

叶绿素荧光对 CO₂ 反演的影响及校正方法研究

蒋芸^{1,2**}, 叶函函^{1*}, 王先华¹, 段锋华^{1,2}, 吴浩^{1,2}, 吕松^{1,2}

¹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;

²中国科学技术大学, 安徽 合肥 230026

摘要 针对植物叶绿素荧光(fluorescence)对 CO₂ 反演精度影响重视不足的问题,调研了全球植被荧光分布,模拟分析了荧光对大气 CO₂ 柱平均干空气体积混合比(XCO₂)的影响。模拟计算表明,当忽略荧光的影响时,在极端情况下 XCO₂ 的反演误差可达 15×10^{-6} ;但是在全物理反演方法中同步反演 0.755 μm 处的荧光时,可把反演误差校正到 0.5×10^{-6} 以内。用 TCCON (The Total Carbon Column Observing Network) 站点 Park Falls 附近的 GOSAT (Greenhouse Gases Observing Satellite) 夏季的数据进行反演,发现同步反演荧光可以把误差从 6×10^{-6} 校正到 2×10^{-6} 以内。上述实验结果表明,在高精度需求情况下,植物叶绿素荧光是一个不可忽略的因素。

关键词 大气光学; 散射效应; 三光谱带; 荧光; 反演

中图分类号 P413

文献标识码 A

doi: 10.3788/AOS201838.0901004

Influence of Chlorophyll Fluorescence on Retrieval Accuracy of Carbon Dioxide and the Correction Method

Jiang Yun^{1,2**}, Ye Hanhan^{1*}, Wang Xianhua¹,
Duan Fenghua^{1,2}, Wu Hao^{1,2}, Lü Song^{1,2}

¹Key Laboratory of Optical Calibration and Characterization of Chinese Academy of Sciences, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei, Anhui 230031, China;

²University of Science and Technology of China, Hefei, Anhui 230026, China

Abstract Aiming at the insufficient attention to influence of plant chlorophyll fluorescence on the accuracy of CO₂ inversion, we investigate the global vegetation fluorescence distribution, and simulate the influence of fluorescence column-averaged CO₂ dry-air mixing ratio (XCO₂). The simulation shows that when chlorophyll fluorescence is neglected, the inversion maximum error of XCO₂ can reach 15×10^{-6} . This bias can be controlled within 0.5×10^{-6} by synchronous inversion fluorescence in a full-physics based retrieval. We retrieve the summer data of the Greenhouse Gases Observing Satellite (GOSAT) near Park Falls TCCON (The Total Carbon Column Observing Network) site. It is found that the error is corrected from 6×10^{-6} to less than 2×10^{-6} based on synchronous inversion fluorescence. This research shows that chlorophyll fluorescence cannot be neglected in high precision CO₂ inversion.

Key words atmospheric optics; scattering effect; three spectrum bands; fluorescence; retrieval

OCIS codes 010.1290; 100.5070; 280.1310

1 引言

CO₂ 作为大气中的主要温室气体^[1],其辐射造成的全球变暖已成为最具影响力的全球环境问题之

一^[2]。模式模拟结果显示要识别并描述地表 CO₂ 源汇的季节变化,大气 CO₂ 柱平均干空气体积混合比(XCO₂)的观测精度必须达到 0.3%~0.5%^[3]。然而一系列针对 CO₂ 卫星观测数据的研究^[4-6]指

收稿日期: 2018-03-15; 修回日期: 2018-04-17; 录用日期: 2018-04-23

基金项目: 国家重点研发计划(2017YFB0504000,2017YFB0504001)、高分辨对地观测系统重大专项(民用部分)项目(32-Y20A17-9001-15/17)、国家自然科学基金项目(41601393,41505020)、中国科学院合肥物质科学研究院“十三五”规划重点支持项目

* E-mail: yehhgo@gmail.com; ** E-mail: jyustc@163.com

出,大气散射作用会严重阻碍 CO₂ 的高精度观测。基于 O₂-A、CO₂ 1.6 μm 和 2.06 μm 三光谱带的全物理反演方法是常用的散射校正方法。

陆地植被中的叶绿素在红光和近红外波长范围内会发射荧光信号。0.76 μm 附近的 O₂-A 光谱带位于荧光波长区域,当前及未来应用 O₂-A 光谱带反演气溶胶参数的方法更多地用于痕量气体(例如 CO₂)反演过程中的气溶胶校正。相对于无叶绿素荧光(fluorescence)的情况,叶绿素荧光的存在,使得 O₂-A 光谱带吸收谱线稍微变浅,呈现一种弱影响。由于叶绿素荧光影响较弱,在以往的大气 CO₂ 反演中没有给予足够重视。然而针对现有卫星遥感数据 CO₂ 反演精度不足的情况,需要研究植被类型、分布和季节变化引起的叶绿素荧光差异,叶绿素荧光对大气 CO₂ 反演影响程度,以及叶绿素荧光与其他参量如气溶胶、地表反射率的耦合等影响因素。

叶函函等^[7]针对全物理反演方法校正散射展开了模拟研究;美国 OCO(Orbiting Carbon Observatory)小组针对 GOSAT(Greenhouse Gases Observing Satellite)数据设计的 ACOS(Atmospheric CO₂ Observations from Space)算法,同步获得 4 种气溶胶类型对应的消光效率、单次散射反照率和地表反照率^[8]。他们在利用全物理反演方法校正散射影响时都需要利用 O₂-A 光谱带,但都没考虑叶绿素荧光的影响。Guanter 等^[9]和 Sanders 等^[10]采用 O₂ 吸收线的荧光全物理方法对叶绿素荧光进行反演研究。Frankenberg 等^[11]发现 O₂-A 光谱带连续谱强度在 1%~2% 的叶绿素荧光,会带来地表反射率 1%、气溶胶光学厚度(AOT)0.1、气溶胶层高 5 km、地表压力 10 hPa 的偏差。他们主要专注于叶绿素荧光以及叶绿素荧光对反演参量的影响,并没有研究叶绿素荧光对大气 CO₂ 反演精度的影响。据此,本文从模拟和反演两方面,研究不同叶绿素荧光强度情况下考虑与忽略叶绿素荧光影响的反演结果,以分析叶绿素荧光对 CO₂ 反演结果的影响,并对该影响进行校正。CO₂ 反演方法采用的是全物理算法,这是由于全物理反演方法最能体现光辐射和传输过程对反演精度的影响,也是目前应用最广泛的反演算法。

2 全物理反演原理与方法

O'Dell 等^[12]提出全物理反演方法,基于辐射传输过程的完全建模,利用 Gauss-Newton 最优迭代算法求解大气辐射传输方程,从观测中同步获

得所有散射相关参量与目标气体的含量。该方法基于 0.76 μm O₂-A 光谱带、1.6 μm CO₂ 弱吸收光谱带和 2.06 μm CO₂ 强吸收光谱带的光谱,提取辐射影响参数。其中 O₂-A 光谱带和 2.06 μm CO₂ 强吸收光谱带的作用是标定 1.6 μm CO₂ 弱吸收光谱带的大气散射,降低大气散射对 CO₂ 反演的影响。

Gauss-Newton 就是一种兼顾先验状态和测量状况的最佳结果迭代计算方法。在输入初始状态向量后,迭代过程中,第 i 次迭代更新的状态向量 \mathbf{X}_{i+1} 如下:

$$\mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i + (\mathbf{S}_a^{-1} + \mathbf{K}_i^T \cdot \mathbf{S}_e^{-1} \mathbf{K}_i)^{-1} \{ \mathbf{K}_i \cdot \mathbf{S}_e^{-1} \times [\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}_i)] - \mathbf{S}_a^{-1} \cdot (\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_a) \}, \quad (1)$$

式中: \mathbf{K}_i 为每个光谱对第 i 次迭代的状态向量的权重函数; \mathbf{S}_a 为先验误差协方差矩阵; \mathbf{S}_e 为测量误差协方差矩阵; \mathbf{y} 为三光谱带实测谱辐亮度信息; $\mathbf{F}(\mathbf{x}_i)$ 为第 i 次迭代对应的三光谱带的模拟谱辐亮度信息; \mathbf{X}_a 为先验信息。

在现有的辐射传输模型中,卫星观测到的光谱辐射公式为

$$I(\nu) = I_0(\nu) \exp[-\tau(\nu)] \cos \theta_a(\nu) \pi^{-1}, \quad (2)$$

式中: ν 为波数; I_0 为大气顶太阳照度谱; $\tau(\nu)$ 为消光光学厚度,包括气体吸收和大气粒子散射; θ 为太阳天顶角; a 为反照率。当地表假设为朗伯体时,反照率 a 为固定值。

若考虑到植被叶绿素荧光的存在,上述辐射传输模型必须进行修正,其表达式为

$$I(\nu) = I_0(\nu) \exp[-\tau(\nu)] \cos \theta_a(\nu) \pi^{-1} + I_{Fs}, \quad (3)$$

式中: I_{Fs} 为经过大气衰减后的地表植物发射的信号,即日光诱导叶绿素荧光信号。

修正后的辐射传输模型与常规的传输模型存在两方面的不同:一是增加了荧光辐射量 I_{Fs} ;二是存在辐射传输过程上的差异。差异为:太阳辐射为入射和反射的双光程大气辐射,而叶绿素荧光为植被发射的单光程大气辐射。叶绿素荧光改变了 O₂ 吸收线,使得 O₂ 吸收峰变浅。考虑到地表反射耦合、气溶胶散射等的影响,在利用全物理反演方法反演 CO₂ 时,叶绿素荧光的存在会影响地表反射率与气溶胶光学厚度的反演结果,气溶胶光学厚度的反演结果传递到 CO₂ 波段,会直接影响到 XCO₂ 的反演结果。因此,在用三光谱带的全物理反演方法校正散射影响时,必须要考虑叶绿素荧光的影响,反演迭代公式见(1)式,此时状态向量 \mathbf{X}_i 中多了 0.755 μm

处的荧光强度,且 y 必须是植被区包含叶绿素荧光信息的实测谱。

3 不同环境参量条件下荧光强度对 CO_2 反演的影响

全球陆地植被叶绿素荧光地图如图 1 所示,从图中可以看出全球叶绿素荧光分布范围比较广泛,植被覆盖率高,且叶绿素荧光强度随季节和区域有明显的变化,在北半球的 7 月份和南半球的 12 月份分别达到峰值。这些强度不同的叶绿素荧光必然会对反演结果造成影响,而其与不同气溶胶强度、地表反射率等的耦合作用进一步加大了影响程度,造成反演精度的差异,形成区域间浓度的伪差异。以气候变化研究为目的的卫星大气 CO_2 遥感,在应用上是以比对区域间相对浓度关系的源汇为基础的,因此由植被荧光分布上的差异引起的区域间 CO_2 浓度伪差异,必然影响其在气候变化研究上的应用能力。

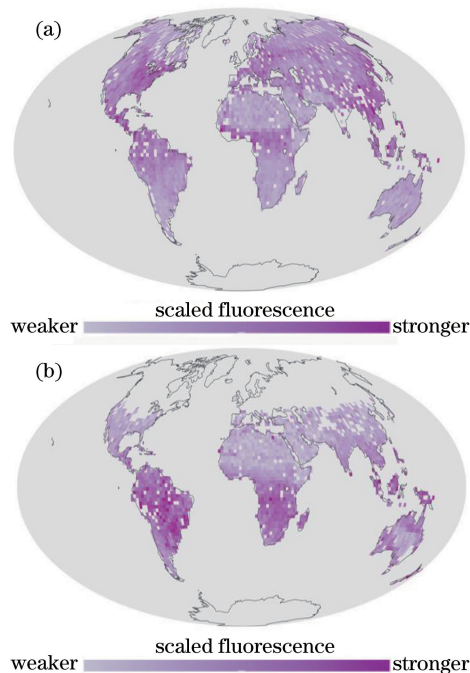


图 1 全球叶绿素荧光分布图。(a)7 月; (b)12 月

Fig. 1 Global chlorophyll fluorescence map.

(a)July; (b)December

Guanter 等^[13]利用 GOSAT 数据反演的 2012 年 7 月份和 12 月份全球植被叶绿素荧光反演结果得到普遍的认可,这一结果与 Frankenberg 等^[14]2011 年的反演结果也非常一致。这些结果显示,叶绿素荧光最高达到 $1.8 \text{ mW} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{sr}^{-1} \cdot \text{nm}^{-1}$,最低几乎为零。因此,叶绿素荧光强度区间为 $0 \sim$

$1.8 \text{ mW} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{sr}^{-1} \cdot \text{nm}^{-1}$,其他参量如表 1 所示。

表 1 模拟光谱对应的参数

Table 1 Factor of simulation spectral

Parameter	Variation range
Albedo (three bands)	0.05, 0.07, 0.09, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5
AOD ($0.55 \mu\text{m}$)	0.05, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5
Solarzenith angle / ($^\circ$)	30
Atmospheric profile	ECMWF

Note: ECMWF is European Centre for Medium-Range Weather Forecasts.

3.1 忽略叶绿素荧光的影响

由于地表与气溶胶之间在辐射传输上的耦合作用,本节将不同地表反射率与气溶胶光学厚度一并考虑。利用大气辐射传输模型 SCIATRAN 来模拟计算不同气溶胶光学厚度、不同地表反射率对应的 GOSAT 卫星观测值。模拟计算了 6 组不同叶绿素荧光条件下的光谱作为“实测谱”,以不考虑叶绿素荧光计算的光谱作为模拟谱,采用全物理反演方法进行 CO_2 反演。

图 2 给出考虑和不考虑叶绿素荧光对应的 XCO_2 反演结果偏差 Δ ,展示了不同气溶胶光学厚度和地表反射率条件下叶绿素荧光对 CO_2 反演的影响。由图可以看出:特定气溶胶状态下,地表反射率越大,叶绿素荧光的影响越小;特定地表反射率条件下,气溶胶光学厚度越大,叶绿素荧光的影响越大。随着叶绿素荧光强度的增加、地表反射率的减小和气溶胶光学厚度的增大, XCO_2 反演结果偏差越大,在叶绿素荧光强度为 $1.8 \text{ mW} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{sr}^{-1} \cdot \text{nm}^{-1}$ 、气溶胶光学厚度为 0.5、地表反射率为 0.05 时达到最大值, XCO_2 反演偏差为 15×10^{-6} 左右。地表反射率减小和气溶胶光学厚度增大,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。而叶绿素荧光作为一种地面辐射源,其作用相当于增大了表观反射率(地表反射率+叶绿素荧光对应的反射率),抵消了部分气溶胶的影响,在地表反射率值相对较小、气溶胶光学厚度较大的情况下,叶绿素荧光的作用凸显,此时叶绿素荧光对 CO_2 反演结果的影响就较大。

在全物理反演方法中忽略叶绿素荧光,误差会通过气溶胶光学厚度、地表反射率传递到 XCO_2 反演中,进而造成 XCO_2 反演误差。这就是在用全物理反演方法反演 CO_2 时叶绿素荧光不能忽略的原因。

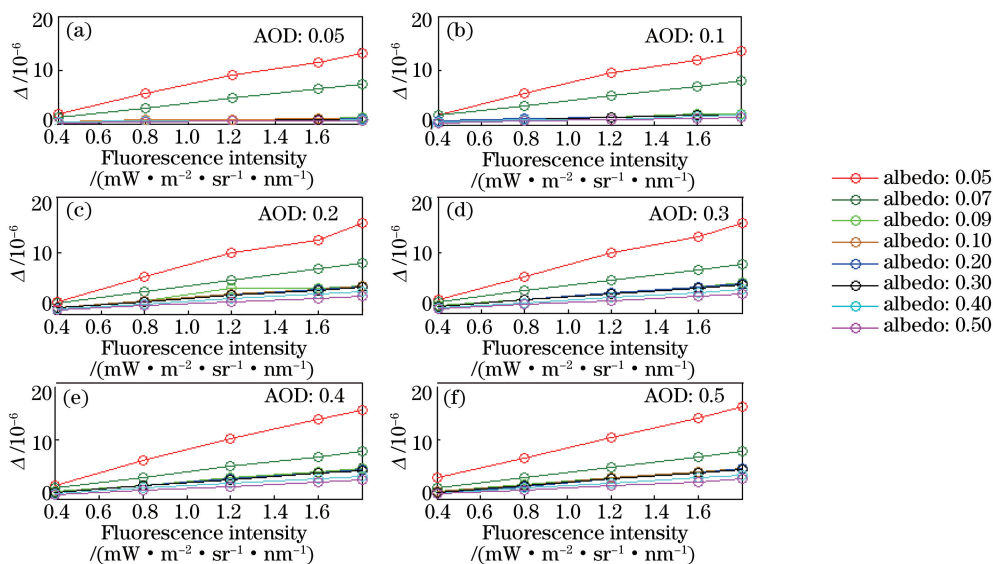


图 2 叶绿素荧光对 CO_2 的反演的影响。(a) AOD is 0.05; (b) AOD is 0.1; (c) AOD is 0.2; (d) AOD is 0.3; (e) AOD is 0.4; (f) AOD is 0.5

Fig. 2 Influence of chlorophyll fluorescence on CO_2 retrieval. (a) AOD is 0.05; (b) AOD is 0.1; (c) AOD is 0.2; (d) AOD is 0.3; (e) AOD is 0.4; (f) AOD is 0.5

3.2 考虑叶绿素荧光的影响

由于叶绿素荧光的存在会给 CO_2 反演带来高达 15×10^{-6} 的误差,用全物理反演方法反演 XCO_2 时将叶绿素荧光作为反演的状态向量。“实测谱”的计算条件与 3.1 一致,只是在计算 O_2-A 波段模拟光谱的时候,将 SCIATRAN 软件的控制文件中的叶绿素荧光选项打开,以添加了叶绿素荧光

计算出的光谱作为模拟谱,同步反演气溶胶光学厚度、地表反射率、 $0.755 \mu m$ 处的叶绿素荧光强度、 XCO_2 。 XCO_2 反演结果如图 3 所示,反演结果的偏差计算方法与(4)式相同。图 3 展示了同步反演叶绿素荧光可以把 XCO_2 反演误差降到 0.5×10^{-6} 以内,几乎可以消除 3.1 中叶绿素荧光造成的反演误差。

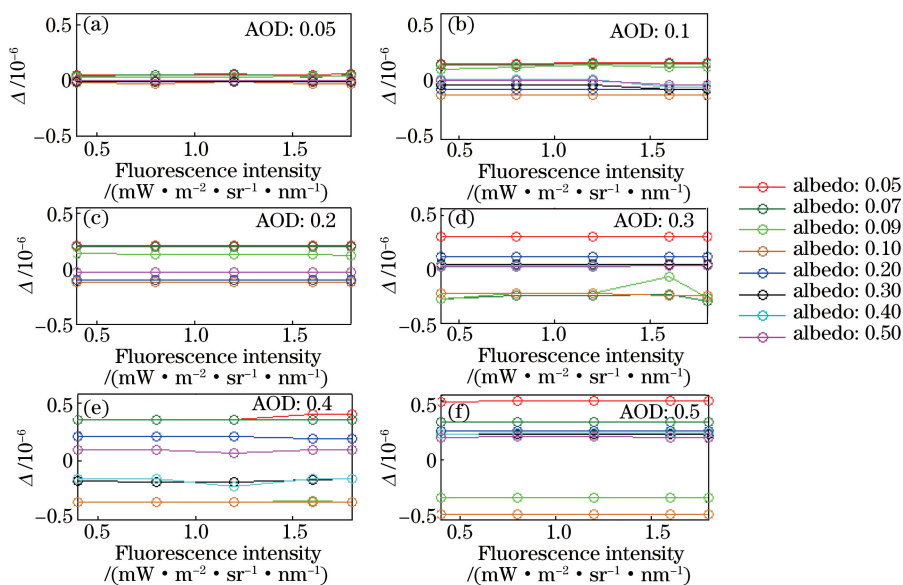


图 3 同步反演叶绿素荧光时 XCO_2 的反演偏差。(a) AOD is 0.05; (b) AOD is 0.1; (c) AOD is 0.2; (d) AOD is 0.3; (e) AOD is 0.4; (f) AOD is 0.5

Fig. 3 Inversion bias of XCO_2 during simultaneous inversion of chlorophyll fluorescence. (a) AOD is 0.05; (b) AOD is 0.1; (c) AOD is 0.2; (d) AOD is 0.3; (e) AOD is 0.4; (f) AOD is 0.5

忽略叶绿素荧光的影响,会给 CO_2 反演带来高达 15×10^{-6} 左右的偏差,而考虑叶绿素荧光的影响时,可以把反演误差修正到 0.5×10^{-6} 以内。由此可以看出,用全物理方法反演植被区 CO_2 时,必须把叶绿素荧光作为状态向量同步反演,以达到高精度 CO_2 反演的需求。

4 实测数据验证

叶绿素荧光的存在会给 CO_2 反演结果带来误差,且这种影响在叶绿素荧光信号较强的区域尤为明显。从图 1 可以看出植被在北半球 7 月份(夏季)的叶绿素荧光强度远远大于北半球 12 月份(冬季)。由于叶绿素荧光信号较弱,且实测数据不可避免地受仪器噪声等的影响,因此要选择叶绿素荧光信号较强的实测数据来做反演分析。

TCCON(The Total Carbon Column Observing Network)是温室气体反演的可靠参考源,这是因为它直接的太阳观测几何结构可以在一定程度上消除大气散射和叶绿素荧光的影响。选择了 TCCON 中的 Park Falls 站点($45.9^\circ\text{N}, 90.3^\circ\text{W}$),该站点位于北半球,周围是大面积的森林和草地。为了保证所选的 GOSAT 数据在植被覆盖区,以该站点为中心,选择经纬度相差 1.5° 以内的夏季陆地 GOSAT 观测数据重复 3.1 和 3.2 节的两种反演方法。得到的反演结果与 TCCON 站点提供的 XCO_2 反演结果对比如图 4 所示,由图 4 可以看出,叶绿素荧光的影响使得反演结果整体偏大,最大偏差为 6×10^{-6} ,而同步反演叶绿素荧光时可以把反演误差控制在 2×10^{-6} 以内。实测光谱同步反演叶绿素荧光时 CO_2 偏差比模拟谱大,这可能是因为反演时忽略了实际光谱中散射对叶绿素荧光的影响。

5 结 论

在大气辐射传输中,叶绿素荧光是一个较小的量。基于地球表面植被叶绿素荧光分布的调研结果,进行大气辐射传输模拟与基于全物理方法的反演误差研究。结果表明叶绿素荧光的存在会通过影响气溶胶光学厚度、地表反射率进而影响 XCO_2 的反演结果。在模拟计算条件下,这种影响在地表反射率为 0.05、气溶胶光学厚度为 0.5、叶绿素荧光强度为 $1.8 \text{ mW} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{sr}^{-1} \cdot \text{nm}^{-1}$ 时达到最大, XCO_2 的反演误差约为 15×10^{-6} 。在反演方法和反演过程中若考虑了叶绿素荧光因素,则可以把反演误差降到 0.5×10^{-6} 以内。在实测光谱反演时,忽略

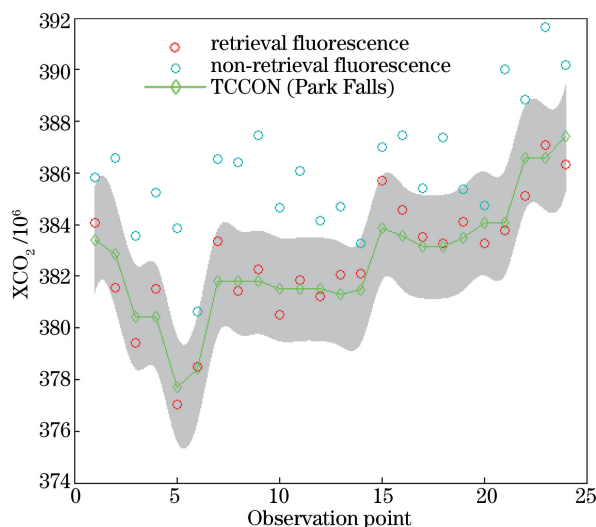


图 4 Park Falls 站点附近夏天时的 GOSAT 数据(反演叶绿素荧光与不反演叶绿素荧光对 CO_2 反演的影响)

Fig. 4 GOSAT summer data near Park Falls site (influence of retrieval and non-retrieval chlorophyll fluorescence on CO_2 inversion)

叶绿素荧光的影响会造成 XCO_2 高达 6×10^{-6} 的偏差;同步反演叶绿素荧光时,由于忽略了散射对叶绿素荧光的影响,校正之后的 XCO_2 偏差比模拟反演时大。由于叶绿素荧光的存在产生的 CO_2 反演误差已经影响了用于气候研究应有的精度,地表 CO_2 源汇的变化难以描述,因此在后续反演过程中,叶绿素荧光是个不忽略的因素。

参 考 文 献

- [1] Xiang L, Zhou Q X, Zhou S Q, *et al.* Comparisons of CO_2 emission from fuel combustion among major countries and regions[J]. *Advances in Climate Change Research*, 2009, 5(5): 278-284.
向亮, 高庆先, 周锁铨, 等. 世界主要 CO_2 排放国家和地区的排放状况及对比分析[J]. *气候变化研究进展*, 2009, 5(5): 278-284.
- [2] Liu Y, Lü D R, Chen H B, *et al.* Advances in technologies and methods for satellite remote sensing of atmospheric CO_2 [J]. *Remote Sensing Technology and Application*, 2011, 26(2): 247-254.
刘毅, 吕达仁, 陈洪滨, 等. 卫星遥感大气 CO_2 的技术与方法进展综述[J]. *遥感技术与应用*, 2011, 26(2): 247-254.
- [3] Vydrov O A, Heyd J, Krukau A V, *et al.* Importance of short-range versus long-range Hartree-Fock exchange for the performance of hybrid density functionals[J]. *Journal of Chemical Physics*, 2006, 125(7): 074106.
- [4] Oshchepkov S, Bril A, Yokota T, *et al.* Effects of

- atmospheric light scattering on spectroscopic observations of greenhouse gases from space: Validation of PPDF-based CO₂ retrievals from GOSAT[J]. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, 2012, 117(D12): D12305.
- [5] Jiang X H, Wang X H, Ye H H, *et al.* Correction method of atmospheric scattering effect through optical path in CO₂ retrieval[J]. *Acta Optica Sinica*, 2014, 34(8): 0801005.
江新华, 王先华, 叶函函, 等. CO₂ 反演中大气散射影响的光程校正方法[J]. *光学学报*, 2014, 35(8): 0801005.
- [6] Duan F H, Wang X H, Ye H H, *et al.* Carbon dioxide retrieval method based on statistics and optical path distribution [J]. *Acta Optica Sinica*, 2017, 37(5): 0501003.
段锋华. 王先华. 叶函函. 等. 基于统计与光程分布的 CO₂ 反演方法研究[J]. *光学学报*, 2017, 37(5): 0501003.
- [7] Ye H H, Wang X H, Jiang X H, *et al.* Correction method of atmospheric scattering effect based on three spectrum bands[J]. *Spectroscopy Spectral Analysis*, 2016, 36(3): 618-623.
叶函函, 王先华, 江新华, 等. 基于三光谱带的大气散射效应校正方法[J]. *光谱学与光谱分析*, 2016, 36(3): 618-623.
- [8] Frankenberg C, Butz, A, Toon G C. Disentangling chlorophyll fluorescence from atmospheric scattering effects in O₂ A-band spectra of reflected sun-light[J]. *Geophysical Research Letters*, 2011, 38 (3): L03801.
- [9] Guanter L, Alonso L, Gómez-Chova L, *et al.* Developments for vegetation fluorescence retrieval from spaceborne high resolution spectrometry in the O₂ A and O₂ - B absorption bands [J]. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, 2010, 115 (D19): D19303.
- [10] Sanders A F J, de Haan J F. Retrieval of aerosol parameters from the oxygen A band in the presence of chlorophyll fluorescence[J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2013, 6(10): 2725-2740.
- [11] Frankenberg C, O'Dell C, Guanter L, *et al.* Remote sensing of near-infrared chlorophyll fluorescence from space in scattering atmospheres: implications for its retrieval and interferences with atmospheric CO₂ retrievals[J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2012, 5(8): 2081-2094.
- [12] O'Dell C W, Connor B, Bösch H, *et al.* The ACOS CO₂ retrieval algorithm - Part 1: Description and validation against synthetic observations[J]. *Atmospheric Measurement Techniques Discussions*, 2011, 4(5): 6097-6158.
- [13] Guanter L, Frankenberg C, Dudhia A, *et al.* Retrieval and global assessment of terrestrial chlorophyll fluorescence from GOSAT space measurements[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2012, 121: 236-251.
- [14] Frankenberg C, Fisher J B, Worden J, *et al.* New global observations of the terrestrial carbon cycle from GOSAT: Patterns of plant fluorescence with gross primary productivity[J]. *Geophysical Research Letters*, 2011, 38(17): L17706.