



论文

二氧化碳柱浓度的卫星反演试验及地基验证

周敏强^{①③}, 张兴赢^{②*}, 王普才^①, 王舒鹏^②, 郭丽莉^④, 胡列群^⑤^① 中国科学院大气物理研究所中层大气和全球环境探测重点实验室, 北京 100029;^② 中国气象局国家卫星气象中心, 北京 100081;^③ 中国科学院大学地球科学学院, 北京 100049;^④ 中国同辐股份有限公司, 北京 100045;^⑤ 乌鲁木齐气象卫星地面站, 乌鲁木齐 830011

* 联系人, E-mail: zxy@cma.gov.cn

收稿日期: 2014-10-27; 接受日期: 2015-01-05; 网络版发表日期: 2015-05-14

国家高技术研究发展计划碳卫星项目(编号: 2011AA12A104)、中国科学院战略性先导科技专项项目(编号: XDA05100300)、公益性行业(气象)专项项目(编号: GYHY201106045)、国家重点基础研究发展计划项目(编号: 2013CB955801)、国家自然科学基金项目(批准号: 41175030)和高分辨率对地观测专项的气象行业应用示范项目(编号: E310/1112)资助

摘要 基于最优估计理论, 采用 LBLRTM 和 VLIDORT 辐射传输模式以及包含 Line Mixing 效应的 aer_v_3.2 数据库, 构建了一套短波红外高光谱卫星反演 XCO₂ 的算法. 利用该算法试验了 Line Mixing 效应对卫星反演结果的影响, 对 GOSAT 卫星观测光谱数据进行了系统性试验反演, 并利用选取的 TCCON 站点一年中的匹配观测资料进行了地面验证, 同时与 GOSAT 卫星官方 L2B 产品进行了比对. 试验表明, 忽略 Line Mixing 将系统性低估约 0.25% 的 CO₂ 柱浓度. 在气溶胶光学厚度小于 0.3 的大气条件下, 本文反演算法反演结果与 GOSAT 官方数据产品精度接近, 与地基观测值相差小于 1%, 而高浓度气溶胶背景下卫星反演 CO₂ 浓度的有效方法仍有待于突破.

关键词二氧化碳
反演试验
卫星高光谱遥感
地基验证

CO₂ 是一种重要的温室气体, 对地球大气系统的辐射平衡起着非常重要的作用, CO₂ 的温室效应受到各国政府和科学研究团体的高度重视, 准确评估 CO₂ 的温室效应具有重大科学意义. 长期地面监测结果表明, 全球工业化发展大量消耗化石燃料, 导致过去一百多年来 CO₂ 浓度大幅度上升(IPCC, 2007). 目前 CO₂ 的观测手段主要还是依赖传统的地面观测(Chevallier 等, 2011; GLOBALVIEW-CO₂, 2006). 地面观测虽然精度高, 但地基观测站点数量有限并且分布不均匀. 卫星遥感不但可以获取全球覆盖的大

气 CO₂ 浓度, 而且能够稳定连续地监测, 对于研究全球的 CO₂ 变化趋势、区域输送和源排放状况具有重要应用价值. 利用卫星探测温室气体 CO₂ 的浓度对卫星载荷技术和高光谱数据处理技术都是巨大的挑战. 目前专门针对温室气体监测的卫星, 全球只有日本于 2009 年 1 月发射的温室气体观测卫星(GOSAT), 和美国于 2014 年 7 月发射的第二颗二氧化碳观测卫星(OCO-2)在轨运行, 第一颗碳卫星(OCO)于 2009 年发射失败. 欧洲目前正在规划碳观测卫星 CarbonSat、日本在推进第二代温室气体观测卫星 GOSAT-2, 中国

中文引用格式: 周敏强, 张兴赢, 王普才, 王舒鹏, 郭丽莉, 胡列群. 2015. 二氧化碳柱浓度的卫星反演试验及地基验证. 中国科学: 地球科学, 45: 856–863

英文引用格式: Zhou M Q, Zhang X Y, Wang P C, Wang S P, Guo L L, Hu L Q. 2015. XCO₂ satellite retrieval experiments in short-wave infrared spectrum and ground-based validation. Science China: Earth Sciences, 58: 1191–1197, doi: 10.1007/s11430-015-5080-z

正在发展自主的全球二氧化碳监测科学实验卫星(简称碳卫星), 预计将于2016年发射升空, 同时下一颗风云三号气象卫星(FY-3D)也将搭载温室气体探测载荷, 计划同年发射。

日本专门用于温室气体 CO_2 和 CH_4 探测的 GOSAT 卫星平台上搭载了两个传感器(Yokota等, 2009): 傅立叶光谱仪(TANSO-FTS)和云与气溶胶成像仪(TANSO-CAI). TANSO-FTS 获取三个短波红外波段光谱(band 1: 13000 cm^{-1} 氧气吸收A带; band 2: 6250 cm^{-1} 二氧化碳弱吸收带; band 3: 4850 cm^{-1} 二氧化碳较强吸收带), 以及一个热红外宽通道光谱($699.3\sim 1818.2\text{ cm}^{-1}$)(Kuze等, 2009). 国外已有大量利用 GOSAT 卫星上的 TANSO-FTS 载荷的观测光谱资料对全球 CO_2 浓度进行遥感的工作(Yoshida等, 2011; O'Dell等, 2012).

中国碳卫星和风云三号气象卫星上计划搭载的温室气体探测载荷, 设置的近红外三个波段范围与 GOSAT 和 OCO-2 一致, 即包含一个氧气吸收A带与两个二氧化碳吸收带. 为了保证我国 CO_2 测量卫星上天后其观测数据产品 CO_2 柱浓度(用 XCO_2 表示)的及时准确发布, 必须开展卫星短波红外高光谱二氧化碳浓度反演算法研究, 并提前准备一套相对成熟的算法. 目前Liu等(2013)在国内率先提出了一套基于最优估计的反演算法, 对 GOSAT 三个月的观测资料进行了 XCO_2 的反演与初步验证, 结果显示精度与 GOSAT 官方产品相当.

先前的研究中 HITRAN2008(Rothman等, 2009) 被广泛使用, 但该数据库中没有考虑 Line Mixing 效应的影响. 然而分子吸收参数数据库的升级变化对 XCO_2 的卫星反演会有很大影响, 已有研究(Hartmann等, 2009)表明, Line Mixing 效应在 6250 和 4850 cm^{-1} 处对大气透过率影响分别为 0.2% 和 1% (给定大气质量因子为 2, 光谱分辨率为 0.01 cm^{-1}), 因此在利用近红外光谱反演 CO_2 的过程中, Line Mixing 效应不可忽略.

本文基于最优估计理论构建了一套卫星反演 XCO_2 的算法, 针对 Line Mixing 效应对二氧化碳浓度反演的影响开展了试验, 试验中采用 LBLRTM 网站提供的 aer_v_3.2 分子光谱数据库, 该数据库在 HITRAN2008 的基础上加入了 CO_2 的 Line Mixing 效应的相关参数(Lamouroux等, 2010). 然后利用一年的 GOSAT 资料对 XCO_2 进行反演, 与 GOSAT L2B 官方产品和全球地基二氧化碳观测进行对比验证.

1 反演算法

卫星 XCO_2 的反演算法采用最优估计理论, 由一个正向辐射传输模式和反演过程的迭代更新, 构成完整的算法流程.

1.1 最优估计理论

本文采用最优估计的数学理论来构建 XCO_2 反演算法, 这个理论在卫星高光谱遥感应用中被广泛应用, 下面做扼要介绍.

这里讨论的物理问题是从卫星测量的短波红外高光谱数据出发反演 XCO_2 . 卫星传感器接收到的光谱信号 y 由完整的大气状态、成分含量及仪器参数确定, 观测物理量与待求大气参数的变化关系通常用复杂模式来表达, 数学上可以抽象地用算子形式表达:

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

式中, 算子 $F(x, b)$ 本质上是正向辐射传输模式, x 为待反演的状态向量, 其中包含待求的大气参数和其他的一些反演参数, b 为影响辐射传输的其他不进行反演的大气参数向量, ε 是误差向量, 包含了模式误差和观测误差. 对于中度非线性问题, 通常采用最优估计的最大后验概率密度来进行处理, 定义代价函数 $J(x)$ (Rodgers, 2000):

$$J(x) = [y - F(x)]^T S_\varepsilon^{-1} [y - F(x)] + [x - x_a]^T S_a^{-1} [x - x_a], \quad (2)$$

式中, y 是观测向量, S_ε 是观测的误差协方差矩阵, x_a 是待求的状态向量的初始值, 通常根据先验知识获取, S_a 是先验协方差矩阵. 反演大气参数的问题就等价于寻找代价函数的最小值, 这可以采用 L-M 牛顿非线性迭代来实现:

$$x_{i+1} = x_i + \hat{S} [K_i^T S_\varepsilon^{-1} (y - F(x_i)) - S_a^{-1} (x_i - x_a)], \quad (3)$$

$$\hat{S} = ((1 + \gamma) S_a^{-1} + K_i^T S_\varepsilon^{-1} K_i)^{-1}, \quad (4)$$

式中, 下标 i 表示第 i 次迭代, K 为雅可比矩阵(权重函数), 表示观测向量对状态参数的敏感性 $K = \partial F(x, b) / \partial x$, $\hat{S}$ 为解的协方差阵, 表征反演结果的可信度, γ 为 L-M 系数.

1.2 正演模式

前节引入的算子本质上是能够完整描述太阳辐射在大气中传输的物理过程的正向辐射传输模式, 可简称为正演模式. 该模式必须能够完整描述太阳

辐射在大气传播过程中与大气成分和大气状态变量的相互作用关系. 本文采用逐线积分模式LBLRTM (Line-By-Line Radiative Transfer Model)计算每层高度的气体光学厚度. LBLRTM是由美国大气和环境实验室在20世纪80年代从FASCODE发展而来的精确逐线积分模式, 精度达千分之五(Clough等, 2005). 散射辐射传输模式采用VLIDORT(Vector LInearized Discrete Ordinate Radiative Transfer), 它是一个基于离散坐标方法的矢量辐射传输模式(Spurr, 2006). VLIDORT在模拟卫星接收的辐亮度时, 能够同时输出地表参数和气体廓线的权重函数. 分子的Rayleigh散射形式简单, 可以直接通过公式精确计算(Crisp等, 2012). 在正演计算中, LBLRTM和VLIDORT输出高光谱信息, 光谱分辨率 0.01 cm^{-1} , 再通过仪器响应函数卷积到GOSAT的光谱上, 波数间隔为 0.2 cm^{-1} , 卷积函数来自GOSAT官网 (<https://data.gosat.nies.go.jp>).

1.3 反演参数及算法流程

利用GOSAT资料对 XCO_2 初步反演, 在不考虑气溶胶散射的情况下, 氧气吸收A波段可以暂时忽略(Herbin等, 2013). 本文中反演波段选择TANSO-FTS band 2($6166\sim 6286\text{ cm}^{-1}$) 和 band 3($4810\sim 4897\text{ cm}^{-1}$). 设地表为朗伯体, 并且由于选取波段的范围较窄, 假定地表反射率在单个波段内存在一次变化, 太阳光谱采用Kurucz光谱, 波数间隔为 0.01 cm^{-1} (<http://kurucz.harvard.edu>). 大气从地表气压至大气层顶(0.1 hPa)按气压等分为18层. 为了减少再分析资料带来的误差, 在反演过程中, 保持温湿度廓线形状不变, 加入一个温度廓线偏移量和一个水汽廓线放大系数进行订正. 此外, 由于太阳、地球与卫星存在相对运动, 会产生多普勒漂移, 所以卫星观测的光谱与太阳光谱之间存在光谱漂移, 在高光谱反演过程中需要订正.

表1给出状态向量 $\mathbf{x}$ 包含的参量及初值: 2个波段上的地表反射率, 2个波段上的地表反射率斜率, 1个温度廓线的偏移量, 1个水汽廓线的放大系数, 2个波段上的光谱漂移量, 18层的 CO_2 浓度. S_a 先验协方差矩阵和 S_e 观测协方差矩阵取值参考ACOS算法, 其中 S_a 根据LMDz模式(Laboratoire de Meteorologie Dynamique) 模拟的全球 CO_2 廓线进行构造(Pickett-Heaps等, 2011), 考虑了层与层之间的相关性; S_e 则是根据

表1 状态向量 $\mathbf{x}$ 包含的参数及其初值

状态向量参数	个数	初值
地表反照率	2	0.2; 0.2
地表反照率的斜率	2	0.0; 0.0
温度廓线偏移量	1	ECMWF
水汽廓线放大系数	1	ECMWF
光谱漂移	2	0.0; 0.0
CO_2	18	390 ppm

TANSO-FTS一年多的观测数据进行误差统计, 模拟误差公式后进行构造, S_e 取决于仪器的性能, 详见ACOS算法(O'Dell等, 2012).

图1给出了反演算法的流程图, 具体步骤如下, 第一步: 去除有云像元. 目前只针对晴空像元进行反演, 利用搭载在GOSAT平台上的另一载荷CAI提供的云产品, 剔除被云污染的像元. 去除有云像元的方法参考日本CLAUDIA算法结果(Ishida和Nakajima, 2009), 同时考虑到太阳天顶角很大时卫星接收到的信号弱, 信噪比较低, 因此去掉太阳天顶角大于 70° 的值; 第二步: 利用ECMWF再分析资料提供的 $1.5^\circ\times 1.5^\circ$ 的气象数据以及GTOPO30提供的全球分辨率为30 s的高程数据(中纬度约300 m), 获取卫星过境时的背景数据, 包括18层的温度、气压、相对湿度及其他参数初值, 得到完整的初始状态向量 x_a ; 第三步: 将 x_a 作为 x_i 代入正演模式进行计算, 考虑气体吸收、大气分子散射以及大气多次散射过程, 模拟卫星接收到的辐亮度 $F(x_i, b)$, 并进行L-M牛顿非线性迭代, 得到 x_{i+1} ; 第四步: 判断 $\|x_i - x_{i+1}\|$ 值是否小于某个阈值, 即是否收敛, 如果收敛并且残差足够小, 则 x_{i+1} 即为所求解, 同时给出其协方差矩阵, 和平均核函数矩阵, 如果没有收敛, 首先判断迭代次数是否超过10次, 如果迭代次数过多则丢弃, 否则更新状态向量, 返回第三步, 将更新的状态向量作为 x_i 继续迭代. 由于全球地表类型差异巨大, 所以将band 2和band 3的初始地表反射率设成0.2可能会造成 CO_2 浓度出现负值, 特别是第一次迭代. 解决该方法有两种: 第一种利用其他地表反射率数据集, 如MODIS的地表反射率产品作为初值, 替代0.2; 第二种方法则是在第一次迭代时, 状态向量中不更新 CO_2 的浓度廓线, 保持每层390 ppm, 因为地表反射率的信息量足够多, 经过一次迭代之后就可以逼近真实值, 从第二次迭代开始才将 CO_2 的浓度廓线加入至状态向量中进行更新迭代, 这样可以有效地避免负值的出现. 本文采取第二种方法进行处理.

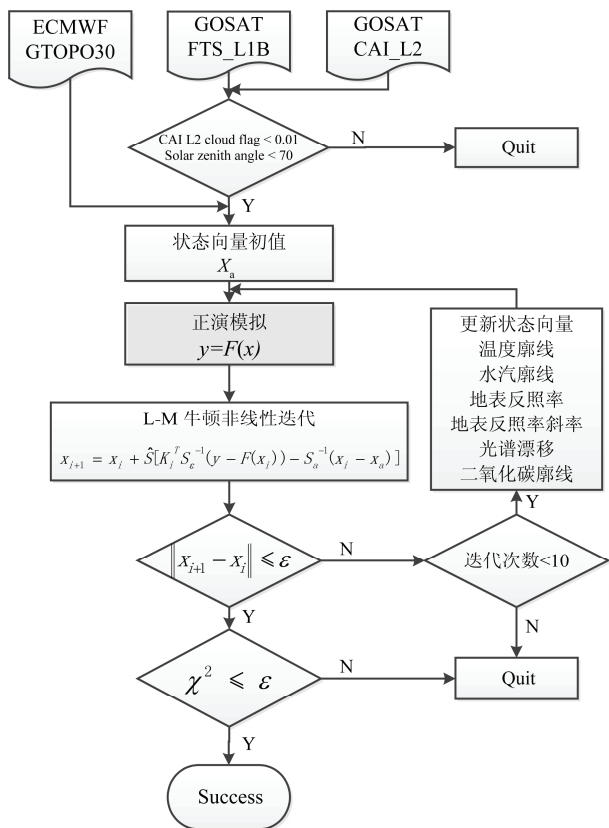


图 1 反演算法流程图

2 Line Mixing 效应及其对 XCO_2 反演结果的影响

Line Mixing 对大气透过率的影响、最终对 XCO_2 反演结果的影响常常被忽略, 本节对 Line Mixing 的

影响进行讨论.

2.1 Line Mixing 对大气透过率的影响

选取 1976 年美国标准大气进行 Line Mixing 的大气透过率的计算. 整层大气 0~120 km 高度分为 50 层, 其中: 25 km 以下每 1 km 一层, 25~50 km 每 2.5 km 一层, 50 km 以上每 5 km 一层. 利用 LBLRTM 模式进行两种大气透过率的计算, 光谱分辨率为 0.2 cm^{-1} : (1) 考虑 Line Mixing; (2) 忽略 Line Mixing.

图 2 显示了 GOSAT band 2 和 band 3 波段的典型大气透过率以及考虑与忽略 Line Mixing 的大气透过率相对差值. 可以发现 Line Mixing 效应对 band 3 的影响要大于对 band 2 的影响, 在 band 2 处造成大气透过率 0.2% 的偏差, 而在 band 3 处可达 2%, Hartman 等 (2009) 利用这两个波段分别进行了地基 FTS 二氧化碳浓度的反演, 结果表明, 加入 Line Mixing 效应后的分子吸收库, 得到的光谱拟合结果残差明显减小, 并且 XCO_2 反演结果与太阳高度角的依赖性减弱.

2.2 Line Mixing 对 XCO_2 反演结果的影响

为了研究 Line Mixing 效应对本文算法反演结果的影响, 采用 HITRAN2008 数据库和考虑了 Line Mixing 效应的 aer_v_3.2 分子光谱数据库, 分别开展反演试验. 试验中选取了全球四个位于不同大洲的地基二氧化碳柱浓度观测站点 (TCCON, Total Carbon Column Observing Network) (Wunch 等, 2011), 通过地基 FTS 观测得到的 XCO_2 数据对卫星反演结果的真实现性进行检验, TCCON 观测数据 GGG2012 来自于二氧

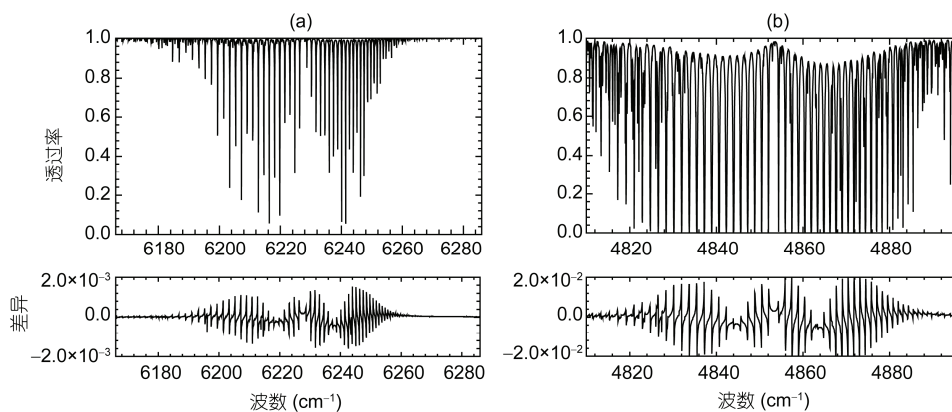


图 2 标准大气情况下 GOSAT band 2(a) 和 band 3(b) 两个波段上的大气透过率及考虑和不考虑 Line Mixing 效应得到的大气透过率的相对偏差

化碳信息分析中心 (CDIAC) 档案 (<http://tccon.ipac.caltech.edu/>).

实验选取的四个站点分别是: Lamont(36.604°N, 97.486°W), Bremen(53.10°N, 8.85°E), Tsukba (36.0513°N, 140.1215°E)和Lauder(45.038°S, 169.699°E), 反演结果显示在图3中, 统计结果由表2给出. 图3中红线为本文算法采用aer_v_3.2分子光谱数据库即考虑了Line Mixing效应的结果, 标记为Our_3.2, 绿线为本文算法采用HITRAN2008数据库的结果, 标记为Our_08. 从图中可以发现, 不考虑Line Mixing效应的反演结果, 要比考虑该效应的卫星反演结果低估约0.5 ppm(0.25%). 而Line Mixing效应对地基XCO₂ 反演可造成约1~4 ppm的偏差, 本文的实验表明Line Mixing效应对卫星反演的影响要小

于对地基反演的影响, 其原因主要由于卫星观测的光谱分辨率要远低于地基FTS的光谱分辨率, 光谱信号在与仪器响应函数的卷积过程中得到了平滑.

3 XCO₂ 反演结果比对验证

3.1 反演试验个例及其与 GOSAT 产品的比对

本节对GOSAT观测光谱利用上面构建的反演算法进行了XCO₂的反演, 选取任意的一个像元的反演结果与GOSAT官方产品数据进行了比对. 图4给出了2012年10月21日的一个像元(36.5534°N, 97.2°W)上 band 2和band 3的观测光谱及模式拟合光谱. 结果表明, 模拟光谱非常接近观测光谱, 两者重合度高, 因此图中基本上只能看到一个光谱, 两者之间的差别

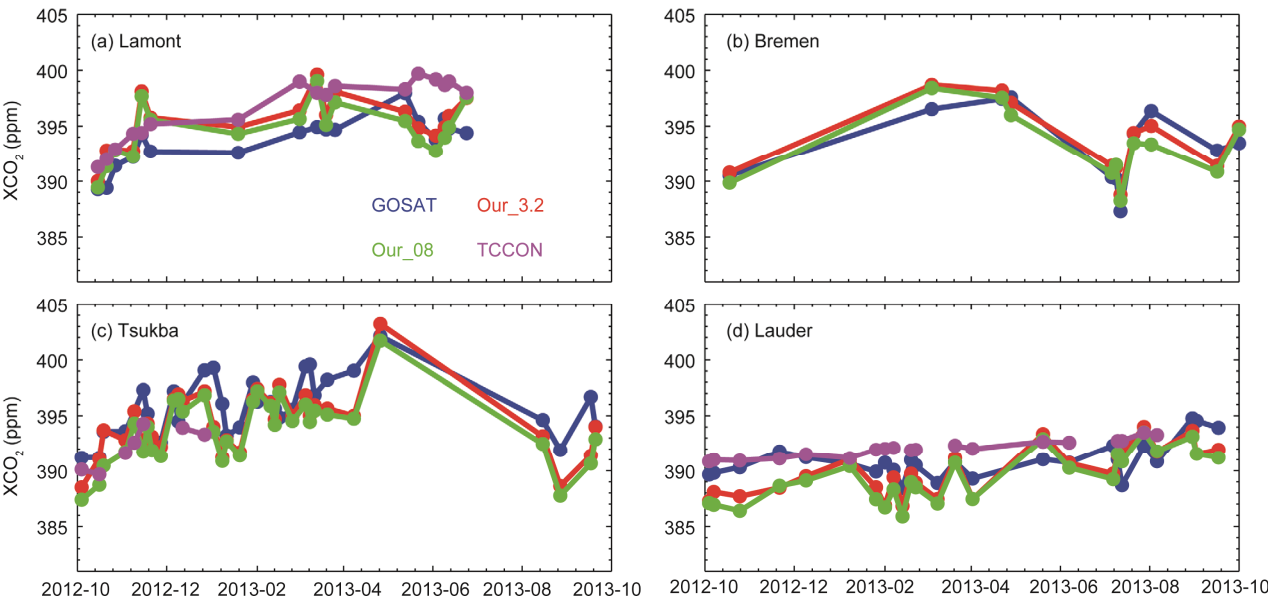


图3 2012年10月1日至2013年10月1日一年内反演的XCO₂浓度值与四个TCCON站点对比

蓝线为GOSAT L2B产品, 红线为本文算法采用aer_v_3.2的结果, 标记为Our_3.2, 绿线为本文算法采用HITRAN2008的结果, 标记为Our_08, 紫线为TCCON观测值

表2 GOSAT L2B、本文算法与TCCON的XCO₂产品对比分析^{a)}

站点	样本数	平均值(ppm)				标准差			
		GOSAT	Our_3.2	Our_08	TCCON	GOSAT	Our_3.2	Our_08	TCCON
Lamont	17	393.690	395.116	394.631	396.588	2.220	2.384	2.483	2.745
Bremen	11	393.368	393.817	393.150	—	3.446	3.310	3.266	—
Tsukba	33	395.792	394.270	393.681	392.215*	2.634	3.037	3.023	1.809*
Lauder	25	390.930	389.923	389.423	392.013	1.638	2.161	2.254	0.781

a) *表示 Tsukba 站点地基观测数据较少

要通过残差光谱才能清晰表达, 残差光谱比观测光谱值小一至两个数量级, 两个波段上残差与观测光谱基线之比的最大偏差约2%, 均方根在1%以下. 该像元利用本文构建的算法得到的XCO₂反演值为392.1 ppm, 与GOSAT官方产品389.4 ppm的差别在1%以内.

图5给出了GOSAT官方L2B产品的CO₂浓度廓线与本文算法反演结果的比较. 可以发现两者廓线形状比较接近, 在近地面浓度较高, 在中高层浓度维持在390 ppm左右并且变化小, 与Wunch等(2011)给出的Lamont站地基观测的CO₂廓线一致. 两者CO₂浓度廓线在中低层相差较大, 产生这种现象的主要原因是最优估计算法的CO₂廓线信号自由度仅有1.6左右, CO₂浓度值很大程度上来自于先验知识的约束, 不同的先验协方差矩阵, 以及最优算法在迭代过程中, 先验知识的约束强弱不同会导致不同CO₂廓线产生, 从该点的反演结果来看, 本文算法中先验知识的约束要强于GOSAT算法.

产生两个算法结果差异的最主要原因有以下几点: (1) CO₂的初值选择不同, GOSAT官方NIES算法将日本国家环境研究中心开发的离线全球大气传输模式的输出结果作为CO₂的初值, 而本文的CO₂初值采用了每层390 ppm均匀分布; (2) GOSAT官方算法加入了气溶胶反演模块, 其第一版本的算法假设气溶胶在边界层(2 km以下)均匀分布, 第二版本则假设

大气中存在5层的气溶胶, 在反演CO₂廓线的时候反演气溶胶校正参数, 由于实验仅选取晴空低浓度气溶胶的像元, 本文算法只加入了背景低浓度气溶胶模块, 并未进行气溶胶参数的同步反演, 两种算法的不同散射处理会对CO₂结果产生偏差; (3) 最优估计算法本身存在观测误差、干扰误差和平滑误差, 根据误差协方差结果, 算法本身造成XCO₂值偏差可达0.8~1.5 ppm.

3.2 系统反演试验结果及其地基验证

为了更好地检验我们的反演算法的效果, 对COSAT卫星的观测光谱进行了试验反演, 并利用上述四个TCCON站点的地基反演XCO₂的结果进行了检验, 同时与GOSAT官方反演产品也进行了比对.

地基观测与卫星像元时空匹配的条件是: 选取TCCON站周围1°范围内的卫星观测像元, TCCON站点反演数据为卫星过境前后一小时的平均值. 同时满足GOSAT L2B产品的约束条件, 即气溶胶光学厚度小于0.3. 对于Lamont, Bremen, Tsukuba和Lauder四个站点, 所考虑的一年观测期内符合匹配条件的分别有17, 11, 33和25个有效样本.

反演试验采用了本文构建的反演算法和包含Line Mixing效应的aer_v_3.2分子光谱数据库. 地基傅里叶变换光谱仪FTS的观测方式是跟踪太阳获得高光谱分辨率直射太阳光谱, 然后对观测光谱使用

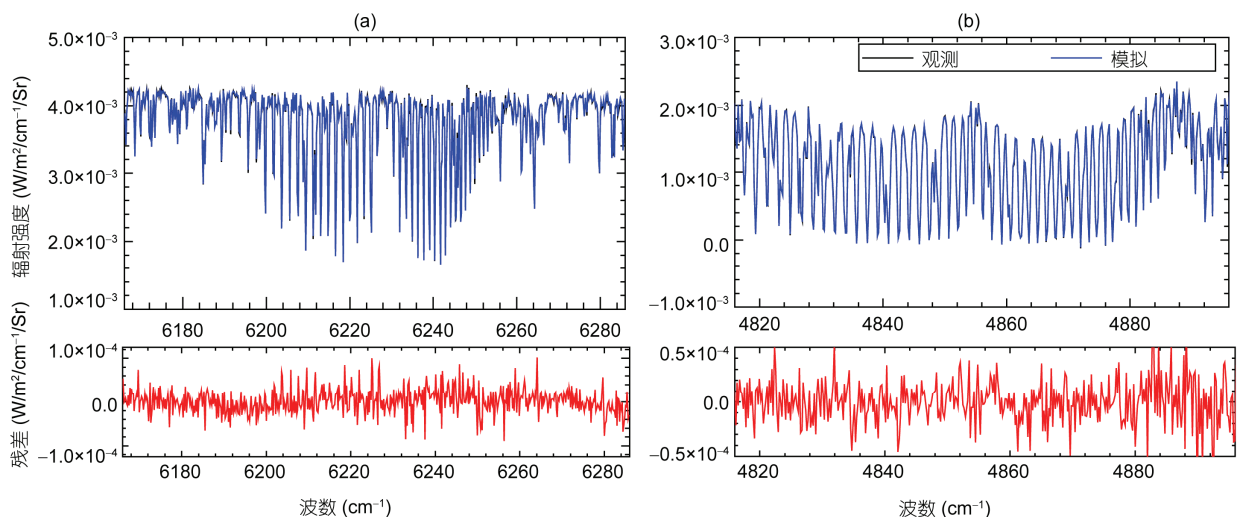


图4 2012年10月21日一个像元(36.5534°N, 97.2°W)的GOSAT band 2(a)和band 3(b)光谱拟合结果

黑线表示实际观测光谱, 蓝线为模拟光谱, 底下的红线分别对应两个波段的残差光谱. 注意模拟光谱非常接近观测光谱, 因此图中基本上只能显示模拟光谱

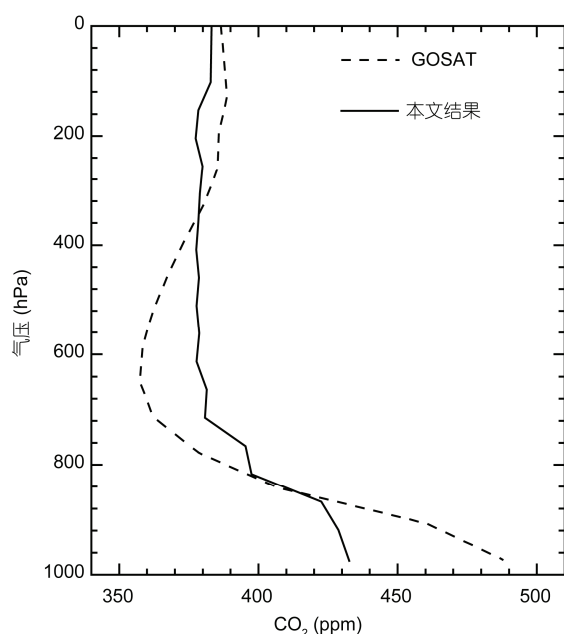


图5 CO₂浓度廓线比较

虚线为GOSAT官方L2B产品结果, 实线为本文算法的结果

非线性最小二乘光谱拟合法来反演温室气体柱总量, 观测证明温室气体CO₂垂直柱浓度的反演精度可达0.8 ppm (Messerschmidt等, 2010; Yoshida等, 2013). 已有研究表明, 气溶胶含量对CO₂的反演结果影响较大(Aben等, 2007; Guerlet等, 2013), 为了避开气溶胶的复杂影响, 比对实验只考虑气溶胶光学厚度AOD小于0.3的情况. 图3为2012年10月1日至2013年10月1日一年内, 利用本文算法和两套不同数据库反演的时空匹配的XCO₂浓度值, 还包括了GOSAT L2B数据产品和地基观测反演结果.

从图3中可以发现, 本算法与GOSAT及TCCON给出的XCO₂的趋势一致, 能够反映XCO₂的变化. 其中Lamont站和Lauder站的卫星反演值都要低于TCCON站地基观测值, 而Tsukuba站的卫星反演值会略高于TCCON站地基观测值. 从表2中可知, 利用aer_v_3.2分子光谱数据反演得到XCO₂平均值与GOSAT L2B产品相差 ± 1.5 ppm, 与TCCON结果相差约2 ppm. 标准差与GOSAT和TCCON产品比较接

近, 从四个站点的一年比较中, 该算法可以达到1%的XCO₂反演精度.

4 讨论与总结

本文基于最优估计理论, 采用LBLRTM和VLIDORT辐射传输模式, 选取包含Line Mixing效应的aer_v_3.2数据库, 构建了一套卫星反演XCO₂的算法. 利用该算法试验了Line Mixing效应对卫星反演结果的影响, 对GOSAT卫星观测光谱数据进行了系统性试验反演, 把反演结果同GOSAT卫星官方数据产品进行了比对, 并利用四个TCCON站点一年中的匹配观测资料对反演试验结果进行了地面验证. 研究的主要结论如下:

(1) 针对Line Mixing效应对卫星反演的影响进行了试验. 本文算法利用aer_v_3.2数据库反演得到的XCO₂值比利用HITRAN2008数据库的反演结果高0.5 ppm, 说明忽略Line Mixing效应可造成XCO₂约0.25%低估, 考虑Line Mixing效应是有必要的;

(2) 本文算法的反演试验结果与GOSAT L2B产品比较接近, 差别在1%以内, 同时两个波段上, 卫星观测的光谱与模式模拟的光谱相当接近, 两个波段上残差偏差与观测光谱基线之比的最大值约2%, 均方根小于1%, 在气溶胶光学厚度小于0.3的情况下, 本文反演结果与GOSAT L2B产品精度接近;

(3) 本文构建的算法对GOSAT卫星观测光谱反演的XCO₂浓度和TCCON站点的地基观测反演结果比较一致, 平均值最大相差2 ppm, 说明在气溶胶光学厚度小于0.3的相对干净的大气状态下, 能够满足二氧化碳1%的探测精度要求.

虽然本文建立的反演算法结果与GOSAT官方数据产品精度相当, 与地基观测反演结果的差别小于1%, 能够满足我国碳卫星的任务要求, 但反演试验结果是在气溶胶光学厚度小于0.3的大气条件下获得的. 而实际上, 我国经济发达地区的气溶胶分布状况都偏离这个假定条件, 因此探索高浓度气溶胶背景下卫星反演CO₂浓度的有效方法仍然是有待攻关的重要任务.

致谢 Jean-Michel Hartmann博士无私地提供了计算Line Mixing的程序及数据库, GOSAT团队提供卫星数据, AER网站提供LBLRTM逐线积分模式, TCCON提供XCO₂观测资料, 欧洲中心提供ECMWF再分析资料, 美国地质机构(USGS)提供GTOPO30高程数据, Robert Spurr博士提供VLIDORT辐射传输模式, 在此一并致谢.

参考文献

- Aben I, Hasekamp O, Hartmann W. 2007. Uncertainties in the space-based measurements of CO₂ columns due to scattering in the Earth's atmosphere. *J Quant Spectrosc Ra*, 104: 450–459
- Chevallier F, Deutscher N M, Conway T J, et al. 2011. Global CO₂ fluxes inferred from surface air-sample measurements and from TCCON retrievals of the CO₂ total column. *Geophys Res Lett*, 38, doi: 10.1029/2011GL049899
- Clough S A, Shephard M W, Mlawer E J, et al. 2005. Atmospheric radiative transfer modeling: A summary of the AER codes. *J Quant Spectrosc Ra*, 91: 233–244
- Crisp D, Bosch H, Brown L, et al. 2012. OCO (Orbiting Carbon Observatory)-2 level 2 full physics retrieval algorithm theoretical basis. Tech. Rep. OCO D-65488, NASA Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, Pasadena, CA, version 1.0
- GLOBALVIEW-CO₂. 2006. Cooperative atmospheric data integration project carbon dioxide. CD-ROM, NOAA CMDL, Boulder, Colorado
- Guerlet S, Butz A, Schepers D, et al. 2013. Impact of aerosol and thin cirrus on retrieving and validating XCO₂ from GOSAT shortwave infrared measurements. *J Geophys Res*, 118: 4887–4905
- Hartmann J M, Tran H, Toon G C. 2009. Influence of line mixing on the retrievals of atmospheric CO₂ from spectra in the 1.6 and 2.1 μm regions. *Atmos Chem Phys*, 9: 7303–7312
- Herbin H, Labonnote L C, Dubuisson P. 2013. Multispectral information from TANSO-FTS instrument-Part 1: Application to greenhouse gases (CO₂ and CH₄) in clear sky conditions. *Atmos Meas Tech*, 6: 3301–3311
- IPCC. 2007. Intergovernmental panel on climate change (IPCC), 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: Cambridge University Press. 996–999
- Ishida H, Nakajima T Y. 2009. Development of an unbiased cloud detection algorithm for a space-borne multispectral imager. *J Geophys Res*, 114, doi: 10.1029/2008JD010710
- Kuze A, Suto H, Nakajima M, et al. 2009. Thermal and near infrared sensor for carbon observation Fourier-transform spectrometer on the Greenhouse gases Observing Satellite for greenhouse gases monitoring. *Appl Optics*, 48: 6716–6733
- Lamoureux J, Tran H, Laraia A L, et al. 2010. Updated database plus software for line-mixing in CO₂ infrared spectra and their test using laboratory spectra in the 1.5–2.3 μm region. *J Quant Spectrosc Ra*, 111: 2321–2331
- Liu Y, Yang D X, Cai Z N. 2013. A retrieval algorithm for TanSat XCO₂ observation: Retrieval experiments using GOSAT data. *Chin Sci Bull*, 58: 1520–1523
- Messerschmidt J, Macatangay R, Notholt J, et al. 2010. Side by side measurements of CO₂ by ground-based Fourier transform spectrometry (FTS). *Tellus Ser B-Chem Phys Meteorol*, 62: 749–758
- O'Dell C W, Connor B, Bösch H, et al. 2012. The ACOS CO₂ retrieval algorithm-Part 1: Description and validation against synthetic observations. *Atmos Meas Tech*, 5: 99–121
- Pickett-Heaps C A, Rayner P J, Law R M, et al. 2011. Atmospheric CO₂ inversion validation using vertical profile measurements: Analysis of four independent inversion models. *J Geophys Res*, 116, doi: 10.1029/2010JD014887
- Rodgers C D. 2000. Inverse methods for atmospheric sounding: Theory and practice. World Scientific Publishing. 85
- Rothman L S, Gordon I E, Barbe A, et al. 2009. The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database. *J Quant Spectrosc Ra*, 110: 533–572
- Spurr R J D. 2006. VLIDORT: A linearized pseudo-spherical vector discrete ordinate radiative transfer code for forward model and retrieval studies in multilayer multiple scattering media. *J Quant Spectrosc Ra*, 102: 316–342
- Wunch D, Toon G C, Blavier J F L, et al. 2011. The total carbon column observing network. *Philos Trans R Soc A-Math Phys Eng Sci*, 369: 2087–2112
- Yokota T, Yoshida Y, Eguchi N, et al. 2009. Global concentrations of CO₂ and CH₄ retrieved from GOSAT: First preliminary results. *Sola*, 5: 160–163
- Yoshida Y, Ota Y, Eguchi N, et al. 2011. Retrieval algorithm for CO₂ and CH₄ column abundances from short-wavelength infrared spectral observations by the Greenhouse gases observing satellite. *Atmos Meas Tech*, 4: 717–734
- Yoshida Y, Kikuchi N, Morino I, et al. 2013. Improvement of the retrieval algorithm for GOSAT SWIR XCO₂ and XCH₄ and their validation using TCCON data. *Atmos Meas Tech*, 6: 1533–1547