

基于超光谱热红外数据的一氧化碳反演通道选择

张贝贝^{1,2}, 王宁^{1*}, 姚微源^{1*}, 钱永刚¹, 马灵玲¹, 李传荣¹, 唐伶俐¹, 刘耀开¹,
高彩霞¹

(1. 中国科学院空天信息创新研究院 定量遥感信息技术重点实验室, 北京 100094;

2. 中国科学院大学 电子电气与通信工程学院, 北京 100049)

摘要: 一氧化碳(CO)在热红外波段吸收强度弱且吸收区内具有较多的干扰信号,利用热红外数据反演高精度CO廓线的难度大。超光谱红外探测仪的开发和应用,为提升CO廓线的反演精度提供了可能。然而,随着超光谱热红外数据分辨率的上升、通道之间的间隔变窄,这在给数据引入特有可反演信息的同时产生大量冗余信息。为了保证反演精度和效率,有必要对通道进行选择来获取包含最大可反演信息的通道同时剔除冗余信息。提出了一种同时考虑通道灵敏度和权函数特性的峰采样通道选择方法,用于从超光谱热红外数据中反演CO廓线。该方法首先通过分析通道对不同气体的灵敏度情况,去除受其他气体干扰较大的通道获得初选通道。然后,分析初选通道的权函数特性后发现,位于CO亮温变化谱线中峰顶和峰底的通道分别包含了不同大气层的CO反演信息,将这些通道选取为最终通道选择结果。以阿拉善沙漠地区、京津地区、长江三角洲及珠江三角洲的冬夏晴空大气为主要研究对象,比较峰采样法与最优灵敏度剖面法(OSP)所得的通道选择结果及相应的CO廓线反演精度。结果表明,该方法选择的通道比OSP方法选择的通道能覆盖更宽的光谱范围且包含更多的CO反演信息。而且,峰采样通道选择方法的应用可以有效提高本文所研究区域和季节的CO廓线反演精度,其中在阿拉善地区冬季大气条件下改善效果最为明显,反演结果的均方根误差(RMSE)由 3.23×10^{-8} g/g降至 3.07×10^{-8} g/g,平均反演精度提高了10.56%。

关键词: 大气科学; 通道选择; CO廓线反演; 超光谱热红外数据; 灵敏度; 权函数特性

中图分类号: P4

文献标识码: A

Channel selection for carbon monoxide retrievals based on ultra-spectral thermal infrared data

ZHANG Bei-Bei^{1,2}, WANG Ning^{1*}, YAO Wei-Yuan^{1*}, QIAN Yong-Gang¹, MA Ling-Ling¹,
LI Chuan-Rong¹, TANG Ling-Li¹, LIU Yao-Kai¹, GAO Cai-Xia¹

(1. Key Laboratory of Quantitative Remote Sensing Information Technology, Aerospace Information Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100094, China;

2. School of Electronic, Electrical and Communication Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract: As the weak absorption intensity and high interference signals in the thermal infrared band of carbon monoxide (CO), it is difficult to retrieve CO profiles with promising accuracy from thermal infrared data. The development and application of ultra-spectral infrared detector make it possible to improve the retrieval accuracy of CO profile. However, the ultra-spectral resolution and the huge channel numbers of the data not only enhance the abundant atmospheric retrieval information, but also induce lots of redundant information. As such, it is necessary to do the channel selection to ensure the accuracy and efficiency of retrieval. In this paper, a channel selection method considering both channel sensitivity and weighting function characteristics is proposed to CO profile retrieval of ultra-spectral infrared data. First,

收稿日期: 2020-04-16, 修回日期: 2020-05-15

Received date: 2020-04-16, Revised date: 2020-05-15

基金项目: 国家重点研发专项(2016YFB0500602); 自然科学基金(41601398, 6170011903); 中科院大科学项目“全球遥感定标基准网”(181811KYSB20160040); 中科院先导项目(XDA13030402)

Foundation items: Supported by the National Key Research and Development Program of China (2016YFB0500602), the National Natural Science Foundation of China (41601398, 6170011903), the Bureau of International Co-operation Chinese Academy of Sciences (181811KYSB20160040), and the Strategic Priority Research Program of Chinese Academy of Sciences (XDA13030402)

作者简介(Biography): 张贝贝(1996—), 女, 河南信阳人, 硕士研究生, 主要研究领域为热红外大气反演. E-mail: bbzhang0@126.com

* 通讯作者(Corresponding author): E-mail: wangning@aoe.ac.cn, yaow@aircas.ac.cn

by analyzing the gas sensitivity of the channels in CO absorption band, the channels severely affected by other gases are excluded and initial channel group is obtained. Then, the weighting function characteristics of the initial channel group are studied. The channels located at the bottom and top of the peaks at the CO absorption spectrum, suggesting abundant gas retrieval information about different atmospheric layer, are selected as the final channel selection results. The channel selection method is applied for the winter and summer air masses in Alxa desert area, Beijing-Tianjin area, Yangtze River Delta, and Pearl River Delta. By comparing with the Optimal Sensitivity Profile method (OSP), the channels selected by the proposed method can cover a wider spectral range and have more CO absorption characteristics. Additionally, the application of the proposed method can improve the retrieval accuracy of CO profiles in all the regions and seasons studied in this paper. The best improvement effect was observed in the Alxa desert area in the winter, whose root mean square error (RMSE) was reduced from 3.23×10^{-8} g/g to 3.07×10^{-8} g/g, with an average increase in accuracy of 10.56%.

Key words: atmospheric science, channel selection, CO profile retrieval, ultra-spectral thermal infrared data, sensitivity, weighting function characteristics

引言

CO是大气中一种重要的痕量气体,同时是主要的大气污染物之一,高浓度的CO会对人体健康造成严重的危害^[1]。在污染大气中,当氮氧化物和碳氢化合物达到一定浓度时,CO可通过光化学反应生成O₃,形成二次污染^[2]。此外,CO作为对流层中羟基(OH)的主要汇,其浓度的增加会增大OH的消耗,削弱大气的氧化能力,间接影响大气中温室气体CO₂、CH₄等在大气中的浓度分布和变化^[3],所以CO也被称作间接温室气体,对全球气候变化有重要影响。因此,对大气中CO的含量及分布状况进行监测具有重要意义。

卫星遥感被认为是获取区域以及全球尺度上长时间序列地表、大气参数最为切实可行的方案^[4-5]。CO的吸收波段主要位于4.67 μm的热红外波段。但是,由于CO在大气中的浓度低、红外吸收强度弱,由CO浓度变化引起的通道亮温变化容易被CO₂、H₂O、O₃、N₂O引起的亮温变化以及仪器的噪声所掩盖^[6]。因此,在采用现有的高光谱传感器数据进行CO廓线反演时,所得结果的精度不够理想^[7-8]。而与高光谱传感器相比,超光谱热红外数据具有更高的光谱分辨率及更多的光谱通道,可以优化反演所得廓线的垂直分辨率,提高廓线反演的精度^[9]。因此,近年来,研究人员对超光谱热红外传感器的研发和应用做了大量的工作。例如,美国AURA卫星上搭载了对流层放射光谱仪(TES),分辨率为0.1 cm⁻¹,可以获得温湿度、CH₄、O₃、CO等廓线场频。我国在风云四号气象卫星及高分五号卫星上分别搭载了高光谱红外大气垂直探测仪(GHIRS)和大气环境红外超光谱分辨率探测仪(AIUS),获得的产品可以用于CO₂、CH₄、O₃、NO₂等大气成分和气溶胶的监测。除此之外,我国“十三五”期间部署了

“大气辐射超光谱探测技术”项目,研制波谱范围覆盖3.2~15.4 μm,天底观测模式下分辨率达到0.05 cm⁻¹的大气辐射超高光谱探测仪。

然而,超光谱热红外传感器通道数量多、数据量大,给数据的计算、存储和传输带来了很大的不便^[10]。另外,与高光谱数据类似,超光谱热红外数据通道之间存在很强的相关性,这种相关性会造成反演的不稳定性,进而影响利用超光谱分辨率资料进行大气参数反演时反演产品的精度^[11]。因此在实际应用中往往要从所有的通道中选择出若干对反演起重要作用的通道子集,来提高反演的效率和精度。

目前,通道选择的方法多种多样,主要可以分为两类:一类是基于权函数的通道选择方法,如资料精度矩阵法^[12]和Jacobian法^[13]等。该类方法主要考虑各通道对大气参数的灵敏度,未能全面考虑通道噪声、背景场以及具体反演方案的影响^[14]。另一类方法是基于信息容量的通道选择方法,如自由度及信息量分析法^[15]、常量迭代法^[16]和大气可反演指标法^[17]等。这类方法在选择通道时主要考虑通道的可反演能力,定量获取通道对反演参数的贡献。该类通道选择方法比较依赖先验信息的准确度^[14]。Crevoisier等人^[18]在采用AIRS数据选择CO₂廓线的反演通道时,结合以上两类方法,提出了最优灵敏度剖面法(the Optimal Sensitivity Profile method, OSP)。OSP方法选择通道时主要分三个步骤:首先,选出每个气压层中待反演气体Jacobian峰值最大的通道;其次,计算待反演气体信号与干扰信号的比值(Signal-to-Interference ratio, 简称为STI),设定阈值后,剔除STI值小于这一阈值的通道;最后,剔除待反演气体本身信号弱的通道,获得通道选择结果。该方法所选通道的权函数在大气垂直方向上分布均匀,通道对反演气体浓度变化具有较高的

灵敏度,同时还被应用在 N_2O 、 CO 和 CH_4 廓线反演的通道选择过程中,是一种适用于高光谱热红外数据气体廓线反演的通道选择方法。

对于超光谱探测仪来说,其光谱分辨率和通道数量是 AIRS 传感器的十倍以上,较窄的通道间隔难以避免地给数据带来大量的相似信息。若采用 OSP 法对超光谱热红外数据进行通道选择,一些包含相似有效反演信息的相邻通道会被筛选出来。具体表现为所选通道会聚集在某些波数范围内,涵盖大量的冗余信息,同时,这些通道对应的权函数不能覆盖 CO 所在的大气层,影响反演的效率和精度。针对超光谱数据 CO 通道选择的问题,本论文对 CO 红外吸收区各通道的权函数特征进行了深入分析,发现位于 CO 亮温变化谱线特征峰顶部和底部的通道对应的权函数强度差异较大,但是强度低的通道中包含了更多低海拔大气的反演信息^[19],这些通道无法被现有的通道选择方法识别。为确保消除冗余信息的同时又能够使通道中包含充分的反演信息,本论文提出的通道选择方法在根据气体灵敏度对通道进行初步选择的基础上,创新地根据通道的权函数特征及通道在 CO 亮温变化谱线特征峰上的位置进行采样。下面将对该方法进行具体描述并对通道选择结果进行分析。

1 实验数据

1.1 研究区域

首先拟挑选包含不同 CO 浓度特征的局地典型地区大气作为主要研究对象。白文广等人^[20]利用搭载在 TERRA 卫星平台上的对流层污染测量仪 (MOPITT) 长时间观测数据 (2000 年 3 月~2009 年 2 月) 对中国区域 CO 时空分布特性进行了分析,图 1 显示了中国区域 CO 柱总量的多年平均分布情况。 CO 柱总量在中国地区总体上呈现东高西低的分布状态。柱浓度的高值区域主要分布在京津冀以及长江三角洲、四川盆地、珠江三角洲、海南地区和东北少量高值区;低值区主要分布在我国广大的西部地区,青藏高原地区为低值中心。中国区域 CO 柱总量具有明显的季节分布特征。中国全境的垂直柱浓度季节波动显著,冬春高,夏秋低,东、西部的低值分别出现在夏季和秋季。

根据收集到的情况,选择 CO 浓度、温度和湿度不同的四个典型地区进行研究。北京-天津地区 (经度: $116^\circ E \sim 118^\circ E$, 纬度: $39^\circ N \sim 41^\circ N$) 作为 CO 反演高值区, CO 浓度低的阿拉善沙漠地区 (经度:

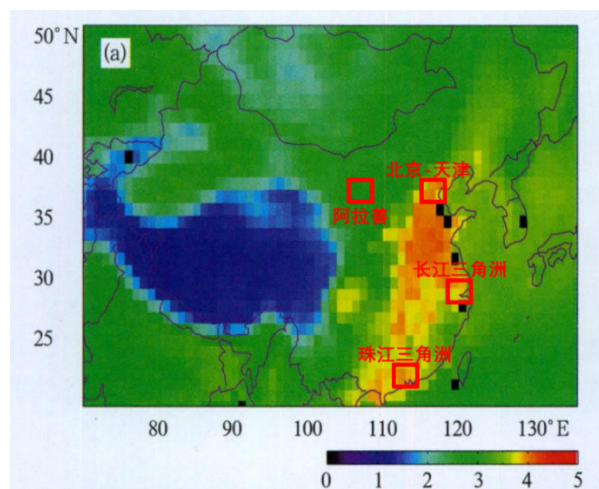


图1 中国区域2000年3月-2009年2月 CO 柱总量多年平均分布^[20]

Fig. 1 China's regional annual average distribution of CO columns from March 2000 to February 2009^[20]

$102^\circ E \sim 104^\circ E$, 纬度: $39^\circ N \sim 41^\circ N$) 作为背景区。另选两个气候较为湿润、水汽含量较高的长江三角洲 (经度: $120^\circ E \sim 122^\circ E$, 纬度: $30^\circ N \sim 32^\circ N$) 和珠江三角洲 (经度: $113^\circ E \sim 115^\circ E$, 纬度: $22^\circ N \sim 24^\circ N$) 地区以研究不同地域和气候的大气条件下本文提出的通道选择方法的适用性。

1.2 大气廓线数据获取及超光谱热红外数据模拟

本研究所使用的实验数据是2011~2016年1月份(冬季)和7月份(夏季)北京-天津、阿拉善、长江三角洲和珠江三角洲地区的大气廓线资料。数据以 $1^\circ \times 1^\circ$ 的分辨率从欧洲中期天气预报中心 (European Centre for Medium-Range Weather Forecasts, ECMWF) 系统的哥白尼大气监测服务 (Copernicus Atmosphere Monitoring Service, CAMS) 再分析数据集^[21] 下载。CAMS再分析数据集是全球大气成分再分析数据集之一。其中的廓线产品是 L60 大气分层模式, 相比之下 L91 大气分层模式具有更高的大气垂直分辨率, 因此, 在数据模拟时将下载的 L60 大气分层模式数据内插为 91 层开展相应的反演试验。通过对下载的 CAMS 再分析数据进行处理, 得到 CO 、 CH_4 、 O_3 、 NO_x 、温度和水汽的初始廓线。并筛选出北京-天津地区的 7 623 条晴空廓线、阿拉善地区的 7 797 条晴空廓线、长江三角洲地区的 2350 条晴空廓线和珠江三角洲地区的 1 320 条晴空廓线作为初始样本用于通道选择实验。

本研究主要是为了支持中国国家重点研发计

划所部署的大气辐射超光谱探测器数据处理。在天底观测模式下,该传感器有望获得 650 cm^{-1} ~ $3\ 050\text{ cm}^{-1}$ 波数范围内的信号,光谱分辨率预计为 0.05 cm^{-1} 。预计的噪声等效温差(NE ΔT)为 $0.3\text{ K}@280\text{ K}$ 。本文中的实验数据由高光谱大气辐射传输模型 4A/OP (Operational release for Automatized Atmospheric Absorption Atlas) 进行模拟。对于每条廓线,设定地表温度为大气底部的温度,地表发射率为 1,所有模拟都忽略了太阳的影响。对于每个通道,仪器产生的噪声由公式(1)计算:

$$\text{NE}\Delta T\{T(\nu)\} = \text{NE}\Delta T\{T_{ref}(\nu)\} \frac{\frac{\partial B}{\partial T}\{T_{ref}(\nu)\}}{\frac{\partial B}{\partial T}\{T(\nu)\}}, \quad (1)$$

式(1)中, $\text{NE}\Delta T\{T(\nu)\}$ 是指位于波数 ν 处的通道的亮度温度 $T(\nu)$ 处所取的噪声等效温差; B 是普朗克辐亮度;参考噪声 $\text{NE}\Delta T\{T_{ref}(\nu)\}$ 等于 0.3 K ;参考温度 T_{ref} 设置为 280 K 。

2 通道选择方法

2.1 灵敏度分析

在进行通道选择前,首先需要对大气中的主要气体成分进行灵敏度分析,来确定待反演气体的热红外吸收区。同时,也可以获得待反演气体热红外吸收区内,各通道因其他气体的浓度变化而引起的亮温变化。

在分析这些通道的灵敏度时,需要确定大气中每种气体的扰动量,以获得给定通道对相关大气成分变化的响应。对于 CO,选择将季节性 CO 循环平均峰间振幅的一半作为扰动量^[22],经计算约为 10%。大气中相对常见的其他几种气体, O_3 、 H_2O 、 N_2O 、 CO_2 、 CH_4 、 NO 、 NO_2 和 SO_2 的扰动量,以与 CO 类似的方式进行计算^[23]。假定各气体的扰动量为常数,经计算 O_3 为 16%, H_2O 为 40%, N_2O 为 2%, CO_2 为 16%, CH_4 为 2%, NO 为 4%, NO_2 为 3%, SO_2 为 3%。

为了研究每个通道对不同气体的灵敏度,在模拟过程中对气体的含量进行扰动。利用北京-天津地区冬季 6847 个晴空廓线的平均数据,模拟计算了 CO、 CO_2 、 H_2O 、 N_2O 、 O_3 、 CH_4 、 NO 、 NO_2 和 SO_2 扰动引起的亮度温度变化,结果如图 2 所示。

结果表明,CO 的敏感波段在 $2\ 050\sim 2\ 250\text{ cm}^{-1}$ 之间。还可以看出,四种气体: CO_2 、 H_2O 、 N_2O 和 O_3 的吸收带与 CO 的敏感带重叠。这些气体的扰动将影响 CO 的反演过程。因此,在下面的章节中,将这

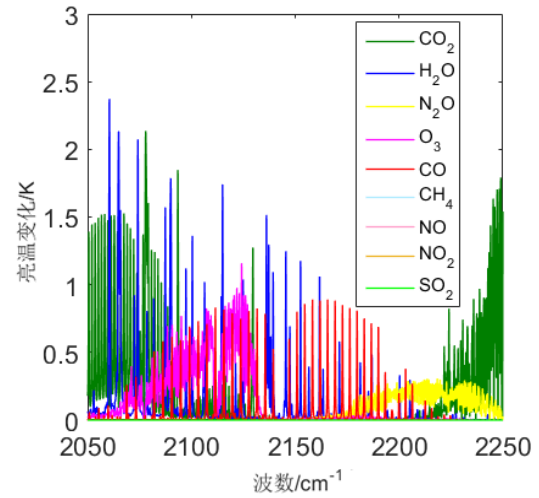


图 2 4.67 μm 波段上各通道对 CO_2 、 H_2O 、 N_2O 、 O_3 、 CO 、 CH_4 、 NO 、 NO_2 和 SO_2 的灵敏度

Fig. 2 Channel sensitivities to CO_2 、 H_2O 、 N_2O 、 O_3 、 CO 、 CH_4 、 NO 、 NO_2 、and SO_2 at the 4.67 μm band

四种气体因浓度变化在 CO 红外吸收区内引起的亮温变化称为“干扰”信号。

2.2 信噪比计算及初始通道选择

采用超光谱热红外数据反演 CO 廓线时,所选的通道首先必须对待反演气体的浓度变化具有最高灵敏度,并且呈现出对大气中其他气体或热力学变量的最低灵敏度。本文采用 Crevoisier 等人^[18]提出的信噪比概念,将 CO 扰动所产生的亮温变化值称为“信号”,干扰参数扰动所产生的亮温变化值称为“噪声”,CO 信号与干扰信号总和的比值称为“信噪比”(STI)。因此,选择通道时,在得到各通道对不同气体成分的灵敏度后,选择呈现最高“信噪比”的通道。STI 的方程如下:

$$\text{STI} = \frac{\Delta BT_{\text{CO}}}{(\Delta BT_{\text{CO}_2} + \Delta BT_{\text{H}_2\text{O}} + \Delta BT_{\text{N}_2\text{O}} + \Delta BT_{\text{O}_3})}, \quad (2)$$

其中, ΔBT_x ($x = \text{CO}$ 、 CO_2 、 H_2O 、 N_2O 、 O_3) 表示各通道上气体扰动引起的亮温变化。

本研究中,选择 STI 比值大于 1 的通道作为初选通道。此时,通道上 CO 的灵敏度高于其它气体灵敏度的总和。根据北京-天津地区冬季平均晴空廓线模拟获得的数据,STI 值大于 1 共有 300 个通道,这些通道在 CO 亮温变化谱线上的分布情况如图 3 所示。从图 3 中可以看出,选择出的通道能够基本覆盖 CO 亮温变化谱线,确保通道能够包含丰富的 CO 信息。但是,初选通道在谱线上的分布较为密集,特别是在 $2\ 150\text{ cm}^{-1}$ 到 $2\ 200\text{ cm}^{-1}$ 的波数范围内。这些聚集的通道包含较多相似的 CO 信息,影响反

演效率。

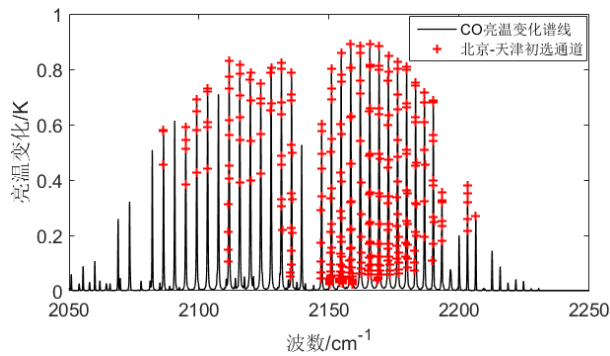


图3 北京-天津地区冬季大气条件下STI值大于1的300个通道在CO亮温变化谱线上的分布情况

Fig. 3 The distributions of the 300 channels in the spectrum of CO brightness temperature change selected by analyzing the STI ratio ($STI > 1$) for the air masses of Beijing-Tianjin area in winter

2.3 亮温变化谱线特征峰采样

为了在一定程度上去除通道中的冗余信息,同时较大程度保留CO的可反演信息,对通道权函数的特征进行了深入分析。权函数可代表通道受到不同高度大气层结构的影响情况,并能反映通道探测信息来源的分布情况^[24]。权函数可由通道辐亮度相对于特定大气层中CO气体混合比的偏导数进行计算。在实际的运算过程中,通过求解雅可比矩阵得到权函数。图4展示的是针对北京-天津地区冬季大气获得的初选通道集合中300个通道的权函数曲线,曲线较为密集,且部分曲线的形状相似。

为进一步去除冗余信息,本研究细致分析了CO亮温变化谱线上位于不同位置的通道权函数特征。图5为初选通道中位于CO亮温变化谱线上特征峰顶部和底部通道的权函数。从图5中可以看出,位于特征峰顶部的通道对应的权函数峰较尖锐,峰强度较大,对CO浓度变化的响应更强烈,峰位置集中在300~500 hPa范围内;位于特征峰底部的通道权函数曲线较为平缓,半波全宽数值大,包含更大范围的CO信号,特别是低海拔的大气层。

位于CO亮温变化谱线中峰顶部和底部通道的权函数特征峰位置和形状存在较大差异,说明两种类型的通道包含了不同的CO反演信息。为了提高通道在特定大气层的灵敏度,排除其他权函数峰的影响,本研究采用峰采样的方法对初选通道进行进一步筛选,具体为选择位于峰顶部和底部的3到4个通道(图6),作为针对局地地区大气的通道选择

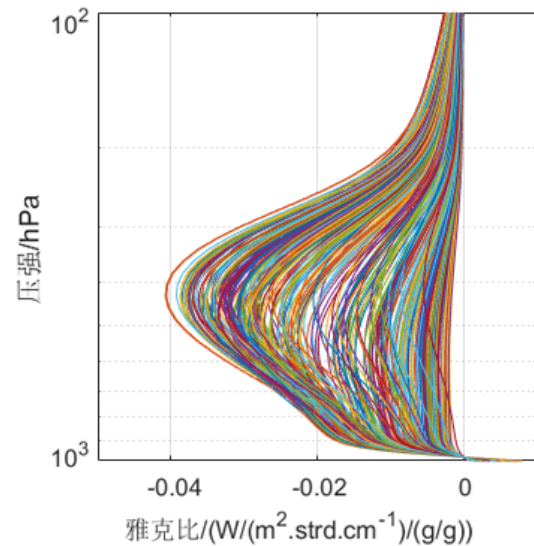


图4 北京-天津冬季大气条件下初选通道集合的雅可比

Fig. 4 Jacobians of the initial channel group for the air masses of Beijing-Tianjin area in winter

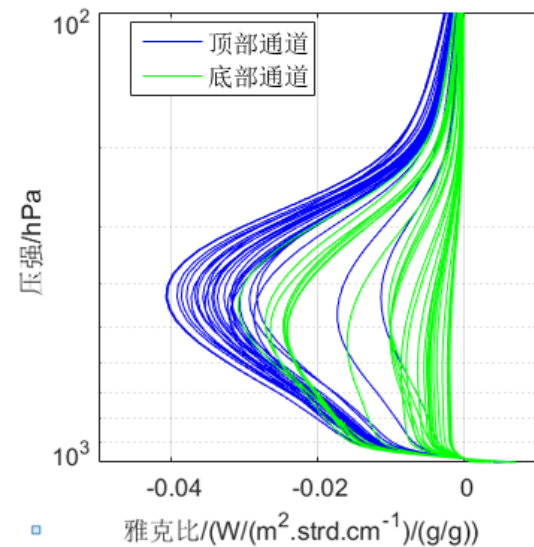


图5 北京-天津冬季大气条件下初选通道集合中位于CO亮温变化谱线特征峰顶部和底部通道的雅可比

Fig. 5 Jacobians of the channel at the top and bottom of characteristic peak of the CO brightness temperature change spectrum among the initial channel group for the air masses of Beijing-Tianjin area in winter

结果,即局地峰采样通道选择结果。

3 通道选择试验

3.1 通道选择结果

北京-天津、阿拉善、长江三角洲和珠江三角洲四个典型地区冬夏季的局地峰采样通道选择结果如图7所示。从图中可以看出,一些通道的灵敏度

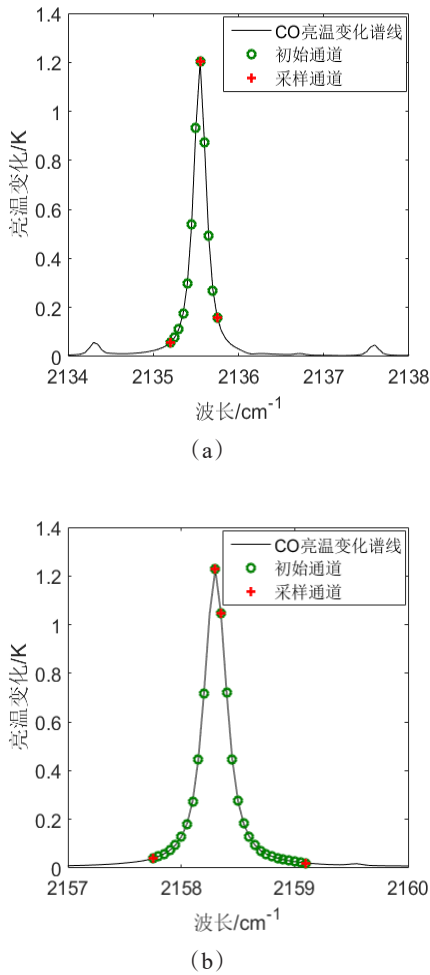


图6 对位于亮温变化谱线特征峰上的初选通道集合进行采样的示意图(a)3个通道(b)4个通道

Fig.6 Schematic diagram of channel selection from the initial channel group at the peak of the CO brightness temperature change spectrum(a)three channels(b)four channels

强、包含信息容量丰富,在不同大气状况下都会被选为待反演通道。然而,通道选择结果中也存在一些通道,仅在某个特定大气状况下会被选取出来,导致不同地区及季节大气状况的通道选择结果并不完全相同。因此,在进行不同局地地区及不同季节大气状况下的CO廓线反演时,需要分别对超光谱数据进行通道选择,工作量极大。

基于四个典型区域大气条件的局地峰采样通道选择结果,提出了一种适用于不同大气状况的通道选择方案。首先,将这些通道选择结果中相同的通道进行挑选,再将结果中不同的通道添加进子集,以应对不同大气湿度和CO含量变化带来的影响。经处理,针对冬季四个地区大气状况的通道集共有167个通道,即图7(a)中所示通道的集合。针

对夏季大气状况的通道集共有146个通道,即图7(b)中所示通道的集合。二者合并后,共有241个通道,将其定义为峰采样通道集。

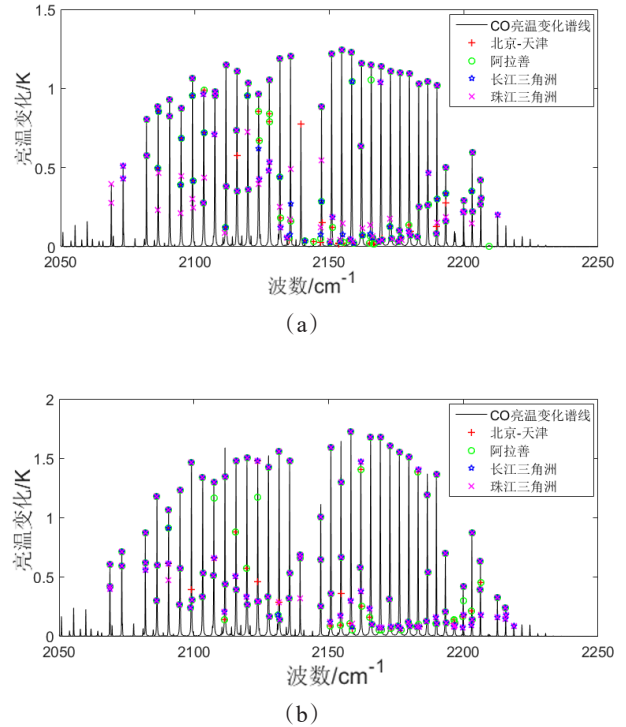


图7 四个地区(a)冬季和(b)夏季大气条件下通过峰采样通道选择方法选出的通道在CO亮温变化谱线上的分布

Fig.7 The distribution in the CO brightness temperature change spectrum of the channels selected by the Peak sampling channel selection method for the air masses of four regions in (a)winter and(b)summer.

3.2 CO廓线反演结果

为了体现在超光谱热红外数据CO反演中通道选择的必要性及峰采样通道选择方法的适用性,在该小节中,对峰采样通道选择方法、OSP方法选出的241个通道和CO热红外吸收区内的4001个通道对应的CO廓线反演结果进行了比较。本论文采用统计的方法反演获取CO廓线。根据北京-天津、阿拉善、长江三角洲和珠江三角洲地区的大气廓线资料,首先利用4A/OP模拟获得超光谱热红外星上观测数据,建立大气廓线与星上观测数据之间的统计回归方程后,采用最小二乘法对方程进行求解,最终获得CO廓线的反演结果。图8和图9分别表示在不同区域不同季节大气条件下利用模拟超光谱数据反演所得CO廓线的均方根误差(RMSEs)。文中RMSE通过公式(3)进行计算:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\mathbf{R}_{i,j} - \mathbf{T}_{i,j})^2}{n}}, \quad (3)$$

式(3)中, $\mathbf{R}_{i,j}$ 为反演得到的第 j 层第 i 条廓线的气体混合比; 相应的, $\mathbf{T}_{i,j}$ 为初始样本的第 j 层第 i 条廓线的气体混合比; n 为廓线条数。

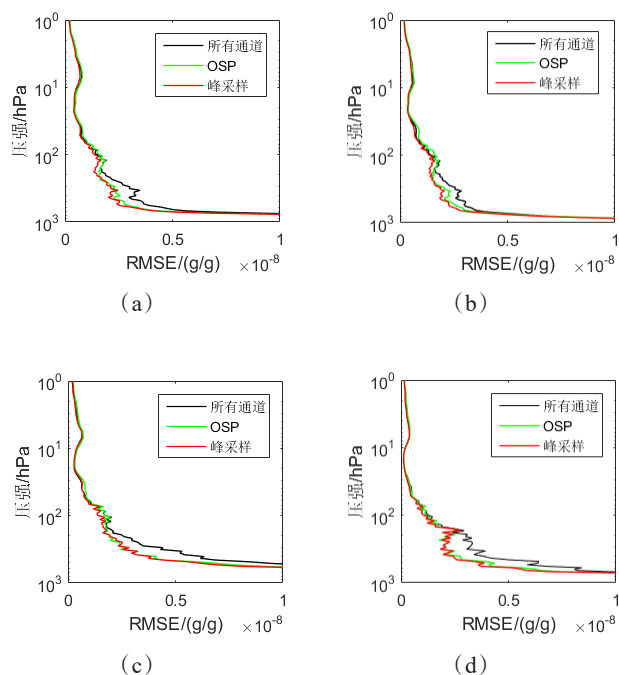


图8 (a)北京-天津(b)阿拉善(c)长江三角洲(d)珠江三角洲冬季大气条件下通过峰采样通道集,OSP法通道集和所有4001个通道进行CO廓线反演所得结果的RMSE

Fig. 8 The RMSEs of the retrieved CO profiles by the Peak sampling channel set, OSP channel set and all 4001-channel set for the winter air masses in (a) Beijing-Tianjin (b) Alxa (c) Yangtze River Delta (d) Pearl River Delta

从图8和图9中可以看出,在任意大气条件下,将CO热红外吸收区内的所有通道都用于CO廓线反演时,其反演精度大大低于其他两种方法在反演中应用获得的精度,这是由于未经选择的通道中相当一部分通道对CO的灵敏度很低,远远不及对其他干扰气体的灵敏度。该结果证明了对超光谱热红外数据反演CO廓线前进行通道选择的必要性。进一步分析峰采样通道集和OSP方法通道集获得的廓线结果精度后发现,在冬季情况下,本文所得的峰采样通道集所获得的CO廓线精度优于OSP方法。但是,在夏季情况下,峰采样通道集反演所得的精度与OSP方法的反演精度没有明显的差异。

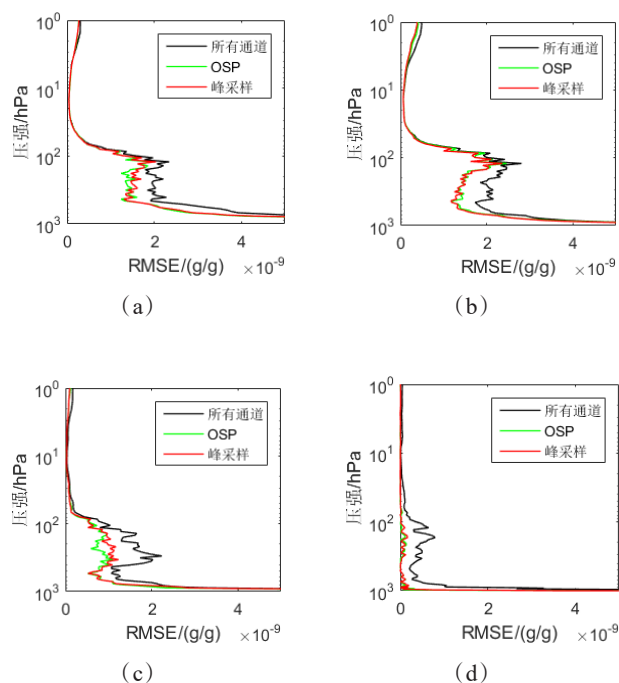


图9 (a)北京-天津(b)阿拉善(c)长江三角洲(d)珠江三角洲夏季大气条件下通过峰采样通道集,OSP法通道集和所有4001个通道进行CO廓线反演所得结果的RMSE

Fig. 9 The RMSEs of the retrieved CO profiles by the Peak sampling channel set, OSP channel set and all 4001-channel set for the summer air masses in (a) Beijing-Tianjin (b) Alxa (c) Yangtze River Delta (d) Pearl River Delta

经过分析发现,夏季的温度较高,CO浓度扰动引起的亮温变化信号较强,在一定程度上降低了通道受到其他气体及仪器噪声干扰,使OSP方法选取的通道在CO的亮温变化谱线上分布更为均匀,这可能是OSP方法在针对夏季大气时性能提升的主要原因。

为了更详细地分析三种方法的反演结果,本文根据以上的精度分析结果,对不同气压层上的RMSE取平均值,计算获取了不同大气情况下不同通道选择方法反演所得CO廓线的总体RMSE(表1),结果的变化趋势与图8和图9相似。峰采样通道选择法和OSP法获得结果对应的CO廓线总体RMSE精度远优于所有通道对应的结果。且在多数大气条件下,峰采样通道选择方法所得CO廓线精度最高。这证明了与OSP法相比,本文提出的峰采样通道集可以有效提高研究区域各季节的CO廓线反演精度。其中,该方法在冬季阿拉善地区的大气状况下对精度的改进效果最好,廓线总体RMSE由 3.23×10^{-8} g/g (OSP方法)降低到了 3.07×10^{-8} g/g (本

方法),进一步对各气压层上的RMSE进行比较后发现,平均反演精度提高了10.56%。

表1 不同通道集下四个地区冬夏季大气条件下模拟超光谱红外数据反演CO廓线的总体RMSE

Table 1 The RMSEs of the retrieved CO profiles for the simulated ultra-spectral infrared data from the air masses of four regions in winter and summer with different channel sets

| 地区 | 方法 | RMSE(10 ⁻⁸ g/g) | |
|-------|------|----------------------------|------|
| | | 冬季 | 夏季 |
| 北京-天津 | 所有通道 | 3.15 | 1.09 |
| | OSP | 3.23 | 1.07 |
| | 峰采样 | 3.07 | 1.07 |
| 阿拉善 | 所有通道 | 0.43 | 0.25 |
| | OSP | 0.44 | 0.25 |
| | 峰采样 | 0.41 | 0.24 |
| 长江三角洲 | 所有通道 | 2.62 | 0.36 |
| | OSP | 2.65 | 0.33 |
| | 峰采样 | 2.51 | 0.34 |
| 珠江三角洲 | 所有通道 | 2.23 | 0.37 |
| | OSP | 2.21 | 0.09 |
| | 峰采样 | 2.10 | 0.06 |

图10显示了北京-天津、阿拉善、长江三角洲和珠江三角洲四个区域在冬季大气条件下CO廓线反演结果的偏差。蓝色线为通过OSP通道选择方法得到的反演结果的偏差,红色线为峰采样通道集获得的反演结果的偏差。偏差 δ 通过公式(4)计算:

$$\delta = \frac{\sum_{i=1}^n (R_{ij} - T_{ij})}{n}, \quad (4)$$

其中, R_{ij} 为反演得到的第*j*层第*i*条廓线的气体混合比;相应的, T_{ij} 为初始样本的第*j*层第*i*条廓线的气体混合比;*n*为廓线条数。

从图10中可以看出,在不同的大气状况下,采用OSP方法通道集反演所得的CO廓线结果偏差均大于通过峰采样通道集获得的反演结果偏差。

综合以上结果可以得出,所有大气状况下反演获得的CO廓线在大气层底部具有最大的RMSE和偏差,并且整体上随着海拔的增加而减小。可能的原因是:1)陆地-大气的耦合抑制了CO反演廓线在大气底部的精度;2)所选通道对对流层中上部的大气更加敏感,尤其是在压强低于700 hPa的大气层。其中,峰采样通道集在不同的大气状况下具有很强的适用性,因此,本文提出的峰采样通道选择方法是一种有应用潜力的超光谱热红外数据反演CO廓

线通道选择方法。

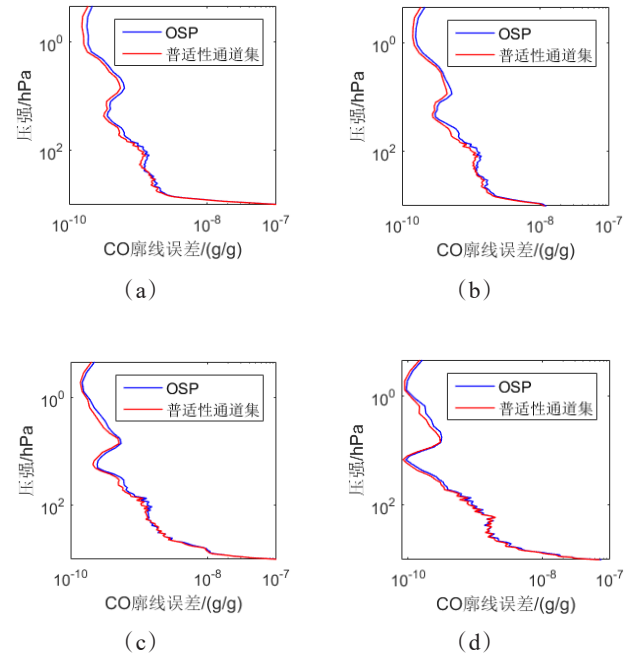


图10 (a)北京-天津(b)阿拉善(c)长江三角洲(d)珠江三角洲冬季大气条件下通过峰采样通道集,OSP通道集进行CO廓线反演结果的偏差

Fig. 10 The biases of the retrieved CO profiles by the Peak sampling channel set and OSP channel set for the winter air masses in (a) Beijing-Tianjin (b) Alxa (c) Yangtze River Delta (d) Pearl River Delta

4 结论

由于超光谱数据通道众多,通道选择是气体反演过程中的关键步骤之一。为了有效提取超光谱热红外数据的可反演信息并去除其中存在的冗余信息,本文提出了一种基于通道灵敏度和权函数特性的通道选择方法。该方法首先根据通道的气体敏感度计算不同大气成分垂直方向上的STI比值,选择STI比值较高的通道作为初选通道。然后,根据初选通道的权函数特性选择CO亮温变化谱线上位于峰顶部和底部的通道。最后,将针对不同局地大气状况的通道选择结果进行合并,获得峰采样通道集。通过比较本方法、OSP方法获得的通道结果和CO热红外吸收区内所有通道在超光谱热红外数据CO廓线反演中应用的结果,可以得出,在多数情况下,峰采样通道集对CO廓线的反演精度高于OSP方法的通道集,远优于所有通道的反演精度。除文中提到的干扰气体外,其它大气和表面热力学组分

对 CO 的吸收波段也有影响。今后还需要进一步研究其他因素对 CO 灵敏度计算的影响。此外,还应考察本文提出的通道选择方法在实际超光谱热红外数据及其它痕量气体反演中的适用性。

References

- [1] Lacatusu I, Mihai M, Constantin C, *et al.* Evaluation of carbon monoxide pollution in Bucharest and potential risks for human health. Part I [J]. *Journal of Environmental Protection and Ecology*, 2010, **11**(3): 896–910.
- [2] Mckeen S A, Hsie E Y, Liu S C. A study of the dependence of rural ozone on ozone precursors in the eastern United States [J]. *Journal of Geophysical Research*, 1991, **96**(8): 15377–15394.
- [3] Memillan W W, Barnet C, Strow L, *et al.* Daily global maps of carbon monoxide from NASA's Atmospheric Infrared Sounder [J]. *Geophysical Research Letters*, 2005, **32**(11): L11801.
- [4] Dash P, Gottsche F M, Olesen F S, *et al.* Land surface temperature and emissivity estimation from passive sensor data: Theory and practice—current trends [J]. *International Journal of Remote Sensing*, 2002, **23**(13): 2563–2594.
- [5] LI Guang-Qing. Frontier problem of atmospheric and surface parameters retrieved by meteorological satellite remote sensing [J]. *Meteorological Science and Technology* (黎光清. 气象卫星遥感反演大气和地表参数的前沿问题. *气象科技*), 1998, **4**(2): 9–16.
- [6] Crevoisier C, Clerbaux C, Guidard V, *et al.* Towards IASI—New Generation (IASI-NG): impact of improved spectral resolution and radiometric noise on the retrieval of thermodynamic, chemistry and climate variables [J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2014, **7**(12): 4367–4385.
- [7] Fu D, Bowman K W, Worden H M, *et al.* High-resolution tropospheric carbon monoxide profiles retrieved from CrIS and TROPOMI [J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2016, **9**(6): 2567–2579.
- [8] Wang J, Gille J C, Bailey P L, *et al.* Retrieval of tropospheric carbon monoxide profiles from high-resolution interferometer observations: A new digital gas correlation (DGC) method and applications. [J]. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 2010, **56**(2): 219–232.
- [9] Smith Sr W L, Revercomb H, Bingham G, *et al.* Evolution, current capabilities, and future advances in satellite ultra-spectral IR sounding [J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2009, **9**(2): 6541–6569.
- [10] Beer R, Glavich T A, Rider D M, *et al.* Tropospheric emission spectrometer for the earth observing system's Aura satellite [J]. *Applied Optics*, 2001, **40**(15): 2356–2367.
- [11] Viatte C, Strong K, Walker K A, *et al.* Five years of CO, HCN, C₂H₆, C₂H₂, CH₃OH, HCOOH and H₂CO total columns measured in the Canadian high Arctic [J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2014, **7**(6): 1547–1570.
- [12] Menke W. *Geophysical Data Analysis: Discrete Inverse Theory* [M]. New York: Academic Press, 1984.
- [13] Aires F, Chedin A, Scott N A, *et al.* A regularized neural net approach for retrieval of atmospheric and surface temperatures with the IASI instrument [J]. *Journal of Applied Meteorology*, 2002, **41**(2): 144–159.
- [14] GUO Hai-Long, DU Hua-Dong, HE Ming-Yuan. Research on channel selection of high spectral resolution data [J]. *Infrared* (郭海龙, 杜华栋, 何明元. 高光谱分辨率资料通道选择方法研究. *红外*), 2013, **034**(7): 9–14.
- [15] Rodgers C D. Information content and optimisation of high spectral resolution remote measurements [J]. *Advances in Space Research*, 1998, **21**(3): 361–367.
- [16] Florence R, Fourrié N, Chafai D, *et al.* Channel selection methods for Infrared Atmospheric Sounding Interferometer radiances [J]. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 2002, **128**: 1011–1027.
- [17] DU Hua-Dong, HUANG Si-Xun, SHI Han-Qing. Method and experiment of channel selection for high spectral resolution data [J]. *Acta Physica Sinica* (杜华栋, 黄思训, 石汉青. 高光谱分辨率遥感资料通道最优选择方法及试验. *物理学报*), 2008, **57**(12): 7685–7692.
- [18] Crevoisier C, Chédin A, Scott N A. AIRS channel selection for CO₂ and other trace-gas retrievals [J]. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 2010, **129**(593): 2719–2740.
- [19] Beer R, Bowman K W, Brown P D, *et al.* Tropospheric emission spectrometer (TES)—Level 2 algorithm theoretical basis document [M]. Jet Propulsion Laboratory, 1999.
- [20] BAI Wen-Guang, ZHANG Peng, ZHANG Xing-Ying, *et al.* Analysis of temporal and spatial distribution characteristics of total CO columns in China using satellite data [J]. *Journal of Applied Meteorological Science* (白文广, 张鹏, 张兴赢, 等. 用卫星资料分析中国区域 CO 柱总量时空分布特征. *应用气象学报*), 2010, **21**(04): 473–483.
- [21] Inness A, Ades M, Agustí-Panareda A, *et al.* The CAMS reanalysis of atmospheric composition [J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2019, **19**: 3515–3556.
- [22] Chédin A, Hollingsworth A, Scott N A, *et al.* Annual and seasonal variations of atmospheric CO₂, N₂O and CO concentrations retrieved from NOAA/TOVS satellite observations [J]. *Geophysical Research Letters*, 2002, **29**(8): 110–111.
- [23] Stocker T F, Qin D, Plattner G K, *et al.* Observations: Atmosphere and Surface. In: *Climate Change 2013: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change* [R]. Cambridge, Cambridge University Press, 2014.
- [24] Huang H L, Smith W L, Woolf H M. Vertical resolution and accuracy of atmospheric infrared sounding spectrometers [J]. *Journal of Applied Meteorology*, 1992, **31**(3): 265–274.