

应用于 GF-5 卫星的大气 CO₂ 协同反演算法吴时超^{1,2}, 王先华^{1*}, 叶函函¹, 李超^{1,2}, 安源^{1,2}, 王晓迪^{1,2}¹中国科学院合肥物质科学研究院安徽光学精密机械研究所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 基于我国 GF-5 号卫星上大气温室气体监测仪(GMI)的遥感数据,开展中国区域的 CO₂ 反演实验,根据中国区域特征差异对 CO₂ 廓线样本进行统计,构建了适合中国区域特征、具有代表性的样本集,然后将统计反演得到的 CO₂ 廓线作为初始值代入物理反演方法当中,形成协同统计和物理方法的新算法。通过分析新算法的反演结果,得出协同反演算法在单独使用物理反演算法的基础上精度提高了 47.7%,其反演结果与国际上同类型的卫星 OCO-2 提供的观测结果的相关性达到 88.5%。

关键词 大气光学; 大气温室气体监测仪; CO₂; 协同反演算法

中图分类号 P407

文献标志码 A

doi: 10.3788/AOS202141.1501002

Atmospheric CO₂ Cooperative Inversion Algorithm Applied to GF-5 Satellite

Wu Shichao^{1,2}, Wang Xianhua^{1*}, Ye Hanhan¹, Li Chao^{1,2},
An Yuan^{1,2}, Wang Xiaodi^{1,2}

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

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

Abstract This paper carried out CO₂ inversion experiments based on the remote sensing data from the greenhouse gases monitoring instrument (GMI) on the GF-5 satellite in China, calculated the CO₂ profile samples according to the differences in China's regional characteristics, and constructed the representative sample set suitable for China's regional characteristics. Then, it substituted the CO₂ profile obtained by statistical inversion as the initial value into the physical inversion method to form a new algorithm for synergistic statistics and physical methods. By analyzing the inversion results of the new algorithm, we conclude that the collaborative inversion algorithm improves the accuracy by 47.7% on the basis of using the physical inversion algorithm alone, and the correlation between the inversion results of the new algorithm and the observation results provided by the international satellite of the same type, OCO-2, reaches 88.5%.

Key words atmospheric optics; greenhouse gases monitoring instrument; CO₂; collaborative inversion algorithm

OCIS codes 010.1290; 100.5070; 280.1310

1 引言

科学研究与统计结果表明,地球温室气体浓度

逐年增长,自然灾害变得愈发严重。联合国碳排放差异报告中指出全球各国环境保护政策的首要工作是减少碳排放量^[1]。高精度的 CO₂ 监测是检验碳

收稿日期: 2020-12-23; 修回日期: 2021-02-01; 录用日期: 2021-03-09

基金项目: 国家重点研发计划(2017YFB050400, 2017YFB0504001)、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(Y73H9P1801)、民用航天技术预先研究项目(多模态大气主要温室气体监测仪)

通信作者: *xhwang@aiofm.ac.cn

排放量的必要手段,其中遥感卫星探测是在全球范围内进行 CO₂ 高精度监测的主要方式。目前,针对温室气体的探测,国际上主要有 GOSAT 和 OCO 卫星^[2],我国有 2018 年发射的 GF-5 卫星上携带的大气温室气体监测仪(GMI)。GMI 主要用于 CO₂ 等温室气体的遥感反演。

卫星遥感监测大气 CO₂ 的过程中最重要的部分是反演过程,由于 CO₂ 遥感监测面临复杂多变的大气环境,高精度反演难度较大。CO₂ 浓度反演结果的应用价值取决于其值的精确性,只有高准确性、高稳定性的反演结果才能保证其应有的应用效能。目前,常用的大气 CO₂ 的卫星反演测量方法有差分吸收光谱^[3]、光子光程概率分布密度函数^[4]、全物理反演方法等^[5],这些都是基于物理原理进行处理,然后用迭代的方式计算出反演结果。其中牛顿迭代法^[6]认定反演状态向量在测量数据中以既定的概率分布,这是由于这样的分布通常需要保证在一定的区间内,因此保证假设的合理性则显得尤为重要。段锋华等^[7]联合统计方法^[8]和光子光程概率分布密度函数方法进行遥感反演,将 CO₂ 的平均反演偏差和方差分别由单一算法的 0.5% 和 3.5 提高到了 0.38% 和 1.4,从中可以看出反演结果与反演算法的初值相关性很强。通常初值廓线的准确度可以决定反演结果的精度。

本文基于城市环境及地表类型,从中国区域不同地理特征和季节差异性出发,建立了中国区域的

CO₂ 浓度样本廓线集,利用主成分分析(PCA)方法进行统计,而后再将统计反演方法得到的 CO₂ 浓度廓线作为物理反演方法的初值廓线,代入协同统计和物理方法的新算法中,进行协同反演,最终 CO₂ 含量的监测精度得以提高。

2 反演数据与方法

2.1 反演数据

反演光谱数据由 GMI 载荷提供^[9],该载荷随 GF-5 卫星发射上天,其携带的温室气体监测仪由中国科学院安徽光学精密机械研究所研制而成。卫星轨道位于 705 km 处,回归周期为 7 d。该卫星能够在 ±25° 的范围内旋转,故 GF-5 卫星可以在中国境内和沿海地区进行为期 5 d 的再次遍历,全球数据可在 2 d 内测完,并能与美国的 A-Train 系列卫星进行同步测量验证。

GMI 采用空间外差技术进行精细辐亮度谱线的探测,该技术同时兼具傅里叶变换和光栅光谱仪的优点。使用高光谱技术进行监测,在对光谱数据进行纠错、傅里叶变换、光谱校准、辐射度校准等后,计算出所监测气体的辐射光谱。

GMI 的主要任务是获取氧气和二氧化碳气体强吸收谱段的高光谱数据,载荷详细参数如表 1 所示,表中 SNR 表示信噪比,FOV 表示视场。本文选取 2019 年 9 月中国区域内的 GMI 光谱数据进行反演算法研究。

表 1 GMI 主要仪器参数

Table 1 GMI main instrument parameters

Parameter	Technical indicator			
	O ₂	CO ₂	CH ₄	CO ₂
Central wavelength / μm	0.765	1.575	1.65	2.05
Spectral range / μm	0.759–0.769	1.568–1.583	1.642–1.658	2.043–2.058
Spectral resolution / cm ⁻¹		0.6		0.27
SNR		300		250
Radiometric calibration	Absolute accuracy: 5%		Relative accuracy: 2%	
FOV	14.6 mrad (10.3 km@705 km)			
Operating mode	Nadir observation model: 1, 5, 7, 9 points(Default mode is 5 points) Sunlight observation model; Calibration observation model			

2.2 CO₂ 统计反演方法

Smith 和 Woolf^[10] 在 1976 年应用统计回归方法反演了大气参数的垂直廓线。统计反演方法是对长时间序列的卫星观测数据进行收集并处理,从中快速获取准确、稳定的目标参数统计信息,为反演提供较合理的初值。本研究根据搜集和整理到的我国温室气体的监测资料,利用主成分分析法选取温室

气体最优初值进行反演,提高了物理算法的计算准确性。

但该方法的反演精度主要取决于样本集的构成,其中 CO₂ 廓线可从 Carbon Tracker^[11] 官网获得,这些廓线的垂直高度范围包含当地海拔高度至 50 km 左右,共计 25 层。使用辐射传输模型结合观测几何条件和仪器特征,对所有廓线训练样本进行

仪器观测的仿真。基于 GMI 观测点的观测参数、地面信息、环境参量等信息,使用 SCIATRAN 软件模拟卫星获取到的光谱,并使用 GMI 的仪器线性函数对模拟光谱进行卷积,以提高模拟光谱与受仪器特性影响的测量光谱之间的一致性。

模型结果按照中国区域的差异特性进行划分,样本集分区是根据中国区域的 CO₂ 廓线特征进行的。根据源汇分布、季节波动、地势等差异,本研究将中国分成 5 个特征区,见图 1。中国的西部、东北、华北、华中与华东、华南 5 个区的 CO₂ 廓线特征各有不同,主要与城市环境及地表类型有关。根据中国城市分区图,可知 C1 为华南和小部分西南地区,C2 为华中和华东地区,有明显的 CO₂ 汇分布,地表浓度会出现较明显的降低,C1 区浓度普遍低于 C2 区,这是因为 C1 区工业型城市少,且海边空气流动快;C3 为华北地区,C4 为东北和一部分华北地区,有较明显的 CO₂ 源分布,特别是 C4 区,地表 CO₂ 浓度高达 6×10^{-4} 。C3 和 C4 在 CO₂ 柱浓度季节分布特征上也存在差异,C4 区的季节变化特征更加明显,这是因为东北相比华北地区有更高的植被覆盖率;Cwest 包括西北和大部分西南地区,地表基本无 CO₂ 源,地表浓度值较小,且近地表廓线较稳定。

时间上主要进行了样本的随机选择和预测。

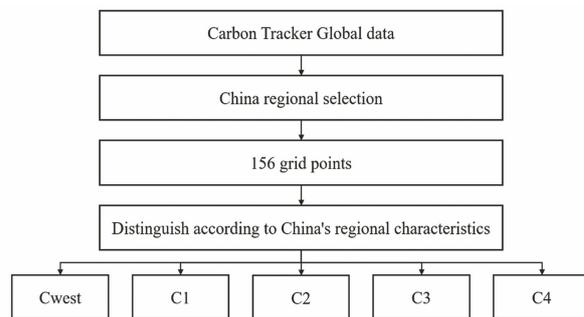


图 1 CO₂ 廓线训练样本空间选择流程示意图

Fig. 1 Schematic diagram of sample space selection process for CO₂ profile training

随机选择是考虑到廓线样本的大小对辐亮度样本的大小起着决定性作用,因此每个栅格点并没有选择完整的多年廓线,而是按浓度分布抽取几条代表性廓线。预测是考虑到未来全球 CO₂ 的变化趋势,在近三年来 CO₂ 浓度分布从 $3.7 \times 10^{-4} \sim 4.1 \times 10^{-4}$ 的基础上,将浓度外延至 4.4×10^{-4} 。

统计反演方法流程中,首先分别对 CO₂ 廓线训练样本集和辐亮度光谱集进行降维,提取主成分,根据主成分分析方法建立 CO₂ 廓线与辐亮度之间的统计回归系统集,然后根据实测的环境参量找到对应的统计回归系数,最后根据实测光谱、辐亮度光谱集、廓线样本集以及查找获得的统计回归系数,计算出 CO₂ 浓度廓线,构建样本集。具体流程如图 2 所示。

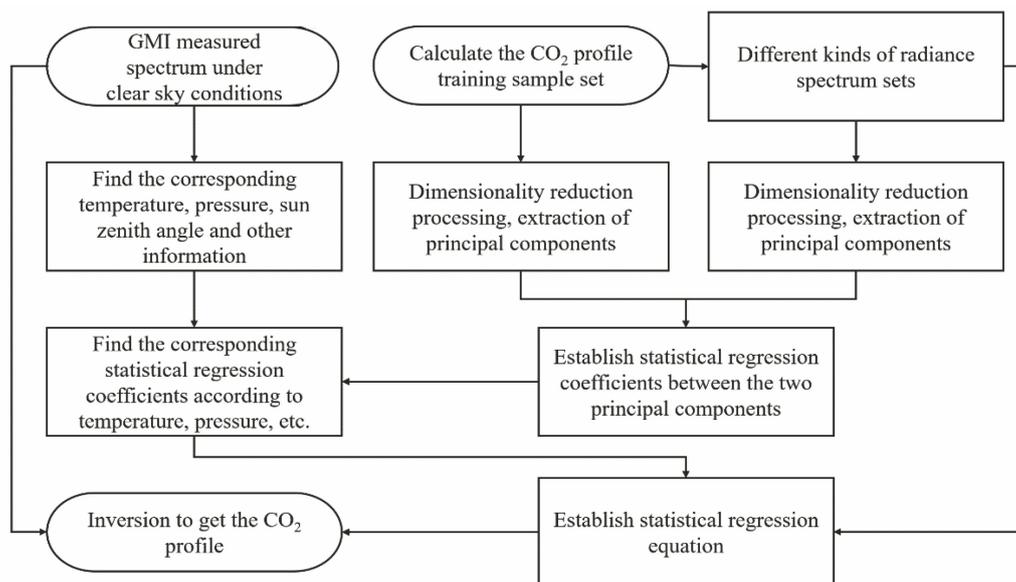


图 2 基于 PCA 的统计反演流程图

Fig. 2 PCA-based statistical inversion flowchart

2.3 同步物理最优化反演方法

三光谱带反演算法是利用氧气和二氧化碳吸收带的综合光谱信息,同步反演出气溶胶和 CO₂ 等参

数。卫星观测光谱为 y , 地表-大气状态向量为 x , 包含气溶胶光学厚度、三光谱带的 Albedo 和 XCO₂。前向模型仿真值为 $f(x)$ 。将模型中的大气和地表

变化值线性化,则权重函数矩阵表示为

$$\mathbf{K} = \partial \mathbf{y} / \partial \mathbf{x}, \quad (1)$$

式中 $K_{i,j} = \partial f_i / \partial x_j$ 代表每个光谱点 f_i 对第 j 个状态向量的敏感性。

使用迭代的方式求解状态向量时,若先验信息 \mathbf{x}_a 不符合实际值,或前向模型 $f(\mathbf{x})$ 没有线性特征,则无法迭代出结果。Rodgers 等^[12]提出了适用于大气廓线物理反演的最优化估计算法,通过牛顿迭代方法逐步逼近“真实值”。该方法是目前大气参数反演的主流方法。利用辐射传输软件对过程进行改进,用来缩短运算时间、提高运算结果精度,第 i 次迭代求解的值 \mathbf{x}_{i+1} 可表示为

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_e^{-1} \mathbf{K}_i + \mathbf{S}_a^{-1} + \lambda \mathbf{D}^2)^{-1} \cdot [\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_e^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{F}_i) - \mathbf{S}_a^{-1} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_a)], \quad (2)$$

式中: \mathbf{S}_e 为观测误差矩阵,应包括仪器噪声、前向模型误差和大气干扰; \mathbf{S}_a 为先验协方差矩阵,对反演先验值与反演结果进行约束; \mathbf{D} 为对角阵,用于约束迭代过程; \mathbf{F}_i 为实测光谱,由数据提供。物理反演算法中,通过求得代价函数的最小值来判断是否收敛,代价函数由所有反演通道上的两次迭代模拟谱的差值平方和组成,当代价函数小于某阈值时,反演收敛,得到反演结果。等步长修改 λ 值使得代价函数的值缩小。

本文创建了符合中国环境特征的 CO_2 廓线样本数据集,并协同统计与物理反演方法对 GMI 实测光谱数据进行了大气 CO_2 浓度反演。

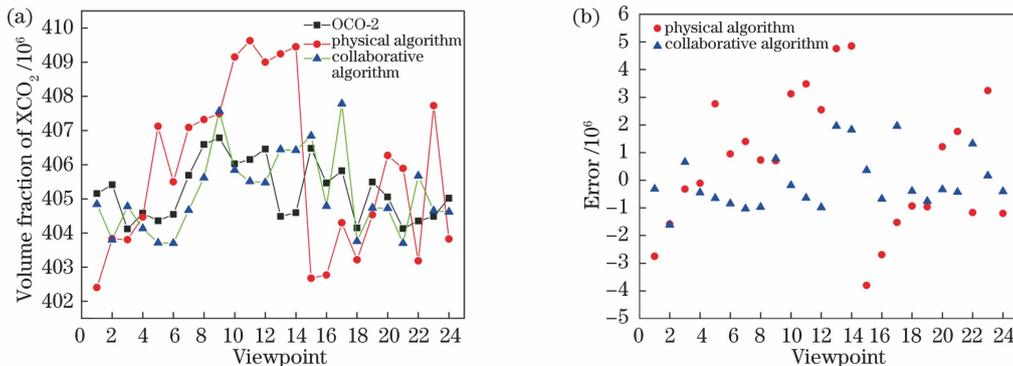


图 3 单一物理算法与协同算法的反演结果对比图。(a) XCO_2 的反演浓度;(b)误差

Fig. 3 Comparison of inversion results using a physical algorithm and collaborative statistical method.

(a) Volume fraction of XCO_2 ; (b) error

3.2 针对中国区域 GMI 实测数据的反演算法应用与结果验证

统计方法数据集中的 CO_2 先验廓线从美国国家海洋和大气管理局 (National Oceanic and Atmospheric Administration, NOAA) 全球 CO_2 建

3 反演结果与讨论

3.1 协同算法对反演精度的影响

反演结果的精度与反演初值的准确性的相关性较强,为检验统计方法得到的初值对改进反演结果精度的影响,进行了单独使用物理算法与协同算法的对比实验。使用精度与匹配性都较好的 OCO-2^[13] 观测数据作为真值进行结果验证。反演结果如图 2 所示,其中正方形点为 OCO-2 卫星产品的统计值,圆形点为单独使用物理反演方法反演得到的 CO_2 浓度值(体积分数),三角形点为协同统计与物理方法反演得到的大气 CO_2 浓度值,从图中可以清晰地看出协同方法反演得到的结果与 OCO-2 卫星的 CO_2 产品值更加接近,协同反演算法的结果相比于单独使用物理算法更加接近真值。对结果进行数据分析发现,协同反演方法较之前的单一物理反演方法的反演精度有大幅提高,反演精度由单一物理反演方法的 3.54×10^6 提高到 1.85×10^6 ,精度提高了 47.7%。

通过对比实验分析可得,协同方法由于联合了统计反演方法,获得了较符合真实大气 CO_2 浓度的先验值,使得物理反演方法有较好的约束。并且由于减小了初值与真实值的差距,缩减了迭代次数,故协同方法的反演运算速度加快,物理反演初始值的准确性提高,从而提升了反演结果精度。

模及同化系统 Carbon Tracker 数据库中获得, Carbon Tracker 同化数据库来自分布于世界各地的 NOAA 温室气体观测网站的精确测量数据,用于估计全球大气 CO_2 的分布和 CO_2 地表通量。在中国区域,依据地区的特性进行单独归纳。在实际反演

中,将 Carbon Tracker 获取的 25 层廓线通过插值转换成 46 层,基于此再计算所对应的先验值和协方差矩阵。

基于统计方法,构建初始值数据集 C1、C2、C3、C4、Cwest,选取中国区 2019 年 8 月可用于反演的 GMI 数据,采用主成分统计与物理反演方法相结合的方式进行了大气 CO₂ 浓度的反演,反演

结果如表 2 所示。选取目前国际上卫星遥感探测 CO₂ 浓度精度较高的仪器——美国 OCO-2 载荷仪器,采用其载荷产品作为我们反演对比真值进行算法精度的验证。根据 GMI 数据的时间与空间坐标信息,筛选出 OCO-2 在 2019 年 8 月的大气 CO₂ 浓度产品,列于表 2 中,用于精度对比验证。

表 2 GMI 与 OCO-2 数据反演结果

Table 2 GMI and OCO-2 data inversion results

Serial number	Volume fraction of CO ₂ /10 ⁶		Serial number	Volume fraction of CO ₂ /10 ⁶	
	GMI inversion result	OCO-2 product		GMI inversion result	OCO-2 product
1	404.12	405.55	13	401.85	402.87
2	402.56	402.85	14	402.46	402.62
3	401.97	402.09	15	402.04	402.42
4	402.46	403.01	16	402.04	402.42
5	401.69	401.82	17	403.43	403.59
6	401.09	400.91	18	404.67	405.01
7	400.74	401.18	19	398.45	400.03
8	402.84	403.21	20	402.74	402.52
9	400.85	401.08	21	399.36	399.75
10	402.73	402.30	22	403.63	403.66
11	401.31	401.55	23	402.14	403.05
12	401.86	401.87	24	403.40	403.56

将协同反演算法反演得到的大气 CO₂ 浓度结果与 OCO-2 卫星大气 CO₂ 浓度产品进行对比,如图 4 所示,可以发现经过匹配的点之间的浓度误差保持在 2×10^6 以内,且结果的相关性达到了 88.5%,这说明针对 GMI 数据的协同反演算法结果与国际同类型仪器的结果之间的相似性较高。

为了进一步验证结果的准确性,将反演结果与

通过时间、空间特征匹配到的 OCO-2 大气 CO₂ 浓度产品数据进行比较。如图 5 所示,图 5(a)为利用 GMI 实测光谱数据反演得到的 CO₂ 浓度结果,图 5(b)为按照空间与实践条件筛选出的相对应的 OCO-2 卫星数据观测结果,从图中可以看出,GMI 与 OCO-2 的反演 CO₂ 浓度值的大小分布规律基本保持一致。

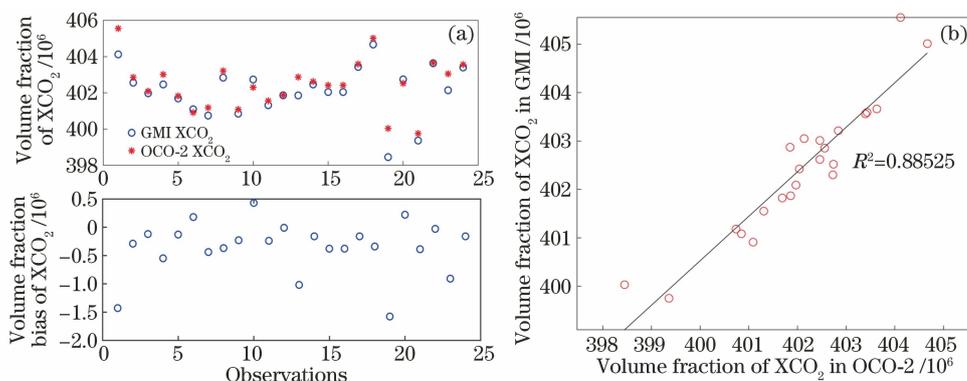


图 4 GMI 与 OCO-2 反演结果对比偏差图。(a)误差;(b)相关性

Fig. 4 Deviation graphs of GMI and OCO-2 inversion results. (a) Error; (b) correlation

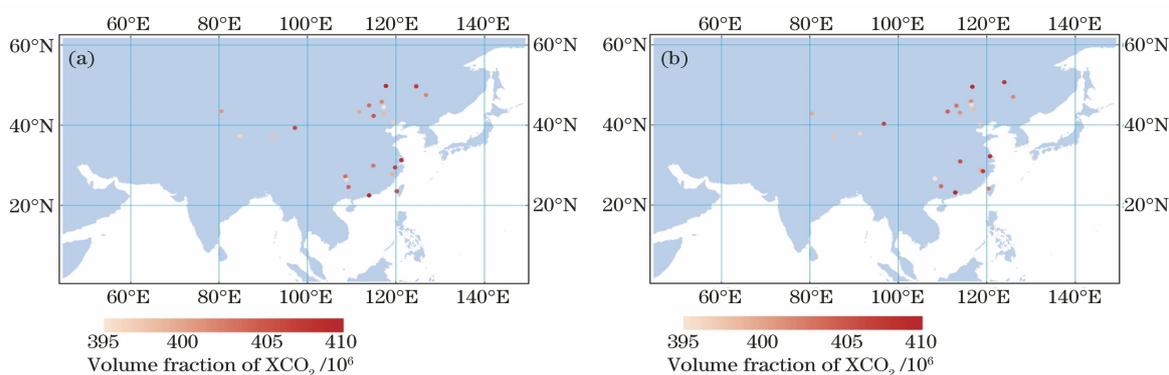


图 5 反演结果分布图。(a) GMI 反演值;(b) OCO-2 观测产品

Fig. 5 Inversion results distribution map. (a) GMI inversion result; (b) OCO-2 product value

4 结 论

为了保证大气环境碳排放监测的准确性,高精度的大气 CO_2 浓度反演方法是我们需要不断提升的目标与方向。由于物理反演方法与反演初值有较高的相关性,因此,相对准确的大气 CO_2 廓线对于反演结果的高精度则显得尤为重要。本研究通过对中国区域不同地区不同条件下大气 CO_2 廓线依据 PCA 方法进行统计、整理、归纳,得到一定条件下满足中国区域特征、具有代表性的 CO_2 浓度初始廓线,形成了反演初值样本数据集。

通过介绍物理反演方法原理,并与 PCA 获取初始 CO_2 廓线的方法相结合,利用 GF-5 号卫星携带大气温室气体监测仪 GMI 观测到的数据光谱进行反演实验。经过对比单独使用物理反演方法和协同反演方法,得出协同算法的 CO_2 浓度反演结果精度得到了较大的提升,精度提高了 47.7%。而后利用该协同算法对中国区域的 GMI 实测数据进行应用,并与 OCO-2 卫星产品相对比,发现二者反演结果的一致性较高,相似性达到了 88.5%。通过反演实验及结果验证,可以得出本文利用统计和物理方法协同反演可获得高精度的大气 CO_2 反演结果,该算法可作为 GMI 载荷的大气 CO_2 反演算法,亦可为全球的碳排放监测提供重要的技术支持。

参 考 文 献

- [1] United Nations Environment Programme. Bridging the emissions gap[M]//United nations environment programme. The emissions gap report 2012. New York: UN, 2012: 30-44.
- [2] Duan F H. Carbon dioxide inversion method under high aerosol conditions [D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2018.
- [3] Yang T P, Si F Q, Ping W, et al. Research on cloud fraction inversion algorithm of environmental trace gas monitoring instrument [J]. Acta Optica Sinica, 2020, 40(9): 0901001.
杨太平, 司福祺, Ping Wang, 等. 大气痕量气体差分吸收光谱仪云量反演算法研究 [J]. 光学学报, 2020, 40(9): 0901001.
- [4] Jiang Y, Ye H H, Wang X H, et al. Correction of effect of plant chlorophyll fluorescence based on optical path distribution method [J]. Acta Optica Sinica, 2019, 39(4): 0401002.
蒋芸, 叶函函, 王先华, 等. 基于光程分布方法校正植物叶绿素荧光的影响 [J]. 光学学报, 2019, 39(4): 0401002.
- [5] Ye H H, Wang X H, Wu J, et al. Systematic error estimation and correction in atmospheric CO_2 retrieval [J]. High Power Laser and Particle Beams, 2013, 25(11): 2841-2845.
叶函函, 王先华, 吴军, 等. 大气二氧化碳反演中系统误差的分析与校正 [J]. 强激光与粒子束, 2013, 25(11): 2841-2845.
- [6] Jiang X H, Wang X H, Ye H H, et al. Correction method of atmospheric scattering effect through optical path in CO_2 retrieval [J]. Acta Optica Sinica, 2014, 34(8): 0801005.
江新华, 王先华, 叶函函, 等. CO_2 反演中大气散射影响的光程校正方法 [J]. 光学学报, 2014, 34(8): 0801005.
- [7] 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二氧化碳反演方法 [J]. 光学学报, 2017, 37(5): 0501003.
- [8] Sang H, Wang X H, Ye H H, et al. Statistic

- retrieval method of carbon dioxide based on principal component analysis[J]. *Journal of Atmospheric and Environmental Optics*, 2017, 12(3): 202-209.
- 桑浩, 王先华, 叶函函, 等. 基于主成分分析的 CO₂ 统计反演方法[J]. *大气与环境光学学报*, 2017, 12(3): 202-209.
- [9] Wu H, Wang X H, Ye H H, et al. Cloud detection algorithm for greenhouse gas retrieval [J]. *Acta Optica Sinica*, 2019, 39(5): 0501001.
- 吴浩, 王先华, 叶函函, 等. 用于温室气体反演的云检测算法[J]. *光学学报*, 2019, 39(5): 0501001.
- [10] Smith W L, Woolf H M. The use of eigenvectors of statistical covariance matrices for interpreting satellite sounding radiometer observations[J]. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 1976, 33(7): 1127-1140.
- [11] Peters W, Jacobson A R, Sweeney C, et al. An atmospheric perspective on North American carbon dioxide exchange: carbon tracker[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of USA*, 2007, 104(48): 18925-18930.
- [12] Rodgers C D. *Inverse methods for atmospheric sounding: theory and practice*[M]. Singapore: World Scientific, 2000.
- [13] Hammerling D M, Michalak A M, Kawa S R. Mapping of CO₂ at high spatiotemporal resolution using satellite observations: global distributions from OCO-2 [J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2012, 117(D6): 58.