

DOI: 10.3969/j.issn.1673-6141.2011.03.007

光学遥感

二氧化硫浓度高精度反演的敏感性研究

叶函函, 王先华, 吴军, 方勇华, 熊伟, 崔方晓

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

摘要: 超光谱技术是高精度反演大气二氧化硫浓度的基础, 针对超光谱技术的特点和大气二氧化硫浓度反演精度的要求, 在探索大气二氧化硫的吸收特性后, 选择了一个适合二氧化硫浓度探测的波段进行研究。根据反演原理和目前所使用的反演方法, 利用前向模型LBLRTM着重分析如下四个敏感因素对反演精度的影响: 光谱分辨率、海拔高度、二氧化硫初始浓度和地表反照率。研究结果表明, 在大气二氧化硫浓度的反演过程中这些因素对精度的提高存在一定的影响。

关键词: 二氧化硫; 反演; 敏感因素; 前向模型; 高精度

中图分类号: O433

文献标识码: A

文献编号: 1673-6141(2011)03-0208-07

Sensitivity for Retrieval of Atmospheric Column Carbon Dioxide with High Accuracy

YE Han-han, WANG Xian-hua, WU Jun, FANG Yong-hua, XIONG Wei, CUI Fang-xiao

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

Abstract: Hyperspectral technology is the base for CO₂ retrieval with high accuracy. With the characteristics of hyperspectral technology and the requirement of accuracy of atmospheric column CO₂ retrieval, after absorption features analysis of atmospheric CO₂, an absorption band appropriate for research is selected. On the basis of retrieval principle and retrieval method, effects of spectral resolution, terrain height, initial value of CO₂ column and surface albedo on retrieval accuracy are investigated using forward model LBLRTM. The result demonstrates that in the process of CO₂ retrieval thoughtful considerations are desired for sensitive factors above-mentioned so as to improve the accuracy.

Key words: CO₂; retrieval; sensitivity study; forward model; high accuracy

收稿日期: 2010-04-23; 修改日期: 2010-08-17

基金项目: 中国科学院重要方向创新项目 (KGCX2-YW-418) 资助

E-mail: yehhgo@gmail.com

1 引言

二氧化碳是最重要的温室气体, 全球大气中二氧化碳的浓度已经从前工业化社会的约 280 ppm 增加到 2005 年的 379 ppm。根据冰芯样品测定, 过去 65 万年的自然浓度范围在 180~300 ppm 之间, 而 2005 年全球大气中的二氧化碳浓度已经超过了这一范围。虽然按年份看存在一些波动, 在过去十年里, 二氧化碳的年增长率 (1995~2005 年每年平均增加 1.9 ppm) 也是人类对大气进行连续直接观测以来最高的^[1]。大约四分之三的人为二氧化碳来自于化石的燃烧, 而另一个明显的原因则是土地用途的变化, 特别是森林的大量砍伐^[2]。近百年来全球气候的逐渐变暖与二氧化碳排放量的增加关系密切, 但两者之间的关系仍未明晰, 关键原因在于对大气二氧化碳源汇的把握上, 因此评估未来全球变暖趋势的一个重要部分就是实现对全球二氧化碳的高精度探测, 而这就需要充分依靠高灵敏度和高光谱分辨率的遥感探测技术, 且综合考虑多种有影响的因素将有助于

提高二氧化碳浓度的反演精度。

超光谱技术是新一代光电探测技术, 兴起于 20 世纪 80 年代, 90 年代后形成研发热潮, 至今仍在迅速发展之中。为适应超光谱技术的发展和大气二氧化碳探测的需求, 本文从反演理论和大气辐射传输模型着手, 分析了若干因素对反演精度的影响, 为发展反演技术、提高反演精度提供了依据。

2 二氧化碳浓度反演理论

2.1 大气气体成分吸收特性

太阳辐射穿过大气层时, 必然受到大气反射、吸收和折射等多重作用, 在不同的电磁波段其通过大气后衰减的程度是不一样的。大气吸收是指除去太阳光穿过大气达到地面、反射返回太空的部分。在红外区, 大气分子有许多丰富的吸收线, 太阳光经过整层大气后就带有其中大气分子含量的信息, 从中就能获得吸收气体的总含量和高度分布等信息。大气中的水汽、二氧化碳和臭氧对太阳辐射的吸收最为显著, 如图 1 所示。

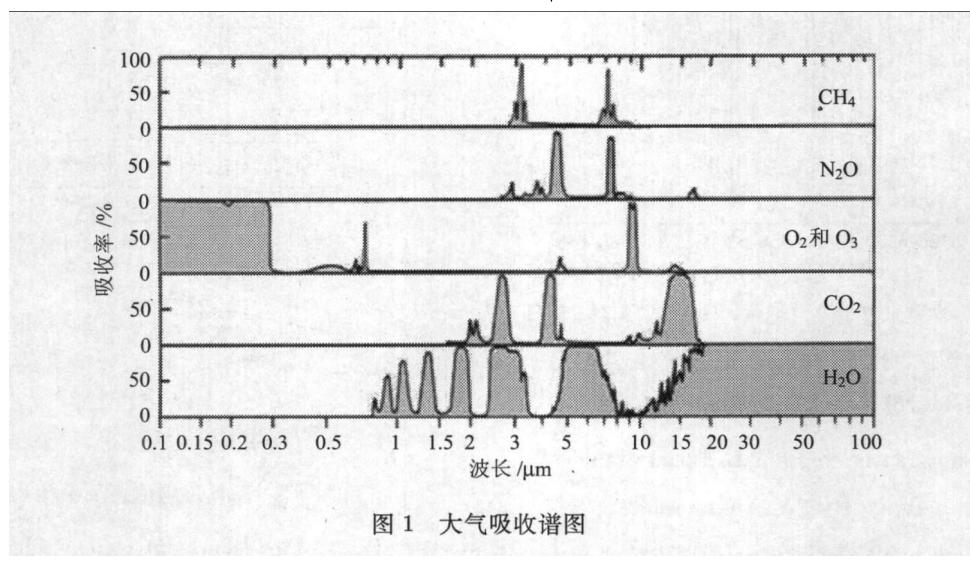


图 1 大气吸收谱图

Fig.1 Atmospheric absorption spectrum

2.2 二氧化碳观测波段的选择

一般来说, 用于气体浓度反演的波段应该具有较强的主动或被动辐射强度, 从而有利于实现高信噪比信号的探测; 而在气体吸收方面, 其强

度应适中, 不会因为吸收太弱而对浓度的变化不敏感, 也不会因为太强而易于饱和。因此, 尽管二氧化碳在中远红外具有很强的吸收, 但这却不是很好的波段, 相反近红外对反演二氧化碳浓度却

非常有利。我们注意到近红外波段的 $1.58 \mu\text{m}$ (参见图 2), 可以使太阳辐射穿过整层大气并被地表反射回太空, 因此大气顶层的上行辐射对二氧化碳总含量的变化很敏感。由于太阳辐射通量足够高, 这样可以利用较少的积分时间在高光谱分辨率的状态下获得高信噪比的信号, 同时, 这一波段还存在着受大气温度和水汽的干扰都很小的优点^[3], 所以我们选择这一波段来反演大气二氧化碳的浓度。

这一吸收带为振转谱带, 在其中心约 6347.85 cm^{-1} 处被分为左边的 P 支和右边的 R 支。每支内的吸收谱线几乎都均匀分布, 但高频支(R 支)内的谱线间隔要略窄于低频支(P 支)。在检测大气二氧化碳总含量方面, 此吸收带与近红外波段的其它二氧化碳振转谱带相比, 能提供足够高的辐射信号, 而且, 这个振动谱带内几乎没有其它气体的干扰。

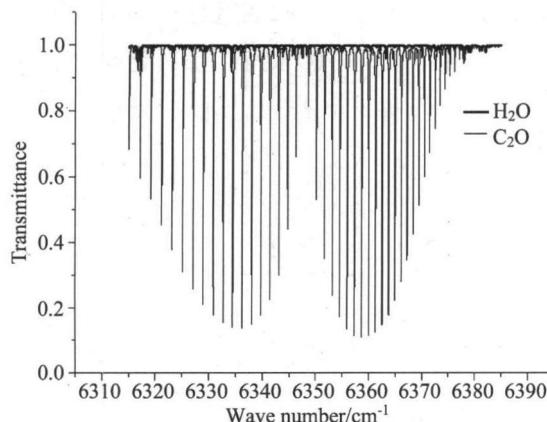


图 2 $1.58 \mu\text{m}$ 波段二氧化碳(细线)与水汽(粗线)沿同一路径(大气顶至地面)的透过率(光谱分辨率约 $1.5 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$, 计算使用的是 1976 年美国标准大气)

Fig.2 One-way (space to ground) transmittance of CO_2 (in light line) and H_2O (in bold line) at nadir in the $1.58 \mu\text{m}$ band. The spectral resolution is $1.5 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$. The 1976 U.S. Standard Atmosphere is used in the calculation

2.3 反演原理与基本反演方法

前向模型 F 描述了测量过程的物理性质, 是控制实际大气中辐射传输过程的函数, 并在测量

的大气顶出射辐亮度向量 y 与状态向量 x 之间建立联系

$$y = F(x, b) + \varepsilon, \quad (1)$$

其中 ε 是探测仪器的测量误差, b 代表辅助的非需反演参数, x 包含所有的需反演参数, 此处代表大气二氧化碳浓度。除了需反演参数外, 模型运算还需要 b 中所包含的非需反演参数, 如气体分子吸收横截面或可以从其它测量结果中精确获得的大气参数。

我们将观测亮度谱 y^m 与前向模型计算的大气顶出射辐亮度谱 $y(x)$ 进行拟合(本文使用的前向模型为 LBLRTM, 在第三部分详述), 通过调整需反演参数使得两者之间的偏差达到最小

$$J(x) = \|y^m - y(x)\| \rightarrow \min, \quad (2)$$

此时的需反演参数值即为所求, 反演流程图参见图 3。

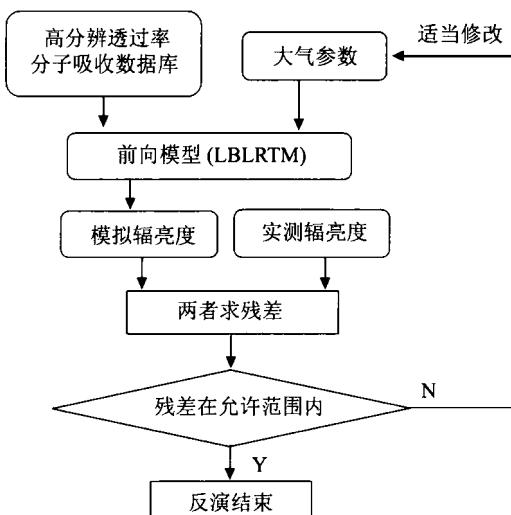


图 3 二氧化碳浓度反演流程图

Fig.3 Flow chart of CO_2 column retrieval

根据一个简单的迭代反演算法便可获得所需的二氧化碳浓度, 具体步骤如下:

- 1) 取大气二氧化碳的初始浓度为 x_0 ; 将 x_0 带入前向模型进行计算得到模拟的大气顶出射辐亮度 y_0 ;

- 2) 将模拟大气顶出射辐亮度 y_0 与测量值 y^m 进行比较, 如果残差 $R_0 = |y^m - y_0|$ 小于所允许的误差上限(通常取为仪器噪声), 则 x_0 就是所求的值;
- 3) 如果残差 R_0 大于所允许的误差上限, 则适量增加或减少初始猜值浓度, 再从 2) 重复运算比较, 直至新的残差满足要求, 则新的初始浓度值 x_n 即为所求值。

3 利用前向模型研究反演敏感性

逐线积分辐射传输模型(LBLRTM)^[4]是由英国剑桥环境研究公司开发的, 它是在美国空军菲利浦实验室开发的FASCODE上发展起来的一种高效、精确的辐射传输算法。它可以高分辨率、高精度地计算大气辐射和大气光谱透过率, 可在反演过程中用作前向模型, 也可在高光谱分辨率探测器的设计进行大气顶出射辐亮度模拟。

LBLRTM有如下几个重要特点^[5]:

- 1) 它在计算所有大气层的吸收时采用 Voigt 线形;
- 2) 它融合了自增宽和外增宽的水汽连续吸收模型 MT_CKD, 这个模型也融合了二氧化碳的连续吸收及其它气体的连续吸收;
- 3) 从高分辨透过率分子吸收数据库 HITRAN 中获取谱线和吸收截面资料;
- 4) LBLRTM 算法的精度约为 0.5%, 已经用实验观测数据进行模拟验证过;
- 5) 可计算透过率、光学厚度、衰减程度、辐射率和辐射等效亮温。

为了研究 $1.58\ \mu\text{m}$ 波段反演大气二氧化碳的敏感性, 我们按照表 1 所示的基本输入参数与模拟输出参数来设置前向模型, 从光谱分辨率、海拔高度、二氧化碳初始浓度值和地表反照率几个方面来研究前行模型的输出结果以进行说明。

表 1 前向模型的基本输入和输出参数列表

Table 1 Input and output parameters of forward model

输入	输出
1976 年美国标准大气, 0~120 km	波段范围: $6315\sim6385\ \text{cm}^{-1}$
二氧化碳混合比: 330 ppmv	扫描函数: 三角函数
朗伯体、表面反射率: 0.3	光谱分辨率: $0.07\ \text{cm}^{-1}$
晴空无气溶胶	光谱采样间隔: $0.0015\ \text{cm}^{-1}$
太阳天顶角: 30°	
卫星观测模式: 星下观测	

3.1 光谱分辨率

在 $288.2\ \text{K}$ 的参考温度和 $1013\ \text{hPa}$ 的气压状态下, 二氧化碳振转谱带的吸收带宽约等于 $0.07\ \text{cm}^{-1}$ 。由于光谱分辨率和辐射探测灵敏度不可兼得, 所以在仪器设计过程中要注意两者的均衡。我们利用一个三角扫描函数卷积前向模型计算得到模拟光谱, 使其与仪器光谱分辨率吻合。在本研究中, 我们选择了多种不同半高全宽($0.0014\sim0.3\ \text{cm}^{-1}$)的三角函数对模拟光谱进行卷积, 结果发现 $0.07\ \text{cm}^{-1}$ 分辨率的光谱较能体现二氧化碳的

光谱特征, 保持了较高的辐亮度电平和较好的辐射探测灵敏度。

敏感度定义公式如下

$$S = \frac{\Delta R}{R_0} = \frac{R' - R_0}{R_0}, \quad (3)$$

式中 S(%) 表示敏感度, R_0 表示原始大气顶出射辐亮度, R' 表示二氧化碳浓度增加 1 ppm 后的大气顶出射辐亮度。

3.2 海拔高度

地表压力的变化对二氧化碳浓度监测的影响

主要表现在两个方面：模型模拟显示地形高度和地表压力（气候系统）的变化对反演二氧化碳总含量存在较大的影响，这已远远超过地表二氧化碳

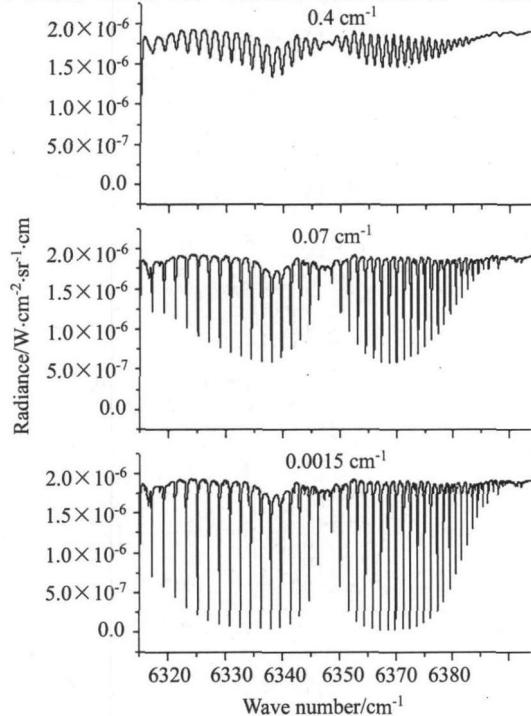


图 4 不同光谱分辨率的星下观测的大气顶出射辐亮度

Fig.4 Top of the atmosphere radiance for nadir viewing in different spectral resolutions

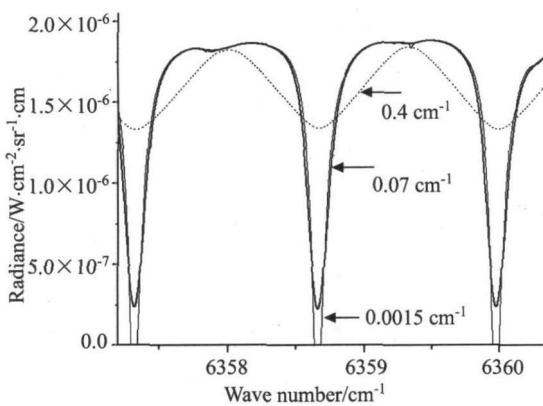


图 5 放大的波段 $6357\sim6360\text{ cm}^{-1}$ 的大气顶出射辐亮度谱

Fig.5 Top of the atmosphere radiances of Fig.4 zoom in $6357\sim6360\text{ cm}^{-1}$

变化带来的影响；另一方面是压力的变化会通过压力展宽对二氧化碳气体分子的吸收线型产生影响^[4]。利用前向模型模拟计算大气顶出射辐亮度

对不同高度大气层上 1 ppm 二氧化碳变化的敏感度，其结果如图 7 所示。

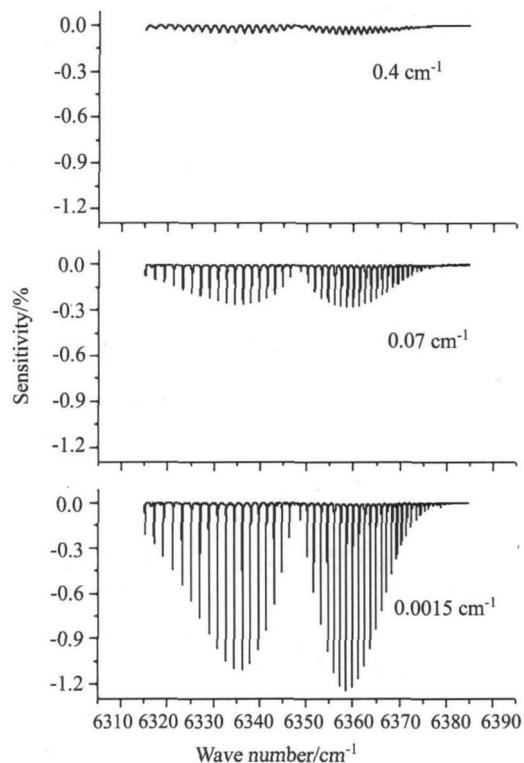


图 6 大气顶出射辐亮度对不同光谱分辨率条件下 1 ppm 二氧化碳变化的敏感度

Fig.6 Sensitivity of top of the atmosphere radiance to 1 ppm CO_2 change in different spectral resolutions

由图可见 2 km 附近大气层的浓度变化对大气顶出射辐亮度的影响最大，高度越向上的大气层则影响越小。大气顶出射辐亮度对边界层二氧化碳的变化非常敏感度，且它的变化完全来自于 19 km 内大气层上二氧化碳浓度变化的贡献，19 km 以上大气层的浓度变化对大气顶出射辐亮度几乎没有影响。

3.3 初始浓度估计值

采用二氧化碳浓度廓线的方式有：76 年美国标准大气 (USSTD)、中纬度夏季大气 (MLS)、中纬度冬季大气 (MLW)、亚极冬季大气 (SAW)、亚极夏季大气 (SAS) 和热带大气 (TRP) 等。本文以 76 年美国标准大气中二氧化碳浓度 (330 ppm) 为参考浓度，再取 340~420 ppm 间隔 10 ppm 的 9 个值为初始浓度与之比较。二氧化碳变化 1 ppm

时, 不同二氧化碳初始浓度下所对应的大气顶出射辐亮度的变化量如下表所示。大气中二氧化碳浓度越低, 则大气顶出射辐亮度对二氧化碳的变

化越敏感, 对大气顶出射辐亮度变化的贡献也越大。初始估计值对反演结果是有一定影响的, 初始值越接近真值, 反演结果越好。

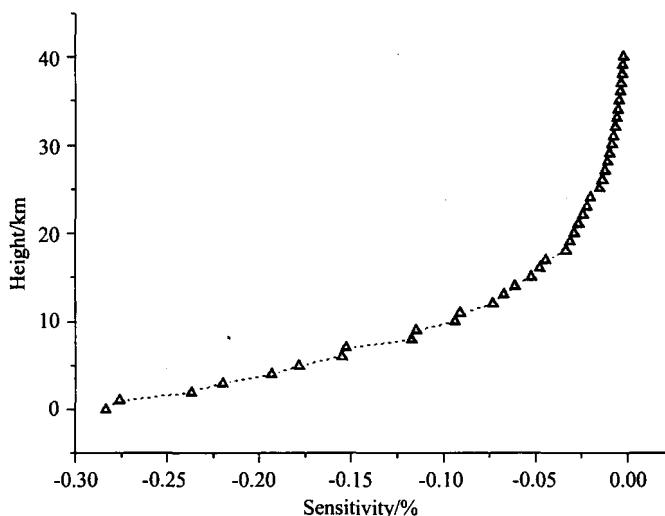


图 7 大气顶出射辐亮度对不同高度大气层上 1 ppm 二氧化碳变化的敏感度

Fig.7 Sensitivity of top of the atmosphere radiance to 1 ppm CO₂ change in different heights

表 2 大气顶出射辐亮度对不同 CO₂ 初始浓度条件下 1 ppm CO₂ 变化的敏感度

Table 2 Sensitivity of top of the atmosphere radiance to 1 ppm CO₂ change in different CO₂ initial values

CO ₂ 初始值 (ppm)	辐亮度变化 (W·cm ⁻² ·sr ⁻¹ ·cm)	敏感度 (%)
330(参考)	-1.64×10^{-9}	-0.2832
340	-1.57×10^{-9}	-0.28
350	-1.52×10^{-9}	-0.2771
360	-1.46×10^{-9}	-0.2743
370	-1.41×10^{-9}	-0.2717
380	-1.35×10^{-9}	-0.2688
390	-1.31×10^{-9}	-0.2659
400	-1.26×10^{-9}	-0.2637
410	-1.22×10^{-9}	-0.2612
420	-1.17×10^{-9}	-0.2589

注: 辐亮度变化是指二氧化碳变化 1 ppm 引起的大气顶出射辐亮度变化;

敏感度是指大气顶出射辐亮度对 1 ppm 二氧化碳变化量的敏感度。

3.4 地表反照率

地表反照率是地表对太阳辐射的反射辐射通量密度与总入射通量密度之比。它也是影响大气二

氧化碳浓度反演的一个重要因素。取反照率 0.3、0.2、0.1、0.05、0.03 进行比较, 由表 3 可得, 地表反照率越高, 则 1.63779×10^{-9} 的大气顶出射

表 3 相同的大气顶出射辐亮度变化量在不同地表反照率条件下所对应的 CO₂ 变化量Table 3 Change of CO₂ due to top of the atmosphere radiance change(1.63779×10^{-9}) in different albedo

反照率	辐亮度变化 (W·cm ⁻² ·sr ⁻¹ ·cm)	二氧化碳变化量 (ppm)
0.3(参考)	1.63779×10^{-9}	1.0
0.2	1.63779×10^{-9}	1.5
0.1	1.63779×10^{-9}	3.0
0.05	1.63779×10^{-9}	6.0
0.03	1.63779×10^{-9}	10.0

注: 二氧化碳变化量指大气顶出射辐亮度变化 1.63779×10^{-9} 时,

在各种不同地表反照率的情况下, 分别对应的二氧化碳变化量.

辐亮度变化所对应的二氧化碳变化量越小, 反之则越大。

4 总 结

本文基于 0.07 cm^{-1} 的光谱分辨率和LBLRTM 作为大气辐射传输的前向模型进行分析, 分析结果显示, 诸如海拔高度、初始浓度估计值和地表反照率等的参数对前向模型的计算结果影响较大, 直接地影响了反演大气二氧化碳浓度的精度。其中, 地表反射率是影响最大的因素, 在同一大气顶出射辐亮度变化值情况下, 不同反照率条件对应的二氧化碳变换量相差很大, 如果忽视它的影响, 反演精度将大大下降; 其次, 大气顶出射辐亮度对不同高度大气层上 1 ppm 二氧化碳变化的敏感度也不同, 各高度层中, 大气顶出射辐亮度对 2 km 内大气层上二氧化碳的变化甚为敏感, 二氧化碳变化 1 ppm 时, 此敏感度就已达到 0.2%~0.3%; 最后, 不同的二氧化碳初始浓度条件下, 相同二氧化碳浓度变化对应的大气顶出射辐射亮度变化也是不同的, 若大气中二氧化碳浓度越低, 大气顶出射辐亮度对二氧化碳的变化就越敏感, 通常不同的二氧化碳初始浓度引起的反演误差超过 1%。

尽管本文是对有限条件的模拟与分析, 但由其表现出来的现象可以看出, 在实际的大气二氧化碳浓度反演过程中, 只有综合考虑并控制这些影响因素的精度, 才能减小这些它们对反演结果的影响。本文介绍的反演算法对前向模型的依赖性较大且算法本身过于简单, 在克服反演过程中影响因素的能力上较弱, 因此开展基于多因素的大气二氧化碳反演方法势在必行。

参 考 文 献:

- [1] Climate Change 2007: The Physical Science Basis Summary for Policymakers [R]. Intergovernmental Panel on Climate Change(IPCC).
- [2] IPCC Third Assessment Report-Climate Change 2001 [R].
- [3] Yang Z H, Toon G C, Margolis J S, et al. Atmospheric CO₂ retrieved from ground-based near IR solar spectra [J]. *Geophys. Res. Lett.*, 2002, **29**(9): 53.1-53.4.
- [4] Mao J P, Kawa S R. Sensitivity Studies for space-based measurement of atmospheric total column carbon dioxide by reflected sunlight [J]. *Appl. Opt.*, 2004, **43**(4): 914-927.
- [5] <http://rtweb.aer.com/lblrmt.html> [OL].

作者简介: 叶函函 (1987-), 女, 安徽巢湖人, 博士研究生, 研究方向为光学遥感。