

# 气溶胶细粒子比偏振遥感最优化反演方法研究

郑逢勋<sup>1,2</sup>, 李正强<sup>2</sup>, 侯伟真<sup>2</sup>, 董晓刚<sup>3</sup>, 周志远<sup>3</sup>

1. 河南科技大学 农业装备工程学院, 洛阳 471003;

2. 中国科学院空天信息创新研究院 国家环境保护卫星遥感重点实验室, 北京 100094;

3. 北京环境特性研究所 光学辐射重点实验室, 北京 100854

**摘要:** 针对PM<sub>2.5</sub>遥感模型对气溶胶细粒子比FMF (Fine mode fraction) 参数的需求, 结合多光谱偏振传感器对大气探测的优势, 基于最优估计OE (Optimal Estimation) 反演框架, 提出了一种基于线偏振度 (Degree of Linear Polarization) 测量的FMF最优化反演方法。采用矢量化的辐射传输模式UNL-VRM进行地基天空光的线偏振度观测模拟, 分析了线偏振度对FMF参数的波段敏感性, 并基于仿真数据开展了算法的反演测试。研究表明: 偏振测量在长波近红外波段对FMF的敏感性高于可见光波段; 基于OE框架的FMF反演算法具有良好的闭合性; 在地基天顶观测模式下, 引入线偏振度测量参与反演能够有效提高FMF的反演精度, FMF反演误差从1.4%下降到了0.18%。最优化反演方法对于气溶胶遥感具有一定的潜力和可行性, 有望成为提高PM<sub>2.5</sub>遥感监测能力的新途径。

**关键词:** 遥感, 线偏振度, 气溶胶, 细粒子比, 最优估计反演

**中图分类号:** P2

**引用格式:** 郑逢勋, 李正强, 侯伟真, 董晓刚, 周志远. 2022. 气溶胶细粒子比偏振遥感最优化反演方法研究. 遥感学报, 26(12): 2497-2506

Zheng F X, Li Z Q, Hou W Z, Dong X G and Zhou Z Y. 2022. Optimal estimation algorithm research for aerosol fine-mode fraction retrieval from polarimetric measurements. National Remote Sensing Bulletin, 26(12): 2497-2506 [DOI: 10.11834/jrs.20210276]

## 1 引言

人为活动向大气中排放的细颗粒物会对人体健康造成严重影响 (Hoek 等, 2013; Cohen 等, 2017; Song 等, 2017)。描述气溶胶细粒子占比的参数FMF (Fine Mode Fraction) 是近地面PM<sub>2.5</sub>纯物理遥感估算模型中的关键参数之一 (Li 等, 2016)。FMF遥感研究对于理解人为因素对气候和环境的影响和大气颗粒物对人类健康的影响具有重要意义 (Yan 等, 2017a)。

目前FMF数据产品主要有: (1) AERONET (AErosol RObotic NETwork) 地基FMF产品, 利用光谱退卷积算法SDA (Spectral Deconvolution Algorithm), 由气溶胶光学厚度AOD (Aerosol Optical Depth) 直接计算得到 (O'Neill 等, 2003)。地基FMF产品具有较高精度, 然而覆盖度低, 主

要用于卫星反演产品的地面验证 (Li 等, 2020; Che 等, 2018)。(2) MODIS (Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer) FMF产品, 基于暗目标方法, 反演不确定性较大 (Levy 等, 2010), 精度上较难满足PM<sub>2.5</sub>估算需求 (Zhang 和 Li, 2015)。Zhao 等 (2017) 尝试融合MODIS和AERONET的FMF产品以支撑PM<sub>2.5</sub>遥感估算。(3) POLDER (POLarization and Directionality of the Earth's Reflectances) FMF产品, 采用GRASP算法 (Román 等, 2018; Torres 等, 2017) 反演得到。中国区域验证结果表明该产品与地基观测具有较好的一致性 (Wei 等, 2020), 是目前精度较高的FMF产品。此外, Yan 等 (2017b, 2019) 将SDA方法应用于MODIS的AOD产品, 反演的FMF在精度上比官方产品有所提升; Zhang 等 (2016a) 基于POLDER偏振和强度数据分别反演细粒子AOD

收稿日期: 2020-07-15; 预印本: 2021-04-12

基金项目: 国家自然科学基金(编号:41871269);河南省高等学校重点科研项目(编号:21A416003);河南科技大学博士科研启动基金(编号:13480031)

第一作者简介: 郑逢勋, 研究方向为偏振遥感最优化反演。E-mail: zhengfengxun@126.com

通信作者简介: 侯伟真, 研究方向为气溶胶卫星遥感。E-mail: houwz@radi.ac.cn

和总 AOD, 进而得到 FMF。总体上, 现有 FMF 数据产品和反演研究较少, 且受到传感器观测信息量的限制, 精度难以满足实际应用需求。

继 POLDER 传感器后, 具备偏振能力的载荷成为气溶胶遥感领域的发展方向 (Dubovik 等, 2019)。中国高分 5 号卫星搭载的 DPC (Directional Polarimetric Camera) (Gu 和 Tong, 2015)、TanSat 卫星搭载的 CAPI (Cloud and Aerosol Polarimetric Imager) (Chen 等, 2017a) 和 HJ-2 卫星搭载的 PSAC (Polarized Scanning Atmospheric Corrector) (Hou 等, 2019), 都具备偏振测量能力。偏振探测相比传统强度测量能够提供更多的大气信息, 尤其是长波近红外波段如 1610 nm 的偏振测量, 对于粗模态气溶胶反演有重要提升价值 (Qie 等, 2015), 为精确反演 FMF 提供了可能。现有反演算法中, SDA 算法属于半经验方法, MODIS 的暗目标法利用查找表 LUT (Look Up Table) 反演, GRASP 算法基于最优估计 OE (Optimal Estimation) 理论 (Rodgers, 2000), 由 AERONET 反演算法 (Dubovik 和 King, 2000) 发展而来, 属于纯物理的全反演方法。LUT 反演效率高, 反演时需要进行插值, 精度受到一定限制 (Kim 等, 2018), OE 方法具有比 LUT 方法更高的理论反演精度, 缺点是计算复杂, 效率较低 (Diner 等, 2012; Jeong 等, 2016)。由于 OE 算法的复杂性, 国内相关研究仍然以理论分析为主 (Chen 等, 2017b; Zheng 等, 2019), 基于 OE 反演框架和长波近红外偏振测量的 FMF 反演研究有待深入开展。

本文利用长波近红外偏振测量包含的气溶胶信息量优势, 基于现有 OE 反演框架 (Li 等, 2018a), 提出了一种联合强度和线偏振度 DOLP (Degree of Linear Polarization) 测量的 FMF 参数反演方法。由于目前近红外偏振波段反演尚缺乏实际数据支撑, 因此本研究使用矢量化的辐射传输模型针对地基本天顶观测模式开展偏振观测仿真, 分析偏振数据对 FMF 参数的波段敏感性, 通过对仿真数据叠加观测误差对算法进行测试, 验证反演算法的可行性和一致性, 为后续实际数据反演研究提供参考。

## 2 模型与方法

### 2.1 前向建模

线偏振度 (DOLP) 是重要的偏振物理量。相

对于强度测量, DOLP 作为“相对测量”量, 在观测方面天然具有精度高等优势 (Yan 等, 2018)。目前, 强度测量的不确定性在 5% 左右, 而在 440—1640 nm 波长范围内, DOLP 能够达到 0.005 的绝对误差 (Li 等, 2018b)。作为描述大气偏振特性的重要参数, DOLP 对粒子尺寸和形状非常敏感, 能够提高气溶胶微物理参数反演精度 (Li 等, 2009; Chen 等, 2018)。DOLP 可以通过 Stokes 矢量的前 3 个分量计算:

$$\text{DOLP} = \frac{\sqrt{Q^2 + U^2}}{I} \quad (1)$$

式中,  $I$  为强度分量,  $Q$  和  $U$  为偏振分量。

对于线偏振度测量的前向建模, 本研究采用线性化的矢量辐射传输模式 UNL-VRM (UNified Linearized Vector Radiative Transfer Model) 进行辐射传输计算 (Wang 等, 2014)。UNL-VRM 能够模拟给定观测几何和光谱的辐射和偏振量 (Stokes 矢量), 并同时输出 Stokes 矢量对于气溶胶参数的敏感度矩阵 (Jacobian matrix), 非常有利于 OE 反演算法的实现 (Hou 等, 2016 和 2017), 且成功应用于气溶胶遥感研究 (Hou 等, 2020; Xu 等, 2015)。

对于下行辐射建模, 大气散射的变化主要依赖于气溶胶粒子的物理和光学特性, 地表强度反射率的不确定性影响较小 (Dubovik 和 King, 2000)。研究表明, DOLP 为 0.2 以及单次散射反照率为 0.85 情况下, 地表对下行偏振基本无影响 (Li 等, 2006)。因此, 在前向模拟中本文采用了朗伯地表假设, 并忽略地表偏振对测量观测的贡献, 对气溶胶的垂直分布, 本研究采用高斯分布模型, 标高设置为 2 km。

本研究采用双模态对数函数分布形式描述气溶胶粒子谱分布情况:

$$\frac{dV}{d\ln r} = \sum_{i=1}^2 \frac{V_0^i}{\sqrt{2\pi \ln \sigma_g^i}} \exp\left(-\frac{(\ln r - \ln r_v^i)^2}{2 \ln^2 \sigma_g^i}\right) \quad (2)$$

式中,  $V_0$ 、 $r_v$  和  $\sigma_g$  分别为气溶胶的体积柱浓度、体积中值半径和标准方差, 上角标  $i$  表示与粒子尺寸相关的气溶胶模态; 进一步, 气溶胶光学厚度  $\tau$  可以通过上述物理量计算得到 (Xu 等, 2013):

$$\tau^i = \frac{3V_0^i Q_{\text{ext}}^i(\lambda)}{4r_{\text{eff}}^i} \quad (3)$$

式中,  $Q_{\text{ext}}$  为气溶胶消光效率因子, 有效半径  $r_{\text{eff}}$ 、

有效方差  $v_{\text{eff}}$  与体积参数之间通过下式进行转换:

$$\begin{cases} r_{\text{eff}} = r_v \exp\left(-\frac{1}{2} \ln^2 \sigma_g\right) \\ v_{\text{eff}} = \exp(\ln^2 \sigma_g) - 1 \end{cases} \quad (4)$$

以  $f$  和  $c$  分别表征细模态 ( $i=1$ ) 和粗模态 ( $i=2$ ), 则气溶胶光学厚度  $\tau$  和细粒子比 FMF 可以表示为:

$$\begin{cases} \tau = \tau^f + \tau^c \\ \text{FMF} = \tau^f / \tau \end{cases} \quad (5)$$

## 2.2 最优估计反演方法

根据 OE 理论, 复杂观测系统可以简单描述为:

$$\mathbf{y} = F(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\epsilon} \quad (6)$$

式中,  $\mathbf{y}$ 、 $\mathbf{x}$  分别表示观测向量、状态向量;  $F$  为大气辐射传输过程;  $\boldsymbol{\epsilon}$  是经验误差项。本研究中,  $\mathbf{y}$  由强度和线偏振度测量构成,  $\mathbf{x}$  由 AOD 和 FMF 参数构成。反演本质上是对上式进行反向求解, 在不考虑模型误差情况下, 反演结果对应非线性代价函数  $J(\mathbf{x})$  的最小值。  $J(\mathbf{x})$  的形式为

$$J(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} [\mathbf{y} - F(\mathbf{x})]^T \mathbf{S}_y^{-1} [\mathbf{y} - F(\mathbf{x})] + \frac{1}{2} \gamma (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)^T \mathbf{S}_a^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) \quad (7)$$

式中,  $\mathbf{S}_y$  为观测误差协方差矩阵;  $\mathbf{x}_a$  和  $\mathbf{S}_a$  分别为  $\mathbf{x}$  的先验估计和误差协方差矩阵, 描述了测量前对状态量的预估及其误差范围; 上角标 “-1” 和 “T” 分别代表矩阵求逆和转置操作;  $\gamma$  为正则化系数 (Xu 等, 2015)。上式右侧分别描述了观测误差和先验误差对反演的影响。代价函数  $J(\mathbf{x})$  是一个非线性函数, 其梯度向量形式为:

$$\nabla J(\mathbf{x}) = \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} [F(\mathbf{x}) - \mathbf{y}] + \gamma \mathbf{S}_a^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) \quad (8)$$

式中,  $\mathbf{K}$  表示前向模型对状态量的敏感度矩阵 (Jacobians Matrix), 其中  $K_{i,j} = \partial F_i / \partial x_j$ 。本研究采用拟牛顿算法程序包 L-BFGS-B 对  $J(\mathbf{x})$  的最小值进行求解。通过将 L-BFGS-B 程序模块、前向辐射传输模拟模块和代价函数的计算模块相结合, 进而建立最优估计迭代反演的程序框架。在程序框架下, 经过多次迭代计算寻找到状态向量的最优估计, 迭代结束的收敛条件为:

$$\|\mathbf{x}^{p+1} - \mathbf{x}^p\|_2 \leq \delta \quad (9)$$

式中,  $\|\cdot\|_2$  为 L2 范数,  $\delta$  为判断迭代结束的收敛阈值。最优估计反演流程如图 1 所示。

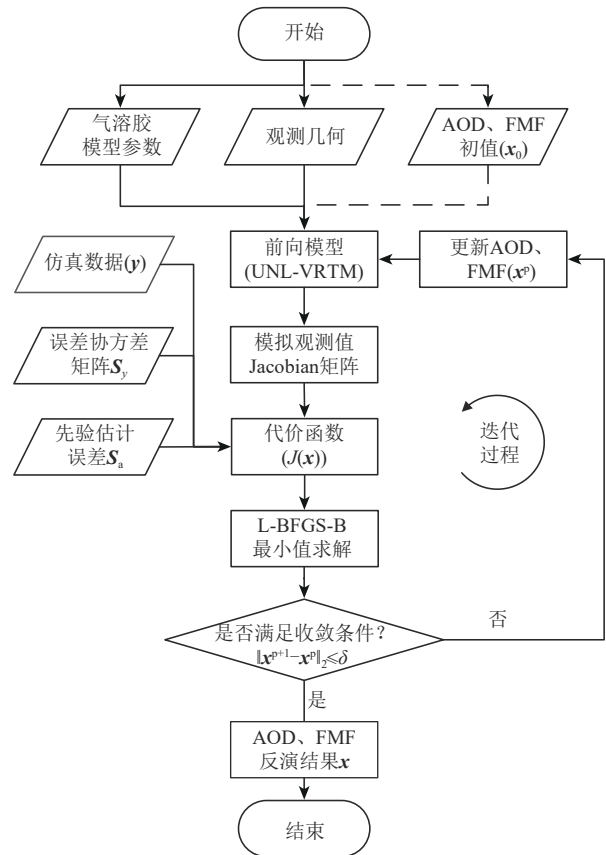


图 1 最优估计反演流程

Fig.1 The flowchart of the optimal estimation inversion

## 2.3 模型及算法参数设置

### 2.3.1 气溶胶模型参数

表 1 给出了研究采用的气溶胶模型参数。其中, 气溶胶粒子谱分布参数 (有效半径  $r_{\text{eff}}$  和有效方差  $v_{\text{eff}}$ ) 来自北京地区 AERONET 站点多年观测数据的统计。复折射指数实部  $m_r$  和虚部  $m_i$  来自于 Zhang 等 (2016b) 建立的双模态气溶胶模型数据。由于 FMF 表征了不同粒子混合的情况, 因此气溶胶类型可以通过调节 FMF 实现。例如 FMF 大于 0.8 表示细模态主导类型, 如城市污染型气溶胶, FMF 小于 0.5 表征了粗粒子主导气溶胶类型, 如沙尘型气溶胶。

表 1 研究采用的气溶胶模型参数

Table 1 Parameter settings of aerosol model

模态	$r_{\text{eff}}/\mu\text{m}$	$v_{\text{eff}}$	$m_r$	$m_i$
细模态	0.155	0.284	1.476	0.0096
粗模态	2.213	0.482	1.487	0.0043

### 2.3.2 观测几何设置

表2给出了前向模拟时采用的观测几何设置, 太阳天顶角为 $60^\circ$ , 观测天顶角为 $0^\circ$  (天顶观测模式), 传感器位于太阳主平面内。建立前向仿真数据时考虑了不同的气溶胶负载和不同的细粒子占比情况。AOD从0.1到3.0变化, 表征了不同气溶胶含量的情况, 0.1到1之间AOD间隔0.1, 1到2之间间隔0.2, 0.2到3之间间隔0.4。FMF参数从0.05到0.99变化, 步长0.05。

表2 前向模拟观测几何及气溶胶设置

Table 2 Observation geometry and aerosol settings in the forward simulation

参数	值
太阳天顶角	$60^\circ$
观测天顶角	$0^\circ$ (天顶观测模式)
相对方位角	$0^\circ$ (太阳主平面)
AOD@550nm	0.1—3.0
FMF	0.05—0.99

### 2.3.3 观测量和反演量设置

观测向量 $\mathbf{y}$ 由总辐射强度和DOLP两种具有不同测量精度的测量组成, 其中辐射强度测量包含了5个波段, DOLP测量包含4个波段, 如表3所示。在误差设置方面, 对于强度测量, 观测不确定性 $\varepsilon_1$ 设为5%, 对于星载偏振测量, 偏振度0.4情况下, 绝对测量精度可保障在0.005 (杨洪春等, 2019), 因此, 本研究DOLP相对误差 $\varepsilon_{\text{DOLP}}$ 设为1%。根据式(7)可知, 在最优估计反演过程中, 先验估计的不确定性会影响到反演结果。考虑到气溶胶模型获取的不确定性, 先验估计误差设定为100% (Hou等, 2017)。观测量、反演量和误差协方差矩阵的组成如表3所示, 其中,  $\text{diag}(\mathbf{I})$ 表示构建矩阵操作, 以向量 $\mathbf{I}$ 的元素作为矩阵的对角元素, 矩阵非对角元素填充零。

## 3 结果与分析

### 3.1 仿真结果分析

基于表1和表2中的参数设置, 使用UNL-VRTM模式进行地基天顶观测模式的仿真。图2给出了天顶观测模式下不同气溶胶光学厚度和不同的粗、细气溶胶粒子混合比下天空光辐射测量 (图2(a)) 和偏振测量 (图2(b)) 的模拟结果。

横坐标轴为AOD, 纵坐标轴为FMF。由图2可知:

(1) 对于强度测量: 天空光辐射强度随着气溶胶光学厚度AOD的增加而增强, 在AOD为2.5时达到最大值, 然后逐渐减小。在相同AOD情况下, 天空光的强度随着细粒子含量的增加而增强。低AOD情况下, 强度测量受FMF变化的影响较小。

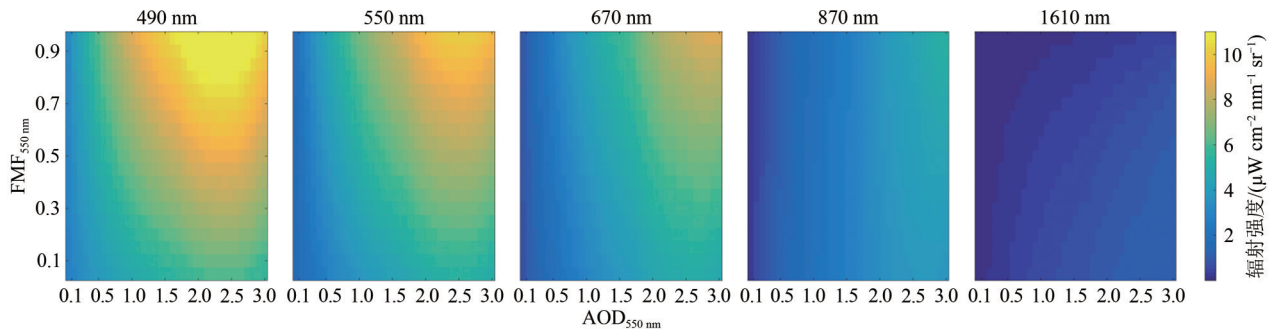
(2) 对于线偏振度测量: 由图2(b)可知, 在490 nm波段, DOLP随气溶胶负载的增加而逐渐减小, 但不同FMF取值下, DOLP变化不明显, 这表明该波段观测量的变化主要由AOD的变化引起, 而对FMF参数变化不敏感; 在670 nm、870 nm和1610 nm波段, 相同AOD情况下, DOLP随FMF的增加出现先减小后增大的情况。DOLP的最小值与FMF大小有关, 670 nm、870 nm和1610 nm这3个波段的DOLP的最小值分别出现在FMF为0.1、0.2和0.7附近。表明随着波长的增大, DOLP最小值所对应的FMF逐渐增大。这是由于在近红外870 nm和长波近红外1610 nm波段, 粗粒子气溶胶的偏振贡献相对于可见光 (490 nm和670 nm) 有所增强, 即近红外波段的观测对粗模态气溶胶更为敏感; 在1610 nm波段, DOLP的变化主要由FMF的变化引起, 与490 nm存在显著差异, 表明该波段对FMF参数的变化比对AOD的变化更敏感。

(3) 由强度和偏振结果对比可知: 辐射强度随波长的增加而减小, 而DOLP的波段间差异并没有这一趋势。尤其对于细模态主导的气溶胶类型 (FMF>0.8), 随着气溶胶光学厚度的增加, 近红外波段的DOLP显著高于可见光波段。

表3 观测向量、状态向量及相应的误差定义

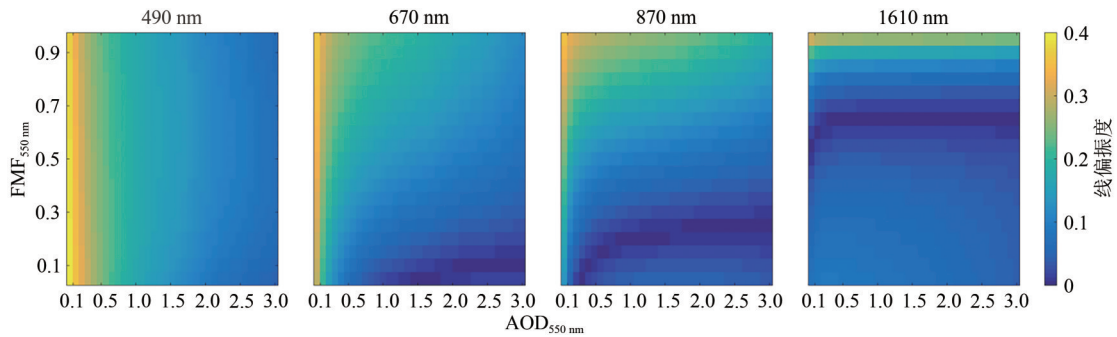
Table 3 Definition of observation vector, state vector and prior estimation error

数据定义	组成设置
观测向量 $\mathbf{y}$	$\mathbf{y} = [\mathbf{I}(\lambda) \text{ DOLP}(\lambda)]^T$ 强度测量: $\lambda = 490, 550, 670, 870, 1610 \text{ nm}$ 偏振测量: $\lambda = 490, 670, 870, 1610 \text{ nm}$
观测误差协方差矩阵 $S_y$	$S_y = \begin{pmatrix} \text{diag}(\varepsilon_1^2 \mathbf{I}^2) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \text{diag}(\varepsilon_{\text{DOLP}}^2 \text{DOLP}^2) \end{pmatrix}$ $\varepsilon_1 = 5\%, \varepsilon_{\text{DOLP}} = 1\%$ (相对误差)
状态向量 $\mathbf{x}$	$\mathbf{x} = [\tau \text{ FMF}]^T$ $\tau \geq 0.01; 0.01 \leq \text{FMF} \leq 0.99$
先验估计误差协方差矩阵 $S_a$	$S_a = \begin{pmatrix} \varepsilon_\tau^2 \tau^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \varepsilon_{\text{FMF}}^2 \text{FMF}^2 \end{pmatrix}$ $\varepsilon_\tau = 100\%, \varepsilon_{\text{FMF}} = 100\%$ (相对误差)



(a) 不同波段的天空光辐射强度

(a) Sky light radiance at different wavelength



(b) 不同波段的天空光线偏振度

(b) Degree of linear polarization at different wavelength

图2 天空光辐射强度和线偏振度测量仿真(天顶观测模式, 太阳天顶角 60°)

Fig. 2 Simulation of intensity and degree of linear polarization (DOLP) for sky light measurements (vertical upward observation with the sun zenith angle equaling 60°)

### 3.2 反演结果分析

基于模拟观测数据, 对上述OE反演算法进行测试。研究采用了3种不同的情形, 测试说明如表4所示。S1为未引入误差情况下的强度和偏振联合反演, 用于测试算法的自我一致性; S2和S3采用服从高斯分布的随机噪声对模拟观测值施加误差扰动, 用以模拟真实观测, 其中, S2为纯强度反演情形, S3为强度偏振联合反演情形。S2和S3的差异用于对比分析偏振测量对反演的贡献。

表4 反演测试说明

Table 4 Data scenarios adopted for inversion test

标识	说明
S1	强度和线偏振度联合反演(无噪声)
S2	仅使用强度反演(叠加5%观测误差)
S3	强度和线偏振联合反演(强度5%误差, 线偏振度1%误差)

图3给出了模拟数据为S3条件下, AOD和FMF均为0.6时, 最优化反演过程中辐射强度和线偏振度随迭代次数增加的变化情况。由图3可知, 仿真模拟值随着迭代次数增加逐渐逼近观测数据。

研究采用反演残差描述反演结果对应的模拟值与观测值的差异, 反演残差定义为

$$\delta = (y_{fit} - y) / y \quad (10)$$

式中,  $y_{fit}$ 表示最后一次迭代时的模拟值,  $y$ 为观测值。图3中第15次迭代时的反演残差仅为0.6%, S3条件下全体模拟数据的平均反演残差为5.2%, 表明最优估计反演算法能够根据参数敏感度矩阵和最小值求解过程, 实现对反演参数的动态调整, 并最终在前向光辐射模拟上与观测值达成很好的一致性。

图4给出了550 nm波段下不同气溶胶光学厚度和细粒子比条件下的反演结果和真实值之间的散点图。其中图4(a)和(d)为没有观测噪声引入情况下的反演结果, 反演结果和真值的相关系数大于0.99, 由算法本身引起的AOD和FMF反演误差分别为0.085%和0.014%。由此可知, 本算法具有很好的闭合性。图4(b)和(e)为仅采用强度观测数据时的反演结果, 图4(c)和(f)为强度和偏振联合反演的结果, 通过对比可知, 在测量误差存在的情况下, 引入DOLP测量对于气溶胶

反演精度的提高非常显著。表5给出了反演误差统计结果,增加DOLP数据参与反演的情况下,AOD反演误差从1%下降到了0.3%,FMF参数反演误差

从1.4%下降到了0.18%,反演精度相对于强度反演有明显的提升。

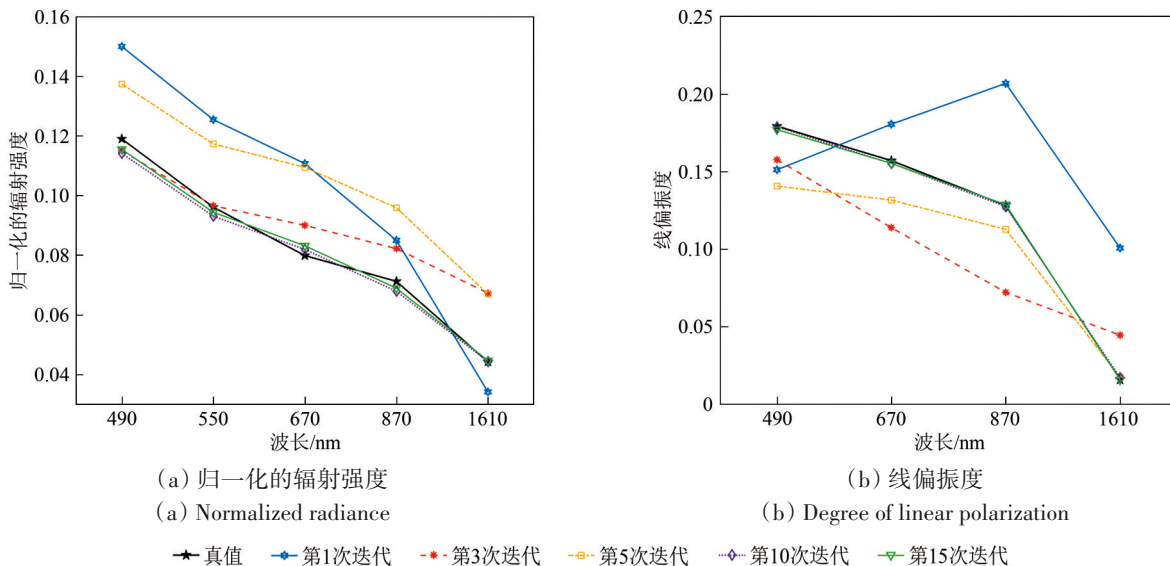


图3 最优估计反演的迭代过程

Fig. 3 The iterative process of the optimal estimation inversion

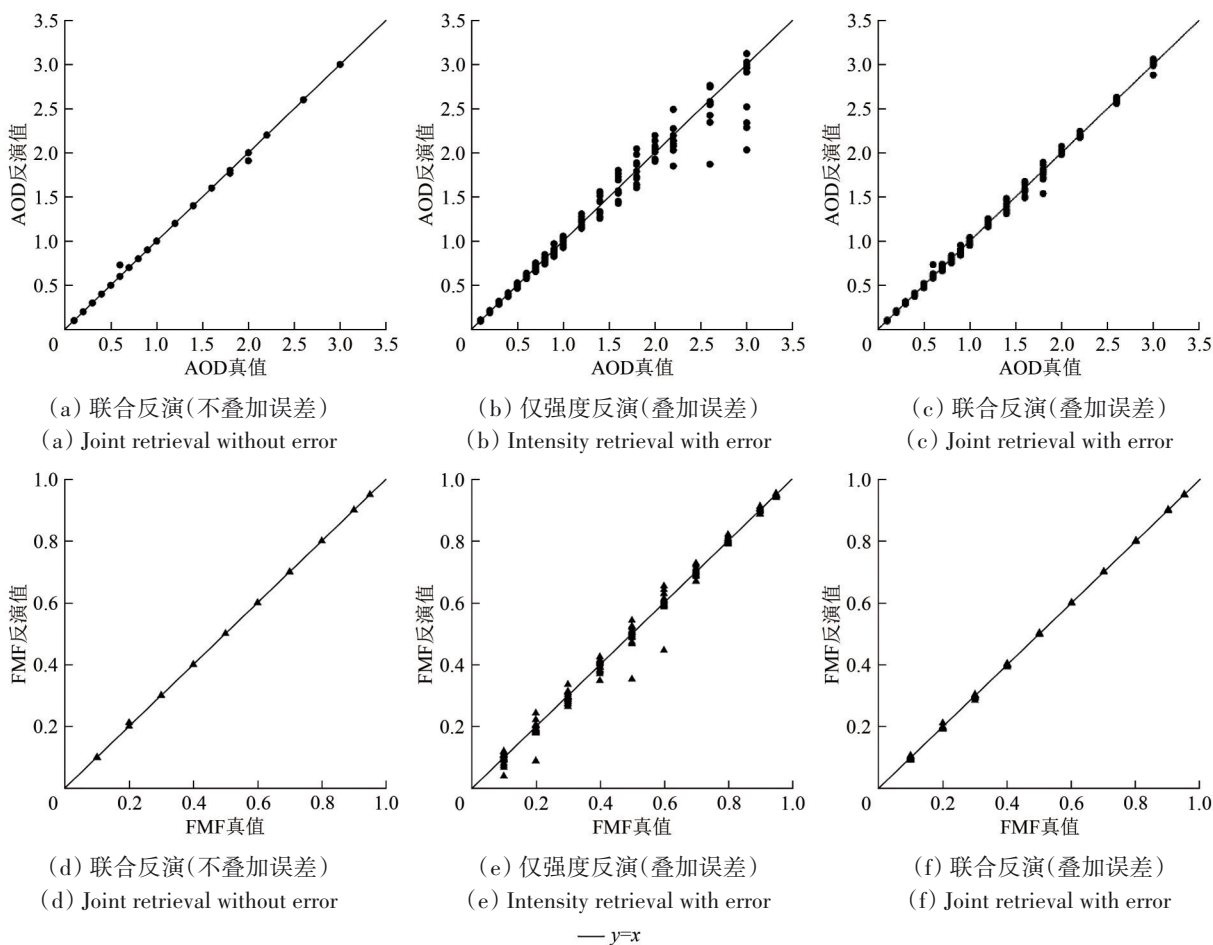


图4 反演结果与真值的散点图

Fig. 4 The scatter plot of retrieved results versus assumed values

表5 3种情况下AOD和FMF的平均反演误差  
Table 5 Average inversion error of AOD and FMF

参数	S1	S2	S3
AOD	0.085	1.0	0.30
FMF	0.014	1.4	0.18

## 4 讨论

根据代价函数和梯度向量的表达式可知, OE反演受到观测和先验估计的约束, 反演结果的精度不仅取决于观测数据的不确定性, 同时受到先验知识的影响 (Xu 和 Wang, 2015)。获取反演参数的先验知识的是最优化反演算法的重要组成, 基于先验知识的平滑约束有助于参数反演的求解 (Fedarenka 等, 2016)。先验知识来源于对反演参数的实验室测量、气象数据统计以及其他途径的遥感观测。合理的先验估计能够约束反演结果的合理性, 减少算法的迭代次数 (Dubovik 等, 2011)。

最优估计反演充分利用强度和偏振数据中的有效信息, 通过在连续的向量空间中搜索最优解, 理论上具有比传统查找表方法更高的反演精度 (Jeong 等, 2016)。然而, 由于反演过程中, 需要进行多次迭代和实时前向辐射传输计算, 因此算法具有较高的耗时。在反演测试中, 平均迭代次数在 10 次左右。未来将 OE 方法应用于大数据量的反演需要进一步优化算法的计算效率。

目前缺乏长波近红外偏振数据支持, 因此本研究基于模拟数据开展了算法测试。采用模拟数据和真实数据反演的主要差异在于前者不存在强度和偏振数据自治性问题。尽管研究对模拟数据叠加了噪声, 但实测数据的不确定性和误差要比模拟数据更复杂, 后续研究需要针对实测数据进行参数优化。此外, 测试针对单角度观测的仿真数据开展, 而多角度观测能够显著降低参数的反演误差 (Wu 等, 2015)。因此, 要进一步降低 FMF 参数反演不确定性, 采用多角度的偏振测量数据进行反演是一个有效途径和方法。

## 5 结论

本研究基于 OE 反演框架, 联合强度和线偏振度的多光谱测量, 开展了气溶胶 FMF 参数的 OE 反演算法研究。基于矢量化的 UNL-VRTM 模式进行

了前向模拟仿真, 分析了线偏振度对 FMF 参数的波段敏感性, 利用仿真数据对最优化估计反演算法进行了反演一致性测试。研究结果表明:

(1) 偏振测量的波段间差异显著, 粗粒子对偏振的贡献在长波近红外要高于可见光波段。AOD 不变的情况下, 线偏振度作为 FMF 的函数存在极小值, 且极小值对应的 FMF 值随着波长的增加而增加。在 670 nm、870 nm 和 1610 nm 波段, 线偏振度极小值对应的 FMF 分别在 0.1、0.2 和 0.7 附近。表明在长波近红外波段, 线偏振度对 FMF 的敏感性高于可见光波段。

(2) OE 反演框架本身具有很好的闭合性。在考虑强度和偏振的测量误差的情况下, 基于模拟数据的平均反演残差仅为 5.2%, 由算法本身引起 FMF 反演误差仅为 0.014%。给定气溶胶模态参数情况下, 基于单角度多光谱强度和线偏振度, OE 反演算法能够较好的约束气溶胶的粗、细模态 AOD 反演, 从而得到 FMF 参数。

(3) 线偏振度测量为粗模态气溶胶反演提供了更多的信息量支持, 在地基天顶观测模式下, 强度联合线偏振度反演, FMF 反演误差从 1.4% 下降到了 0.18%。可见, 引入线偏振度测量参与反演能够极大的降低 FMF 参数的反演误差, 改善反演结果的不确定性。

**志 谢** 前向模拟基于国产卫星载荷同步大气校正仪, 传感器波段及带宽等参数设置得到了中国科学院安徽光学精密机械研究所孙晓兵、李梦凡等人的支持, 在此表示衷心的感谢!

## 参考文献 (References)

- Che H Z, Qi B, Zhao H J, Xia X G, Thomas F, Goloub P, Dubovik O, Estelles V, Cuevas-Agulló E, Blarel L, Wu Y F, Zhu J, Du R G, Wang Y Q, Wang H, Gui K, Yu J, Zheng Y, Sun T Z, Chen Q L, Shi G Y and Zhang X Y. 2018. Aerosol optical properties and direct radiative forcing based on measurements from the China Aerosol Remote Sensing Network (CARSNET) in Eastern China. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 18(1): 405-425 [DOI: 10.5194/acp-18-405-2018]
- Chen X, Wang J, Liu Y, Xu X G, Cai Z N, Yang D X, Yan C and Feng L. 2017a. Angular dependence of aerosol information content in CAPI/TanSat observation over land: effect of polarization and synergy with A-train satellites. *Remote Sensing of Environment*, 196: 163-177 [DOI: 10.1016/j.rse.2017.05.007]

- Chen X, Yang D X, Cai Z N, Liu Y and Spurr R J D. 2017b. Aerosol retrieval sensitivity and error analysis for the cloud and aerosol polarimetric imager on board TanSat: the effect of multi-angle measurement. *Remote Sensing*, 9(2): 183: 1-18 [DOI: 10.3390/rs9020183]
- Chen W, Li Y F, Wu T X and Guan G X. 2018. Preliminary research on sky polarization and influential factors. *Journal of Remote Sensing*. 22(6): 989-995 (陈伟, 李延飞, 吴太夏, 关桂霞. 2018. 全天空偏振模式及其影响因素初探. *遥感学报*, 22(6): 989-995) [DOI: 10.11834/jrs.20187378]
- Cohen A J, Brauer M, Burnett R, Anderson H R, Frostad J, Estep K, Balakrishnan K, Brunekreef B, Dandona L, Dandona R, Feigin V, Freedman G, Hubbell B, Jobling A, Kan H D, Knibbs L, Liu Y, Martin R, Morawska L, Pope C A, Shin H, Straif K, Shaddick G, Thomas M, Van Dingenen R, Van Donkelaar A, Vos T, Murray C J L and Forouzanfar M H. 2017. Estimates and 25-year trends of the global burden of disease attributable to ambient air pollution: an analysis of data from the Global Burden of Diseases Study 2015. *The Lancet*, 389(10082): 1907-1918 [DOI: 10.1016/S0140-6736(17)30505-6]
- Diner D J, Hodos R A, Davis A B, Garay M J, Martonchik J V, Sanghavi S V, Allmen P, Kokhanovsky A A and Zhai P W. 2012. An optimization approach for aerosol retrievals using simulated MISR radiances. *Atmospheric Research*, 116: 1-14 [DOI: 10.1016/j.atmosres.2011.05.020]
- Dubovik O and King M D. 2000. A flexible inversion algorithm for retrieval of aerosol optical properties from Sun and sky radiance measurements. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 105(D16): 20673-20696 [DOI: 10.1029/2000JD900282]
- Dubovik O, Herman M, Holdak A, Holdak A, Lapyonok T, Tanré D, Deuzé J L, Ducos F, Sinyuk A and Lopatin A. 2011. Statistically optimized inversion algorithm for enhanced retrieval of aerosol properties from spectral multi-angle polarimetric satellite observations. *Atmospheric Measurement Techniques*, 4(5): 975-1018 [DOI: 10.5194/amt-4-975-2011]
- Dubovik O, Li Z Q, Mishchenko M I, Tanré D, Karol Y, Bojkov B, Cairns B, Diner D J, Espinosa W R, Goloub P, Gu X F, Hasekamp O, Hong J, Hou W Z, Knobelspiesse K D, Landgraf J, Li L, Litvinov P, Liu Y, Lopatin A, Marbach T, Maring H, Martins V, Meijer Y, Milinevsky G, Mukai S, Parol F, Qiao Y L, Remer L, Rietjens J, Sano I, Stammes P, Stammes S, Sun X B, Tabary P, Travis L D, Waquet F, Xu F, Yan C X and Yin D K. 2019. Polarimetric remote sensing of atmospheric aerosols: instruments, methodologies, results, and perspectives. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 224: 474-511 [DOI: 10.1016/j.jqsrt.2018.11.024]
- Fedarenka A, Dubovik O, Goloub P, Li Z Q, Lapyonok T, Litvinov P, Barel L, Gonzalez L, Podvin T and Crozel D. 2016. Utilization of AERONET polarimetric measurements for improving retrieval of aerosol microphysics: GSFC, Beijing and Dakar data analysis. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 179: 72-97 [DOI: 10.1016/j.jqsrt.2016.03.021]
- Gu X F and Tong X D. 2015. Overview of China earth observation satellite programs [space agencies]. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Magazine*, 3(3): 113-129 [DOI: 10.1109/MGRS.2015.2467172]
- Hoek G, Krishnan R M, Beelen R, Peters A, Ostro B, Brunekreef B and Kaufman J D. 2013. Long-term air pollution exposure and cardio- respiratory mortality: a review. *Environmental Health*, 12(1):43: 1-15 [DOI: 10.1186/1476-069X-12-43]
- Hou W Z, Li Z Q, Song C Y, Lin J, Ma Y, Ge B Y and Zheng F X. 2019. Study on errors propagation in synchronous atmospheric correction for HJ-2 satellites//Proceedings of SPIE 11338, AOPC 2019: Optical Sensing and Imaging Technology. 113380V: 1-6 [DOI: 10.1117/12.2542736]
- Hou W Z, Wang J, Xu X G, Reid J S and Han D. 2016. An algorithm for hyperspectral remote sensing of aerosols: 1. Development of theoretical framework. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 178: 400-415 [DOI: 10.1016/j.jqsrt.2016.01.019]
- Hou W Z, Wang J, Xu X G and Reid J S. 2017. An algorithm for hyperspectral remote sensing of aerosols: 2. Information content analysis for aerosol parameters and principal components of surface spectra. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 192: 14-29 [DOI: 10.1016/j.jqsrt.2017.01.041]
- Hou W Z, Wang J, Xu X G, Reid J S, Janz S J and Leitch J W. 2020. An algorithm for hyperspectral remote sensing of aerosols: 3. Application to the GEO-TASO data in KORUS-AQ field campaign. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 253(107161): 1-22 [DOI: 10.1016/j.jqsrt.2020.107161]
- Jeong U, Kim J, Ahn C, Torres O, Liu X, Bhartia P K, Spurr R, Haffner D, Chance K and Holben B N. 2016. An optimal-estimation-based aerosol retrieval algorithm using OMI near-UV observations. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 16(1): 177-193 [DOI: 10.5194/acp-16-177-2016]
- Kim M J, Torres O, Ahn C, Kim W, Jeong U, Go S J, Liu X, Moon K J and Kim D R. 2018. Optimal estimation-based algorithm to retrieve aerosol optical properties for GEMS measurements over Asia. *Remote Sensing*, 10(2): 162 [DOI:10.3390/rs10020162]
- Levy R C, Remer L A, Kleidman R G, Mattoo S, Ichoku C, Kahn R and Eck T F. 2010. Global evaluation of the collection 5 MODIS dark-target aerosol products over land. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 10(21): 10399-10420 [DOI: 10.5194/acp-10-10399-2010]
- Li L, Che H Z, Derimian Y, Dubovik O, Luan Q Z, Li Q Y, Huang X Y, Zhao H J, Gui K, Zheng Y, An L C, Sun T Z and Liang Y X. 2020. Climatology of fine and coarse mode aerosol optical thickness over East and South Asia derived from POLDER/PARASOL Satellite. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 125(e2020JD032665): 1-30 [DOI: 10.1029/2020JD032665]
- Li Z Q, Goloub P, Devaux C, Gu X F, Deuzé J L, Qiao Y L and Zhao F S. 2006. Retrieval of aerosol optical and physical properties from ground-based spectral, multi-angular, and polarized sun-photometer measurements. *Remote Sensing of Environment*, 101(4): 519-



- 533[DOI: 10.1016/j.rse.2006.01.012]
- Li Z Q, Goloub P, Dubovik O, Blarel L, Zhang W X, Podvin T, Sinyuk A, Sorokin M, Chen H B, Holben B, Tanré D, Canini M and Buis J P. 2009. Improvements for ground-based remote sensing of atmospheric aerosol properties by additional polarimetric measurements. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 110(17): 1954-1961 [DOI: 10.1016/j.jqsrt.2009.04.009]
- Li Z Q, Hou W Z, Hong J, Zheng F X, Luo D G, Wang J, Gu X F and Qiao Y L. 2018a. Directional Polarimetric Camera (DPC): monitoring aerosol spectral optical properties over land from satellite observation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 218: 21-37 [DOI: 10.1016/j.jqsrt.2018.07.003]
- Li Z Q, Li K T, Li L, Xu H, Xie Y S, Ma Y, Li D H, Goloub P, Yuan Y L and Zheng X B. 2018b. Calibration of the degree of linear polarization measurements of the polarized Sun-sky radiometer based on the POLBOX system. *Applied Optics*, 57(5): 1011-1018 [DOI: 10.1364/AO.57.001011]
- Li Z Q, Zhang Y, Shao J, Li B S, Hong J, Liu D, Li D H, Wei P, Li W, Li L, Zhang F X, Guo J, Deng Q, Wang B X, Cui C L, Zhang W C, Wang Z Z, Lv Y, Xu H, Chen X F, Li L and Qie L. 2016. Remote sensing of atmospheric particulate mass of dry  $PM_{2.5}$  near the ground: method validation using ground-based measurements. *Remote Sensing of Environment*, 173: 59-68 [DOI: 10.1016/j.rse.2015.11.019]
- O'Neill N, Eck T, Smirnov A, Holben B N and Thulasiraman S. 2003. Spectral discrimination of coarse and fine mode optical depth. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 108(D17), 4559: 1-15 [DOI: 10.1029/2002JD002975]
- Qie L, Li Z Q, Sun X B, Sun B, Li D H, Liu Z, Huang W, Wang H, Chen X F, Hou W Z and Qiao Y L. 2015. Improving remote sensing of aerosol optical depth over land by polarimetric measurements at 1640 nm: airborne test in North China. *Remote Sensing*, 7(5): 6240-6256 [DOI: 10.3390/rs70506240]
- Rodgers C D. 2000. *Inverse Methods for Atmospheric Sounding: Theory and Practice*. Singapore: World Scientific.
- Román R, Benavent-Oltra J A, Casquero-Vera J A, Lopatin A, Cazorla A, Lyamani H, Denjean C, Fuertes D, Pérez-Ramírez D, Torres B, Toledano C, Dubovik O, Cachorro V E, Frutos A M, Olmo F J and Alados-Arboledas L. 2018. Retrieval of aerosol profiles combining sunphotometer and ceilometer measurements in GRASP code. *Atmospheric Research*, 204: 161-177 [DOI: 10.1016/j.atmosres.2018.01.021]
- Song C B, He J J, Wu L, Jin T S, Chen X, Li R P, Ren P P, Zhang L and Mao H J. 2017. Health burden attributable to ambient  $PM_{2.5}$  in China. *Environmental Pollution*, 223: 575-586 [DOI: 10.1016/j.envpol.2017.01.060]
- Torres B, Dubovik O, Fuertes D, Schuster G, Cachorro V E, Lapyonok T, Goloub P, Blarel L, Barreto A, Mallet M, Toledano C and Tanré D. 2017. Advanced characterisation of aerosol size properties from measurements of spectral optical depth using the GRASP algorithm. *Atmospheric Measurement Techniques*, 10(10): 3743-3781 [DOI: 10.5194/amt-10-3743-2017]
- Wang H, Sun X B, Sun B, Liang T Q, Li C L and Hong J. 2014. Retrieval of aerosol optical properties over a vegetation surface using multi-angular, multi-spectral, and polarized data. *Advances in Atmospheric Sciences*, 31(4): 879-887 [DOI: 10.1007/s00376-013-3100-5]
- Wei Y Y, Li Z Q, Zhang Y, Chen C, Dubovik O, Zhang Y, Xu H, Li K T, Chen J, Wang H F, Ge B Y and Fan C. 2020. Validation of POLDER GRASP aerosol optical retrieval over China using SONET observations. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 246(106931):1-13 [DOI: 10.1016/j.jqsrt.2020.106931]
- Wu L, Hasekamp O, Van Diedenoven B, Cairns B. 2015. Aerosol retrieval from multiangle, multispectral photopolarimetric measurements: importance of spectral range and angular resolution. *Atmospheric Measurement Techniques*, 8(6): 2625-2638 [DOI: 10.5194/amt-8-2625-2015]
- Xu X G and Wang J. 2015. Retrieval of aerosol microphysical properties from AERONET photopolarimetric measurements: 1. Information content analysis. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 120(14): 7059-7078 [DOI: 10.1002/2015JD023108]
- Xu X G, Wang J, Henze D K, Qu W J and Kopacz M. 2013. Constraints on aerosol sources using GEOS-Chem adjoint and MODIS radiances, and evaluation with multisensor (OMI, MISR) data. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 118(12): 6396-6413 [DOI: 10.1002/jgrd.50515]
- Xu X G, Wang J, Zeng J, Spurr R, Liu X, Dubovik O, Li L, Li Z Q, Mishchenko M I, Siniuk A and Holben B. 2015. Retrieval of aerosol microphysical properties from AERONET photopolarimetric measurements: 2. A new research algorithm and case demonstration. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 120(14): 7079-7098 [DOI: 10.1002/2015JD023113]
- Yan L, Gu X F, Chu J H, You Z, Liu S Y, Motimor H and Chandrasekar V. 2018. Optical polarized effects for high-resolution quantitative remote sensing and new polarization remote sensing fields. *Journal of Remote Sensing*, 22(6):901-916 (晏磊, 顾行发, 褚君浩, 尤政, 刘世元, Motimor H, Chandrasekar V. 2018. 高分辨率定量遥感的偏振光效应与偏振遥感新领域, 遥感学报, 22(6): 901-916) [DOI: 10.11834/jrs.20187380]
- Yan X, Shi W Z, Li Z Q, Li Z Q, Luo N N, Zhao W J, Wang H F and Yu X. 2017a. Satellite-based  $PM_{2.5}$  estimation using fine-mode aerosol optical thickness over China. *Atmospheric Environment*, 170:290-302 [DOI: 10.1016/j.atmosenv.2017.09.023]
- Yan X, Li Z Q, Shi W Z, Luo N N, Wu T X and Zhao W J. 2017b. An improved algorithm for retrieving the fine-mode fraction of aerosol optical thickness, part 1: algorithm development. *Remote Sensing of Environment*, 192: 87-97 [DOI: 10.1016/j.rse.2017.02.005]
- Yan X, Li Z Q, Luo N N, Shi W Z, Zhao W J, Yang X C, Liang C, Zhang F and Cribb M. 2019. An improved algorithm for retrieving the fine-mode fraction of aerosol optical thickness. Part 2: Application and validation in Asia. *Remote Sensing of Environment*, 222: 90-103 [DOI: 10.1016/j.rse.2018.12.012]
- Yang H C, Hong J, Zou P, Song M X, Yang B Y and Liu Z H. 2019.

- Onboard Polarization Calibrators of Spaceborne Particulate Observing Scanning Polarimeter. *Acta Optica Sinica*, 39(9): 205-213 (杨洪春, 洪津, 邹鹏, 宋茂新, 杨本永, 刘振海. 2019. 星载偏振扫描仪星上偏振定标器, *光学学报*, 39(9): 205-213) [DOI: 10.3788/AOS201939.0912005]
- Zhang Y and Li Z Q. 2015. Remote sensing of atmospheric fine particulate matter ( $PM_{2.5}$ ) mass concentration near the ground from satellite observation. *Remote Sensing of Environment*, 160: 252-262 [DOI: 10.1016/j.rse.2015.02.005]
- Zhang Y, Li Z Q, Qie L, Zhang Y, Liu Z H, Chen X F, Hou W Z, Li K T, Li D H and Xu H. 2016a. Retrieval of aerosol fine-mode fraction from intensity and polarization measurements by PARASOL over East Asia. *Remote Sensing*, 8(5): 417 :1-18 [DOI: 10.3390/rs8050417]
- Zhang Y, Li Z Q, Zhang Y H, Chen Y, Cuesta J and Ma Y. 2016b. Multi-peak accumulation and coarse modes observed from AERONET retrieved aerosol volume size distribution in Beijing. *Meteorology and Atmospheric Physics*, 128(4): 537-544 [DOI: 10.1007/s00703-016-0435-3]
- Zhao A M, Li Z Q, Zhang Y, Zhang Y and Li D. 2017. Merging MODIS and ground-based fine mode fraction of aerosols based on the geostatistical data fusion method. *Atmosphere*, 8(7): 117: 1-16 [DOI: 10.3390/atmos8070117]
- Zheng F X, Hou W Z and Li Z Q. 2019. Optimal estimation retrieval for directional polarimetric camera onboard Chinese Gaofen-5 satellite: an analysis on multi-angle dependence and a posteriori error. *Acta Physica Sinica*, 68(4): 192-207 (郑逢勋, 侯伟真, 李正强. 2019. 高分五号卫星多角度偏振相机最优估计反演: 角度依赖与后验误差分析. *物理学报*, 68(4): 192-207) [DOI: 10.7498/aps.68.20181682]

## Optimal estimation algorithm research for aerosol fine-mode fraction retrieval from polarimetric measurements

ZHENG Fengxun<sup>1,2</sup>, LI Zhengqiang<sup>2</sup>, HOU Weizhen<sup>2</sup>, DONG Xiaogang<sup>3</sup>, ZHOU Zhiyuan<sup>3</sup>

1.College of Agricultural Equipment Engineering, Henan University of Science and Technology, Luoyang 471003, China;

2.State Environmental Protection Key Laboratory of Satellite Remote Sensing, Aerospace Information Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100094, China;

3.Science and Technology on Optical Radiation Laboratory, Beijing Institute of Environmental Characteristics, Beijing 100854, China

**Abstract:** Monitoring the atmospheric particle pollution is one of priorities for environmental protection. To infer the near-surface fine particulate matter ( $PM_{2.5}$ ) mass concentration, aerosol Fine-Mode Fraction (FMF) is an important parameter, which can separate contributions from smaller and bigger particles in Aerosol Optical Depth (AOD). However, there still have great challenges for the conversion between FMF and remotely sensed optical measurements. As one of the most promising methods of remote sensing, polarimetry is widely employed for atmospheric aerosol monitoring, and has a good potential for improving FMF inversion. In order to investigate the contribution of polarization to the for improved characterization of FMF, an algorithm for FMF retrieval from multispectral intensity and Degree Of Linear Polarization (DOLP) measurements is proposed in this paper.

The proposed algorithm is based on the Optimal Estimation (OE) inversion theory. The UNified Linearized Vector Radiative Transfer Model (UNL-VRTM) is adopted as the forward model, and the quasi-Newton approach implemented by the L-BFGS-B code is used to find the minimum of the cost function. In order to test the performance of the algorithm, synthetic data for ground-based measurements of sky light, in the conditions of different aerosol optical depth (AOD, from 0.1 to 3.0) and FMF (from 0.05 to 0.95), are simulated. In addition, near-infrared (NIR) measurements at a wavelength of 1610 nm were introduced to improve the retrieval of coarse mode aerosol. Under the OE inversion framework, the AOD and FMF can be retrieved simultaneously after several iterations.

Based on the synthetic data, analysis shows that the DOLP is more sensitive to FMF in the NIR band (centered at 1610 nm) than in the visible band (centered at 490, 550, 670 and 870 nm). Numerical inversion test furtherly show that the algorithm has well self-consistency, the error of retrieved FMF caused by the algorithm itself is 0.014%. In the case of 5% observation error is considered, the average fitting residual, differences between the simulations with best inversion results and the measurements, is 5.2%, which is slightly higher than the intensity observation error (5%). By introducing DOLP measurements into the retrieval, the inversion accuracy improved significantly than only using the intensity measurements. The retrieval error of AOD has decreased from 1% to 0.3%, and the retrieval error of FMF has decreased from 1.4% to 0.18%.

These results strongly validate the feasibility and potentiality of the proposed OE inversion method in atmospheric aerosol polarimetric remote sensing. This mechanism is expected to be a new approach to improving the remote sensing capabilities of  $PM_{2.5}$  monitoring.

**Key words:** remote sensing, degree of linear polarization, aerosol, fine mode fraction, optimal estimation retrieval

**Supported by** National Natural Science Foundation of China (No. 41871269); Key Scientific Research Projects of Colleges and Universities in Henan Province (No. 21A416003); PhD Research Startup Foundation of Henan University of Science and Technology (No. 13480031)