中国科学: 地球科学 2013 年 第 43 卷 第 12 期: 2062 ~ 2071
www.scichina.com earth.scichina.com
《中国科学》杂志社
SCIENCE CHINA PRESS

论 文

基于 PPDF 方法的气溶胶散射效应参数化模型精度评估

邹铭敏[①②], 陈良富[①*], 陶金花[①], 苏林[①], 范萌[①②], 张莹[①], 韩冬[③]

① 中国科学院遥感应用研究所遥感科学国家重点实验室, 北京 100101;
② 中国科学院大学地球科学学院, 北京 100049;
③ 青岛大学师范学院, 青岛 266071
* 联系人, E-mail: lfchen@irsa.ac.cn

收稿日期: 2013-01-22; 接受日期: 2013-05-22; 网络版发表日期: 2013-11-25
国家自然科学基金重点项目(批准号: 41130528)资助

摘要 本文讨论分析了 O_2-A 带气溶胶散射效应的估算. 利用基于等效理论的光子路径分布概率函数(PPDF)方法, 将散射效应对大气有效透过率的影响参数化, 通过模拟反演实验分析研究 PPDF 方法的有效性. 首先利用正向模型模拟四种不同气溶胶模式分布情况下 O_2-A 带的卫星观测; 然后利用非线性最优化迭代方法反演 PPDF 因子, 利用反演得到的 PPDF 因子重构观测值, 最后比对分析了重构观测值和模拟观测真值之间的差异. 通过反演实验, 验证了 PPDF 方法对于气溶胶散射效应估算的有效性; 同时也表明 O_2-A 带可以作为痕量气体卫星遥感的一个有效辅助观测通道.

关键词 PPDF O_2-A 带 气溶胶 反演

IPCC(2007)认为, 近 100 年来由于全球大气中 CO_2 浓度的迅速增加导致全球气候变暖. 研究表明大气中 CO_2 的浓度及其空间分布是全球气候变化评估中的主要不确定性因素之一. 由于 CO_2 主要的源和汇均在边界层大气(Crisp 等, 2004), 所以边界层大气 CO_2 浓度及其分布成为全球变化关注的热点. 传统的 CO_2 浓度地基观测网点分布稀疏, 观测数据不能满足区域尺度下 CO_2 全球分布制图的需求, 基于卫星平台的观测方式则可以提供区域尺度的连续遥感数据. 卫星遥感 CO_2 有热红外和近红外两种方式, 由于热红外观测数据对边界层 CO_2 浓度变化不敏感, 因此近红外 CO_2 卫星遥感成为当前研究热点测. 然而观测的精度水平对近红外 CO_2 卫星遥感来说是一个巨大的挑战. 研究指出(Miller 等, 2007): CO_2 的源汇研究需要 CO_2 垂直干空气混合比浓度的卫星观测精度达到 0.3%~0.5%(1~2 ppm), 而短波红外波段卫星观测受气溶胶、卷云影响大, 散射会严重影响 CO_2 的观测反演精度. Connor 等(2008)研究指出当气溶胶光学厚度从 0.01 增大到 0.3, 亮地表条件下 CO_2 在 1.6 μm 观测波段的观测值变化幅度最大将达到 50%; Schneising 等(2008)研究表明, 光学厚度为 0.03、云高为 12 km 的卷云将给 CO_2 干空气垂直混合比浓度带来 8.8%的错误估计; Aben 等(2007)研究发现, 在反射率为 0.05 的暗地表条件下, 光学厚度为 0.05 的卷云会导致 CO_2 浓度多达 8%的低估, 当地表反射率为 0.5 时, 将有 1%的浓度低估; Houweling 等(2005)指出,

中文引用格式: 邹铭敏, 陈良富, 陶金花, 等. 基于 PPDF 方法的气溶胶散射效应参数化模型精度评估. 中国科学: 地球科学, 2013, 43: 2062–2071
英文引用格式: Zou M M, Chen L F, Tao J H, et al. Accuracy analysis of PPDF-based method to parameterize aerosol scattering effect. Science China: Earth Sciences, 2013, doi: 10.1007/s11430-013-4782-3

SCIAMACHY 传感器的 CO_2 浓度产品在撒哈拉沙漠地区高达 10%(约 37 ppm)的非正常变化幅度, 主要是受沙尘型气溶胶的影响. 由于我国气溶胶光学厚度值比较高、气溶胶成分复杂(Luo 等, 2001), 因此气溶胶散射效应是中国地区短波近红外遥感所面临的一个重要问题, 如何有效地校正气溶胶散射是实现我国 CO_2 高精度卫星遥感的关键.

为了校正大气散射对 CO_2 观测的影响, 此前欧空局的 SCIAMACHY 载荷、日本 GOSAT 卫星和计划于 2014 年发射的美国 OCO-2 卫星, 都设计包含了 0.76 μm 的 O_2-A 带、2.0 μmCO_2 的强吸收通道和 1.6 μm CO_2 的弱吸收通道进行同步观测, 辅助解决 CO_2 观测过程中的散射问题(Crisp 等, 2004; Yokota 等, 2004). 其中 SCIAMACHY 载荷数据的 CO_2 反演算法基于差分吸收光谱技术(DOAS)(Buchwitz 和 Burrows, 2004)采用多项式拟合的方式来去除散射效应. 但气溶胶多次散射引起的光子传输路径的改变无法通过多项式拟合的方式来精确去除, 这也是撒哈拉沙漠地区 SCIAMACHY 数据反演 CO_2 出现约 10%误差的主要原因. 日本 GOSAT 卫星的 CO_2 浓度反演采用了基于光子路径分布概率函数 PPDF 方法(Bril 等, 2007), 该方法依据等效理论将颗粒物散射效应参数化, 利用 O_2-A 带观测数据反演得到参数化因子(即称 PPDF 因子), 然后利用该因子修正大气有效透过率模型来估算散射影响. 这种 O_2-A 带参数化方法虽避免了复杂的散射处理过程, 但 PPDF 因子对气溶胶散射效应描述的精度直接关系到 CO_2 浓度的反演精度, 因此针对 PPDF 方法在 O_2-A 带的气溶胶散射效应估算精度评价十分必要.

本文研究评估了基于 PPDF 方法的气溶胶散射效应估算精度. 首先介绍 PPDF 方法估算气溶胶散射效应的基本原理以及利用 O_2-A 带观测数据反演 PPDF 因子的方法; 然后利用多种气溶胶模式下的卫星观测模拟数据, 基于最优化估计方法反演估算 PPDF 因子; 最后评价这些 PPDF 因子对不同类型气溶胶多次散射效应描述的有效性.

1 大气散射的PPDF估算原理及PPDF因子反演

1.1 大气散射估算原理

光子路径分布概率函数(Photon Path-length probability Density Function, PPDF)方法(Bril 等, 2007, 2008; Oshchepkov 等, 2008, 2009)基于等效理论(Bennartz 和 Preusker, 2006), 在大气透过率模型中引入光子传输路径修正因子、散射发生层高度及层顶反射率、线型校正项等 4 个因子, 即 4 个 PPDF 因子, 将散射效应对大气有效透过率的影响进行参数化,以估算散射对大气透过率的影响. 根据所处理大气散射因子的差异, PPDF 方法有不同类型, 本文不考虑卷云, 关注仅有气溶胶散射效应的二层大气模型, 即将边界层含有气溶胶的大气看作一层大气, 记为 L1, 上部不含气溶胶的大气为另一层, 记为 L2. 这样整层大气的有效透过率模型可表示为如下形式:

$$\tilde{T} = \alpha \cdot T_2 + (1-\alpha)\cdot T_1 \cdot T_2, \tag{1}$$

式中, α表示经 L1 层反射进入传感器的光子数(未经地面反射)占入射太阳辐射的比例; T_1, T_2 分别表示 L1 层, L2 层的大气透过率, 可分别表示为

$$T_1 = \exp\left[-\left(\frac{1}{\mu}+\frac{1}{\mu_0}\right)\cdot(1+\delta)\cdot\tau_1\right], \tag{2}$$

$$T_2 = \exp\left[-\left(\frac{1}{\mu}+\frac{1}{\mu_0}\right)\cdot\tau_2\right]; \tag{3}$$

其中

$$\tau_1 = \int_0^{h_a} k(h)\mathrm{d}h,\ \tau_2 = \int_{h_a}^{h_{\mathrm{top}}} k(h)\mathrm{d}h,$$
$$\delta = \rho\cdot\exp\left[-\gamma\cdot(\tau_1+\tau_2)\right], \tag{4}$$

式中, μ, μ_0 分别表示太阳天顶角、观测天顶角的余弦; ρ表示光子在含有气溶胶 L1 层大气中传输的路径修正因子, 即修正散射而引起的光子传输路径; h_a 和 h_{top} 分别表示 L1 层顶和大气顶的高度; γ则是 L1 层大气内 PPDF 线型的校正因子. 这样α, h_a, ρ和γ就是加入到大气透过率模型中对气溶胶散射效应进行参数化描述的 4 个 PPDF 因子.

1.2 O_2-A 带反演 PPDF 因子方法

O_2-A 带反演 PPDF 因子使用非线性最优化估计方法(Rodgers, 2000), 反演迭代形式如下:

$$X_{i+1} = X_i + \left[S_a^{-1} + K_i^T\cdot S_\epsilon^{-1}\cdot K_i\right]^{-1} \cdot\left\{K_i^T\cdot S_\epsilon^{-1}\left[Y-F(X)\right] - S_a^{-1}\left[X_i - X_a\right]\right\}, \tag{5}$$

式中, X_α表示待反演参数向量初始猜值, 由 4 个 PPDF 因子组成; S_a 表示先验协方差矩阵; S_ϵ 表示观测误差

协方差矩阵; K_i表示 PPDF 因子的权重函数(Jacobian). 根据公式(1)~(3), 在一定的氧气垂直混合浓度廓线 $C_{\mathrm{O}_2}(h)$条件下, 4 个 PPDF 因子各自对应的权重 K_i 的计算形式为(Oshchepkov 等, 2008)

$$\frac{\partial\tilde{T}\left[X,C_{\mathrm{O}_2}(h)\right]}{\partial h_a}=T_2\cdot\left(\frac{1}{\mu}+\frac{1}{\mu_0}\right)\cdot k(h_a)\cdot\left[\alpha-(1-\alpha)\cdot T_1\cdot\exp\left(-\gamma\cdot(\tau_1+\tau_2)\right)\cdot\rho\right],$$

$$\frac{\partial\tilde{T}\left[X,C_{\mathrm{O}_2}(h)\right]}{\partial\alpha}=T_2-T_1T_2,$$

$$\frac{\partial\tilde{T}\left[X,C_{\mathrm{O}_2}(h)\right]}{\partial\rho}=(1-\alpha)\cdot T_1T_2\cdot\left[-\left(\frac{1}{\mu}+\frac{1}{\mu_0}\right)\cdot\tau_1\cdot\exp\left(-\gamma\cdot(\tau_1+\tau_2)\right)\right],$$

$$\frac{\partial\tilde{T}\left[X,C_{\mathrm{O}_2}(h)\right]}{\partial\gamma}=(1-\alpha)\cdot T_1T_2\cdot\left[\left(\frac{1}{\mu}+\frac{1}{\mu_0}\right)\cdot\tau_1\cdot(\tau_1+\tau_2)\cdot\delta\right]. \tag{6}$$

2 基于 PPDF 方法散射估算模拟实验与评价

基于O_2-A 带观测值反演 PPDF 的 4 个因子后, 即获得了气溶胶散射效应的参数化描述. 那么这 4 个 PPDF 因子对气溶胶散射效应的描述的有效性如何? 下文通过模拟实验来验证评估.

为了研究基于 PPDF 的气溶胶散射估算方法的有效性, 选用具有处理多次散射功能模块的大气辐射传输模型 SCIATRAN(Rozanov 等, 2005)模拟 O_2-A 带的卫星观测值. 考虑到中国地区气溶胶模式的多样性, 分别模拟了 4 种不同光学厚度气溶胶类型下的卫星观测的表观反射率, 观测方式为天底观测. 4 种气溶胶模式分别为 Lowtran 辐射传输模式中定义的秋冬季节模式乡村型气溶胶、春夏季节模式城市型气溶胶, 以及沙尘型气溶胶和烟尘气溶胶. 另外, 由于光子在含有气溶胶的边界层大气中的传输过程与地表状况相关, 地表反射率影响光子在气溶胶和地表间散射和反射, 因此针对每一种气溶胶类型, 模拟过程考虑了从亮地表到暗地表的不同地表反射率影响. 大气状态的其他参数参照美国 1976 标准大气模式. 图 1 给出了不同地表反射率条件下、每种气溶胶类型状况下 O_2-A 带的卫星观测的表观反射率值(图中的带标记蓝色谱线).

基于上述模拟的表观反射率, 利用 1.2 节描述的方法反演 PPDF 因子 (α,h_a,ρ,γ), 不同气溶胶类型、不同地表反射率条件时对应不同的 PPDF 因子反演结果. 将反演得到的 4 个 PPDF 因子结果代入公式(1), 就可以获得参数化了气溶胶散射效应的大气有效透过率模型. 利用此大气有效透过率模型正向计算的观测值(图中绿色谱线), 称之为反演重构的观测值, 将其与用 SCIATRAN 模型模拟的'实际观测值'进行比较, 分析说明 PPDF 方法气溶胶散射效应估算的有效性. 作为参照, 图中还给出了同样大气状态参数下, 没有气溶胶散射时的模拟观测(图中黑色谱线).

由图 1 可以看出, 利用反演 PPDF 因子修正大气有效透过率模型后重构的 O_2-A 带的卫星观测值, 与模拟观测真值之间差别很小. 下面利用误差统计方式更直观地评价 PPDF 方法针对气溶胶多次散射效应描述的有效性. 统计形式如下(Oshchepkov 等, 2009):

$$residua=\frac{\hat{R}(\mathrm{PPDF})-R}{\max(R)}\times100\%, \tag{7}$$

式中, 表示 $\hat{R}$ 利用 PPDF 因子修正大气有效透过率模型后重构的观测值, R 表示实际观测值. 对应图 1, 图 2 给出了各种场景下不同波数位置处重构误差, 以及误差绝对值的平均值(mean). 表 1 给出了不同气溶胶类型和不同地表反射条件下的误差百分比绝对值的统计平均.

由统计结果可知, PPDF 方法估算秋冬季模式乡村型气溶胶和春夏季模式城市型气溶胶的散射效应的结果较好, 在不同地表反射率条件下的估算误差百分比绝对值的均值都在 0.32%以内; 对于沙尘型和烟尘型气溶胶, 估算精度有所降低, 但误差水平依旧在 0.52%以内, 其中对于沙尘型气溶胶, 当地表反射率为 0.6 时估算误差甚至达到 0.085%. 这就验证了基于 PPDF 方法的气溶胶散射效应估算的有效性. 同时从统计结果可以看到, 地表反射率对估算结果影响明显, 这是因为地表反射率直接关系到光子在气溶胶颗粒散射和地表反射作用下的传输过程. 对春夏

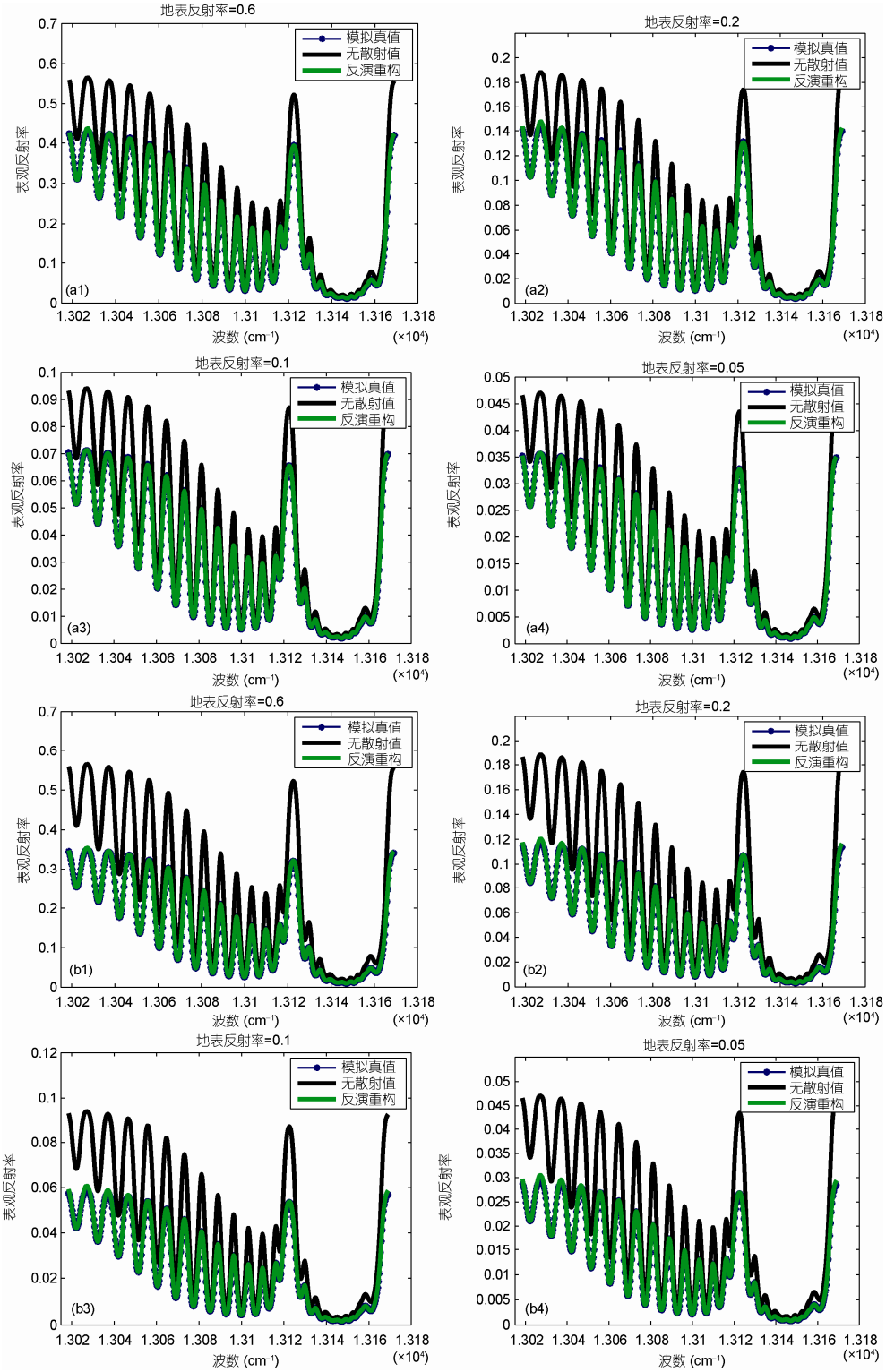
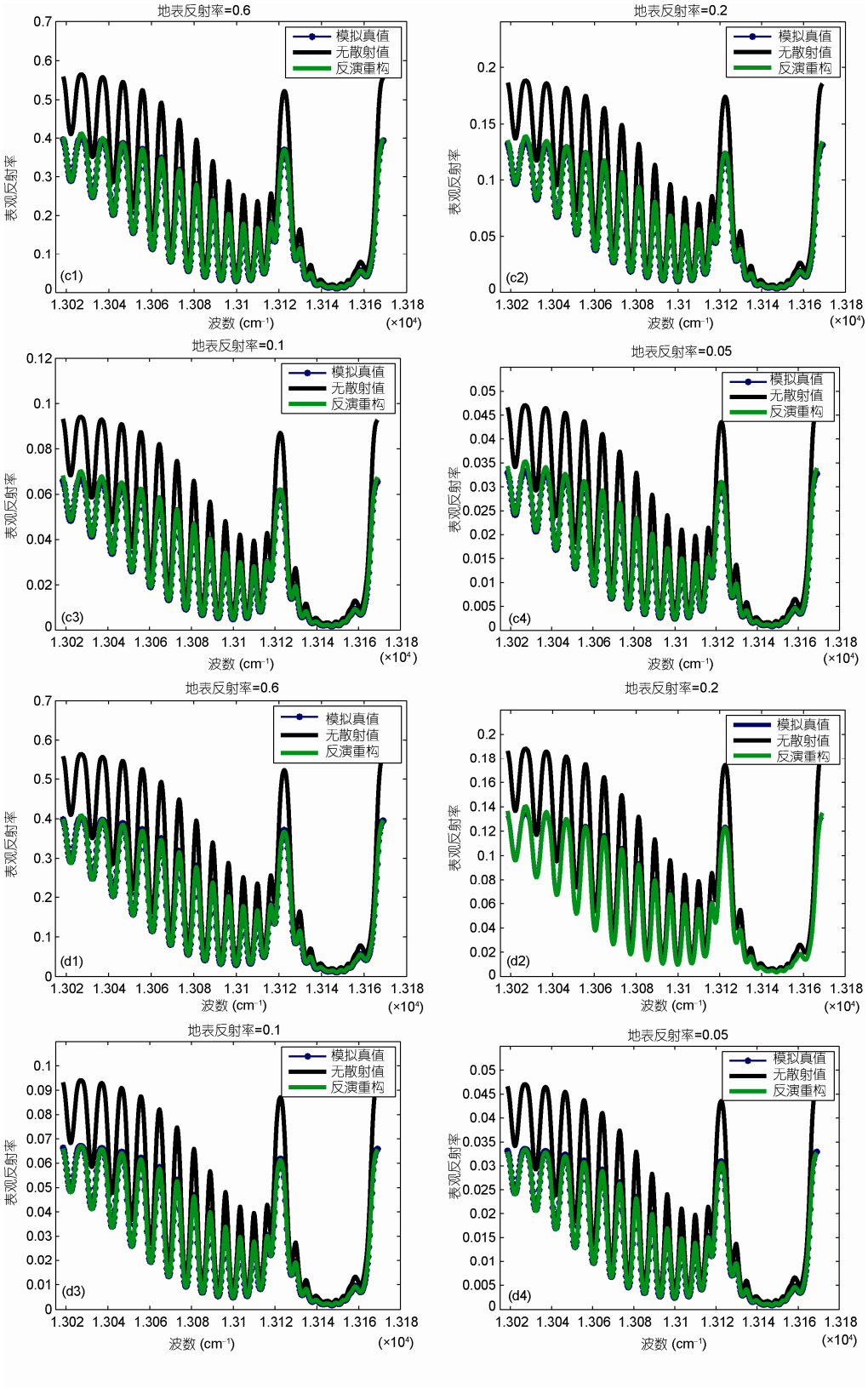


图 1　模拟观测值及反演重构值

给出了 4 种气溶胶类型下、不同地表反射率时的模拟真值(带标记蓝线), 以及利用反演得到的 PPDF 因子校正大气有效透过率模型后, 反演重构值(绿线); 黑线为模拟的无散射值. (a1)~(a4) 秋冬季乡村型气溶胶; (b1)~(b4) 春夏季城市型气溶胶; (c1)~(c4) 沙尘型气溶胶; (d1)~(d4) 烟尘型气溶胶

(续图 1)


地表反射率=0.6
模拟真值
无散射值
反演重构
表观反射率
(c1)
波数 (cm⁻¹)
(×10⁴)
地表反射率=0.2
(c2)
地表反射率=0.1
(c3)
地表反射率=0.05
(c4)
地表反射率=0.6
(d1)
地表反射率=0.2
(d2)
地表反射率=0.1
(d3)
地表反射率=0.05
(d4)

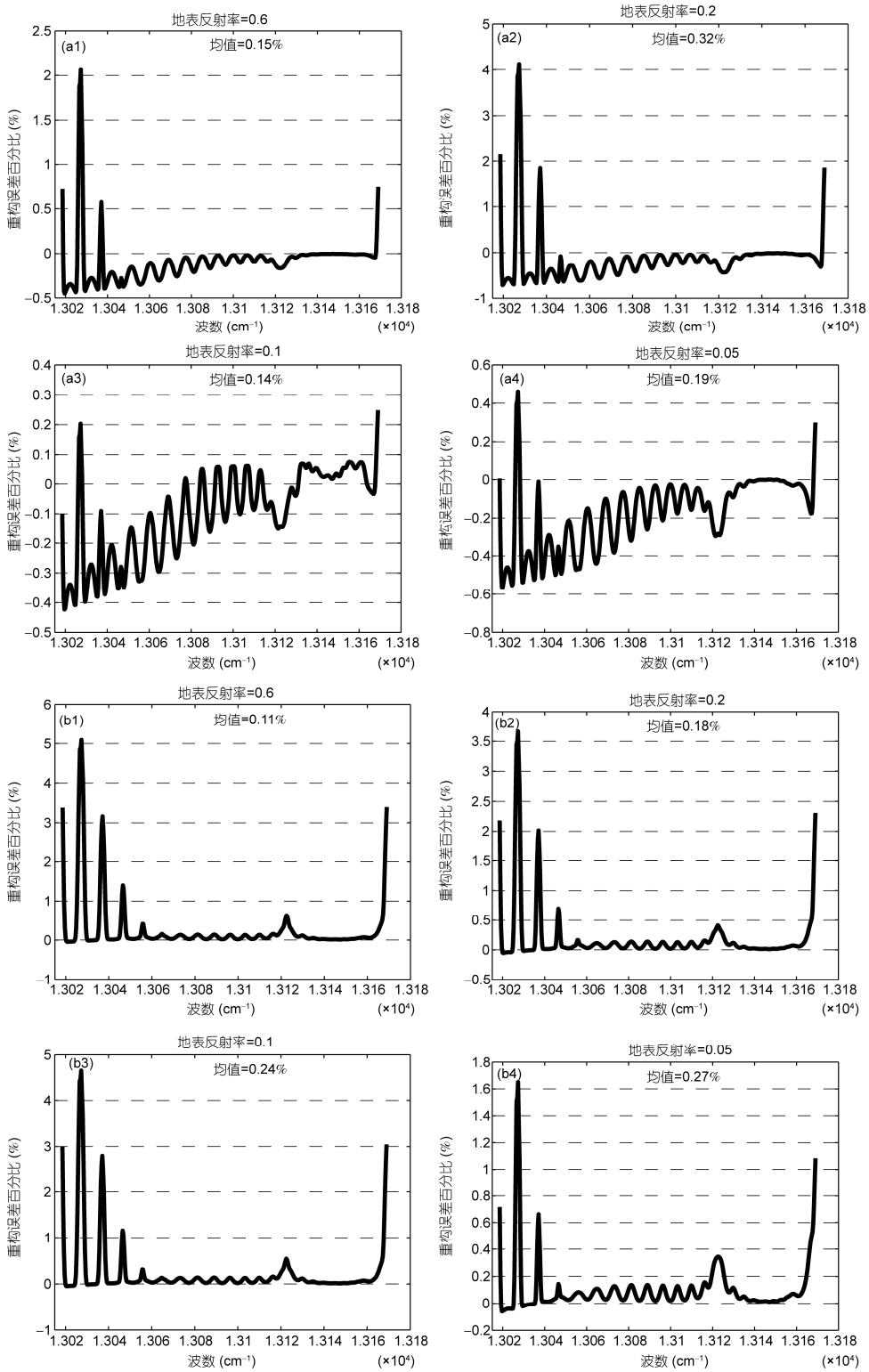


图 2　反演重构观测值的误差百分比

4 种气溶胶类型下、不同地表反射率时的反演 PPDF 因子后重构观测值在不同波长位置处的误差百分比; “均值(mean)”表示所有波数位置重构误差百分比的绝对值均值. (a1)~(a4) 秋冬季乡村型气溶胶; (b1)~(b4) 春夏季城市型气溶胶; (c1)~(c4) 沙尘型气溶胶; (d1)~(d4) 烟尘型气溶胶

(续图 2)

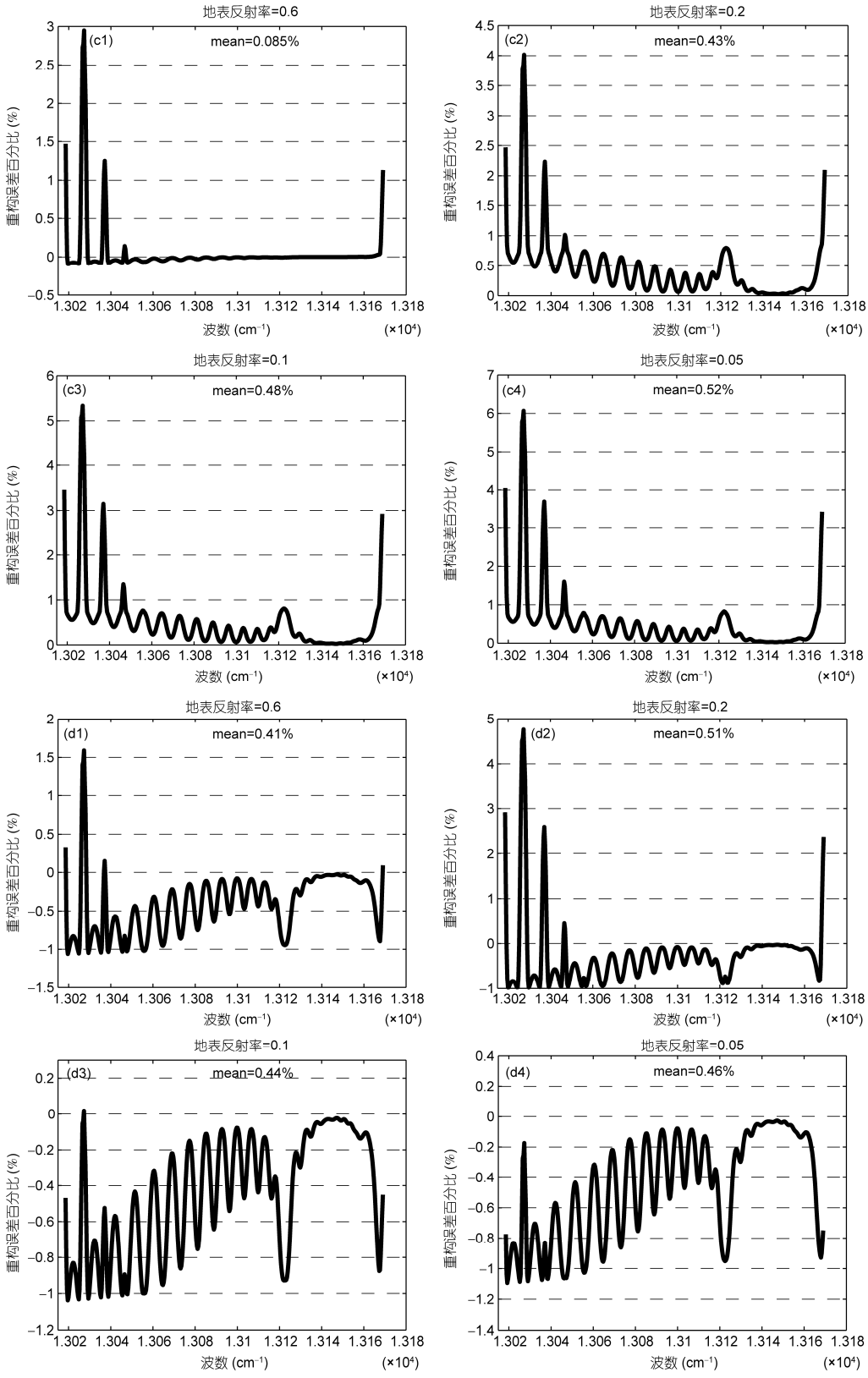

地表反射率=0.6
(c1)
mean=0.085%
地表反射率=0.2
(c2)
mean=0.43%
地表反射率=0.1
(c3)
mean=0.48%
地表反射率=0.05
(c4)
mean=0.52%
地表反射率=0.6
(d1)
mean=0.41%
地表反射率=0.2
(d2)
mean=0.51%
地表反射率=0.1
(d3)
mean=0.44%
地表反射率=0.05
(d4)
mean=0.46%
重构误差百分比 (%)
波数 (cm⁻¹)
(×10⁴)

表 1　PPDF 方法重构观测误差百分比均值

气溶胶类型	地表反射率	重构误差百分比绝对值平均(%)	气溶胶类型	地表反射率	重构误差百分比绝对值平均(%)
秋冬季乡村型	0.6	0.15	沙尘型	0.6	0.085
	0.2	0.32		0.2	0.43
	0.1	0.14		0.1	0.48
	0.05	0.19		0.05	0.52
春夏季城市型	0.6	0.11	烟尘型	0.6	0.41
	0.2	0.18		0.2	0.51
	0.1	0.24		0.1	0.44
	0.05	0.27		0.05	0.46

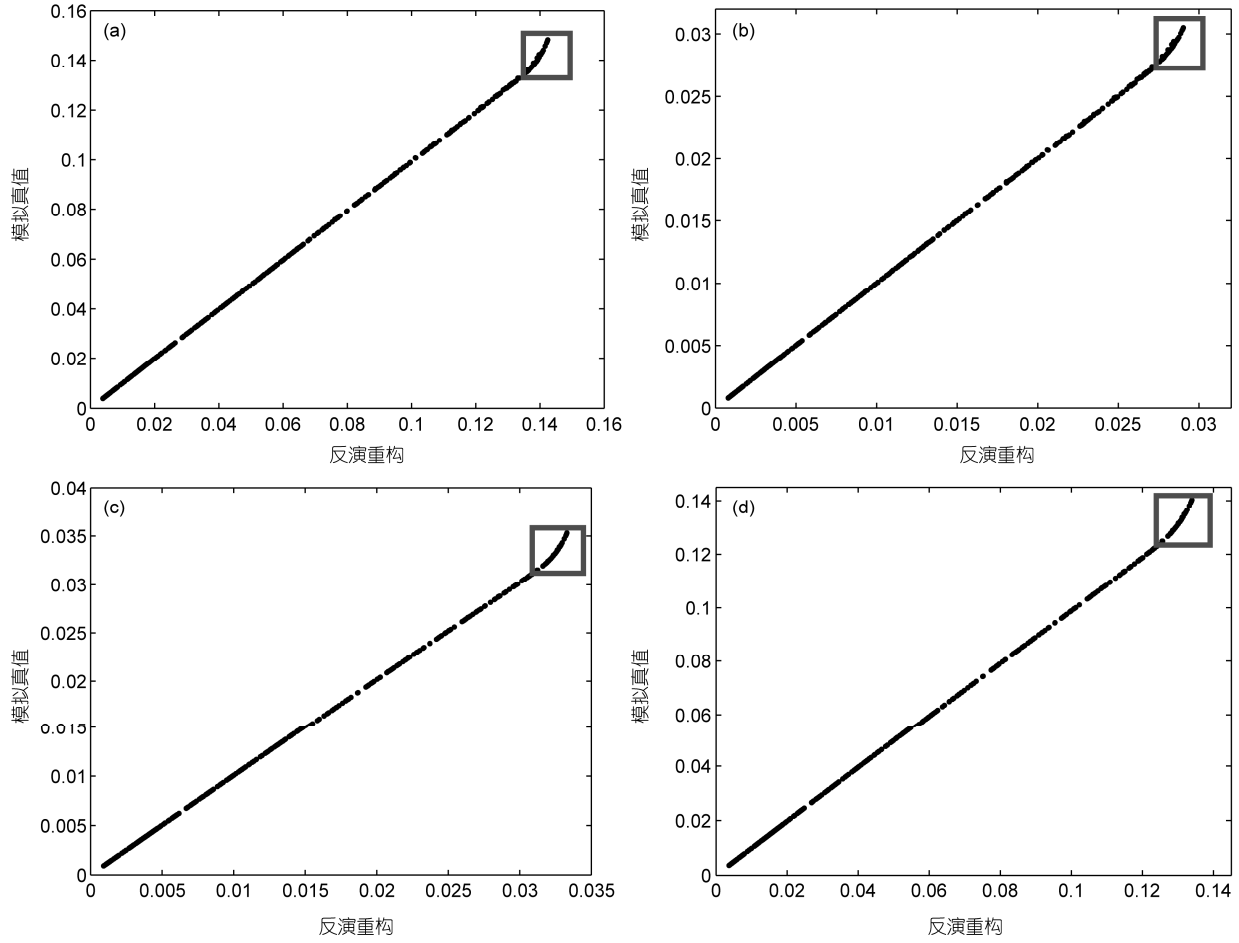


图 3　反演重构相关性分析

不同类型气溶胶及地表反射率条件下, 反演重构观测值与模拟观测真值之间的相关性. (a) 秋冬季乡村型气溶胶, 地表反射率=0.2; (b) 春夏季城市型气溶胶, 地表反射率=0.05; (c) 沙尘型气溶胶, 地表反射率=0.05; (d) 烟尘型气溶胶, 地表反射率=0.2

季节模式城市型气溶胶和沙尘型气溶胶来说, 估算的精度随着地表反射率的减小而降低; 而对于秋冬季节模式乡村型气溶胶和烟尘型气溶胶, 估算的精度随地表反射率减小虽然并不是单一的降低, 但是在一个较小的地表反射率变化范围内, 估算精度随地表反射率单调变化.

从图 2 的误差统计结果还可以看到, 在一些波长处估算误差相对较大, 接下来对模拟观测真值和经

散射估算后的重构值进行了相关性分析. 这里选择每种气溶胶类型里估算误差百分比绝对均值最大的一种地表反射率样本, 构建分析图(图 3). 图中横坐标对应图 1 中绿线所示反演重构的观测值, 纵坐标为模拟的“实际观测值”, 横纵坐标的高值处对应 O_2-A 带内的弱吸收波长处. 从图 3 中可以看到, 在表观反射率较小的区间内, 即氧气的强吸收波段内, 反演重构值和模拟真值的相关性非常好; 在表观反射率相对较大的位置(图中红色矩形框标注部分), 即 O_2-A 带内及两翼附近吸收较弱或不吸收位置处, 反演重构值误差相对较大. 分析认为, PPDF 方法是基于光子路径概率分布函数进行光子传输路径的校正, 4 个 PPDF 因子的权重函数与和氧气的吸收强弱相关, 并在吸收最强的波长处达到峰值, 所以在吸收较强的波长处 PPDF 方法的路径校正效果较好, 相应的气溶胶散射效应的估算精度亦较高. 相反地, 对于 O_2-A 带两翼及附近的不吸收和相对较弱的吸收位置处, 观测值对光子传输路径变化的敏感性低, 从而影响了 PPDF 方法在这些波长位置处对散射效应估算的有效性, 导致反演重构误差相对较大.

3 结论

气溶胶散射效应对短波近红外 CO_2 卫星遥感观测影响严重, 如何估算气溶胶散射效应是一个非常关键的科学问题. 本文介绍了基于光子路径概率分布函数的 PPDF 散射估算方法, 该方法依据等效理论将气溶胶散射效应参数化. 文中利用模拟观测数据进行了反演实验, 实验结果验证了 PPDF 方法进行气溶胶散射效应估算的有效性. 反演实验选择了四种不同的气溶胶类型, 考虑到光子经散射后的传输路径和地表反射率相关, 在每种气溶胶类型下又分别模拟了不同地表反射状况的影响. 模拟反演实验中, 利用反演得到的 PPDF 因子修正大气有效透过率模型后重构观测值的误差小, 所有气溶胶类型条件下的重构误差百分比绝对值的均值都在 0.52%以内, 个别情况下重构误差均值甚至达到了 0.085%; 通过分析比较重构观测值的误差百分比发现, PPDF 方法估算的精度水平受地表反射率影响显著, 在一定的地表反射率变化范围内, 估算精度随地表反射率的减小而降低; O_2-A 带两翼及附近弱吸收及无吸收的波长处校正效果相对较差, 这是由于这些波长处的观测值对光子路径变化敏感性低, 从而影响了 PPDF 方法的散射估算精度.

散射是短波近红外波段 CO_2 卫星遥感不可回避的问题, 对于在中国地区气溶胶类型多样、光学厚度较大的大气环境条件下, 有效地去除气溶胶散射效应是实现 CO_2 高精度卫星遥感的关键. 本文通过 O_2-A 带的模拟数据进行反演验证了 PPDF 方法校正散气溶胶射效应的有效性. 以 O_2-A 带作为辅助观测通道、利用 PPDF 方法, 可以为短波近红外 CO_2 等大气痕量气体卫星遥感提供散射校正技术支持, 提高观测反演精度.

参考文献

Aben I, Hasekamp O, Hartmann W. 2007. Uncertainties in the space-based measurements of CO_2 columns due to scattering in the Earth's atmosphere. J Quant Spectrosc Rad Trans, 104: 450–459

Bennartz R, Preusker R. 2006. Representation of the photon pathlength distribution in a cloudy atmosphere using finite elements. J Quant Spectrosc Rad Trans, 98: 202–219

Bril A, Oshchepkov S, Yokota T, et al. 2007. Parameterization of aerosol and cirrus cloud effect on reflected sunlight spectra measured from space: Application of the equivalence theorem. Appl Optics, 46: 2460–2470

Bril A, Oshchepkov S, Yokota T. 2008. Correction of atmospheric scattering effects in space-based observations of carbon dioxide: Model study of desert dust aerosol. J Quant Spectrosc Rad Trans, 109: 1815–1827

Buchwitz M, Burrows J P. 2004. Retrieval of CH_4, CO and CO_2 total column amounts from SCIAMACHY near-infrared nadir spectral: Retrieval algorithm and first results. Proc SPIE, 5235: 375–388

Connor B J, Boesch H, Toon G, et al. 2008. Orbiting carbon observatory: Inverse method and prospective error analysis. J Geophys Res, 113: D05305

Crisp D, Allas R M, Breon F M, et al. 2004. The orbiting carbon observatory (OCO) mission. Adv Space Res, 34: 700–709

Houweling S, Hartmann W, Aben I, et al. 2005. Evidence of systematic errors in SCIAMACHY-observed CO_2 due to aerosols. Atmos Chem Phys, 5: 3003–3313

IPCC. 2007. Climate Change 2007: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. Cambridge, United Kingdom and New York: Cambridge University Press

Luo Y F, Lu D R, Zhou X J, et al. 2001. Characteristics of the spatial distribution and yearly variation of aerosol optical depth over China in last 30 years. J Geophys Res, 106: 14501–14513

Miller C E, Crisp D, DeCola P L, et al. 2007. Precision requirements for space-based X_{CO2} data. J Geophys Res, 112: D10134

OshchepkovS, Bril A, Yokota T. 2008. PPDF-based method to account for atmospheric light scattering in observations of carbon dioxide from space. J Geophys Res, 113: D23210

Oshchepkov S, Bril A, Yokota T. 2009. An improved photon path length probability density function-based radiative transfer model for space-based observation of greenhouse gases. J Geophys Res, 114: D19207

Rodgers C D. 2000. Inverse methods for atmospheric sounding: Theory and Practice. London: World Scientific Publishing Co, 85

Rozanov A, Rozanov V, Buchwitz M, et al. 2005. SCIATRAN 2.0—A new radiative transfer model for geophysical applications. Adv Space Res, 5: 1015–1019

Schneising O, Buchwitz M, Burrows J P, et al. 2008. Three years of greenhouse gas column-averaged dry air mole fractions retrieved from satellite—Part 1: Carbon dioxide. AtmosChemPhys, 8: 3827–3853

Yokota T, Oguma H, Morino I, et al. 2004. Test measurements by a BBM of the nadir-looking SWIR FTS aboard GOSAT to monitor CO_2 column density from space. Proc SPIE, 5652: 182–188