

Применение эмпирических ортогональных функций при спутниковом мониторинге верхнего слоя морской воды

Г. С. Моисеенко, С. Д. Левашов

*Всероссийский научно-исследовательский институт
рыбного хозяйства и океанографии, Москва, 107140, Россия
E-mail: georgiy-moiseenko@yandex.ru*

Алгоритмы обработки данных спутниковых спектрорадиометров, связывающие величины измеряемых *in situ* параметров морской воды со значениями измеренных спектрорадиометром спектров коэффициента яркости, в основном используют коэффициенты яркости для двух, трёх или четырёх длин волн, а информация других спектральных каналов остаётся, по сути, не востребованной. В качестве одного из возможных подходов, позволяющих использовать в анализе данных весь измеренный спектр, предлагается метод эмпирических ортогональных функций. В этом случае для построения регрессионных соотношений вместо коэффициентов яркости для отдельных длин волн используются коэффициенты разложения спектров в ряд по эмпирическим ортогональным функциям. Следует отметить, что ранее в ряде работ использовались эмпирические ортогональные функции для решения задач дистанционного зондирования моря, однако расчёты функций проводились на ограниченном наборе спектров, и поэтому они были применимы для исследования только тех данных, на основе которых были получены. Отличие предлагаемого подхода состоит в том, что для расчёта ковариационной матрицы и, соответственно, эмпирических ортогональных функций предлагается использовать годовые массивы спектров коэффициента яркости для всего Мирового океана. В качестве примера представлено применение полученных эмпирических ортогональных функций для оценки концентрации неорганического углерода при цветении кокколитофорид.

Ключевые слова: коэффициент яркости, эмпирические ортогональные функции, дистанционное зондирование, океан, метод, спутник, кокколитофориды

Одобрена к печати: 12.12.2019

DOI: 10.21046/2070-7401-2020-17-1-42-49

Введение

Применяемые на практике методы восстановления параметров верхнего слоя морской воды по спутниковым измерениям в большинстве своём основаны на регрессионных соотношениях, связывающих отношения яркостей, измеренных в узких спектральных диапазонах, с концентрацией изучаемого параметра (Clark, 1997).

Спутниковые методы определения примесей в морской воде непрерывно совершенствуются благодаря улучшению алгоритмов атмосферной коррекции и восстановления оптических характеристик по измерениям спектральной яркости. В последнее время разрабатываются локальные алгоритмы, учитывающие региональную специфику, что позволяет уменьшить ошибки восстановления концентрации хлорофилла и взвеси в морской воде (Korelevich et al., 2011). Это особенно актуально для окраинных и внутренних морей и на шельфе, а также в районах, подверженных влиянию речных стоков.

Наряду с использованием соотношений спектральных яркостей для отдельных длин волн в ряде работ применяется так называемый метод анализа главных компонент, или метод эмпирических ортогональных функций (ЭОФ) (Обухов, 1960), для анализа всего измеряемого участка видимого спектра (Doerffer, 1981; Gower et al., 1984; Mueller, 1976). Суть метода состоит в представлении каждого измеренного спектра в виде вектора в многомерном пространстве с использованием в качестве базиса эмпирических ортогональных функций. Оптимальный в смысле минимума среднеквадратического отклонения набор функций представляет собой наиболее значимые собственные векторы ковариационной матрицы измеренных спектров коэффициента яркости излучения, выходящего из водной толщи. При этом для

приемлемого описания измеренных спектров в большинстве случаев достаточно использовать несколько первых собственных векторов. Общий подход к задаче отыскания «оптимальных разложений», т.е. определения базиса эмпирических ортогональных функций, изложен в работе (Обухов, 1960) на основе общей теории случайных функций.

Разложения эмпирически определяемых функций по некоторому базису ортогональных функций достаточно широко используются при решении задач геофизики, оптики атмосферы и океана и в других областях науки и техники. В частности, в работе (Багров, 1959) содержится описание метода «естественных разложений» метеорологических полей и применение этого метода к задаче о типизации аномалий барического поля. Универсальная система собственных функций получена в работах (Копелевич и др., 1975, 1978) для аппроксимации индикатрис рассеяния света морской водой. Эмпирические ортогональные функции использовались для решения задач дистанционного зондирования моря при обработке спектров плотности энергетической яркости, измеренных видеополяриметром «Трассер», установленном на борту самолёта-лаборатории Ил-18 ДОРР (самолёт дальнего обнаружения рыбных ресурсов) (Романов и др., 1992). Применение ЭОФ для оценок концентрации хлорофилла в прибрежных водах Новой Шотландии (Craig et al., 2012) показало возможности метода при исследовании сложных с оптической точки зрения морских вод.

Следует отметить, что эмпирические ортогональные функции, использовавшиеся до настоящего времени при анализе спектров коэффициента яркости, являлись локальными и были применимы для исследования ограниченных наборов данных, на основе которых сами функции были получены. Вместе с тем для анализа оптических явлений в верхнем слое морской воды, сопоставления этих явлений вне зависимости от акватории и временных интервалов требуется более универсальная система эмпирических ортогональных функций.

Целью настоящей работы является получение эмпирических ортогональных функций, максимально учитывающих изменчивость спектров коэффициента яркости выходящего из воды излучения. Представленный набор ЭОФ может в некоторой степени претендовать на универсальность, так как для расчёта функций использовался массив спутниковых данных за один календарный год по всему Мировому океану.

Материалы и методика

Для расчёта эмпирических ортогональных функций спектров коэффициента яркости излучения, выходящего из водной толщи, использовались данные спектрорадиометра MODIS спутника Aqua уровня обработки L1b, полученные с серверов Национального агентства по исследованию атмосферы и космического пространства США (<https://ladsweb.modaps.eosds.nasa.gov>). Массив данных содержал информацию за 2014 г. по всему Мировому океану. Спектры коэффициента яркости рассчитывались для одиннадцати длин волн (412 нм, 443, 469, 488, 531, 547, 555, 645, 667, 678 и 748 нм). Пространственное разрешение составляло 1 км. Принципиальным является включение в расчёты длины волны 748 нм, так как для вод типа 2, к которым в том числе принадлежат воды большинства окраинных морей России, значения коэффициента яркости для этой длины волны во многих случаях не равны нулю. В стандартных продуктах уровня L2 этот параметр отсутствует, поэтому для получения полных спектров приходилось в качестве исходных использовать данные уровня L1b. Затем с помощью утилит пакета программ SeaDAS проводился расчёт продуктов уровня L2, из которых формировался исходный массив данных.

Обработка массива спектров коэффициента яркости проводилась аналогично алгоритму, описанному в работах (Обухов, 1960; Романов и др., 1992).

Из массива измерений $\mathbf{R}_k = \{R_k(\lambda_1), \dots, R_k(\lambda_r)\}$, где $k = 1, \dots, n$, $n \approx 12,3 \cdot 10^9$ — количество векторов (измеренных спектров коэффициента яркости), $r = 11$ — размерность векторов (количество длин волн), рассчитывался средний вектор $\bar{\mathbf{R}}$. Затем средний вектор вычитался из каждого измеренного вектора. Полученный в результате массив векторов $\hat{\mathbf{R}}_k = (\mathbf{R}_k - \bar{\mathbf{R}})$ использовался для расчёта ковариационной матрицы \mathbf{B} , её собственных векторов $\boldsymbol{\varphi}_i$ и собственных

чисел b_i . В силу произвольности нормировки собственных векторов выбиралась следующая связь между собственными числами и собственными векторами: $\boldsymbol{\varphi}_i \boldsymbol{\varphi}_i = b_i^2$. Следовательно, если расположить собственные числа в порядке убывания, то соответствующие им собственные векторы расположатся в порядке уменьшения их дисперсии.

Разложение векторов $\hat{\mathbf{R}}_k$ в ряд с использованием полученных собственных векторов ковариационной матрицы в качестве базиса является оптимальным с точки зрения минимума среднеквадратичной ошибки (Обухов, 1960).

При этом в силу того, что собственные векторы расположены в порядке убывания их дисперсии, первые несколько векторов описывают большую часть изменчивости измерений $\hat{\mathbf{R}}_k$. Поэтому при использовании в качестве ортогонального базиса $p \ll r$ первых собственных векторов получается следующая аппроксимация измеренных спектров:

$$\hat{\mathbf{R}}_k = \sum_{i=1}^p c_{ik} \boldsymbol{\varphi}_i,$$

которая описывает μ % суммарной дисперсии всей совокупности измерений $\hat{\mathbf{R}}_k$, где $k = 1, \dots, n$,

$$\mu = \frac{\sum_{i=1}^p b_i}{\text{tr} \mathbf{B}} \times 100\%,$$

где $\text{tr} \mathbf{B}$ — след ковариационной матрицы \mathbf{B} , т. е. сумма её диагональных элементов.

Результаты

На *рис. 1* представлен график зависимости величины суммарной дисперсии μ от количества собственных векторов рассчитанной ковариационной матрицы.

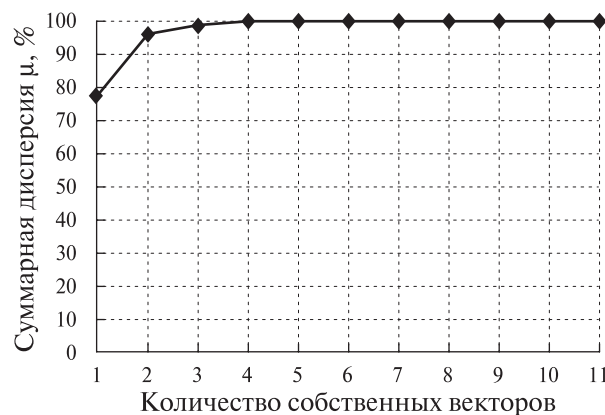


Рис. 1. Процент описываемой изменчивости в зависимости от количества собственных векторов

Первые пять векторов отвечают за 99,8 % совокупной изменчивости. Таким образом, в большинстве случаев можно ограничиться пятью эмпирическими ортогональными функциями (нормированными собственными векторами ковариационной матрицы) в качестве базиса пятимерного пространства для исследования свойств спектров коэффициента яркости.

Следует отметить, что, возможно, в некоторых случаях можно будет пренебречь влиянием пятого собственного вектора, отвечающего всего лишь за 0,3 % изменчивости. Значения первых пяти полученных эмпирических функций и среднего вектора приведены в *таблице*.

Значения среднего вектора и эмпирических ортогональных функций

Длина волны, нм	Средний вектор	Φ_1	Φ_2	Φ_3	Φ_4	Φ_5
412	0,01013	0,00510	0,00090	0,00062	0,00018	0,00014
443	0,00828	0,00367	0,00010	-0,00020	-0,00014	-0,00034
469	0,00668	0,00243	-0,00054	-0,00069	-0,00021	0,00015
488	0,00588	0,00178	-0,00097	-0,00053	0,00001	0,00010
531	0,00269	0,00046	-0,00168	0,00007	0,00023	0,00001
547	0,00210	0,00032	-0,00172	0,00019	0,00017	-0,00003
555	0,00184	0,00028	-0,00171	0,00022	0,00013	-0,00006
645	0,00037	0,00008	-0,00068	0,00035	-0,00036	0,00001
667	0,00028	0,00007	-0,00058	0,00030	-0,00035	0,00003
678	0,00033	0,00005	-0,00055	0,00030	-0,00034	0,00004
748	0,00005	0,00001	-0,00015	0,00011	-0,00018	0,00003

На рис. 2 приведены графики рассчитанного среднего вектора, а также первых пяти эмпирических ортогональных функций.

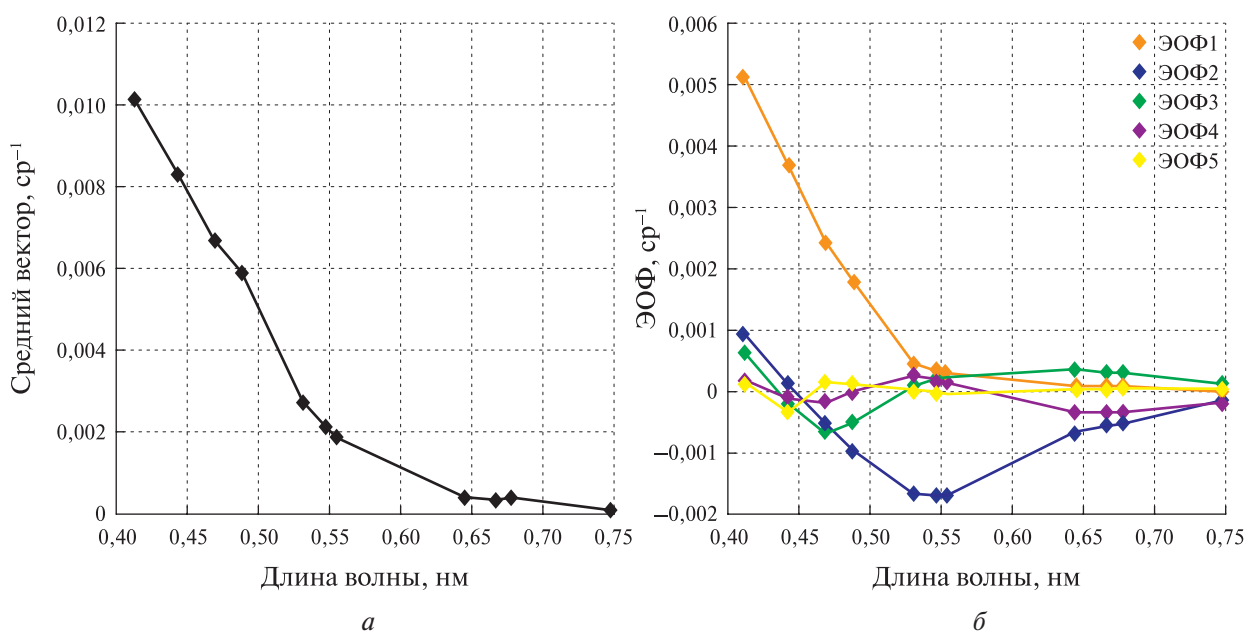


Рис. 2. Средний вектор (а) и первые пять эмпирических ортогональных функций (б)

Полученный набор эмпирических ортогональных функций можно использовать при выводе регрессионных соотношений для количественной оценки концентрации составляющих морской воды, например для оценки концентрации неорганического углерода в верхнем слое.

Оценка концентрации неорганического углерода в морской воде

Для оценки концентрации неорганического углерода в морской воде во время цветения кокколитофорид (в молях неорганического углерода в кубическом метре воды, моль/м³) была выбрана модель линейной регрессии: $PIС-EOF5 = f(c_1, c_2, c_3, c_4, c_5)$. В качестве данных для обучения и проверки качества модели использовались результаты расчётов концентрации

неорганического углерода (*англ.* particulate inorganic carbon, PIC) по модели PIC-CI (Mitchell et al., 2017), показавшей хорошие результаты для различных районов Мирового океана ($R^2 = 0,974$, $RMSE = 0,00031$ моль/м³). Массив данных состоял из значений концентрации, рассчитанных для четырёх фрагментов информации спектрорадиометра MODIS Aqua: A20121971105 (Чёрное море), A20142812340 (Берингово море), A20161880820 и A20182110810 (Баренцево море), в которых наблюдалось интенсивное цветение кокколитофорид. Для тех же фрагментов спутниковых данных были рассчитаны коэффициенты разложения спектров коэффициента яркости в ряд по эмпирическим ортогональным функциям c_j . Затем массив был разделён случайным образом на две части — обучающую и контрольную, каждая из которых содержала 197 696 точек.

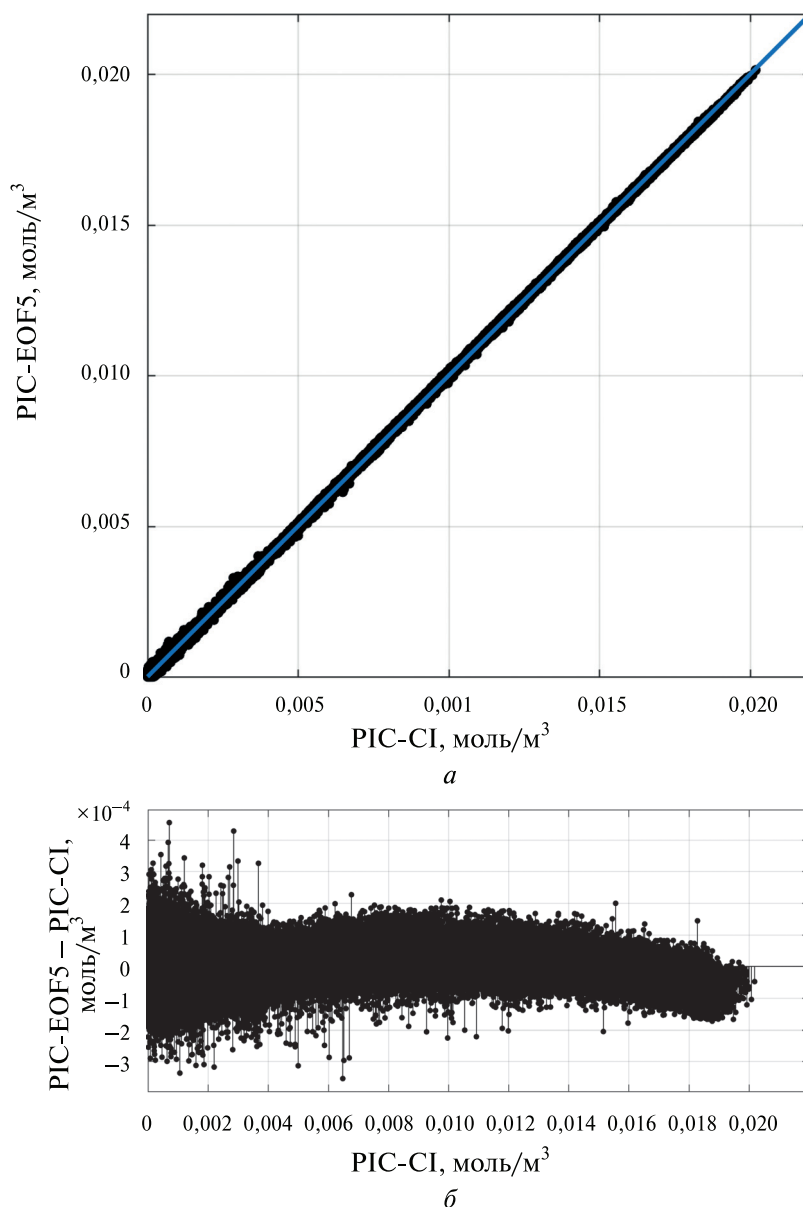


Рис. 3. Сравнение моделей PIC-EOF5 и PIC-CI (а) и распределение остатков PIC-EOF5 – PIC-CI (б) для контрольной выборки

С помощью обучающей выборки было получено следующее уравнение регрессии, связывающее концентрацию неорганического углерода (моль/м³) в верхнем слое морской воды с коэффициентами разложения спектров коэффициента яркости излучения в ряд по эм-

пирическим ортогональным функциям: $PIС-EOF5 = (18,46 + 7,66c_1 - 54,58c_2 - 4,20c_3 + 23,41c_4 - 6,09c_5) \times 10^{-5}$.

Значение коэффициента детерминации: $R^2 = 1$, стандартного отклонения: $RMSE = 3,2 \cdot 10^{-5}$ моль/м³. Эти параметры характеризуют отклонения оценок концентрации неорганического углерода, полученных с помощью модели PIС-EOF5, по сравнению с оценками, получаемыми с помощью модели PIС-CI.

На рис. 3 (см. с. 46) представлены графики, иллюстрирующие качество модели для контрольной выборки.

Таким образом, учитывая малые отклонения результатов расчётов по модели PIС-EOF5 от результатов модели PIС-CI, можно в первом приближении полагать, что точность оценки концентрации неорганического углерода по модели с использованием эмпирических ортогональных функций приблизительно равна точности модели PIС-CI, т.е. $RMSE = 0,00031$ моль/м³.

Заключение

В результате работы получен набор эмпирических ортогональных функций спектров коэффициента яркости излучения, выходящего из водной толщи, измеренных спектро радиометром MODIS Aqua в видимой области спектра. Полученный набор эмпирических ортогональных функций можно использовать при выводе регрессионных соотношений для количественной оценки концентрации составляющих морской воды.

В качестве примера применения показано использование эмпирических ортогональных функций для расчёта концентрации неорганического углерода во время цветения кокколитофорид в верхнем слое морской воды. Полученная линейная модель позволяет проводить мониторинг концентрации кокколитофорид с приемлемой точностью.

Литература

1. Багров Н.А. Аналитическое представление последовательности метеорологических полей посредством естественных ортогональных составляющих // Тр. Центрального ин-та прогнозов. 1959. Вып. 74. С. 3–24.
2. Копелевич О.В., Гуцин О.А. О статистической и физической моделях светорассеивающих свойств морской воды // Изв. Акад. наук СССР. Физика атмосферы и океана. 1978. Т. 14. № 9. С. 967–973.
3. Копелевич О.В., Буренков В.И., Гуцин О.А., Маштаков Ю.Л., Шматко М.А. Универсальная система функций для аппроксимации индикатрис рассеяния света морской воды // Изв. Акад. наук СССР. Физика атмосферы и океана. 1975. Т. 11. № 7. С. 770–773.
4. Обухов А.М. О статистически ортогональных разложениях эмпирических функций // Изв. Акад. наук СССР. Сер. геофиз. 1960. № 3. С. 432–439.
5. Романов А.А., Моисеенко Г.С., Кузнецов М.Б. Метод восстановления скорости приводного ветра по спектральным характеристикам восходящего излучения // Тр. НПО «Планета». 1992. № 41. С. 128–135.
6. Clark D.K. MODIS algorithm theoretical basis document. Bio-optical algorithms — case 1 waters. Version 1.2. National Oceanic and Atmospheric Administration National Environmental Satellite Service. Washington, D. C., 1997. 50 p.
7. Craig S.E., Jones C.T., Li W.K.W., Lazin G., Horne E., Caverhill C., Cullen J.J. Deriving optical metrics of coastal phytoplankton biomass from ocean colour // Remote Sensing of Environment. 2012. V. 119. P. 72–83.
8. Doerffer R. Factor analysis in ocean color interpretation // Oceanography from Space / ed. Gower J.F.R. N. Y.: Plenum, 1981. P. 339–345.
9. Gower J.F.R., Lin S., Borstad G.A. The information content of different optical spectral ranges for remote chlorophyll estimation in coastal waters // Intern. J. Remote Sensing. 1984. V. 5. No. 2. P. 349–364.
10. Kopelevich O.V., Burenkov V.I., Sheberstov S.V., Vazyulya S.V., Zavalov S.P. Bio-optical characteristics of the Russian Seas from satellite ocean color data of 1998–2010 // Proc. 6th Intern. Conf. “Current problems in Optics of Natural Waters (ONW 2011)”. St. Petersburg, Sept. 6–9, 2011. P. 181–182.

11. Mitchell C., Hu C., Bowler B., Drapeau D., Balch W.M. Estimating particulate inorganic carbon concentrations of the global ocean from ocean color measurements using a reflectance difference approach // J. Geophysical Research: Oceans. 2017. V. 122. DOI: 10.1002/2017JC013146.
12. Mueller J.L. Ocean color spectra measured off the Oregon coast: Characteristic vectors // Applied Optics. 1976. V. 15. P. 394–402.

Application of empirical orthogonal functions in satellite monitoring of the upper layer of sea water

G. S. Moiseenko, S. D. Levashov

Russian Federal Research Institute of Fisheries and Oceanography
Moscow 107140, Russia
E-mail: georgiy-moiseenko@yandex.ru

The data processing algorithms for satellite spectroradiometers that relate the *in situ* measured values of sea water parameters to the values of the remote sensing reflectance spectra measured by the spectroradiometer mainly use remote sensing reflectance for 2, 3, or 4 wavelengths, while the information from other spectral channels is, in fact, ignored. A statistical approach based on the empirical orthogonal functions analysis that uses the whole measured spectrum is proposed. In this case the regression equations, which connect the estimated parameters with coefficients of serial expansion for remote sensing reflectance on the basis of empirical orthogonal functions, are applied to retrieve sea water constituents. This method was used before in some studies for remote sensing data analysis. But the computations were made on a small set of data, the empirical orthogonal functions varied depending on the area of the research and the time interval when data were collected, and thus could not be applied for other datasets. The difference of the proposed approach is that to calculate the covariance matrix and, accordingly, empirical orthogonal functions, it is proposed to use annual arrays of remote sensing reflectance for the entire world ocean. As an example of application the use of computed empirical orthogonal functions for the estimation of particulate inorganic carbon concentrations during coccolithophores blooms is demonstrated.

Keywords: remote sensing reflectance, empirical orthogonal functions, remote sensing, ocean, method, satellite, coccolithophores

Accepted: 12.12.2019

DOI: 10.21046/2070-7401-2020-17-1-42-49

References

1. Bagrov N.A., Analiticheskoe predstavlenie posledovatel'nosti meteorologicheskikh polei posredstvom estestvennykh ortogonal'nykh sostavlyayushchikh (Analytical presentation of the sequence of meteorological fields through natural orthogonal components), *Trudy Tsentral'nogo instituta prognozov*, 1959, Issue 74, pp. 3–24.
2. Kopelevich O.V., Gushchin O.A., O statisticheskoi i fizicheskoi modelyakh svetorasseivayushchikh svoistv morskoi vody (On the statistical and physical models of the light-scattering properties of sea water), *Izvestiya AN SSSR, Fizika atmosfery i okeana*, 1978, Vol. 14, No. 9, pp. 967–973.
3. Kopelevich O.V., Burenkov V.I., Gushchin O.A., Mashtakov Yu.L., Shmatko M.A., Universal'naya sistema funktsii dlya approksimatsii indikatris rasseyaniya sveta morskoi vody (Universal system of functions for approximation of scattering function of light of sea water), *Izvestiya AN SSSR, Fizika atmosfery i okeana*, 1975, Vol. 11, No. 7, pp. 770–773.
4. Obukhov A.M., O statisticheski ortogonal'nykh razlozheniyakh empiricheskikh funktsii (On statistically orthogonal expansions of empirical functions), *Izvestiya AN SSSR, Ser. geofizicheskaya*, 1960, No. 3, pp. 432–439.
5. Romanov A.A., Moiseenko G.S., Kuznetsov M.B., Metod vosstanovleniya skorosti privodnogo vetra po spektral'nykh kharakteristikam voskhodyashchego izlucheniya (Method for reconstructing wind speed

- above the water surface from spectral characteristics of upwelling radiation), *Trudy NPO "Planeta"*, 1992, No. 41, pp. 128–135.
6. Clark D. K., *MODIS algorithm theoretical basis document. Bio-optical algorithms — case 1 waters, Version 1.2*, National Oceanic and Atmospheric Administration National Environmental Satellite Service, Washington, D. C., 1997, 50 p.
 7. Craig S. E., Jones C. T., Li W. K. W., Lazin G., Horne E., Caverhill C., Cullen J. J., Deriving optical metrics of coastal phytoplankton biomass from ocean colour, *Remote Sensing of Environment*, 2012, Vol. 119, pp. 72–83.
 8. Doerffer R., Factor analysis in ocean color interpretation, In: *Oceanography from Space*, Gower J. F. R. (ed.), New York: Plenum, 1981, pp. 339–345.
 9. Gower J. F. R., Lin S., Borstad G. A., The information content of different optical spectral ranges for remote chlorophyll estimation in coastal waters, *Intern. J. Remote Sensing*, 1984, Vol. 5, No. 2, pp. 349–364.
 10. Kopelevich O. V., Burenkov V. I., Sheberstov S. V., Vazyulya S. V., Zavialov S. P., Bio-optical characteristics of the Russian Seas from satellite ocean color data of 1998–2010, *Proc. Intern. Conf. "Current problems in Optics of Natural Waters (ONW 2011)"*, St. Petersburg, Sept. 6–9, 2011, pp. 181–182.
 11. Mitchell C., Hu C., Bowler B., Drapeau D., Balch W. M., Estimating particulate inorganic carbon concentrations of the global ocean from ocean color measurements using a reflectance difference approach, *J. Geophysical Research: Oceans*, 2017, Vol. 122, DOI: 10.1002/2017JC013146.
 12. Mueller J. L., Ocean color spectra measured off the Oregon coast: Characteristic vectors, *Applied Optics*, 1976, Vol. 15, pp. 394–402.