利用高光谱红外探测资料反演大气参数

吴雪宝^{1,2} 张凤英¹

(1 国家卫星气象中心,北京100081)

朱元竞

(2 北京大学物理学院大气科学系,北京100871)

摘要 文章介绍了红外高光谱的卫星探测技术以及利用现有的机载和星载高光谱资料的反演方法,着重讨论了美 国 NASA 地球观测系统上携带的大气红外探测仪 AIRS 的反演方法。

关键词 高光谱红外探测器 特征向量反演方法 物理反演方法

引言

2002 年 5 月 2 日,地球观测系统(EOS) 第二颗 卫星 AQUA 升空,其上携带的大气红外探测仪 AIRS(At mospheric Infra Red Sounder) 采用红外光栅 阵分光技术,按 NASA 设计要求,2378 个通道覆盖 650~2700cm⁻¹红外光谱区域,其光谱分辨力(W) △U) 高于1200, 辐射测量绝对精度优于 0.2K, 实现 了高光谱高精度红外探测。在美国,对于 AIRS 的 模拟研究始于十多年前,并且成立了以 M.T. Chahine 为首席科学家、近 70 人参加的 AIRS 反演 产品研究小组,研究成员主要来自 NASA 喷气推进 实验室(JPL)和戈达德空间飞行中心(GSFC)、 NOAA/ NESDIS 麻省理工大学(MIT) 以及马里兰 大学巴尔的摩分校(UMBC)等。AIRS 研究小组的 联合模拟研究表明,综合利用 AQUA的 AIRS 红外 探测资料和 AMSU 微波探测资料能够满足世界气 象组织提出的温湿垂直探测精度要求,即:1°/1km 和 10 %/2km。AIRS 核心反演产品为 0.1 ~ 1000hPa 之间的 100 层温度和 100~1000hPa 之间 的 55 层湿度,这是当前 NOAA 业务气象卫星 HIRS 红外探测仪无法实现的,究其根本原因,是由于受滤 光片制式限制,探测器光谱分辨力太低(υ/ Δυ≈50~

100)和辐射测量的精度不足所致。因为红外遥感受 云层干扰,要获取云层下的大气温度、湿度廓线,还 须同时利用多通道微波探测资料,进行高光谱高精 度红外和微波多通道协合(synergic)定量遥感探测, 真正实现全天候遥感。根据调研,总结目前较常用 的高光谱 AIRS 和微波 AMSU 大气温度、湿度反演 方法。同时对于云订正方法、最佳通道的选取以及 物理反演涉及的辐射传递正演模式也作了简单介 绍。

1 AIRS/ AMSU大气参数反演方法^[1]

1.1 微波初估场反演(Microwave Only Retrieval)

该算法由 Rosenkranz 和 Staelin 提出,对于一组 AMSU通道,定义如下目标函数(Objective Function):

$$\frac{1}{2} \left| \left| X - X_0 \right|^{\mathsf{T}} S_X^{-1} \left| X - X_0 \right| + \left| \Theta_{\mathsf{obs}} - \Theta \right| X \right| \right|^{\mathsf{T}} \cdot S_{\mathsf{err}}^{-1} \left| \Theta_{\mathsf{obs}} - \Theta \right| X \right| \left| \right|$$
(1)

其中, x 为欲求的大气参数和表面参数矢量, X_0 为 它的初始场, S_x 为初始场协方差矩阵, 假如初始场 选自 TIGR 气候数据集,则 S_x 为大气样本的协方 差矩阵。 Θ_{obs} 为观测亮温, 是由微波快速辐射传递 模式计算得到的通道亮温, S_{err} 为观测误差协方差矩

收稿日期:2002年12月25日,定稿日期:2003年2月10日

国防科工委"风云三号卫星 02 批高光谱分辨率红外大气探测仪性能指标和模拟实验研究" 课题资助

作者简介:吴雪宝,女,副研究员,博士研究生,主要从事卫星大气探测研究,Email:xuebao.wu@nsmc.cma.gov.cn

(2)

阵,一般而言,它是一个对角矩阵,包括仪器噪声、系统误差和其他误差,而且都服从 Gaussian 分布假定。反演的目的从上述目标函数中求解 X,采用牛顿迭代法(Newtonian Iteration)按顺序依次反演出表面参数、大气湿度廓线和大气温度廓线。

该算法得到的微波反演初估场结果将用于晴空 亮温订正和大气参数的进一步反演。

1.2 晴空订正法(Cloud Clearing)

晴空订正法是由 Smith(1968)^[2]提出的,其目的 是从卫星观测中去除云的影响,得到等效的晴空辐射 值,以便应用在无云情况下的辐射传递方程中。卫星 红外观测受视场中的云层干扰较大,考虑云影响的方 法很多,但归纳起来,可以分为三大类:(1)确定晴空 区域,不作云订正,只对晴空区进行大气参数反演; (2)晴空订正法,后面将作详细的介绍;(3)利用有云 情况下的辐射传输模式,直接反演大气参数和云参 数。AIRS/ AMSU 晴空订正方法由 Susskind 提出,是 Smith 方法的一种扩充。假定相邻视场除了云量的不 同,其它特性完全一致,也就是说,相邻视场的大气温 度结构,水汽分布以及云的组成和特性也是均匀的。 根据这些假定,通道的晴空辐射率订正可以表示为各 视场内卫星测值的线性组合,也即:

> $R_{i,\text{CLR}} = R_{i,1} + \eta [R_{i,1} - R_{i,K+1}] + , \dots,$ $\eta_{k} [R_{i,1} - R_{i,(K+2)-k}] + , \dots,$ $\eta_{K} [R_{i,1} - R_{i,2}]$

其中, $\tilde{R}_{i,CLR}$ 是经过订正的、通道*i*的有效晴空辐射率,大写英文字母 K为云层数目,小写英文字母 k为云层数目,小写英文字母 k为第k个云层, $R_{i,k}$ 是通道*i*、第k个云层的晴空辐射率,希腊字母 η ,…, η_k 是 K 个独立于通道的未知常数,总共需要 K+1 个观测值求解上述 K 个常数和晴空辐射订正值。下面,以单层云为例,说明AIRS/AMSU等效晴空辐射强度计算方法,考虑两个相邻的视场,上述式子可简化为:

 $R_{i,CLR} = R_{i,1} + \eta [R_{i,1} - R_{i,2}]$ (3) 由此可见,晴空辐射订正的关键是如何确定常数 η ,Susskind 等人于 1993 年提出^[3],选用 15µm、 4.3µm二氧化碳吸收带谱区通道和窗区通道进行订 正,采用标准化带权重的最小二乘法求解常数,并进 行多次迭代:

$$\eta_{l}^{n} = \left| \left(\begin{array}{ccc} R_{1} - R_{2} \right)^{T} \bigwedge^{n-1} \left(\begin{array}{ccc} R_{1} - R_{2} \right) \right|^{-1} \cdot \left(\begin{array}{ccc} R_{1} - R_{2} \right)^{T} \bigwedge^{n-1} \left(\begin{array}{ccc} R_{n}^{n} - R_{1} \right) \end{array} \right)$$
(4)

其中, か为通道噪声协方差矩阵,主要包括表面参数(表面温度、表面比辐射率、表面双向反射率)和大 气温度湿度参数的计算误差,同时观测噪声也包括 在内。

1.3 NOAA/ NESDIS 业务产品反演法 (First Product)

该算法由 Goldberg 和 Mc Millin 提出,这是目前 NESDIS 业务上采用的方法。首先,采用统计反演 法得到初估场,在此基础上,利用物理方法反演得到 大气温湿廓线、臭氧廓线和表面参数。

1.3.1 构建经验正交函数初估场(Empirical Orthogonal Function)

与传统的最小二乘统计回归反演方法不同, NESDIS 沿用 Smith 和 Woolf 于1976 年提出的经验 正交函数法(EOF)构建初估场廓线^[4]。首先,利用 大气廓线训练样本,建立统计回归关系,然后将回归 系数应用到实际的卫星观测数据中。AIRS/AMSU 仪器总共有 2397 个通道,但由于许多通道权重函数 之间存在重叠,包含的独立信息远小于通道总数,模 拟试验表明,保留前 40 个经验正交函数(协方差矩 阵的特征向量)为最佳选择,既能节省大量计算时间 又不损失卫星观测的独立信息。与物理反演算法不 同,在统计回归关系的建立过程中,应该考虑不同观 测角对卫星辐射值的影响,进行临边变暗订正处理。 1.3.2 最小方差物理反演法(Minimum Variance Physical Retrieval)

物理反演法通过求解辐射传递方程得到符合实 际情况的大气参数,由于反演的不稳定性,必须引入 一些附加条件、常用的办法是引入初估场、把它作为 反演迭代的起始点,显而易见,如果初估场越接近真 值,则有助于迭代收敛速度和求解精度的提高,因此 初估场的选择非常重要。在 AIRS/AMSU 的业务 产品反演中,采用上述 EOF 统计回归反演结果作为 物理反演的初估场。利用初估场,对辐射传递方程 进行一阶泰勒展开,用 Rodgers(1976)最小方差物理 反演法求解线性化的辐射传递方程[5],其中的关键 是权重函数的计算,特别是水汽权重函数的计算。 权重函数的计算在很大程度上依赖于透过率的快精 计算模式,在红外和微波光谱区域,分别计算大气温 度、表面温度和水汽的权重函数。同时为了提高反 演的稳定性,引入 EOF,那么究竟取多少个 EOF? 由于仪器各个通道之间存在很强的相关性、温度场

和水汽场本身也存在自相关性,因此仅仅需要一些 有限的相互独立的变量就能很好地描述大气的温度 和水汽结构。对于高光谱红外垂直探测仪而言,用 前 40 个 EOF 表示温度、湿度变化,这样既可大大减 少计算时间又能提高反演的稳定性,就能分辨温度、 湿度廓线的细微结构。与 Smith 同步物理反演法不 同,NESDIS 采用分步物理反演方法,按顺序依次反 演出表面参数、大气温度廓线和大气湿度廓线。红 外光谱区域的 15μ m 和 4.3μ m 二氧化碳吸收带受 水汽影响较小,首先,选择这些红外通道反演大气温 度廓线,在此基础上,能够得到较为精确的湿度反演 结果。温度和湿度的反演都可以进行多次迭代,但 模拟试验表明,一次迭代便可得到较好的反演结果。

1.4 NASA试验产品反演法(Final Product)

该算法由 Susskind 和 Chahine 提出,是 AIRS/ AMSU核心算法,采用全新的反演技术,尤其适合 于多通道、高信噪比卫星数据的处理,它充分考虑各 通道噪声的来源以及晴空辐射订正的误差。得到的 大气反演参数对于初估场依赖性很弱。反演过程主 要包括以下步骤:

(1) 获取大气温度、湿度和臭氧廓线的初估场;

(2)利用 AMSU 微波资料,得到大气温度廓线, 用于晴空辐射订正;

(3)晴空辐射订正处理;

(4)表面温度反演,重复步骤(2)~(3);

(5)利用新的晴空辐射订正值,依次反演表面温度、大气温度、湿度和臭氧廓线;

(6)检查反演的收敛性,如果不收敛,则重复步骤(2)~(3);一般而言,重复2~3次之后,迭代过程结束。

1.5 通道选择

在进行地球物理参数反演时,选择合适的通道 是极其重要的。但是,某些通道受多个参数影响,例 如,对大气水汽和臭氧敏感的通道,同时也对大气温 度和表面温度敏感。Susskind 提出,在进行温度反 演时,应该选择水汽和臭氧比较弱的通道,而选择水 汽通道时,则应选择水汽吸收较强的通道。随着红 外垂直探测仪光谱分辨率的提高,可以得到高垂直 分辨率和高精度的大气温度、湿度廓线。试验结果 显示,随着通道数增加,温度和水汽反演结果越来越 好,但当使用过多的通道时,温度和水汽反演结果反 而变差,这意味着在反演中,并不是通道越多越好, 而存在一套最优通道。在反演中选择并使用最优通 道不仅节省了大量计算时间,而且能够达到较好的 反演结果。对于 AIRS/AMSU地球物理参数反演, 选择 297 个通道参与 42 个表面和大气参数的反演。

2 GIFTS/ CrIS 大气参数反演方法

GIFTS (Geostationary Imaging Fourier Transform Spectrometer)为 NASA 新世纪计划地球观测 EO3 使命中装载的高光谱、高空间分辨率红外干涉 探测仪,将装载于静止气象卫星,计划于 2005 年发 射,分为两个阶段:第一阶段在美国上空进行试验; 第二阶段为业务卫星,运行在印度洋上空,将实现大 气的四维观测。而计划装载在美国 NPP 和 NPOESS低轨业务卫星上的 CrIS(Cross-track Infrared Sounder) 为高光谱红外干涉探测仪,将取代目 前 NOAA 业务卫星上的 HIRS 仪器,主要用于探测 大气温度、湿度的垂直分布、以改进天气预报和气候 预测。总共将有 4 个 CrIS,第一个仪器装载在 NPP 卫星(2006年发射),其他 3 个装载于 NPOESS 卫星 (2009 年发射)。GIFTS 和 CrIS 都属于高光谱红外 干涉探测仪,为减少未来业务卫星和研究卫星上携 带这些仪器的风险,在卫星发射之前的数年中,美国 NASA和 NOAA 开展多次机载试验,检测仪器设计 方案和数据处理算法,最终确定仪器性能指标。 NAST-I (NPOESS Aircraft Sounder Testbed-Interferometer) 为机载高光谱红外探测仪, 它是跨轨迹扫 描傅立叶分光计,其光谱分辨率和空间分辨率分别 为 0.25 cm⁻¹和 2.6 km,能够探测来自地球大气 645 ~2700cm⁻¹范围内的红外光谱辐射,NASA将该探 测仪装载在飞行高度为 20km 的 ER-2 高空飞机上。 自1998年3月首次飞行以来, NAST-I多次参与野 外试验,主要有1998年夏季的热带和中纬度的第三 次对流和水汽试验 CAMEX-3,1999 年的冬、春季威 斯康星试验 WINTEX。这些场地试验获取了许多 宝贵的观测数据,覆盖不同的纬度带和天气气候条 件,有益于反演算法的评价。有关 NAST-I 仪器性 能几次机载试验以及资料获取情况,可以参考网页 http://deluge.ssec.wisc.edu/~nasti/。

NAST-I 数据主要用于反演大气温度、湿度和 臭氧廓线。

2.1 特征向量回归反演法(Smith)^[4,6]

对于装载在高轨研究卫星上的 GIFTS 资料处

理,因为 GIFTS 测得的是高精度辐射率,因而仍可 采用 Smith于1976 年提出的特征向量回归反演方 法,通过直接建立卫星辐射测值与大气参数之间的 统计相关性,反演出大气参数。辐射计算和特征向 量分解都是脱机进行,因此,反演速度非常快,这种 方法选择 20~200 个特征向量即可保证相当高的反 演精度。

2.2 牛顿迭代法(Sisko)^[7]

NASA Langley 研究中心的 Sisko 和 Smith 等人 提出非线性大气参数反演算法。对于任何 NAST-I 通道,辐射传递方程的线性化形式如下:

$$\delta T_b = W_{T_s} \delta T_s + \int_0^{P_s} W_T \delta T(p) \, \mathrm{d} p + \int_0^{P_s} W_{\ln q} \, \mathrm{d} n \, q(p) \, \mathrm{d} p$$
(5)

其中, T_b 为 NAST-I 观测亮温,希腊字母 δ 表示观 测值与计算值之间的差值, W 为表面温度、大气温 度和大气湿度的权重函数。采用 Levenberg Marquardt 提出的混合牛顿迭代法,结合最速下降算法, 并引入 Hessian 逆矩阵,上述方程的迭代解具有如 下形式:

 $X_{n+1} = X_n - [\nabla^2 J(X) + \nu I]^{-1} \nabla J(X)$ (6) 其中,希腊字母 ν 为控制收敛速度的调节因子,如 果迭代过程收敛很快,则减小 ν ,否则增加 ν 值。J(X)为目标函数,定义为:

 $2 J (X) = (X - X^{0})^{T} C^{-1} (X - X^{0}) +$

 $[Y^m - Y(X)] E^{-1}[Y^m - Y(X)]$ (7) 式中 X^0 是 X 的初始猜想值 ,由统计回归反演得到 , Y^m 是观测亮温 , Y(X) 是快速辐射传递正演模式计 算得到的亮度温度 , E 是观测误差协方差矩阵 , C是初始场误差协方差矩阵 。这种非线性反演方法仍 处在不断的发展之中 ,对 CAMEX-3 试验资料的处 理结果表明 ,大气温度反演精度小于 2K ,大气水汽 混合比的反演精度在 $2g \cdot kg^{-1}$ 之内 。

2.3 物理反演法(Zhou)^[8]

1998 年 CAMEX-3 试验期间,获得总共 8632 个通道的红外辐射资料。对于如此多通道的数据处 理,选择一个快速精确的反演方法显得极其重要。 Zhou 、Smith 等人于 2002 年提出新的大气参数物理 反演法,用来处理 NAST-I 数据。为了更好地考虑 云的影响,首先利用红外窗区通道判断视场中是否 晴空,否则用 Smith 的 N^{*}方法进行晴空订正处理。 在此基础上,分两步获取高精度大气参数

2.3.1 特征向量回归反演法

这与前面提到的 Smith 特征向量回归反演法一 样,关键是如何选择大气训练样本库和最佳 EOF。 利用 NAST-I 试验区域的历史常规资料构建大气训 练样本数据集。根据大气温度和湿度权重函数的分 布特点选取 4514 个通道数据参与统计回归反演。 在考虑观测噪声和正演辐射模式等误差的基础上, 经过统计分析和独立样本检验,Zhou 等认为选择 23 ~26 个 EOF,即可得到与常规探空资料较吻合的反 演结果。

2.3.2 准非线性牛顿迭代法

由回归反演得到的初始场,经过非线性迭代处 理,有助于改善反演结果。NAST-I共有 8632 个通 道,尽管各个通道的权重函数相互重叠,但就随机观 测噪声而言,它们之间又是相互独立的,因此,进行 特征向量统计时,应采用尽量多的通道(例如前面提 到的 4514 个通道),而物理反演法应选择噪声小、权 重函数贡献大的那些最佳通道,以提高反演速度和 精度。采用非线性牛顿迭代法,并引入 Lagrange 平 滑因子,辐射传递方程的迭代解具有如下形式:

$$\delta X_{n+1} = (Y'_{n}E^{-1}Y'_{n} + YI)^{-1}Y'_{n}E^{-1} \cdot (\delta Y_{n} + Y'_{n}\delta X_{n})$$
(8)

其中,平滑因子 r的确定非常困难但极其重要。 r 依赖于观测值及其误差、初始场。当 r太小时,对 方程的约束不足,将导致解的不稳定。当 r太大时,对方程的约束过多,并产生大的反演误差。在 NASTI资料的反演处理中,Discrepancy Principle 方法用来确定平滑因子 r。

$$\parallel \mathbf{Y} [\mathbf{X}(\mathbf{y})] - \mathbf{Y}^m \parallel = \mathbf{\sigma}^2 \tag{9}$$

其中, ♂ 由仪器误差和正演辐射传递模式误差构成。用数值方法对上述方程求解,可以得到与每次 迭代过程对应的 *γ*:

$$Y_{n+1} = q_n Y_n \tag{10}$$

式(10)中 q 因子决定 r 是增加还是减少 r 它的取值 如下 :

 $q_0 = 1$ $\| Y[X(Y)] - Y^m \| < \hat{\sigma}, M q_n = 1.5$ $\| Y[X(Y)] - Y^m \| = \hat{\sigma}, 迭代结束$ (11) $\| Y[X(Y)] - Y^m \| > \hat{\sigma}, M q_n = 0.5$ 总之,调节因子的选择,应保证反演的稳定性和 收敛性。试验结果表明,物理反演对初始场(即统计 回归反演)的改进并不明显,而且物理反演过程占用 较多计算时间,只有当训练大气样本不具有很好的 代表性时,物理反演法才能改进统计回归所得到的 初始场。因此,Smith等认为,特征向量统计反演法 能够很好地完成 NAST-I的反演任务。

2.4 主分量反演法(Huang)^[9]

卫星高光谱数据具有信息量大和通道多等特点,主分量(Principal Component)技术在该领域的应 用将越来越重要。Huang 等于 2001 年在分析主分 量与大气各层温度、湿度参数之间相关性的基础上, 选取 200 个主分量对卫星模拟资料进行大气廓线反 演,得到较高反演精度。Huang 指出,除了在反演方 法中的应用,主分量技术对高光谱数据压缩也具有 很高的保真性。

参考文献

 Chahine M T, Aumann H and Goldberg M, et al. AIRS-team retrieval for core products and geophysical parameters. M Gunson, Ed.Algorithm Theoretical Basis Document, Version 2.1 (JPL D 17006). Jet Propulsion Laboratory, National Aeronautics and Space Administration, Pasadena, Calif., 1999.1 - 160

- 2 Smith W L. An improved method for calculating tropospheric temperature and moisture from satellite radiometer measurements. *Mon*. *Wea*. *Rev*., 1968, 96:387 - 396
- 3 Susskind J, Joiner J and Chahine M T. Determination of temperature and moisture profiles in a cloudy at mosphere using AIRS/ AM-SU. 1993, NATO ASI Series Vol.19.149 - 161
- S mith W L and Woolf H M. The use of eigenvectors of statistical co
 variance matrices for interpreting satellite sounding radiometer observations. J. At mos. Sci., 1976, 33:1127 1140
- 5 Rodgers C D. Retrieval of at mospheric temperature and composition from remote measurements of thermal radiation. *Rev*. *Geophys*. *and Space Phys*., 1976, 14, 609 - 624
- 6 Smith W L, Zhou D K and Harrison F W. et al. Hyperspectral remote sensing of atmospheric profiles from satellites and aircraft. Proc. of SPIE, 2001, V.4151, 94 - 102
- 7 Sisko C A, Smith W L and Tobin C D, et al. NAST-I: High spectral resolution measurements from a cross-track scanning infrared sounder and future implications for infrared sounders. Proc. of SPIE,1999, V.3867, 120 - 128
- 8 Zhou D K, Smith W L and Li J, et al. Thermodynamic product retrieval methodology for NAST-I and validation. Applied Optics, 2002 in print.(personal communication)
- 9 Huang H L, Antonelli P. Application of principal component analysis to high resolution infrared measurement compression of at mospheric profiles from satellites and aircraft. J. Appl. Meteor., 2001, 40:365
 - 388

Retrieval of Thermodynamic Parameters Using High Spectral Resolution Infrared Measurements from Satellites and Aircraft

Wu Xuebao Zhang Fengying

(National Satellite Meteorological Center, Beijing 100081, China)

Zhu Yuanjing

(Depart ment of Atmospheric Science of Peking University, Beijing 100871, China)

Abstract: The advanced sounding capability of high spectral resolution infrared satellite measurement is briefly described. The retrieval methods for thermodynamic parameters are reviewed with the current satellite and air craft data. The highlight is given to the eigenvector regression method and the physical retrieval method for the AIRS (Atmospheric InfraRed Sounder) onboard the second Earth Observing System of NASA.

Key words: high spectral resolution infrared sounder, eigenvector regression method, physical retrieval method