

唐红祥,花梦颖,廖瑶,等. FY-3B TOU 臭氧总量多元回归插值与验证[J]. 中低纬山地气象, 2023, 47(2): 18-23.

FY-3B TOU 臭氧总量多元回归插值与验证

唐红祥¹, 花梦颖², 廖瑶¹, 胡锋¹, 黄林峰¹

(1. 贵州省生态气象和卫星遥感中心, 贵州 贵阳 550002; 2. 贵州食品工程职业学院, 贵州 贵阳 551499)

摘 要: FY-3B TOU 臭氧总量产品空间分辨率为 50 km, 在开展小区域或精细化的臭氧研究时, 需要获得更高分辨率、更具有准确性和可靠性的臭氧插值数据。常规的数据插值方法没有考虑 TOU 臭氧总量受短波辐射、海拔高度的影响, 所得到的插值数据参考性不强。该文利用 TOU 多元回归插值方法, 采用程序设计方式, 动态分析 TOU 与短波辐射、海拔高度之间的相关性, 建立一元回归模型, 并根据一元回归模型结构建立多元回归模型, 再通过多元回归模型对 TOU 进行插值。使用 OMI 臭氧总量数据对插值结果开展验证, 验证结果表明采用多元回归算法的插值具有较好的可行性。该插值方法及程序设计对其他类似的数据插值、分析具有一定的借鉴和参考意义。

关键词: 臭氧总量; 短波辐射; 高程; OMI; 多元回归模型; 插值

中图分类号: X87; TP311.1 **文献标识码:** A

Multivariate Regression Interpolation and Verification of FY-3B TOU Total Ozone

TANG Hongxiang¹, HUA Mengying², LIAO Yao¹, HU Feng¹, HUANG Linfeng¹

(1. Guizhou Provincial Center for Ecological Meteorology and Satellite Remote Sensing, Guiyang 550002, China;
2. Guizhou Food Engineering Vocational College, Guiyang 551499, China)

Abstract: The spatial resolution of FY-3B TOU total ozone product is 50 km, and it is necessary to obtain high-resolution, more accuracy and reliability total ozone interpolation data, when carrying out small area or refined ozone studies. Conventional data interpolation methods do not consider the influence of short wave radiation and altitude on the total ozone amount of TOU, and the interpolation data obtained are not highly referential. This paper utilizes the multiple regression interpolation method of TOU, adopts the programming approach to dynamically analyze the correlation between TOU and shortwave radiation, altitude, establish a single regression model, establish a multiple regression model according to the structure of the single regression model, and then interpolate TOU through the multiple regression model. The OMI ozone total data was used to verify the interpolation results, and the verification results show that the interpolation using multiple regression algorithm was feasible. The interpolation method and program design have certain reference significance for other similar data interpolation and analysis.

Key words: total ozone; shortwave radiation; elevation; OMI; multiple regression model; interpolation

收稿日期: 2022-06-20

第一作者简介: 唐红祥(1981—), 男, 高工, 主要从事遥感数据处理与分析应用气象服务工作, E-mail: 353167931@qq.com。

通讯作者简介: 花梦颖(1987—), 女, 工程师, 主要从事物流管理、数学模型应用工作, E-mail: 710544952@qq.com。

资助项目: 风云三号 03 批气象卫星工程地面应用系统 2021 年区域特色应用项目(FY-3(03)-AS-12.13); 山地生态气象遥感应用系统。

0 引用

臭氧是大气中的重要微量气体,是影响对流层与平流层大气运动的重要成分之一。臭氧总量指地面上 1 个垂直大气柱中所包含的全部臭氧量,其常用单位是 DU (多布森单位),表示在规定大气的气压、温度所测量得到的 10 ~ 50 km 厚度纯臭氧的臭氧总量。

臭氧虽然在大气中的比例很小,但它是一种重要的温室气体,对全球气候和环境变化起着举足轻重的作用^[1-6]。大部分臭氧积聚在平流层,在紫外波段和可见光波段都有吸收带。因此,臭氧吸收紫外光和可见光,阻挡部分有害太阳辐射到达地面,被誉为地球生命体的保护伞。除此之外,由于平流层的主要热源是臭氧对太阳紫外辐射的吸收,所以平流层臭氧的浓度及其垂直分布会直接影响平流层温度的垂直分布,从而在区域以及全球的大气环流和气候形成中起到至关重要的作用。臭氧对一定范围内的红外波段具有较强吸收作用,它在地表浓度的增加会导致温室效应增强。研究臭氧的分布和变化,有利于人们了解全球气候与环境变化。

臭氧在大气中的作用比较复杂,局地气象条件对臭氧及其前体物的时间变化具有重要影响,而且不同地区不同时刻臭氧总量与近地面臭氧浓度的时空变化及其影响因素也存在很大差异。臭氧监测具有地基监测和卫星遥感监测 2 种方式。地基监测易受仪器状况、地形、天气等因素影响,而且监测范围小,无法对全球覆盖,存在一定局限性^[7]。卫星遥感监测具有空间时间连续性好、覆盖面积广、周期观测能力强等优势,且不受恶劣天气及地形条件的影响。因此,臭氧的卫星遥感监测已成为精准分析全球臭氧时空变化的重要手段。

2010 年 11 月 5 日我国自主研制的气象卫星风云三号 B 星(FY-3B)成功发射,FY-3B 所携带的紫外臭氧总量探测仪(Total Ozone Unit,简称 TOU)也是我国自主研制并专门用于获取大气臭氧总量产品的星载仪器^[8]。探测仪与美国 NOAA 卫星上的同类仪器在性能上基本相同,只是根据我国技术条件作了一些适应性修改。

FY-3B 的 TOU 臭氧总量日产品空间分辨率为 50 km,在进行小区域臭氧研究、分析和应用时,低分辨率数据显得较粗糙,需要对 50 km 分辨率的 TOU 产品进行插值,从而得到更高分辨率的臭氧产品。而常用的反距离插值、克里金插值法等只是用数据本身的统计算法来计算插值,没有考虑到臭氧受地面短波辐射、高程等实际变量的影响。为此,本文选择短波辐射、高程数据对 FY-3B TOU 进行插值算法研究,并使用程序开发快速实现算法结果,以及对算法结果的验证。

1 算法设计的总体流程

多项研究^[9-11]表明,臭氧浓度与太阳辐射之间存在显著正相关关系,太阳辐射和高温能促进光化学反应速率,有利于臭氧浓度的上升。地表短波辐射(也称为短波辐射)为到达地球表面水平面的太阳辐射量,代表当地太阳辐射的强弱。为得到更高分辨率下的臭氧总量分布,需要使用影响臭氧分布相关的地表短波辐射、高程与 TOU 拟合得到不同格点值,即为多元回归插值算法。算法的总体设计如图 1 所示。

在总体设计流程中,主要分为 4 个阶段,分别为:数据处理、一元回归模型建立、多元回归模型建立、数据插值推算。

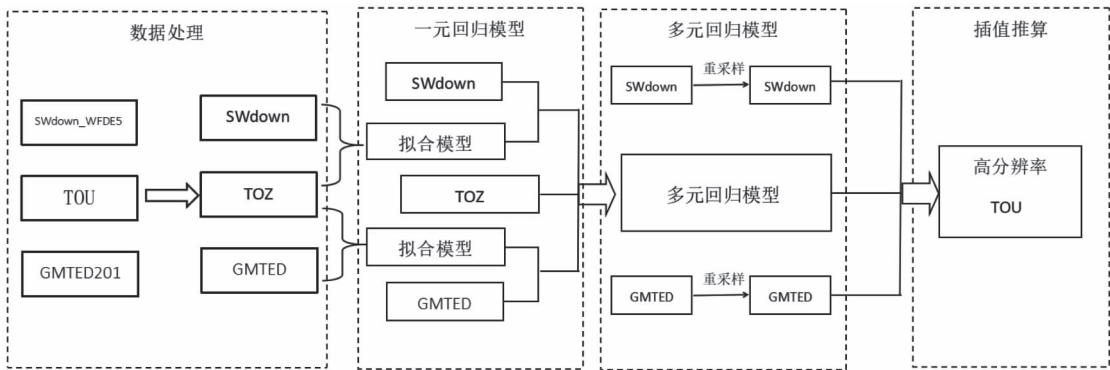


图 1 总体框图
Fig. 1 General block diagram

2 算法介绍

为更好地理解算法中的模型和插值过程,选取 2019 年 9 月 11 日 TOU、SWdown_WFDE5、GMTED2010 实验数据进行分析。

2.1 数据来源与处理

2.1.1 FY-3B TOU 紫外臭氧日总量产品资料
在国家卫星气象中心获取的 FY-3B TOU 臭氧总量日产品(全球等经纬度投影),空间分辨率为 50 km,存储格式是 HDF(Hierarchical Data Format)。

FY-3B TOU 是包含多个数据集结构的合成文件,其中臭氧总量数据集字段为 Total_Ozone(TOZ),通过程序单独读取 TOU 中的 TOZ 数据,为使数据通用和易读,将 TOZ 数据转换为 GeoTIFF 格式。因产品数据范围是全球范围,为减少分析和运算时间,本文选取贵州省行政区域为研究范围,将 TOZ 数据按贵州省边界的矩形区域裁剪。

2.1.2 SWdown_WFDE5 地表短波辐射产品资料
ERA5 是欧洲中期天气预报中心(ECMWF)对全球气候的第五代大气再分析数据。从 ECMWF 官网上获取 SWdown_WFDE5 地表短波辐射产品资料(以下简称 SWdown),空间分辨率有 50 km 和 10 km,存储格式为 nc。

从 ERA5 下载的 SWdown_WFDE5 有日值、月值、年值数据,地面短波辐射数据集字段是 SWdown,在 SWdown 数据集中每小时的数据存储是以 1 个波段来表示,日合计数据就是对应日期的 24 个波段之和,并按区域裁剪为 GeoTIFF 格式数据。

2.1.3 GMTED2010 全球大陆范围内高程数据集
该数据是由美国地质调查局和 NGA(国家地理空间情报局)合作开发显著增强的全球高程模型。本文使用的数据空间分辨率为 0.1 km,存储格式为 jp2。

同样将 GMTED2010 转换为 GeoTIFF 格式(以下称 GMTED),为与 TOZ 和 SWdown 分辨率保持一致,GMTED 重采样为 50 km 的分辨率,裁剪出贵州范围的数据。

2.2 一元回归模型建立

2.2.1 一元回归建模流程
为确定 TOZ 与 SWdown、GMTED 相互间的依赖关系,使用回归方法分别分析 SWdown 与 TOZ、GMTED 与 TOZ 之间的相关性,通过计算和选取决定系数(R^2)最优的拟合模型,分别建立 SWdown 与 TOZ、GMTED 与 TOZ 的一元回归模型。

在计算 TOZ 与 SWdown、GMTED 的拟合模型时,选择常用的线性、多项式、指数、对数、幂函数 5

种模型,以 TOZ 作为因变量,SWdown、GMTED 分别作为自变量,计算和选取 5 种拟合中 R^2 最优的模型方程作为多元回归模型的基本结构。

2.2.2 实验数据的一元回归模型
通过对实验数据中的 SWdown 与 TOZ、GMTED 与 TOZ 分别采用 5 种拟合方法分析(SWdown、GMTED、TOZ 均为 108 个实测样本数)计算 R^2 ,选取最大 R^2 对应的拟合方程和系数(所有数据采用 7 位有效数字),根据方程结构推导其一元回归模型。

(1)SWdown 与 TOZ 最大 R^2 为 0.52116697,对应的是多项式拟合,拟合方程为:

$$y_1 = 307.6395414 - 4.3298444 \times 10^{-4} x_1 - 6.262636 \times 10^{-7} x_1^2$$

一元回归模型结构为:

$$y_1 = a_1 + b_1 x_1 + c_1 x_1^2 \quad (1)$$

(2)GMTED 与 TOZ 最大 R^2 为 0.1923599,对应的是多项式拟合,拟合方程为:

$$y_2 = 314.4799199 - 2.1358491 \times 10^{-4} x_2 - 1.4926284 \times 10^{-6} x_2^2$$

一元回归模型结构为:

$$y_2 = a_2 + b_2 x_2 + c_2 x_2^2 \quad (2)$$

式(1)、(2)中, x_1 为地表短波辐射, x_2 为陆地数字高程, y_1 、 y_2 为臭氧日总量值, a_1 、 a_2 为常数, b_1 、 b_2 为一次项拟合系数, c_1 、 c_2 为二次项拟合系数。

2.3 多元回归模型建立

2.3.1 多元回归建模流程
在插值计算不同格点臭氧值时,因其与短波辐射和海拔高度存在密切关系,所以采用多元回归方法建立模型方程。将 SWdown、GMTED 按照其对应的一元回归方程结构作为自变量,TOZ 作为因变量再次进行多元回归分析,通过分析结果中的系数、截距以及方程结构建立多元回归模型。

2.3.2 实验数据的多元回归模型
通过 SWdown、GMTED 作为自变量分别带入一元回归模型(1)、(2),TOZ 作为因变量建立多元回归模型方程(取 7 位有效数字):

$$y = 306.9328584 + 1.7770286 \times 10^{-3} x_1 - 1.708014 \times 10^{-6} x_1^2 + 9.5996684 \times 10^{-4} x_2 + 3.3445973 \times 10^{-7} x_2^2 \quad (3)$$

式中,306.9328584 为截距, x_1 表示 SWdown 值, x_2 表示 GMTED 值。

2.4 数据插值

为将分辨率为 50 km 的 TOZ 插值到更高分辨率网格上,需要将 GMTED、SWdown 与 TOZ 目标值保持相同的分辨率,对 GMTED、SWdown 重采样后,

再把 GMTED、SW_{down} 数值带入多元回归模型,即可插值得到较高分辨率的 TOZ 格点值。

3 多元回归插值算法验证与分析

3.1 验证数据选取

FY-3B TOU 反演臭氧总量的算法是基于通道而开发的,其工作原理与 TOMS V8.0 相类似^[12]。本文验证数据采用 Aura-OMI 臭氧总量数据,它是来源于国际同期在轨的 EOS-Aura 卫星上的 OMI 传感器,Aura-OMI 的 OMT03e 是目前常用的卫星臭氧产品,该产品的反演算法以 TOMS V8.0 为基础,因此选择与 FY-3B TOU 反演算法相似的 OMT03e 臭氧总量产品对插值后的 TOU 进行验证具有较好的可比性。本文使用的 OMT03e 产品从 EarthData 官网 (<https://earthdata.nasa.gov/>) 上免费下载

载,单位 DU,空间分辨率 25 km,存储格式为 HDF-EOS5。

为更好地验证插值算法的可靠性,验证资料的选取考虑了不同年份的不同季节,选取 2017 年 4 月 26 日、2018 年 10 月 19 日、2019 年 9 月 11 日的 TOZ 插值数据与 OMT03e 进行验证。

图 2 是 TOZ 多元回归插值前后对比图,从图中可以看出,插值前后臭氧浓度分布存在一定的差异变化。存在这种差异的原因是多元回归插值是以地面短波辐射和数字高程为变量,而地面短波辐射在纬度上有较为明显的变化,并受山脉、地形、云量等因素影响^[13]。从 50 km 到 25 km 的区域,数字高程和短波辐射变化很大,因此,插值得到的臭氧浓度分布必然存在差异。

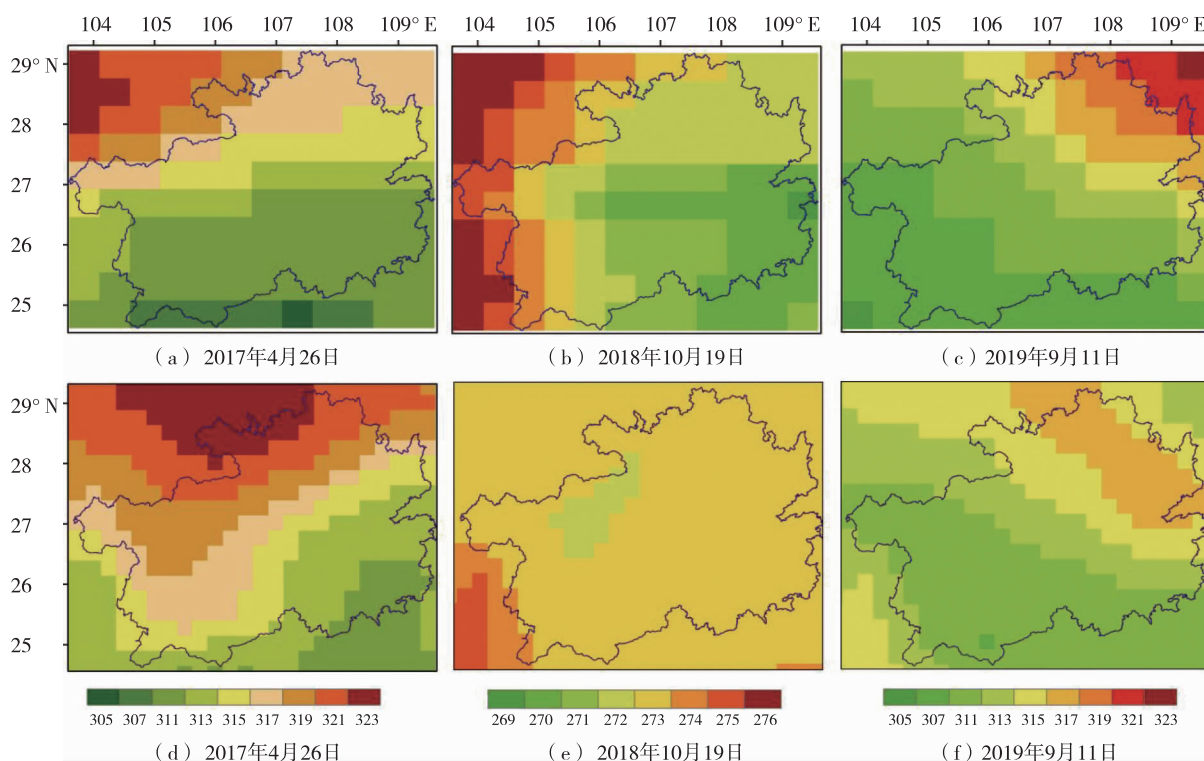


图2 TOZ 臭氧柱日总量浓度插值前(a~c,分辨率 50 km)后(d~f,分辨率 25 km)对比图

Fig.2 Comparison of TOZ ozone column daily total concentration before (a~c, resolution 50 km) and after (d~f, resolution 25 km) interpolation

图 3 为 OMT03e 的 3 次臭氧总量分布图,从分布图来看,OMT03e 与 TOZ 在数值范围和分布特征上都存在差异。因此,只有采用 OMT03e 与 TOZ 偏差分析才能更好地验证插值方法的可靠性。

3.2 验证方法

将 TOZ 经过多元回归法插值为 25 km 分辨率(用 TOZ_{25km} 表示),通过计算 TOZ_{25 km} 与 OMI 在对应网格点值的相对偏差(Relative Difference,简称

RD)来表征 TOZ_{25 km} 的数据精度水平,进而分析 TOZ_{25 km} 臭氧总量插值产品的可靠性。

相对偏差 RD 的计算公式如下:

$$RD_i = \frac{TOZ_{25\text{ km}_i} - OMI_i}{OMI_i} \times 100\%$$

式中, $TOZ_{25\text{ km}_i}$ 为 TOZ 臭氧总量值的 25 km 插值, OMI_i 表示 Aura-OMI 卫星臭氧总量产品 OMT03e 值。

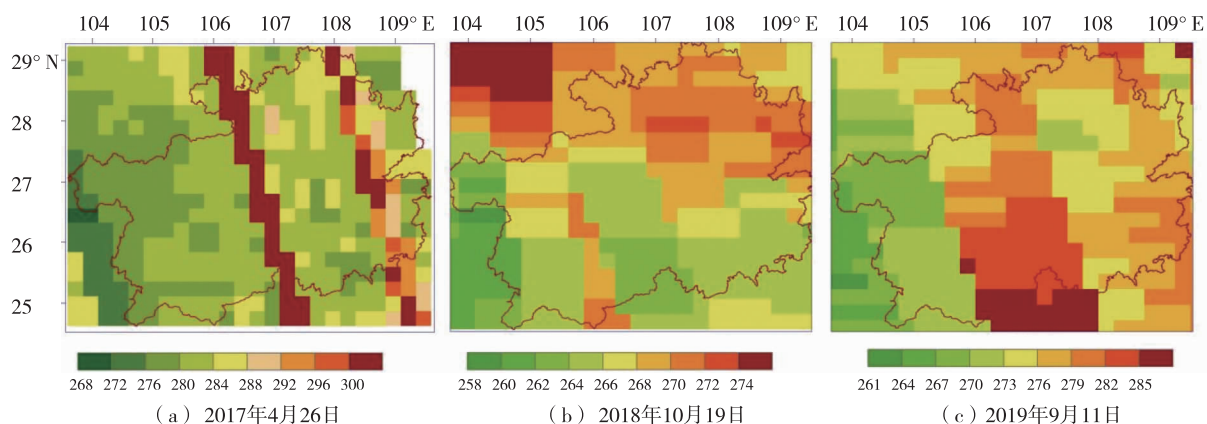


图 3 OMT03e 臭氧柱日总量浓度分布图

Fig. 3 Distribution of daily total concentration of OMT03e ozone column

3.3 验证结果与分析

为验证多元回归插值方法,将 TOZ 插值前和插值后的值分别与 OMT03e 进行 RD 分析,比较 RD 的变化进而判断插值方法的可靠性。

3.3.1 插值前 TOZ 相对偏差分析 由于插值前的 TOZ 分辨率为 50 km,需将分辨率为 25 km 的 OMT03e 重采样为 50 km 的分辨率(OMT03e_50 km),通过计算 RD,利用色标图形式填充到区域地图上,直观展现 TOZ 与 OMT03e_50 km 相对偏差空间分

布特征(图 4a~4c)。

根据分析,RD 的分布情况如下:图 4a 集中在 9%~15%之间,平均值 11.783%;图 4b 集中在 1%~4%之间,平均值 2.535%;图 4c 集中在 11%~17%之间,平均值 14.22%。

3.3.2 插值后 TOZ_25 km 相对偏差分析 通过计算 TOZ_25km 与 OMT03e 的相对偏差值,以相同图例绘制 TOZ_25km 与 OMI 臭氧总量 RD 空间分布特征(图 4d~4f)。

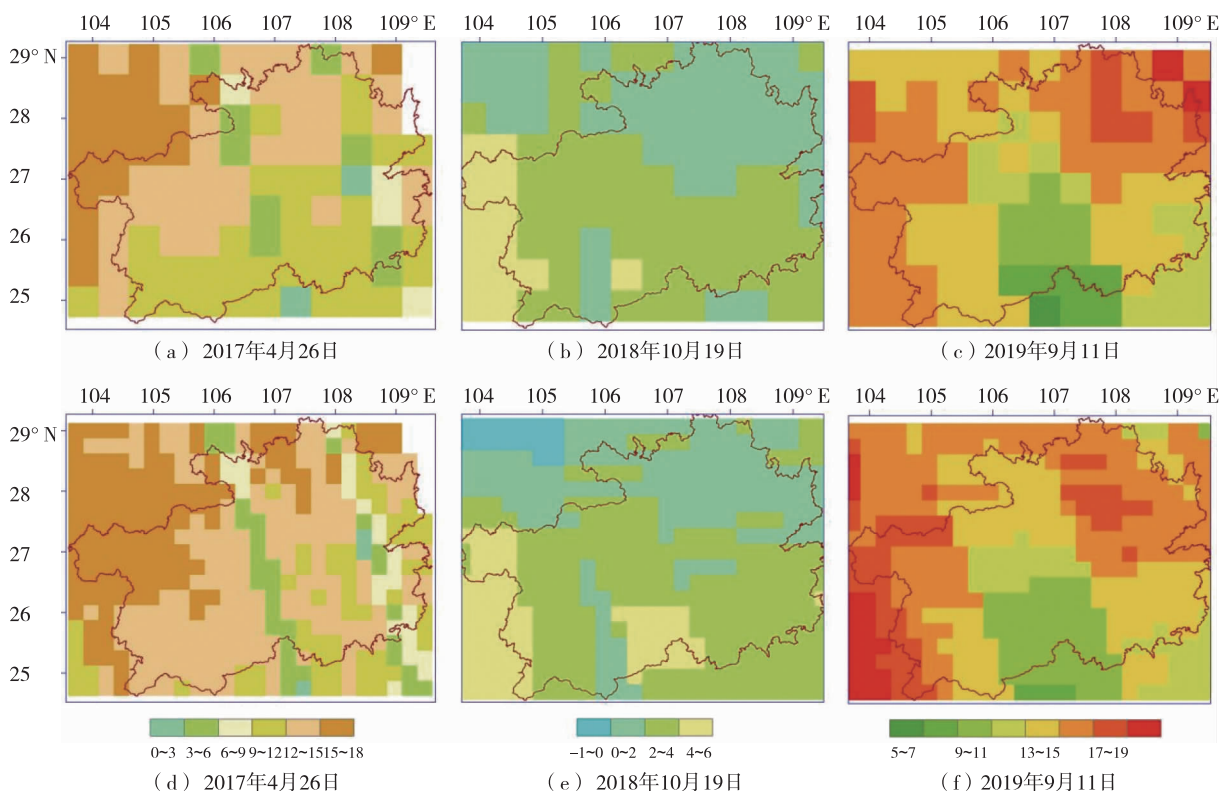


图 4 TOZ(a~c)与 OMT03e(d~f)臭氧总量 RD 空间分布图(单位:%)

Fig. 4 Spatial distribution of total ozone RD between TOZ(a~c) and OMT03e(d~f)(unit:%)

从图 4d~4f 中对 RD 分析可知:图 4d 大部分集中在 9%~16% 之间,平均值 12.856%;图 4e 集中在 1%~4%,平均值 2.646%;图 4f 集中在 11%~17% 范围,平均值 14.655%。TOZ_{25km} 与 OM-TO3e 的 3 次验证数据相对偏差值表明,TOZ 多项式插值与 OMI 臭氧总量较为吻合,这与钟美等^[7]的研究结果相近。

图 4 展示了 3 次验证数据在插值前后的 RD 空间分布特征的对比,从图和数据分析来看,插值前后的 RD 变化和分布较为一致,平均值接近,充分说明多元回归插值方法具有较好的可靠性。

4 总结

本文通过 FY-3B TOU 臭氧总量与短波辐射、数字高程之间的关系动态建立一元回归、多元回归模型,再通过多元回归模型对 TOU 臭氧总量进行高分辨率插值,并对插值数据开展验证。验证结果表明,多元回归插值方法具有较好的可用性。算法分步阐述,并采用实验数据逐步计算分析,使读者更加理解算法过程。同时,算法采用程序设计完成,解决了人工无法完成的计算过程。插值方法考虑了要素间的相互影响和相关性,为类似的数据插值算法提供参考和借鉴。

参考文献

[1] 秦大河. 大气臭氧层和臭氧洞[M]. 北京:气象出版社,2003.

(上接第 9 页)

- [8] 李长吉,沈鹰. 云南省污染气候区划[J]. 环境科学研究,1993,6(5):23-28.
- [9] 李浪,白慧,方荻,等. 贵州省空气污染过程的大气环流特征及分型研究[J]. 中低纬山地气象,2021,45(5):34-41.
- [10] 张人禾,李强,张若楠. 2013 年 1 月中国东部持续性强雾霾天气产生的气象条件分析[J]. 中国科学·地球科学,2014,44(1):31-40.
- [11] 蒋婉婷,谢汶静,王碧菡,等. 2014-2016 年四川盆地重污染大气环流形势特征分析[J]. 环境科学学报,2019,39(1):180-188.
- [12] 吴润,蒋维楣,陈新梅,等. 生物质燃烧对东南亚及中国南方对流层臭氧含量影响的模拟研究[J]. 环境科学,2004,25(2):1-6.
- [13] 何宇凡. 红河州近年来环境空气质量状况分析[J]. 环境科学导刊,2021,40(6):42-45.
- [14] 王健,邱飞,向峰,等. 景洪市环境空气质量状况及污染特征分析[J]. 环境科学导刊,2018,37(增刊):58-62.

- [2] 江芳. 紫外散射反演臭氧总量的若干问题研究[D]. 北京:中科院空间科学与应用研究中心,2007.
- [3] 李辉. 用卫星资料反演臭氧总量的研究[D]. 北京:中国气象科学研究院,2003.
- [4] 周秀骥. 中国地区大气臭氧变化及其对气候环境的影响(一)[M]. 北京:气象出版社,1996.
- [5] 郭世昌,琚建华,常有礼,等. 大气臭氧变化及其气候生态效应[M]. 北京:气象出版社,2002.
- [6] 潘亮. 利用卫星资料反演臭氧含量及进行气溶胶分类[D]. 南京:南京信息工程大学,2007.
- [7] 钟美,皮波,余勇,等. FY-3B TOU 与 Aura OMI 卫星臭氧总量产品的比对分析[J]. 气象研究与应用,2021,42(2):31-32.
- [8] 杨忠东,卢乃锰,施进明,等. 风云三号卫星有效载荷与地面应用系统概述[J]. 气象科技进展,2013,3(4):6-12.
- [9] 宋佳颖,刘旻霞,孙瑞弟,等. 基于 OMI 数据的东南沿海大气臭氧浓度时空分布特征研究[J]. 环境科学学报,2020,40(2):438-449.
- [10] 卫佩茹,邵天杰,黄小刚,等. 2015—2018 年东北地区臭氧浓度时空变化特征及其驱动因素研究[J]. 生态与农村环境学报,2020,36(8):988-997.
- [11] 杨春燕,陈圣波,汪自军. 大气辐射在臭氧反演中的应用[J]. 安徽农业科学,2010,38(6):3306-3307.
- [12] WANG W H, FLYNN L, ZHANG X Y, et al. Cross-Calibration of the Total Ozone Unit(TOU) with the Ozone Monitoring Instrument(OMI) and SBUV/2 for environmental applications[J]. Advance in Meteorological Science and Technology,2013,3(4):97-107.
- [13] 段果,钟若媚. 2007—2014 年中国区域地表辐射特征研究[J]. 气候变化研究快报,2020,9(4):285-298.

- [15] 王占良,段燕楠,杨健. 昆明低空大气温度层结特征与空气质量的 Logistic 判别模型[J]. 环境科学导刊,2019,38(6):1-7.
- [16] 杨家康,单韬,张万诚. 云南低纬高原地区大气污染与逆温强度关系研究[J]. 灾害学,2021,36(4):27-53.
- [17] 字冉,孔震,明蕊,等. 2020 年西双版纳持续重霾天气成因和来源分析[J]. 中低纬山地气象,2022,46(5):10-18.
- [18] 王宇. 云南农业气候图集[M]. 北京:气象出版社,1990:117-120.
- [19] 郑国光,矫梅燕,丁一汇,等. 中国气候[M]. 北京:气象出版社,2019:46-50.
- [20] 朱勇,王学锋,范立张,等. 云南省风能资源及其开发利用[M]. 北京:气象出版社,2013:17-30.
- [21] 段长春,陶云. 1961-2008 年云南平均风速的时空变化特征[J]. 云南气象,2013,33(3):7-13.
- [22] 段玮,万石云,段旭. 昆明坝子边界层贴地逆温特征及其成因[J]. 云南地理环境研究,2014,26(4):1-6.