

文章编号: 1672-8785(2015)11-001-06

地基红外高光谱遥感大气温湿 廓线反演研究综述

黄 威 高太长* 刘 磊

(中国人民解放军理工大学气象海洋学院, 江苏南京, 211101)

摘 要: 作为气象学和气候学研究的重要参量, 温湿廓线在辐射传输过程、层结稳定度、对流有效位能、降水过程以及云的形成和演变过程中具有重要作用。目前, 对大气温湿廓线的遥感探测主要有激光雷达、微波辐射计以及红外高光谱分辨率探测器等探测技术。总结了地基红外高光谱遥感大气温湿廓线在仪器、反演算法等方面的研究进展, 重点介绍了统计反演算法和物理反演算法的基本原理, 具体分析了不同算法在反演精度、稳定性和计算时间等方面的技术特点。最后, 对目前地基红外高光谱遥感大气温湿廓线反演中存在的问题及未来的发展趋势进行了探讨。

关键词: 红外; 高光谱; 正则化方法; “剥洋葱”法

中图分类号: TP7 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3969/j.issn.1672-8785.2015.11.001

Review of Remote Sensing Retrieval of Temperature and Water Vapor Profiles Using Ground-based Infrared Hyper-spectral Data

HUANG Wei, GAO Tai-chang*, LIU Lei

(Institute of Meteorology and Oceanographic, PLA University of Science and Technology,
Nanjing, 211101, China)

Abstract: As the important parameters for meteorological and climate research, temperature and water vapor profiles are of importance to the study of radiation transfer, vertical stability, convective available potential energy, precipitation and cloud formation and evolution. At present, the main remote sensing techniques for detecting temperature and water vapor profiles include laser radars, microwave radiometers and hyper-spectral resolution detectors. The instruments and algorithms for temperature and water and vapor profile retrieval by ground-based infrared hyper-spectral remote sensing are summarized. The basic principles of statistical retrieval algorithms and physical retrieval algorithms are presented emphatically. The technical features of different algorithms in retrieval accuracy, stability and computing time are analyzed in detail. Finally, the limitation and future trend of the current atmospheric temperature and water vapor profile retrieval by infrared hyper-spectral remote sensing are discussed.

Key words: infrared; hyper-spectral; regularization method; onion peeling method

收稿日期: 2015-10-08

基金项目: 国家自然科学基金项目 (41575024)

作者简介: 黄威 (1992-), 男, 河南商丘人, 硕士研究生, 主要研究地基红外高光谱资料的反演与应用。

E-mail: huangwei_edu@sina.com

* 通讯作者: 高太长, 博导, 主要从事大气探测的研究与应用。E-mail: 2009gaotc@gmail.com

0 引言

气候研究以及数值天气预报对大气温湿廓线资料时空分辨率的要求越来越高。大气温湿廓线数据在辐射传输过程、层结稳定度、对流有效位能、降水过程以及云的形成和演变过程中具有重要的作用^[1]。目前,在天气预报模式中,利用探空气球释放探空仪仍是获取大气温湿数据的重要手段。这种探测方式成本高,时间分辨率较低,并且在测站稀疏的海洋、高海拔地区,探空作业难以进行。另外,由于大气中水汽浓度随时间的变化较快,水平梯度较大,随高度变化分布相差几个量级,探测器很难及时地响应水汽的变化,从而影响其探测精度。这些因素都给温湿廓线的探测带来了较大困难。

在过去的几十年中,科学家们研发出了多种探测对流层大气温湿廓线的新技术。按探测方式,它们大致可分为主动式和被动式两类技术。这两类技术在垂直分辨率和仪器自身对边界层大气的敏感性等方面各有优势。主动探测系统的代表设备有无线电声学探测系统(Radio Acoustic Sounding System, RASS)和拉曼激光雷达。RASS虽然能够提供对流层自由大气的虚温,但是在空中风较大以及大气层结稳定度较高的情况下,其探测精度会受到较大限制^[2];拉曼激光雷达在探测对流层的水汽廓线和气溶胶时表现良好,但是这种方法受太阳光的影响较大,白天探测会遇到较大的困难^[3]。被动式探测的代表设备是微波辐射计,它不仅能够探测大气温湿廓线,由于其响应波长较长,而且能够提供云层的微物理信息;但这种方法对 15 km 以上大气的敏感度较高,对边界层探测的精度不是很理想^[4]。

利用红外波段的辐射数据进行温湿廓线反演具有较长研究历史,其主要采用红外波段的二氧化碳吸收带和水汽吸收带。本文主要介绍自上世纪 70 年代以来地基红外高光谱遥感探测的发展历史和国内外的研究进展,主要从地基红外高光谱遥感反演技术发展及代表性仪器、数据去噪方法和温湿廓线反演方法等方面进行总结分析。

1 技术发展简介及代表性仪器

红外遥感反演温湿廓线技术的思路是首先在星载传感器上进行理论研究和试验。1959 年美国科学家 King 和 Kaplan 提出了在卫星上进行三维大气温度和湿度探测的想法^[5],其主要原理就是利用大气中含量稳定的 CO_2 的吸收带来探测大气的温度廓线,利用 H_2O 的吸收带来探测大气的湿度廓线。但是,红外遥感探测受仪器分辨率的影响较大。低分辨率的探测器因权重函数被加宽,接收到的能量是来自于某一厚层的大气,无法得到温度和湿度随高度分布的信息^[6]。当时,受制于硬件技术,温湿廓线的反演只处于理论阶段。随着光学方面的关键技术的突破,探测通道的增加以及高分辨率光谱探测器的出现,大气廓线的遥感探测获得了长足的发展。以 2002 年发射的 EOS Aqua 卫星上的 AIRS 为代表,探测光谱覆盖了 $650\sim 2700\text{ cm}^{-1}$ 范围内的共 2378 个通道,光谱分辨率平均为 $1200(\lambda/\Delta\lambda)$ ^[7]。每个通道的权重函数在某一高度达到了极大值,不同的通道对不同高度的大气层敏感,因此从 2378 个通道中选择合适的波段就可以提取出大气的温湿廓线信息。

虽然天基遥感具有空间覆盖广、水平分辨率高、时间取样频率高和资料一致性好的优点^[8],但是其在边界层受地表的影响较大。随着高度的降低,温湿廓线的反演精度会变得越来越低。而地基的遥感探测仪器由于接受的是大气的下行辐射,受地表的影响极小,因此可以很好地弥补天基仪器的缺陷。

Smith 于 1970 年提出可以利用地基遥感探测器进行探测,得到红外辐射数据,以获取大气的温度信息。1988 年在地基大气廓线实验(Ground-based Atmospheric Profiling Experiment, GAPEX)中,Turner 团队将高分辨率干涉仪(High-resolution Interferometer Sounder, HIS)放置于地面上对空中进行观测,证明了地基探测器遥感探测低层大气温度和湿度信息的可行性。1989 年,威斯康辛大学研发了第一款专门用于

探测温湿廓线的地基傅里叶光谱仪 (Atmospheric Emitted Radiance Interferometer, AERI-00)^[9]。它能够连续自动地观测 $520\sim 3000\text{ cm}^{-1}$ 波段的大气下行红外辐射, 其中 $540\sim 1800\text{ cm}^{-1}$ 波段的下行红外辐射由碲镉汞 (Mercury Cadmium Telluride, MCT) 探测器获得, $1800\sim 3000\text{ cm}^{-1}$ 波段的下行红外辐射由钽化铟探测器获得, 两个探测器以“三明治”的方式组合在一起。AERI 的观测光谱经辐射定标后具有极高的精度, 其辐射定标系统包括两个高精度校准黑体 (Hot Blackbody, HBB 和 Ambient Blackbody, ABB), HBB 称为高温校准黑体, 它的温度固定在 $60\text{ }^{\circ}\text{C}$ 附近, 而 ABB 的温度随着周围环境温度的变化而改变。在 AERI 的一个观测周期中, 前 3 min 对天空进行观测, 紧接着转动视场镜, 对两个黑体进行 5 min 的观测, AERI 通过精准控制黑体和各结构部件的温度, 辐射校准的偏差不超过 1%。因其观测光谱中包括二氧化碳吸收带、水汽吸收带、臭氧吸收带以及大气窗区, 故 AERI 常被用来探测边界层大气的温度和水汽的垂直分布。

我国早在上世纪 70 年代就开始了利用下行红外辐射数据反演大气温湿廓线的研究。曾庆存院士给出了红外遥感反演大气温湿廓线的原理和方法, 并在理论上阐述了地基遥感与天基遥感的巨大区别^[10]。但是当时受仪器硬件的制约以及重视程度不足等原因, 我国在地基遥感反演大气温湿廓线领域进展缓慢。进入 21 世纪以来, 我国在该领域的研究明显加大了力度, 其中中科院大气物理研究所在遥感云及大气温湿廓线等方面做了大量工作, 并提出了反演云底等效高度及等效发射率的新方法^[11]。

2 数据去噪处理

探测通道的增加, 不仅丰富了观测数据中大气状态、地表、气溶胶、痕量气体以及其它重要的大气参数信息, 同时也增加了数据中的冗余信息和噪声信息^[12]。由于边界层的湍流时间尺度低于小时量级, 捕捉大气的对流运动及云的快速演变, 需要更高时间分辨率的探测资料。威斯

康辛大学在 AERI 标准型的基础上开发了快速采样模式 (rapid sample mode), 将观测周期由原来的 8 min 缩短至 20 s, 大大缩短了采样时间。然而, 缩短仪器采样的时间间隔需要快速转换观测视场, 使得观测数据中包含更多的随机噪声^[11]。在利用地基红外高光谱数据资料遥感反演大气温湿廓线时, 辐射传输方程的非线性会使观测数据中的噪声在反向传播时被放大, 导致反演的结果较差甚至不稳定。由于地基红外高光谱包含的数据信息集中在边界层的下层, 噪声的反向传播造成的误差集中在边界层的上层。因此, 对于地基红外高光谱遥感探测, 其降噪的好坏将直接影响到反演结果的精度和稳定性。

目前, 高光谱数据降噪最常用的方法是主成分分析法, 其基本思想是利用奇异值分解 (Singular Value Decomposition, SVD) 将观测数据的协方差矩阵分解为若干个主成分, 并按照对应方差的值从大到小排列。排序靠前的主成分中包含的是大气信息; 随着主成分个数的增加, 包含的噪声信息越多。因此, 截取前 k 个主成分就可以滤掉后面主成分中所包含的噪声信息。归纳起来, 用主成分方法降噪大致包括五个步骤^[11]: (1) 计算观测光谱的协方差矩阵 X ; (2) 通过 SVD 方法分解 X , 获取特征向量和特征值; (3) 确定重构辐射光谱的最优主成分个数 k ; (4) 将各辐射光谱投影到 k 个特征向量构造的矢量空间, 计算出投影系数; (5) 利用投影系数重构辐射光谱, 从而去除原始数据的非相关噪声。

但是, 高光谱分辨率仪器的噪声在波数空间中并不均匀。在噪声较大的波段, 主成分分析法会适应噪声的特点而无法有效滤去噪声^[13]。Antonelli 通过用误差等效光谱对观测光谱进行标准化处理^[13], 将仪器噪声转化为了高斯白噪声, 有效去除了光谱数据中的非相关噪声。同时, 对主成分个数的截取也会导致丢失其中所包含的大气信息。因此, 如何截取最优的主成分个数 k , 使得既能保留绝大部分的大气信息, 又可以滤去观测数据中的噪声, 是一项需要重点关注的课题。Turner 等人将化学领域中的经验分

析方法引入了到光谱分析中,并在将标准化光谱噪声分解为相关噪声和非相关噪声两部分之后,利用经验公式给出了最佳 k 值^[14]。

3 温湿廓线反演方法

去噪后的地基红外高光谱数据可以用于反演大气边界层的温湿廓线。目前,主要有利用观测辐射和探空廓线历史数据的统计反演法和基于辐射传输过程的物理反演法。

3.1 统计反演方法

统计反演算法不考虑电磁波与大气的相互作用,而是建立辐射值与大气廓线之间的统计关系。正是这个特点,使得统计算法相比于物理反演算法计算速度更快,无论是在天基遥感还是在地基遥感中都得到了广泛的应用。目前,统计反演方法中主要有回归算法和人工神经网络算法。

回归算法本质上是基于最小二乘的统计方法,即将辐射传输方程线性化,利用由温湿廓线与对应的辐射值组成的样本在建立起的二者之间的最小二乘关系中寻找出最优的回归系数,将样本数据的偏差减至最小;然后利用实时获取的下行辐射数据,根据回归系数求出大气的温湿廓线。目前,该领域应用最广泛的是特征向量法。威斯康辛大学利用该方法开发了 IMAPP 软件包,目前该软件包在天基遥感探测中得到了广泛应用;在地基遥感探测中, AERI 在日常运行中使用的 AERIprof 软件包也是利用该算法计算大气温湿廓线并将之作为物理反演的初值的。

人工神经网络算法可实现输入空间到输出空间的非线性映射,相比于统计回归算法更接近大气温度和湿度廓线反演的物理本质^[15]。并且,该算法无需做关于数据分布的任何假定,具有较好的容错性。但是,相比于特征向量法,该方法在获取大气初始廓线的精度方面和用实际的观测资料做实验时,其精度并没有明显改进^[16],因此限制了该方法在获取大气初始廓线领域的应用。

3.2 物理反演方法

由于大气辐射传输方程是非线性积分方程,这类方程的最显著特征是不适定性,即解不能同时满足存在性、稳定性和唯一性的要求。这种解的不适定,很大程度上是由仪器的观测误差和大气辐射传输模式的误差造成的。因此需要研究控制反演不适定性和提高反演精度的有效方法。

在过去的几十年中,许多学者针对不同反演问题提出了许多物理反演方法。1970 年 Chahine 提出了松弛法,其基本思想是将初始猜值代入辐射传输方程中,计算出辐射值;然后将计算值与仪器实际观测值比较,如果残差接近于零或者达到某一设定的值,即为所求解;若残差未达到要求,则按照迭代公式更新,直至达到设定的要求为止^[17]。但是,该算法忽略了大气的内在联系,从而影响了反演的精度^[6]。针对辐射传输方程解的不适定性,对于地基遥感来说,目前主要有两种解决方案。第一种方案称为“剥洋葱”方法 (onion peeling), 该方法不直接对辐射传输方程求解,而是根据获取的大气初始廓线,从低到高逐层对大气温湿廓线进行调整,即将初始廓线代入辐射传输模式中,通过计算模拟辐射和观测辐射的差值来调整下层的温度或湿度值,然后将调整后的下层廓线和上层的初始廓线代入辐射传输模式,这样循环往复逐层向上调整。第二种方案是正则化方法,针对积分方程解不存在的问题,引入最小二乘解,使得方程的解总是存在,即用求取的温度廓线将模拟辐射和观测辐射的差值最小;对于解的不稳定,引入正则化算子可以在迭代过程中可以起到平滑的作用;对于解的不唯一性,可以使用初始值和背景误差协方差矩阵对方程的解进行约束。

3.2.1 “剥洋葱”方法

“剥洋葱”算法利用模式计算的辐射值与观测辐射的差值,根据物理迭代算法来调整初始廓线,使得模拟辐射与观测辐射的差值逐渐减小,直至达到设定的阈值,此时的迭代廓线即为最终的解。该方法共包含两步:首先,根据历史探空数据计算初始的温度和湿度廓线;其次,根据辐射传输方程建立一个循环迭代方案,利用第一步的初始值求出最优的温度和湿度廓线,

使模拟辐射和观测辐射的偏差变得最小。其中最关键的循环迭代部分包含了“剥洋葱”算法最主要的思想,其大致过程如下:将第一步获取的初始廓线代入逐线积分辐射传输模式,在温湿随高度呈线性变化的假设条件下,得到大气某一层温度(湿度)的迭代公式,利用观测辐射值、模式计算的模拟辐射值和下层温度(湿度)可以求出本层的温度(湿度)。因此,利用地面温度(湿度)从地面逐渐向上调整,可以得到边界层的温度(湿度)廓线。

自 Feltz 第一次提出利用 AERI 观测的下行红外辐射数据反演 3 km 以下的温湿廓线以来,该方法就获得了科学家的关注。威斯康辛大学依据该方法开发了 AERIprof 软件,并将其应用在 AERI 上。后来 Feltz, Turner 等陆续给出了利用该方法反演大气温湿廓线的结果。1999 年, W.L.Smith 阐述了该方法的具体步骤和数理关系,并利用 AERI 观测的数据得到了 3 km 以下大气的温湿廓线,其中温度廓线误差为 0.6~1.3 K,湿度廓线误差为 0.8~1.4 g/kg^[18]。

目前, AERI 采用了基于“剥洋葱”算法的 AERIprof 软件包。该软件包能提供高时间分辨率的大气温湿廓线资料,在 AERI 的日常运行中表现良好,是目前较成熟的一种软件包。但受限于反演问题的病态特性,该软件包非常依赖于初值问题的准确性,尤其是最底层大气初值的准确程度;另外,由于云会影响高光谱数据资料,目前该软件包只适用于晴空大气条件下的反演,而且“剥洋葱”算法无法提供反演结果的不确定度,这限制了该方法在某些领域的应用^[19]。

3.2.2 正则化方法

正则化方法在反演步骤上与“剥洋葱”算法类似,不同之处在于循环迭代方案。正则化方法结合观测误差与背景误差的欧几里得距离和正则化算子构建关于温湿廓线的泛函,并将其作为代价函数,从而实现辐射传输方程的线性化;然后,根据一阶变分原理求得最优解,使代价函数达到极小值,从而得到温湿廓线的迭代方案。

该方法中存在着诸多需要改进的方面。首先,该方法建立在线性化后的辐射传输方程的基础上,没有考虑辐射传输方程的非线性影响,特别是在求解水汽时,非线性更为突出,使得迭代速度和迭代精度等方面都存在不足。李俊等在辐射传输方程线性化的过程中,采用二阶导数得到了牛顿非线性迭代方案。D.D.Turner 于 2014 年第一次将这种方法应用在 AERI 上,并取得了较好的结果:与探空仪比较,温度廓线的平均偏差为 0.2 K,水汽廓线的平均偏差为 0.3 g/kg,反演的高度达到了 5 km^[19]。

其次,正则化算子 γ 的选择非常重要。在实际应用中, γ 的选取通常都是基于经验。Turner 是通过选取一组向量 (1000, 300, 100, 30, 10, 3, 1, 1, 1) 作为 γ 值来控制最优解的^[19]。这种选择方法以对初始廓线的依赖程度为出发点,没有考虑反演精度的改进。李俊、黄思训使用偏差原则方法对正则化算子进行了控制,他们以无线电探空资料为标准,将基于偏差原则的天基反演结果与经验法对比,发现反演精度在低层有明显的改进^[20]。这对地基遥感反演是很好的借鉴。

正则化方法很好地克服了“剥洋葱”算法的缺点,可以提供反演廓线的后验误差协方差矩阵。而且,该方法对初始廓线不敏感,即使在初始廓线精度较差的情况下仍然能够收敛到较高的精度。另外,正则化算法在晴天和有云条件下都可用于大气温湿廓线反演,而且还能得到云的液态水路径等云参数。

4 小结

光学器件关键技术的突破使得红外高光谱遥感探测获得了长足的进步。地基高光谱遥感探测以其在边界层探测精度高的特点获得了越来越多的关注,其中尤以威斯康辛大学研发的 AERI 为代表。介绍了地基高光谱遥感探测的发展历史及其在仪器和算法方面的研究进展,重点介绍了统计反演算法和物理反演算法。统计反演算法的计算速度快,算法稳定,能够为物理反演提供比较稳定、可靠的初值。其中,基于最

小二乘的特征向量法已经被广泛应用于地基和地基反演;神经网络算法相比于特征向量法更多地考虑了辐射传输过程中的非线性影响,但是在实际的反演实验中,其精度并没有改进。对于物理反演来说,比较成熟的是“剥洋葱”算法。在晴空条件下,其温(湿)度廓线的反演精度达到了 $0.6\sim 1.3\text{ K}(0.8\sim 1.4\text{ kg}^{-1})$ 。但是,该方法对初始廓线较依赖,而且无法解决云对反演结果造成的影响。正则化方法通过合理的调整正则化算子,使其对初始廓线的依赖性大大降低;并且该算法在云天条件下能够从观测的红外辐射中提取出温湿廓线和云的信息,对“剥洋葱”算法是很大的改进。

地基高光谱红外遥感反演温湿廓线目前有两个重要的研究方向。一是温湿廓线与云微物理参数一体化反演。由于下行的红外辐射不仅与大气的温湿廓线有关,而且也与云的有效粒子半径、粒子数密度以及冰水路径密不可分,因此理论上也可以从有云天气条件下的下行红外辐射中反演得到云的微物理参数信息。在LIBDIS辐射传输模式中,云的微物理参数与温湿廓线一样,都是作为辐射传输模式的输入参量,可以通过扰动各输入参量数值获取各云微物理参数和温湿廓线的雅克比矩阵^[21],然后利用正则化方法求取各输入参量的反演值。二是星地温湿廓线联合反演。对于地基遥感探测来说,观测数据中85%以上的温度信息在2 km以下^[19],其在边界层的探测较好;随着高度的升高,垂直分辨率呈指数形式递减。对于卫星遥感探测来说,受地表的影响,探测精度随高度的下降而逐渐降低。因此,卫星与地基探测仪器的联合探测不仅具有很好的互补性,而且还能获得很好的增益效果^[22]。

参考文献

- [1] Wulfmeyer V, Hardesty R M, Turner D D, et al. A Review of the Remote Sensing of Lower Tropospheric Thermodynamic Profiles and its Indispensable Role for the Understanding and the Simulation of Water and Energy Cycles[J]. *Reviews of Geophysics*, 2015, **53**(3):1002.
- [2] Feltz W F, Smith W L, Knuteson R O, et al. Meteorological Applications of Temperature and Water Vapor Retrievals from the Ground-Based Atmospheric Emitted Radiance Interferometer (AERI) [J]. *Journal of Applied Meteorology*, 1998, **37**(9): 857-875.
- [3] Turner D D, Feltz W F, Ferrare R A. Continuous Water Vapor Profiles from Operational Ground-Based Active and Passive Remote Sensors [J]. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 2000, **81**(6): 1301-1318.
- [4] Schneider M, Hase F, Blumenstock T. Water Vapour Profiles by Ground-based FTIR Spectroscopy: Study for an Optimised Retrieval and its Validation[J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2006, **6**(3): 811-830.
- [5] 程洁, 柳钦火, 李小文. 星载高光谱红外传感器反演大气痕量气体综述 [J]. *遥感信息*, 2007(02): 90-97.
- [6] 李俊, 曾庆存. 晴空时大气红外遥感及其反演问题 I. 理论研究 [J]. *大气科学*, 1997(01): 2-10.
- [7] 官莉. *星载红外高光谱资料的应用* [M]. 北京: 气象出版社, 2007.
- [8] 官莉. 卫星红外超光谱资料及其在云检测、晴空订正和大气廓线反演方面的应用 [D]. 南京信息工程大学, 2005.
- [9] Knuteson R O, Revercomb H E, Best F A, et al. Atmospheric Emitted Radiance Interferometer. Part I: Instrument Design[J]. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 2004(12): 1763-1776.
- [10] 曾庆存. *大气红外遥测原理* [M]. 北京: 科学出版社, 1974.
- [11] 潘琳. 利用地基高分辨率红外辐射遥感云及边界层大气温湿廓线的研究 [D]. 中国科学院大气物理研究所, 2012.
- [12] Kang S, Goo T, Ou M. Improvement of AERI T/q Retrievals and Their Validation at Anmyeon-Do, South Korea[J]. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 2013, **30**(7): 1433-1446.
- [13] Antonelli P. A Principal Component Noise Filter for High Spectral Resolution Infrared Measurements[J]. *Journal of Geophysical Research*, 2004, **109**(D23):102.
- [14] Turner D D, Knuteson R O, Revercomb H E, et al. Noise Reduction of Atmospheric Emitted Radiance Interferometer (AERI) Observations Using Principal Component Analysis[J]. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 2006(9): 1223-1238.
- [15] 刘. 利用人工神经网络方法反演晴空大气湿度廓线的研究 [D]. 南京信息工程大学, 2011.
- [16] 官莉, 刘, 张雪慧. 人工神经网络算法在红外高光谱资料反演大气温度廓线中的应用 [J]. *大气科学学报*, 2010(03): 341-346.

(下转第 12 页)