

# 沙尘气溶胶散射效应对大气二氧化碳卫星遥感反演误差的影响分析

华健聪, 曾招城

北京大学 地球与空间科学学院 遥感与地理信息系统研究所, 北京 100871

**摘要:** 二氧化碳 (CO<sub>2</sub>) 是一种重要的温室气体, 利用卫星遥感可实现全球大气 CO<sub>2</sub> 的持续大范围监测, 对于制定减排策略应对全球气候变暖具有重要意义。大气中的气溶胶散射效应是制约卫星高精度 CO<sub>2</sub> 反演的主要因素。现有研究表明, 在地表反照率较高的地区, 例如沙漠地区, 卫星反演的 CO<sub>2</sub> 大气柱平均干燥空气混合比 (XCO<sub>2</sub>) 比真实值普遍偏高, 偏差程度可达到满足实际应用需求所允许误差的 50%。然而目前学界对此还缺乏足够的理解和定量分析。围绕这一难点问题, 本文应用精准的大气辐射传输模型和基于最优化估计的 XCO<sub>2</sub> 全物理反演算法, 分析和量化沙漠地区沙尘气溶胶散射效应所导致的 XCO<sub>2</sub> 反演误差。本研究从气溶胶的 3 个重要特征变量出发, 包括气溶胶光学厚度 (AOD)、气溶胶层高 (ALH) 和单次散射反照率 (SSA), 解析沙尘气溶胶散射效应导致 XCO<sub>2</sub> 卫星反演结果偏差的物理机制。研究结果表明卫星反演算法中低估沙尘气溶胶的 AOD、低估 ALH 或高估 SSA 是沙漠地区 XCO<sub>2</sub> 出现高估的可能原因。具体表现为: (1) 在反演算法不考虑气溶胶的情况下, 若实际 AOD 大于 1.0, 将导致 XCO<sub>2</sub> 反演结果高估超过 1%; (2) 当 AOD 低估 0.3 至 0.5 时, XCO<sub>2</sub> 的反演结果将高估 0.15% 至 1.28%; (3) 当 ALH 低估超过 0.6 km 时, XCO<sub>2</sub> 将高估超过 1%; (4) 在高估单次散射反照率 (SSA) 的情况下, XCO<sub>2</sub> 反演结果偏高, 但高估不超过 0.15%。由本文的模拟实验可知, 精准的气溶胶信息对于实现高精度的 XCO<sub>2</sub> 反演极为关键。本文还探究了沙漠地区可能发生的“临界反照率”效应对反演结果的影响, 并指出此效应可能是高亮地表中 CO<sub>2</sub> 探测卫星无法同时量化气溶胶信息的根源。本文提出, 为了解决这一难题, 实际反演中需要综合气溶胶探测仪器的观测数据对气溶胶信息进行进一步约束以提高 XCO<sub>2</sub> 的反演精度。本文结论可为未来卫星反演算法的改进提供参考依据。

**关键词:** 沙尘气溶胶, 二氧化碳卫星, 遥感反演算法, 散射效应, 辐射传输模型

**中图分类号:** P2

**引用格式:** 华健聪, 曾招城. 2024. 沙尘气溶胶散射效应对大气二氧化碳卫星遥感反演误差的影响分析. 遥感学报, 28(10): 2582-2599  
Hua J C and Zeng Z C. 2024. Quantifying the scattering effect of dust aerosols on satellite remote sensing retrievals of atmospheric carbon dioxide. National Remote Sensing Bulletin, 28(10): 2582-2599 [DOI: 10.11834/jrs.20243305]

## 1 引言

工业革命以来, 化石燃料燃烧等人类活动导致全球大气中的温室气体浓度不断增加, 温室效应显著增强, 引起国际社会的普遍关注。二氧化碳 (CO<sub>2</sub>) 作为最主要的温室气体, 是影响温室效应的重要因素。联合国政府间气候变化专门委员会 (IPCC) 第六次评估报告 (AR6) 显示, 由于人类活动的影响, 大气 CO<sub>2</sub> 浓度已从 1850 年—1900 年的 289.9±3.3 ppm 增加到 2010 年—2019 年的 398.8±

7.3 ppm, 增长幅度达到约 38%, 在过去 50 年中增长最快 (IPCC, 2023)。精确监测大气中的 CO<sub>2</sub> 浓度可以为有效追踪化石燃料燃烧引起的碳排放、量化生态系统的碳汇能力和评估极端气候影响等研究提供基础性科学数据集, 对于深入研究全球气候变化和理解全球碳收支状态具有重要意义。

利用卫星遥感技术可实现稳定、持续、大范围的大气 CO<sub>2</sub> 浓度监测。日本于 2009 年发射了全球首颗专门用于观测温室气体的卫星 GOSAT (Greenhouse Gases Observing Satellite) (Yokota 等,

收稿日期: 2023-07-24; 预印本: 2024-04-07

基金项目: 国家重点研发计划 (编号: 2022YFB3903702); 国家自然科学基金 (编号: 42275142)

第一作者简介: 华健聪, 研究方向为大气遥感。E-mail: huajc01@foxmail.com

通信作者简介: 曾招城, 研究方向为大气遥感。E-mail: zczeng@pku.edu.cn

2009)。美国在2009年发射OCO (Orbiting Carbon Observatory) 失败后, 于2014年成功发射OCO-2 (Crisp等, 2008)。中国于2016年成功发射碳卫星TanSat, 这是国际上第3颗专门用于观测温室气体的卫星 (Yang等, 2020)。

目前温室气体高光谱遥感探测使用的传感器依据所用的电磁波波长范围主要分为热红外和短波近红外两类。由于人类活动排放的CO<sub>2</sub>主要集中在近地表, 因此近地表的大气CO<sub>2</sub>浓度监测是目前研究的重点 (Nelson和O'Dell, 2019)。短波近红外相较于热红外探测 (Crevoisier等, 2009) 对于近地表的大气CO<sub>2</sub>敏感性更高, 因此广泛用于GOSAT、OCO-2、TanSat等卫星的大气CO<sub>2</sub>探测。短波近红外探测主要是基于大气中的CO<sub>2</sub>分子吸收部分太阳辐射及由地面反射的电磁波能量而形成的CO<sub>2</sub>吸收光谱, 并考虑实际大气中的吸收、散射等物理过程, 运用高精度的全物理FP (Full Physics) 反演算法得到大气CO<sub>2</sub>浓度分布 (Rodgers, 2000; Buchwitz等, 2000; Buchwitz等, 2006)。目前主要采用的波段是位于1.61 μm附近的CO<sub>2</sub>吸收带, 此外为了减弱云和气溶胶对反演的影响, 短波近红外传感器还增加了位于0.76 μm附近的氧气A波段 (O<sub>2</sub>A波段) 和位于2.06 μm附近的CO<sub>2</sub>强吸收波段 (SCO<sub>2</sub>波段) 来辅助1.61 μm的CO<sub>2</sub>弱吸收波段 (WCO<sub>2</sub>波段) 进行反演。

目前主流的全物理反演算法是基于Rodgers (2000) 提出的最优估计法。其通过迭代不断更新待求状态参数以最小化模拟光谱和观测光谱的差异, 直至达到一定的收敛条件, 最终获得与观测光谱匹配度最佳的大气状态。全物理反演算法精度较高, 普遍用于目前在轨卫星的温室气体反演。知名的全物理反演算法还包括美国NASA团队的ACOS算法 (O'Dell等, 2012)、英国莱斯特大学的UoL-FP算法 (Bösch等, 2006)、日本的NIES-FP算法 (Tanaka等, 2016)、荷兰太空研究所和德国卡斯鲁理工学院的RemoTec算法 (Schepers等, 2012)、中国的TanSat卫星反演算法 (Yang等, 2020; Wang等, 2020; Hong等, 2022) 等。

CO<sub>2</sub>在大气中混合均匀且变化梯度小, 一般的碳源或碳汇导致的CO<sub>2</sub>大气柱平均干燥空气混合比XCO<sub>2</sub> (column-average dry-air mole fraction of CO<sub>2</sub>) 的变化相较于其背景量较小 (Schneising等, 2008)。因此为了满足全球温室气体浓度监测及获

取源汇信息等实际应用需求, 大气XCO<sub>2</sub>卫星遥感反演的精度要求极高, 通常要达到1% (约4 ppm) (Miller等, 2007)。在近红外波段, 气溶胶散射效应是大气XCO<sub>2</sub>反演的最主要误差源。这是因为在大气辐射传输过程中, 气溶胶对电磁辐射的散射会改变光程并显著影响卫星传感器接收到的辐射能量, 而气溶胶散射效应由于其复杂性模拟不确定性高。

为削弱气溶胶散射对大气XCO<sub>2</sub>卫星反演结果的干扰, 国内外学者提出了不同的解决方案。Butz等 (2009) 在反演XCO<sub>2</sub>的过程中对气溶胶数量、高度分布、粒径大小等微物理特性进行参数化, 最终可实现在气溶胶光学厚度AOD (Aerosol Optical Depth) 为0.5时气溶胶散射效应对XCO<sub>2</sub>反演结果的误差小于1%, 且反演误差不随地表反照率和气溶胶种类的改变而发生变化。Nelson和O'Dell (2019) 将从第五版的戈达德地球观测系统模型GEOS-5 (Goddard Earth Observing System Model, Version 5) 中获取的优化的气溶胶先验信息输入ACOS反演算法, 指出优化的气溶胶先验信息可将XCO<sub>2</sub>的反演误差由2.12 ppm降至1.83 ppm, 但反演精度仍因现有的气溶胶模型存在的不确定性而受限。针对全物理反演算法可能在有些情况下无法有效参数化实际大气中的云和气溶胶, 反而使得反演精度较低的问题, Nelson等 (2016) 提出在使用一系列预处理和后处理手段去除云和气溶胶干扰的基础上, 使用“晴空 (clear-sky)”反演法能得到和全物理反演法精度相当的结果, 而且其计算更简单省时。Zeng等 (2018) 使用光谱分选法 (Spectral Sorting Approach), 利用OCO-2卫星的O<sub>2</sub>A波段的高光谱观测数据反演AOD和气溶胶层高ALH (Aerosol Layer Height), 该方法可较好地刻画气溶胶的垂直结构, 并已在洛杉矶地区 (Zeng等, 2017) 和西撒哈拉沿海地区 (Zeng等, 2020a) 得到验证, 可有效减小气溶胶散射效应导致的XCO<sub>2</sub>反演误差。

目前全球CO<sub>2</sub>卫星反演存在的一个重要问题是受沙尘气溶胶影响较大的地区的大气XCO<sub>2</sub>反演结果出现了整体偏高的现象。Frey等 (2021) 使用卫星XCO<sub>2</sub>反演结果与位于非洲纳米比亚Gobabeb沙漠的碳柱观测合作网络COCCON (Collaborative Carbon Column Observing Network) 地面观测站点的数据进行对比, 发现GOSAT卫星XCO<sub>2</sub>反演结果

偏高 1.2—2.6 ppm (约 0.5%, 也即满足实际应用需求所允许的 50%), OCO-2 同化产品偏高 0.4—1.4 ppm。本文以 Gobabeb 沙漠的 COCCON 观测站点为中心, 筛选出落在  $1^\circ \times 1^\circ$  范围内 OCO-2 L2 产品的 XCO<sub>2</sub> 结果, 共获得 2017 年 2 月 6 日至 2021 年 4 月 15 日的共 27 个匹配结果。结果显示 OCO-2 的 XCO<sub>2</sub> 反演结果整体偏高, 平均绝对误差约为 1.76 ppm, 均方根误差约为 2.08 ppm。然而对于沙尘气溶胶占主导地区的 XCO<sub>2</sub> 卫星反演结果整体偏高的问题, 目前还缺乏有效的解决方法, 这是卫星 XCO<sub>2</sub> 反演的一个难点问题。过去的研究表明 (Nelson 和 O'Dell, 2019; Butz 等, 2009; Zhang 等, 2016), 这个偏差与沙漠地区的高反照率地表以及沙尘气溶胶的散射效应密切相关, 但其中的影响机理目前仍不明确。在实际的大气 XCO<sub>2</sub> 全球反演中, 沙尘气溶胶影响普遍存在。据 OCO-2 卫星 L2 产品的算法理论基础文档 (ATBD) 显示, 主导气溶胶类型为沙尘气溶胶的区域不仅包括非洲北部、阿拉伯半岛的沙漠, 还包括南美洲北部、中亚、中国西北部的大部分地区, 另外沙尘气溶胶为次主导类型的区域也有美国西部、中北美地区和欧洲西部等 ([https://docsserver.gesdisc.eosdis.nasa.gov/public/project/OCO/OCO\\_L2\\_ATBD.pdf](https://docsserver.gesdisc.eosdis.nasa.gov/public/project/OCO/OCO_L2_ATBD.pdf)[2023-07-24])。由此可见, 沙尘气溶胶是进行大气 XCO<sub>2</sub> 反演时不可忽视的关键影响因素。对沙尘气溶胶的影响机制的深入理解可以帮助提高全球大气 XCO<sub>2</sub> 的反演精度。特别对于估算处于沙漠之中的大城市 (如美国的拉斯维加斯及菲尼克斯、阿联酋的迪拜、埃及的开罗、摩洛哥的卡萨布兰卡、伊朗的德黑兰和秘鲁的利马等) 的碳排放, 沙尘气溶胶的影响是我们无法回避且必须要正确认识和解决的问题。

气溶胶是大气 XCO<sub>2</sub> 高精度反演的重要干扰因素, 且在高反照率地区, 沙尘气溶胶的存在可能会给大气 XCO<sub>2</sub> 反演引入更大的误差。围绕这一难点问题, 本文基于精确的辐射传输模型和卫星 XCO<sub>2</sub> 全物理反演算法, 详细论述沙尘气溶胶散射效应对大气 XCO<sub>2</sub> 反演的影响机制, 以沙漠地区为典型案例, 探讨 XCO<sub>2</sub> 反演出现偏差的可能原因, 为未来的温室气体监测卫星的设计研发及反演算法改进提供参考。

## 2 大气辐射传输前向模型

### 2.1 辐射传输模型

前向辐射传输模型模拟在特定的输入地表和大气状态以及其他模型参数的条件下卫星观测到的辐射亮度, 是大气 XCO<sub>2</sub> 反演算法中的重要部分。为精确计算卫星传感器接收到的辐射亮度, 经典的方法是对所求光谱范围内的每条吸收线进行大量的逐线 (Line-By-Line) 计算, 以模拟太阳光穿过大气层的复杂传输过程, 如经典的线性离散坐标辐射传输模型 LIDORT (Linearized Discrete Ordinate Radiative Transfer) (Spurr, 2002)。然而这样的计算非常耗时, 为此学界开发出了一些用于温室气体反演的快速辐射传输模型 (Buchwitz 等, 2000; Frey 等, 2021; Spurr, 2002), 能在加快光谱计算的同时不引入较大的系统误差。

本研究采用基于大气光学特性的主成分分析 PCA (Principal Component Analysis) 辐射传输模型 (O-PCA)。O-PCA 模型最早由 Natraj 等 (2005) 提出, 后由 Kopparla 等 (2016, 2017) 进行改进以推广到不同波段的温室气体反演。Somkuti 等 (2017) 证明了 O-PCA 模型可快速且较为准确地从卫星观测光谱中反演 XCO<sub>2</sub>。O-PCA 模型主要利用了邻近吸收线的光学性质存在一定量的信息冗余这一特点, 使用主成分分析方法减少逐线计算的数量, 以加快辐射传输计算速度。O-PCA 模型有 3 个主要步骤, 如下:

(1) 首先使用 2S-ESS 辐射传输模型 (Spurr 和 Natraj, 2011) 对波段内的每个光谱点进行快速但精度相对较低的逐线辐亮度计算, 获得所有通道的辐亮度光谱。2S-ESS 模型使用高阶的散射相函数精确计算气溶胶单次散射, 并采用二流近似 (Two-Stream) 计算多次散射。2S-ESS 模型在单次散射占主导, 或是在气体强吸收占主导的大气中展示了较好的优越性, 因此被不少研究采用 (Zhang 等, 2015; Zeng 等, 2020b; Xi 等, 2015)。

(2) 利用主成分分析方法计算一个与波长相关的校正系数。

(3) 将上一步得到的校正系数与 2S-ESS 辐射传输模型结果相乘, 最终获得高精度的辐亮度光谱 (Somkuti 等, 2017)。

## 2.2 前向模型模拟

### 2.2.1 输入数据介绍

本文主要使用WCO<sub>2</sub>波段反演CO<sub>2</sub>分子柱浓度，使用O<sub>2</sub>A波段反演O<sub>2</sub>分子柱浓度。为了模拟真实大气分子的吸收状况，我们除了考虑要求的大气分子廓线，还同时引入各波段内主要干扰性吸收气体分子的廓线。气溶胶可依据粒径大小分成粗模态（Coarse Mode）和细模态（Fine Mode）这两类，其中粗模态包括海盐（sea salt）气溶胶和沙尘（dust）气溶胶；细模态则包括有机碳（organic

carbon）气溶胶、黑碳（black carbon）气溶胶和硫酸盐（sulfate）气溶胶。不同类型的气溶胶在AOD、单次散射反照率SSA（Single Scattering Albedo）和散射相函数等性质上存在差异。本文研究沙尘气溶胶的散射效应，因此有关实验主要围绕粗模态气溶胶展开。地表反照率和气溶胶散射效应的影响常常是耦合的，因此本文选取地表较亮的沙漠地区和相对较暗的城市地区作为地表反照率的典型场景下进行模拟和比较。数据介绍汇总见表1。

表 1 前向模型模拟的输入数据介绍

Table 1 Introduction of input data in the simulations using forward model

类型	来源	描述
大气先验廓线	GGG2020的改进算法(Laughner等, 2023)	WCO <sub>2</sub> 波段内考虑气体:CO <sub>2</sub> 、甲烷(CH <sub>4</sub> )、水汽(H <sub>2</sub> O)、重水(HDO)等;O <sub>2</sub> A波段内考虑气体:O <sub>2</sub> 、H <sub>2</sub> O
分子吸收截面数据	高分辨率透过分子吸收数据库HITRAN(High-resolution TRANs-mission molecular absorption database)(Rothman等, 2009)	用于计算气体光学厚度
地表反照率	OCO-2 L2 Lite数据产品(O'Dell等, 2012)	假设地表为朗伯体。估算得到沙漠地区O <sub>2</sub> A波段的地表反照率为0.34, WCO <sub>2</sub> 波段为0.45;城市地区O <sub>2</sub> A波段的地表反照率为0.21, WCO <sub>2</sub> 波段为0.18
AOD	研究与应用气溶胶再分析回顾分析数据MERRAero (Modern Era Retrospective analysis for Research and Applications Aerosol Reanalysis) (Rienecker等, 2011)	近似地取WCO <sub>2</sub> 波段内的粗模态AOD与O <sub>2</sub> A波段内的相等, WCO <sub>2</sub> 波段内的细模态AOD为O <sub>2</sub> A波段内的0.2倍 ( <a href="https://docsserver.gesdisc.eosdis.nasa.gov/public/project/OCO/OCO_L2_ATBD.pdf">https://docsserver.gesdisc.eosdis.nasa.gov/public/project/OCO/OCO_L2_ATBD.pdf</a> )
ALH	加州理工学院的微型微脉冲激光雷达MiniMPL(Mini Micropulse Lidar)观测数据(Zeng等, 2021)	ALH的平均值约为0.7 km。低空的气溶胶与人类活动密切相关,而高空的气溶胶主要是由大气运动从别处带来
SSA	乔治亚理工学院-戈达德全球臭氧化学气溶胶辐射和传输GOCART(Georgia Institute of Technology-Goddard Global Ozone Chemistry Aerosol Radiation and Transport)(Chin等, 2002)与MERRAero	以MERRAero中的AOD值为权重,通过加权平均求取SSA。SSA通常为提前设定,算法不对其进行反演。本研究使用的粗模态气溶胶SSA约为0.951,细模态气溶胶SSA约为0.518
散射相函数	GOCART与MERRAero	以AOD和SSA乘积大小为权重,通过加权平均求取。通常也是提前设定,算法不对其进行反演
太阳辐照度	Kurucz太阳光谱与Toon等人的GFIT模型中的太阳伪透射谱 ( <a href="https://mark4sun.jpl.nasa.gov/toon/solar/solar_spectrum.html">https://mark4sun.jpl.nasa.gov/toon/solar/solar_spectrum.html</a> [2023-07-24])	与GOSAT卫星反演算法类似的方法(Yokota等, 2009)。由于卫星过境时间均为当地时间正午左右,因此本研究均假定太阳天顶角SZA(Solar Zenith Angle)为15°

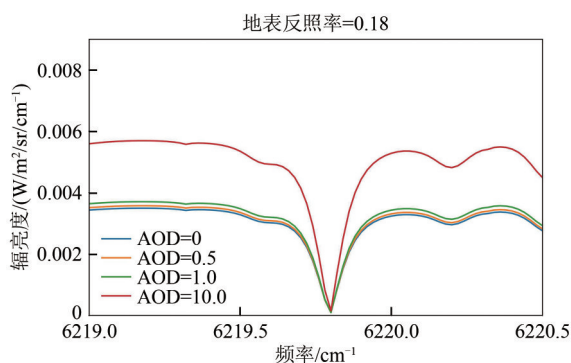
## 3 WCO<sub>2</sub>吸收光谱特征对于气溶胶特性的响应分析

在上述大气条件下，应用O-PCA辐射传输模型得到辐射亮度光谱。我们以WCO<sub>2</sub>波段范围内6219.8 cm<sup>-1</sup>附近的一个吸收线为例分析气溶胶特性和地表反照率对光谱的影响（图1）。其中ALH设置为0.2 km。对于相同的AOD，地表反照率越大，意味着有更多的太阳入射能量能被地表反射而被卫星传感器接收，光谱基台值（continuum level，也即气体吸收可被忽略的通道的辐亮度）也相应

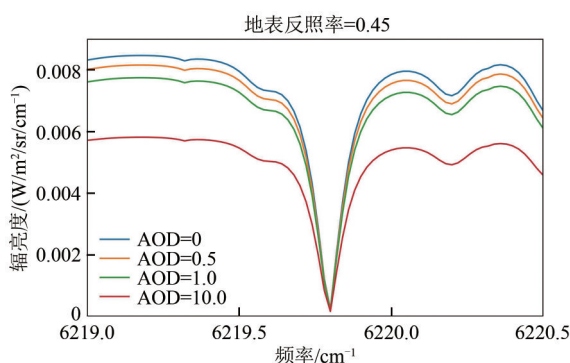
更大。在相同地表反照率下，AOD的改变不会显著影响吸收线“谷底”的辐亮度，这是因为该通道气体分子吸收接近饱和程度。但AOD和地表反照率对光谱基台值有非常重要的影响。当地表反照率较小，也即地表较暗时，增加AOD，会导致基台值增加；当地表反照率较大，也即地表较亮时，增加AOD，会导致基台值减小。由于沙尘气溶胶SSA较高（可达0.95），大部分入射光遇到沙尘气溶胶都会发生散射，因此当地表较暗时，经地表反射的太阳入射光和气溶胶散射光较少，直接经气溶胶散射后被卫星传感器接收的能量占据

主导, 因此此时若增加 AOD, 光谱基台值将增大。反之, 当地表较亮时, 经地表反射的能量占主导,

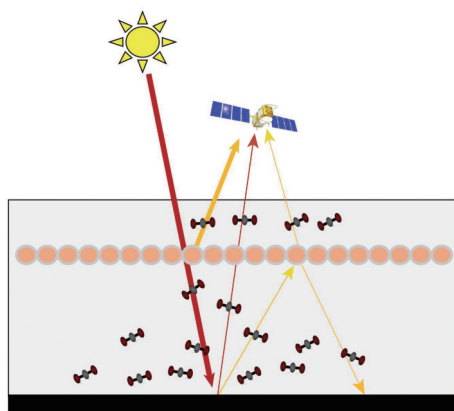
此时增加 AOD, 到达传感器的能量被削弱, 光谱基台值减小。



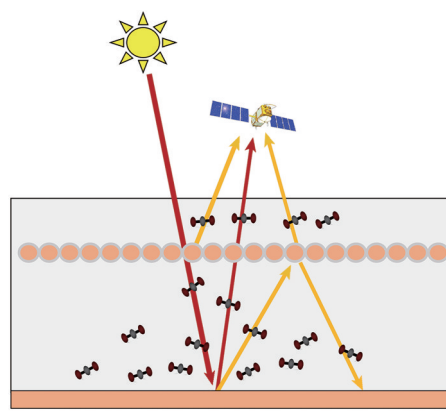
(a) 地表反照率为 0.18 时的辐亮度模拟光谱  
(a) Radiance simulation for surface albedo of 0.18



(b) 地表反照率为 0.45 时的辐亮度模拟光谱  
(b) Radiance simulation for surface albedo of 0.45



(c) 地表反照率为 0.18 时的散射和反射过程示意图  
(c) Schematic diagram of scattering and reflection when surface albedo is 0.18



(d) 地表反照率为 0.45 时的散射和反射过程示意图  
(d) Schematic diagram of scattering and reflection when surface albedo is 0.45

● 沙尘气溶胶      ●●● 气体分子

图 1 不同地表反照率和 AOD 情况下,  $\text{WCO}_2$  波段内的  $6219.8 \text{ cm}^{-1}$  吸收线的辐亮度光谱和散射和反射过程示意图 (红线代表直接经地表反射的光线, 黄线代表与气溶胶发生散射作用的光线, 线的粗细代表辐射能量的相对大小, 线越粗代表辐射能量越大)

Fig. 1 Schematic diagram of scattering and reflection and radiance simulation near an absorption line at  $6219.8 \text{ cm}^{-1}$  in the  $\text{WCO}_2$  band with different surface albedos and AODs (The red lines represent the light reflected directly from surface; the yellow lines represent the light scattered by aerosol. The thickness of the line represents the relative magnitude of the radiant energy; the thicker the line, the greater the radiant value)

由上述分析可知, 改变地表反照率和 AOD, 将会使吸收线“谷底”辐亮度值与光谱基台值发生变化, 而二者之差也将随之发生变化。我们将这个差值称为“吸收深度”, “吸收深度”与基台值之比定义为“相对吸收深度”。“相对吸收深度”的大小决定了最终反演的气体分子含量, 因此“相对吸收深度”对于  $\text{XCO}_2$  反演算法极为重要。我们将在第 4 节对“相对吸收深度”对  $\text{XCO}_2$  反演结果的影响进行具体阐述。

不同高度的气溶胶对被传感器接收光束的光

程的改变是不同的, 也即 ALH 会对气溶胶的多次散射效应产生影响 (图 2)。我们分析了 ALH 对相对吸收深度的影响, 结果表明当气溶胶处在较高的位置时, 相对吸收深度较小。这是因为当 ALH 较大时, 有更多的人射光在大气较高的位置就被散射而被传感器接收, 这部分光程较短, 与之发生吸收的气体分子数量相对较少, 因此其相对吸收深度较小。图 3 为不同的 ALH 情况下的气溶胶散射效应示意图。

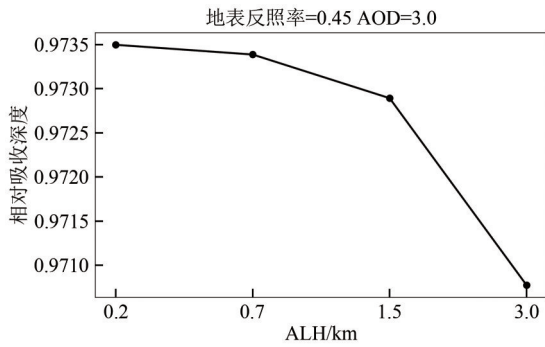


图 2 相对吸收深度随 ALH 变化图

Fig. 2 Relative absorption depth varies with Aerosol Layer Height

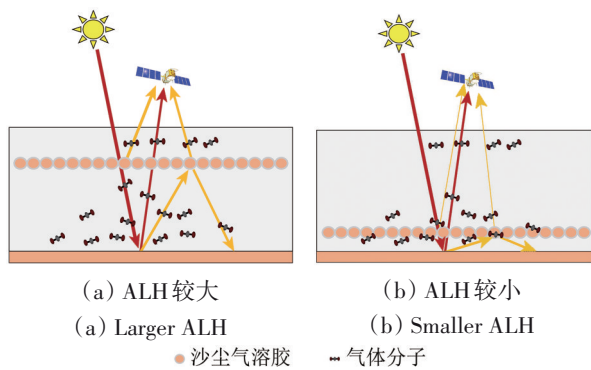


图 3 不同的 ALH 情况下的气溶胶散射效应示意图

Fig. 3 Schematic diagram of aerosol scattering effect with different ALHs

## 4 基于卫星观测的大气 XCO<sub>2</sub>反演模型

### 4.1 全物理反演算法概述

本文用到的大气 XCO<sub>2</sub>的全物理反演算法被称为“尺度反演法” (Scaling Retrieval)，也即将所有

待求参数组成一个状态向量  $\mathbf{x}$  进行反演，通过迭代求取一个最优后验状态向量。状态向量中对应的待求气体参数为“尺度因子” (scale factor)，将最优后验状态向量中的“尺度因子”与对应的气体先验廓线相乘，得到我们要求的气体廓线。“尺度反演法”假设大气廓线中各高度处的先验值相较于真实值整体高估或低估了一个乘性尺度因子。这种方法不改变大气廓线形状，也即算法不对每一层大气进行单独反演，不同高度处的气体含量之间的相互关系保持不变 (Wunch 等, 2011)。具体反演的流程图如图 4 所示。

卫星观测辐射亮度  $\mathbf{y}$  与由待求参数组成的状态向量  $\mathbf{x}$  之间满足如下公式：

$$\mathbf{y} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{b}) + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (1)$$

式中， $\mathbf{F}$  代表辐射传输模型； $\mathbf{x}$  包括待求的气体柱浓度、气溶胶参数、地表反照率等； $\mathbf{b}$  代表气体吸收截面、太阳几何和观测几何等已知参数； $\boldsymbol{\varepsilon}$  是包含观测误差和前向模型误差在内的误差向量。经过前向模型得到模拟光谱和相应的雅可比 (Jacobian) 矩阵  $\mathbf{K}$ 。 $\mathbf{K}$  包含了模拟光谱辐射亮度对所有状态向量元素的一阶导数，它反映了光谱通道相对于待反演参数的敏感性，在反演模型中用于迭代优化状态向量以拟合观测光谱，表达式如下：

$$\mathbf{K} = \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{b})}{\partial \mathbf{x}} \quad (2)$$

反演模型中的最优估计方法目的是通过最小化代价函数  $\mathbf{J}(\mathbf{x})$  来求取后验概率最大的状态向量 (Rodgers, 2000)。

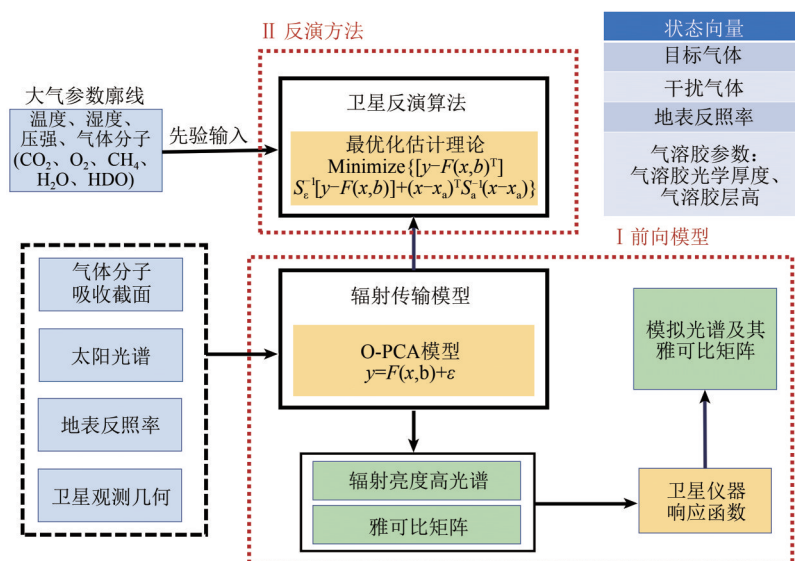


图 4 大气 XCO<sub>2</sub>全物理反演算法流程图

Fig. 4 Flow chart of atmospheric XCO<sub>2</sub> full physic retrieval algorithm

$$J(\mathbf{x}) = \chi^2 = [\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{b})]^T \mathbf{S}_e^{-1} [\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{b})] + [\mathbf{x} - \mathbf{x}_a]^T \mathbf{S}_a^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) \quad (3)$$

式中,  $\mathbf{x}_a$ 是先验状态向量;  $\mathbf{S}_e$ 是观测误差的协方差矩阵;  $\mathbf{S}_a$ 是状态向量的先验协方差矩阵。代价函数第一项代表观测和模拟光谱在  $\mathbf{S}_e$  限制下之差, 而第二项代表估计和先验状态向量在  $\mathbf{S}_a$  限制下之差。

利用莱文贝格—马夸特 (Levenberg–Marquardt) 方法 (Levenberg, 1944; Marquardt, 1963) 最小化代价函数, 迭代获取最优的估计参数:

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + ((1 + \gamma)\mathbf{S}_a^{-1} + \mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_e^{-1} \mathbf{K}_i)^{-1} \times (\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_e^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}_i, \mathbf{b})) - \mathbf{S}_a^{-1} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_a)) \quad (4)$$

式中, 下标  $i$  代表第  $i$  次迭代;  $\gamma$  初始值通常取 10, 在迭代过程中可更新以控制迭代收敛速度。当状态向量的改变量足够小时, 迭代终止。

拟合光谱和观测光谱之间的差异可用光谱的约化卡方  $\text{reduced}\chi_{\text{spectrum}}^2$  (Reduced Chi-Square) 表示, 约化卡方等于卡方 ( $\chi_{\text{spectrum}}^2$ ) 与自由度之比。由于假设各光谱通道的观测相互独立, 因此这里的自由度即为观测通道数  $N_{\text{channel}}$ , 公式表示如下:

$$\text{reduced}\chi_{\text{spectrum}}^2 = \frac{\chi_{\text{spectrum}}^2}{N_{\text{channel}}} = \frac{[\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{b})]^T \mathbf{S}_e^{-1} [\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{b})]}{N_{\text{channel}}} \quad (5)$$

约化卡方越接近于 1 说明拟合效果越好。因为最优化估计方法能有效结合先验知识估算卫星观测在气体浓度反演中的有效信息容量和计算反演误差, 所以其在卫星反演中得到了广泛的使用。

## 4.2 大气 XCO<sub>2</sub> 反演模拟实验

本文以 OCO-2 卫星垂直观测模式 (nadir mode) 为例进行大气 XCO<sub>2</sub> 反演的模拟实验。卫星观测的信噪比 SNR (Signal-to-noise ratio) 设为 300。在前向模型输出的光谱的基础上加满足正态分布 (均值=0, 标准差=1/SNR×光谱辐亮度的最大值) 的随机噪声, 作为模拟观测光谱。假设各通道的观测值相互独立, 则观测误差的协方差矩阵  $\mathbf{S}_e$  为对角阵, 对角线元素为 1/SNR 的平方。状态向量中各元素也是相互独立的, 先验协方差矩阵  $\mathbf{S}_a$  也为对角阵, 对角线元素为各元素设定的先验误差。

本文首先分别在 WCO<sub>2</sub> 波段和 O<sub>2</sub> A 波段进行单独反演, 再结合两波段进行联合反演。

### 4.2.1 O<sub>2</sub> A 波段反演

O<sub>2</sub> A 波段包含较多的气溶胶信息, 因此可以

用来辅助 XCO<sub>2</sub> 的反演。下面通过模拟实验来说明这一点。如果在 O<sub>2</sub> A 波段反演中不考虑气溶胶的影响, 在 AOD=3.0 和 ALH=3.0 km 的条件下生成模拟观测光谱, 而在反演过程中将 AOD 设置为 0 (也即认为没有气溶胶), 此时反演中的待求参数共有 5 个, 包括 O<sub>2</sub> (LBL)、O<sub>2</sub> (CIA)、H<sub>2</sub>O 的尺度因子和地表反照率。其中 O<sub>2</sub> (LBL) 为逐线反演得到的是 O<sub>2</sub> 尺度因子; O<sub>2</sub> (CIA) 为基台值反演得到的是 O<sub>2</sub> 尺度因子, 我们最终需要的是 O<sub>2</sub> (LBL)。在实验中设置各元素的参数设置和反演结果见表 2。模拟观测光谱和反演迭代收敛时前向模型输出光谱, 以及光谱拟合的残差见图 5。

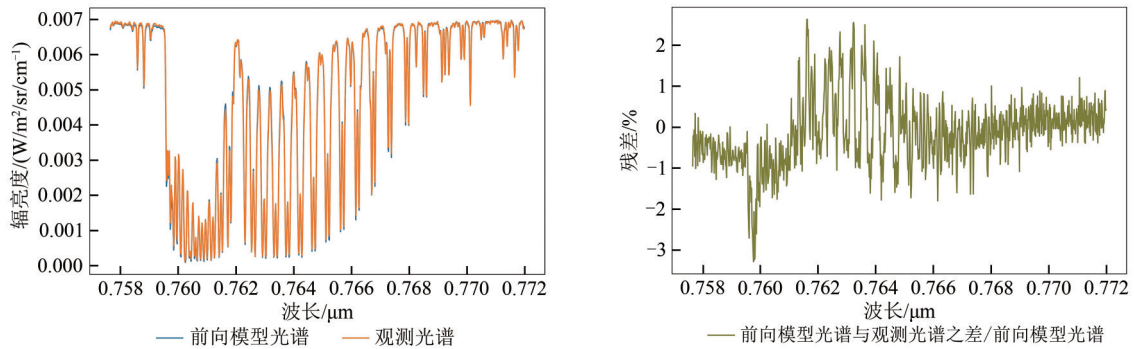
表 2 在不考虑气溶胶情况下的 O<sub>2</sub> A 波段反演: 状态向量元素的真实值、先验值、先验误差和最后的反演结果  
Table 2 O<sub>2</sub> A band retrieval without considering aerosol: true values of state vector elements, a priori values, a priori errors, and retrieval results

状态向量元素	真实值	先验值	先验误差	反演结果
O <sub>2</sub> (LBL)尺度因子	1.0	1.1	0.1	0.752
O <sub>2</sub> (CIA)尺度因子	1.0	1.1	0.1	1.981
H <sub>2</sub> O尺度因子	1.0	1.1	0.1	1.054
地表反照率	0.34	0.3	0.01	0.306

从图 5 可知, 在不考虑气溶胶的情况下进行反演, 光谱拟合结果较差, 此时的约化卡方达到 6.01, 各元素的反演结果与真实值偏差也较大 (表 2), 这是因为反演过程没有提取到 O<sub>2</sub> A 波段中体现的气溶胶信息, 而误将气溶胶对光谱的影响当成气体分子或地表反照率对光谱的影响, 造成反演结果较差。

为验证上述结论, 再在考虑气溶胶的情况下进行模拟实验, 在反演气体尺度因子和地表反照率的同时, 对 AOD 和 ALH 进行反演, 那么此时状态向量共包含 6 个元素。各元素的参数设置和反演结果见表 3。在这种情况下的模拟观测光谱和反演迭代收敛时前向模型输出光谱, 以及光谱拟合的残差见图 6。

若同时对 AOD 和 ALH 进行反演, 则可获得较好的光谱拟合结果 (约化卡方为 0.973), 状态向量元素也能接近真实值 (表 3), 这充分印证了上述结果: O<sub>2</sub> A 波段的反演必须引入 AOD 和 ALH, 以体现气溶胶在该波段对光谱的影响, 才能获得更好的反演结果。



(a) 模拟观测光谱和反演迭代收敛时前向模型输出光谱  
(a) Simulated observation spectrum and spectrum generated from forward model when the retrieval algorithm is converged

(b) 光谱拟合的残差  
(b) Residual of spectral fitting

图 5 在不考虑气溶胶情况下的 O<sub>2</sub>A 波段反演  
Fig. 5 Retrieval of the O<sub>2</sub>A band without considering aerosol

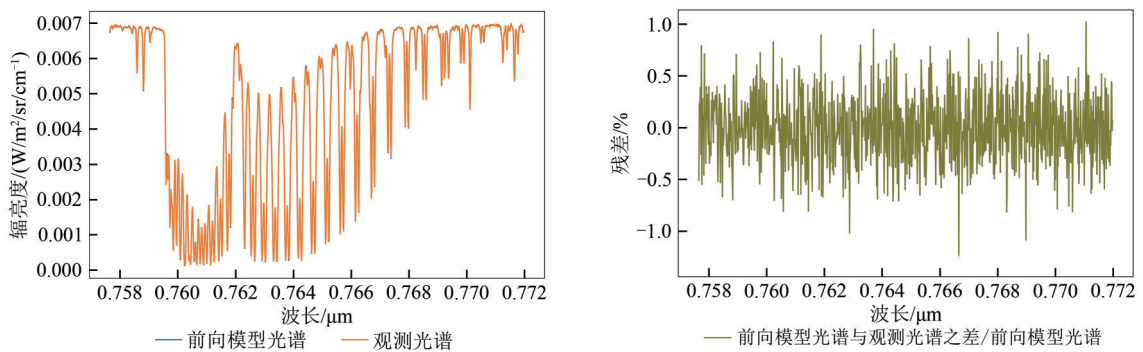
表 3 在考虑气溶胶情况下的 O<sub>2</sub>A 波段反演: 状态向量元素的真实值、先验值、先验误差和最后的反演结果

Table 3 O<sub>2</sub>A band retrieval considering aerosol: true values of state vector elements, the a priori values, the a priori errors, and retrieval results

状态向量元素	真实值	先验值	先验误差	反演结果
O <sub>2</sub> (LBL)尺度因子	1.0	1.1	0.1	1.011
O <sub>2</sub> (CIA)尺度因子	1.0	1.1	0.1	0.963
H <sub>2</sub> O 尺度因子	1.0	1.1	0.1	1.099
地表反照率	0.34	0.3	0.01	0.336
AOD	3.0	3.1	0.1	2.956
ALH/km	3.0	3.1	0.1	3.088

#### 4.2.2 WCO<sub>2</sub> 波段反演

WCO<sub>2</sub> 波段包含的气溶胶信息相对较少, 即使不对 AOD 和 ALH 进行反演, 也能较好地拟合光谱。气溶胶的影响主要体现在最后各元素的反演结果上。我们同样在 AOD=3.0 和 ALH=3.0 km 的条件下生成模拟观测光谱, 而在反演过程中将 AOD 设置为 0 (也即认为没有气溶胶)。WCO<sub>2</sub> 波段反演模拟实验中的状态向量共有 5 个元素, 包括四种气体 (CO<sub>2</sub>、CH<sub>4</sub>、H<sub>2</sub>O、HDO) 的尺度因子和地表反照率, 各元素的参数设置和反演结果见表 4, 光谱见图 7。



(a) 模拟观测光谱和反演迭代收敛时前向模型输出光谱  
(a) Simulated observation spectrum and spectrum generated from forward model when the retrieval algorithm is converged

(b) 光谱拟合的残差  
(b) Residual of spectral fitting

图 6 在考虑气溶胶情况下的 O<sub>2</sub>A 波段反演  
Fig. 6 Retrieval of the O<sub>2</sub>A band considering aerosol

在不考虑气溶胶的情况下进行 WCO<sub>2</sub> 波段的反演, 光谱能达到较好的拟合效果 (约化卡方为

1.09), 但状态向量各元素的反演结果与真实值偏差较大 (表 4)。



表 4 WCO<sub>2</sub>波段反演:状态向量元素的真实值、先验值、先验误差和最后的反演结果

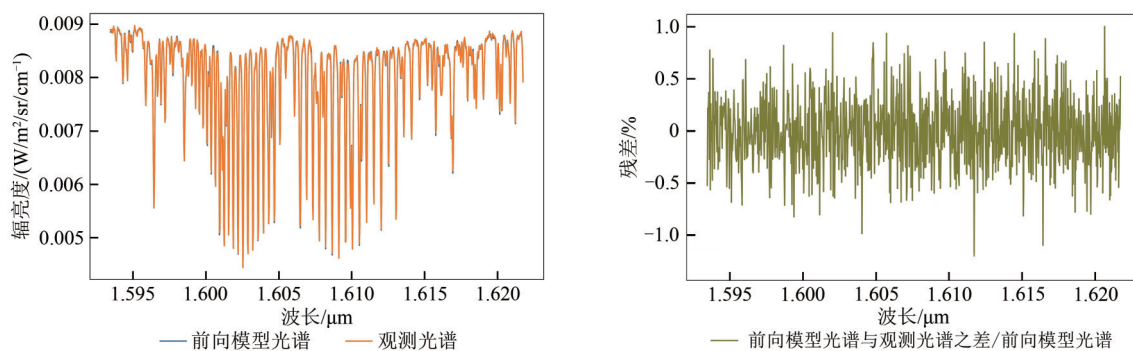
Table 4 WCO<sub>2</sub> band retrieval: true values of state vector elements, the a priori values, the a priori errors, and retrieval results

状态向量元素	真实值	先验值	先验误差	反演结果
CO <sub>2</sub> 尺度因子	1.0	1.1	0.1	0.954
CH <sub>4</sub> 尺度因子	1.0	1.1	0.1	0.974
H <sub>2</sub> O尺度因子	1.0	1.1	0.1	1.096
HDO尺度因子	1.0	1.1	0.1	1.070
地表反照率	0.45	0.4	0.01	0.349

第3节提到光谱的“相对吸收深度”对反演结果有重要影响,下面通过展示在不同AOD条件下

的观测光谱和最终XCO<sub>2</sub>反演结果进行说明。图8展示了不同粗模态AOD下的相对吸收深度,以及此时对应反演的CO<sub>2</sub>尺度因子。

由图8可知,当光谱的“相对吸收深度”增大时,反演的CO<sub>2</sub>尺度因子也将增大,且二者的变化趋势基本相同。此外,当AOD从0增加到3.0时,“相对吸收深度”仅增加了不到0.03%,但最终反演的CO<sub>2</sub>尺度因子增加了约1.41%,可见CO<sub>2</sub>反演结果对于光谱“相对吸收深度”非常敏感,“相对吸收深度”的微小改变将对最终CO<sub>2</sub>反演的结果带来显著影响。这说明了要进行高精度的CO<sub>2</sub>反演,首先必须要有非常精密且光谱分辨率极高的光谱测量。

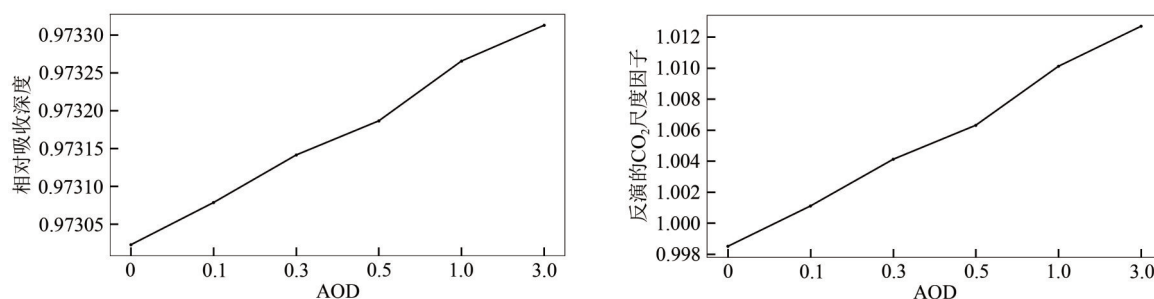


(a) 模拟观测光谱和反演迭代收敛时前向模型输出光谱  
(a) Simulated observation spectrum and spectrum generated from forward model when the retrieval algorithm is converged

(b) 光谱拟合的残差  
(b) Residual of spectral fitting

图 7 WCO<sub>2</sub>波段反演

Fig. 7 Retrieval of the WCO<sub>2</sub> band



(a) 不同AOD条件下模拟观测光谱中的相对吸收深度  
(a) Relative absorption depth in simulated observation spectrum with different AODs

(b) 不同AOD条件下反演的CO<sub>2</sub>尺度因子  
(b) Retrieval CO<sub>2</sub> scale factor with different AODs

图 8 相对吸收深度及反演的CO<sub>2</sub>尺度因子随AOD的变化

Fig. 8 Relative absorption depth and retrieval CO<sub>2</sub> scale factor vary with AOD

#### 4.2.3 WCO<sub>2</sub>波段和O<sub>2</sub>A波段联合反演

实际XCO<sub>2</sub>反演中通常采用WCO<sub>2</sub>波段和O<sub>2</sub>A波段进行联合反演。WCO<sub>2</sub>波段反演主要是获取CO<sub>2</sub>浓度,

为了获得XCO<sub>2</sub>,还需知道大气分子总数(即需要精确的地表压强估计)。由于O<sub>2</sub>在大气中均匀分布且浓度非常稳定,体积混合比约为0.2095,因此我们通常

利用O<sub>2</sub>A波段反演的O<sub>2</sub>浓度来推断大气分子总数。

此外, 我们还能通过O<sub>2</sub>A波段获取气溶胶信息, 这是因为: (1) 我们能获得较为准确的O<sub>2</sub>A波段内吸收截面随波长变化的情况; (2) O<sub>2</sub>A波段观测光谱能体现明显的气溶胶散射特征, 由此我们能获得气溶胶垂直分布特征, 量化其对于XCO<sub>2</sub>反演的影响, 进而减小反演误差。

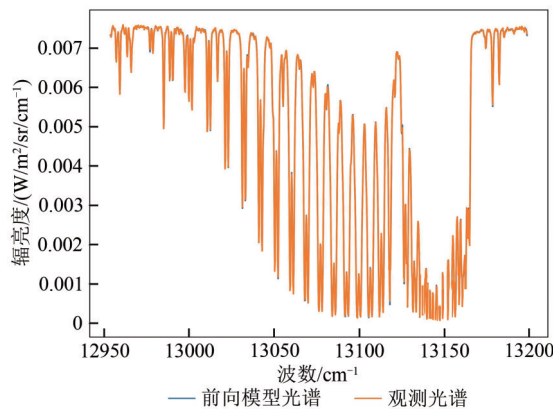
以下是WCO<sub>2</sub>波段和O<sub>2</sub>A波段联合反演的一个例子。状态向量由11个待求参数组成, 包括两波段共7个气体尺度因子, 两波段的地表反照率、AOD和ALH, 各参数设置和反演结果见表5。由于大气O<sub>2</sub>浓度变化极小, 我们在联合反演模拟时将其先验值设置为1.001, 先验误差也随之设为0.001, 这与实际是相符的。与前述分波段反演模拟实验类似, 在联合反演模拟实验中, 同样是在前向模型结果的基础上增加一定的随机噪声获得模拟观测光谱, 然后进行反演。模拟观测光谱和

反演迭代收敛时前向模型输出光谱, 以及光谱拟合的残差见图9。

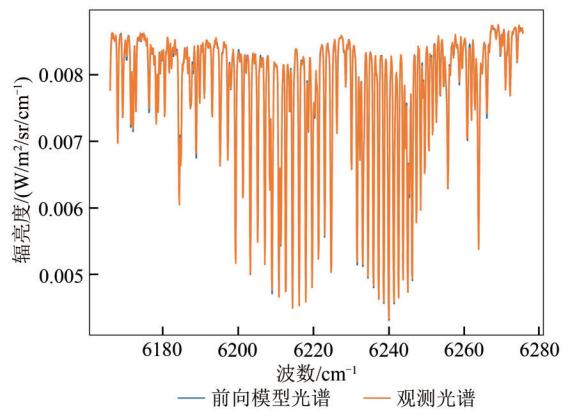
表5 WCO<sub>2</sub>波段和O<sub>2</sub>A波段联合反演: 状态向量元素的真实值、先验值、先验误差和最后的反演结果

Table 5 WCO<sub>2</sub> band and O<sub>2</sub>A band joint retrieval: true values of state vector elements, the a priori values, the a priori errors, and retrieval results

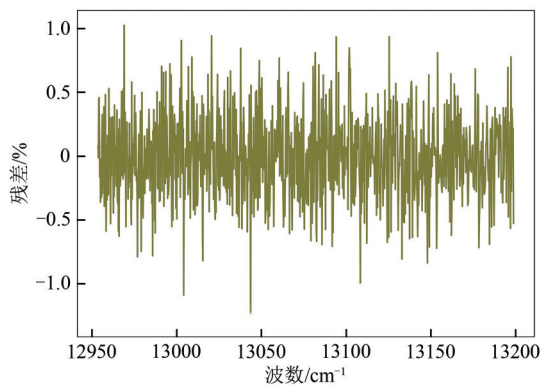
状态向量元素	真实值	先验值	先验误差	反演结果
O <sub>2</sub> (LBL)尺度因子	1.0	1.001	0.001	1.00098
O <sub>2</sub> (CIA)尺度因子	1.0	1.001	0.001	1.001
H <sub>2</sub> O尺度因子(O <sub>2</sub> A)	1.0	1.1	0.1	1.097
地表反照率(O <sub>2</sub> A)	0.34	0.3	0.01	0.335
粗模式 AOD	0.3	0.4	0.1	0.225
ALH (km)	0.7	0.8	0.1	0.812
CO <sub>2</sub> 尺度因子	1.0	1.1	0.1	1.0003
CH <sub>4</sub> 尺度因子	1.0	1.1	0.1	1.0064
H <sub>2</sub> O尺度因子(WCO <sub>2</sub> )	1.0	1.1	0.1	1.102
HDO尺度因子	1.0	1.1	0.1	1.090
地表反照率(WCO <sub>2</sub> )	0.45	0.4	0.1	0.446



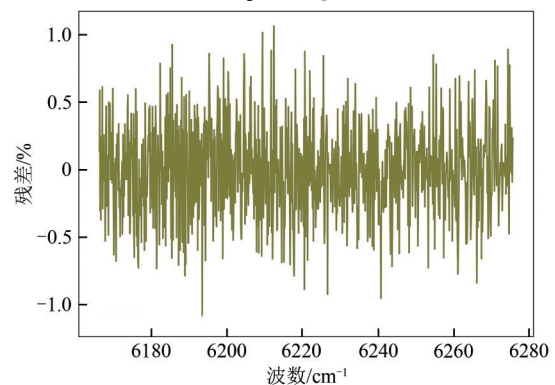
(a) O<sub>2</sub>A band spectra  
(a) O<sub>2</sub>A band spectrums



(b) WCO<sub>2</sub> band spectra  
(b) WCO<sub>2</sub> band spectrums



(c) O<sub>2</sub>A band spectral fitting residual  
(c) Residual of spectral fitting for O<sub>2</sub>A band



(d) WCO<sub>2</sub> band spectral fitting residual  
(d) Residual of spectral fitting for WCO<sub>2</sub> band

图9 WCO<sub>2</sub>波段和O<sub>2</sub>波段联合反演示例

Fig. 9 Example of retrieval results based on joint WCO<sub>2</sub> band and O<sub>2</sub> band retrieval

光谱拟合的残差基本在1%以内，与加的随机噪声大小相当，约化卡方为1.01，说明光谱拟合结果较好，欠拟合的部分主要由于随机噪声造成，反演结果可信度高。

## 5 沙尘气溶胶散射效应对大气 XCO<sub>2</sub> 反演误差评估

本节将基于上述的全物理反演算法量化沙尘气溶胶散射效应对大气 XCO<sub>2</sub> 反演的影响。特别地，研究聚焦于导致 XCO<sub>2</sub> 卫星反演结果偏差的物理机制解析和量化。首先在4个不同情景下进行模拟实验，分别是（1）反演算法中不考虑气溶胶散射效应；（2）反演算法中低估 AOD；（3）反演算法中低估 ALH；（4）反演算法中高估气溶胶 SSA。实验旨在探讨当我们忽略了沙尘气溶胶散射效应对气溶胶信息理解不准确时造成的大气 XCO<sub>2</sub> 反演误差。由于地表反照率常常与气溶胶散射共同影响大气 XCO<sub>2</sub> 的卫星反演，要分析沙尘气溶胶散射效应的影响，必须兼顾对地表反照率的讨论，尤其是沙漠地区的高亮地表还可能存在非常特殊的“临界反照率”效应。因此在5.2节中我们探究了沙漠中的“临界反照率”效应对大气 XCO<sub>2</sub> 反演的影响。

### 5.1 沙漠地区沙尘气溶胶散射效应对大气 XCO<sub>2</sub> 反演的影响

图10展示了沙尘气溶胶多次散射对 XCO<sub>2</sub> 反演的影响。相较于无气溶胶的情景，气溶胶的散射效应将显著影响传感器接收光束的光程。光程的改变意味着路径上与之发生吸收作用的气体分子数量的改变，最终对反演结果造成影响。因此，若我们在反演过程中忽略了气溶胶散射效应，或对气溶胶特性的刻画不够准确，都将给反演结果带来误差。

我们根据这一机理开展模拟实验，从如下4个方面探索沙漠地区 XCO<sub>2</sub> 反演值存在偏差的可能原因。

#### 5.1.1 反演中不考虑气溶胶散射情况下导致的 XCO<sub>2</sub> 反演偏差

本文首先在不同粗模态 AOD (0.1, 0.3, 0.5, 1.0, 3.0) 条件下生成模拟观测光谱 (细模态 AOD 设置为0)，根据信噪比为300增加光谱噪声。在沙漠地区，气溶胶的光学厚度平均约为0.3至0.5。

在该模拟实验中，AOD=0.1代表低于平均值的情况，而AOD=1.0和3.0代表高于平均值的情况。在反演算法中，将粗模态和细模态的AOD均设为0，探究在不考虑沙尘气溶胶散射情况下 XCO<sub>2</sub> 反演误差。其中 ALH 设置为固定值 0.7 km。这里所提 AOD 皆为波长 0.76 μm (O<sub>2</sub> A 波段) 情况下的值。

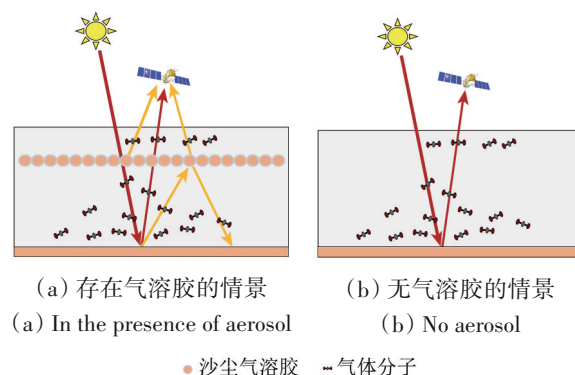


图10 高亮地表中沙尘气溶胶散射效应对 XCO<sub>2</sub> 反演的影响机理示意图

Fig. 10 Schematic diagram of mechanism of dust aerosol scattering effect on XCO<sub>2</sub> inversion over bright surface

若反演算法中不考虑气溶胶散射效应，XCO<sub>2</sub> 反演结果均会偏高 (图11 (a))。这是因为实际大气中发生的气溶胶散射使得进入传感器的光束的光程变长，发生吸收作用的气体分子数量更多；若不考虑气溶胶散射，在更短的光程下要拟合到实际辐亮度光谱，意味着要“加入”比实际大气情况中更多的气体分子，因此使得反演的 XCO<sub>2</sub> 比实际情况偏高。当实际的 AOD 较小时 (0.1)，XCO<sub>2</sub> 反演误差也较小，但当实际的 AOD 增大时，XCO<sub>2</sub> 反演误差增大，特别是当实际的 AOD 为 1.0 和 3.0 时，XCO<sub>2</sub> 反演误差分别为 4.2 ppm 和 5.3 ppm，均超过 1%，这样的误差是不可忽视的。因此在 XCO<sub>2</sub> 反演中我们必须充分考虑气溶胶散射效应的影响。

#### 5.1.2 反演算法中 AOD 低估导致的 XCO<sub>2</sub> 反演偏差

在实际反演中我们可能无法精准获取大气状况，从而不能准确刻画气溶胶特性，由此会引入 XCO<sub>2</sub> 反演误差。Chen 等 (2022) 将 OCO-2 Level 2 标准产品中的 AOD 数据与云气溶胶激光雷达和红外探路仪卫星观测 CALIPSO (Cloud-Aerosol Lidar and Infrared Pathfinder Satellite Observation) 中的

AOD 产品进行对比, 发现在沙特阿拉伯的利雅得沙漠地区, OCO-2 的 AOD 反演结果整体相较于 CALIPSO 的结果 (精度较高, 常作为参考真值) 有明显的低估。沙漠地区 AOD 的低估较为常见, 本小节探究全物理反演算法中低估 AOD 对反演结果的影响。沙漠地区的沙尘气溶胶的 AOD 一般可达 0.5, 因此我们首先以粗模态 AOD 为 0.5 生成模拟观测光谱, 所增加噪声与 5.1.1 节一致。其次,

在不同粗模态 AOD 低估量的情况分别进行联合反演, 每次反演算法的迭代过程中均保持 AOD 不变 (也即设置模拟辐亮度光谱对 AOD 的雅可比矢量为 0)。ALH 设置为 0.7 km。为了探究以沙尘气溶胶为代表的粗模态气溶胶的影响, 我们在生成模拟观测光谱和反演过程中均将细模态 AOD 设置为 0, 也即假设大气中仅存在粗模态气溶胶, 从而排除细模态气溶胶对结果的干扰。

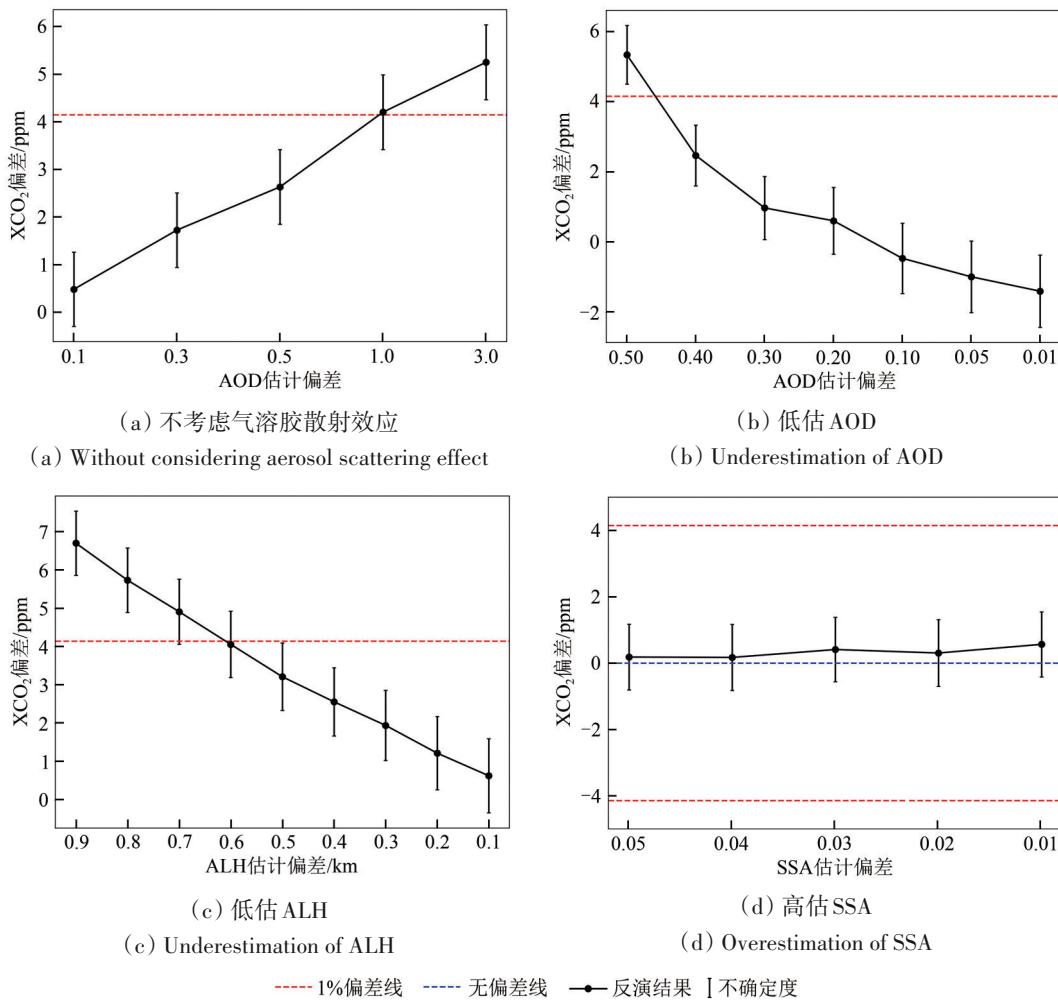


图 11 4 种情景(不考虑气溶胶散射效应、低估 AOD、低估 ALH 和高估 SSA)对 XCO<sub>2</sub> 反演结果的影响

Fig. 11 Effect of not considering aerosol scattering effect, underestimation of AOD, underestimation of ALH and overestimation of SSA on XCO<sub>2</sub> retrieval results

从图 11 (b) 可得, 当 AOD 低估 0.5 时 (也即反演中设置 AOD=0), XCO<sub>2</sub> 反演结果将高估超过 5 ppm, 当 AOD 低估 0.2 至 0.4 时 (也即反演中设置 AOD 为 0.3 至 0.1), XCO<sub>2</sub> 反演结果也将偏高, 但偏差小于 1% (约为 0.15% 至 0.59%)。这是因为反演中低估 AOD, 将导致气溶胶多次散射效应被低估, 则该情况与不考虑气溶胶散射反演时类似, 导致

反演的 XCO<sub>2</sub> 偏高。但低估 AOD 时 XCO<sub>2</sub> 反演的高估偏差更小, 不考虑气溶胶散射反演可看作低估 AOD 反演的一个极端特例。当 AOD 仅低估 0.01 至 0.1 时 (也即反演中设置 AOD 为 0.49 至 0.4) 时, XCO<sub>2</sub> 反演结果低估约 0.3% 至 0.1%。考虑此时 AOD 低估较小, 所以反演中基本能顾及气溶胶的多次散射效应, 此时 XCO<sub>2</sub> 出现与前述分析不一样

的小程度低估现象可能是反演算法本身的误差所致。

### 5.1.3 反演算法中 ALH 低估导致的 XCO<sub>2</sub> 反演偏差

实际反演中我们可能无法准确掌握气溶胶特性，导致 ALH 的估计产生偏差，进而造成 XCO<sub>2</sub> 反演误差。本小节探究反演算法中 ALH 低估对 XCO<sub>2</sub> 反演结果的影响。我们首先在 ALH 为 1.0 km 的情况下生成模拟观测光谱，所增加噪声与 5.1.1 节一致。再分别在 ALH 为 0.1 km 至 0.9 km 的情况下进行 O<sub>2</sub> A 波段和 WCO<sub>2</sub> 波段的联合反演。每次反演算法的迭代过程中均保持 ALH 不变。粗模态 AOD 设置为 0.5，细模态 AOD 设置为 0。

若反演中低估 ALH，均将导致 XCO<sub>2</sub> 反演结果偏高（图 11 (c)）。这可以通过 2.2.2 及 3.2.2 中的结论解释：当 ALH 越小时，光谱的相对吸收深度越大（图 2），说明发生吸收作用的气体分子也越多，此时反演算法得到的气体分子数量越大（图 8）。因此，当反演中设置的 ALH 比真实值偏低时，将导致反演算法高估 XCO<sub>2</sub>。ALH 低估程度越大，XCO<sub>2</sub> 反演结果偏差越大。当 ALH 低估超过 0.6 km（也即反演中设置的 ALH 小于 0.4 km）时，XCO<sub>2</sub> 将高估超过 1%；当 ALH 低估达到 0.9 km（也即反演中 ALH 设置为 0.1 km）时，XCO<sub>2</sub> 将高估约 1.61%（约 6.70 ppm）。

### 5.1.4 气溶胶输入 SSA 高估导致的 XCO<sub>2</sub> 反演偏差

除了 AOD 和 ALH，我们还可能在实际反演中无法输入准确的沙尘气溶胶 SSA，从而引入 XCO<sub>2</sub> 反演偏差。本小节首先在粗模态 SSA 为 0.85 的情况下生成模拟观测光谱，所增加噪声与 5.1.1 一致。再分别在粗模态 SSA 为 0.95、0.96、0.97、0.98 和 0.99 的情况下进行 O<sub>2</sub> A 波段和 WCO<sub>2</sub> 波段的联合反演。粗模态 AOD 设置为 0.5，ALH 设置为 0.7 km。生成模拟观测光谱和反演过程中细模态 AOD 均设置为 0。

模拟实验表明 SSA 高估将造成 XCO<sub>2</sub> 反演结果出现小程度的高估（图 11 (d)），这是由于 SSA 偏高意味着气溶胶散射作用增强，吸收截面相对更小，此时反演算法需要“加入”比真实数量更多的气体分子才能与观测光谱拟合，因此造成 XCO<sub>2</sub>

高估。但 SSA 高估造成的 XCO<sub>2</sub> 高估量相对于上述其他 3 种情况较小，XCO<sub>2</sub> 高估整体不超过 0.15%（约 0.6 ppm）。这主要是因为在高估 SSA 的情况下，反演算法通过不断调低地表反照率来拟合前向模型光谱和观测光谱，尽管迭代结束时光谱能获得较好的拟合，XCO<sub>2</sub> 反演结果的高估程度也较小，但此时地表反照率的反演结果将出现明显的低估。

### 5.2 沙漠中的“临界反照率”效应对大气 XCO<sub>2</sub> 反演的影响

从第 2 节的论述可知，在存在气溶胶散射效应的情景下，地表反照率对前向模型光谱有重要影响。Fraser 和 Kaufman（1985）提出当地表反照率为某一值时，改变 AOD 将不会对光谱的基台值产生影响，并将该地表反照率定义为“临界反照率”（Critical Albedo）。当地表反照率等于“临界反照率”时，前向模型光谱对 AOD 的一阶偏导数（也即相应的雅可比矩阵）为 0（Seidel 和 Popp，2012）。在“临界反照率”处，光谱对 AOD 的变化将非常不敏感。改变 AOD 对光谱的影响几乎与改变吸收性气体（如 CO<sub>2</sub>）柱浓度的影响相同，从而导致我们无法从光谱中得到关于气溶胶变化的有效信息，对于气溶胶的光学厚度及其光学微物理参数（如 SSA）的量化容易出现较大偏差，因此导致在联合反演 AOD 和 XCO<sub>2</sub> 时出现较大误差。沙漠地区的地表反照率较高，接近“临界反照率”，可能是导致沙漠地区出现 XCO<sub>2</sub> 高估的重要原因之一。

为了估算临界反照率出现的可能性，我们在不同 SSA 的条件下运行前向辐射传输模型，获得 WCO<sub>2</sub> 波段基台值处（约 1.608 μm）辐亮度对 AOD 的一阶偏导数随地表反照率变化的情况如图 12。（其中 AOD=0.5，ALH=1.0 km，观测天顶角为 0°）

图 12 中黑色虚线与各条曲线的交点对应的地表反照率即为该 SSA 条件下的“临界反照率”。“临界反照率”与 SSA 密切相关：当 SSA 为 0.92 时，“临界反照率”约为 0.18；当 SSA 为 0.98 时，“临界反照率”约为 0.35；当 SSA 为 0.99 时，“临界反照率”约为 0.46。SSA 越大，对应的“临界反照率”也更大。由于沙尘气溶胶 SSA 通常大于 0.95，且沙漠地区地表反照率约为 0.3 至 0.5，因此沙漠地区的 XCO<sub>2</sub> 反演有很大可能受到“临界反照率”效应的影响。Chen 等（2022）提出当地表反照率落在“临界反照率”±0.1 区间内时，AOD 和 XCO<sub>2</sub> 的反

演误差将迅速增大，主要是由于此时观测自由度和有效信息量出现了显著下降。从另一方面看，“临界反照率”效应虽然对XCO<sub>2</sub>反演有不利影响，但由于其对SSA有较高的敏感性，可用来反演SSA等气溶胶特性参数（Seidel和Popp，2012；Sayer等，2013；Banks等，2013）。

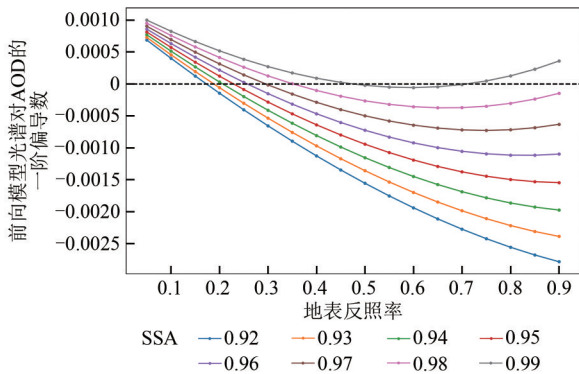


图 12 不同SSA条件下,光谱基台值对AOD的一阶偏导数 (Jacobian)随地表反照率的变化

Fig. 12 The first partial derivative of spectrum continuum (Jacobian) with respect to AOD varies with surface albedo with different SSA conditions

为了减小“临界反照率”效应对XCO<sub>2</sub>反演的影响，我们需要引入额外的信息来提供气溶胶限制条件。Uppala等（2005）提出可以用欧洲中期天气预报中心ECMWF（European Centre for Medium-Range Weather Forecasts）的再分析资料固定地表压强，再用O<sub>2</sub>的吸收波段反演AOD。由于ECMWF地表压强数据精度非常高，且大气中O<sub>2</sub>的体积混合比几乎不发生变化，固定了地表压强也就确定了大气中的O<sub>2</sub>柱浓度，此时就能从O<sub>2</sub>吸收线中反演AOD。Zhang等（2015）就应用类似的方法从大气遥感加利福尼亚州实验室CLARS（California Laboratory for Atmospheric Remote Sensing）的观测数据中反演XCO<sub>2</sub>。

## 6 结论

气溶胶散射效应是目前卫星XCO<sub>2</sub>反演的最主要误差源，这是由于气溶胶散射将显著改变光程，然而由于其高度复杂性导致在辐射传输模式中往往难以有效刻画。因此气溶胶散射对观测光谱中体现的CO<sub>2</sub>吸收特征产生干扰，进而影响反演结果。气溶胶散射效应的量化是温室气体遥感的重点和难点研究方向。特别是在高地表反照率地区，

气溶胶散射效应对卫星XCO<sub>2</sub>反演的影响尤为明显。围绕目前CO<sub>2</sub>卫星遥感反演的这一难点，我们从精准的辐射传输模型O-PCA出发，应用基于最优化估计的全物理反演算法，从前向辐射传输模型和反演模型两个方面分别对卫星XCO<sub>2</sub>反演中沙尘气溶胶散射效应引起的误差的可能发生机制进行了探讨。从前向模型的结果看出，在高亮地表的情景下发生气溶胶散射时，卫星传感器接收到的能量中来自地表反射的部分占主导，此时增加AOD将会导致光谱基台值减小，这与地表反照率相对较暗的情景有明显的差异；不同高度的气溶胶对前向模型光谱的影响不同，当ALH越大时，经过散射后被传感器接收的光程相应更短，光谱的相对吸收深度也更小。相对吸收深度对最终反演结果有重要影响。反演模型方面，我们说明了O<sub>2</sub>A波段在提供气溶胶信息方面的优势，并进行了WCO<sub>2</sub>波段和O<sub>2</sub>A波段联合反演气溶胶参数和XCO<sub>2</sub>的模拟实验。我们从4个角度出发进行了模拟，探讨目前沙漠地区大气XCO<sub>2</sub>卫星反演结果整体偏高的可能原因。首先是在不考虑气溶胶散射的情况下进行XCO<sub>2</sub>反演，最终发现反演结果整体偏高，当实际AOD大于1.0时，反演结果的偏差将高于1%；其次是在低估AOD的情况下进行XCO<sub>2</sub>反演，XCO<sub>2</sub>总体上出现高估，当AOD低估0.2至0.5时，XCO<sub>2</sub>反演结果会高估0.15%至1.28%（约0.61 ppm至5.32 ppm）；接着是在低估ALH的情况下进行XCO<sub>2</sub>反演，XCO<sub>2</sub>总体上出现高估，当ALH低估超过0.6 km时，XCO<sub>2</sub>将高估超过1%；最后是在高估SSA的情况下进行XCO<sub>2</sub>反演，XCO<sub>2</sub>会出现高估，但高估不超过0.15%（约0.6 ppm）。综合上述四个模拟实验，沙漠地区大气XCO<sub>2</sub>卫星反演出现高估的可能原因是反演算法中低估了沙尘气溶胶AOD、低估了ALH或高估了SSA。从模拟实验中我们也能看出，如果我们不考虑沙尘气溶胶或对其重要性质的理解和刻画不够准确，可能导致XCO<sub>2</sub>反演结果误差超过产品的精度要求（1%）。从另一方面说，如果我们能准确量化沙尘气溶胶的特性或估计误差非常小，反演结果的误差能控制在0.15%以内，达到产品的精度要求。本文还对沙漠中的“临界反照率”效应对大气XCO<sub>2</sub>反演的影响进行了说明，“临界反照率”的大小与SSA等因素有关，SSA越大，“临界反照率”也越大。

本文虽以沙漠地区为研究案例，但由此获得

的沙尘气溶胶散射效应对大气 XCO<sub>2</sub> 反演结果影响的结论也适用于包括中国西北地区在内的沙尘气溶胶占主导的区域, 对提高全球大气 XCO<sub>2</sub> 反演精度有一定的参考价值。由于城市地区人口密集, 能源相关的 CO<sub>2</sub> 排放量占到全球的三分之二以上 (Schneising 等, 2013), 因此城市地区也是全球 XCO<sub>2</sub> 反演关注的重点区域之一, 核准城市的人为 CO<sub>2</sub> 排放对于我们制定减排政策具有重要意义。与此同时, 目前全球的特大城市常受严重污染天气影响 (如由沙尘暴等自然现象引发), 城市大气中沙尘气溶胶含量可能较高, 这给大气 XCO<sub>2</sub> 反演带来挑战。本文第 3 节指出, 城市地区的地表反照率相较沙漠地区较低, 因此沙尘气溶胶散射效应在城市区域对前向模型光谱的影响与在沙漠区域不同。同时, 城市大气的气溶胶来源与组成也更为复杂, 既有工业排放等人为源, 也存在自然源, 且季节性变化特征显著 (Rienecker 等, 2011), 占主导的不一定是沙尘气溶胶, 还可能是工业排放的硫酸盐气溶胶等。气溶胶成分比例发生变化时需相应地对反演算法中气溶胶光学特性等设置进行调整, 如当粗模态气溶胶比例增加时, 气溶胶散射相函数的角度依赖性将增强 (Zeng 等, 2020b)。气溶胶光学特性也会随时间发生变化, 如中国东部地区的长期观测数据显示自 2013 年减少人为排放污染物以来, 气溶胶性质变化趋势较之前时期发生转变 (Tao 等, 2020)。关于城市气溶胶对大气 XCO<sub>2</sub> 反演的影响仍待进一步研究。

为了校正由于沙尘气溶胶散射带来的反演偏差, 我们必须从多方面保证沙尘气溶胶光学厚度和微物理特性的准确性。本文的研究工作展示了气溶胶信息在大气 XCO<sub>2</sub> 反演中发挥的极为重要的作用, 但本文仅通过模拟实验阐释了气溶胶散射效应对卫星反演的影响机理, 在接下来的工作中我们将基于真实的卫星观测光谱和地面观测站点数据进行进一步实验。在实际的联合反演中, 仅依靠观测光谱信息将无法对气溶胶进行准确刻画, 因此我们必须引入外部的信息对沙尘气溶胶进行进一步量化, 例如使用来自中分辨率成像光谱仪 MODIS (MODerate resolution Imaging Spectroradiometer)、多角度成像光谱仪 MISR (Multi-Angle Imaging SpectroRadiometer) 和气溶胶自动观测网 AERONET (AErosol RObotic NETwork) 等气溶胶探测仪器的观测数据, 来减小因气溶胶散射效应造成的 XCO<sub>2</sub>

反演误差。实际大气中发生的气溶胶散射效应对卫星 XCO<sub>2</sub> 反演的影响机理非常复杂, 多种因素相互耦合。本研究重点研究了地表反照率以及气溶胶的 AOD、ALH 和 SSA 各自对大气 XCO<sub>2</sub> 卫星反演的影响, 但未对各参数之间的相互影响以及对反演结果的共同影响进行进一步解析, 此外气溶胶的其他特性 (如散射相函数) 及卫星观测几何等因素也可能对反演结果产生影响。在接下来的工作中我们将考虑多参数的联合敏感性分析, 进行更加全面而深入的探究。

**志 谢** 本文使用的 OCO-2 数据来自美国航天航空局 (<https://www.earthdata.nasa.gov/>)。Gobabeb 沙漠地区的 COCCON 观测数据由 M. K. Sha 团队提供。大气廓线数据来源于 GFIT 模式。大气吸收截面数据从 HITRAN 获取 (<https://hitran.org/>)。气溶胶数据来源于 MERRAero (<https://gmao.gsfc.nasa.gov/reanalysis/merra/MERRAero/>)。太阳模型数据来自 Kuruz 和 Toon ([https://mark4sun.jpl.nasa.gov/toon/solar/solar\\_spectrum.html](https://mark4sun.jpl.nasa.gov/toon/solar/solar_spectrum.html))。在此特向以上提及的个人或团队及相关机构表示感谢。本研究得到北京大学高性能计算校级公共平台支持。

## 参考文献 (References)

- Banks J R, Brindley H E, Flamant C, Garay M J, Hsu N C, Kalashnikova O V, Klüser L and Sayer A M. 2013. Intercomparison of satellite dust retrieval products over the west African Sahara during the Fennec campaign in June 2011. *Remote Sensing of Environment*, 136: 99-116 [DOI: 10.1016/j.rse.2013.05.003]
- Bösch H, Toon G C, Sen B, Washenfelder R A, Wennberg P O, Buchwitz M, de Beek R, Burrows J P, Crisp D, Christi M, Connor B J, Natraj V and Yung Y L. 2006. Space-based near-infrared CO<sub>2</sub> measurements: testing the Orbiting Carbon Observatory retrieval algorithm and validation concept using SCIAMACHY observations over Park Falls, Wisconsin. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 111(D23): D23302 [DOI: 10.1029/2006JD007080]
- Buchwitz M, de Beek R, Noël S, Burrows J P, Bovensmann H, Schneising O, Khlystova I, Bruns M, Bremer H, Bergamaschi P, Körner S and Heimann M. 2006. Atmospheric carbon gases retrieved from SCIAMACHY by WFM-DOAS: version 0.5 CO and CH<sub>4</sub> and impact of calibration improvements on CO<sub>2</sub> retrieval. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 6(9): 2727-2751 [DOI: 10.5194/acp-6-2727-2006]
- Buchwitz M, Rozanov V V and Burrows J P. 2000. A near-infrared optimized DOAS method for the fast global retrieval of atmospheric

- CH<sub>4</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, and N<sub>2</sub>O total column amounts from SCIAMACHY Envisat-1 nadir radiances. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 105(D12): 15231-15245 [DOI: 10.1029/2000JD900191]
- Butz A, Hasekamp O P, Frankenberg C and Aben I. 2009. Retrievals of atmospheric CO<sub>2</sub> from simulated space-borne measurements of backscattered near-infrared sunlight: accounting for aerosol effects. *Applied Optics*, 48(18): 3322 [DOI: 10.1364/AO.48.003322].
- Chen S H, Natraj V, Zeng Z C and Yung Y L. 2022. Machine learning-based aerosol characterization using OCO-2 O<sub>2</sub> A-band observations. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 279: 108049 [DOI: 10.1016/j.jqsrt.2021.108049]
- Chin M, Ginoux P, Kinne S, Torres O, Holben B N, Duncan B N, Martin R V, Logan J A, Higurashi A and Nakajima T. 2002. Tropospheric aerosol optical thickness from the GOCART model and comparisons with satellite and sun photometer measurements. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 59(3): 461-483 [DOI: 10.1175/1520-0469(2002)059<0461:TAOTFT>2.0.CO;2]
- Crevoisier C, Chédin A, Matsueda H, Machida T, Armante R and Scott N A. 2009. First year of upper tropospheric integrated content of CO<sub>2</sub> from IASI hyperspectral infrared observations hyperspectral infrared observations. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 9(14): 4797-4810 [DOI: 10.5194/acp-9-4797-2009]
- Crisp D, Miller C E and DeCola P L. 2008. NASA Orbiting Carbon Observatory: measuring the column averaged carbon dioxide mole fraction from space. *Journal of Applied Remote Sensing*, 2(1): 023508 [DOI: 10.1117/1.2898457]
- Fraser R and Kaufman Y. 1985. The relative importance of aerosol scattering and absorption in remote sensing. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, GE-23(5): 625-633 [DOI: 10.1109/TGRS.1985.289380]
- Frey M M, Hase F, Blumenstock T, Dubravica D, Groß J, Göttsche F, Handjaba M, Amadhila P, Mushi R, Morino I, Shiomi K, Sha M K, De Mazière M and Pollard D F. 2021. Long-term column-averaged greenhouse gas observations using a COCCON spectrometer at the high-surface-albedo site in Gobabeb, Namibia. *Atmospheric Measurement Techniques*, 14(9): 5887-5911 [DOI: 10.5194/amt-14-5887-2021]
- Hong X H, Zhang P, Bi Y M, Liu C, Sun Y W, Wang W, Chen Z Q, Yin H, Zhang C X, Tian Y and Liu J G. 2022. Retrieval of global carbon dioxide from tansat satellite and comprehensive validation with TCCON measurements and satellite observations. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 60: 4101716 [DOI: 10.1109/TGRS.2021.3066623]
- IPCC. 2023. *Climate Change 2021-The Physical Science Basis: Working Group I Contribution to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. Cambridge: Cambridge University Press [DOI: 10.1017/9781009157896]
- Kopparla P, Natraj V, Limpasuvan D, Spurr R, Crisp D, Shia R L, Somkuti P and Yung Y L. 2017. PCA-based radiative transfer: improvements to aerosol scheme, vertical layering and spectral binning. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 198: 104-111 [DOI: 10.1016/j.jqsrt.2017.05.005]
- Kopparla P, Natraj V, Spurr R, Shia R L, Crisp D and Yung Y L. 2016. A fast and accurate PCA based radiative transfer model: extension to the broadband shortwave region. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 173: 65-71 [DOI: 10.1016/j.jqsrt.2016.01.014]
- Laughner J L, Roche S, Kiel M, Toon G C, Wunch D, Baier B C, Biraud S, Chen H L, Kivi R, Laemmel T, McKain K, Quéhé P Y, Rousogonous C, Stephens B B, Walker K and Wennberg P O. 2023. A new algorithm to generate a priori trace gas profiles for the GGG2020 retrieval algorithm. *Atmospheric Measurement Techniques*, 16(5): 1121-1146 [DOI: 10.5194/amt-16-1121-2023]
- Levenberg K. 1944. A method for the solution of certain non-linear problems in least squares. *Quarterly of Applied Mathematics*, 2(2): 164-168 [DOI: 10.1090/qam/10666].
- Marquardt D W. 1963. An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters. *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, 11(2): 431-441 [DOI: 10.1137/0111030]
- Miller C E, Crisp D, DeCola P L, Olsen S C, Randerson J T, Michalak A M, Alkhaled A, Rayner P, Jacob D J, Suntharalingam P, Jones D B A, Denning A S, Nicholls M E, Doney S C, Pawson S, Boesch H, Connor B J, Fung I Y, O'Brien D, Salawitch R J, Sander S P, Sen B, Tans P, Toon G C, Wennberg P O, Wofsy S C, Yung Y L and Law R M. 2007. Precision requirements for space-based XCO<sub>2</sub> data. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 112(D10): D10314 [DOI: 10.1029/2006JD007659]
- Natraj V, Jiang X, Shia R L, Huang X L, Margolis J S and Yung Y L. 2005. Application of principal component analysis to high spectral resolution radiative transfer: a case study of the band. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 95(4): 539-556 [DOI: 10.1016/j.jqsrt.2004.12.024]
- Nelson R R and O'Dell C W. 2019. The impact of improved aerosol priors on near-infrared measurements of carbon dioxide. *Atmospheric Measurement Techniques*, 12(3): 1495-1512 [DOI: 10.5194/amt-12-1495-2019]
- Nelson R R, O'Dell C W, Taylor T E, Mandrake L and Smyth M. 2016. The potential of clear-sky carbon dioxide satellite retrievals. *Atmospheric Measurement Techniques*, 9(4): 1671-1684 [DOI: 10.5194/amt-9-1671-2016]
- O'Dell C W, Connor B, Bösch H, O'Brien D, Frankenberg C, Castano R, Christi M, Eldering D, Fisher B, Gunson M, McDuffie J, Miller C E, Natraj V, Oyafuso F, Polonsky I, Smyth M, Taylor T, Toon G C, Wennberg P O and Wunch D. 2012. The ACOS CO<sub>2</sub> retrieval algorithm-Part 1: description and validation against synthetic observations. *Atmospheric Measurement Techniques*, 5(1): 99-121 [DOI: 10.5194/amt-5-99-2012]
- Rienecker M M, Suarez M J, Gelaro R, Todling R, Bacmeister J, Liu E, Bosilovich M G, Schubert S D, Takacs L, Kim G K, Bloom S, Chen J Y, Collins D, Conaty A, Da Silva A, Gu W, Joiner J, Koster R D, Lucchesi R, Molod A, Owens T, Pawson S, Pegion P, Redder C R, Reichle R, Robertson F R, Ruddick A G, Sienkiewicz M and Woollen J. 2011. MERRA: NASA's modern-era retrospective analysis for research and applications. *Journal of Climate*, 24(14): 3624-3648 [DOI: 10.1175/JCLI-D-11-00015.1]



- Rodgers C D. 2000. Inverse methods for atmospheric sounding: theory and practice. Vol. 2: world scientific. Singapore: World Scientific Pub. Co.
- Rothman L S, Gordon I E, Barbe A, Benner D C, Bernath P F, Birk M, Boudon V, Brown L R, Campargue A, Champion J P, Chance K, Coudert L H, Dana V, Devi V M, Fally S, Flaud J M, Gamache R R, Goldman A, Jacquemart D, Kleiner I, Lacombe N, Lafferty W J, Mandin J Y, Massie S T, Mikhailenko S N, Miller C E, Moazzen-Ahmadi N, Naumenko O V, Nikitin A V, Orphal J, Perevalov V I, Perrin A, Predoi-Cross A, Rinsland C P, Rotger M, Šimečková M, Smith M A H, Sung K, Tashkun S A, Tennyson J, Toth R A, Vandaele A C and Vander Auwera J. 2009. The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 110(9/10): 533-572 [DOI: 10.1016/j.jqsrt.2009.02.013]
- Sayer A M, Hsu N C, Bettenhausen C and Jeong M J. 2013. Validation and uncertainty estimates for MODIS Collection 6 “Deep Blue” aerosol data. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 118(14): 7864-7872 [DOI: 10.1002/jgrd.50600]
- Schepers D, Guerlet S, Butz A, Landgraf J, Frankenberg C, Hasekamp O, Blavier J F, Deutscher N M, Griffith D W T, Hase F, Kyro E, Morino I, Sherlock V, Sussmann R and Aben I. 2012. Methane retrievals from Greenhouse Gases Observing Satellite (GOSAT) shortwave infrared measurements: performance comparison of proxy and physics retrieval algorithms. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 117(D10): D10307 [DOI: 10.1029/2012JD017549]
- Schneising O, Buchwitz M, Burrows J P, Bovensmann H, Reuter M, Notholt J, Macatangay R and Warneke T. 2008. Three years of greenhouse gas column-averaged dry air mole fractions retrieved from satellite-Part 1: carbon dioxide. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 8(14): 3827-3853 [DOI: 10.5194/acp-8-3827-2008]
- Schneising O, Heymann J, Buchwitz M, Reuter M, Bovensmann H and Burrows J P. 2013. Anthropogenic carbon dioxide source areas observed from space: assessment of regional enhancements and trends. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 13(5): 2445-2454 [DOI: 10.5194/acp-13-2445-2013]
- Seidel F C and Popp C. 2012. Critical surface albedo and its implications to aerosol remote sensing. *Atmospheric Measurement Techniques*, 5(7): 1653-1665 [DOI: 10.5194/amt-5-1653-2012]
- Somkuti P, Boesch H, Natraj V and Kopparla P. 2017. Application of a PCA-based fast radiative transfer model to XCO<sub>2</sub> Retrievals in the shortwave infrared. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 122(19): 10477-10496 [DOI: 10.1002/2017JD027013]
- Spurr R and Natraj V. 2011. A linearized two-stream radiative transfer code for fast approximation of multiple-scatter fields. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 112(16): 2630-2637 [DOI: 10.1016/j.jqsrt.2011.06.014]
- Spurr R J D. 2002. Simultaneous derivation of intensities and weighting functions in a general pseudo-spherical discrete ordinate radiative transfer treatment. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 75(2): 129-175 [DOI: 10.1016/S0022-4073(01)00245-X]
- Tanaka T, Yates E, Iraci L T, Johnson M S, Gore W, Tadić J M, Loewenstein M, Kuze A, Frankenberg C, Butz A and Yoshida Y. 2016. Two-year comparison of airborne measurements of CO<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> with GOSAT at Railroad Valley, Nevada. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 54(8): 4367-4375 [DOI: 10.1109/TGRS.2016.2539973]
- Tao M H, Wang L L, Chen L F, Wang Z F and Tao J H. 2020. Reversal of aerosol properties in eastern China with rapid decline of anthropogenic emissions. *Remote Sensing*, 12(3): 523 [DOI: 10.3390/rs12030523]
- Uppala S M, Kållberg P W, Simmons A J, Andrae U, Da Costa Bechtold V, Fiorino M, Gibson J K, Haseler J, Hernandez A, Kelly G A, Li X, Onogi K, Saarinen S, Sokka N, Allan R P, Andersson E, Arpe K, Balmaseda M A, Beljaars A C M, van de Berg L, Bidlot J, Bormann N, Caires S, Chevallier F, Dethof A, Dragosavac M, Fisher M, Fuentes M, Hagemann S, Hólm E, Hoskins B J, Isaksen I, Janssen P A E M, Jenne R, McNally A P, Mahfouf J F, Morcrette J J, Rayner N A, Saunders R W, Simon P, Sterl A, Trenberth K E, Untch A, Vasiljevic D, Viterbo P and Woollen J. 2005. The ERA-40 re-analysis. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 131(612): 2961-3012 [DOI: 10.1256/qj.04.176]
- Wang S P, van der A R J, Stammes P, Wang W H, Zhang P, Lu N M, Zhang X Y, Bi Y M, Wang P and Fang L. 2020. Carbon dioxide retrieval from TanSat observations and validation with TCCON measurements. *Remote Sensing*, 12(14): 2204 [DOI: 10.3390/rs12142204]
- Wunch D, Toon G C, Blavier J F L, Washenfelder R A, Notholt J, Connor B J, Griffith D W T, Sherlock V and Wennberg P O. 2011. The total carbon column observing network. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 369(1943): 2087-2112 [DOI: 10.1098/rsta.2010.0240]
- Xi X, Natraj V, Shia R L, Luo M, Zhang Q, Newman S, Sander S P and Yung Y L. 2015. Simulated retrievals for the remote sensing of CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, CO, and H<sub>2</sub>O from geostationary orbit. *Atmospheric Measurement Techniques*, 8(11): 4817-4830 [DOI: 10.5194/amt-8-4817-2015]
- Yang D, Boesch H, Liu Y, Somkuti P, Cai Z, Chen X, Di Noia A, Lin C, Lu N, Lyu D, Parker R J, Tian L, Wang M, Webb A, Yao L, Yin Z, Zheng Y, Deutscher N M, Griffith D W T, Hase F, Kivi R, Morino I, Notholt J, Ohyama H, Pollard D F, Shiomi K, Sussmann R, Té Y, Velasco V A, Warneke T and Wunch D. 2020. Toward high precision XCO<sub>2</sub> retrievals from tansat observations: retrieval improvement and validation against TCCON measurements. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 125(22): e2020JD032794 [DOI: 10.1029/2020JD032794]
- Yokota T, Yoshida Y, Eguchi N, Ota Y, Tanaka T, Watanabe H and Maksyutov S. 2009. Global concentrations of CO<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> retrieved from GOSAT: first preliminary results. *Sola*, 5: 160-163 [DOI: 10.2151/sola.2009-041]
- Zeng Z C, Chen S H, Natraj V, Le T H, Xu F, Merrelli A, Crisp D, Sander S P and Yung Y L. 2020a. Constraining the vertical distribution of coastal dust aerosol using OCO-2 O<sub>2</sub> A-band measurements. *Remote Sensing of Environment*, 236: 111494 [DOI: 10.

- 1016/j.rse.2019.111494]
- Zeng Z C, Natraj V, Xu F, Chen S H, Gong F Y, Pongetti T J, Sung K, Toon G, Sander S P and Yung Y L. 2021. GFIT3: a full physics retrieval algorithm for remote sensing of greenhouse gases in the presence of aerosols. *Atmospheric Measurement Techniques*, 14(10): 6483-6507 [DOI: 10.5194/amt-14-6483-2021]
- Zeng Z C, Natraj V, Xu F, Pongetti T J, Shia R L, Kort E A, Toon G C, Sander S P and Yung Y L. 2018. Constraining aerosol vertical profile in the boundary layer using hyperspectral measurements of oxygen absorption. *Geophysical Research Letters*, 45(19): 10772-10780 [DOI: 10.1029/2018GL079286]
- Zeng Z C, Xu F, Natraj V, Pongetti T J, Shia R L, Zhang Q, Sander S P and Yung Y L. 2020b. Remote sensing of angular scattering effect of aerosols in a North American megacity. *Remote Sensing of Environment*, 242: 111760 [DOI: 10.1016/j.rse.2020.111760]
- Zeng Z C, Zhang Q, Natraj V, Margolis J S, Shia R L, Newman S, Fu D J, Pongetti T J, Wong K W, Sander S P, Wennberg P O and Yung Y L. 2017. Aerosol scattering effects on water vapor retrievals over the Los Angeles Basin. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 17(4): 2495-2508 [DOI: 10.5194/acp-17-2495-2017]
- Zhang Q, Natraj V, Li K F, Shia R L, Fu D J, Pongetti T J, Sander S P, Roehl C M and Yung Y L. 2015. Accounting for aerosol scattering in the CLARS retrieval of column averaged CO<sub>2</sub> mixing ratios. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 120(14): 7205-7218 [DOI: 10.1002/2015JD023499]
- Zhang Q, Shia R L, Sander S P and Yung Y L. 2016. XCO<sub>2</sub> retrieval error over deserts near critical surface albedo. *Earth and Space Science*, 3(2): 36-45 [DOI: 10.1002/2015EA000143]

## Quantifying the scattering effect of dust aerosols on satellite remote sensing retrievals of atmospheric carbon dioxide

HUA Jiancong, ZENG Zhaocheng

*Institute of Remote Sensing and Geographic Information System, School of Earth and Space Sciences, Peking University, Beijing 100871, China*

**Abstract:** Carbon dioxide (CO<sub>2</sub>) is an important greenhouse gas. Satellite remote sensing of atmospheric CO<sub>2</sub> has the advantages of long-term and wide spatial range observation, which is crucial for verifying emission reduction strategies to cope with global warming. Aerosol scattering in the atmosphere is considered a major obstacle for remote sensing retrieval of CO<sub>2</sub> with high accuracy. Previous studies have shown that over areas with high surface albedo, such as desert regions, satellite retrievals of atmospheric column-average dry-air mole fraction of CO<sub>2</sub> (XCO<sub>2</sub>) are systematically overestimated, and the bias can reach 50% of the allowable error to meet the practical application requirements. However, sufficient understandings and quantitative analysis of the systematic bias are still lacking. Focusing on this difficult problem, this thesis analyzes and quantifies the bias of XCO<sub>2</sub> retrievals caused by the scattering effect of dust aerosol over desert regions using an accurate atmospheric radiative transfer model and a retrieval algorithm based on optimal estimation. This study starts from three important representative variables of aerosols, including aerosol optical depth (AOD), aerosol layer height (ALH), and single scattering albedo (SSA), to illustrate the physical mechanism of dust aerosol scattering effects on XCO<sub>2</sub> remote sensing retrievals. From the perspective of spectral radiance generated from forward radiative transfer model, increasing AOD leads to a decrease in the spectrum continuum level (defined as radiance of channels where gas absorption can be neglected) in the case of high surface albedo through its extinction effect. Increasing ALH causes reduced relative absorption depth (defined as the ratio of radiance difference between continuum level and absorption channels to continuum level), which is closely related to the XCO<sub>2</sub> retrievals. From the perspective of retrieval model, this thesis conducts separate retrieval experiments using the O<sub>2</sub>A band and the WCO<sub>2</sub> band, respectively, and joint retrieval experiment using both bands. Results show that the underestimation of AOD or ALH of dust aerosols or the overestimation of SSA in satellite retrieval algorithms can be possible causes of the overestimation of XCO<sub>2</sub> over deserts. Specifically, (1) in the case of not considering aerosol in the retrieval algorithm, XCO<sub>2</sub> retrievals are overestimated by more than 1% when the actual AOD is larger than 1.0; (2) when AOD is underestimated by a value between 0.3 and 0.5, XCO<sub>2</sub> retrievals are overestimated by 0.15%—1.28%; (3) when ALH is underestimated by more than 0.6 km, XCO<sub>2</sub> retrievals are overestimated by more than 1%; (4) when SSA is overestimated, XCO<sub>2</sub> retrievals are also overestimated but by no more than 0.15%. These simulation experiments reveal that accurate aerosol information is crucial to achieving accurate atmospheric XCO<sub>2</sub> retrievals. Additionally, this thesis discusses the impact of potential “critical albedo” on retrievals and demonstrates that its effect is probably the cause of the bias in extracting useful aerosol information from CO<sub>2</sub> monitoring satellites. This thesis proposes that this difficult problem can be addressed when observations from aerosol-observing instruments are included in actual retrievals to further constrain the aerosol information to improve the accuracy of XCO<sub>2</sub> retrievals.

**Key words:** dust aerosol, carbon dioxide satellite, remote sensing retrieval algorithm, scattering effect, radiative transfer model

**Supported by** National Key Research and Development Program of China (No. 2022YFB3903702); National Natural Science Foundation of China (No. 42275142)