

多尺度耦合经验正交分解法反演海洋次表层温盐结构

张明琪^{1,3}, 徐永生^{2,3,4}, 杨树国¹

(1. 青岛科技大学, 山东 青岛 266061; 2. 中国科学院海洋研究所, 山东 青岛 266071; 3. 崂山实验室, 山东 青岛 266061; 4. 中国科学院大学, 北京 100094)

摘要: 针对提升利用卫星观测海面信息重构三维温盐场精度的问题, 本文提出了一种基于多尺度耦合正交分解的三维温盐场重构方法。该方法利用多尺度耦合正交分解对历史温盐剖面进行从大尺度到小尺度的迭代分解, 以分层提取不同尺度三维温盐场的特征信息, 然后分别建立海洋表面卫星观测与不同尺度的三维温盐场特征信息重构模型, 从而达到三维温盐场重构的目的。本文分别利用多尺度耦合正交分解法与单层正交分解法进行三维温盐场重构, 结果显示, 多尺度耦合正交分解法优于单层正交分解法, 且随着分解的层次不断细化, 重构温盐场的精度及其垂直梯度精度均呈现明显的提升, 其中组合 4 精度提升程度最高, 分别提升了 25.57% 和 27.58%; 同时, 对比 HYCOM 模式数据, 多尺度耦合正交分解重构方法能有效地捕捉次表层海洋的空间特征信息。总体上, 本文耦合经验正交分解法反演的温盐场与 Argo 温盐场偏差较小, 反演精度较好, 在空间分布上趋于一致。

关键词: 卫星观测; 多尺度耦合正交分解; 温盐梯度; 异常矩阵

中图分类号: P731 文献标识码: A 文章编号: 1000-3096(2024)3-0001-12

DOI: 10.11759/hyxx20221124003

卫星遥感凭借快速、高效获取地球表面大量实时观测数据的能力, 成为人类了解和认知地球的必要途径。目前, 中国遥感卫星已发展成为拥有气象、海洋等系列卫星的对地观测系统^[1-2]。海洋三维温盐场属于海洋核心动力要素, 精准描述海洋次表层温盐结构非常重要且富有挑战性。对于海洋内部现场的观测, 受多方面因素的限制, 数据往往稀疏和缺失。卫星遥感也无法直接探测海洋内部热力信息。然而经过多年的发展和观测, 遥感技术已经积累了庞大的海表面观测数据, 因此基于海表层卫星遥感观测间接推测海洋次表层温盐结构有非常重要的研究意义^[3]。

温度和盐度是海水的基本物理性质, 它们的分布表征海洋的动态过程, 并对生物地球化学循环具有重要的影响^[4-5]。近年来, 人们通过各种各样的方法不断地探索海洋次表面的温盐结构。海洋的次表层结构都会受到表层参数的影响, 并且可以借助卫星观测数据和数值模拟方法进行解释, 以得出深海温盐结构的关键参数^[6]。Khedouri 等^[7]通过卫星高度计数据来估算海洋次表层温度; Fischer^[8]基于多元投影法, 使用海表面高度异常(sea surface height anomaly, 简称 SSHA)和海表面温度异常(sea surface temperature

anomaly, 简称 SSTA)估计了赤道的垂直温度结构; Fox 等^[9]通过经验回归建立了海面高度与海面温度与次表面温盐的回归模型, 并且以此为基础构建了美国海军使用的 The Modular Ocean Data Assimilation System (MODAS)系统; 王喜东等^[10]根据 MODAS 系统统计出了海面温度异常、海面高度异常与温度剖面异常之间关系, 并利用卫星海表面温度和卫星海面高度重构了三维海洋温度场。此外还有很多基于统计回归的重构方法^[11-15], 这类方法利用卫星表面观测对海洋三维温盐场进行重构, 对温盐场有良好的描述能力, 但是缺乏温盐场垂直梯度的约束。除了回归方法外, Ali 等^[16]表明, 可以使用神经网络从表面参

收稿日期: 2022-11-24; 修回日期: 2023-02-16

基金项目: 崂山实验室科技创新项目(LSKJ202201406-2); NSFC-山东省联合基金项目(U1406401); 国家自然科学基金项目(41906027); 中国科学院战略性先导科技专项(XDB42000000)

[Foundation: Laoshan Laboratory science and technology innovation projects, No. LSKJ202201406-2; NSFC-Shandong Joint Fund Key Project, No. U1406401; National Natural Science Foundation of China, No. 41906027, Strategic Priority Research Program of the Chinese Academy of Sciences, No. XDB42000000]

作者简介: 张明琪(1998—), 男, 硕士研究生, 甘肃武威人, 主要从事海洋三维温盐场重构研究, E-mail: mingqi_zhang502@163.com; 徐永生(1970—), 山东青岛人, 通信作者, 研究员, 主要从事物理海洋、海洋遥感研究, E-mail: yongsheng.xu@qdio.ac.cn

数确定海洋次表层的温盐结构。Wu 等^[17]使用了多个卫星测量和一种名为自组织图(Self-Organizing Map, 简称 SOM)的神经网络算法,对海洋次表面的温盐结构进行了估算;Su 等^[18-19]采用支持向量机、随机森林等多种方法对全球海洋温盐场重构进行探索并取得较好的精度结果。此外,聂旺琛等^[20]利用广义回归神经网络算法重构了全球海洋三维温盐场。人工智能重构主要集中在大尺度温盐场重构上,然而对于小尺度的温盐场重构效能尚不明确。

本文提出一种基于多尺度耦合经验正交分解(Multi-scale coupled empirical orthogonal function, 简称 MCEOF)的三维温盐场多尺度重构方法,通过多层重构迭代的过程得到包含多尺度特征信息重构三维温盐场。该方法引入了多尺度重构的思想,从不同的空间尺度进行重构,提高了温盐场及其垂直梯度的重构精度。同时该温盐重构模型的构建,为高精度温盐场的重构方案给予了参考,也为进一步优化模型,比如增加海表面盐度、风场等约束条件来提高重构精度提供了思路。

1 数据

1.1 数据来源

本文使用的数据集有:1)卫星遥感海面温度数据(sea surface temperature, 简称 SST)和卫星海表面高度数据(sea surface height, 简称 SSH);2)历史观测温盐场数据;3)气候态数据。

文中选取的 SST 数据为 REMSS(Remote Sensing Systems)多源卫星融合 daily SST 产品(<https://data.remss.com/sst/daily/mw/v05.0/netcdf/>),其分辨率为 $0.25^\circ \times 0.25^\circ$ 。

卫星高度数据来自于 Aviso+提供的 $0.25^\circ \times 0.25^\circ$ 的网格化海面高度异常数据 daily SSH 产品(<https://cds.climate.copernicus.eu/cdsapp#!/dataset/satellite-sea-level-global?tab=form>),该数据融合了 TOPEX/POSEIDON、JASON 等卫星资料。

历史观测温盐场数据选取的是全球海洋 ARGO(array for real-time geostrophic oceanography)温盐数据(https://data-ARGO.ifremer.fr/geo/pacific_ocean/),包括从 2001—2020 年,研究区域内所有的温盐剖面。

气候态数据选取美国国家海洋数据中心提供的 WOA18(World Ocean Atlas 2018)温盐数据集(<https://www.ncei.noaa.gov/access/world-ocean-atlas-2018/>)。

1.2 数据处理

本文使用 ARGO 数据集对重构方法进行测试,选取的重建区域为 $143^\circ \sim 155^\circ \text{E}$, $28^\circ \sim 40^\circ \text{N}$ 的 $12^\circ \times 12^\circ$ 矩形区域,将所有的剖面数据随机打乱,随机选取 3/4 的温盐剖面建立重构模型,利用剩下 1/4 的数据剖面进行模型验证。

在建立模型前,需要对区域内的数据集进行严格的筛选和处理。本文只重构试验区域内 0~1 000 m 深度内的温盐剖面,以此来验证模型,所以要删除 1 000 m 以浅区域空值率大于 5%的温盐剖面,然后将温盐剖面用线性插值法插值为标准深度的剖面数据,本文选取的标准深度与 WOA18 气候态的标准深度保持一致。除此之外,删去温盐度数据变化不稳定的剖面。最后,将 SST、SSH 以及气候态数据根据时空位置与 ARGO 温盐剖面相匹配,总计得到约 21 000 条剖面,其中训练集数据约 15 000 条,测试集数据约 6 000 条。

2 方法

2.1 EOF 重构方法

经验正交分解(empirical orthogonal function, 简称 EOF)也叫做特征向量分析,它主要被用于分析矩阵数据中的特征,进而提取数据中的主要特征量。本文主要是利用 EOF 方法对三维温盐场的垂向模态进行提取,对于任意测试集的分析点,将其附近的历史温度和盐度的深度剖面组成一个新的耦合温盐剖面矩阵 X ,然后对矩阵 X 进行经验正交分解。

$$X = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & \cdots & T_{1i} & \cdots & T_{1N} \\ T_{21} & T_{22} & \cdots & T_{2i} & \cdots & T_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{k1} & T_{k2} & \cdots & T_{ki} & \cdots & T_{kN} \\ S_{11} & S_{12} & \cdots & S_{1i} & \cdots & S_{1N} \\ S_{21} & S_{22} & \cdots & S_{2i} & \cdots & S_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{k1} & S_{k2} & \cdots & S_{ki} & \cdots & S_{kN} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

式中 T_{ki} 为温度场, S_{ki} 为盐度场, k 表示深度层数。本文的深度按照 WOA18 气候态中的标准深度,将 0~1 000 m 分为 47 层, N 为分析点附近进行 EOF 分解的历史剖面总数。对矩阵 X 进行 EOF 分解,得到其主成分

$$P = E_{\text{EOF}}^T \cdot X. \quad (2)$$

分析前 m 个主成分与海面温度和海面高度的相关关系,并利用多元线性回归建立每个主成分与剖面的经度、纬度、海面温度和海面高度的回归关系:

$\hat{P}_i = b_1 + b_2 * L_{lon} + b_3 * L_{lat} + b_4 * S_{SST} + b_5 * S_{SSH}$, (3)
 式中 $i=1, 2, \dots, m$, 从而预测出测试集的前 m 个主成分 \hat{P} , 由

$$\hat{X} = E_{EOF} \cdot \hat{P}. \quad (4)$$

得到对应位置的重构温盐剖面。

2.2 多尺度耦合正交分解

考虑到固定尺度窗口的 EOF 分解得到的只是固定尺度的垂向温盐特征, 而对其他尺度的温盐信息捕捉能力较为缺乏, 为了提取不同尺度的三维温盐场信息, 本文提出了一种多尺度耦合正交分解 (MCEOF) 回归法来开展三维温盐场重构工作。

MCEOF 的主要思想是: 首先通过 EOF 分解, 利用前 m 个模态, 即在大尺度上温盐场的主要特征, 重构出依赖于前 m 个模态的训练集重构温盐场 X' ; 然后, 将观测温盐场与重构温盐场做差, 得到 $\Delta X = X - X'$, 该差值就是除去大尺度主要特征后温盐度的异常场, 再将 ΔX 均分为小区域, 在每块小区域内进行 EOF 重构, 提取除去主要特征后次要特征的主要模态, 通过不断地细分, 逐渐完善温盐场的重构特征, 得到准确的重构温盐场。除此之外, 随着分层的进行, 真实值与重构结果之间的误差 e_i 会越来越小, 最终逼近真实值, 误差分析过程如图 1 所示。

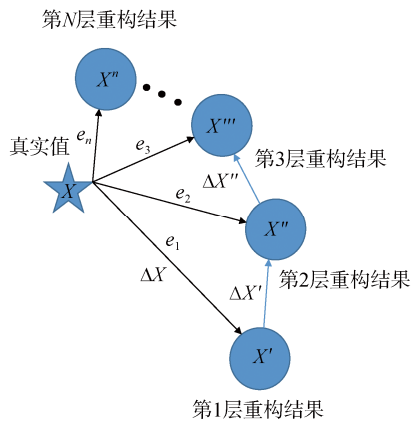


图 1 模型误差分析

Fig. 1 Model error analysis

本文以三层 MCEOF 为例进行分析, 如图 2, 第 1 层 MCEOF 是将观测温盐剖面构成的矩阵 X 提取主成分, 使用多元线性回归构造主成分与剖面的经度、纬度、海面温度和海面高度的函数关系:

$$P = f(L_{lon}, L_{lat}, S_{SST}, S_{SSH}), \quad (5)$$

进而重构得到第 1 层重构温盐场 $X' = E_{EOF} \cdot P$, 记 $F_1 = G = E_{EOF} \cdot P$ 。

接下来计算第 2 层 MCEOF, 第 1 层重构温盐场与观测温盐场的异常值为 $\Delta X = X - X'$, 将异常矩阵 ΔX 划分为 4 个小区域, 分别提取区域内的主成分, 同样建立主成分与变量之间的函数关系如下:

$$\hat{P}_i = f_i(L_{lon}, L_{lat}, \widehat{S_{SST}}, \widehat{S_{SSH}}), \quad (6)$$

式中 $i=1, \dots, 4$, 代表 4 个区域, $\widehat{S_{SST}, k} = S_{SST, k} - T'_{1,k}$, 分别表示第一重构场和卫星观测的海面温度异常和海面高度异常, k 为区域内剖面的个数, 第 2 层重构温盐场分别为

$$X''_i = X' + E_{EOF,i} \cdot \hat{P}_i \quad (7)$$

记为 $F_2 = G + G_i$, 其中 $G_i = E_{EOF,i} \cdot \hat{P}_i$ 。

同理进行第 3 层 MCEOF 重构, 第 2 层重构温盐场与第 1 层重构温盐场的异常值为 $\Delta X'' = X'' - X'$, 对第 2 层的 4 个小区域分别进行分层计算, 以 G_1 为例, 将 G_1 均分为 4 个小区域, 提取每个区域内的主成分, 并建立函数关系

$$\hat{P}_{1,i} = f_{1,i}(L_{lon}, L_{lat}, \widehat{S'_{SST}}, \widehat{S'_{SSH}}), \quad (8)$$

式中 $\widehat{S'_{SST}, k} = T'_{1,k} - T''_{1,k}$, $\widehat{S'_{SSH}, k} = h'_{1,k} - h''_{1,k}$ 分别表示第 2 层重构温盐场和卫星观测的海面温度异常和海面高度异常, 得到区域 G_1 内的第 3 层重构温盐场。

分别为

$$X'''_{1,i} = X' + X''_1 + E_{EOF,1,i} \cdot \hat{P}_{1,i}, \quad (9)$$

记为 $F_3 = G + G_i + G_{i,j}$, 式中 $G_{i,j} = E_{EOF,1,i} \cdot \hat{P}_{1,i}$, $i=1, \dots, 4$ 表示第 2 层的 4 个区域, $j=1, \dots, 4$ 分别为第二层区域内的小区域。

3 模型验证

本文利用所构造的数据集, 对 MCEOF 重构模型进行验证, 分别建立了不同的 MCEOF 重构对照分析, 进行多次重复试验, 并将其结果与多元线性回归 (Multiple Linear Regression, 简称 MLR) 重构方法进行比较。

3.1 EOF 模型对空间尺度参数的响应关系

在温盐重构过程中, 空间尺度越大, 包含的特征越多, 很难捕捉到最主要的特征。因此本文将研究区域划分为 $12^\circ \times 12^\circ$ 、 $6^\circ \times 6^\circ$ 、 $3^\circ \times 3^\circ$ 和 $1^\circ \times 1^\circ$, 利用 EOF 重构模型重构不同空间尺度上的温盐场, 分析空间尺度大小对重构结果的影响。

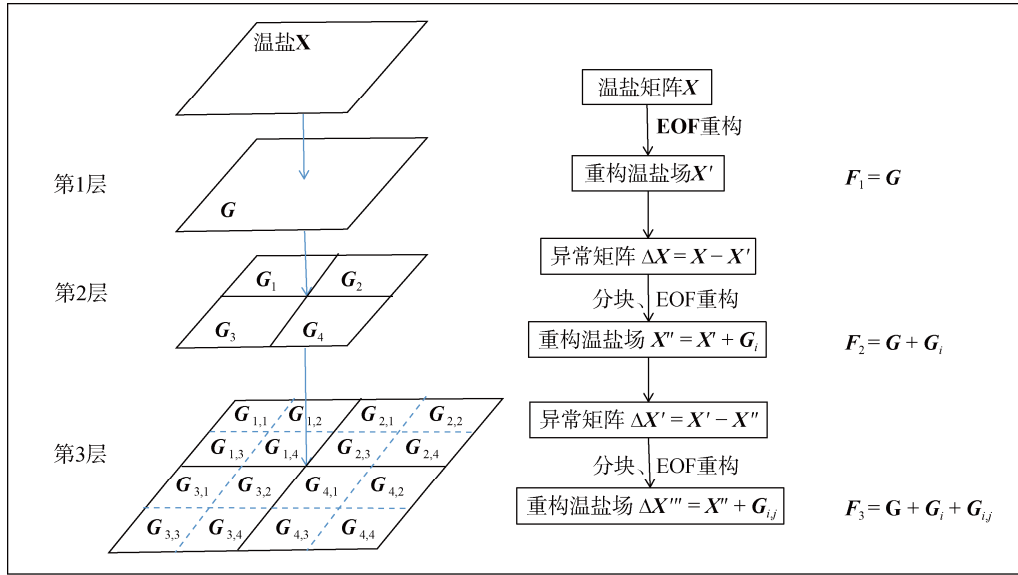


图2 MCEOF 重构流程图
Fig. 2 Flow chart of MCEOF-based reconstruction

本文计算了 EOF 重构方法在不同空间尺度上的重构温盐场与 ARGO 测试温盐场的均方根误差(图3), 在整体上 EOF 重构方法的均方根误差均小于 MLR 重构方法, EOF 方法的精度相比于 MLR 方法有了明显的提升。同时在 $12^\circ \times 12^\circ$ 、 $6^\circ \times 6^\circ$ 和 $3^\circ \times 3^\circ$ 区域内, 随着空间尺度的减小, 重构温盐场的均方根误差逐渐减小, 这是因为不同区域内影响温盐场的主要特征不同, 越小的研究区域越有利于捕捉温盐场的局部特征, 能有效地提高温盐场的重构精度。而 $1^\circ \times 1^\circ$ 区域重构温盐场的均方根误差大于 $3^\circ \times 3^\circ$ 区域, 这取决于研究区域内数据量的大小, 在实际温盐场重构中,

$1^\circ \times 1^\circ$ 范围内的温盐剖面数量较少, 重构模型难以准确获取完整的温盐特征, 并且模型的精度与稳定性容易受少数异常值的影响, 不足以支撑模型准确地获取其主要特征, 从而影响了重构温盐场的精度。

因此, 对比不同空间尺度范围内 EOF 模型重构温盐场的精度, 随着空间尺度的减小, 重构温盐场的均方根误差也逐渐减小, 但由于历史观测温盐场数量过少的原因, 限制了模型的优越性, 重构结果在 $3^\circ \times 3^\circ$ 区域内达到最佳。

3.2 MCEOF 模型敏感度分析

本文的温盐场重构方法中涉及到的敏感因素主要有分层的层数以及分层的尺度组合, 为了验证 MCEOF 重构模型的敏感度和稳定性, 本文根据不同的分层数和分层的尺度组合, 设计了如表 1 的 13 个组合, 分别对每个组合进行 5 次重复试验, 该重复试验将制作的数据集随机打乱, 随机选取其中 3/4 的数据作为训练集, 剩余 1/4 的数据作为测试集, 对每个组合求 5 组重复试验的平均均方根误差, 作为重构精度的评判标准, 均方根误差越小, 其重构精度越高。

如表 1 所示, 不同分组实验重构温盐场中, 差异主要体现在温度的重构精度, 盐度的重构精度变化很小, 所以下面主要讨论温度重构精度。通过观察不同分层层数的重构精度发现, 将研究区域分为 3 层后, MCEOF 的重构精度都达到最高, 其余分层方式重构精度由高到低依次为 2 层、1 层、4 层; 值得注意的是, 分层层数为

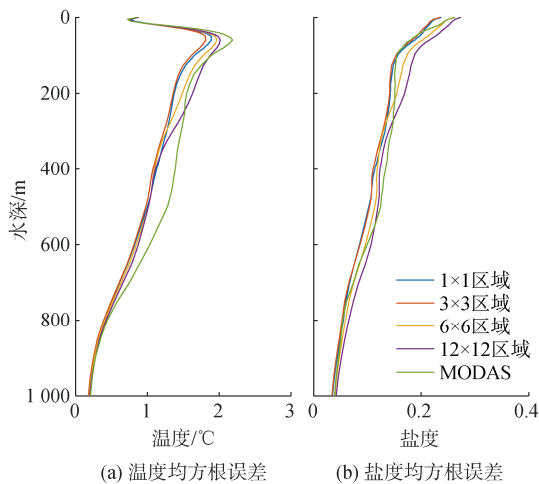


图3 不同空间尺度 EOF 重构温盐场的均方根误差
Fig. 3 Root mean square errors of the EOF reconstruction of temperature and salt fields at different spatial scales

表 1 实验组合的平均均方根误差

Tab. 1 The average root mean square error of the experimental combination

组合	层数	分层情况	温度平均均方根误差/℃	盐度平均均方根误差
1	4	12×12, 6×6, 3×3, 1×1	1.200	0.143
2	4	12×12, 6×6, 2×2, 1×1	1.200	0.143
3	4	12×12, 4×4, 2×2, 1×1	1.198	0.144
4	3	12×12, 6×6, 3×3	1.149	0.141
5	3	12×12, 6×6, 2×2	1.158	0.141
6	3	12×12, 4×4, 2×2	1.157	0.142
7	2	12×12, 6×6	1.185	0.144
8	2	6×6, 3×3	1.170	0.141
9	2	6×6, 2×2	1.172	0.142
10	2	4×4, 2×2	1.169	0.139
11	1	6×6	1.258	0.154
12	1	3×3	1.184	0.140
13	1	2×2	1.183	0.140

4 层的组合, 其重构精度会降低, 这是由于该区域内温盐剖面数量较少, 难以提取完整的温盐特性, 模型不能获取其主要特征, 从而降低了模型的重构精度, 因此得到随着 MCEOF 重构分层数的增加, 重构精度也会增加, 并且分为 3 层后, 其温盐场重构精度最高。

对相同分层数的不同尺度组合包含 2°×2°和 3°×3°的组合精度相差不大, 由于 2°×2°区域内数据量少的原因, 使其重构精度略有降低, 得到重构精度最高的组合为组合 4(12×12, 6×6, 3×3), 因此选择组合 4 中的尺度参数与层数参数来构建最终的次表层温盐重构模型。

3.3 MCEOF 模型重构精度分析

本文以组合 4(12°×12°、6°×6°、3°×3°)的区域划分为例, 进行 MCEOF 重构计算, 以此验证 MCEOF 重构方法的有效性。

首先提取耦合历史观测温盐矩阵的主要特征, 得到对应前 4 个模态上的特征投影, 即前 4 个主成分, 分别分析前 4 个主成分与海面温度异常和海面高度异常的相关性。

图 4(a)表示第 1 层 MCEOF 中前 4 个主成分与海面高度异常的散点图, 其对应主成分的方差贡献率

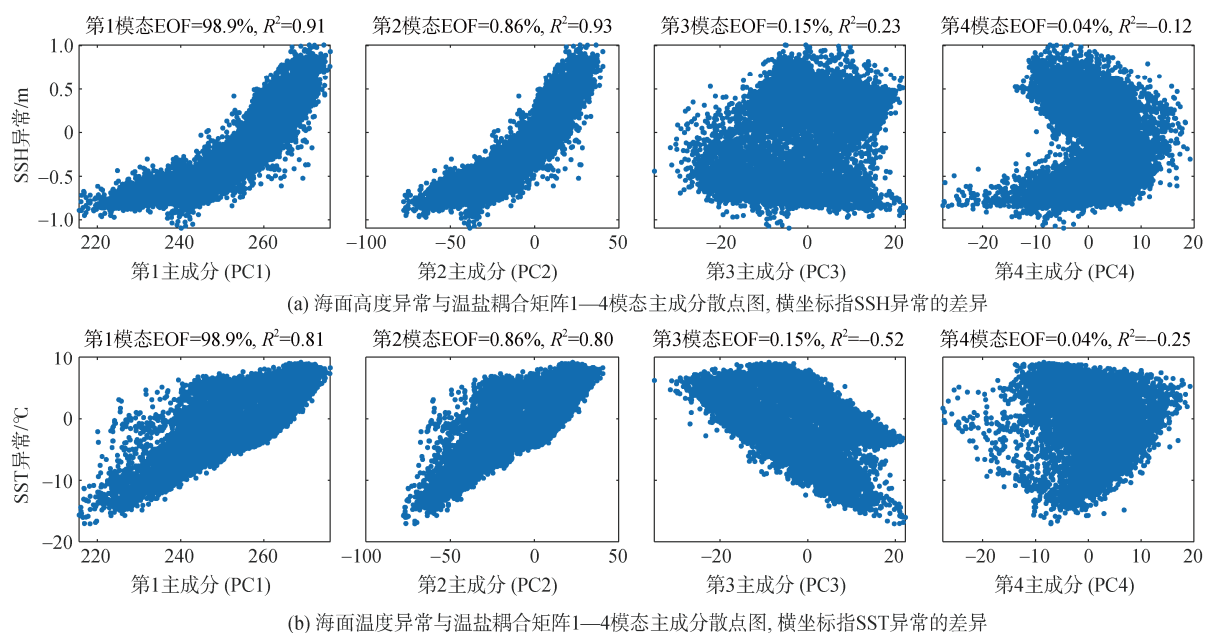


图 4 第 1 层 MCEOF 主成分与海面异常数据的散点分析图

Fig. 4 Scatter analysis plot of the first layers of principal MCEOF components with sea surface anomaly data

分别为 98.90%、0.96%、0.15%和 0.04%，根据图中主成分和海面异常的散点图分布，得到海面高度异常和第一主成分、第二主成分都有明显的正相关关系，它们的相关系数分别为 0.91、0.93，但是相关关系并不是线性关系，而是一种接近指数相关的非线性关系；海面高度异常和第三主成分存在弱正相关关系，相关系数为 0.23。

图 4(b)表示前 4 个主成分与海面温度异常的散点图，温度异常和第一主成分、第二主成分都存在明显的正相关关系，相关系数分别为 0.81、0.80；和第三主成分存在明显的负相关关系，相关系数为-0.52，并且其相关关系都接近于线性关系。为了便于测试模型，假设海面高度和海面温度与主成分之间的关系都是线性关系，建立温盐重构模型，从而通过公式(2)计算第 1 层 MCEOF 的重构温盐场。

通过图 4 发现，在大尺度的 EOF 分析中，温度异常和高度异常的散点图明显分成了两簇，说明除了大尺度上最明显的特征之外，还有一些中、小尺度的特征也会对温盐场的重构有很重要的作用。因此，

利用本文提出的 MCEOF 思想，根据第 1 层 EOF 的重构温盐场，计算其与观测温盐场误差矩阵，除去大尺度的主要特征，然后对误差场进行重构，提取主要特征除外的次要特征，以此构建第 2 层尺度的重构模型。

在第 2 层 MCEOF 重构中，将研究区域划分为 $6^{\circ} \times 6^{\circ}$ 的四个区域，对每个区域的误差场进行 MCEOF 分析，提取其前 4 个主成分，分别分析前 4 个主成分与海面高度误差、温度误差的相关性。

根据图 5，前 4 个主成分的方差贡献率分别为 58.10%、20.20%、8.92%和 4.67%，前 4 个主成分的方差贡献率达到 90%，能够表现误差场的主要特征。海面高度异常与第一主成分、第三主成分存在正相关关系，相关系数为 0.43、0.39，与第二主成分有正相关性，相关系数为 0.30，两者的相关关系都接近于线性相关；海面温度异常与第二主成分只有弱负相关关系，其相关系数分别为-0.29。选取前 4 个主成分构造三维温盐场的第 2 层重构模型，根据公式(5)计算出第 2 层 MCEOF 的重构温盐场。

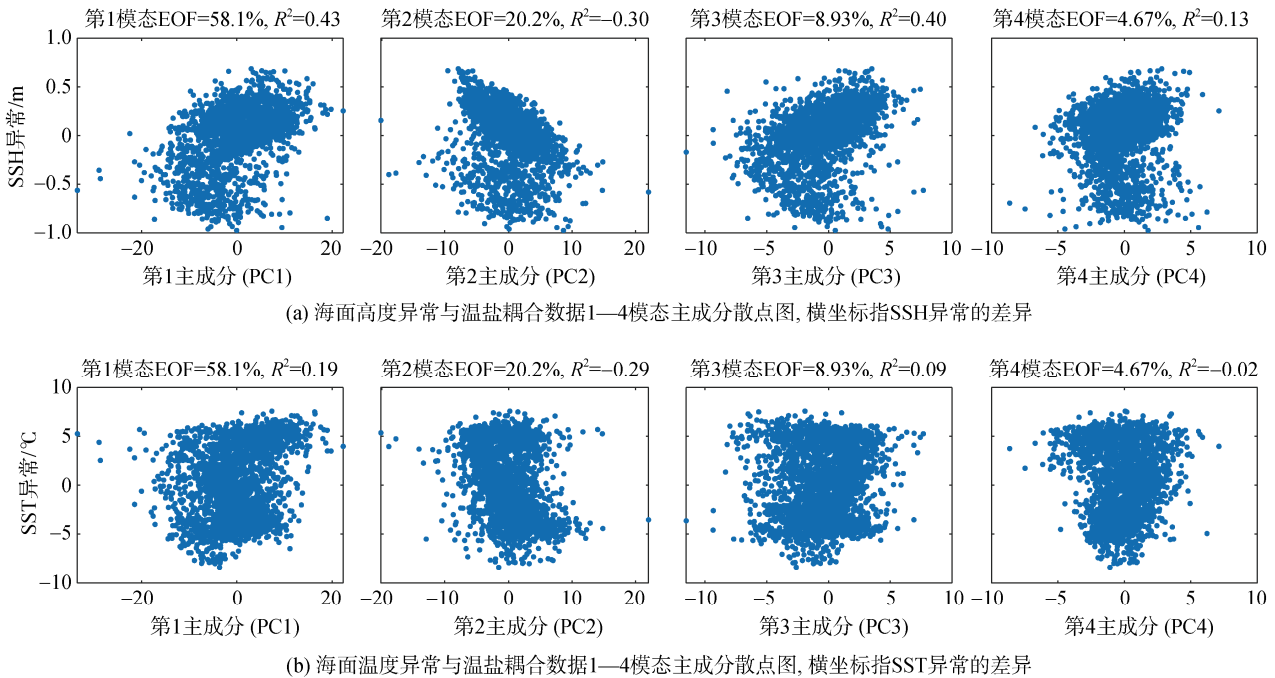


图 5 第 2 层 MCEOF 主成分与海面异常数据的散点分析图

Fig. 5 Scatter analysis plot of the second layers of principal MCEOF components with sea surface anomaly data

通过图 5 发现，去除大尺度的主要特征后，海面温度异常和海面高度异常的散点图仍有分为两簇的现象，说明去除中尺度主要特征之后，更小尺度的特征仍会对温盐场的重构有很重要的作用。从而在

两层 MCEOF 的基础上，再次计算第 1 层重构温盐场和第 2 层重构温盐场的异常场，进行 EOF 分解。

在 $6^{\circ} \times 6^{\circ}$ 分块区域的基础上，继续将每个区域均分为 $3^{\circ} \times 3^{\circ}$ 的研究区域，建立 $3^{\circ} \times 3^{\circ}$ 区域上的第 3 层

MCEOF 重构。对每个区域的误差场进行 EOF 特征提取，提取了其前 4 个主成分，分别对海面高度和海面温度与每个主成分之间的相关性进行分析。

如图 6 所示，前 4 个主成分的方差贡献率达到 90%，能够表现误差场的主要特征。在除去前两个尺度上的主要、次要特征后，海面高度异常和海面温度异常仍然和主成分之间存在相关关系。海面高

度异常与第一主成分存在负相关关系，且接近线性相关；海面温度异常与第二主成分存在弱负相关关系，与第三主成分存在弱正相关关系，且其相关关系都接近线性相关。选取前 4 个主成分构造第三层 EOF 温盐重构模型，根据公式 (7) 计算出三层 MCEOF(3 layer MCEOF, 简称 3L_MCEOF)的重构温盐场。

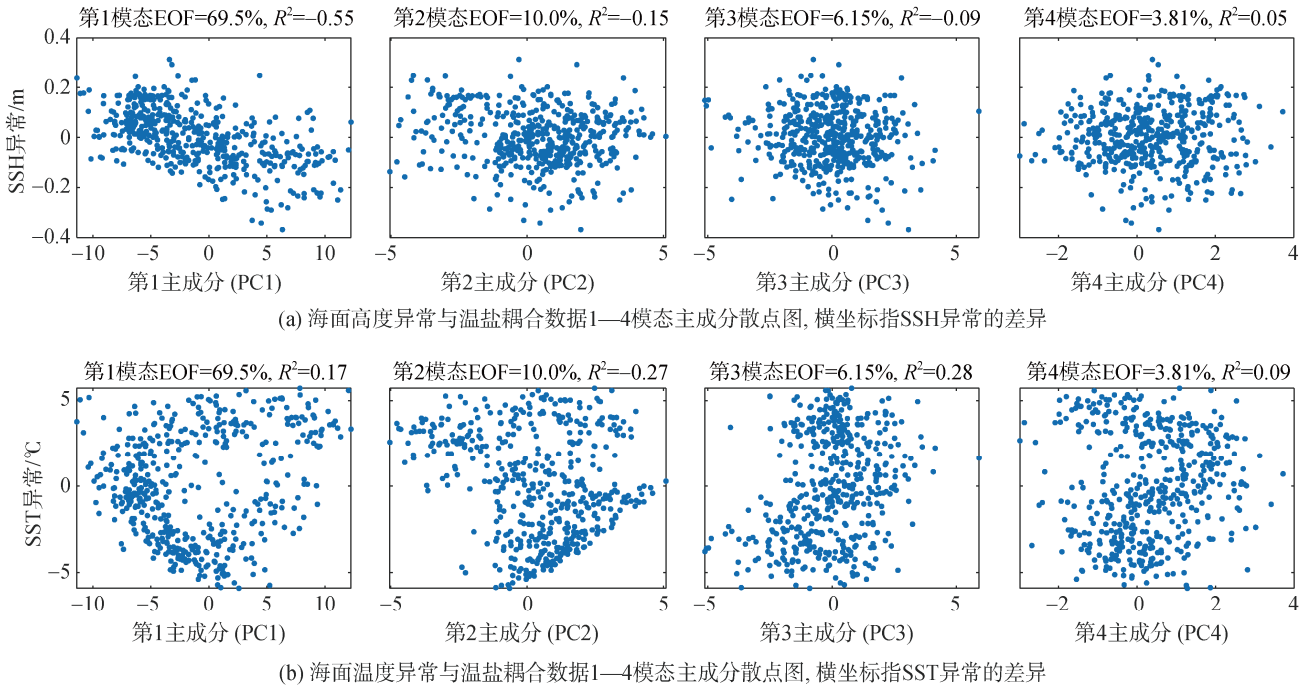


图 6 第三层 MCEOF 主成分与海面异常数据的散点分析图

Fig. 6 Scatter analysis plot of the third layers of principal MCEOF components with sea surface anomaly data

为了验证 MCEOF 重构方法的优越性，本文准备了组合 4 对应的 MCEOF 重构模型、 $3^{\circ} \times 3^{\circ}$ 区域内的 EOF 重构模型和 $3^{\circ} \times 3^{\circ}$ 区域 MLR 重构法三个对照组分别做多次重复试验，通过计算多次实验结果的平均均方根误差，对温盐场的重构精度进行比较。

图 7 中，相比传统的多元线性回归方法(MLR)，使用 EOF 重构和 MCEOF 分层重构方法后，重构温度和盐度场的精度都得到了提升，总体来看，MCEOF 重构的精度最高。针对图 7 温度均方根误差图，在混合层深度处，所有重构方案温度的均方根误差都达到最大值，EOF 重构的均方根误差为 1.86，MCEOF 重构的均方根误差为 1.76，其精度分别较 EOF 重构提升了约 0.1°C ；在 $0\sim 350\text{ m}$ 深度处，MCEOF 的重构精度相比于 EOF 有明显的提升，而在 350 m 以深的区域，两种重构方法的精度大致相同，但还是可以看出，MCEOF 的重构精度高于 EOF 重构，进一步说明了多尺度 EOF 重构方法的有效性。

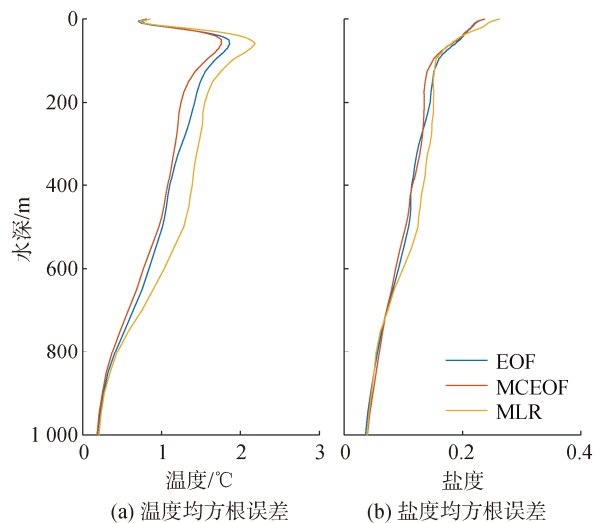


图 7 MCEOF 重构温盐场均方根误差对比

Fig. 7 Comparison of the RMSEs of MCEOF-reconstructed temperature and salt fields

从图 7 盐度均方根误差对比中看出, EOF 和 MCEOF 重构的盐度精度都高于 MLR 重构方法, 并且从总体看出, MCEOF 重构精度达到最高, 虽然盐度精度的提升较小, 但对于海洋在声学场等方面的研究仍然有很大的作用。

除此之外, 本文对对照组重构温盐场的垂直梯度与 ARGO 观测温盐剖面垂直梯度的均方根误差也进行了分析(图 8)。所有重构温盐场与观测温盐场垂直梯度的均方根误差都符合气候态与观测温盐场垂直梯度均方根误差的变化趋势。MCEOF 重构的温盐场垂直梯度在 200 m 以深区域, 其均方根误差有明显的提升, 并且 MCEOF 重构温盐场垂直梯度的精度达到最高。这说明通过不断去除大尺度的主要特征, 对温盐场的精度和其垂直梯度的精度都会有明显的改善。MCEOF 温盐重构工作提高了重构温盐场的垂直梯度, 这一特点在研究海洋声学场、潜艇的信号接收等方面都有非常重要的作用。

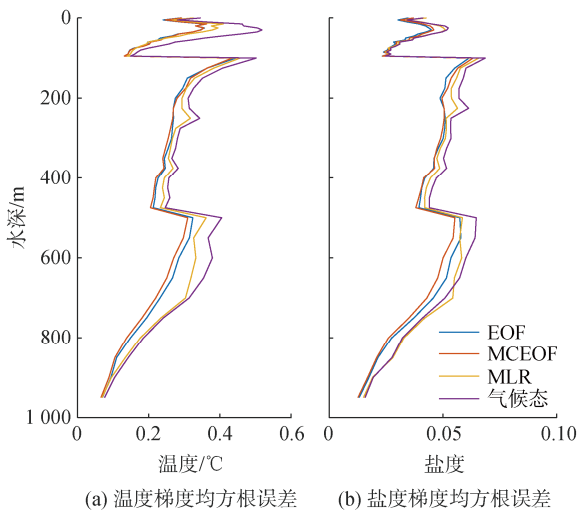


图 8 三层 MCEOF 重构温盐梯度均方根误差对比
Fig. 8 Comparison of the RMSEs of MCEOF-reconstructed temperature and salinity gradients

3.4 MCEOF 模型重构空间特征分析

本文选择组合 4 的 MCEOF 重构三维温盐场与 HYCOM 模式数据进行对比, 分析海洋三维温盐场的空间特征。

HYCOM 模式数据采用由等深坐标和等密度坐标相结合的垂向混合坐标, 可以提供海洋数值模式的初始场, 也可以将 HYCOM 模式数据同化到海洋数值再分析和预报系统中, 毛庆文等^[21]就用 HYCOM 模式数据来评估由其构建的三维温盐场系统的性能。本文

通过对比 HYCOM 模式温盐场和 MCEOF 重构温盐场, 分析其深度垂向断面以及水平切面的差异, 来评估重构温盐场对实际海洋的信息捕捉能力。

本文选取 36°36'N, 从 138°E~150°E 的 HYCOM 垂向断面, 观测时间为 2019 年 12 月 20 日, 由 3.2 的分析可知, 不同重构方案在深层区域的均方根误差都比较接近, 所以本文主要分析 0~500 m 的深度断面。

图 9(a)(左)的 HYCOM 温度断面中, 在 150°~153°E 之间, 等温线有明显的凸起; 同时在 144°~149°E 之间, 等温线也有凸起的特征。图 9(a)(右)中 MCEOF 温度重构结果与 HYCOM 模式数据相比, 重构温度场不仅反映了上层温度的变化特征, 还反映了真实的温盐场的内部状况, 在 150°~153°E 和 144°~149°E 之间的两个温度凸起也得到了良好的反映。同样在图 9(b)中, MCEOF 盐度重构结果也能够很好地反映出 150°~153°E 之间, HYCOM 模式数据明显的凸起特征, 并且其深度断面的变化趋势也符合盐度模式数据。

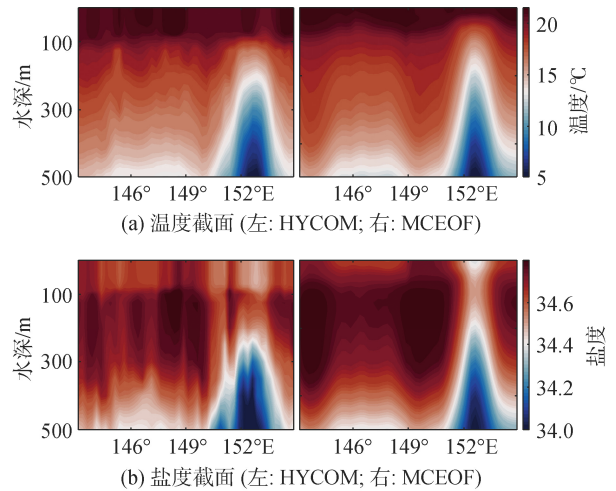


图 9 MCEOF 重构温度(a)和盐度(b)的垂向截面对比
Fig. 9 Comparison of the vertical cross-sections of MCEOF-reconstructed temperature (a) and salinity (b) fields

除深度截面的对比之外, 本文还对区域内不同深度的水平切面进行分析。选择整片区域内, 2019 年 12 月 20 日的 HYCOM 数据和组合 4 的 MCEOF 重构温盐场进行水平切面的对比。

综合对比 50 m, 450 m 和 800 m 深度处 HYCOM 模式数据和 MCEOF 重构温盐的切面结果(图 10), MCEOF 重构的温盐场与 HYCOM 模式数据的温盐场分布特征大致保持一致, 符合海洋真实温盐场的变化趋势, 并且 MCEOF 重构结果中温度的分布情况更加符合真实温盐场。

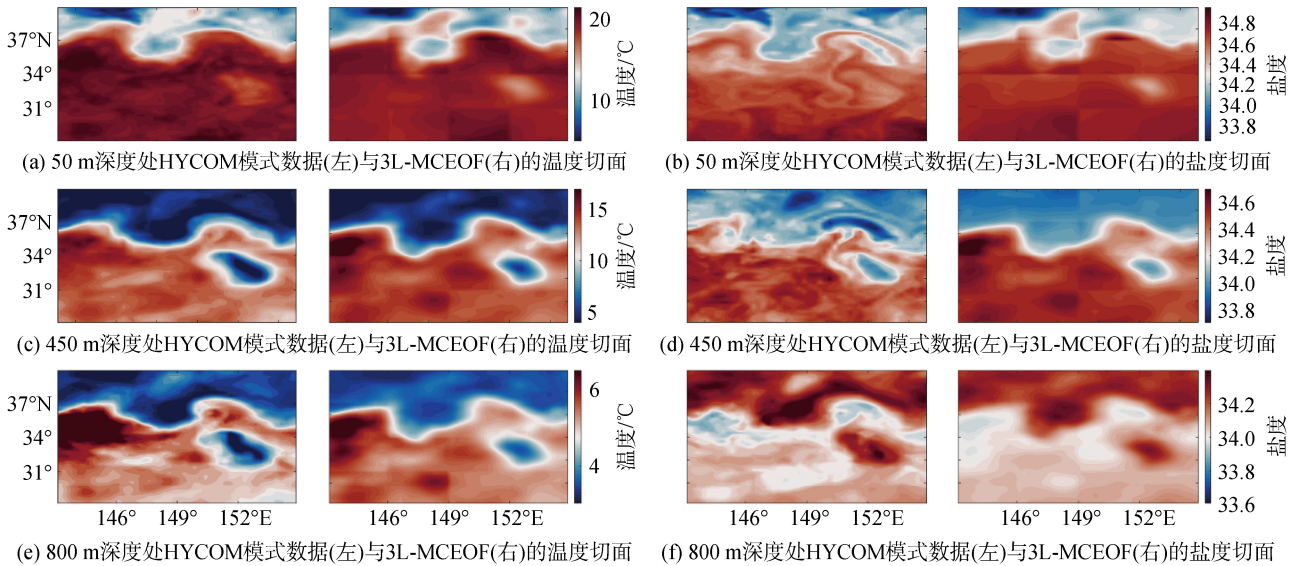


图 10 MCEOF 重构温盐场与 HYCOM 模式数据水平切面对比

Fig. 10 Horizontal-section comparison between MCEOF-reconstructed temperature and salinity fields and HYCOM data

通过对 MCEOF 重构结果的均方根误差, 以及从不同角度(纵向, 横向)与 HYCOM 数据的比较得出, MCEOF 重构方法能有效提高海洋三维温盐场的重构精度, 并且能良好地体现海洋内部的变化特征, 有效地捕捉到海洋中内部信息。

3.5 卫星观测误差对重构模型影响的量化评估

通过上述几个角度的研究分析发现, 重构温盐场的精度与重构区域的尺度有很重要的关系, 在拥有足够数据量的前提下, 选取的重构区域尺度越小, 重构温盐场的精度越高。除此之外, 本文重构模型的输入参量是卫星海表面温度和卫星高度计数据, 然而卫星观测其真实海洋存在一定的误差, 为了进一步评估卫星观测的误差对三维温盐场的影响, 本文接下来选取组合 4 的 MCEOF 重构温盐场模型, 分别将选取卫星海表数据和真实海表数据作为输入参量进行三维温盐场重构, 其中真实海表面温度数据选取 ARGO 温度剖面的表层温度; 高度数据是利用 ARGO 温盐剖面数据, 使用 Olbers 等^[22]的定义来计算的动力高度。

根据图 11, 将真实海表面数据作为输入参数进行重构的精度明显高于卫星海表面数据作为输入参数的精度。在约 80 m 深度处, 两种重构结果的均方根误差都达最大值, 并且观测海表重构的精度要大于卫星海表重构精度; 在 100 m~500 m 深度区域, 观测重构的精度有了明显的提升, 并且在约 300 m 深

度处提升最大, 该位置的温度均方根误差较卫星重构均方根误差减小 0.4, 其精度提升了 27.24%。这也进一步表明, 在本文提出的 MCEOF 方法中, 三维温盐场重构精度与海面参量的准确率有密切关系, 即越接近真实海洋的表面的海面观测, 能使其重构三维温盐场越加真实。

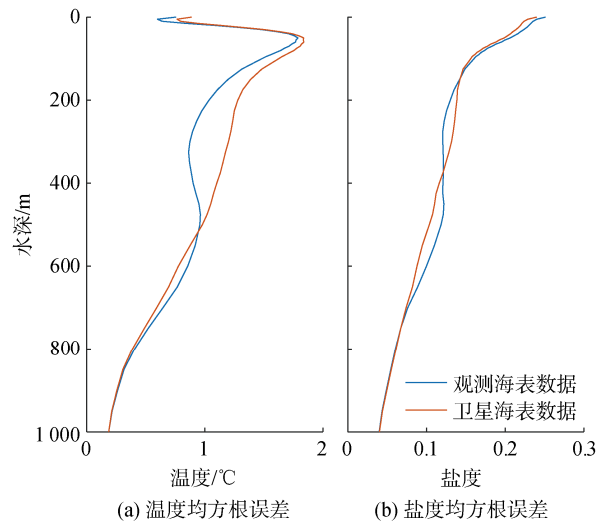


图 11 不同输入参量重构结果均方根误差对比

Fig. 11 Comparison of the root mean square errors of reconstruction results for different input parameters

4 结论

利用多年海洋遥感海表面信息和 ARGO 历史观测温盐数据, 开展了基于多尺度 EOF 特征分解的海

洋三维温盐场重构工作。将观测温度场和盐度场组成的耦合矩阵进行经验正交分解,提取主要特征,通过多元线性回归构建主成分与观测点的经纬度、海面高度和海面温度的回归关系,利用位置和海面信息重构温盐剖面。为了验证 EOF 温盐重构方法,本文建立了 $12^{\circ} \times 12^{\circ}$ 、 $6^{\circ} \times 6^{\circ}$ 、 $3^{\circ} \times 3^{\circ}$ 和 $1^{\circ} \times 1^{\circ}$ EOF 的四种重构方案,并且与同尺度 MLR 方法进行对比。结果显示,小尺度温盐场重构的精度有明显的提升,并且对比同尺度 MLR 方法,其与真实温盐场的偏差更小。同时,小尺度的温盐重构能更准确地重构海洋的三维温盐场的垂直梯度特征。

考虑到不同尺度温盐场表现的主要特征不同,本文在 EOF 温盐重构方法的基础上,提出了一种多尺度思想,通过去除大尺度的主要特征,继续使用 EOF 重构模型,提取除大尺度主要特征外其他尺度的次要特征,以此计算更精确的重构温盐场。本文设计了不同的重构方案,并对其与 MLR 方法进行比较,结果显示, MCEOF 重构模型的精度高于 EOF 模型的重构精度,并且随着模型层次的细化,重构温盐场的精度也逐渐提高。同时, EOF 方法重构的温盐场精度要高于 MLR 方法的重构精度。此外, MCEOF 重构温盐场的垂直梯度比其余方法均有一定的提升。对比 HYCOM 模式数据, MCEOF 重构能良好地体现海洋内部的变化特征,有效地捕捉到海洋中内部信息。本文还分析了卫星观测的精度对海洋温盐场重构的影响。结果显示,卫星海表面信息越接近于真实海表面信息,三维温盐场重构结果提升越大。

参考文献:

- [1] 赖积保, 康旭东, 鲁续坤, 等. 新一代人工智能驱动的陆地观测卫星遥感应应用技术综述[J]. 遥感学报, 2022, 26(8): 1530-1546.
LAI Jibao, KANG Xudong, LU Xukun, et al. A review of land observation satellite remote sensing application technology with new generation artificial intelligence[J]. National Remote Sensing Bulletin, 2022, 26(8): 1530-1546.
- [2] 刘建强, 叶小敏, 兰友国. 我国海洋卫星遥感大数据及其应用服务[J]. 大数据, 2022, 8(2): 75-88.
LIU Jianqiang, YE Xiaomin, LAN Youguo. Remote sensing big data from Chinese ocean satellites and its application service[J]. Big Data Research, 2022, 8(2): 75-88.
- [3] 黎文娥, 苏华, 汪小钦, 等. 多源卫星观测的全球海洋次表层温度异常信息提取[J]. 遥感学报, 2017, 21(6): 881-891.
LI Wene, SU Hua, WANG Xiaoqin, et al. Estimation of global subsurface temperature anomaly based on multisource satellite observations[J]. Journal of Remote Sensing, 2017, 21(6): 881-891.
- [4] STEWART R H. Introduction to physical oceanography[M]. Englewood Cliffs: Prentice Hall, 2008: 25-32.
- [5] TALLEY L D, PICKARD G L, EMERY W J, et al. Descriptive physical oceanography[M]. San Diego: Academic Press, 2011: 29-65.
- [6] SU H, WU X B, YAN X H, et al. Estimation of subsurface temperature anomaly in the Indian Ocean during recent global surface warming hiatus from satellite measurements: A support vector machine approach[J]. Remote Sensing of Environment: An Interdisciplinary Journal, 2015, 160: 63-71.
- [7] KHEDOURI E, SZCZECZOWSKI C, CHENEY R E. Potential oceanographic applications of satellite altimetry for inferring subsurface thermal structure[J]. Oceans, 1983, 15: 274-280.
- [8] FISCHER M. Multivariate projection of ocean surface data onto subsurface sections[J]. Geophysical Research Letters, 2000, 27(6): 755-757.
- [9] FOX D N, TEAGUE W J, BARRON C N, et al. The Modular Ocean Data Assimilation System (MODAS)[J]. Journal of Atmospheric and Oceanic Technology, 2002, 15(1): 22-28.
- [10] 王喜冬, 韩桂军, 李威, 等. 利用卫星观测海面信息反演三维温度场[J]. 热带海洋学报, 2011, 30(6): 10-17.
WANG Xidong, HAN Guijun, LI Wei, et al. Reconstruction of ocean temperature profile using satellite observations[J]. Journal of Tropical Oceanography, 2011, 30(6): 10-17.
- [11] FIEDLER P C. Surface manifestations of subsurface thermal structure in the California Current[J]. Journal of Geophysical Research: Oceans, 1988, 93(C5): 4975-4983.
- [12] CARNES M R, MITCHELL J L, DEWITT P W. Synthetic temperature profiles derived from GEOSAT altimetry: comparison with air-dropped expendable bathythermograph profiles[J]. Journal of Geophysical Research: Oceans, 1990, 95(C10): 17979-17992.
- [13] CARNES M R, TEAGUE W J, MITCHELL J L. Inference of Subsurface thermohaline structure from fields measurable satellite[J]. Journal of Atmospheric and Oceanic Technology, 1994, 11(2): 551-566.
- [14] PASCUAL A and GOMIS D. Use of surface data to estimate geostrophic transport[J]. Journal of Atmospheric and Oceanic Technology, 2003, 20(6): 912-926
- [15] 汤博, 侯一筠, 殷玉齐, 等. 利用卫星遥感海面温度、高度联合反演南海北部三维温度场[J]. 海洋科学, 2019, 43(11): 1-10.
TANG Bo, HOU Yijun, YIN Yuqi, et al. Inversion of the three-dimensional temperature field in the northern

- part of the South China Sea based on the remote satellite sea surface temperature and height[J]. *Marine Sciences*, 2019, 43(11): 1-10.
- [16] ALI M M, SWAIN D, WELLER R A. Estimation of ocean subsurface thermal structure from surface parameters: A neural network approach[J]. *Geophysical Research Letters*, 2004, 31(20): L20308.
- [17] WU X B, YAN X H, JO Y H, et al. Estimation of subsurface temperature anomaly in the North Atlantic using a self-organizing map neural network[J]. *Journal of Atmospheric & Oceanic Technology*, 2012, 29(11): 1675-1688.
- [18] SU H, WU X B, LU W F, et al. Inconsistent subsurface and deeper ocean warming signals during recent global warming and hiatus[J]. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 2017, 122: 8182-8195.
- [19] SU H, ZHANG H J, GENG X P, et al. OPEN: A new estimation of global ocean heat content for upper 2000 meters from remote sensing data[J]. *Remote Sensing*, 2020, 12(14): 1-17.
- [20] 聂旺琛, 王喜冬, 陈志强, 等. 基于神经网络的全球三维温盐场重构技术研究[J]. *热带海洋学报*, 2022, 41(2): 1-15.
NIE Wangchen, WANG Xidong, CHEN Zhiqiang, et al. Research and application of global three-dimensional thermohaline reconstruction technology based on neural network[J]. *Journal of Tropical Oceanography*, 2022, 41(2): 1-15.
- [21] 毛庆文, 储小青, 严幼芳, 等. 南海三维动态温盐场重构系统的设计与实现[J]. *热带海洋学报*, 2013, 32(6): 1-8.
MAO Qingwen, CHU Xiaoqing, YAN Youfang, et al. A three-dimensional temperature and salinity reconstruction system in the South China Sea[J]. *Journal of Tropical Oceanography*, 2013, 32(6): 1-8.
- [22] OLBERS D, GOURETSKY V, SEISS G, et al. *Hydrographic atlas of the Southern Ocean*[M]. Bremen: Alfred Wegener Institute, 1992: 17-18.

Inversion of ocean subsurface temperature and salinity structure by multiscale coupled empirical orthogonal decomposition

ZHANG Mingqi^{1, 3}, XU Yongsheng^{2, 3, 4}, YANG Shuguo¹

(1. Qingdao University of Science and Technology, Qingdao 266061, China; 2. Institute of Oceanography, Chinese Academy of Sciences, Qingdao 266071, China; 3. Laoshan Laboratory, Qingdao 266061, China; 4. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100094, China)

Received: Nov. 24, 2022

Key words: satellite observation; multiscale coupled empirical orthogonal function; vertical gradient; spatial characteristics

Abstract: To address the problem of reconstructing the three-dimensional ocean thermohaline salinity fields based on sea surface information obtained through satellite observation, a three-dimensional thermohaline field–reconstruction method based on multiscale coupled empirical orthogonal decomposition is proposed in this paper. The proposed method involves using a multiscale coupled empirical orthogonal function to iteratively decompose historical temperature and salinity profiles from a large to a small scale to extract the feature information of three-dimensional thermohaline and salinity fields at different scales in a hierarchical manner. Then, models of the collected satellite information are established and the characteristic information of the involved three-dimensional thermohaline field is obtained at different scales to achieve three-dimensional thermohaline field reconstruction. Herein, multiscale coupled empirical and single-layer orthogonal decompositions are used to reconstruct three-dimensional thermohaline and salinity fields. The results indicate that the former is superior to the latter. Furthermore, with continuous refinement of the decomposition levels, the accuracy of the reconstructed thermohaline field and its vertical-gradient accuracy are significantly improved, with Scheme 4 resulting in the highest improvements (25.57% and 27.58%, respectively). Meanwhile, compared with the HYCOM, the proposed method can more effectively capture the spatial characteristics of the involved subsurface ocean. In general, thermohaline-field inversion based on the proposed method deviates less from the Argo thermohaline field; moreover, the accuracy of the inversion is better. Further, the obtained spatial distribution tends to be consistent, aiding in effectively analyzing the three-dimensional structure and variation characteristics of the ocean thermohaline field.

(本文编辑: 丛培秀)