯模型平均, 而预报变量尝试采用正态分布 (Normal

distribution)与伽马分布(Gamma distribution), 结果表明: 在计算精度方面, BMA-BFGS 的精度与 MCMC 方法几乎一致, 优于 EM 算法; 在计算耗时性方面, BMA-BFGS 的计算耗时与 EM 算法相当, 远小于 MCMC 方法。

1 贝叶斯模型平均

为了阐述 BMA 方法, 令 $f=f_1, \dots, f_k$ 分别表示 K 个不同数值模式的预报结果, Δ 代表需要预报的变量。在 BMA 中, 每一个集合预报成员, $f_k, k=1, \dots, K$ 都和一个条件概率密度函数(pdf) $g_k(\Delta|f_k)$ 相联系, 可解释为预报变量 Δ 在模式预报 f_k 下的条件概率, 表明 f_k 为最优预报的可能性。BMA 的预报模型可表示为如下的多模式概率预报加权平均的形式:

$$p(\Delta | f_1, \dots, f_k) = \sum_{k=1}^K w_k g_k(\Delta | f_k), \quad (1)$$

其中 w_k 表示第 k 个成员预报为最佳预报的后验概率。 w_k 非负且满足 $\sum_{k=1}^K w_k = 1$, 它们反映的是每个模型成员在模型训练阶段对预报技巧的相对贡献程度。

最初的 BMA 方法^[5,8]假设条件概率分布 $g_k(\Delta|f_k)$ 为正态分布, 其均值或期望为原始预报结果的简单线性函数 $a_k+b_k f_k$, 标准偏差为 σ_k

$$\Delta | f_k \sim N(a_k + b_k f_k, \sigma_k^2), \quad (2)$$

其中 a_k, b_k 是偏差校正项, 可经简单线性回归的方式求得。由此, BMA 预报均值(期望):

$$E(\Delta | f_1, \dots, f_k) = \sum_{k=1}^K w_k (a_k + b_k f_k). \quad (3)$$

公式(3)是一个确定性的预报结果, 可与预报集合中的每个成员预报结果以及集合预报的平均结果相比较。令 s, t 分别表示空间与时间指标, f_{kst} 表示预报集合中第 k 个成员在空间 s 与时间 t 的预报结果, 公式(3)相应方差为

$$\text{var}[\Delta | f_{1st}, \dots, f_{kst}] = \sum_{k=1}^K w_k \left((a_k + b_k f_{kst}) - \sum_{l=1}^K w_l (a_l + b_l f_{lst}) \right)^2 + \sum_{k=1}^K w_k \sigma_k^2. \quad (4)$$

BMA 的方差(4)包含两项, 第一项表示为预报集合的扩散程度, 第二项则表示集合内的预报方差。公式(2)~(4)待率定参数个数为 $2K$: w_k 与 $\delta_k, (k=1, \dots, K)$ 。

值得注意的是 BMA 预报变量的正态分布假设(2)

式对诸如气温与海平面气压等变量是适合的, 而对如降水以及与降水有关的一些变量比如径流则一般是不合适的. 本文的数值试验分别预报了变量为正态分布和伽马分布的情形.

2 贝叶斯权重与方差的计算

上面已经提过, 进行贝叶斯模型平均需要估算每一个成员预报的条件概率函数的权重与方差. 与文献[5]相同, 我们利用一套率定数据及极大似然的原则对 $w_k, s_k, k=1, \dots, K$ 进行估算. 假定预报误差在空间与时间上相互独立, 则有

$$l(w_1, \dots, w_K, \sigma_1^2, \dots, \sigma_K^2 | f_1, \dots, f_K, \Delta) = \sum_{s,t} \log \left(\sum_{k=1}^K w_k g_k(\Delta_{s,t} | f_{kst}) \right), \quad (5)$$

其中 n 表示所有观测数据的总和. 这里采用 \log 型似然函数而非似然函数本身, 主要是出于计算稳定的考虑. 遗憾地是, 方程(5)不存在解析的极大值解. 因此需要采用迭代的方式来进行求解. 我们将首先将对 EM 算法进行简单介绍, 然后基于有限记忆的拟牛顿优化算法 LBFSG-B 提出了一种全新的求解最优化问题(5)的 BMA-BFGS 方法.

2.1 EM 算法

EM 算法在极大似然估计的迭代计算中应用广泛, 尤其对某些数据不完整的问题非常有效. 在 BMA 方法中应用 EM 算法, 需要引入一个非观测变量 z_{kst} , 其中如果模式集合中的第 k 个集合成员为最佳预报时, z_{kst} 为 1, 否则 0. 任何时刻, 只有一个 z_{kst} 可为 1, 其他皆为 0.

对每个集合成员的权重与方差初始化后, EM 算法开始在以下的期望步与最大化步之间迭代. 在每个期望步, z_{kst} 根据当前步的权重与方差值由下面的公式(期望步)进行重新估算:

$$z_{kst}^{(j)} = \frac{w_k g(\Delta_{st} | f_{kst}, \sigma_k^{(j-1)})}{\sum_{l=1}^K w_l g(\Delta_{st} | f_{lst}, \sigma_l^{(j-1)})}, \quad (6)$$

其中指标 j 代表迭代的次数, 而 $g(\Delta_{st} | f_{kst}, \sigma_k^{(j-1)})$ 则表示第 k 个集合成员集中于观测 Δ_{st} 的条件概率分布, $g(\Delta_{st} | f_{kst}, \sigma_k^{(j-1)})$ 为正态分布, 均值为 f_{kst} , 标准差为 $\sigma_k^{(j-1)}$. 在下面的最大化步里, BMA 权重与方差则根

据最新 $z_{kst}^{(j)}$ 进行更新:

$$w_k^{(j)} = \frac{1}{n} \sum_{s,t} z_{kst}^{(j)}, \quad (7)$$

$$\sigma_k^{2(j)} = \frac{\sum_{s,t} z_{kst}^{(j)} \cdot (\Delta_{st} - f_{kst})^2}{\sum_{s,t} z_{kst}^{(j)}}. \quad (8)$$

EM 算法在(6)式与(7)~(8)式之间反复迭代由此改善 BMA 权重与方差 $w_k, \sigma_k (k=1, \dots, K)$ 估计, 直到收敛为止.

不难看出, EM 算法执行非常简单, 只需在(6)与(7)和(8)之间反复迭代即可. 另外, 公式(7)还能保证所有的 BMA 权重非负且之和为 1. 如文献[5]所提到的, EM 算法极易迅速收敛到局部最优解而无法得到全局最优解, EM 算法另外一个不足之处就是还须假设 $g(\Delta_{st} | f_{kst}, \sigma_k^{(j-1)})$ 为正态分布, 这样的假设对某些物理变量是不适合的, 其广泛应用也因此大受限制.

另外, 很多研究也采用 MCMC 方法来对 BMA 权重与方差的进行优化估算: 如前所述, 与 EM 算法不同, MCMC 方法使用多个不同马尔可夫链(Markov Chain)根据 BMA 权重与方差在似然函数中的权重进行随机采样, 能有效处理复杂的高维问题, 其缺点是计算代价太高.

2.2 BMA-BFGS 方法

Byrd 等^[12]和和 Zhu 等^[13]发展了一种有限记忆的拟牛顿优化算法(LBFGS-B)求解如下具有简单边界约束的大型非线性最优化问题:

$$\min f(x), \quad (9)$$

满足:

$$l \leq x \leq u, \quad (10)$$

其中 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 是一个 n 维非线性函数, 其梯度为 G , l 和 u 分别是变量 x 的上下边界. LBFGS-B 不需要目标函数的具体表达式以及二阶导数信息, 因此可应用于 Hessian 矩阵无法直接计算的情形. 其梯度 G 也可由如下的四点差分法近似逼近

$$g \approx \frac{1}{12h} [f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)]. \quad (11)$$

LBFGS-B 使用有限记忆的拟牛顿更新逼近 Hessian 矩阵, 其存储要求仅为 $O(n)$, 优化精度高, 方法稳定有效. 关于 LBFGS-B 算法的详细细节, 有兴趣的读

者可参看文献[12, 13], 这里不再赘述.

估算BMA权重与方差实际上就是求如下的一个极大值问题:

$$\max \left(\sum_{s,t} \log \left(\sum_{k=1}^K w_k g_k(\Delta | f_{kst}) \right) \right), \quad (12)$$

满足

$$0 \leq w_k \leq 1, \text{ and } \sum_{k=1}^K w_k = 1, \quad (13)$$

$$\sigma_{k,\min} \leq \sigma_k \leq \sigma_{k,\max}. \quad (14)$$

通过取负数或者取倒数的方式可将最大值优化问题

$\max \left(\sum_{s,t} \log \left(\sum_{k=1}^K w_k g_k(\Delta | f_{kst}) \right) \right)$ 转化为最小值优化问题.

受到约束条件 $\sum_{k=1}^K w_k = 1$ 的限制 LBFGS-B 算法仍

无法直接应用到最优化问题(15)~(17)式. 引入中间

变量 $\alpha_k (0 \leq \alpha_k \leq 1)$, 令 $w_k = \alpha_k / \sum_{k=1}^K \alpha_k$ 可消除

$\sum_{k=1}^K w_k = 1$ 的显式约束, 优化问题(15)~(17)式转化为

$$\min \left(- \sum_{s,t} \log \left(\sum_{k=1}^K \frac{\alpha_k}{\sum_{k=1}^K \alpha_k} g_k(\Delta | f_{kst}) \right) \right), \quad (15)$$

$$0 \leq \alpha_k \leq 1, k=1, \dots, K, \quad (16)$$

$$\sigma_{k,\min} \leq \sigma_k \leq \sigma_{k,\max}, k=1, \dots, K. \quad (17)$$

可用 LBFGS-B 算法求解优化问题(15)~(17)式, 得到 $\alpha_k, \sigma_k (k=1, \dots, K)$ 的最优值, 由此得到 BMA 权重

$w_k = \alpha_k / \sum_{k=1}^K \alpha_k$ 与方差 $\sigma_k (k=1, \dots, K)$.

3 数值试验

为了检验本文所提出 BMA-BFGS 方法的有效性, 下面利用大气强迫数据驱动由三个陆面过程模式 (CLM3.5, Clm-Vic, Noah) 组成的模式集合模拟生成土壤湿度数据集, 并采用华北区域 (110°~120°E,

40°~45°N) 14 个站点 1993~2006 年的观测资料进行 BMA 模式训练, 分别利用以上三种方法 EM 算法, BMA-BFGS 算法以及另外一种比较流行的 MCMC 方法^[10,11]进行贝叶斯模型平均, 对比分析三种 BMA 集合模拟方法在计算精度与时间效率上的性能.

3.1 模型、数据与实验

本文选定试验的区域为华北区域 (110°~120°E, 40°~45°N). 本研究共选用三个陆面过程模式: Community Land Model 3.5^[14], CLM-VIC^[15] 以及 Noah LSM 2.7^[16-18]. 所使用的强迫数据为文献[19]及其更新版本, 并按照文献[20]的方法将其空间插值为 0.5°×0.5°, 三个模式的积分时段为 1950~2006 年, 空间分辨率为 0.5°×0.5°, 这里只选取 1993~2006 年的模拟结果进行分析.

为了进行 BMA 模型训练, 我们搜集了由中国气象局观测网站提供的该区域内 14 个站点 1993~2006 年的土壤湿度的观测资料, 每个站点在每月的 8, 18, 28 号进行观测, 观测层次分为三层: 0~10 cm, 40~50 cm 以及 90~100 cm, 由于 40~50 cm 与 90~100 cm 两个层次的观测数据相对稀少不适宜合作 BMA 模型训练, 因此本实验中仅考虑表层 0~10 cm 的情况.

为了测试 BMA-BFGS 方法对于其他概率分布的适用情况, 试验中三个 BMA 算法除了使用了经常使用的正态分布, 还特意考虑了 BMA-BFGS 算法与 MCMC 算法在预报变量为以下伽马分布的情形:

$$\Delta | f_k \sim \frac{1}{\beta^\alpha \Gamma(\alpha)} \Delta^{\alpha-1} \exp(-\Delta / \beta), \quad (18)$$

其中 α, β 分别是型系数与尺度系数. 伽马分布(18)的均值为 $\mu = \alpha\beta$, 方差为 $\sigma^2 = \alpha\beta^2$, 由此可推导出 $\alpha_k = \mu_k^2 / \sigma_k^2, \beta = \sigma_k^2 / \mu_k$ 其中 $\mu_k = f_k$. 不同试验方法的命名请见表 1.

3.2 数值结果

图 1 给出了三个模式 (CLM3.5, CLM-VIC 以及 Noah) 所模拟的土壤湿度以及它们的集合平均模拟与

表 1 不同试验方法的命名

	BMA-BFGS(1993~2000)	MCMC(1993~2000)	BMA-BFGS(1993~2006)	MCMC(1993~2006)
正态分布(N)	BFGS-N	MCMC-N	BFGS-N1	MCMC-N1
伽马分布(G)	BFGS-G	BFGS-G	BFGS-G1	BFGS-G1

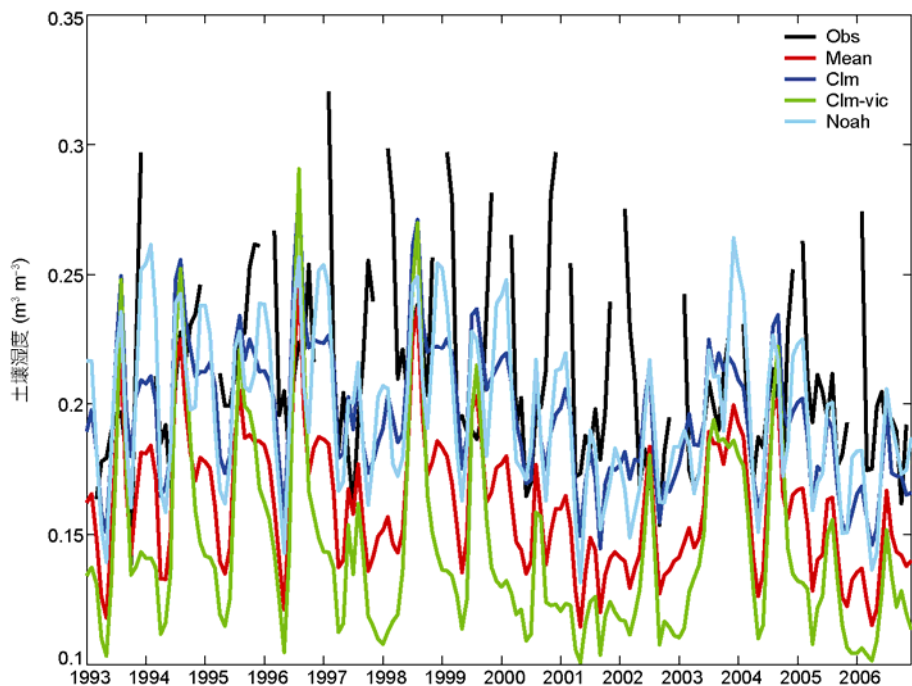


图1 观测与模式模拟的土壤湿度的时间序列

观测的土壤湿度 1993~2006 年逐月的对比结果, BMA 模型的训练时间阶段为 1993~2000 年. 总的来说, 三个模式都能基本上模拟出土壤湿度的幅度与季节变率, 但模拟的精度还有待提高. 另外, 值得注意的是三个模型预报结果简单的算术平均(mean)的预报结果与单个的模型预报结果相比并没有表现出多大的优势, 一方面是因为简单的算术平均只能给每个模型预报结果以相等的系数, 无法考虑到各个模型的性能优劣; 另一方面的原因也可能是因为此次试验中我们所用的模型集合的个数较少(只有三个), 这使得简单平均的模拟结果会存在着较大的不确定性.

图 2 给出的是三种 BMA 方法所模拟的土壤湿度与观测的土壤湿度时间序列, 与图 1 中的结果相比较, 三种 BMA 方法所模拟的土壤湿度的结果相比较单个模型模拟以及简单的模型平均均有明显的改进, 这主要是因为 BMA 方法可充分考虑各个模型的预报能力的优劣程度, 并根据其优劣程度赋予不同的 BMA 系数, 其权重(BMA 系数)是相应模型的后验概率, 代表着每个模型在模型训练阶段相对的预报技巧, 这样便会在很大程度上提高 BMA 集合预报的模拟精度; 另一方面, BMA 方法还首先对模型的预报结果进行一个简单的线性回归, 实际上是一个简单的模型误

差误差校正的过程^[5], 必然会在一定程度上提高 BMA 集合预报的模拟精度.

图 3(a)给出的是三种 BMA 集合模拟, 三个陆面模式直接模拟以及它们的集合平均模拟与观测的土壤湿度的相关系数, 总的来说三种 BMA 方法集合模拟的土壤湿度与观测数据的相关系数一般都在 0.5 以上. 在这三种 BMA 算法中, EM 算法的性能最差, 其相关系数最小, 而 MCMC 方法与 BMA-BFGS 方法的相关系数非常接近, 都在 0.6 以上, 其中当 BMA-BFGS 方法取伽马分布时, 其相关系数最高, 达到了 0.63 左右, 由此可推测这种伽马分布可能比正态分布更符合土壤湿度这一物理量的随机变化. 而单个模式的直接模拟以及它们的简单集合平均模拟的相关系数都小于 0.5, 其中 Noah 模式的效果最好, 其相关系数达到了 0.4 以上, 其他的都小于 0.4, 集合平均的模拟结果仅比 CLM-VIC 模型的模拟结果稍好, 由此不难看出多个模式简单平均的模拟效果难言理想. 图 3(b)给出的是三种 BMA 集合预报, 三个陆面模式模拟以及它们的集合平均模拟的均方根误差. 与图 3(a)的结果相对应, 三种 BMA 方法集合模拟的均方根误差都小于单个模式直接模拟以及三个模式的集合简单平均模拟结果的均方根误差; 另外, MCMC 算

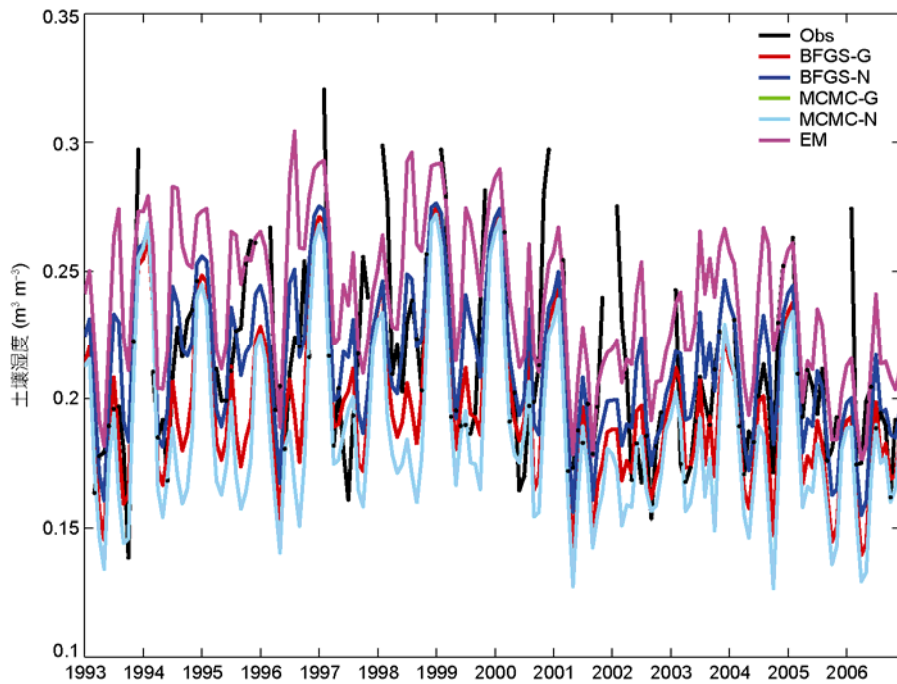


图2 观测与三种 BMA 方法模拟的土壤湿度的时间序列

BFGS-N 和 MCMC-N 中的“-N”表示变量分布采用正态分布; BFGS-G 和 MCMC-G 中的“-G”表示变量分布采用伽马分布

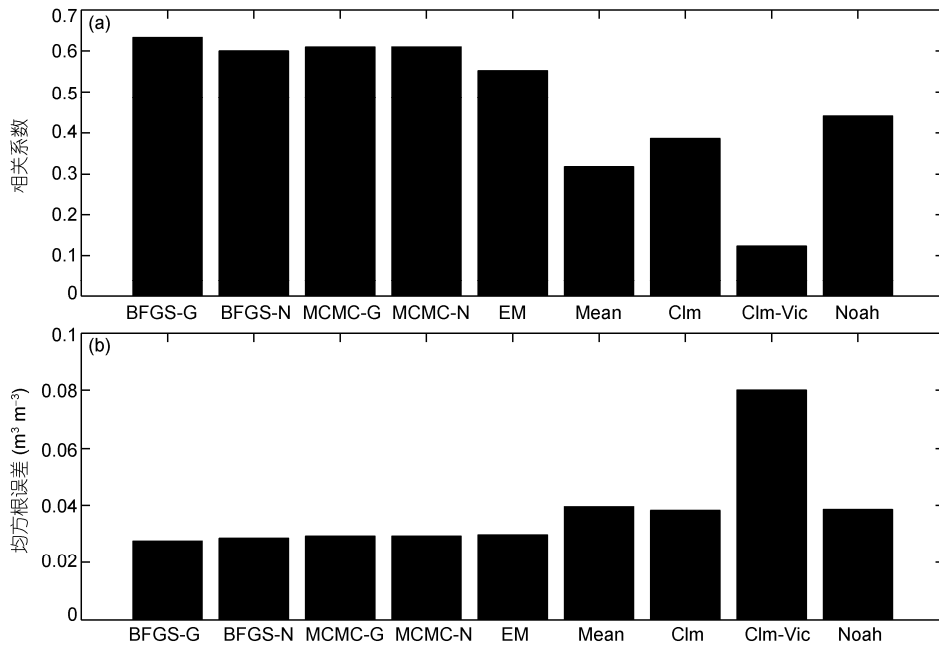


图3 不同方法的模拟结果与观测的土壤湿度时间序列的相关系数(a)和不同方法模拟的土壤湿度的均方根误差(b)

法与 BMA-BFGS 方法的均方根误差相差无几, 都略小于 EM 算法. 就时间效率而言, 完成以上的数值试验 BMA-BFGS 与 EM 算法所需要的 CPU TIME 大约

1 s 左右, 而 MCMC 方法大约需要 10~15 s 的时间. 以上的数值试验从计算精度与时间效率两个方面表明这种新发展的 BMA-BFGS 方法的有效性.

为了测试不同的模型训练时间对 BMA-BFGS 方法最后集合预报结果的影响程度, 以下还测试了模型训练时间段为 1993~2006 年的 BMA-BFGS 方法 (BFGS-N1 和 BFGS-G1) 的集合模拟结果. 图 4 给出的是模型训练阶段不同的 BMA-BFGS 模拟与观测的土壤湿度时间序列. 总的来说, 训练阶段的时间长短对 BMA-BFGS 方法的影响不大, 主要表现在两种方法所模拟的土壤湿度的时间序列几乎吻合在一起. 两个不同模型训练阶段的 BMA-BFGS 模拟与观测的土壤湿度时间序列的相关系数(图 5(a))也几乎没有什么变化, 其均方根误差也非常相近, 表明在保证一定的训练时间长度的前提下, BMA-BFGS 集合预报对模型训练阶段的时间长度变化并不敏感, 结果稳定. 当然, 由于预报变量、预报模型以及预报模型个数的不同, 我们很难给出一个统一确定的训练时段. 而另一个需要指出的是, 由于目前土壤湿度的站点观测比较稀疏, 这样对于在更大范围上使用 BMA 多模式预报方法进行土壤湿度的集合模拟带来挑战, 而陆面数据同化^[21,22]可以提供一定时段高时空分辨率且具有一定精度的土壤湿度资料, 因此贝叶斯多模式预报结合陆面数据同化可能是未来生成长时间序列高

时空分辨率的土壤数据的一个途径.

4 小结与讨论

贝叶斯模型平均最近提出的一种利用多模式集合进行概率预报的统计后处理方法, 其预报结果准确可靠, 具有现行其他多模式方法无法比拟的优势. 本文首先对 BMA 的(对数)似然函数进行改进使之无需 BMA 权重之和为 1 的显式约束, 并利用一种有限记忆的拟牛顿优化算法(LBFGS-B)对其进行极大化, 由此提出了一种求解贝叶斯模型平均的新方法(BMA-BFGS). 采用三个陆面模式进行的土壤湿度多模式数值模拟试验表明 BMA-BFGS 方法在计算精度方面与 MCMC 方法相当, 优于 EM 算法; 在计算耗时性方面, BMA-BFGS 的计算耗时与 EM 算法相当, 远小于 MCMC 方法; 另外, BMA-BFGS 方法还受预报变量为正态分布假设的限制, 可以适用于任何概率分布形式, 拓宽了该方法的适用范围. 数值试验还表明, BMA-BFGS 方法能够在很大程度上提高土壤湿度的模拟效果, 其 BMA 集合模拟的土壤湿度与观测的土壤湿度无论从幅度变化和季节变率上都吻合的相当好, 就这使得利用多个陆面过程模式结合

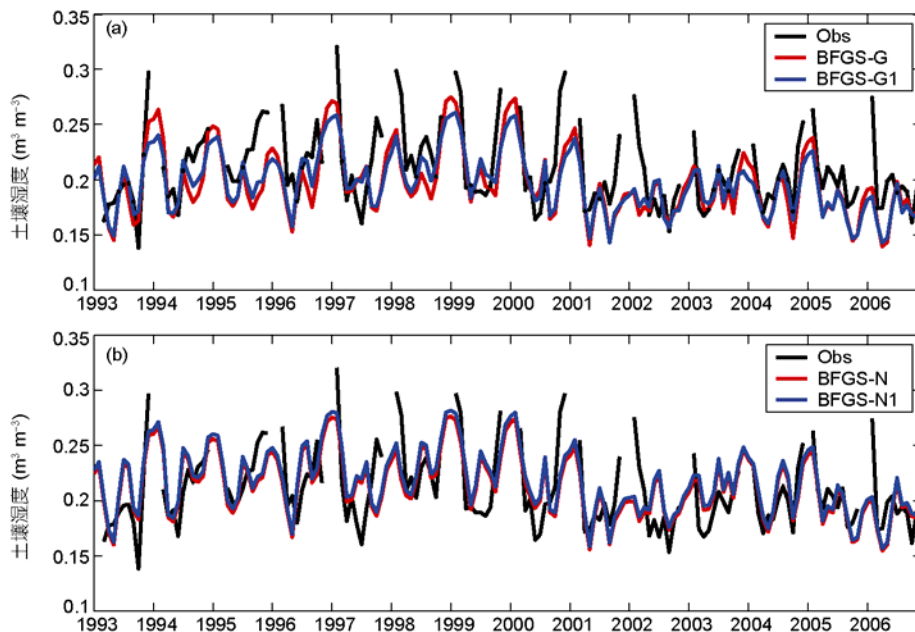


图 4 模型训练阶段不同的 BMA-BFGS 模拟与观测的土壤湿度时间序列

(a) 伽马分布; (b) 正态分布. BFGS-G1, BFGS-N1 分别代表模型训练时间为 1993~2006 年; BFGS-G, BFGS-N 表示模型训练时间为 1993~2000 年

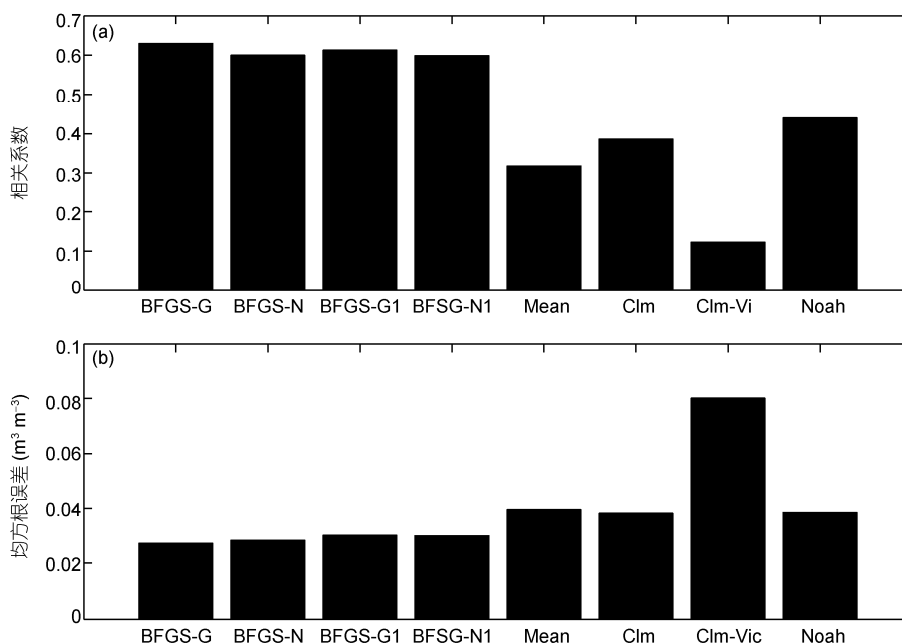


图 5 模型训练阶段不同的 BMA-BFGS 模拟与观测的土壤湿度时间序列的相关系数(a)和模型训练阶段不同的 BMA-BFGS 模拟的土壤湿度的均方根误差(b)

BMA-BFGS 方法生成较高精度的土壤湿度数据集成为可能. 另外, 特别指出的是由于 BMA 多模式集合预报模型方法的本质是一个模型训练方法, 必须利

用观测数据对模型集合中各个预报模型进行训练、测试以确定其 BMA 系数, 对于没有观测资料的格点处该方法无能为力, 具有一定的局限性.

致谢 感谢审稿专家提出的宝贵意见.

参考文献

- 1 Barnston A G, Mason S J, Goddard L, et al. Multimodel ensembling in seasonal climate forecasting at IRI. *Bull Am Meteorol Soc*, 2003, 84: 1783-1796
- 2 Grimit E P, Mass C F. Initial results of a mesoscale short-range ensemble forecasting system over the Pacific Northwest. *Wea Forecast*, 2002, 17: 192-205
- 3 Molteni F, Buizza R, Palmer T N, et al. The ECWMF ensemble prediction system: Methodology and validation. *Q J R Meteorol Soc*, 1996, 122: 73-119
- 4 Palmer T N, Alessandri A, Andersen U, et al. Development of a European multi-model ensemble system for seasonal-to-interannual prediction (DEMETER). *Bull Am Meteorol Soc*, 2004, 85: 853-872
- 5 Raftery A E, Gneiting T, Balabdaoui F, et al. Using Bayesian model averaging to calibrate forecast ensembles. *Mon Weather Rev*, 2005, 133: 1155-1174
- 6 Ajami NK, Duan Q, Sorooshian S. An integrated hydrologic Bayesian multimodel Combination framework: Confronting input, parameter, and model structural uncertainty in hydrologic prediction. *Water Resour Res*, 2007, 43: W01403, doi: 10.1029/2005WR004745
- 7 Neuman S P. Maximum likelihood Bayesian averaging of uncertain model predictions. *Stoch Environ Res Risk Assess*, 2003, 17: 291-305, doi: 10.1007/800477-003-0151-7
- 8 Raftery A E, Madigan D, Hoeting J A. Bayesian model averaging for linear regression models. *J Am Stat Assoc*, 1997, 92: 179-191
- 9 Sloughter J M, Raftery A E, Gneiting T. Probabilistic quantitative precipitation forecasting using Bayesian model averaging. University of Washington, Department of Statistics, Technical Report 496, 2006
- 10 Xie H, Eheart J W, Chen Y, et al. An approach for improving the sampling efficiency in the Bayesian calibration of computationally

- expensive simulation models. *Water Resour Res*, 2009, 45: W06419, doi: 10.1029/2007WR006773
- 11 Liu J S, Liang F, Wong W H. The multiple-try method and local optimization in metropolis sampling. *J Am Stat Assoc*, 2000, 95: 121–134
 - 12 Byrd R H, Lu P, Nocedal J, et al. A limited memory algorithm for bound constrained optimization. *SIAM J Scientific Computing*, 1995, 16: 1190–1208
 - 13 Zhu C, Byrd R H, Lu P, et al. L-BFGS-B: A limited memory FORTRAN code for solving bound constrained optimization problems. Technical Report. NAM-11, EECS Department, Northwestern University, 1994
 - 14 Oleson K W, Niu G Y, Yang Z L, et al. Improvements to the Community Land Model and their impact on the hydrological cycle. *J Geophys Res*, 2008, 113: G01021, doi: 10.1029/2007JG000563
 - 15 Wang A, Li K Y, Lettenmaier D P. Integration of the variable infiltration capacity model soil hydrology scheme into the community land model. *J Geophys Res*, 2008, 113: D09111, doi: 10.1029/2007JD009246
 - 16 Schaake J C, Koren V I, Duan Q Y, et al. Simple water balance model for estimating runoff at different spatial and temporal scales. *J Geophys Res*, 1996, 101: 7461–7475
 - 17 Chen F, Janjic Z, Mitchell K. Impact of atmospheric surface layer parameterizations in the new land-surface scheme of the NCEP mesoscale Eta model. *Bound-Lay Meteorol*, 1997, 85: 391–421
 - 18 Ek M B, Mitchell K E, Lin Y, et al. Implementation of Noah land surface model advances in the National Centers for Environmental Prediction operational mesoscale Eta model. *J Geophys Res*, 2003, 108, doi: 10.1029/2002JD003296
 - 19 Sheffield J, Goteti G, Wood E F. Development of a 50-year high-resolution global dataset of meteorological forcings for land surface modeling. *J Climate*, 2006, 19: 3088–3111
 - 20 Wang A, Bohn T J, Mahanama S P, et al. Multi-model ensemble reconstruction of drought over the continental United States. *J Climate*, 2009, 22: 2694–2712
 - 21 Tian X J, Xie Z H, Dai A G, et al. A dual-pass variational data assimilation framework for estimating soil moisture profiles from AMSR-E microwave brightness temperature. *J Geophys Res*, 2009, 114: D16102, doi: 10.1029/2008JD011600
 - 22 Tian X J, Xie Z H, Dai A G, et al. A microwave land data assimilation system: Scheme and preliminary evaluation over China. *J Geophys Res*, 2010, 115: D21113, doi: 10.1029/2010JD014370