

超光谱热红外数据通道选择方法在O₃和CH₄廓线反演中的应用

姚微源, 张贝贝, 王宁, 马灵玲, 钱永刚, 王新鸿, 李传荣, 唐伶俐

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

摘要: 与高光谱热红外数据相比, 超光谱热红外数据中包含了臭氧(O₃)和甲烷(CH₄)在大气垂直剖面上更多的状态信息, 为提升O₃和CH₄廓线的反演精度提供了可能。然而, 超光谱热红外数据通道之间的间隔较窄, 这在给数据引入一些特有可反演信息的同时还引入了大量的相似信息, 这些特征均无法被现有的基于高光谱热红外数据的通道选择方法识别。为了保证超光谱热红外数据反演O₃和CH₄廓线的效率和精度, 我们提出了一种基于大气灵敏度和雅可比剖面的通道优选方法(OWSP法)。该方法首先通过分析通道对不同气体的灵敏度情况, 优选出受其他气体干扰较小的通道为初选通道; 其次, 深度分析通道雅可比特征后提出了优化雅可比矩阵的策略, 具体为将通道雅可比量化为表征通道信息容量的因素, 并采用迭代的方法获取最终的通道选择结果。本文将OWSP方法应用在阿拉善、北京-天津、长江三角洲和珠江三角洲4个典型地区的冬夏季大气条件下, 与常用的最佳灵敏度法(OSP法)相比, OWSP方法所选的通道集合中冗余信息少, 同时也可以识别一些具有特殊有效信息但灵敏度相对较低且受其他干扰因素干扰较大的通道。反演结果进一步表明, 在多数情况下, OWSP方法可以有效提升廓线的反演精度, O₃廓线的平均反演精度提高了9.30%, CH₄廓线的平均反演精度提高了4.90%。本文能为中国超光谱热红外载荷开发以及数据应用提供必要的技术支撑, 具有重要的理论和应用价值。

关键词: 遥感, 热红外数据, 超光谱, 通道选择, 雅可比, 气体敏感性, O₃和CH₄廓线反演

中图分类号: TP701/P2

引用格式: 姚微源, 张贝贝, 王宁, 马灵玲, 钱永刚, 王新鸿, 李传荣, 唐伶俐. 2024. 超光谱热红外数据通道选择方法在O₃和CH₄廓线反演中的应用. 遥感学报, 28(2): 385-397

Yao W Y, Zhang B B, Wang N, Ma L L, Qian Y G, Wang X H, Li C R and Tang L L. 2024. Application of a channel-selection method on the retrieval of O₃ and CH₄ profiles from Ultra-Spectral Thermal Infrared Data. National Remote Sensing Bulletin, 28(2): 385-397 [DOI: 10.11834/jrs.20211223]

1 引言

O₃和CH₄是大气中的重要痕量气体成分。大气中的O₃主要集中在距离地面约20—30 km左右的高空中, 这部分O₃可以调控到达地面的紫外线辐射量, 对人类和生态系统起到保护作用(McKenzie等, 2011)。但是, 当近地面大气中O₃的含量较高时, 其会对人体的呼吸道、神经系统及免疫系统造成危害, 同时也会影响地表生态系统(Cape, 2008; Chen等, 2007)。CH₄作为一种重要的温室气体, 温室效应比CO₂高20倍, 其在大气中的浓度变化会对地球的辐射平衡产生巨大的影响(Pavlov

等, 2000)。因此, 高精度、高垂直分辨率和高覆盖率的O₃和CH₄廓线是人类健康、环境污染及气候变化等研究领域的重要资料。

卫星遥感方式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(Ulaby, 2018)。热红外遥感数据因包含O₃、CH₄、CO等多种气体发射、散射及吸收的热辐射信息, 被广泛应用在大气痕量气体廓线的获取中(Crevoisier等, 2003; Worden等, 2012; 张莹等, 2012)。超光谱数据蕴含着丰富的光谱辐射信息和空间信息, 其超高的分辨率对应着更为尖锐的权函数, 能够支持多种大气痕量气体高精度高分辨率垂直分布

收稿日期: 2021-04-25; 预印本: 2021-10-25

基金项目: 国家重点研发专项(编号:2016YFB0500602)

第一作者简介: 姚微源, 研究方向为大气遥感反演。E-mail: yaowey@aircas.ac.cn

通信作者简介: 王宁, 研究方向为热红外遥感反演。Email: wangning@aircas.ac.cn

信息的获取 (Smith, 2009)。加拿大航天局于2003年发射的SciSat-1卫星上的ACE-FTS传感器,其分辨率高达 0.02 cm^{-1} ,主要被用于观察臭氧层。美国随后于2004年发射了AURA卫星,其搭载了一台分辨率为 0.1 cm^{-1} 的TES高分辨热红外传感器,其可以反演获得 O_3 、 CO 、 CH_4 气体廓线数据,反演精度分别为15%、20%和12%。鉴于超光谱热红外传感器数据在大气痕量气体成分观测中的良好应用前景,中国也于2018年5月9日成功发射“高分五号”(GF-5)卫星,其搭载了光谱分辨率高达 0.03 cm^{-1} 的大气环境红外甚高光谱分辨率探测仪(AIUS),光谱范围为 $2.4\text{--}13.3\text{ }\mu\text{m}$ (董欣等,2018)。除此之外,中国“十三五”期间部署了国家重点研发计划“大气辐射超光谱探测技术”项目,拟研制波谱范围覆盖 $3.2\text{--}15.4\text{ }\mu\text{m}$,天底观测模式下分辨率达到 0.05 cm^{-1} ,临边观测模式下分辨率高达 0.015 cm^{-1} 的大气辐射超高光谱探测仪。

然而,超光谱热红外数据中包含的大量光谱通道,对数据的计算、存储和传输带来了极大的负担。同时,超光谱数据中包含了辐射传输路径方向上不同气团的耦合信息,对于痕量气体而言,这种耦合性更是加剧。因此,在对 O_3 和 CH_4 进行反演前,首先需要对通道的可反演能力进行评价后,获取最大反演信息容量的通道合集,保障反演的效率和精度。目前,常用的通道选择方法包括基于权函数和基于信息容量两大类通道优选策略。前者的核心在于利用权函数可以反映各通道对反演参数敏感性的特点,将此作为评价通道可反演能力的指标,对反演通道集进行筛选。Aires等(2002)、马鹏飞等(2015)、王雅鹏(2017)均采用了该方法分别对地表和大气温度、 N_2O 及 CO_2 和 O_3 等参数的反演通道集合进行筛选。此外,CrIS传感器数据在进行业务处理之前,也通过分析通道的敏感性和权函数来进行通道选择(Gambacorta和Barnet,2013)。基于权函数的通道选择方法原理简单,运行方便,但是权函数对通道反演能力的代表性非常有限,该类方法在应用时会给后续反演引入较大的误差。考虑到基于权函数的通道选择方法的局限性,研究人员进一步考虑权函数、背景场、载荷观测的误差、干扰气体信号等因素的综合影响,对通道信息容量进行定量评估来优选通道,这类通道选择方法被定义为基于信息容量的通道选择方法。该方法率先由Rodgers(1998)

于1998年提出,在温湿廓线的反演中具有较多的应用,如Rabier等(2002)提出的分步迭代法、杜华栋等(2008)提出了的大气可反演指标法等。近年来,基于信息容量的通道选择方法在痕量气体反演中的应用也非常广泛。Chédin等(2003)采用信息容量的通道选择方法选取 CO_2 廓线反演通道。在此基础上,Crevoisier等(2003)同时考虑通道敏感性、通道噪声及权函数的影响,提出了优化灵敏度法(OSP法)进行通道选择,并应用在IASI数据反演 CO_2 、 CO 、 N_2O 及 CH_4 等气体廓线中。该方法的特点在于,所选通道的权函数在大气垂直方向上分布均匀,是一种优秀的适用于高光谱热红外数据气体廓线反演的通道选择方法。Wang等(2018)和苗晶等(2021)在采用AIUS甚高光谱模拟数据反演 H_2O 、 N_2O 、 NO_2 和 HF 也使用了基于信息容量的方法获取反演通道。另外,TES传感器的业务处理中综合考虑了系统误差、测量误差等因素的影响,对小窗口区中通道的总信息容量进行分析,选取了包含最大信息容量的小窗口区集合,保障了 CH_4 等气体廓线的反演精度(Worden等,2004,2012)。

由上可得,基于信息容量的通道选择方法是目前热红外数据反演痕量气体廓线中应用的主流方法。然而,此类通道选择方法在较高分辨率数据中应用的适用性欠佳。如其在IASI和HIS等传感器数据中应用时,出现结果中部分通道信息冗余的问题(Lerner等,2002;Wu等,2018);在TES数据通道选择的业务化处理中发现,该方法会忽略部分包含较低大气层反演信息的通道(von Clarmann等,1998)。因此,超光谱热红外数据在应用过程中仍然存在冗余信息识别受阻和有效信息提取不足的问题,影响痕量气体空间信息的高效高精度获取。

基于以上,本文提出了一种新型的基于大气灵敏度和雅可比剖面通道优选策略(OWSP方法),该方法可以充分利用超光谱热红外数据的光谱辐射及空间信息,对冗余信息及特有信息进行高效准确识别以获取通道优选集合,达到提升反演精度和效率的目标。本文针对当前各领域对高精度 O_3 和 CH_4 大气信息的需求,将OWSP和OSP通道选择方法分别应用在超光谱热红外数据反演 O_3 和 CH_4 廓线中,获得相应的通道选择结果及反演廓线结果,并对通道选择方法在超光谱热红外数据中的

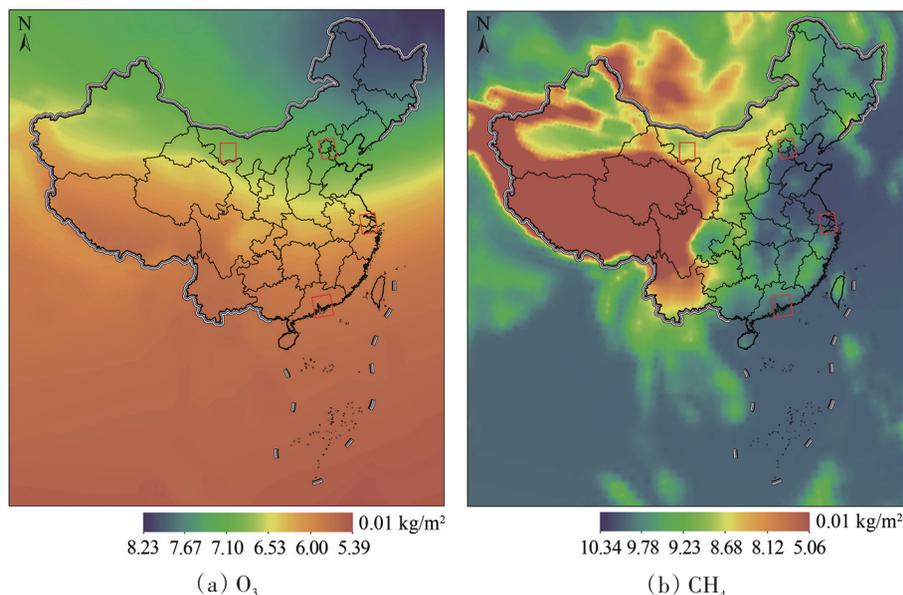
适用性进行评价。

2 方法和实验

2.1 研究区域

首先对中国区域的O₃和CH₄的柱含量进行分析。本研究基于欧洲中期天气预报中心ECMWF

(European Centre for Medium-Range Weather Forecasts)系统的哥白尼大气监测服务CAMS (Copernicus Atmosphere Monitoring Service)再分析数据集(Inness等, 2019)中2010年—2020年的O₃和CH₄柱含量数据,计算获取相应的日平均值,中国区域的气体柱总量分布图如图1所示。



审图号:GS(2021)6786号

图1 中国区域2010年—2020年气体日平均柱总量分布图

Fig. 1 Distribution of daily average gas column amount during 2010 to 2020 over China

图1(a)为O₃在中国区域的气体日平均柱总量分布图。从图中可以看出,臭氧的柱总量分布大致呈现随纬度提高而增加的趋势,东北、华北、内蒙古和新疆地区的臭氧柱总量相对较高。图1(b)为CH₄在中国区域的气体日平均柱总量分布图。CH₄在中国区域总体上呈现东高西低的分布状态,高值区包括京津冀、长江流域、珠江流域及部分东北地区,低值区主要分布在西部地区。

基于O₃和CH₄在中国区域内的分布特征,本研究选择了北京—天津地区(简称为JJ,经度:116°E—118°E,纬度:39°N—41°N)、阿拉善沙漠地区(简称为AL,经度:102°E—104°E,纬度:39°N—41°N)、长江三角洲(简称为YRD,经度:120°E—122°E,纬度:30°N—32°N)和珠江三角洲(简称为PRD,经度:113°E—115°E,纬度:22°N—24°N)4个典型区域的大气作为本文的主要研究对象,以上区域包含了高值和低值的O₃和CH₄区域,同时也具有不同的温湿度,可以有效考察

本文提出的通道选择方法在不同地域和大气条件下对O₃和CH₄廓线反演的适用性。

2.2 数据模拟

本研究所使用的背景数据是CAMS再分析数据库中JJ、AL、YRD和PRD等4个典型地区的大气廓线资料,数据分辨率为1°×1°,对应的时间为2011年—2016年1月份(冬季)和7月份(夏季)。从下载的CAMS再分析数据中提取温度、水汽、O₃、CH₄、N₂O和CO的初始廓线数据,共筛选获取了JJ地区的7623条晴空廓线、AL地区的7797条晴空廓线、YRD地区的2350条晴空廓线和PRD地区的1320条晴空廓线。考虑到L91大气分层模式具有更高的大气垂直分辨率,因此,本论文在采用大气廓线模拟星上观测数据及后续的通道选择及反演时,将L60大气分层模式的大气廓线数据内插为91层。

本研究旨在支持国家重点研发计划所部署的

“大气辐射超光谱探测仪数据处理与反演技术研究”课题。该课题支撑的大气辐射超高光谱仪的波谱范围覆盖3.2—15.4 μm ，天底观测模式下分辨率达到0.05 cm^{-1} 。

基于以上的大气廓线背景数据和传感器参数，本研究采用高光谱大气辐射传输模型4A/OP (Operational release for Automatized Atmospheric Absorption Atlas) 获取每条大气廓线对应的星上观测数据及气体雅可比。在模拟过程中，设定地表温度为大气底部的温度，地表发射率为1，并忽略了太阳的影响。每个通道中预计的噪声等效温差 ($NE\Delta T$) 为0.3 K@280 K，由式 (1) 计算：

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

式中， $NE\Delta T \{T(v)\}$ 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 $NE\Delta T \{T_{\text{ref}}(v)\}$ 等于0.3 K；参考温度 T_{ref} 设置为280 K。

2.3 OWSP通道选择方法

2.3.1 基于大气灵敏度的通道初选策略

考虑到超光谱热红外数据在痕量气体吸收区内的耦合性强，大量通道受到其他因素干扰严重，在实际进行通道选择时，首先需要剔除此类通道。本文以冬季的AL地区大气状况为例，对不同大气成分在 O_3 和 CH_4 热红外敏感区中的敏感性进行分析，结果如图2 (a) 和 (b)。本研究根据大气中几种常见气体的季节性浓度变化 (Chédin 等, 2002;

IPCC 等, 2014)，在研究时将 O_3 、 H_2O 、 N_2O 、 CO_2 、 CO 、 CH_4 、 NO 、 NO_2 和 SO_2 的扰动量分别定为16%、40%、2%、16%、10%、2%、4%、3%及3%。从图中可以看出： O_3 热红外吸收区的干扰气体成分主要包括 CO_2 和 H_2O ，其中 O_3 浓度变化引起的热红外信号强度大大高于 CO_2 和 H_2O ，但是若在潮湿的地区， H_2O 扰动引起的热红外信号也会对 O_3 信号造成较大的干扰； CH_4 热红外吸收区的干扰气体成分主要包括 CO_2 、 H_2O 和 N_2O ，在该区域的大量通道中， H_2O 在大气中的浓度变化引起了超过2 K的亮温变化，同时， CO_2 引起的亮温变化与 CH_4 的类似，以上两个参数的干扰是影响 CH_4 反演精度的关键。

基于 O_3 和 CH_4 热红外敏感区内不同成分的敏感性分析结果，本文采用 Crevoisier 等 (2003) 提出的信噪比概念，将待反演气体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及仪器噪声引起的亮度变化值的总和称为“噪声”，待反演气体信号与干扰信号总和的比值称为“信噪比” (r_{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。 r_{STI} 的方程如下：

$$r_{\text{STI}, v} = \frac{\Delta BT_{\text{sig}, v}}{\sum_{k=1}^n \Delta BT_{\text{inf}, v, k} + NE\Delta T_v} \quad (2)$$

式中， $\Delta BT_{\text{sig}, v}$ 表示目标反演气体扰动引起的亮温变化， $\Delta BT_{\text{inf}, v, k}$ 为干扰气体扰动引起的亮温变化， $NE\Delta T_v$ 指通道对应的噪声等效温差， n 代表干扰气体个数， v 为通道波数。

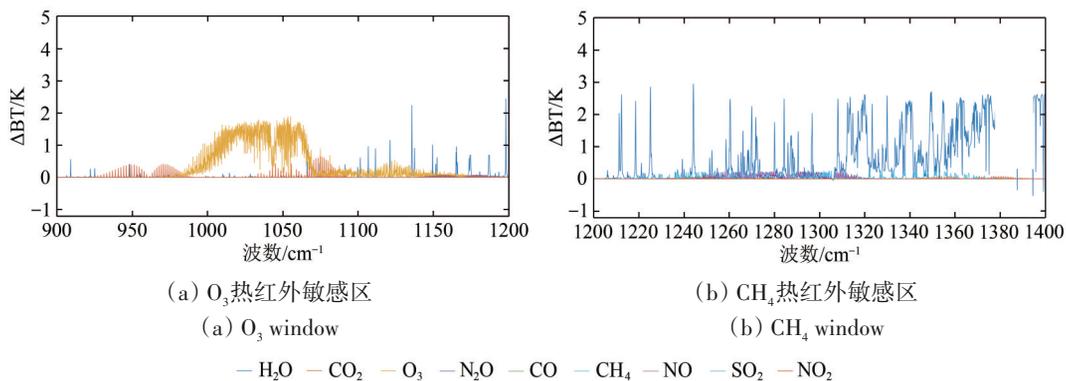


图2 不同热红外波段的气体敏感性分析

Fig. 2 Analysis of gas sensitivity at different thermal infrared bands

考虑到强通道噪声会给反演结果传递误差，因此，在获得各个通道中反演参数与其他因素的

信噪比之后，本研究先简单地认为信噪比越强的通道，其对反演结果精度的贡献越大，而信噪比

弱的通道反之, 因此在该步骤会将信噪比小的若干通道剔除。具体方法为: 将热红外吸收区内的通道按信噪比从高到低排序; 评价信噪比高的前若干通道的可反演能力, 选取反演能力最大的若干通道。此处将通道集合对应的反演结果总均方根误差 (RMSEs) 作为评价通道集合总信息容量的指标。采用该方法获取的通道数量及 r_{sn} 的阈值会随背景条件的变化而发生改变。当然这种以信噪比为指针的评价通道可反演能力的方法是不全面的, 但是可以初步筛选一些明显对反演结果精度提升无支持作用的通道, 简化进一步的通道选择过程。

2.3.2 基于通道雅可比剖面的通道优选策略

将通道信噪比较低的一些通道剔除后, 所得的通道集合的通道数量仍然非常可观, 需要进一步优选通道来提高通道反演精度和效率。通道的雅可比剖面可以较为直观地反映通道的相似信息和特有信息。然而, 现有基于雅可比矩阵的通道选择方法未有针对以上两类信息的识别策略, 其在超光谱热红外数据中的应用存在较大的瓶颈。

基于以上, 本研究首先对通道的雅可比矩阵特征进行分析, 发现通道之间的雅可比矩阵的差异主要在于雅可比矩阵特征峰的峰强 (i)、等效探测位置 (P_{bl} , 定义为特征峰积分面积二等分处对应的压强) 及半峰宽 (FWHM), 如图 3 所示。以上 3 个指标可以有效对通道的相似信息进行评价。如当雅可比矩阵峰强不同, 但是特征峰的等效探测位置与半峰宽无明显差异时, 则可以认为这些通道具有相似的反演信息, 在选取通道时可以选择峰强度相对较大的通道作为反演通道。然而, 由于大量痕量气体集中在特定的大气分层上, 导致雅可比矩阵特征峰在特定压强高度范围内堆叠, 根据雅可比矩阵特征峰的峰强、等效探测位置及半峰宽这 3 个指标无法有效对通道的特有信息进行识别。

因此为了实现通道相似信息和有效信息的自动选取, 本研究提出了基于雅可比矩阵特征与通道可反演信息的关系, 对雅可比矩阵进行优化, 强化通道在敏感性强的精细大气分层上反演信息贡献权重, 同时弱化其在敏感性弱的大气分层上的贡献, 获取更为尖锐的雅可比矩阵来提高反演的精度和分辨率。

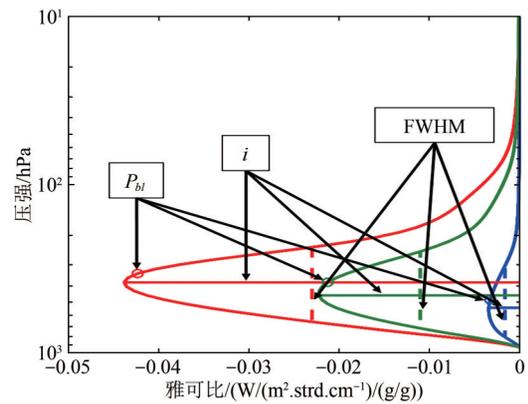


图3 雅可比矩阵特征分析

Fig. 3 Characteristics analyzing of Jacobian matrix

考虑到通道中痕量气体的雅可比可以表示为

$$J = \frac{\partial \tau_{v,CO}}{\partial \ln P} \quad (3)$$

式中, $\partial \tau_{v,CO}$ 是地面到传感器的痕量气体透过率, J 是其对应的雅可比。

重新对式 (3) 中的压强 P 进行定义, 采用如下公式对不同大气层上的雅可比进行优化:

$$P' = \frac{P - (1 - f_s)P_{bl,v}}{f_s} \quad (4)$$

式中, $P_{bl,v}$ 是位于波数 v 的通道 P_{bl} , f_s 是比例因子。

式 (4) 中的 f_s 是影响优化后的雅可比矩阵在垂直方向上信息分布的关键, f_s 越大, 则认为该通道雅可比矩阵对应的敏感大气分层垂直范围越小。此时, 各精细大气分层上雅可比值最大的通道, 即可判断其为具有该大气分层最大可反演信息的通道。确定 f_s 的大小是影响通道选择结果及反演结果的关键, 本研究分析了不同 f_s 取值所得的通道集合对应反演结果总均方根误差 (RMSEs) 进行分析, 选取最小 RMSEs 的通道集合作为终选的反演通道。

2.4 OSP 通道选择方法

本文所使用的 OSP 方法基于 Crevoisier 等 (2003) 提出的方法。为了提高该方法在超光谱热红外数据中的适用性, 在本文中做了相应的调整。主要步骤为: (1) 根据上文中所得的各通道 r_{sn} 值对各通道进行排序; (2) 将 r_{sn} 的最大值的 1/10 定为阈值, r_{sn} 大于该值的通道集合即为 OSP 方法所得的通道选择结果。

2.5 反演方法

辐射能量在传输路径上的衰减是一个复杂的

非线性过程, 利用辐射传输方程解求任意一个大气参数, 都需要考虑其他参数的影响。由于参与反演的通道主要位于热红外区, 所以辐射传输过程中不仅可以忽略大气散射的作用, 同时忽略太阳的影响, 一定程度上降低了方程线性化的难度。为了简化描述, 忽略掉角度和波长, 将辐射传输方程简化为

$$R = \varepsilon B_s \tau_s - \int_0^{p_s} B d\tau + (1 - \varepsilon) \int_0^{p_s} B d\tau^* \quad (5)$$

式中, ε 表示比辐射率, B_s 表示地表温度对应的黑体辐亮度, τ_s 表示大气层总透过率, p_s 表示地表气压值, B 表示温度廓线对应的黑体辐亮度, τ^* 表示从某个气压层到卫星高度上的整体透过率。

对辐射传输方程的微扰形式进行求解后可得线性化方程:

$$\begin{aligned} \delta T_B = & J_{T_s} \delta T_s + J_\varepsilon \delta \varepsilon + \int_0^{p_s} J_T \delta T dp + \int_0^{p_s} J_{O_3} \delta \ln q_{O_3} dp + \\ & \int_0^{p_s} (J_{CO_2} \delta \ln q_{CO_2} + J_{CO} \delta \ln q_{CO} + J_{H_2O} \delta \ln q_{H_2O}) dp + \\ & \int_0^{p_s} J_{CH_4} \delta \ln q_{CH_4} dp \end{aligned} \quad (6)$$

式中, J_{T_s} , J_T , J_{H_2O} , J_{CO_2} , J_{O_3} , J_{CH_4} 及 J_{CO} 分别代表线性化辐射传输方程之后地表温度、大气温度廓线、大气 H_2O 、 CO_2 、 O_3 、 CH_4 和 CO 廓线对应的权重。

在本研究中, 除待反演的 O_3 或 CH_4 廓线之外, 假定地表温度、大气温度廓线、大气湿度廓线及其他痕量气体廓线反演所得的结果为各参数对应的再分析数据, 则它们的变化量均为 0, 线性化方程 (6) 可简化为

$$\delta T_B = \int_0^{p_s} J_{gp_ret} \delta \ln q_{gp_ret} dp \quad (7)$$

式中, gp_ret 为 O_3 或 CH_4 。

将式 (7) 写为矩阵形式, 即为

$$T = J^T Q \quad (8)$$

3 数据结果处理与分析

3.1 O_3 廓线通道选择及反演结果分析

3.1.1 通道选择结果分析

针对所研究的 4 个局地地区不同的大气条件, 分别采用 OWSP 方法和 OSP 方法选取反演 O_3 廓线的通道。以上两种方法在不同大气条件下所选的

通道数如表 1 所示。其中, AL 冬季大气条件下, OWSP 和 OSP 方法所选的通道在 O_3 亮温变化谱线上的分布如图 4 所示。OSP 方法对通道的选取主要依赖 r_{sn} 的值, 考虑到在 O_3 的热红外敏感区, O_3 的信号非常强, 在较为干燥的大气状况下, 其干扰气体 CO_2 和 H_2O 的热红外信号强度大大弱于 O_3 , 因此, 在热红外敏感区内包含了大量强 r_{sn} 的通道, 这些通道均可以被 OSP 方法选取。在本论文中, 为了提高反演的效率, 限制 OSP 方法选取的最大通道数为 1000 条。基于以上, 采用 OSP 方法为 AL、JJ、YRD 和 PRD 地区的冬季大气选取的通道数分别为 966、1000、906 和 1000 条, 为 AL 和 JJ 的夏季大气选取的通道数分别为 1000 和 901 条。然而, 在以上 6 种大气条件下, 采用 OWSP 方法选取的 O_3 反演通道数量大大小于 OSP 方法的。这可以归因于 OWSP 方法可以有效减少一些包含冗余信息通道的选择。而对于 YRD 和 PRD 地区的夏季大气而言, 由于大气水汽的强干扰作用, OSP 方法所选的通道相对较少, 尤其是在 YRD 地区, 仅有 36 个通道被选择出来, 而 OWSP 方法在同等条件下所选的通道数为 142 条。这说明了 OSP 方法会简单地剔除一些包含较大干扰信息的通道, 忽略了部分通道中的可反演信息。

表 1 不同大气条件下, OWSP 法和 OSP 方法所选 O_3 廓线反演通道数

Table 1 Number of channels selected by OWSP and OSP methods for O_3 profile retrieval in different airmasses

大气条件		通道数	
区域	季节	OWSP 法	OSP 法
AL		366	966
JJ		510	1000
YRD	冬季	247	906
PRD		214	1000
AL		189	1000
JJ		362	901
YRD	夏季	142	36
PRD		68	577

3.1.2 反演结果分析

采用 OWSP 方法和 OSP 方法的通道选择结果对 O_3 的廓线进行反演, 评价不同的通道选择方法对反演精度的影响。图 5 和图 6 分别为 4 个研究区

域在冬季和夏季大气条件下 O₃ 反演结果对应的 RMSE，并采用如下公式对反演廓线的 RMSE_p 进行评价：

$$RMSE_p = \frac{\sum_{j=1}^L RMSE_j}{L} \quad (9)$$

式中， L 为大气分层的总层数， j 为大气层序号。

OWSP 方法和 OSP 方法反演所得廓线的 RMSE_p 如表 2 所示。表中精度提升比率的计算方法为

$$k = \frac{RMSE_{p,OSP} - RMSE_{p,OWSP}}{RMSE_{p,OSP}} \quad (10)$$

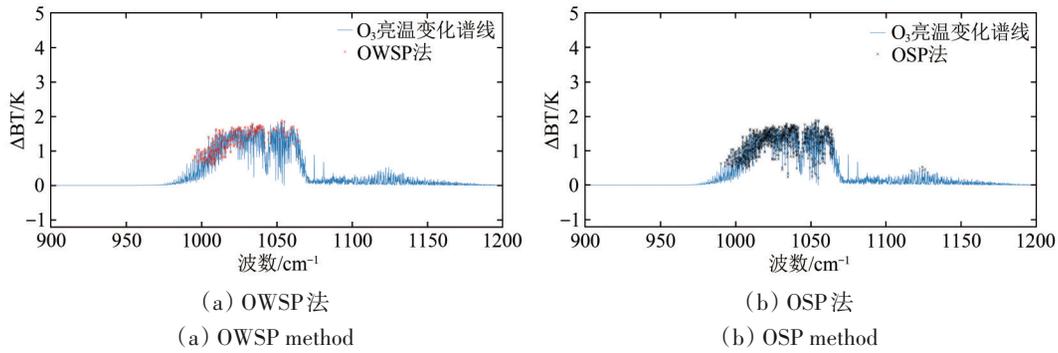


图 4 AL 地区冬季大气下，采用不同方法获取 O₃ 反演的通道选择结果在 O₃ 亮温变化谱线上的分布情况
Fig. 4 The distribution in the O₃ brightness temperature change spectrum of channels selected for O₃ retrieval by different methods in winter airmass of AL region

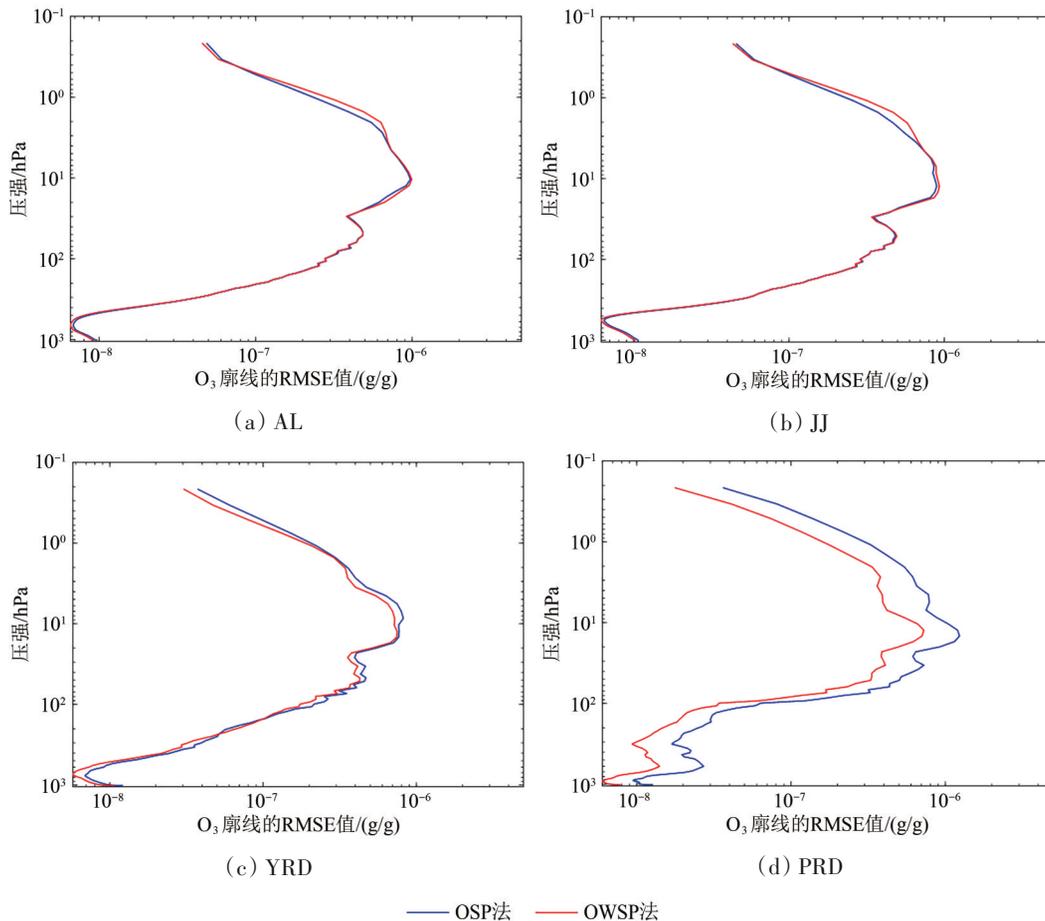


图 5 冬季大气条件下通过 OWSP 通道集和 OSP 通道集进行 O₃ 廓线反演所得结果的 RMSE
Fig. 5 RMSEs of the retrieved O₃ profiles by the OWSP and OSP channel selection methods in winter airmasses

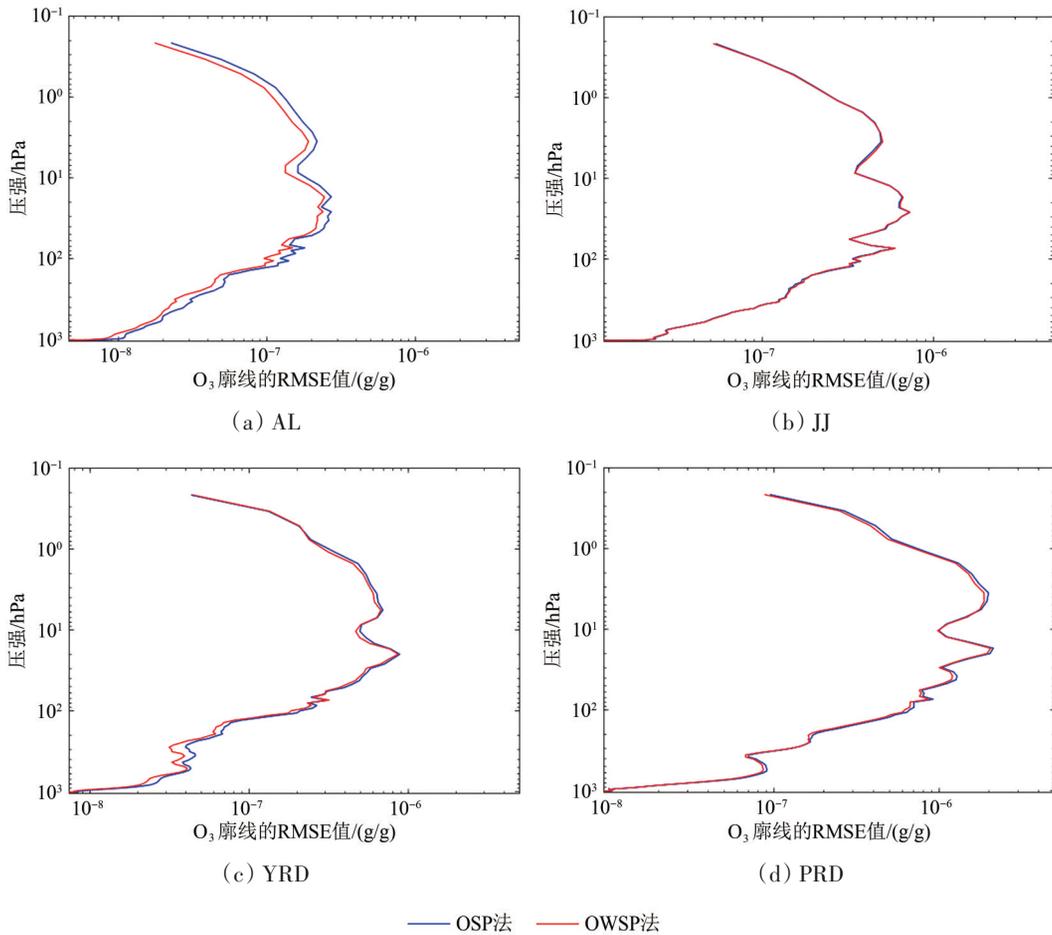


图6 夏季大气条件下通过OWSP通道集和OSP通道集进行O₃廓线反演所得结果的RMSE
 Fig. 6 RMSEs of the retrieved O₃ profiles by the OWSP and OSP channel selection methods in summer airmasses

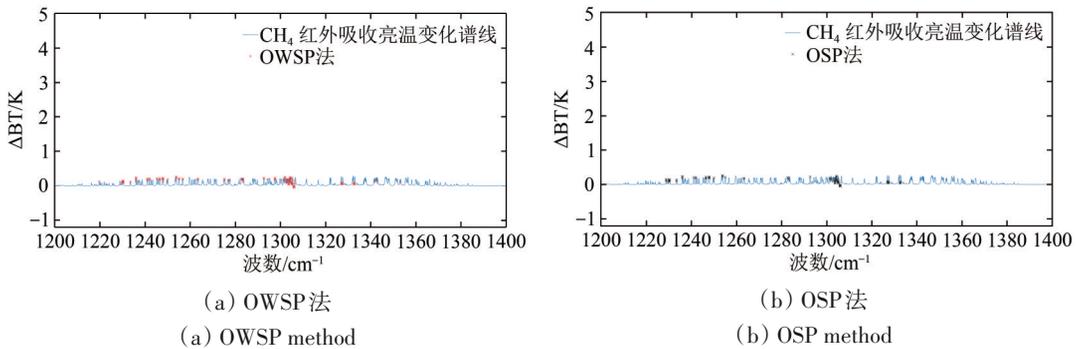


图7 AL地区冬季大气下,采用不同方法获取CH₄反演的通道选择结果在CH₄亮温变化谱线上的分布情况
 Fig. 7 The distribution in the CH₄ brightness temperature change spectrum of channels selected for CH₄ retrieval by different methods in winter airmass of AL region

结合通道选择结果和反演结果可以得出:(1)在冬季的AL、JJ和夏季的JJ地区大气条件下,OWSP方法所选取通道组合反演的O₃廓线精度略低于OSP方法的,因此可以认为两种方法所得的通道结果组合中的信息容量非常类似。但是前者的通道数量大大小于后者的,说明OWSP方法对冗余信息

具有较强的识别能力。(2)在YRD地区的夏季大气条件下,优于大气水汽的强干扰作用,OSP方法选取的通道数仅为36条,OWSP方法能够充分识别部分受到水汽强干扰通道中的O₃可反演信息,选取了142条通道,该通道集合获得的O₃廓线精度明显优于OSP方法的。(3)在冬季的YRD、PRD和夏季的

AL、PRD 大气条件下, OWSP 方法选取所得的通道数量不仅大大小于 OSP 方法的, 同时前者所得的 O₃ 廓线精度优于后者, 这说明了 OWSP 方法在这些大气湿度适中的地区, 兼具识别通道冗余信息和特有信息的功能。值得注意的是, 在冬季的 PRD 和夏季的 AL 大气条件下, 反演精度的提升分别为 42.60% 和 14.46%, 远远超过其他大气条件, 这可以归因于 OSP 方法所选的 1000 条大气廓线中的冗余信息丰富引起的通道集合中的信息容量不足问题。

表 2 不同大气条件下, OWSP 法和 OSP 方法对应 O₃ 廓线反演精度比较

Table 2 Accuracy comparisons of the retrieved O₃ profiles by the OWSP and OSP channel selection methods in different airmasses

大气条件		RMSE _p /ppbv		精度提升比率/%
区域	季节	OWSP 法	OSP 法	
AL		140.70	140.21	-0.35
JJ	冬季	140.78	140.32	-0.32
YRD		104.47	115.02	9.17
PRD		79.10	137.88	42.60
AL		46.66	54.55	14.46
JJ	夏季	139.60	139.06	-0.39
YRD		117.08	123.51	5.20
PRD		299.85	312.24	3.97

3.2 CH₄ 廓线通道选择及反演结果分析

3.2.1 通道选择结果分析

与 O₃ 廓线反演时类似, 反演 CH₄ 廓线时同样针对四个局地地区不同的大气条件进行研究。采用 OWSP 方法和 OSP 方法在不同大气条件下所选的通道数如表 3 所示。其中, AL 冬季大气条件下, OWSP 和 OSP 方法所选的通道在 O₃ 亮温变化谱线上的分布如所示。由于在 CH₄ 的热红外敏感区, CH₄ 在大气中扰动引起的热红外信号变化较弱, 同时干

扰气体 CO₂, H₂O 和 N₂O 的热红外信号变化相对较强, 因此, 各通道对应的 r_{sn} 较小。在采用 OSP 方法对通道进行选择时, 所有大气条件对应的通道数均小于 100 条, 在 JJ 地区的冬季大气条件下, 该方法所得的通道数仅为 11 条。相对而言, OWSP 方法可以在多因素强干扰的情况下对有效信息进行识别, 除了 JJ 地区的夏季大气条件之外, 其他情况下所选的 CH₄ 反演通道数均在 100 条以上。因此, 针对热红外敏感区干扰因素多且强的微弱红外辐射气体而言, OSP 方法会在牺牲有效信息的前提下优选受其他因素干扰少的通道, 而 OWSP 方法会选取这些通道的同时, 挖掘 r_{sn} 相对较小的系列通道中的特有信息。

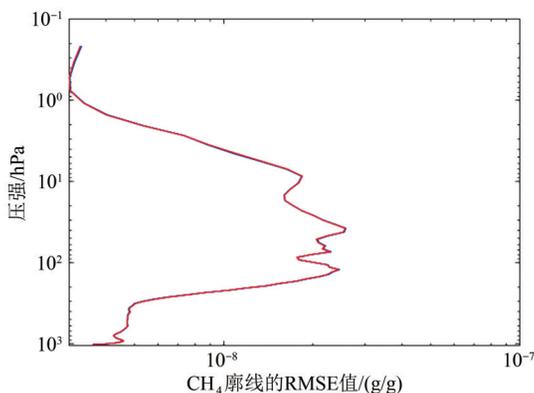
表 3 不同大气条件下, OWSP 法和 OSP 方法所选 CH₄ 廓线反演通道数

Table 3 Number of channels selected by OWSP and OSP methods for CH₄ profile retrieval in different airmasses

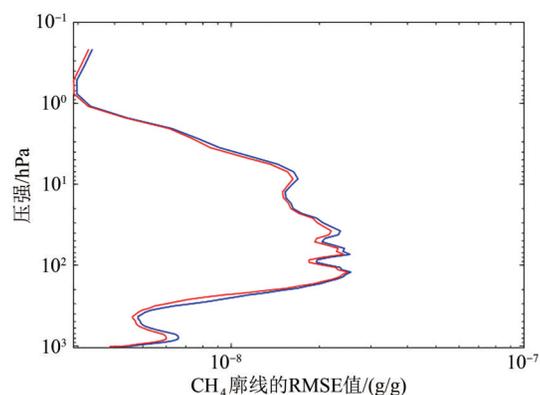
大气条件		通道数	
区域	季节	OWSP 法	OSP 法
AL		123	84
JJ	冬季	159	11
YRD		151	33
PRD		133	48
AL		160	39
JJ	夏季	70	55
YRD		146	39
PRD		179	55

3.2.2 反演结果分析

进一步将 OWSP 方法和 OSP 方法的通道选择结果应用在 CH₄ 廓线的反演中, 来对 OWSP 方法在微弱红外辐射气体廓线反演中的优越性进行分析。图 8 和图 9 分别为 4 个研究区域在冬季和夏季大气条件下 CH₄ 反演结果对应的 RMSE 值。表 4 中的 RMSE_p 和精度提升比率的计算方法见式 (9) 和式 (10)。



(a) AL



(b) JJ

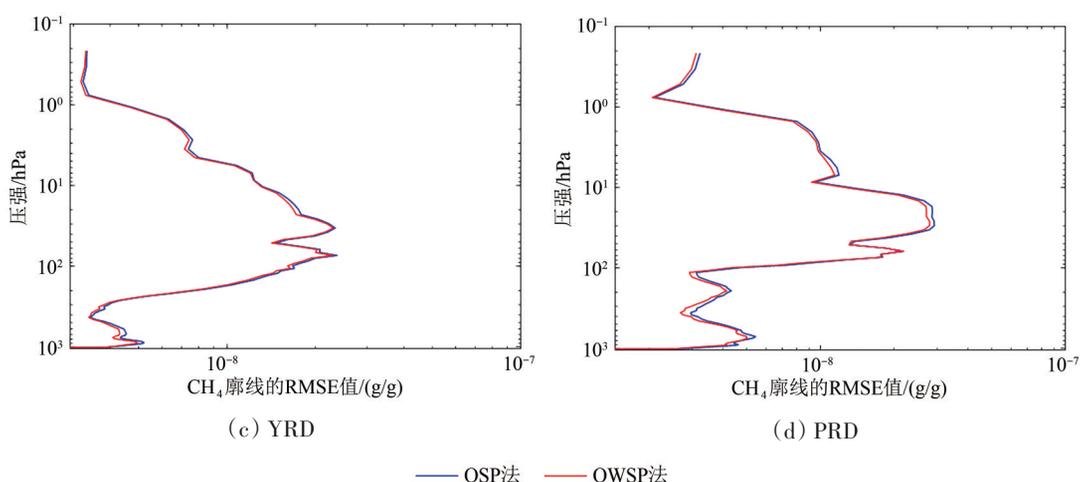


图8 冬季大气条件下通过OWSP通道集和OSP通道集进行 CH_4 廓线反演所得结果的RMSE
Fig. 8 RMSEs of the retrieved CH_4 profiles by the OWSP and OSP channel selection methods in winter airmasses

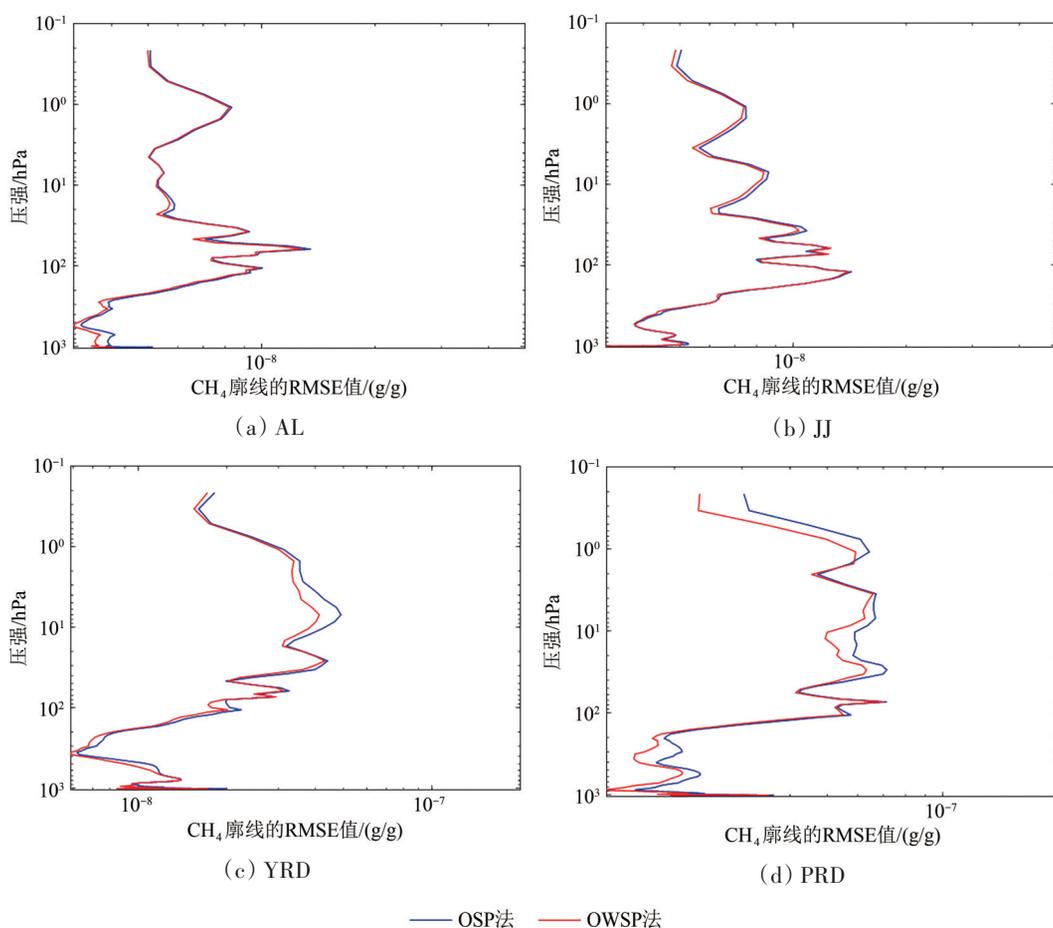


图9 夏季大气条件下通过OWSP通道集和OSP通道集进行 CH_4 廓线反演所得结果的RMSE
Fig. 9 RMSEs of the retrieved CH_4 profiles by the OWSP and OSP channel selection methods in summer airmasses

结合 CH_4 的通道选择结果,对其反演所得廓线的精度进行分析。可得:(1)在所研究的所有大气条件下,OWSP方法选取的通道集合反演精度均优于OSP方法的,平均精度提升比率为4.90%,这进一步说明了OWSP方法可以有效挖掘受干扰较大

通道中的特有反演信息。(2)与其他相对较为干燥的大气状况相比,采用OWSP方法获取的夏季YRD和PRD地区 CH_4 廓线精度较差,分别为32.72和60.61 ppbv,这说明了大气中水汽是 CH_4 反演中的重要干扰因素。

表4 不同大气条件下,OWSP法和OSP方法对应CH₄廓线反演精度比较

Table 4 Accuracy comparisons of the retrieved CH₄ profiles by the OWSP and OSP channel selection methods in different airmasses

大气条件		RMSE _p /ppbv		精度提升比率/%
区域	季节	OWSP法	OSP法	
AL	冬季	19.66	20.17	2.59
JJ		19.96	21.20	5.86
YRD		16.08	16.58	3.03
PRD		14.15	14.85	6.62
AL	夏季	9.86	10.28	4.05
JJ		12.42	12.65	1.79
YRD		32.72	35.28	6.86
PRD		60.61	66.15	8.37

4 结论

本研究针对超光谱热红外数据反演痕量气体廓线时通道选择结果信息冗余及有效信息提取不足的问题,深入分析了精细大气分层上的通道可反演信息,构建了一种新型的基于大气敏感度和雅可比剖面的通道选择方法(OWSP法)。将该方法应用在O₃和CH₄廓线的反演研究中,对通道选择结果及其对应的廓线反演结果进行分析后,可以得到如下结论:

(1) 在热红外敏感区干扰因素少的情况下,OSP方法获取的通道集合可以较为全面地包含反演目标参数廓线的有效信息,然而该方法获取的通道数量非常庞大,无法对包含相似信息的相邻通道进行优选。而OWSP法在保证所选通道总信息容量的同时,可以自动剔除一些低信息容量的冗余信息,大大提高了反演的效率,同时,降低了反演方程的病态性,提升了反演的精度。

(2) 在热红外敏感区干扰因素多的情况下,OSP方法放大了干扰因素对反演结果精度的抑制作用,所选通道集合中包含的信息容量不充分。OWSP方法可以对部分较少受到干扰的通道进行二次筛选,通过对精细大气分层上的信息容量进行半量化研究来提取超光谱热红外数据中的特有信息,达到提高反演廓线精度的目标。

(3) 将OWSP方法应用在超光谱热红外数据中,在本文所研究的大气条件下,与OSP方法相比,反演O₃和CH₄廓线结果精度分别提升了9.30%

和4.90%。以上结果证明了OWSP方法可以有效提升超光谱热红外数据反演强红外辐射气体和微弱红外辐射气体廓线的精度,具有较高的应用价值。

(4) 除本文提到的干扰气体及仪器噪声之外,其他大气和表面热力学组分也会对O₃和CH₄的吸收波段造成影响。今后还需要进一步研究其他因素对痕量气体反演过程中通道选择及反演精度的影响。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反演痕量气体中的适用性。

参考文献(References)

- Aires F, Chédin A, Scott N A and Rossow W B. 2002. A regularized neural net approach for retrieval of atmospheric and surface temperatures with the IASI instrument. *Journal of Applied Meteorology*, 41(2): 144-159 [DOI: 10.1175/1520-0450(2002)041<0144:ARN-NAF>2.0.CO;2]
- Von Clarmann T and Echle G. 1998. Selection of optimized microwindows for atmospheric spectroscopy. *Applied Optics*. 37(33):7661-7669. [DOI: 10.1364/AO.37.007661].
- Cape J N. 2008. Surface ozone concentrations and ecosystem health: Past trends and a guide to future projections. *Science of The Total Environment*, 400(1/3): 257-269 [DOI: 10.1016/j.scitotenv.2008.06.025]
- Chédin A, Hollingsworth A, Scott N A, Serrar S, Crevoisier C and Armante R. 2002. Annual and seasonal variations of atmospheric CO₂, N₂O and CO concentrations retrieved from NOAA/TOVS satellite observations. *Geophysical Research Letters*, 29(8): 110-1110-4 [DOI: 10.1029/2001GL014082]
- Chédin A, Saunders R, Hollingsworth A, Scott N, Matricardi M, Etcheto J, Clerbaux C, Armante R and Crevoisier C. 2003. The feasibility of monitoring CO₂ from high-resolution infrared sounders. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 108(D2): 4064 [DOI: 10.1029/2001JD001443]
- Chen T M, Kushner W G, Gokhale J and Shofer S. 2007. Outdoor air pollution: Ozone health effects. *The American Journal of the Medical Sciences*, 333(4): 244-248 [DOI: 10.1097/MAJ.0b013e31803b8e8c]
- Crevoisier C, Chédin A and Scott N A. 2003. AIRS channel selection for CO₂ and other trace-gas retrievals. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 129(593): 2719-2740 [DOI: 10.1256/qj.02.180]
- Dong X, Xu P M and Hou L Z. 2018. Design and implementation of atmospheric infrared ultra-spectral sounder. *Spacecraft Recovery & Remote Sensing*, 39(3): 29-37 (董欣, 徐彭梅, 侯立周). 2018. 大气环境红外甚高光谱分辨率探测仪设计与实现. 航天返回与遥

- 感, 39(3): 29-37 [DOI: 10.3969/j.issn.1009-8518.2018.03.004]
- Du H D, Huang S X and Shi H Q. 2008. Method and experiment of channel selection for high spectral resolution data. *Acta Physica Sinica*, 57(12): 7685-7692 (杜华栋, 黄思训, 石汉青. 2008. 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*, 57(12): 7685-7692) [DOI: 10.3321/j.issn:1000-3290.2008.12.045]
- Gambacorta A and Barnett C D. 2013. Methodology and information content of the NOAA NESDIS operational channel selection for the Cross-Track Infrared Sounder (CrIS). *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 51(6): 3207-3216 [DOI: 10.1109/TGRS.2012.2220369]
- Inness A, Ades M, Agusti-Panareda A, Barré J, Benedictow A, Blechschmidt A M, Dominguez J, Engelen R, Eskes H, Flemming J, Huijnen V, Jones L, Kipling Z, Massart S, Parrington M, Peuch V H, Razinger M, Rémy S, Schulz M and Suttie M. 2019. The CAMS reanalysis of atmospheric composition. *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions*, 19(6): 3515-3556 [DOI: 10.5194/acp-19-3515-2019]
- IPCC. 2014. The physical science basis. Contribution of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. Cambridge: Cambridge University Press
- Lerner J A, Weisz E and Kirchengast G. 2002. Temperature and humidity retrieval from simulated Infrared Atmospheric Sounding Interferometer (IASI) measurements. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 107(14): ACH 4-1-ACH 4-11 [DOI: 10.1029/2001JD900254]
- Ma P F, Chen L F, Li Q, Tao M H, Wang Z F, Zhang Y, Wang Z T and Zhou C Y. 2015. Simulation of atmospheric nitrous oxide profiles retrieval from AIRS observations. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 35(6): 1690-1694 (马鹏飞, 陈良富, 厉青, 陶明辉, 王子峰, 张莹, 王中挺, 周春艳. 2015. 红外高光谱资料 AIRS 反演晴空条件下大气氧化亚氮廓线. *光谱学与光谱分析*, 35(6): 1690-1694) [DOI: 10.3964/j.issn.1000-0593(2015)06-1690-05]
- McKenzie R L, Aucamp P J, Bais A F, Björn L O, Ilyas M and Madronich S. 2011. Ozone depletion and climate change: impacts on UV radiation. *Photochemical & Photobiological Sciences*, 10(2): 182-198 [DOI: 10.1039/c0pp90034f]
- Miao J, Li X Y, Wang H M, Wang Y P, Zhu S Y and Wang Z H. 2021. Atmospheric water vapor profiles retrieval algorithm for occultation satellite-based infrared payloads. *National Remote Sensing Bulletin*, 25(6): 1201-1215 (苗晶, 李小英, 王红梅, 王雅鹏, 朱松岩, 王智灏. 2021. GF-5 AIUS 水汽廓线反演算法研究. *遥感学报*, 25(6): 1201-1215)
- Pavlov A A, Kasting J F, Brown L L, Rages K A and Freedman R. 2000. Greenhouse warming by CH₄ in the atmosphere of early Earth. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 105(E5): 11981-11990 [DOI: 10.1029/1999JE001134]
- Rabier F, Fourrié N, Chafai D and Prunet P. 2002. Channel selection methods for infrared atmospheric sounding interferometer radiances. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 128(581): 1011-1027 [DOI: 10.1256/0035900021643638]
- Rodgers C D. 1998. Information content and optimization of high-spectral-resolution measurements. *Advances in Space Research*, 21(3): 361-367 [DOI: 10.1016/S0273-1177(97)00915-0]
- Smith W L. 2009. Evolution, current capabilities, and advances in satellite ultra-spectral IR sounding. *AIP Conference Proceedings*, 1100(1): 335-338 [DOI: 10.1063/1.3116985]
- Ulaby F. 2018. Introduction to satellite remote sensing: Atmosphere, ocean, land, and cryosphere applications [Book Review]. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Magazine*, 6(4): 109-110 [DOI: 10.1109/MGRS.2018.2873040]
- Wang H M, Li X Y, Xu J, Zhang X Y, Ge S L, Chen L F, Wang Y P, Zhu S Y, Miao J and Si Y D. 2018. Assessment of retrieved N₂O, NO₂, and HF profiles from the Atmospheric Infrared Ultraspectral Sounder based on simulated spectra. *Sensors*, 18(7): 2209 [DOI: 10.3390/s18072209]
- Wang Y P. 2017. Research on Temperature/Pressure and Ozone Retrieval Algorithm based on Atmospheric Infrared Ultraspectral Spectrometer. Beijing: University of Chinese Academy of Sciences (王雅鹏. 2017. 大气红外甚高分辨率掩星探测仪温压及臭氧廓线反演算法研究. 北京: 中国科学院大学)
- Worden J, Kulawik S S, Shephard M W, Clough S A, Worden H, Bowman K and Goldman A. 2004. Predicted errors of tropospheric emission spectrometer nadir retrievals from spectral window selection. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 109(D9): D09308 [DOI: 10.1029/2004JD004522]
- Worden J, Kulawik S, Frankenberg C, Payne V, Bowman K, Cady-Peirara K, Wecht K, Lee J E and Noone D. 2012. Profiles of CH₄, HDO, H₂O, and N₂O with improved lower tropospheric vertical resolution from Aura TES radiances. *Atmospheric Measurement Techniques*, 5(2): 397-411 [DOI: 10.5194/amt-5-397-2012]
- Wu X, Dai C M, Wei H L and Miao X K. 2018. Channel selection of high-spectral resolution interferometer sounder for use in temperature retrieval//Proceedings of SPIE10697, Fourth Seminar on Novel Optoelectronic Detection Technology and Application. Nanjing: SPIE [DOI: 10.1117/12.2315473]
- Zhang Y, Chen L F, Tao J H, Su L, Yu C and Fan M. 2012. Retrieval of methane profiles from spaceborne hyperspectral infrared observations. *Journal of Remote Sensing*, 16(2): 232-247. (张莹, 陈良富, 陶金花, 苏林, 余超, 范萌. 2012. 利用卫星红外高光谱资料反演大气甲烷浓度垂直廓线. *遥感学报*, 16(2): 232-247) [DOI: 10.11834/jrs.20121051]

Application of a channel-selection method on the retrieval of O₃ and CH₄ profiles from Ultra-Spectral Thermal Infrared Data

YAO Weiyuan, ZHANG Beibei, WANG Ning, MA Lingling, QIAN Yonggang, WANG Xinhong,
LI Chuanrong, TANG Lingli

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

Abstract: Compared with high-spectral thermal infrared data, ultra-spectral thermal infrared data contains enhanced atmospheric vertical information of ozone (O₃) and methane (CH₄). This finding indicates the possibility to improve the accuracy of retrieved O₃ and CH₄ profiles. Due to the narrow channel intervals of the ultra-spectral thermal infrared data, abundant special information and redundant information is induced. However, information cannot be detected by channel-selection methods for high-spectral thermal infrared data, thereby impeding the superiority of ultra-spectral data for the retrieval of trace-gas profiles. As such, a novel channel-selection method based on the gas-sensitivity and weighting-function characteristics (OWSP) has been promoted, aiming to enhance the retrieval efficiency and accuracy of O₃ and CH₄ profiles from ultra-spectral thermal infrared data. The method comprises two steps. First, the sensitivities of the channels to different gases are analyzed, and the signal-to-interference ratio (r_{STI}) are obtained. On this basis, channels with abundant information for retrieved gas and insensitivity to other gases can be detected, which are taken as the initial channel group. Second, a strategy of optimizing the distribution of the weighting function is promoted based on the features of Jacobians to O₃ and CH₄. The channel information content can then be quantified by the optimized weighting function. An iterative approach is applied to select the optimal channel group to retrieve atmospheric profiles. In this paper, the promotion effect of OWSP method for O₃ and CH₄ profile retrieval from ultra-spectral thermal infrared data is evaluated by applying in the winter and summer atmospheric situation of the regions of Alxa Desert (AL), Beijing Tianjin district (JJ), Yangtze River Basin (YRD), and Pearl River Basin (PRD). The optimal sensitivity profile (OSP) method, which suggests good performance for high-spectral thermal infrared data in literature, is used in the control group. By comparing with the channel selection results of OSP method, it shows that the OWSP method can effectively screen the correlated channels with similar information for the strong infrared radiation gas, O₃. It can also select some channels with special information. Conversely, it has relatively low sensitivity for the weak infrared radiation gas, CH₄, thereby ensuring the accuracy and efficiency of the subsequent retrieval process. The retrieval results of O₃ and CH₄ profiles with the channel group selected by the two methods further prove that the OWSP method can efficiently improve the accuracy of the retrieved profiles in most situations, and the mean retrieval accuracy of the O₃ and CH₄ profiles increase 9.30% and 4.90%, respectively. This research has important theoretical and application value, which can provide some essential technological support for the development and data application of ultra-spectral TIR sensor for our country in the future.

Key words: remote sensing, thermal infrared data, ultra-spectral, channel selection, jacobians, gas sensitivity, O₃ and CH₄ profile retrieval

Supported by National Key Research and Development Program (No. 2016YFB0500602)