

基于三光谱带的大气散射效应校正方法

叶函函, 王先华*, 江新华, 卜婷婷

中国科学院通用光学定标与表征技术重点实验室, 中国科学院安徽光学精密机械研究所, 安徽 合肥 230031

摘要 大气散射效应作为 CO₂ 反演的主要误差源, 严重影响了全球大气 CO₂ 卫星产品的应用研究。气溶胶作用以及气溶胶与地表综合作用是大气散射的重要来源。基于 O₂-A, CO₂ 1.6 和 2.06 μm 三个光谱带中的强、弱吸收峰和连续谱, 从大气气溶胶光学厚度和地表反照率的角度, 分析三光谱带具有的相关信息, 提出改进的全物理反演方法, 对相关性很强的气溶胶光学厚度和地表反照率这两个散射相关参数进行同步反演, 实现大气 CO₂ 反演中的散射效应校正。模拟计算气溶胶影响、气溶胶和地表反照率两者综合影响导致的 CO₂ 反演误差, 并进行校正, 极端情况下导致的 8% CO₂ 反演误差可校正到 1% 内, 气溶胶类型差异导致最高达 10% 的散射影响可校正到 2% 内, 显示了方法的有效性, 同时通过对校正效果的评估, 表明该方法应用于卫星数据高精度反演的潜力, 也指出了实际应用时需要关注的问题。

关键词 CO₂; 反演; 散射效应; 校正方法; 三光谱带

中图分类号: P407 文献标识码: A DOI: 10.3964/j.issn.1000-0593(2016)03-0618-06

引言

卫星观测大气 CO₂ 的含量及分布对认识和预测全球碳循环至关重要, 利用近红外光谱区域的反射太阳光来反演大气 CO₂ 柱平均含量, 有助于提高当前对 CO₂ 源和汇的空间分布、时间变化认识的准确性。为满足研究需求, 卫星观测的 CO₂ 与空气混合比浓度 (XCO₂) 至少要保证区域尺度上 (1 000 × 1 000 km²) 月平均精度优于 2.5×10^{-6} [1]。然而一系列针对 CO₂ 卫星观测数据的研究 [2-3] 指出, 大气散射作用会严重阻碍 CO₂ 的高精度观测。散射相关参数认知偏差的存在, 使得无法准确定量实际散射效应的影响, 从而导致 CO₂ 反演产生偏差。

气溶胶、卷云 [2-3] 和地表反照率 [4-5] 是决定大气散射的重要因素, 2009 年发射的 GOSAT (Greenhouse Gases Observing Satellite) 卫星和 2014 年发射的 OCO (Orbiting Carbon Observatory)-2 卫星在研究大气 CO₂ 时均考虑了这些因素。GOSAT 搭载了 TANSO-CAI (Thermal and Near-infrared Sensor for Carbon Observation-Cloud and Aerosol Imager) 进行气溶胶和云的识别与定量, 辅助进行数据筛选和 CO₂ 反演校正, 地表反照率信息则来自于 MODIS (Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer) 16 天观测的平均反照率数

据 [6]; OCO-2 采用同一 A-Train 轨道上 MODIS 的产品, 为 CO₂ 研究提供气溶胶含量和云覆盖信息 [7], 且利用独立光谱带两端的无气体吸收连续谱估计该光谱范围内的地表反照率值 [8]。不管来源于卫星产品或数值估计, 参数的先验信息越可靠, 获得的目标反演结果就越稳定、准确, 反演误差程度取决于这些参数的可靠程度。气溶胶、卷云和地表反照率的来源方式不可避免地存在误差, 因此必须采取校正方法来补偿其影响。

目前校正方法基本有两种, 一种是考虑大气散射引起的光程长改变, 对光程长的统计特征进行公式化描述的光子路径分布概率函数 (PPDF) 方法 [9-10], 另一种是通过对观测光谱建模、并利用数学方法求解大气辐射传输公式, 从而获得散射相关参量的全物理方法 (FP 方法) [11-12], 上述两种方法均使得气溶胶光学厚度 (AOD) (550 nm) 高达 0.3 对应的 CO₂ 反演误差大大降低。但是, PPDF 方法利用 O₂-A 带的光程相关参数校正 CO₂ 带的误差, 存在两个难点, 首先光程相关参数的光谱特性难以准确获取 [10]; 其次由于忽略 O₂-A 带内地表反照率 (Albedo) 的偏差, 其对光程相关参数的影响会造成散射影响误判。然而, FP 方法同步反演气溶胶波长特性参数及各光谱带的地表反照率, 更充分地考虑了散射相关因素的影响, 虽然这两个参量的影响高度相似, 但结合优化估计方法, 采用先验信息来约束这种严重欠定的问题, 可以获

收稿日期: 2014-12-19, 修订日期: 2015-04-12

基金项目: 国家自然科学基金项目 (41175037) 资助

作者简介: 叶函函, 1987 年生, 中国科学院安徽光学精密机械研究所博士研究生 e-mail: yehhgo@gmail.com

* 通讯联系人 e-mail: xhwang@aiofm.ac.cn

得物理合理解。

1 三光谱带反演模型

1.1 基于三光谱带的反演原理

三光谱带反演算法是利用 $0.76 \mu\text{m}$ $\text{O}_2\text{-A}$ 、 1.6 和 $2.06 \mu\text{m}$ CO_2 带的综合信息，同步反演出多个目标参数。 $1.6 \mu\text{m}$ 带对近地表大气 CO_2 敏感，可反演 CO_2 ； $\text{O}_2\text{-A}$ 带和 $2.06 \mu\text{m}$ CO_2 带内的饱和吸收区域对气溶胶散射引起的光程变化敏感，可反演气溶胶；光谱带两端的连续谱，可对反射率和气溶胶的光谱特性进行约束。

具有信息的每个参数都会影响卫星探测器观测到的辐射，然而从观测中是否能准确反演出这些参数，取决于它们

所对应的权重函数。实测光谱对每个参数的偏导称为该参数的权重函数。在特定仪器探测精度条件下，权重函数差异较大的参数之间才易区分，而被反演出来，权重函数相似会导致反演参数结果不明确^[13]。

图 1 展示了乡村型 $\text{AOD}=0.1$ ， $\text{Albedo}=0.3$ ， $\text{XCO}_2=380 \times 10^{-6}$ 的状态，GOSAT 光谱分辨率条件下， $1.6 \mu\text{m}$ CO_2 带内 AOD 和 Albedo 两个散射相关参数分别变化 0.1 ， CO_2 浓度变化 1×10^{-6} 所对应的权重函数（太阳归一化光谱差值）。 AOD 、 Albedo 和 XCO_2 权重函数的曲线之间具有很强的相关性，仪器实际上无法从散射参数的变化中区分出 XCO_2 的变化。仅从 CO_2 带分析数据时，散射参数的不确定，常会导致 CO_2 反演误差，因此必须对散射参数进行约束。

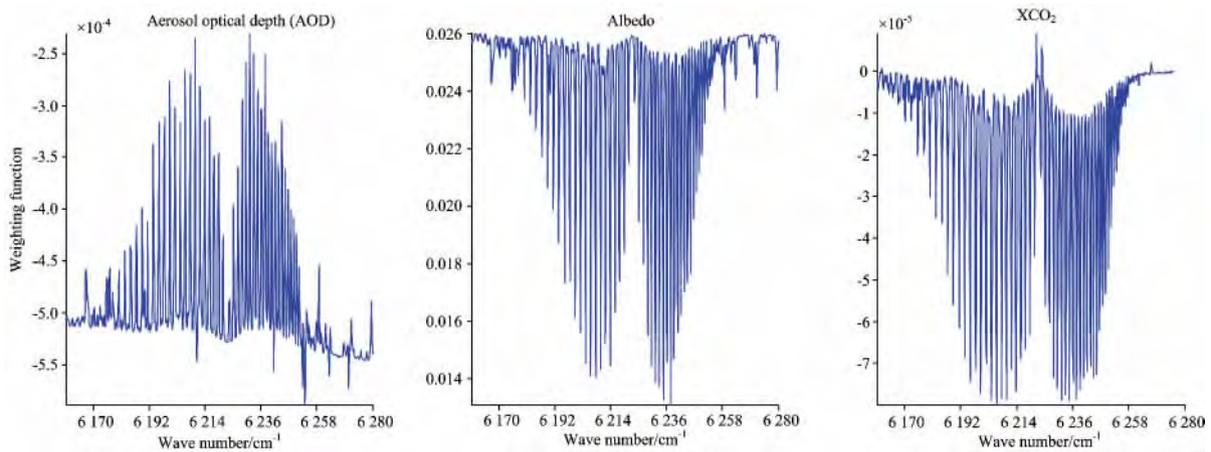


Fig 1 Weighing function of aerosol, albedo and CO_2 in $1.6 \mu\text{m}$ CO_2 band

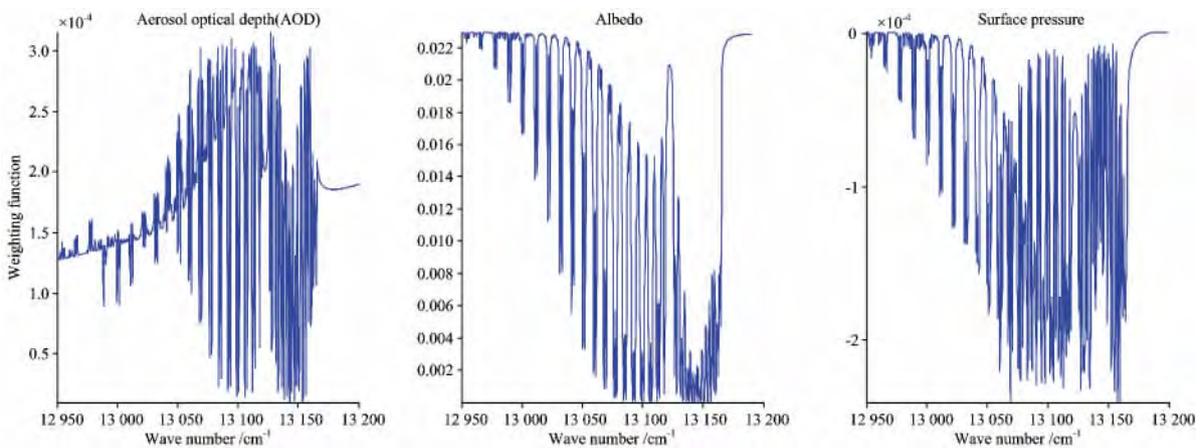


Fig 2 Weighing function of aerosol, albedo and surface pressure, in $\text{O}_2\text{-A}$ band

与图 1 类似，图 2 和 3 展示了相同条件下 $\text{O}_2\text{-A}$ 和 CO_2 $2.06 \mu\text{m}$ 带各参数的权重函数，其中 $\text{O}_2\text{-A}$ 带展示了地表压力的权重函数，可用来获得静力学假设条件下的大气总分子数，用于计算 XCO_2 。由于强吸收的作用，气体吸收的饱和程度对散射引起的光程变化比较敏感，而且各参数权重函数之间的相似性不太明显，因此考虑从这两个光谱带中，剥离出气溶胶光学厚度和地表反照率的独立信息。三光谱带边缘的

连续谱，可以对地表反照率和气溶胶的波长依赖光学特性进行约束。综上分析，可从 $\text{O}_2\text{-A}$ 和 CO_2 $2.06 \mu\text{m}$ 带获得大气散射信息，从连续谱获得地表反照率，用于约束 $1.6 \mu\text{m}$ 带和 $\text{O}_2\text{-A}$ 计算的 XCO_2 反演结果。

1.2 反演方法的构建

FP 反演方法是利用多光谱带之间的物理关系，结合数值方法求解辐射传输公式同步获得目标参数的方法。Gauss-

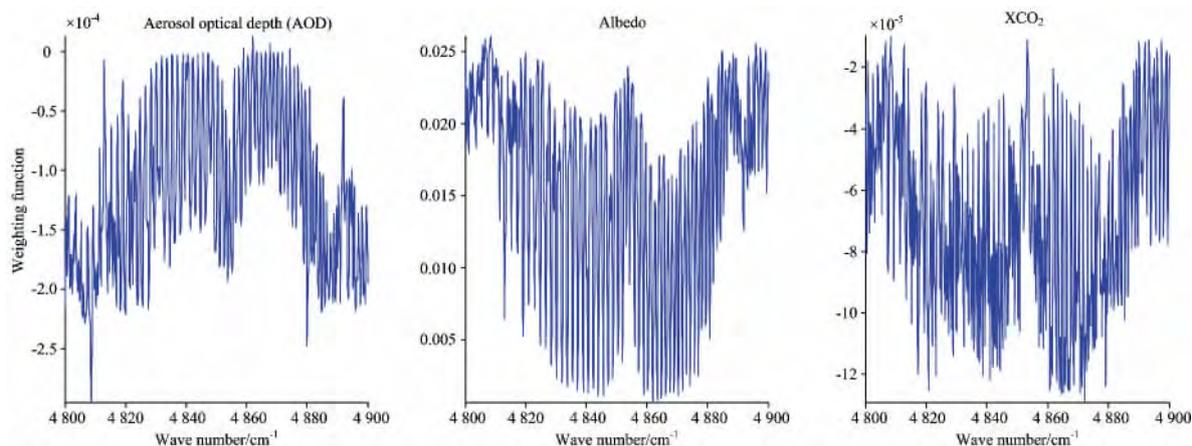


Fig 3 Weighting function of aerosol, albedo and CO₂ in 2.06 μm CO₂ band

Newton 是迭代计算的常用方法,但若先验信息 x_a (AOD、三光谱带 Albedo 和 XCO₂) 与真实值偏差较大,或前向模型 $f(x)$ 高度非线性,则迭代过程难以稳定收敛。为解决这个问题,在 Rodgers 迭代公式(5.35)^[14]基础上进行改进,以提高收敛速度及准确性,第 i 次迭代更新的状态向量 x_{i+1} 如下

$$x_{i+1} = x_i + (K_i^T S_e^{-1} K_i + S_a^{-1} + \lambda D^2)^{-T} \times [K_i^T S_e^{-1} (y - F_i) - S_a^{-1} (x_i - x_a)] \quad (1)$$

式中 $K_i = \partial f / \partial x_i$ 代表每个光谱对第 i 个状态向量的权重函数, S_e 为观测误差协方差矩阵, S_a 为先验误差协方差矩阵, y 为 O₂-A 带、1.6 μm 和 2.06 μm CO₂ 三个卫星观测光谱带, D 是一个对角阵,用以确保迭代过程的稳定, λ 为约束因子,每次迭代中均调整以保证代价函数逐渐减小。

在观测数据信息足够的情况下,通过优化估计技术,结合适合的算法和约束,保证全物理方法的准确性。 D 与 λ 设置的合理与否,是能否准确区分出高度相似参数气溶胶和反射率的决定性条件。对 S_e 和 S_a 进行 Cholesky 分解^[6]

$$S_e = T_\epsilon^T T_\epsilon, S_a^{-1} = T_{\text{ainv}}^T T_{\text{ainv}} \quad (2)$$

定义矩阵 A

$$A = \begin{pmatrix} T_\epsilon^{-T} K_i \\ T_{\text{ainv}} \end{pmatrix} \quad (3)$$

则对角阵 D 为

$$D^2 = \text{diag}(A^T A) \quad (4)$$

λ 值的调整策略,取决于代价函数 χ^2 的实际变化量(第 i 与 $i+1$ 次之间)与基于线性假设的代价函数预测减小量之间的比值

$$R = (\chi_i^2 - \chi_{i+1}^2) / (\chi_i^2 - \chi_{i+1, \text{FC}}^2) \quad (5)$$

$R=1$ 代表代价函数减小量等于预测减小量,前向模型完全线性; $R<0$ 代表代价函数增大; $0<R<1$ 代表代价函数减小,但未达到预期程度。根据 R 的值, λ 的调整策略如下:

- (1) $R<0$, x_{i+1} 舍弃, λ 增加 2 倍后重新反演;
- (2) $R<0.25$, 发散, λ 增加 2 至 10 倍;
- (3) $R>0.75$, 相当线性, λ 减小 2 倍;
- (4) $0.25<R<0.75$, λ 不变。

这样,反演策略结合三光谱带的信息,可在无额外信息的条件下,实现自稳收敛,并获得三光谱带的最佳拟合。同

步使用拟合窗相比较单个光谱带独立反演,有两个好处:

- (1) 同步拟合确保三光谱带所有参量(除具有波长特性的反射率等)必须一致,从而增强约束、增加了反演结果的一致性;
- (2) 如果一个光谱带内状态向量成分具有较强的不确定性(如 CO₂ 带内的散射参数),则取其他光谱带获得相对更明确的信息。多光谱带结合可保证采用三个光谱带中不确定性最小的作为反演结果^[13]。

2 散射校正实验

当大气中包含光学厚度或类型未知的气溶胶或卷云时, XCO₂ 反演误差常由具有波长特性的气溶胶和反射率两者的综合影响导致。利用下面两组实验来了解气溶胶的影响、气溶胶和反射率的综合影响,以及采用上述散射校正方法获得的校正效果。

2.1 气溶胶影响

为研究气溶胶对 CO₂ 反演的影响、测试校正方法的有效性,利用大气辐射传输模型 MODTRAN5 来模拟计算不同气溶胶状态对应的 GOSAT 卫星观测值。气溶胶由气溶胶类型和 AOD 两个参数来描述,此处提及的气溶胶类型均指 0~2 km 之间的,而 3~10 km 的确定为对流层型,11~100 km 的确定为背景平流层型,气溶胶消光系数在整层大气中的分布呈指数衰减。AOD 均对应 550 nm,取值位于 0~2 之间,符合实际大气气溶胶状态。

气溶胶类型选择两种相似的散射型和一种吸收型,分别为 MODTRAN 模式中定义的乡村型、沙漠型(无风)和城镇型气溶胶, AOD 取 0.05, 0.3, 1 和 2。反演计算时,参考光谱的计算条件为乡村型气溶胶、AOD 0.05, 美国 1976 年标准大气模式,三光谱带的地表反射率均 0.3, 太阳天顶角 30°, 星下点观测,光谱分辨率 O₂-A 带为 0.6 cm⁻¹ 和 CO₂ 带为 0.27 cm⁻¹, 该条件相当于晴空和中等地表反射条件下的 GOSAT 卫星观测。

由表 1 可看出,气溶胶类型认知准确,即实际大气气溶胶也为乡村型,仅存在 AOD 偏差的情况下(AOD 为 2 时对应 CO₂ 误差达 1.886%),经校正后误差最大不超过

Table 1 Correction results of the method for aerosol effect

气溶胶 类型	CO ₂ 带		校正前 CO ₂ 反演 误差/%	AOD 反演值	Albedo 反演值	校正后 CO ₂ 反演 误差/%
	AOD	Albedo				
乡村型	0.05	0.3	0	0.05	0.3	0
	0.3	0.3	-0.571	0.3	0.3	0.005
	1.0	0.3	-1.140	0.999	0.3	-0.002
	2.0	0.3	-1.866	2.47	0.3	0.213
城市型	0.05	0.3	0.004	0.05	0.3	0.002
	0.3	0.3	-0.506	0.26	0.29	0.048
	1.0	0.3	-1.430	1.09	0.14	-0.286
	2.0	0.3	-3.275	0.92	0.18	-0.99
沙漠型	0.05	0.3	0.002	0.05	0.3	0.003
	0.3	0.3	-0.540	0.31	0.31	0.018
	1.0	0.3	-0.900	1.02	0.33	0.092
	2.0	0.3	-1.572	2.03	0.36	0.213

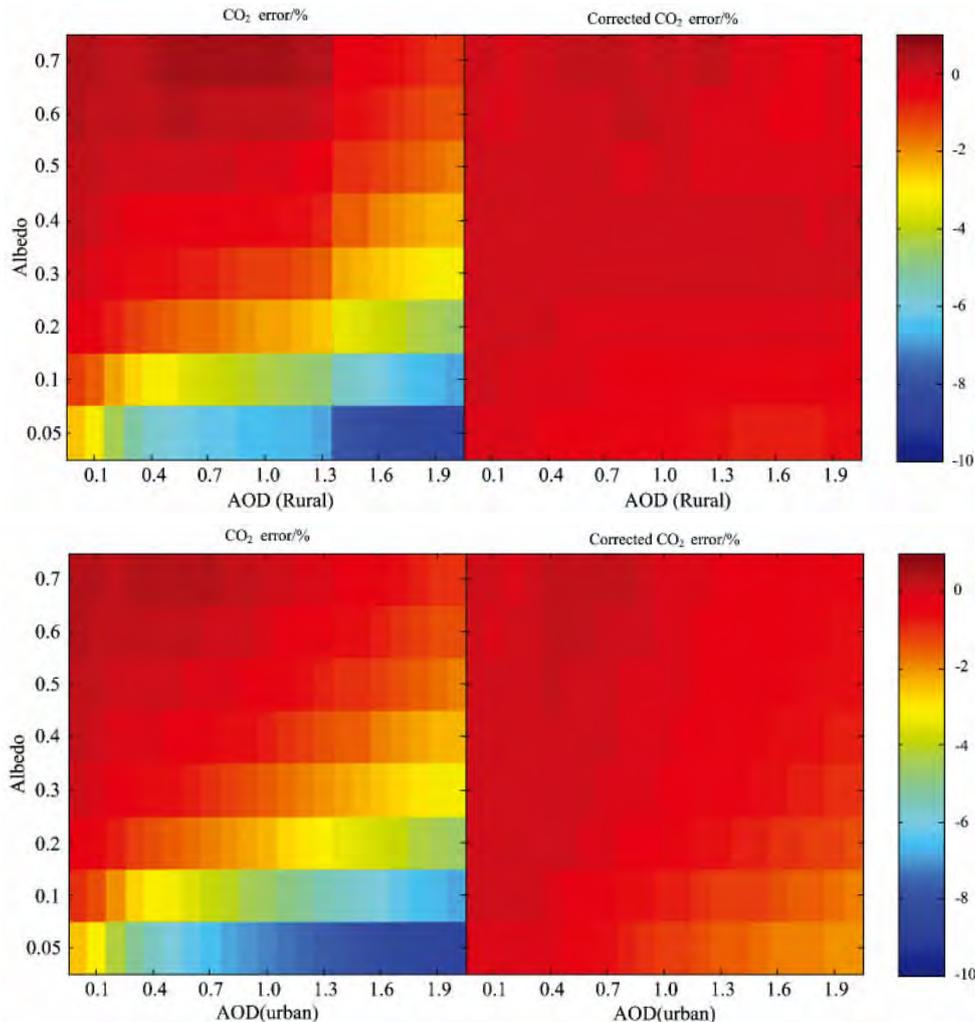
0.213%；当气溶胶类型的认知存在偏差时，校正方法的效果，取决于气溶胶类型先验判断的准确性，城市型气溶胶对应的最大 CO₂ 误差为 3.275%，校正可达到 0.99%，而沙漠型气溶胶对应的最大 CO₂ 误差为 1.572%，校正可达到 0.213%，因为沙漠型气溶胶散射性较强，与先验的乡村型气溶胶特性相近，则大气散射作用的重构，以及算法的校正

效果均明显优于吸收性较强的城市型气溶胶。

气溶胶类型偏差引起的误差，主要是由气溶胶散射效应的参数化不完整导致，若由完整的光学特征参数光学厚度、单次散射反照率和粒子相函数来构建气溶胶模型，则效果将得以改进。

2.2 气溶胶和地表反照率综合影响

为定量两者的散射作用，研究 AOD = 0.05, 0.1, 0.2, ..., 2.0, Albedo = 0.05, 0.1, 0.2, ..., 0.7 的大气-地表状态对 CO₂ 的影响，其余大气状态、模拟计算及校正方法均与 2.1 节相同。图 4 展示了不同气溶胶类型、AOD 和 Albedo 条件下大气散射的影响(左子图)及校正效果(右子图)，由图可看出，特定气溶胶状态下，散射作用取决于 Albedo，Albedo 越小，CO₂ 反演误差越大；特定地表反照率条件下，散射作用取决于 AOD 和气溶胶类型的偏差，AOD 增大、气溶胶类型偏差越大，对应的 CO₂ 反演误差也越大。地表反射率减小和 AOD 增大，两者都会降低太阳光穿过整层大气的辐射量，使得直射辐射所占比例减小，从而 CO₂ 受散射影响加剧。然而这些误差源的影响经过校正后得以明显降低，对于乡村型和沙漠型气溶胶，散射影响最剧烈的情况下，CO₂ 反演误差高达约 8% 时，对应的校正误差也不超过 1%；对于城市型气溶胶，散射影响最剧烈的情况下，CO₂ 反演误差高



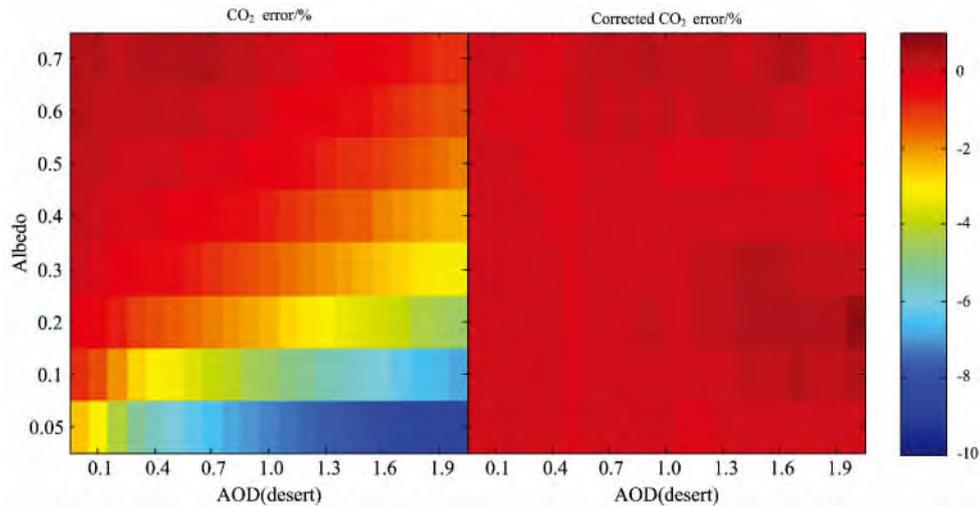


Fig 4 Effect of AOD and Albedo on CO₂ retrieval and the correction results

(a): Rural aerosol; (b): Urban aerosol; (c): Desert aerosol

达约 10% 时, 对应的校正误差也不超过 2%, 由图 4 可见, 校正效果非常明显。校正效果随气溶胶类型偏差增强而变弱的现象及原因分析, 可参见 2.1 节相关内容。

3 结 论

通过 AOD 和 Albedo 两个散射相关参数来考虑大气 CO₂ 反演中的散射影响, 利用三光谱带综合信息结合改进的优化反演策略, 足以同步获取这两个参数, 实现散射效应的校正。利用不同 AOD 和 Albedo 模拟散射影响, 极端散射情况

下 CO₂ 反演误差高达 8%, 而校正方法可将误差降低到 1% 内; 利用不同气溶胶类型来模拟散射影响, 则校正效果取决于气溶胶类型相对于先验知识的偏差, 在城市型气溶胶影响高达 10% 的情况下, 校正方法可将误差控制在 2% 内。校正方法对 AOD 和 Albedo 对应的散射影响校正效果明显, 但易受气溶胶类型的影响, 这是由于仅 AOD 参与反演, 不能完全体现气溶胶的散射作用。若由完整的光学特征参数 AOD、单次散射反照率和粒子相函数描述气溶胶散射效应, 校正效果将进一步改进。

References

- [1] Patra P K, Maksyutov S, Sasano Y, et al. *Journal of Geophysical Research*, 2003, 108: D24.
- [2] Houweling S, Hartmann W, Aben I, et al. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2005, 5: 3003.
- [3] Uchino O, Kikuchi N, Sakai T, et al. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2012, 12: 3393.
- [4] Aben I, Hasekamp O, Hartmann W. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2007, 104: 450.
- [5] Maksyutov S, Nakatsuka Y, Valsala V, et al. *Algorithms for Carbon Flux Examination Using GOSAT Observation Data*. <http://www.cger.nies.go.jp/publications/report/i092/i092.pdf>, 2010.
- [6] Yoshida Y, Eguchi N, Ota Y, et al. *Algorithm Theoretical Basis Document for CO₂ and CH₄ Column Amounts Retrieval from GOSAT TANSO-FTS NIES*, GOSAT project Document (NIES-GOSAT-PO-014), 2010.
- [7] Baker D F, Bösch H, Doney S C. *Atmospheric Chemistry and Physics Discuss.*, 2008, 8: 20051.
- [8] Crisp D, Bösch H, Brown L, et al. http://disc.sci.gsfc.nasa.gov/acdisc/documentation/OCO-2_L2_FP_ATBD_v1_rev4_Nov10.pdf, 2010.
- [9] Bril A, Oshchepkov S, Yokota T, et al. *Applied Optics*, 2007, 46: 2460.
- [10] Oshchepkov S, Bril A, Yokota T. *Journal of Geophysical Research*, 2008, 113: D23210.
- [11] Yoshida Y, Ota Y, Eguchi N, et al. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2011, 4: 717.
- [12] O'Dell C W, Connor B, Bösch H, et al. *Atmospheric Measurement Techniques Discuss*, 2011, 4: 6097.
- [13] Reuter M, Buchwitz M, Schneising O, et al. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2010, 3: 209.
- [14] Rodgers C D. *Inverse Methods of Atmospheric Sounding: Theory and Practice*. Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd; 2000. 93.

Correction Method of Atmospheric Scattering Effect Based on Three Spectrum Bands

YE Han-han, WANG Xian-hua*, JIANG Xin-hua, BU Ting-ting

Key Laboratory of Optical Calibration and Characterization, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China

Abstract As a major error of CO₂ retrieval, atmospheric scattering effect hampers the application of satellite products. Effect of aerosol and combined effect of aerosol and ground surface are important source of atmospheric scattering, so it needs comprehensive consideration of scattering effect from aerosol and ground surface. Based on the continuum, strong and weak absorption part of three spectrum bands O₂-A, CO₂ 1.6 μm and 2.06 μm, information of aerosol and albedo was analyzed, and improved full physics retrieval method was proposed, which can retrieve aerosol and albedo simultaneously to correct the scattering effect. Simulation study on CO₂ error caused by aerosol and ground surface albedo CO₂ error by correction method was carried out. CO₂ error caused by aerosol optical depth and ground surface albedo can reach up to 8%, and CO₂ error caused by different types of aerosol can reach up to 10%, while these two types of error can be controlled within 1% and 2% separately by this correction method, which shows that the method can correct the scattering effect effectively. Through evaluation of the results, the potential of this method for high precision satellite data retrieval is obvious, meanwhile, some problems which need to be noticed in real application were also pointed out.

Keywords CO₂; Retrieval; Scattering effect; Correction method; Three spectrum bands

* Corresponding author

(Received Dec. 19, 2014; accepted Apr. 12, 2015)

第四届亚洲二维相关光谱学术会议 (第一轮通知)

第四届二维相关光谱学术会议,作为中国光学学会和中国化学会主办的“第19届全国分子光谱学学术会议”暨由中国光学学会光谱专业委员会主办的“2016年光谱年会”的卫星会,将于2016年10月28—31日在福建省福州市召开,会议由中国科学院福建物质结构研究所,福州大学和闽江学院联合承办,北京大学协办。

二维相关光谱是由美国特拉华大学的 Isao Noda 教授在上世纪八十年代末发展出的强有力的光谱学方法,经近三十年的发展,已成为分子光谱学科的一个重要分支,并在诸多学科中得到了广泛应用。本次会议将展现二维相关光谱在国内外的研究进展,回顾其在过去三十年的发展历程,展望其未来的发展蓝图。会议将邀请二维相关光谱的创始人美国特拉华大学的 Isao Noda 教授做大会报告,并邀请在二维相关光谱领域做出重要贡献的德国杜伊斯堡大学的 Heinz, W. Siesler 教授,韩国江原国立大学 Young Mee Jung 教授和国内在此领域从事研究工作的专家学者做主题报告。同时会议还将组织各类讨论和学术交流。组委会诚挚的欢迎国内外光谱界的同仁莅临本届盛会,交流最新研究成果,真诚期待大家2016年金秋10月相聚在历史文化名城——福州。

征文范围

二维相关光谱理论研究,方法学研究及在物理、化学、生物、材料科学、表面/界面科学、医药、环境、工业过程、催化学、地学、农林及其它领域的基础理论与应用研究的最新科研成果。

论文摘要要求

1. 论文内容必须是未在期刊杂志上发表过或其它全国或国际会议宣读过的创新性研究结果。
2. 提交论文扩展摘要一份,纸张大小用 A4 纸版式(用 Office word 软件排版,页边距为 2 cm,单倍行距)。
3. 扩展摘要按以下顺序排版:文题(三号黑体居中);作者(四号仿宋居中);单位(小四号宋体居中,含所在省市、邮政编码、电子邮箱(如有));论文的创新性,研究意义与结果(五号宋体);关键词和主要参考文献(自版芯左起,五号宋体)。文稿中可穿插主要论据的图、表和照片,图题、图注和表题、表注一律用英文表述。摘要的字数,包括图,表,参考文献,总共不能超过 2 个页面。

(下转 630 页)