УДК 004.4

М.Ю. Катаев, А.К. Лукьянов, S. Maksyutov

Модифицированный метод эмпирических ортогональных функций восстановления общего содержания углекислого газа из спутниковых данных

Рассматривается модификация метода эмпирических ортогональных функций (ЭОФ) для решения задачи восстановления общего содержания углекислого газа по реальным данным измерений спутниковым прибором GOSAT. Модификация заключается в учете сингулярного разложения не только матрицы измеренных сигналов (основной подход), но также матрицы общего содержания углекислого газа (модификация). Приводятся результаты обработки основным и модифицированным методом эмпирических ортогональных функций данных измеренных спутниковых спектров отраженного от поверхности солнечного излучения в ближней ИК-области спектра для станции Lamont наземной сети TCCON измерения общего содержания CO_2 .

Ключевые слова: атмосфера Земли, газовый состав, дистанционные спутниковые методы, отраженное от поверхности солнечное излучение, Фурье-спектрометр, эмпирические ортогональные функции.

doi: 10.21293/1818-0442-2016-19-4-87-90

Известно, что наблюдаемые изменения климата связаны с естественными и антропогенными факторами. Разделение вклада этих компонент в общем процессе – важнейшая задача, которая приводит к необходимости проведения глобального мониторинга параметров атмосферы Земли, среди которых находятся и такие парниковые газы, как CO_2 и CH_4 . Помимо первой, важной является задача оценки вклада в формирование климата подстилающей поверхности и процессов обмена выделяемых ею газовых компонент, к которым также относятся газы CO_2 и CH_4 . Для решения вышеизложенных задач оценки изменений климата применяется подход, связанный с разработкой различного рода климатических моделей (например, NCAR Community Climate Model (CCM) [www.cgd.ucar.edu/cms/ccm3]), для разработки которых требуются пространственно-временные данные составляющих атмосферы (метеорологические, газовые и аэрозольные составляющие), данные о поверхности Земли и др. Только спутниковые приборы позволяют получать регулярные по времени и пространству по всей поверхности Земли, измерения климатообразующих параметров.

Одним из таких приборов является Фурье-спектрометр среднего разрешения GOSAT, установленный на спутнике японского космического агентства IBUKI [www.gosat.nies.go.jp/en]. Аналогичные по характеристикам являются приборы: OCO-2 [oco.jpl.nasa.gov], Sciamachy [www.sciamachy.org], и IASI [iasi.cnes.fr/fr].

Технологии проведения уникальных научных экспериментов изучения атмосферы со спутников с целью определения ее параметров разрабатываются уже более 50 лет. За это время получены приборы, которые позволяют проводить измерения излучения в ультрафиолетовой, видимой, инфракрасной и микроволновой областях спектра с высоким качеством, пространственным и спектральным разрешением. Число спектральных каналов от первых спутниковых приборов до последних возросло в тысячи раз,

что позволяет восстанавливать параметры атмосферы с высокой точностью по пространству и времени. Однако большое количество поступающих данных приводит к необходимости их накапливать и обрабатывать, что предъявляет особые требования к методам обработки и вычислительным средствам. С развитием приборной базы спутниковых измерений развиваются и методы обработки новых подходов, новых программных приложений. Поэтому предлагаемая в статье модификация метода решения обратной задачи восстановления общего содержания парниковых газов по данным спутникового Фурье-спектрометра является весьма актуальной.

Известные подходы решения обратной задачи

Модель измерений, определяющая прямую задачу, в общем виде может быть представлена следующим выражением:

$$\mathbf{S} = \mathbf{F}(\mathbf{w}, \mathbf{b}) + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (1)$$

где $\mathbf{S}$ – вектор измеренных со спутника интенсивностей отраженного от поверхности солнечного излучения; $\mathbf{F}$ – оператор прямой задачи, как правило, нелинейный; $\mathbf{w}$ – вектор искомых параметров (в нашем случае общее содержание парниковых газов), $\mathbf{b}$ – вектор мешающих параметров атмосферы (это эффекты многократного рассеяния, переотражения от облачных образований, аэрозольные слои и др.); $\boldsymbol{\varepsilon}$ – вектор шума измерительного прибора.

Обратная задача по отношению к (1) заключается в нахождении оценки вектора $\mathbf{w}$ при известном векторе $\mathbf{b}$ по измеренным сигналам $\mathbf{S}$ (учитывая высокое отношение сигнал/шум > 100). Известные подходы [1–8] к решению обратных задач атмосферной оптики основываются на решении обратной задачи методом наименьших квадратов при условии линеаризации (1). В этом случае прямая задача может быть представлена в виде

$$\mathbf{S} = \mathbf{A}\mathbf{w} \quad (2)$$

или

$$\delta\mathbf{S} = \mathbf{A}\delta\mathbf{w}, \quad (3)$$

здесь $\mathbf{A}$ – матрица весовых коэффициентов, $\delta\mathbf{S}=\mathbf{S}-\mathbf{S}_0$ – вектор вариаций измеряемого сигнала относительно модельного, при заданном априорном значении искомого параметра $\mathbf{w}_0$, $\delta\mathbf{w}=\mathbf{w}-\mathbf{w}_0$ – вектор вариаций искомого параметра относительно априорного значения.

Известно, что большинство измерительных задач приводят к некорректным обратным задачам восстановления искомого параметра, что вынуждает применять соответствующие математические методы. При решении обратной задачи для нелинейного вида прямой задачи (1) применяются вариационные алгоритмы, минимизирующие различного рода целевые функции:

$$\Delta(\mathbf{w})=\{(\mathbf{S}-\mathbf{F}(\mathbf{w},\mathbf{b}))\mathbf{R}_S^{-1}(\mathbf{S}-\mathbf{F}(\mathbf{w},\mathbf{b}))^T\} \quad (4)$$

или

$$\Delta(\mathbf{w})=\{(\mathbf{w}-\mathbf{w}_0)\mathbf{R}_w^{-1}(\mathbf{w}-\mathbf{w}_0)^T + (\mathbf{S}-\mathbf{F}(\mathbf{w},\mathbf{b}))\mathbf{R}_S^{-1}(\mathbf{S}-\mathbf{F}(\mathbf{w},\mathbf{b}))^T\}, \quad (5)$$

где $\mathbf{R}_S$, $\mathbf{R}_w$ – ковариационные матрицы измерений и априорной информации об общем содержании исследуемого газа.

Отметим, что для случая (2), (3) выражения (4) и (5) не будут меняться, только вместо $\mathbf{F}(\mathbf{w},\mathbf{b})$ будет стоять $\mathbf{Aw}$ (или $\mathbf{A}\delta\mathbf{w}$). Точность решения задач (4), (5) зависит от близости задания начального приближения $\mathbf{w}_0$ к точному решению. Как правило, решение этих уравнений приводит к итерационным алгоритмам, которые являются весьма затратными по своим вычислительным ресурсам и требуют применения специфических методов решения, учитывая, что возникающие при решении матрицы являются большого размера (например, для спутникового прибора GOSAT число спектральных каналов составляет 80000).

Нами ранее был предложен простой и не ресурсоемкий в вычислительном плане подход, основанный на методе эмпирических ортогональных функций. Основным вариантом, предложенный в [10], успешно позволяет в минимальное время обрабатывать большие массивы измерений прибора GOSAT. Однако, имеется возможность провести модификацию этого метода, что даст возможность получить более точное решение обратной задачи.

Модификация метода определения общего содержания

Главным отличием предлагаемой модификации от основного метода является сингулярное разложение не только матрицы измерений, но и матрицы, содержащей общее содержание углекислого газа.

Модификацию ранее предложенного нами метода, ранее представленного в работах [10–12], можно представить несколькими шагами:

ШАГ 1. Вычисление ковариационных функций:

Общее содержание

$$\mathbf{C}_w=\Delta\mathbf{W}\Delta\mathbf{W}^T/N, \quad \Delta\mathbf{W}=\mathbf{W}-\mathbf{E}(\mathbf{W}).$$

Измеренные сигналы

$$\mathbf{C}_s=\Delta\mathbf{S}\Delta\mathbf{S}^T/N, \quad \Delta\mathbf{S}=\mathbf{S}-\mathbf{E}(\mathbf{S}).$$

ШАГ 2. Вычисление сингулярного разложения SVD

$$\mathbf{C}_w=\mathbf{U}_w\mathbf{\Lambda}_w\mathbf{U}_w^T, \quad \mathbf{C}_s=\mathbf{U}_s\mathbf{\Lambda}_s\mathbf{U}_s^T,$$

$\mathbf{U}$, $\mathbf{U}^T$ – собственные вектора и $\mathbf{\Lambda}$ – собственные значения.

ШАГ 3. Вычисление коэффициентов $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$

$$\Delta\mathbf{W}=\mathbf{U}_w\mathbf{A}, \quad \Delta\mathbf{S}=\mathbf{U}_s\mathbf{B}.$$

Из формул для коэффициентов $\Delta\mathbf{W}$ и $\Delta\mathbf{S}$ можно получить:

$$\mathbf{A}=\Delta\mathbf{W}\mathbf{U}_w^T \text{ и } \mathbf{B}=\Delta\mathbf{S}\mathbf{U}_s^T,$$

так как матрица $\mathbf{U}$ – симметрична.

Предположив линейную зависимость между коэффициентами $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$ в виде $\mathbf{A}=\mathbf{DB}$, помножив слева $\mathbf{B}=\Delta\mathbf{S}\mathbf{U}_s^T$ на $\mathbf{D}$, получим $\mathbf{DB}=\mathbf{D}\Delta\mathbf{S}\mathbf{U}_s^T$ тогда $\Delta\mathbf{W}\mathbf{U}_w^T=\mathbf{D}\Delta\mathbf{S}\mathbf{U}_s^T$, откуда

$$\Delta\mathbf{W}=\mathbf{U}_w\mathbf{D}\Delta\mathbf{S}\mathbf{U}_s^T.$$

ШАГ 4. Вычисление общего содержания

$$\mathbf{W}=\mathbf{E}(\mathbf{W})+\mathbf{U}_w\mathbf{D}(\mathbf{S}-\mathbf{E}(\mathbf{S}))\mathbf{U}_s^T.$$

Матрица представима в виде

$$\mathbf{D}=\mathbf{AB}^T(\mathbf{BB}^T)^{-1}.$$

Тогда получаем окончательное выражение для определения общего содержания газа, которое связывает сингулярное разложение как вектора общего содержания, так и матрицы сигналов

$$\mathbf{W}=\mathbf{E}(\mathbf{W})+\mathbf{U}_w\mathbf{AB}^T(\mathbf{BB}^T)^{-1}(\mathbf{S}-\mathbf{E}(\mathbf{S}))\mathbf{U}_s^T.$$

Ранее нами использовалось сингулярное разложение только матрицы сигналов.

Результаты сравнения основного и модифицированного методов

Для проверки работоспособности модифицированного метода ЭОФ, представленного шагами 1–4, нами выполнялось решение обратной задачи в несколько этапов. На первом этапе проходило обучение – получение значений матриц $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$ для данных уровня обработки L2 GOSAT (значения общего содержания CO_2), а затем, на втором этапе, проходила обработка измеренных данных уровня L1 GOSAT (непосредственно измеренные сигналы). Длина выборки данных для станции TCCON Lamont [<https://tcccon-wiki.caltech.edu/Sites>] и GOSAT равнялась одному году. Данные измерений GOSAT брались из площади 1×1 градус с центром в станции Lamont. После обучения и решения обратной задачи стандартным и модифицированным подходами ЭОФ, результаты восстановленного общего содержания CO_2 сравнивались со значениями для станции Lamont. На рис. 1 показано сравнение измеренных на станции Lamont и восстановленного общего содержания CO_2 по данным спутникового прибора GOSAT (см. рис. 1, а) и отклонение этих значений друг от друга (см. рис. 1, б). Из рисунка видно, что отличие общего содержания для станции Lamont и восстановленных по спутниковым данным не пре-

восходит 4 ppm, что составляет около 1% от величины общего содержания, которое меняется в пределах 390–405 в течение года (см. рис. 1, а). Основная масса значений восстановленного общего содержания CO_2 сосредоточена в диапазоне 2 ppm (см. рис. 1, б). Надо отметить, что значительного улучшения в точности решения обратной задачи не произошло. Это можно объяснить наличием множества мешающих факторов, которые надо учитывать при решении обратной задачи, например, оптическая толща аэрозоля, угол наблюдения и освещенности пятна обзора, общее содержание влажности, рельеф и др. Одним из мешающих факторов является оптическая толща аэрозоля, особенно в средней части атмосферы, которая вносит ослабление в проходящее солнечное излучение, но трудно контролируется ввиду малости и имеет сезонную вариабельность [9].

Рис. 1. Сравнение измеренных на станции TCCON Lamont и восстановленных общих содержаний CO_2 по данным спутникового прибора GOSAT (а) и отклонение этих значений друг от друга (б)

Для большей наглядности на рис. 2, а и 3, а приведены графики сравнения общего содержания CO_2 для станции Lamont и восстановленного по данным спутникового прибора GOSAT в относительно друг от друга виде. На рис. 2, б и 3, б приведены отклонения общего содержания CO_2 для станции Lamont и восстановленного по данным спутникового прибора в виде гистограмм. Сравнительный анализ гистограмм показывает, что в случае модифицированного метода (см. рис. 3, б) число отклонений, близких к данным Lamont, является наибольшим по сравнению с основным методом (число значений в районе нуля). Если для основного метода стандартное отклонение составляет 0,7 ppm, то для

модифицированного метода стандартное отклонение составляет 0,58 ppm.

Рис. 2. Сравнение измеренных на станции TCCON Lamont и восстановленных общих содержаний CO_2 по данным спутникового прибора GOSAT (а) и отклонение этих значений друг от друга в виде гистограммы (б) для основного метода ЭОФ

Рис. 3. Сравнение измеренных на станции TCCON Lamont и восстановленных общих содержаний CO_2 по данным спутникового прибора GOSAT (а) и отклонение этих значений друг от друга в виде гистограммы (б) для модифицированного метода ЭОФ

Заключение

Проведенные в статье исследования показывают возможность восстановления общего содержания CO_2 по гиперспектральным измерениям отраженного солнечного излучения при решении задач мониторинга окружающей среды спутниковыми приборами в ближней ИК-области спектра. Рассмотренная в статье модификация метода эмпирических ортогональных функций обработки данных спутниковых измерений может быть применена для получения достоверной информации о временном поведении общего содержания углекислого газа. Несмотря на отсутствие явных преимуществ модифицированного метода, его точность в целом повысилась, что говорит о возможности использования именно этого в дальнейших массовых обработках данных спутникового Фурье-спектрометра GOSAT. Проведенные численные эксперименты показали, что отклонение между данными восстановленных значений общего содержания CO_2 со спутника и данными наземной станции TCCON Lamont за длительный промежуток времени составляет не более одного процента. Это позволяет говорить о возможности применения разработанного метода для массовой обработки спутниковых данных, полученных прибором GOSAT, а также многими другими подобными приборами.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 13-05-01036.

Литература

1. Тимофеев Ю.М. Математические аспекты решения обратных задач атмосферной оптики: учеб. пособие / Ю.М. Тимофеев, А.В. Поляков. – СПб.: Изд-во С.-Петербург. ун-та, 2001. – 188 с.
2. Козлов В.П. Математические вопросы обращения радиационных данных // Инверсия Абеля и ее обобщения / под ред. д. ф.-м.н. Н.Г. Преображенского. – Новосибирск: Наука, 1978. – С. 68–95.
3. Турчин В.Ф. Использование методов математической статистики для решения некорректных задач / В.Ф. Турчин, В.П. Козлов, М.С. Малкевич // Успехи физических наук. – 1970. – Т. 102, вып. 3. – С. 345–386.
4. Rodgers C.D. Some theoretical aspects of remote sounding in the Earth's atmosphere // JQSRT. – 1971. – Vol. 11. – PP. 767–777.
5. Westwater E.R. Statistical information content of radiation measurements used in indirect sensing / E.R. Westwater, O.N. Straund // J. of the Atm. Scien. – 1968. – Vol. 25, № 12. – PP. 750–758.
6. Retrieval algorithm for CO_2 and CH_4 column abundances from short-wavelength infrared spectral observations by the Greenhouse Gases Observing Satellite / Y. Yoshida, Y. Ota, N. Eguchi, N. Kikuchi et al. // Atmospheric Measurement Techniques Discussions. – 2010. – Vol. 1, № 4. – PP. 717–734.
7. Hannachi A. Empirical orthogonal functions and related techniques in atmospheric science: A review / A. Hannachi, I. T. Jolliffe, D. B. Stephenson // International journal of climatology. – 2007. – Vol. 27, № 9. – PP. 41–48.
8. Поляков А.В. Температурно-влажностное зондирование атмосферы по данным спутникового ИК-зондировщика высокого спектрального разрешения ИКФС_2 / А.В. Поляков, Ю.М. Тимофеев, А.Б. Успенский // Исследования Земли из космоса. – 2009. – Т. 1, № 5. – С. 3–10.
9. Лидарные наблюдения появления аэрозолей в средней атмосфере Камчатки в 2007–2011 гг. / В.В. Бычков, А.С. Пережогин, Б.М. Шевцов и др. // Оптика атмосферы и океана. – 2012. – Т. 25, № 1. – С. 87–93.
10. Непараметрические математические методы восстановления общего содержания CO_2 из данных спутникового мониторинга / М.Ю. Катаев, С.Г. Катаев, А.Г. Андреев и др. // Доклады ТУСУРа. – 2011. – Т. 2, № 3. – Ч. 24. – С. 181–186.
11. Математические алгоритмы обработки и анализа данных Фурье-спектрометра в ближней ИК-области спектра / М.Ю. Катаев, С.Г. Катаев, Ш. Максюттов и др. // Изв. высш. учеб. завед. Физика. – 2012. – Т. 55, № 3. – С. 84–89.
12. Катаев М.Ю. Восстановление общего содержания углекислого газа / М.Ю. Катаев, А.К. Лукьянов // Доклады ТУСУРа. – 2014. – Т. 1, № 2. – Ч. 32. – С. 230–237.

Катаев Михаил Юрьевич

Д-р техн. наук, профессор каф. автоматизированных систем управления (АСУ) ТУСУРа, профессор Юргинского технологического института (филиала) Национального исследовательского Томского политехнического университета
Тел.: 8-960-975-2785, (382-2) 70-15-36
Эл. почта: kataev.m@sibmail.com

Лукьянов Андрей Кириллович

Канд. техн. наук, ассистент каф. автоматизированных систем управления (АСУ) ТУСУРа
Тел.: (382-2) 70-15-36
Эл. почта: hyena116@mail.ru

Shamil Maksyutov

Ph.D. Center for Global Environmental Research,
National Institute for Environmental Studies, Tsukuba, Japan
<http://www.cger.nies.go.jp/en/people/maksyutov/>

Kataev M.Yu., Lukyanov A.K., Maksyutov S.
Modified method of empirical orthogonal functions to retrieve the total amount of carbon dioxide from satellite data

We consider a modification of empirical orthogonal functions (EOF) method to solve the problem of recovery of the total amount of carbon dioxide based on the real data measurements obtained from satellite device GOSAT. The modification consists in taking into account the singular value decomposition of not only the matrix of the measured signals (the basic approach), but also of the matrix total carbon dioxide content (option). The processing results obtained with primary and modified method of empirical orthogonal functions when measuring satellite spectra reflected from the surface of solar radiation in the near infrared spectrum region are shown. Geographic location of the data received from satellite is associated with the station Lamont belonging to TCCON network of ground-based measurements of the CO_2 total content.

Keywords: atmosphere, gas composition, remote satellite sensing, reflected surface solar radiation, Fourier-spectrometer, empirical orthogonal functions.