0254-6124/2019/39(1)-093–07 *Chin. J. Space Sci.* 空间科学学报

ZHANG Zhuo, WANG Yongmei, WANG Weihe, WANG Houmao. Sensitivity study of viewing path and spectral resolution on absorbing aerosol index (in Chinese). *Chin. J. Space Sci.*, 2019, **39**(1): 93-99. DOI:10.11728/cjss2019.01.093

观测路径和光谱分辨率对吸收性气溶胶指数的影响*

张 卓[1,2,3,4,5] 王咏梅[1,3,4,5,6] 王维和[7] 王后茂[1,3,4,5]

1(中国科学院国家空间科学中心 北京 100190)

2(中国科学院大学 北京 100049)

3(国家空间科学中心空间环境探测研究室 北京 100190)

4(天基空间环境探测北京市重点实验室 北京 100190)

5(中国科学院空间环境态势感知技术重点实验室 北京 100190)

6(中国科学院大学天文与空间科学学院 北京 100049)

7(国家气象局卫星气象中心 北京 100081)

摘 要 吸收性气溶胶指数 (AAI) 在监测污染物方面有较好的应用, 其反演结果受边界层高度、云高、相对湿度以及仪器指标和观测几何路径等因素影响. 利用大气辐射传输模型 MODTRAN, 对辐射传输方程中多次散射计算的不同近似方法和不同观测几何角度下的 AAI 进行模拟, 研究这些因素对 AAI 结果的作用, 并分析仪器光谱分辨率对 AAI 探测结果的影响. 结果表明, 折衷考虑计算效率与精度的情况下, 应选择 8 流近似的离散坐标法进行带有多次散射计算的辐射方程解析. AAI 在不同浓度和不同类型气溶胶下随观测角度变化的趋势相同: 相对方位角 $< 120°$ 时, AAI 误差在太阳天顶角和卫星方位角均为 $40°$~$60°$ 时最大; 相对方位角在 $120°$~$180°$ 时误差均较小; 光谱分辨率对 AAI 反演结果无明显影响.

关键词 吸收性气溶胶指数, 观测角度, 光谱分辨率, MODTRAN 模型

中图分类号 P 353

Sensitivity Study of Viewing Path and Spectral Resolution on Absorbing Aerosol Index

ZHANG Zhuo[1,2,3,4,5] WANG Yongmei[1,3,4,5,6]

WANG Weihe[7] WANG Houmao[1,3,4,5]

1(*National Space Science Center, Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100190)

2(*University of Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100049)

3(*Laboratory of Space Environment Exploration, Beijing* 100190)

4(*Beijing Key Laboratory of Space Environment Exploration, Beijing* 100190)

5(*Key Laboratory of Environmental Space Situation Awareness Technology, Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100190)

* 国家重点研发计划项目资助 (2017YFB0502803, 2017YB0502800)

2017-12-06 收到原稿, 2018-05-08 收到修定稿

E-mail: hmwang@nssc.ac.cn

6(*School of Astronomy and Space Science, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100049)

7(*National Satellite Meteorological Center, China Meteorology Administration, Beijing* 100081)

Abstract Absorbing Aerosol Index (AAI) has a broad application in pollution monitoring. AAI is influenced by many factors in atmosphere, such as altitude of boundary layer, height of cloud, relative humidity, as well as factors from instrumental properties and geometric observation view angles. The atmospheric radiance transfer model MODTRAN was used to simulate the effects of the streams used in the DISORT multiple scattering calculation in radiance transfer equation and view angle of instrument on the biases of AAI derivation. The results indicate that 8 Streams is the best choice in radiative transfer simulation of aerosol scattering, both in accuracy and computational efficiency. AAI varies similarly with the view angle for different aerosol thickness and types: When Relative Azimuth Angle $< 120°$, the bias of AAI is largest when both the Solar Zenith Angle and Satellite Viewing Angle are between 40° and 60°; When Relative Azimuth Angle $<180°$ and $> 120°$, the bias of AAI is relatively small. Besides, spectral resolution has no significant influence on AAI retrieval results.

Key words Absorbing Aerosol Index, View Angles, Spectral Resolution, MODTRAN model

0 引言

吸收性气溶胶指数 (Absorbing Aerosol Index, AAI) 最初是臭氧柱总量计算时使用的误差校正因子 [1], 由于能够利用紫外波段光谱特性获取大气中的吸收性气溶胶信息, 其已成为气溶胶研究和污染物监测的有效工具. AAI 指数具有广泛应用, 可以用来考察紫外辐射在地球表面的消减程度 [2,3], 指示紫外吸收性气溶胶的空间分布 [4], 获取气溶胶性质 [5,6], 此外还可用于研究土壤沙尘气溶胶动态变化及其对生态环境的影响等 [7−10].

地基探测器无法追踪生物燃烧和沙尘颗粒污染物的远距离传输及其时空变化, 而星载探测可以较好地追踪并测量全球污染物分布情况, 因此星载 AAI 反演算法和应用一直不断在发展. 1978−2005 年, 美国 TOMS 探测器在轨工作期间, 为全球范围烟雾和沙尘监测提供了长时间的有效数据 [11]. 继 TOMS 之后, 美国又利用 EOS/Aura 搭载的 OMI 探测器对污染气体和气溶胶等数据进行了长时间观测, 包括 O_3、SO_2、生物质燃烧及沙尘等. 自 1995 年起, 欧空局的 ERS-2/GOME 开始利用 AAI 对气溶胶进行观测 [12], 后续仪器还包括 Envisat/SCIAMACHY、GOME2 等. 中国的紫外臭氧柱总量遥感探测器 TOU/FY-3A (Ultraviolet Total Ozone Unit)[13] 于 2008 年发射升空, 并于 2010 年和 2013 年搭载在 FY-3B 和 FY-3C 卫星上发射后续传感器进行全球臭氧总量探测.

AAI 的影响因素相对较多, 主要包括两方面: 大气环境影响因素, 包括大气边界层高度、云高、地表情况、大气臭氧含量等 [12]; 探测器的观测参数, 对 AAI 结果也有着重要影响, 包括仪器的性能指标, 例如光谱分辨率、观测路径等. 另外, 辐射传输方程解析所用的近似方法也对 AAI 反演结果具有很大影响. 本文利用大气辐射传输模型 MODTRAN, 模拟分析不同的近似方法、仪器观测路径角度和仪器光谱分辨率对 AAI 的影响.

1 仪器、算法及模型介绍

1.1 紫外臭氧总量探测仪

紫外臭氧总量探测仪 (TOU) 搭载在中国第二代气象极轨卫星 FY-3 系列卫星上, 为环境监测和全球气候变化的研究提供重要参数. 表 1 列出了 TOU 的观测通道和带宽信息, 其中第 5 和第 6 两个通道用于反演 AAI 指数.

1.2 吸收性气溶胶指数

AAI 表示包含吸收性气溶胶效应的真实大气顶反射率与不带有吸收性气溶胶的大气顶反射率模拟

表 1 TOU/FY-3 的光谱性质

Table 1 Spectral properties of TOU/FY-3

通道	实测中心波长/nm	实测带宽/nm
1	308.780	1.153
2	312.719	1.138
3	317.730	1.171
4	322.516	1.162
5	331.434	1.152
6	360.271	1.156

值之间的差异. 残差 $\boldsymbol{r}_\lambda$ 定义为 [4]

$$\boldsymbol{r}_\lambda = -100\left[\lg\left(\frac{I_\lambda}{I_{\lambda_0}}\right)^{\text{meas}} \lg\left(\frac{I_\lambda}{I_{\lambda_0}}\right)^{\text{Ray}}\right]. \quad (1)$$

式中 λ, λ_0 为紫外波长, 分别选取 331 nm 和 360 nm, 代替 TOMS 算法中分别取为 340 nm 和 380 nm. I 表示在大气层顶后向散射辐射值. 角标 meas 代表实测获得的大气层顶后向散射辐射, 角标 Ray 代表利用大气辐射传输模型获得的纯分子大气条件下模拟值. 而 AAI 被定义为残差的正值部分, 为无量纲值.

1.3 MODTRAN 模型及离散坐标法

大气辐射传输模型 MODTRAN (MODerate resolution atmospheric TRANsmission) 由美国空军地球物理实验室 (AFGL) 开发和研制, 包括了多种大气模型数据库和光谱吸收模型, 可用来模拟复杂大气条件下多种辐射观测, 在计算大气倾斜路径及辐射沿路径衰减量时, 考虑大气折射和地球曲率 [15]. MODTRAN 同时考虑了 Lorentz 压力增宽和 Doppler 频移 (与温度有关) 增宽相结合的 Voigt 线形, 与其早期版本 LOWTRAN 相比, 适用于更高的高度 [14]. 另外, MODTRAN 采用 Curtis-Godson 近似模拟大气吸收, 通过等效均匀路径代替多层路径的计算 [15].

在 MODTRAN 模型中嵌套了基于离散坐标法的辐射传输计算方法, 计算粒子的多次散射效应, 将天顶角积分用有限求和公式代替, 辐射传输方程转化为一阶微分方程组, 可根据对应边界条件解出.

不考虑偏振情况的平面平行大气辐射, 传输方程为 [16]

$$\mu\frac{\mathrm{d}I_v(\tau_v;\mu,\phi)}{\mathrm{d}\tau} = I_v(\tau_v;\mu,\phi) - J_v(\tau_v;\mu,\phi). \quad (2)$$

式中: ϕ 为方位角; $\mu = \cos\theta$, θ 为天顶角, 即辐射方向与天顶的夹角; 光学厚度

$$\tau_v = \int_z^{+\infty} e_{u,v}\mathrm{d}z,$$

$e_{u,v}$ 为消光系数; I_v 为辐射强度; J_v 为源函数; 下标 v 为单色辐射波数.

大气层顶太阳光入射方向辐射强度可近似表示为

$$I(\tau;\mu,\phi) = I'(\tau;\mu,\phi) + \delta(\mu-\mu_0)\delta(\phi-\phi_0)I_0\mathrm{e}^{-\tau/\mu_0}. \quad (3)$$

式 (3) 为大气辐射传输的上边界条件, 其中在 UV 至热红外波段, 右边第一项可忽略不计.

$$J(\tau;\mu,\phi) = \frac{\tilde{\omega}(\tau)}{4\pi}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi'\int_{-1}^{1}\mathrm{d}\mu' P(\tau;\mu,\phi,\mu',\phi')\cdot I(\tau;\mu',\phi') + [1-\tilde{\omega}(\tau)]B[T(\tau)] + \frac{\tilde{\omega}(\tau)I_0}{4\pi}P(\tau;\mu,\phi,-\mu_0,\phi_0)\mathrm{e}^{\frac{\tau}{\mu_0}}. \quad (4)$$

式中: $\tilde{\omega}$ 为单次散射反照率; P 为散射相函数; $B(T)$ 为 Plank 函数.

对于球形粒子和对称分布的粒子群, 散射相函数只是空间坐标和散射角的函数, 可用 Legendre 多项式展开为

$$P(\tau,\cos\theta) = \sum_{l=0}^{2N-1} g_l(\tau)(2l+1)P_l(\cos\theta). \quad (5)$$

式中 θ 为散射角, 展开系数为

$$g_l(\tau) = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} P_l(\cos\theta)P(\tau,\cos\theta)\mathrm{d}\cos\theta. \quad (6)$$

极坐标中相函数可整理为

$$P(\mu,\phi;\mu',\phi') = \sum_{m=0}^{2N-1}(2-\delta_{0m})\cdot\Big[\sum_{l=m}^{2N-1}(2l+1)g_l^m(\tau)\cdot P_l^m(\mu)P_l^m(\mu')\cos(\phi-\phi')\Big]. \quad (7)$$

式中:

$$\delta_{0m} = \begin{cases} 1, & m=0, \\ 0, & m\neq 0; \end{cases} \quad (8)$$

$$g_l^m(\tau) = g_l(\tau)\frac{(l-m)!}{(l+m)!}. \quad (9)$$

进一步将辐射强度展开为

$$I(\tau;\mu,\phi)=\sum_{m=0}^{2N-1}I^m(\tau,\mu)\cos m(\phi-\phi_0). \tag{10}$$

将上述分解代入式 (2), 得到 $2N$ 个关于 Fourier 分量的方程, 有

$$\mu\frac{\mathrm{d}I^m(\tau,\mu)}{\mathrm{d}\tau}=I^m(\tau,\mu)-\int_{-1}^{1}D^m(\tau;\mu,\mu')I^m(\tau,\mu')\mathrm{d}\mu'Q^m(\tau,\mu),$$
$$(m=0,1,2,\cdots,2N-1). \tag{11}$$

式中,

$$D^m(\tau;\mu,\mu')=\frac{\tilde{\omega}(\tau)}{2}\cdot\sum_{l=m}^{2N-1}(2l+1)g_l^m(\tau)P_l^m(\mu)P_l^m(\mu'), \tag{12}$$

$$Q^m(\tau,\mu)=X_0^m(\tau,\mu)\mathrm{e}^{-\tau/\mu_0}+\delta_{0m}[1-\tilde{\omega}(\tau)]B[T(\tau)], \tag{13}$$

$$X_0^m(\tau,\mu)=\frac{\tilde{\omega}(\tau)I_0}{4\pi}(2-\delta_{0m})\sum_{l=0}^{2N-1}(2l+1)\cdot I^m g_l^m(\tau)P_l^m(\mu)P_l^m(\mu_0). \tag{14}$$

用 $2N$ 个节点的 Gauss 求积公式代替式 (11)

$$\mu_i\frac{\mathrm{d}I^m(\tau,\mu_i)}{\mathrm{d}\tau}=I^m(\tau,\mu_i)-\sum_{j=-N}^{N}w_jD^m(\tau;\mu_i,\mu_j)\cdot I^m(\tau,\mu_j)Q^m(\tau,\mu_i),$$
$$(i=\pm1,\pm2,\cdots,\pm N;\quad m=0,1,2,\cdots,2N-1). \tag{15}$$

式中, μ_i 和 w_j 为求积节点和权重. $2N$ 为方程的流数, N 取 1 时方程退化为二流近似, 并且 N 值越高, 近似程度越精确, MODTRAN 模型中最高支持 16 流近似. 但 N 值每增加 1, 模型运行时间会大幅度增加, 因此需要根据不同的反演需求来平衡精度与计算效

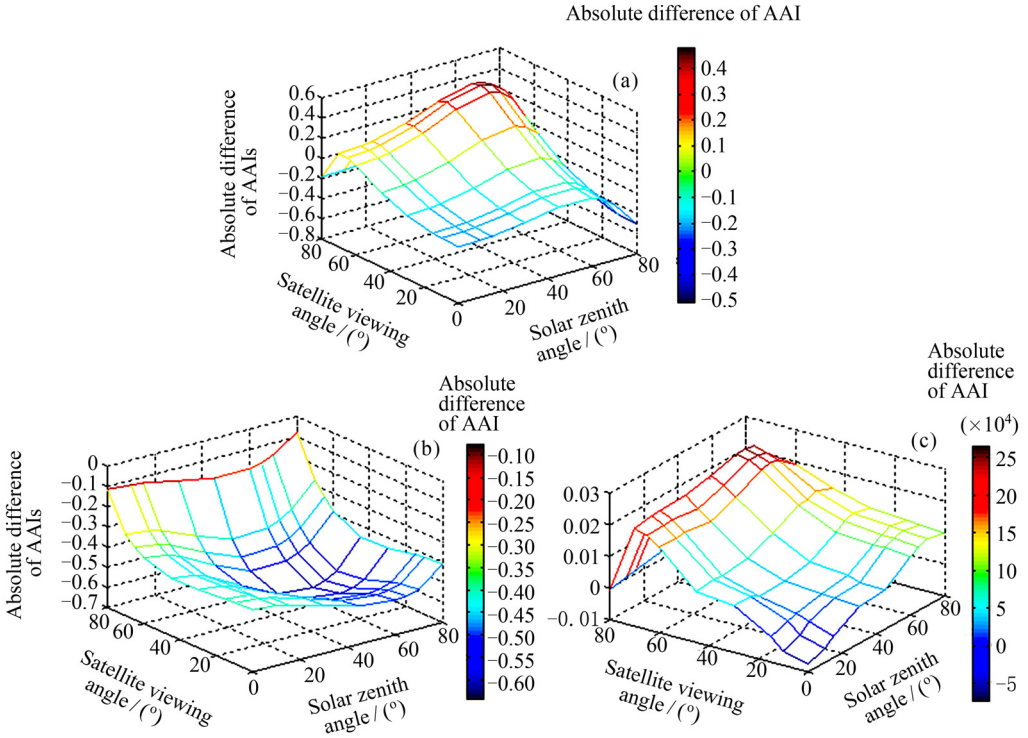

图 1 MODTRAN 模拟离散坐标法中 16 流近似反演 AAI 结果分别与 2 流近似 (a)、4 流近似 (b) 和 8 流近似 (c) 结果的绝对差值

Fig. 1 Absolute differences between AAI retrieval result using 16 streams in the DISORT multiple scattering calculation MODTRAN and AAI results of 2 streams (a), 4 streams (b) and 8 streams (c) by MODTRAN

率. 这里将先找出适合反演 AAI 的近似选取, 再利用该结果进一步讨论观测路径和光谱分辨率对反演结果的影响.

在 MODTRAN 模型中, 气溶胶模块主要分为乡村气溶胶和城市气溶胶. 乡村气溶胶含有 30% 的沙尘类气溶胶和 70% 的水溶性物质 (包括铵盐、硫酸钙和有机成分). 城市气溶胶是通过向乡村气溶胶中加入燃烧气溶胶和工业源气溶胶, 其中包含 80% 的乡村气溶胶和 20% 由工业活动产生的含碳气溶胶 [17].

2　实验过程及结果讨论

2.1　不同程度近似解辐射传输方程对 AAI 结果的影响

如上所述, 模型计算准确度直接影响 AAI 的反演精度, 在 MODTRAN 模型中利用离散坐标法来进

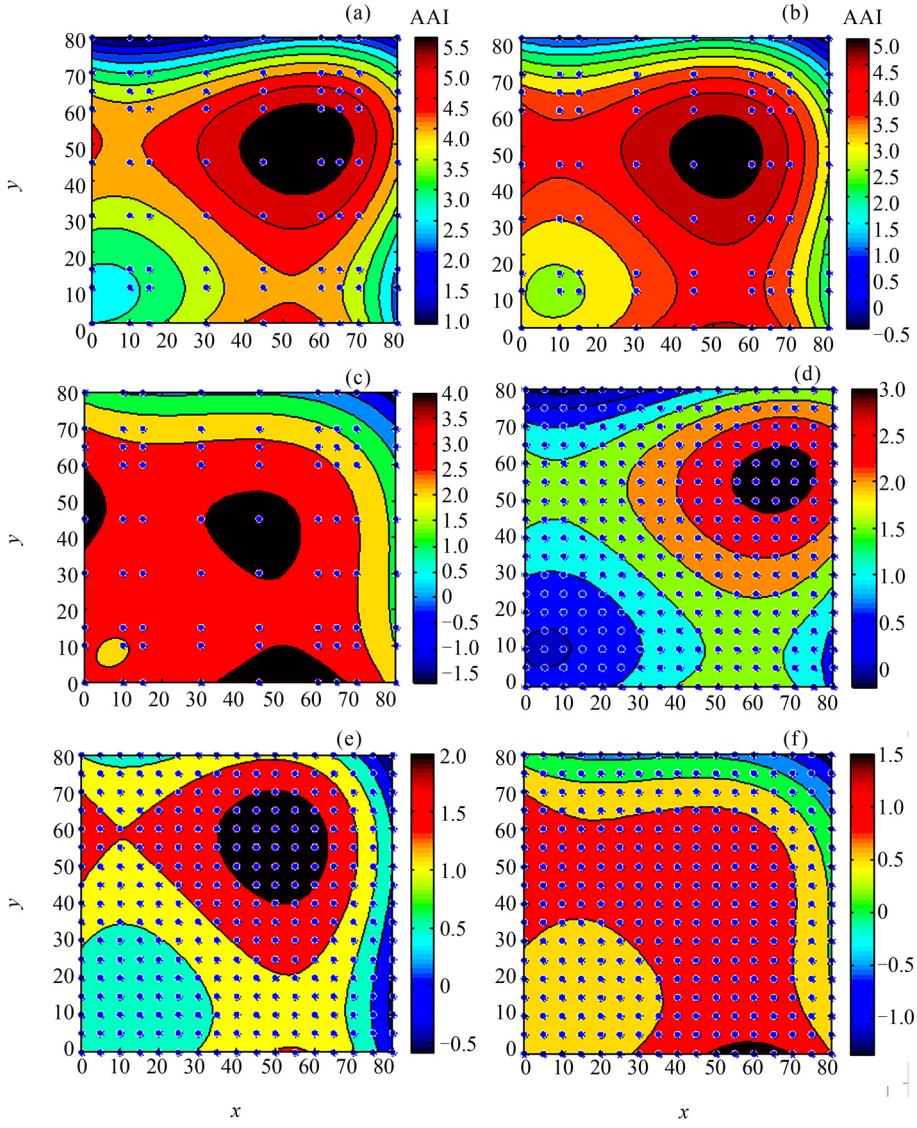

图 2　MODTRAN 模拟 AAI 值在乡村 5 km 能见度气溶胶相对方位角为 0° (a), 90° (b) 和 180° (c) 时及城市 5 km 能见度气溶胶相对方位角为 0° (d), 90° (e), 180° (f) 时随太阳天顶角和卫星观测角的变化

Fig. 2　AAI in rural 5 km aerosol when relative azimuth angle is 0° (a), 90° (b) and 180° (c) and AAI in urban 5 km aerosol when relative azimuth angle is 0° (d), 90° (e), 180° (f), varying with solar zenith angle and satellite viewing angle by MODTRAN

行辐射传输方程解析, 其中使用 16 流近似是计算精度最高的解析方法, 其反演的 AAI 结果最接近真实值, 但其计算过程繁复, 耗时长, 在实际应用中应选取满足精度条件下耗时最少的近似方法进行计算. 因此这里以 16 流近似反演结果作为基准, 对 2 流近似、4 流近似和 8 流近似的计算偏差进行分析, 以找到最合适的反演近似方法. 在模拟过程中, 地表反射率设为 0.05, 太阳天顶角为 30°, 使用天底观测, 相对方位角取为 180°, 大气廓线为中纬度夏季, 包含温度、气压、臭氧和痕量气体 [17].

图 1 给出了相应的模拟计算结果. 其中图 1(a) 给出了 2 流近似的 AAI 反演结果与 16 流近似结果的绝对差值, 从图中可以看到在不同的方位其正向或负向偏差均较大; 图 1(b) 给出的是 4 流近似与 16 流近似结果的绝对差值, 可以发现 4 流近似的负向绝对差值偏大; 图 4(c) 中 8 流近似与 16 流近似结果相差很小, 最高为 10^{-2} 量级. 鉴于 8 流近似计算速度远高于 16 流近似且计算结果误差很小, 后续模拟计算全部使用 8 流近似进行.

2.2 观测路径对 AAI 结果的影响

利用 MODTRAN 进行 AAI 随太阳天顶角和卫星方位角变化的分析, 气溶胶类型分别选为 5 km 能见度的乡村气溶胶和城市气溶胶, 结果如图 2 所示. 从图 2 中可以看出, 虽然 5 km 乡村气溶胶和城市气溶胶成分存在差异, 导致二者在同一观测方位上 AAI 值大小不同, 但是 AAI 随观测角度的变化趋势基本相同, AAI 在不同相对方位角下对太阳天顶角和卫星观测角的响应基本呈对称关系. 从图中可以看到, 在太阳角和卫星观测角均为 40°~60° 时 AAI 反演具有较大的偏差值.

此外, 基于 5 km 能见度的乡村气溶胶对 AAI 随相对方位角的变化进行分析, 结果如图 3 所示. 图中 6 条线分别代表太阳天顶角和卫星观测角均为 0°, 15°, 30°, 45° 和 60° 的情况. 以 0° 情况作为参考基准, 可以发现在相对方位角 < 120° 时 AAI 误差较大, 在 120°~180° 范围内误差较小.

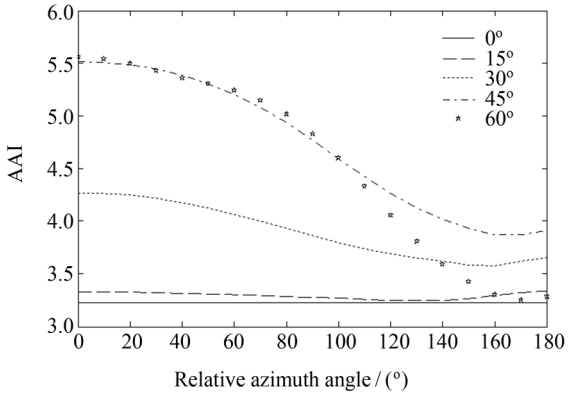

图 3 MODTRAN 模拟乡村 5 km 能见度气溶胶 AAI 值在太阳天顶角和卫星观测角均为 0°, 15°, 30°, 45° 和 60° 时随相对方位角的变化

Fig. 3 AAI in rural 5 km aerosol varying with relative azimuth angle when solar zenith angle and satellite viewing angle both are 0°, 15°, 30°, 45° and 60° by MODTRAN

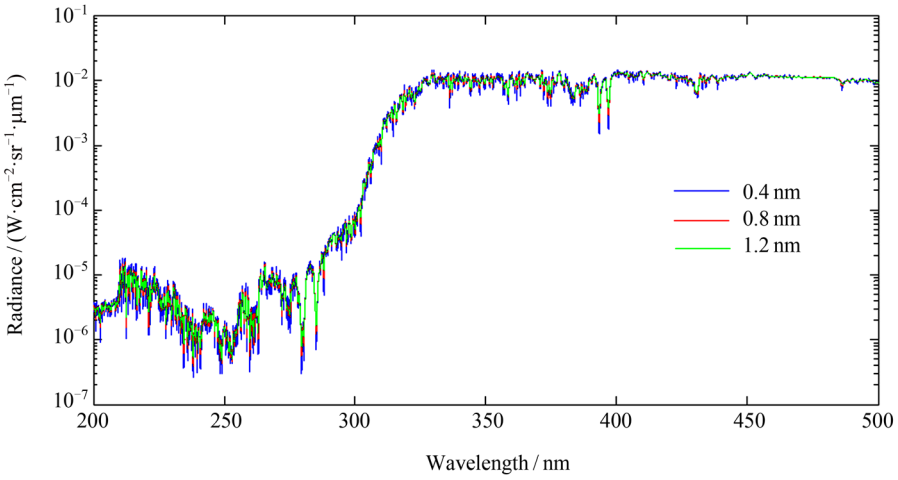

图 4 MODTRAN 模拟不同光谱分辨率 (FWHM) 下 5 km 能见度乡村气溶胶存在情况下大气层顶辐亮度值

Fig. 4 Radiances at top of atmosphere in rural 5 km aerosol with different FWHMs by MODTRAN

2.3 不同光谱分辨率对 AAI 结果的影响

基于 MODTRAN 5 km 能见度的乡村气溶胶模块分析光谱分辨率对 AAI 反演结果的影响. 使用三角函数作为仪器狭缝函数, 半高宽 (FWHM) 分别为 0.4, 0.8 和 1.2 nm. 如图 4 所示, 不同光谱分辨率下谱线的平滑程度明显不同. 通过对不同光谱分辨率下 Rayleigh 大气顶后向散射辐射强度进行运算, 进而得到 AAI 值, 发现随着狭缝半高宽的增加, AAI 值几乎不变, 因此在反演 AAI 过程中可以不必考虑探测器光谱分辨率对其结果的影响.

3 结论

利用大气辐射传输模型 MODTRAN 模拟了若干因素对 AAI 反演结果的影响, 得到如下结论.

(1) 多次散射计算过程中 2 流与 4 流近似误差较大, 8 流近似误差小且计算效率较高.

(2) AAI 随太阳天顶角和卫星观测角的变化基本呈对称关系, 对于不同类型的气溶胶在相同的相对方位角下其变化形态类似; 相对方位角 $< 120°$ 时, 太阳天顶角和卫星观测角均在 $40°$~$60°$ 时 AAI 偏差最大, 而相对方位角位于 $120°$~$180°$ 时, AAI 整体偏差较小.

(3) 大气顶层辐亮度值的精细度会随探测器光谱分辨率的变化而变化, 而光谱分辨率的变化不会对 AAI 反演结果产生明显影响, 因此 AAI 随光谱分辨率的变化基本可以忽略不计.

参考文献

[1] DAVE J V. Effect of aerosols on the estimation of total ozone in an atmospheric column from the measurements of its ultraviolet radiance [J]. *Atmos. Sci.*, 1987, **35**: 899-911

[2] HERMAN J R., KROTKOV N, CELARIER E, *et al.* Distribution of UV radiation at the Earth's surface from TOMS-measured UV-backscattered radiances [J]. *Geophys. Res.*, 1999, **104**(D10): 12059-12076

[3] KROTKOV N A, BHAETIA P K, HERMAN J R, *et al.* Satellite estimation of spectral surface UV irradiance in the presence of tropospheric aerosols: 1. Cloud-free case [J]. *Geophys. Res.*, 1998, **103**(D8): 8779-8793

[4] HERMAN J R, BHARTIA P K, TORRES O, *et al.* Global distribution of UV-absorbing aerosols from Nimbus 7/TOMS data [J]. *Geophys. Res.*, 1997, **102**(D14): 16911-16922

[5] TORRES O, BHARTIA P K, HERMAN J R, *et al.* Derivation of aerosol properties from satellite measurements of backscattered ultraviolet radiation: theoretical basis [J]. *J. Geophys. Res. Atmos.*, 1998, **103**(D14): 17099-17110

[6] TORRES O, HERMAN J R, BHARTIA P K, *et al.* Aerosol properties from EP-TOMS near UV observations [J]. *Adv. Space Res.*, 2002, **29**(11): 1771-1780

[7] CAKMUR R V, MILLER R L, TEGEN I. A comparison of seasonal and interannual variability of soil dust aerosols over the Atlantic Ocean as inferred by the TOMS AI and AVHRR AOT retrievals [J]. *Geophys. Res.* 2001, **106**(D16): 18287-18303

[8] PROSPERO J M, GINOUX P, TORRES O, *et al.* Environmental characterization of global sources of atmospheric soil dust identified with the Nimbus 7 Total Ozone Mapping Spectrometer (TOMS), absorbing aerosol product [J] *Rev. Geophys.*, 2002, **40**(1): 2-1-31

[9] PROSPERO J M. Interhemispheric transport of viable fungi and bacteria from Africa to the caribbean with soil dust [M]//Werner D. Biological Resources and Migration, Chapter 11. Berlin, Heidelberg: SpringerVerlag, 2004: 127-133

[10] SHINN E A, Smith G W, PROSPERO J M, *et al.* African dust and the demise of Caribbean Coral Reefs [J]. *Geophys. Res. Lett.*, 2000, **27**(19): 3029-3032

[11] MCPETERS R D, KRUEGER A J, BHARTIA P K, *et al.* Nimbus-7 Total Ozone Mapping Spectrometer (TOMS) data products user's guide [M]. NASA Ref. Publ. 1993: 1384

[12] DE GRAAF M, STAMMES P, TORRES O, *et al.* Absorbing aerosol index: sensitivity analysis, application to gome and comparison with toms [J]. *J. Geophys. Res. Atmos.*, 2005, **110**(D1): 372-384

[13] WANG Y, WANG Y J, WANG W H, *et al.* Fy-3 satellite ultraviolet total ozone unit [J]. *Chinese Sci. Bull.*, 2010, **55**(1): 84-89

[14] KNEIZYS F X, ROBERTSON D C, ABREU L W, *et al.* The MODTRAN 2/3 Report and LOWTRAN 7 MODEL [M]. MODTRAN Report, Hanscom AFB, MA: Phillips Laboratory, Geophysics Directorate, PL/GPOS, 1996: 1731-3010

[15] SUN Y Y, DONG H, BI Z H, *et al.* Inter-comparison of models for radiative transfer in the atmosphere [J]. *High Power, Laser and Particle Beams*, 2004, **16**(2): 149-153

[16] SHI G Y. Atmospheric Radiation [M] Beijing: Science Press, 2007: 71-73

[17] FAN B, LI X, ZHANG J, *et al.* The aerosol models in modtran: incorporating selected measurements from northern Australia [J]. *Chin. J. Appl. Ecol.* , 2005, **71** (711): 1587-1594