

К.Г. Грибанов, В.И. Захаров, А.Ю. Топтыгин

Восстановление профилей температуры и влажности по ИК-спектрам Земли на основе сингулярного разложения ковариационных матриц

ГУДП «Свердловский филиал научно-исследовательского и конструкторского института энерготехники»,
ГФОУ «Уральский государственный университет им. А.М. Горького», г. Екатеринбург

Поступила в редакцию 26.12.2002 г.

Разработан и программно реализован экономичный метод восстановления атмосферных профилей температуры и влажности по ИК-спектрам Земли, полученным из космоса с высоким спектральным разрешением. Метод основан на представлении искомого решения в виде ряда по собственным векторам ковариационной матрицы, построенной на выборке зондовых измерений, где коэффициенты ряда определяются в процессе решения обратной задачи переноса ИК-излучения в атмосфере. Аппроксимация решения несколькими первыми членами разложения понижает размерность задачи, что позволяет сократить время счета в несколько раз без потери точности. Тестирование показало, что метод устойчив к шуму с уровнем, характерным для сенсора IMG/ADEOS, и ошибка восстановления температуры, и концентрации водяного пара в нижней тропосфере не превышают 1 К и 10% соответственно.

Введение

Технология зондирования атмосферы с целью мониторинга метеорологических параметров и загрязнения разрабатывается уже более 30 лет [1–3]. Созданию эффективной космической системы мониторинга атмосферных газов уделяется особое внимание. Космическая система мониторинга атмосферных газов включает в себя приборы нескольких типов, которые можно классифицировать по геометрии зондирования. Данная работа посвящена исключительно термическому зондированию в нади́р, поскольку только данная геометрия позволяет осуществлять зондирование в любое время суток и имеет наиболее широкий высотный диапазон измерений, включающий в себя нижнюю тропосферу.

Использование ИК-спектров высокого разрешения позволяет восстанавливать атмосферные параметры с большей точностью и более высоким высотным разрешением, при этом возрастает объем данных, которые следует обрабатывать, что, в свою очередь, предъявляет высокие требования к вычислительным ресурсам, которые задействованы в восстановлении атмосферных параметров по спектрам высокого разрешения. Программное обеспечение FIRE-ARMS [4] разработано для расчетов по переносу излучения в атмосфере с высоким спектральным разрешением и восстановления профилей температуры и концентраций атмосферных газов. Решение обратной задачи в данном пакете осуществляется с помощью метода Флетчера–Ривза [5]. В качестве переменных выступают температуры и концентрации газов на сетке высот. Таким образом, число неизвестныхкратно числу узлов этой сетки.

Методика, описанная в данной статье, основана на использовании априорной информации о параметрах атмосферы. Построение ковариационной матрицы профилей атмосферных параметров и ее сингулярное разложение позволяют представить обратную задачу восстановления в других координатах: неизвестными считаются коэффициенты в разложении профиля атмосферных параметров по собственным векторам ковариационной матрицы. Ограничивая ряд несколькими первыми слагаемыми, можно понижать размерность задачи, что, в свою очередь, уменьшает время решения обратной задачи. Данная работа посвящена развитию идеи, изложенной в работе [6], где описывается применение сингулярного разложения ковариационной матрицы профилей для решения обратной задачи с использованием линеаризованной прямой модели для многоканальных спектрорадиометров GOES-8/9. В данной же работе используются как более строгая нелинейная модель переноса излучения в атмосфере, так и спектры более высокого разрешения, что позволяет надеяться на более высокую точность восстановления. Предложенная методология апробирована на спектрах, полученных сенсором IMG/ADEOS [7].

Собственные значения и собственные векторы ковариационной матрицы профилей

Для определения состояния атмосферы в данной работе использовался следующий вектор: $\mathbf{P} = (T_s, T_1, \dots, T_N, q_1, \dots, q_N)$, который содержит по-

верхностную температуру, высотный профиль температуры воздуха и высотный профиль концентрации водяного пара. Пусть $\mathbf{P}^1 \dots \mathbf{P}^M$ – набор векторов атмосферных параметров, полученный в результате зондовых или иных прямых измерений. Ковариационная матрица для этого набора рассчитывается по формуле

$$\Sigma_{kl} = \frac{\sum_{i=1}^M (P_k^i - P_k^0)(P_l^i - P_l^0)}{M - 1}. \quad (1)$$

Здесь \mathbf{P}^0 – вектор, относительно которого вычисляется ковариация; индексы k, l меняются от 1 до $2N + 1$, где N – число узлов в высотной сетке $\{h_1, \dots, h_N\}$ профиля; M – число векторов в наборе. В качестве \mathbf{P}^0 может быть взят средний вектор по набору $\mathbf{P}^1 \dots \mathbf{P}^M$, тогда элемент Σ_{kl} будет представлять корреляцию параметров между k -м и l -м компонентами вектора состояния, а элементы Σ_{kl} – соответствующую дисперсию.

Сингулярное разложение матрицы

$$\Sigma = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}', \quad (2)$$

где \mathbf{S} – диагональная матрица, содержащая собственные значения; \mathbf{U} и \mathbf{V} – ортогональные матрицы, столбцы которых содержат левые и правые собственные векторы Σ . Стандартные методы сингулярного разложения устроены таким образом, что собственные значения отсортированы в матрице \mathbf{S} по убыванию. Используя разложение (2), любой N -мерный вектор \mathbf{P} можно точно представить в виде

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}^0 + \sum_{i=1}^N C_i \mathbf{u}_i, \quad (3)$$

где \mathbf{u}_i – собственные векторы Σ . В соответствии с разбиением вектора \mathbf{P} каждый собственный вектор можно представить как $\mathbf{u}_i = (u_i^s, u_{i1}^T, \dots, u_{iN}^T, u_{i1}^q, \dots, u_{iN}^q)$ (индексы s, T и q обозначают температуру поверхности, температурный профиль и профиль влажности соответственно). Если взять число слагаемых в сумме (3) равным $n \leq N$, то можно получить некоторое приближение вектора \mathbf{P} . Для построения матрицы (1) была использована база данных атмосферных профилей TIGR [8]. На рис. 1 представлены типичный профиль температуры и его приближительные разложения для $n = 10, 20$ при $N = 34$. Средняя высотная ошибка составила 1,8 и 0,5 К соответственно для данных n , а максимальная – 5,6 и 2,7 К соответственно. Таким образом, сократив число слагаемых в (3), можно понизить размерность обратной задачи при восстановлении профиля T и, следовательно, сократить число итераций в используемом алгоритме минимизации целевой функции при реализации метода наименьших квадратов.

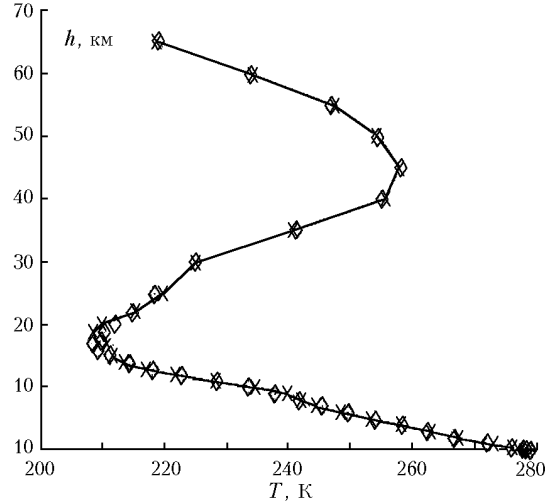


Рис. 1. Высотный профиль температуры и его разложения (3) при числе слагаемых 10 (ромбы) и 20 (крестики)

Метод восстановления профилей температуры и влажности с использованием сингулярного разложения

Спектр излучения безоблачной атмосферы для случая наблюдения в надир определяется следующим выражением [1]:

$$W_v = \varepsilon(v) B_v(T_s) \exp\left(-\int_0^H K_v dh\right) + \int_0^H K_v B_v(T) \exp\left(-\int_h^H K_v dh'\right) dh, \quad (4)$$

где $B_v(T)$ – яркость абсолютно черного тела; $\varepsilon(v)$ – излучательная способность поверхности; H – верхняя граница атмосферы; K_v – коэффициент поглощения атмосферы, который рассчитывается в предположении локального термодинамического равновесия и отсутствия рассеяния методом полилинейного суммирования с использованием параметров из базы данных HITRAN-96 [9].

В настоящей статье использовалась следующая целевая функция:

$$F = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \left[\frac{W_i^{obs}}{W_i^{calc}} - \frac{W_i^{calc}}{W_i^{obs}} \right]^2, \quad (5)$$

где W_i^{obs} и W_i^{calc} – наблюдаемый и модельный спектры на i -й частоте. Для минимизации (5) используется метод наименьших квадратов по алгоритму сопряженных градиентов Флетчера–Ривза. Варьируемыми параметрами являются коэффициенты C_i в разложении профиля атмосферных параметров (3). Метод Флетчера–Ривза представляет собой расширение метода сопряженных направлений на случай произвольных функций. Методы

сопряженных направлений характеризуются тем, что по скорости сходимости они превосходят градиентные методы [10] и приближаются к методу Ньютона, однако в отличие от него не требуют вычисления вторых производных функции (5), которое привело бы к вычислению вторых производных выражения (4), вычислительная реализация чего весьма трудоемка. Метод Флетчера–Ривза может быть представлен в виде следующей последовательности шагов:

а) шаг 0: C^0 – начальное состояние (коэффициенты, соответствующие разложению модельного профиля атмосферы); $d^0 = -\nabla F(C^0)$ – направление первого шага;

б) шаг k : находится λ^k из решения задачи одномерной минимизации для функции $g(\lambda) = F(C^k + \lambda d^k)$, затем полагаются

$$C^{k+1} = C^k + \lambda^k d^k; \beta^k = \frac{\|\nabla F(C^{k+1})\|^2}{\|\nabla F(C^k)\|^2};$$

$$d^{k+1} = -\nabla F(C^{k+1}) + \beta^k d^k; \quad (6)$$

в) остановка производится, если достигнута нужная точность.

Вычисление ∇F предполагает вычисление производных вида $\partial F / \partial C_k$, где $k = 1, \dots, L$ – число коэффициентов в разложении (3), а это, в свою очередь, приводит к вычислению производных вида

$$\begin{aligned} \frac{\partial W_i^{calc}}{\partial C_k} = & \varepsilon_i \frac{\partial B_i(T_s)}{\partial T_s} u_k^s \exp\left(-\int_0^H K_i dh\right) - \\ & - \varepsilon_i B_i(T_s) \left[\int_0^H \frac{\partial K_i}{\partial T} u_k^T(h) dh \right] \exp\left(-\int_0^H K_i dh\right) - \\ & - \varepsilon_i B_i(T_s) \left[\int_0^H \frac{\partial K_i}{\partial q} u_k^q(h) dh \right] \exp\left(-\int_0^H K_i dh\right) + \\ & + \int_0^H \frac{\partial K_i}{\partial T} u_k^T(h) B_i \exp\left(-\int_h^H K_i dh'\right) dh + \\ & + \int_0^H \frac{\partial K_i}{\partial q} u_k^q(h) B_i \exp\left(-\int_h^H K_i dh'\right) dh + \\ & + \int_0^H K_i \frac{\partial B_i}{\partial T} u_k^T(h) \exp\left(-\int_h^H K_i dh'\right) dh - \\ & - \int_0^H K_i B_i \left[\int_h^H \frac{\partial K_i}{\partial T} u_k^T(h') dh' \right] \exp\left(-\int_h^H K_i dh'\right) dh - \\ & - \int_0^H K_i B_i \left[\int_h^H \frac{\partial K_i}{\partial q} u_k^q(h') dh' \right] \exp\left(-\int_h^H K_i dh'\right) dh. \quad (7) \end{aligned}$$

Здесь учтено, что

$$\frac{\partial K_v[P(h)]}{\partial C_k} = \frac{\partial K_v[P(h)]}{\partial P(h)} \frac{\partial P(h)}{\partial C_k} = \frac{\partial K_v}{\partial P} u_k(h),$$

последнее равенство вытекает из (3); $u_k(h)$ находится линейной аппроксимацией между узлами сетки $h \in [h_j, h_{j+1}]$.

Алгоритм восстановления профилей атмосферных параметров на основе сингулярного разложения (3), использующий метод (6) и выражение (7), был программно реализован путем модификации открытого исходного кода FIRE-ARMS.

Результаты и их обсуждение

С помощью описанной выше методики была проведена серия численных экспериментов по восстановлению профилей температуры и концентрации водяного пара.

Модельный эксперимент проводился по следующей схеме:

1. Из базы профилей TIGR выбираются температура поверхности T_s , профили температуры T_0 и влажности q_0 , и моделируется спектр яркости системы «атмосфера – земная поверхность» в спектральных интервалах 675–825, 1200–1220 и 1550–1620 см^{-1} для выбранного состояния атмосферы. К модельным спектрам был добавлен случайный сигнал, равномерно распределенный в интервале $[-r_N, r_N]$, где $r_N = 0,0002 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{см}^{-1} \cdot \text{ср})$ – эквивалентная шумовая спектральная яркость, заявленная в [11] для интерферометра IMG.

2. Из модельного спектра в выбранных узких спектральных интервалах восстанавливаются поверхностная температура (819–821 см^{-1}), высотные профили температуры (680–685, 714–715, 749–751 и 760–761 см^{-1}) и влажности (1210–1213 и 1560–1610 см^{-1}). При этом в качестве начального приближения P^0 используется одна из стандартных моделей атмосферы [12], а выбор спектральных интервалов был сделан на основе анализа весовых функций выражения (4) [1].

Производится сравнение заданного и восстановленного состояний атмосферы.

На рис. 2 показан пример сравнения исходного и восстановленного профилей температуры, аналогичный пример для водяного пара представлен на рис. 3.

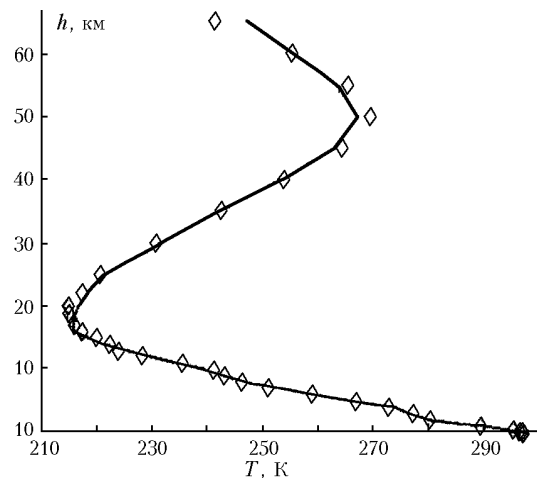


Рис. 2. Исходный (сплошная линия) и восстановленный из модельного спектра (ромбы) высотные профили температуры

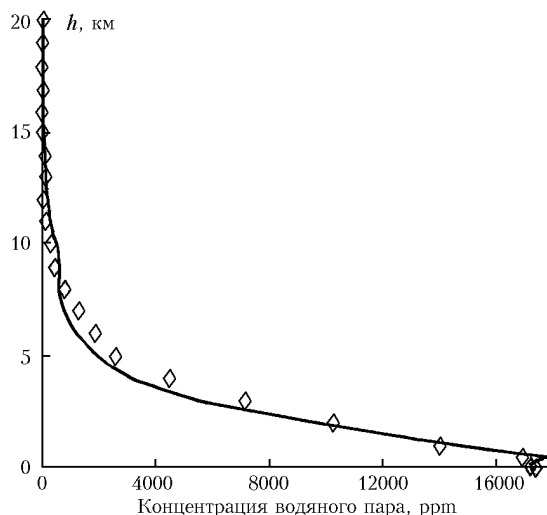


Рис. 3. Пример исходного (сплошная линия) и восстановленного из модельного спектра (ромбы) высотных профилей концентрации водяного пара

Рис. 4 и 5 показывают подгонку спектров, смоделированных на основе заданного и восстановленного состояний атмосферы. На основе большого количества модельных экспериментов была построена среднеквадратическая ошибка восстановления из модельных спектров как с добавлением шумового сигнала, так и без него. Результаты представлены на рис. 6 и 7 для температуры и влажности соответственно.

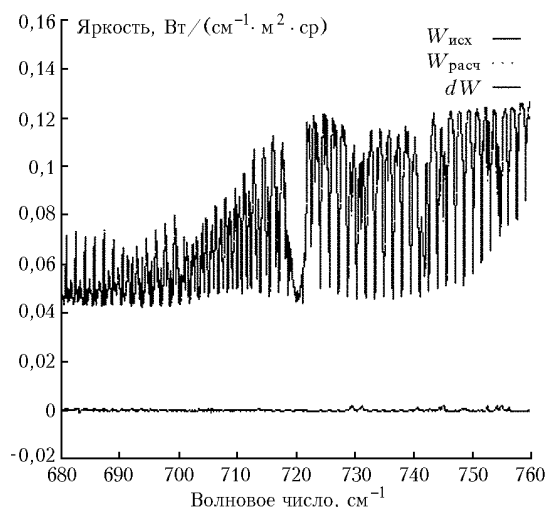


Рис. 4. Подгонка исходного модельного спектра и спектра, смоделированного на основе восстановленного профиля температуры (см. рис. 2)

Модельная сетка высот в экспериментах содержала 34 узла, и размерность ковариационной матрицы была 69×69 ($2 \cdot 34 + 1 = 69$), что означало 69 слагаемых в сумме в (3). Однако, как показали эксперименты, для восстановления высотных профилей температуры и влажности с приемлемой точностью достаточно 15–20 первых слагаемых ряда (3), что означает более чем трехкратное понижение размерности задачи и соответствующее уменьшение времени на ее решение.

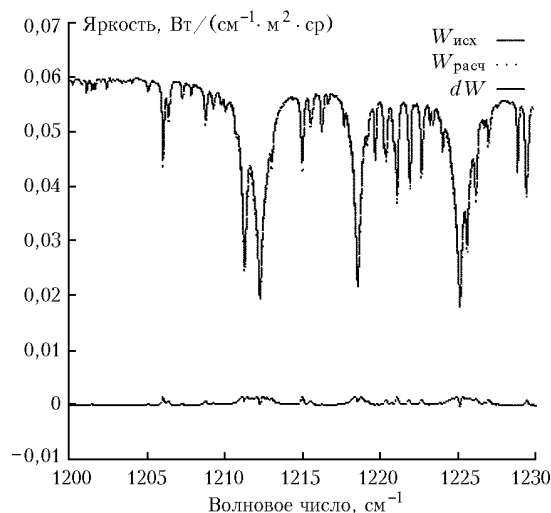


Рис. 5. Подгонка исходного модельного спектра и спектра, смоделированного на основе восстановленного профиля концентрации водяного пара (см. рис. 3)

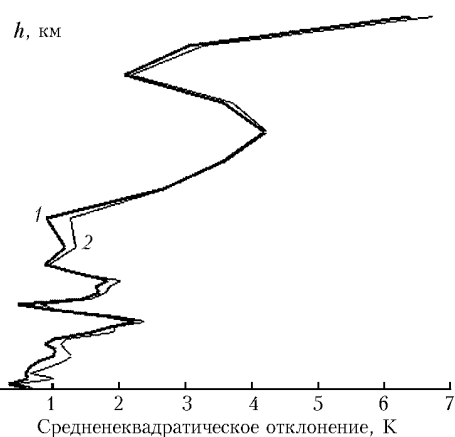


Рис. 6. Среднеквадратическая ошибка восстановления высотного профиля температуры из модельных спектров без учета шумов (кривая 1) и с уровнем шума сенсора IMG/ADEOS (кривая 2)

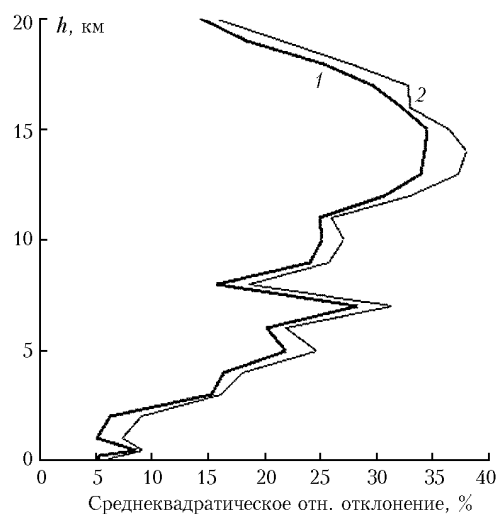


Рис. 7. Среднеквадратическая ошибка восстановления высотного профиля концентрации водяного пара из модельных спектров без учета шумов (кривая 1) и с уровнем шума сенсора IMG/ADEOS (кривая 2)

Разработанный метод апробирован на образцах реальных спектров, полученных сенсором IMG со спутника ADEOS. На рис. 8, 9 приведены восстановленные профили температуры и влажности.

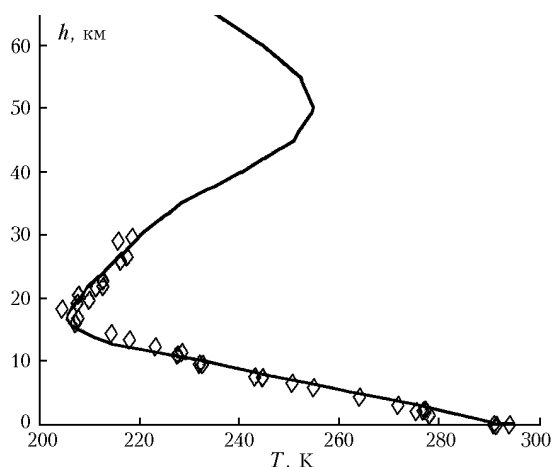


Рис. 8. Восстановленный из спектра IMG профиль температуры (сплошная линия). Для сравнения приведен измеренный зондом (ромбы) профиль

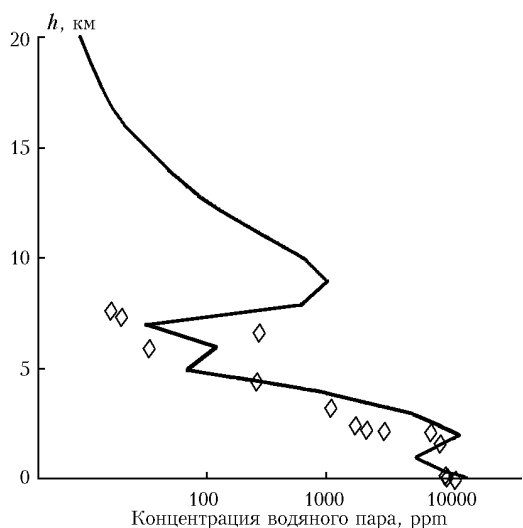


Рис. 9. Восстановленный из спектра IMG профиль концентрации водяного пара (сплошная линия). Для сравнения приведен измеренный зондом профиль (ромбы)

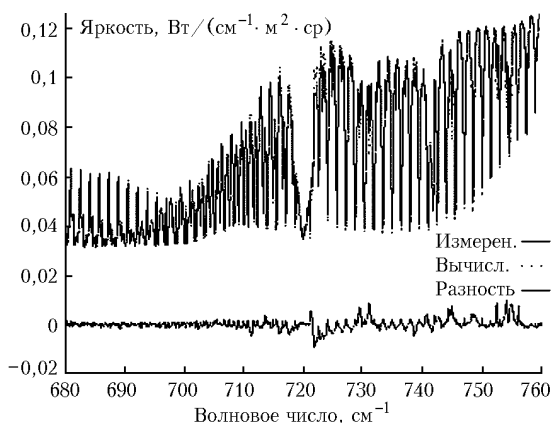


Рис. 10. Подгонка измеренного сенсором IMG спектра и спектра, смоделированного на основе восстановленного профиля температуры (см. рис. 8)

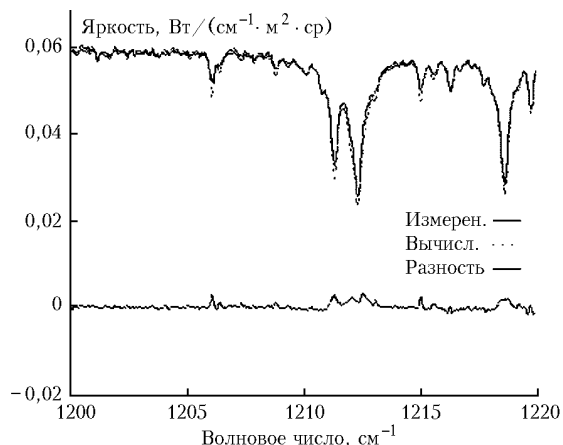


Рис. 11. Подгонка измеренного сенсором IMG спектра, смоделированного на основе восстановленного профиля концентрации водяного пара (см. рис. 9)

Там же приведены результаты зондовых измерений, близкие по времени и координатам. Оба измерения были сделаны над акваторией Тихого океана 22 апреля 1997 г. над точкой $25,175^\circ$ ю.ш., $151,675^\circ$ з.д. (IMG) и над точкой $29,04^\circ$ ю.ш., $177,92^\circ$ з.д. (зонд). На рис. 10, 11 показаны измеренный и расчетный спектры в полосах, использованных для определения профилей температуры и влажности.

Заключение

Нами разработан экономичный метод восстановления высотных профилей температуры и влажности на основе сингулярного разложения ковариационной матрицы зондовых измерений. Исследовано влияние шума с уровнем, характерным для сенсора IMG/ADEOS, на ошибку восстановления профилей температуры и влажности. Как показал модельный эксперимент, влияние шумовой составляющей спектра яркости на ошибку восстановления предложенным методом из спектров сенсора IMG не велико. Метод ориентирован прежде всего на восстановление атмосферных параметров из спектров высокого разрешения, измеряемых орбитальными Фурье-спектрометрами нового поколения. Он сочетает в себе экономичность и достаточную точность, что делает его перспективным для обработки данных с таких будущих сенсоров, как IASI [14], TES [15], EarthCARE FTS [16] и др. Метод реализован программно в виде исходного кода на языке Фортран и доступен в сети Интернет по адресу atmosphere.ur.ru

1. Кондратьев К.Я., Тимофеев Ю.М. Термическое зондирование атмосферы со спутников. Л.: Гидрометеоиздат, 1970. 280 с.
2. Малкевич М.С. Оптические исследования атмосферы со спутников. М.: Наука, 1973. 303 с.
3. Тимофеев Ю.М. Спутниковые методы исследования газового состава атмосферы (обзор) // Изв. АН СССР. Физ. атмосфер. и океана. 1989. Т. 26. № 5. С. 451–472.
4. Griбанov K.G., Zakharov V.I., Tashkun S.A., Tyutelev V.I.G. A new software tool for radiative transfer calculations and its application to IMG/ADEOS data

- // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2001. V. 68. N 4. P. 435–451.
5. *Muny M.* Математическое программирование: Пер. с фр. Новосибирск: Наука, 1990. 488 с.
 6. *Ma X.L., Schmit T.J., Smith W.L.* A Nonlinear Physical Retrieval Algorithm – Its Application to the GOES-8/9 Sounder // J. Appl. Meteorol. 1999. V. 38. P. 501–513.
 7. *Nakajima N., Kobayashi H., Saji H.* IMG Current Status and Mission Operation Plan // The Second ADEOS Symposium/Workshop: Proc. 1997. P. 389–397.
 8. *Chevallier F., Chedin A., Cheruy F., Morcrette J.J.* TIGR-like atmospheric profile databases for accurate radiative-flux computation // Quart. J. of Roy. Meteorol. Soc. 2000. V. 126. N 563. Part B. P. 777–785.
 9. *Rothman L.S., Rinsland C.P., Goldman A., Massie S.T., Edwards D.P., Flaud J.-M., Perrin A., Camy-Peyret C., Dana V., Mandin J.-Y., Schroeder J., McCann A., Gamache R.R., Wattson R.B., Yoshida K., Chance K.V., Jucks K.W., Brown L.R., Nemtchinov V. and Varanasi P.* The HITRAN molecular spectroscopic database and HAWKS (HITRAN Atmospheric Workstation): 1996 edition // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1998. V. 60. N 5. P. 665–710.
 10. *Пшеничный Б.Н., Данилин Ю.М.* Численные методы в экстремальных задачах. М.: Наука, 1975. 320 с.
 11. *Interferometric Monitor for Greenhouse Gases: IMG Project Technical Report // IMG Mission Operation & Verification Committee, CRIEPI / Ed. by H. Kobayashi.* Tokyo, Japan, 1998. 45 p.
 12. *Anderson G.P., Clough S.A., Kneizys F.X., Chetwynd J.H., and Shettle E.P.* AFGL atmospheric constituent profiles (0–120 km) // AFGL-TR-0110. Environ. Res. Paper 954, Air Force Geophys. Labor. 1986. 43 p.
 13. *Rogers C.D.* Characterization and Error Analysis of Profiles Retrieved From Remote Sounding Measurements // J. Geophys. Res. D. 1990. V. 95. N 5. P. 5587–5597.
 14. *Javelle P.* IASI instrument overview // Proc. of the 5th Workshop on ASSFTS, Nov. 30th – Dec. 2nd, 1994. Tokyo, Japan. P. 1–20.
 15. *Beer R.* Tropospheric emission spectrometer (TES) // Proc. of the 5th Workshop on ASSFTS, Nov. 30th – Dec. 2nd, 1994. Tokyo, Japan. P. 77–92.
 16. *Kondo K., Imasu R., Kimura T., Suzuki M., Kuze A., Ogawa T., Nakajima T.* Mission objectives and instrument design concept of EarthCARE FTS // Proc. SPIE. 2002. V. 4897.

K.G. Gribanov, V.I. Zakharov, A.Yu. Toptygin. Temperature and humidity profiles retrieval on the basis of singular value decomposition of covariance matrices.

An economic algorithm for atmospheric temperature and humidity profiles retrieval from IR Earth spectra obtained with high spectral resolution is developed. The method is based on representation of the solution as expansion in terms of eigenvectors of covariance matrix of the set of sonde measurements. The coefficients of this expansion are determined in the process of inverse IR radiative transfer solution. The approximation of the solution by several first terms of the expansion decreases the dimension of the inverse problem and the time of calculations without accuracy loss. Test retrievals showed that the method is stable with the measurement noise level reported for IMG/ADEOS and errors in temperature and water vapor concentration retrievals in the lower troposphere are no greater than 1 K and 10%, respectively.