

GOSAT-2 TANSO-FTS-2 SWIR L2 処理アルゴリズム基準書

2022 年 8 月

国立環境研究所 GOSAT-2 プロジェクト

吉田 幸生¹⁾
押尾 晴樹¹⁾

1) 国立研究開発法人 国立環境研究所 地球環境研究センター

改訂履歴

版数	制定年月	改訂箇所	改訂内容、理由
00	2020年12月	—	—
01	2022年8月	p. 5	表 3.1-1 にデータセットを追加
		p. 9	表 3.3.1-1 の注釈を追加
		p. 10	表 3.3.1-2 に分光パラメータを追加
		p. 11	表 3.3.2-1 に出力データを追加
		p. 17	参考文献を修正
		p. 39	表 4.7.2-7 に推定対象物理量を追加
		p. 48	4.7.4 (e)に記述を追記
		p. 57	表 4.7.5.4-1 の誤記を修正
		p. 62	表 4.7.5.8-1 に推定対象物理量を追加
		p. 71	4.7.6 に(j)装置関数伸縮係数を追加
		p. 79	4.17 の記述を修正
		p. 80	表 4.17-1 を追加
		p. 82	6. に記述を追加
		p. 83	参考文献を追加
p. 85, p. 86	参考文献を一部修正		

※本文書記載の所属は初版制定時点のものである。

目次

1. はじめに.....	1
1.1 適用範囲.....	1
1.2 適用文書.....	2
2. 背景.....	3
2.1 観測機器の概要.....	3
3. 入出力データ.....	5
3.1 入力データ.....	5
3.2 出力データ.....	7
3.2.1 FTS-2 SWIR L2 クロロフィル蛍光・proxy 法プロダクト.....	7
3.2.2 FTS-2 SWIR L2 カラム平均気体濃度プロダクト.....	7
3.3 参照データ・中間出力データ.....	8
3.3.1 導出処理部用参照データ.....	8
3.3.2 導出処理部処理済みデータ.....	10
4. FTS-2 SWIR L2 処理アルゴリズム.....	12
4.1 アルゴリズムの概要.....	12
4.2 入力・参照データ読込.....	17
4.3 観測輝度スペクトル補正処理.....	17
4.3.1 感度劣化補正.....	17
4.4 波数軸補正.....	19
4.5 偏光合成処理.....	22
4.6 導出処理対象抽出処理.....	26
4.6.1 導出処理対象抽出処理 (SIF・proxy 法).....	26
4.6.2 導出処理対象抽出処理 (full-physics 法).....	26
4.7 導出処理.....	28
4.7.1 MAP 解析法.....	28
4.7.2 処理条件.....	34
4.7.3 鉛直グリッド.....	40
4.7.4 フォワードモデル.....	42
4.7.5 推定対象物理量の先験値、及び、各種光学特性.....	49
4.7.6 ヤコビアン.....	63
4.8 導出処理 (SIF・proxy 法) 後処理.....	72
4.9 処理結果出力.....	73
4.10 FTS-2 SWIR L2 処理済みデータ (SIF・proxy 法) 読込.....	74

4.11	クロロフィル蛍光輝度用 処理対象データ抽出処理.....	74
4.12	クロロフィル蛍光輝度補正テーブル作成.....	75
4.13	クロロフィル蛍光輝度補正処理.....	76
4.14	品質判定処理 (クロロフィル蛍光・proxy 法).....	76
4.15	FTS-2 SWIR L2 クロロフィル蛍光・proxy 法プロダクト作成処理	78
4.16	FTS-2 SWIR L2 処理済みデータ (full-physics 法) 読込.....	79
4.17	品質判定処理 (full-physics 法).....	79
4.18	FTS-2 SWIR L2 カラム平均気体濃度プロダクト作成処理.....	80
5.	アルゴリズム検証.....	81
6.	前提条件・制約事項.....	82
7.	参考文献.....	83

1. はじめに

本アルゴリズム基準書は、GOSAT-2 に搭載された TANSO-FTS-2 により観測された SWIR 域の観測輝度スペクトルデータ (TANSO-FTS-2 L1B プロダクト) に対し クロロフィル蛍光、および、二酸化炭素 (CO₂)・メタン (CH₄)・一酸化炭素 (CO) カラム平均気体濃度を導出し、「TANSO-FTS-2 SWIR L2 クロロフィル蛍光・proxy 法プロダクト」・「TANSO-FTS-2 SWIR L2 カラム平均気体濃度プロダクト」を作成するアルゴリズムについて説明するものである。

1.1 適用範囲

システム全体の処理フローを図 1.1-1 に示す。図中の黄色く示した部分が、本 ATBD の適用範囲である。

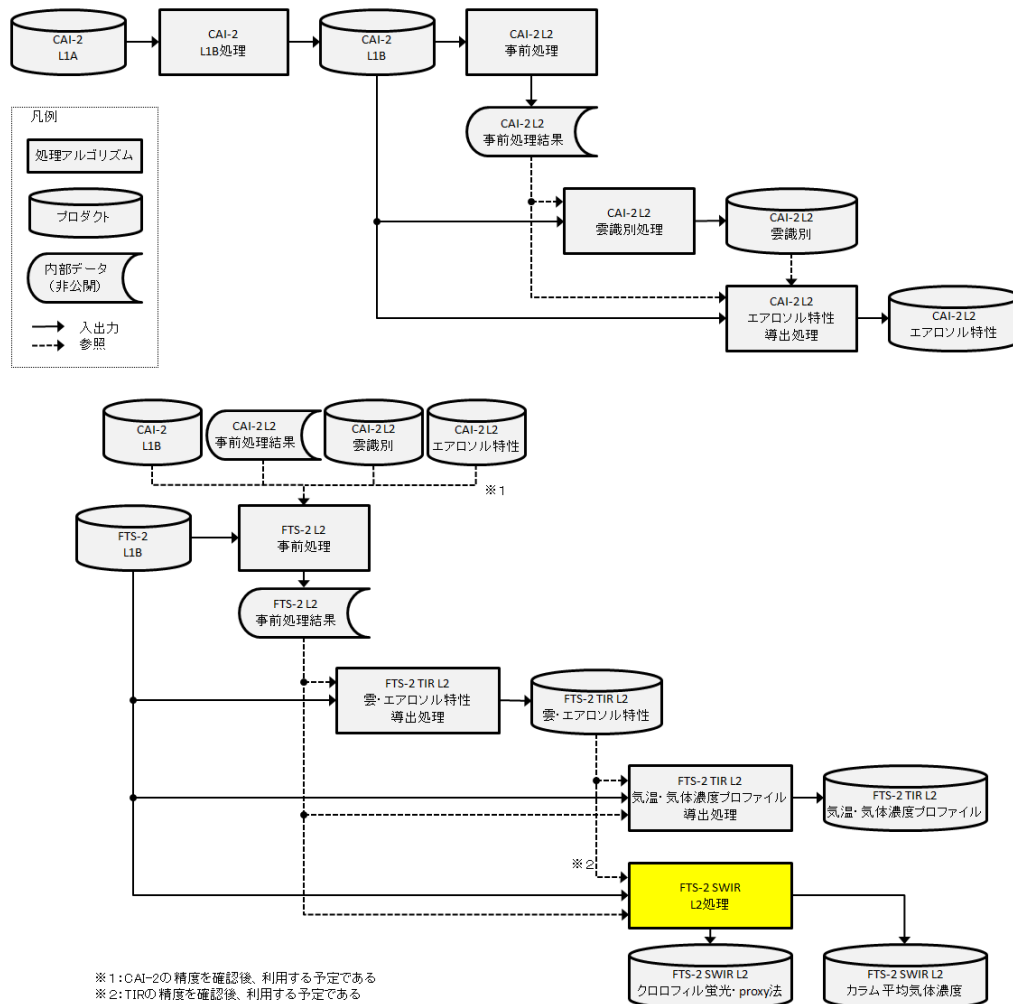


図 1.1-1 システム全体の処理フローにおける本アルゴリズム基準書の適用範囲。

1.2 適用文書

本アルゴリズム基準書の関連文書を以下に挙げる。

- (1) 温室効果ガス観測技術衛星 2 号 (GOSAT-2) アルゴリズム基準書
- (2) GOSAT-2/TANSO-FTS-2 レベル 1 プロダクトフォーマット説明書
- (3) GOSAT-2 TANSO-FTS-2 L2 事前処理 アルゴリズム基準書
- (4) GOSAT-2 TANSO-FTS-2 TIR L2 雲・エアロソル特性導出処理 アルゴリズム基準書
- (5) 国立環境研究所 GOSAT-2 プロダクトファイルフォーマット説明書 (プロダクト編)
 - ・第 4 分冊 : GOSAT-2 TANSO-FTS-2 SWIR L2 クロロフィル蛍光・proxy 法プロダクト
 - ・第 5 分冊 : GOSAT-2 TANSO-FTS-2 SWIR L2 カラム平均気体濃度プロダクト
 - ・第 6 分冊 : GOSAT-2 TANSO-FTS-2 TIR L2 雲・エアロソル特性プロダクト

2. 背景

2.1 観測機器の概要

GOSAT-2 には温室効果ガス観測センサ 2 型 (TANSO-FTS-2; 以下、FTS-2) と雲・エアロソルセンサ 2 型 (TANSO-CAI-2; 以下、CAI-2) が搭載される。FTS-2 は短波長赤外 (short wavelength infrared; SWIR) 域に 3 バンド、熱赤外 (thermal infrared; TIR) 域に 2 バンドを有するフーリエ変換分光計であり、二軸のポインティング機構を用いて、直下点を中心にアロングトラック (along track; AT) 方向 $\pm 40^\circ$ 、クロストラック (cross track; CT) 方向 $\pm 35^\circ$ 内の任意の点を、瞬時視野角 (instantaneous field of view; IFOV) 15.8 mrad (衛星直下視で直径約 9.7 km の円に相当) で観測する (註: 角度範囲は視線ベクトルの範囲を表し、軸周りのモータ回転角の範囲ではない点に注意)。CAI-2 は衛星直下点より衛星進行方向に対し前方・後方 ($\pm 20^\circ$) にそれぞれ紫外域から短波長赤外域 5 バンド、計 10 バンドを有する電子走査イメージャーである。クロストラック方向に 920 km の視野を 0.46 km もしくは 0.92 km の空間分解能で観測する。FTS-2、CAI-2 の仕様をそれぞれ表 2.1-1、2.1-2 に示す。

FTS-2 は、任意の方向からの観測光をポインティング機構を介して干渉計部へ導入する。干渉光は複数のダイクロミックミラー、バンドパスフィルタなどによりバンド毎の波数域に分割され、SWIR 3 バンドはさらに偏光ビームスプリッタにより偏光二成分に分割された後、検出器でインタフェログラムが記録される。1 インタフェログラムの取得に要する時間は 4.024 秒であり、ポインティング機構は 1 インタフェログラム取得中に同一地点をポインティングするためにも利用される。加えて、日照域で海上を観測する際には、水の反射率が鏡面反射点周辺を除いて低いことから、鏡面反射点方向を指向した運用を実施する (サンダリント観測)。

FTS-2 は軌道上で拡散板を利用した太陽照度校正を行う他、ポインティング機構を内部の校正源へ指向することで、装置関数校正、黒体校正、深宇宙校正を行う。また、日陰側で衛星本体を地心と逆向きに指向することで、月校正を実施する。

CAI-2 は雲・エアロソルの空間分布を把握するために広範囲の衛星進行直交方向の視野を有する。海上では太陽の鏡面反射方向で反射率が高くなることから、雲の識別が困難となる。CAI-2 は前方・後方の二方向の視線方向を有するため、一方の視線方向が鏡面反射近傍となった場合でも他方の視線方向は鏡面反射近傍から外れることになる。これにより、雲識別精度の向上が図られている。

FTS-2 TIR は日照・日陰の両方で運用されるが、FTS-2 SWIR、および、CAI-2 の運用は地表日照域に限定される。なお、ミッション機器ではないものの、FTS-2 には視野確認カメラが搭載されており、日照時には FTS-2 によるインタフェログラム取得と連動した撮像が実施される。

表 2.1-1 TANSO-FTS-2 仕様。

	Band 1	Band 2	Band 3	Band 4	Band 5
偏光観測	有	有	有	無	無
波数範囲 [cm ⁻¹]	12950 - 13250	5900 - 6400	4200 - 5200	1188 - 1800	700 - 1188
装置関数半値全幅	< 0.4 cm ⁻¹	< 0.27 cm ⁻¹	< 0.27 cm ⁻¹	< 0.27 cm ⁻¹	< 0.27 cm ⁻¹
サンプリング間隔	< 0.2 cm ⁻¹	< 0.2 cm ⁻¹	< 0.2 cm ⁻¹	< 0.2 cm ⁻¹	< 0.2 cm ⁻¹
データ取得間隔	約 4.67 秒 (インタフェログラム取得に要する時間 : 4.024 秒)				
瞬時視野角	15.8 mrad (衛星直下点における地表投影直径 : 約 9.7 km)				
視野範囲	±40° (アロングトラック方向)、±35° (クロストラック方向)				

表 2.1-2 TANSO-CAI-2 仕様。

	Band 1 / 6	Band 2 / 7	Band 3 / 8	Band 4 / 9	Band 5 / 10
鏡筒	鏡筒 1	鏡筒 2	鏡筒 3	鏡筒 4	鏡筒 5
指向方向	前方視 (AT 方向 前方 20°) / 後方視 (AT 方向 後方 20°)				
中心波長 [μm]	0.343 / 0.380	0.443 / 0.550	0.674	0.869	1.63
波長幅 [μm]	< 0.02	< 0.02	< 0.02	< 0.02	< 0.09
分解能	0.46 km				0.92 km
有効画素数	2048				958
撮像幅	920 km				

3. 入出力データ

3.1 入力データ

FTS-2 SWIR L2 処理における入力データは FTS-2 L1B プロダクトである。FTS-2 L1B プロダクトは SWIR と TIR にて共通の情報を格納した「共通ファイル」と、SWIR 固有の情報を格納した「SWIR 固有ファイル」、TIR 固有の情報を格納した「TIR 固有ファイル」から構成される。FTS-2 L1B プロダクトは衛星の昇交点を起点として 1 周回分のデータが 4 シーンに分割されており、シーン 01 は昇交点から日陰観測終了まで、シーン 02 は日照観測開始から降交点まで、シーン 03 は降交点から日照観測終了まで、シーン 04 は日陰観測開始から次の昇交点まで、のデータがそれぞれ格納される。日照観測と日陰観測が切り替わる場所は季節により変動する。FTS-2 SWIR は日照部のみで運用されるため、FTS-2 L1B プロダクト SWIR 固有ファイルはシーン 02, 03 のみ存在する。FTS-2 SWIR L2 処理では FTS-2 L1B SWIR 固有ファイルのみを使用する。以下では『FTS-2 SWIR L1B プロダクト』は SWIR 固有ファイルを指すものとする。FTS-2 SWIR L2 処理において、処理の入力となるデータの一覧を表 3.1-1 に示す。なお、一部の処理は FTS-2 L2 事前処理で実施済みであるため (3.3.1 項参照)、1.2 項 (3) GOSAT-2 TANSO-FTS-2 L2 事前処理 アルゴリズム基準書をあわせて参照されたい。また、3.2 項の出力データに転記するだけのデータは表 3.1-1 には含まない点に注意。

表 3.1-1 FTS-2 SWIR L2 処理で使用する FTS-2 L1B プロダクト SWIR 固有ファイル格納項目。

データセット名	説明	単位
SoundingAttribute		
numSoundings	ファイルに格納されている観測点数	
observationTime	FTS-2 観測時刻。4.024 秒のインタフェログラム取得時間の中心時刻が格納される。	
scanDirection	各観測点におけるスキャン方向が格納される。	
QualityInfo		
soundingQualityFlag	観測点ごとの品質フラグ。 Good/Fair/Poor/NG	
dataInvalidFlag	データ無効フラグ。	
IMC_StabilityFlag	IMC 安定度フラグ。	
missingFlag	欠損有無フラグ。	
saturationFlag	飽和フラグ。	
spikeFlag	スパイク判定フラグ。	
scanStabilityFlag	走査速度安定性フラグ。	
SNR	簡易的に評価した SNR。	

データセット名	説明	単位
interferogramQualityFlag	インタフェログラム品質フラグ。	
spectrumQualityFlag	スペクトル品質フラグ。	
SatelliteGeometry		
yawSteeringFlag	ヨーステアリングフラグ。	
SoundingGeometry		
solarDistance	観測時刻におけるみかけの太陽位置と観測点間の距離。	AU
SoundingData		
WavenumberInfo		
numWN	スペクトルデータ点数。	
beginWN	スペクトルデータ開始波数。	cm ⁻¹
deltaWN	スペクトルデータ波数間隔。	cm ⁻¹
RawSpectrum		
band1P	感度校正前の Band 1P スペクトルデータ。	V/cm ⁻¹
band1S	感度校正前の Band 1S スペクトルデータ。	V/cm ⁻¹
band2P	感度校正前の Band 2P スペクトルデータ。	V/cm ⁻¹
band2S	感度校正前の Band 2S スペクトルデータ。	V/cm ⁻¹
band3P	感度校正前の Band 3P スペクトルデータ。	V/cm ⁻¹
band3S	感度校正前の Band 3S スペクトルデータ。	V/cm ⁻¹

3.2 出力データ

FTS-2 SWIR L2 処理からは、FTS-2 SWIR L2 クロロフィル蛍光・proxy 法プロダクトと FTS-2 SWIR L2 カラム平均気体濃度プロダクトが得られる。

3.2.1 FTS-2 SWIR L2 クロロフィル蛍光・proxy 法プロダクト

FTS-2 SWIR L2 クロロフィル蛍光・proxy 法プロダクトは、雲・エアロソルが存在しないという仮定のもと、独立した 6 通りの導出処理を行った結果をまとめたものであり、クロロフィル蛍光輝度、XCH₄ (proxy)、XCO (proxy)、および光路長変動の指標となるいくつかのパラメータが含まれる。格納項目の詳細は 1.2 節 (5) 国立環境研究所 GOSAT-2 プロダクトファイルフォーマット説明書 (プロダクト編) 第 4 分冊 GOSAT-2 TANSO-FTS-2 SWIR L2 クロロフィル蛍光・proxy 法プロダクトを参照のこと。

3.2.2 FTS-2 SWIR L2 カラム平均気体濃度プロダクト

FTS-2 SWIR L2 カラム平均気体濃度プロダクトは、雲・エアロソルによる光路長変動の影響が比較的小さいと思われる事例を対象に full physics 法にて導出処理を行った結果をまとめたものであり、XCO₂、XCH₄、XCO、XH₂O が含まれる。格納項目の詳細は 1.2 節 (5) 国立環境研究所 GOSAT-2 プロダクトファイルフォーマット説明書 (プロダクト編) 第 5 分冊 GOSAT-2 TANSO-FTS-2 SWIR L2 カラム平均気体濃度プロダクトを参照のこと。

3.3 参照データ・中間出力データ

3.3.1 導出処理部用参照データ

FTS-2 SWIR L2 処理 導出処理部で使用する参照データを表 3.3.1-1 に示す。

表 3.3.1-1 FTS-2 SWIR L2 処理 導出処理部で使用する参照データ。

参照データ	参照項目
FTS-2 L2 事前処理 処理結果 ¹⁾	<p>オルソ補正後の FTS-2 視野中心位置に対応する太陽天頂角 [deg.]・方位角 [deg.]、衛星天頂角 [deg.]・方位角 [deg.]。</p> <p>放射伝達基準面とスキャンミラー反射基準面とのなす角 [deg.]、スキャンミラーに対する入射角 [deg.]、スキャンミラー反射基準面と FTS-2 検出器基準面のなす角 [deg.]、観測光偏光面と放射伝達基準面のなす角 [deg.]。</p> <p>太陽、および、衛星に対するドップラー速度 [m/s]。</p> <p>FTS-2 観測視野範囲内に含まれる陸海マスクデータの陸グリッド点数、および、グリッド点総数。</p> <p>CAI-2 L2 雲識別プロダクトによる雲判定結果。</p> <p>FTS-2 偏光成分別 2 μm 帯雲判定結果。</p> <p>FTS-2 観測時刻、視野中心位置に時間・空間内挿した地表面気圧 [hPa]、地上風速（東西風・南北風）[m/s] と地上風速の分散 [(m/s)²]、気圧 [hPa]・気温 [K]・ジオポテンシャル高度 [m]・重力加速度 [m/s²]・H₂O、CO₂、O₃、N₂O、CO、CH₄ 濃度 [ppm] の高度分布データ、エアロソル種別の質量混合比プロファイル [kg/kg]、および、各気体濃度の分散・共分散行列 [ppm²]。高度分布の層数、および、エアロソルの種類は源泉データに準ずる。</p>
FTS-2 SWIR 装置特性 ²⁾	感度劣化補正係数、走査鏡の複素屈折率、装置関数、後置光学系の効率 [V/cm ⁻¹ /(W/cm ² /str/cm ⁻¹)]。
参照スペクトル用光学的厚さ ³⁾	US 標準大気の CO ₂ 濃度を 380 ppm に増加させた大気プロファイルの気体吸収による光学的厚さ。
太陽照度データ ⁴⁾	太陽から 1 天文単位離れた地点における太陽照度スペクトル [W/cm ² /cm ⁻¹]。
気体分子吸収断面積 LUT ⁵⁾	気圧・気温でルックアップテーブル (LUT) 化してある気体分子吸収断面積 [cm ² /molecules]。

参照データ	参照項目
エアロソル散乱特性 LUT ⁶⁾	エアロソル輸送モデル SPRINTARS のエアロソル成分に対応した質量消散係数 [cm ² /g]、質量散乱係数 [cm ² /g]、散乱位相行列。
雲散乱特性 LUT ⁷⁾	巻雲の雲氷量規格化消散係数 [m ² /g]、一次散乱アルベド、散乱位相行列。

- 1) 処理内容については、1.2 節 (3) GOSAT-2 TANSO-FTS-2 L2 事前処理結果 アルゴリズム基準書 を参照のこと。
- 2) 源泉情報は GOSAT-2 Product Archive (<https://prdct.gosat-2.nies.go.jp/>) に掲載されている『TANSO-FTS-2 装置特性情報』である。感度劣化補正係数 (RAD_Time_Wave_Deg) と走査鏡の複素屈折率 (SCANNER_REFRACTION) は提供されている情報をそのまま用いる。装置関数と後置光学系の効率提供されている情報を加工したものを用いる。P 偏光、S 偏光の装置関数は、提供されている装置関数 (ILSF_P, ILSF_S) を、波数差 0 cm⁻¹ でピークを取り、積分値が 1 となるように規格化したものである。また、加工後の P 偏光、S 偏光の装置関数を平均したものを全強度用の装置関数として用意する。後置光学系の効率は提供されている感度変換係数 (Rad_CNV) の逆数である。
- 3) 表 3.3.1-1 に示す気体分子吸収断面積 LUT を用いて計算する。波数刻みは LUT に準じる。
- 4) 太陽光の Fraunhofer 線の情報は、FTS-2 SWIR L2 V01 処理では Toon (2015b) による Solar Pseudo-Transmittance Spectrum (Disk-Integrated Spectrum, 2015 version) を使用した。FTS-2 SWIR L2 V02 処理では Toon (2015b) による Solar Pseudo-Transmittance Spectrum (Disk-Integrated Spectrum, 2016 version) を使用した。ベースラインの情報は、Coddington et al. (2021) による TSIS-1 Hybrid Solar Reference Spectrum を使用した。
- 5) 気体吸収断面積の計算に用いた分光パラメータ、参考文献は表 3.3.1-2 を参照のこと。LUT の気圧グリッドは、0.06 hPa から 1040 hPa の間に対数スケールで 70 グリッドを、また、気温方向には、各気圧グリッドごとに US 標準大気モデルの気温を中心とする幅 90 K の間に 10 K 刻みで 10 グリッド設定した。但し、連続吸収については気温のみの LUT とし、150 K から 350 K の間に 10 K 刻みで 21 グリッド設定した。
- 6) エアロソル散乱特性 LUT の波長グリッド点は、0.3, 0.35, 0.4, 0.45, 0.5, 0.55, 0.6, 0.65, 0.7, 0.75, 0.8, 0.9, 1.0, 1.25, 1.5, 1.75, 2.0, 2.5 μm の 18 点であり、吸湿性エアロソルが相対湿度に応じて膨張する効果を取り入れるための相対湿度のグリッド点は 0.0, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9, 0.95, 0.98, 0.99 の 8 点である。LUT では相対湿度の違いによる散乱特性の変化を異なるエアロソル成分として扱うため、SPRINTARS が扱う 19 種のエアロソルに対し、LUT には 75 成分のエアロソル成分の散乱特性が格納される。
- 7) 雲は巻雲のみを考慮し、散乱特性は Baum et al. (2014) による Ice Cloud Bulk

Scattering Models の General Habit Mixture V3.6 から FTS-2 SWIR L2 処理に必要な波長分を抽出して LUT としてまとめた。波長グリッド点は 0.01 μm 刻みで 0.55, 0.75 ~ 0.78, 1.56 ~ 1.73, 1.92 ~ 2.38 の 70 点、有効粒径グリッド点は 5 μm 刻みで 10 ~ 120 μm の 23 点である。

表 3.3.1-2 気体吸収断面積 LUT に用いた分光パラメータ、参考文献。LM, CIA, SDV はそれぞれ line mixing、collision induced absorption、speed-dependent Voigt を考慮していることを表す。

FTS-2 Band	気体	分光パラメータ	参考文献
1	O ₂	ABSCO V5.0 (LM, CIA)	Drouin et al. (2017)
	O ₃ 連続吸収	MT_CKD	Mlawer et al. (2012)
2	H ₂ O	ATM line list	Toon (2015a)
	CO ₂	Lamouroux et al. (2010) (LM)	Lamouroux et al. (2010)
	CH ₄	¹² CH ₄ 2 _{v3} (SDV + LM)	Devi et al. (2015, 2016)
		others HITRAN 2016	Gordon et al. (2017)
H ₂ O 連続吸収	MT_CKD	Mlawer et al. (2012)	
3	H ₂ O	ATM line list	Toon (2015a)
	CO ₂	Lamouroux et al. (2010) (LM)	Lamouroux et al. (2010)
	CO	¹² C ¹⁶ O 2 _v (SDV + LM)	Devi et al. (2012)
		others HITRAN 2016	Gordon et al. (2017)
	CH ₄	ATM line list *	Toon (2015a)
		SEOM IAS **	Birk et al. (2017)
H ₂ O 連続吸収	MT_CKD	Mlawer et al. (2012)	

* FTS-2 SWIR L2 V01 処理で使用

** FTS-2 SWIR L2 V02 処理で使用

3.3.2 導出処理部処理済みデータ

FTS-2 SWIR L2 処理 導出処理部における処理済みデータを表 3.3.2-1 に示す。導出処理 (SIF・proxy 法)、導出処理 (full-physics 法) に対応した処理済みデータが、後処理部 (クロロフィル蛍光・proxy 法)、後処理部 (カラム平均気体濃度) それぞれの入力となる。

表 3.3.2-1 FTS-2 SWIR L2 処理 導出処理部処理済みデータ。

分類	出力データ
導出処理結果	<p>観測点毎の視野内陸率、偏光合成光に対する SNR。</p> <p>観測点毎、導出処理毎の pre-screening 判定結果、反復計算収束判定結果。pre-screening を通過した事例に対し、反復回数、state vector、state vector の各要素が制約条件を満たしたかどうかのフラグ、カイ二乗、サブバンド毎の観測スペクトル、フォワードモデル、及び、残差スペクトルの二乗平均。</p> <p>気体濃度が state vector に含まれる場合、Main-layer 各境界における気圧、各層の気圧荷重関数、導出結果に対する乾燥空気の総気柱量、先験値に対する乾燥空気の総気柱量、導出気体毎のカラム平均気体濃度の導出値、先験値、DFS、不確定性、カラムアベレージングカーネル。</p>
導出処理 (SIF・proxy 法) 後処理結果	<p>Band 1 クロロフィル蛍光におけるゼロレベルオフセット導出値、使用波数範囲内輝度最大値、SNR。</p> <p>XCH₄ (proxy 法) とその品質フラグ、計算に用いた XCO₂ (モデル値)。</p> <p>XCO (proxy 法) とその品質フラグ。</p> <p>地表面気圧差、H₂O バンド間比、CO₂ バンド間比、CH₄ バンド間比。</p>
FTS-2 L1B プロダクトから転記	<p>FTS-2 観測時刻、観測点ごとの品質フラグ、IMC 安定度フラグ、欠損有無フラグ、飽和フラグ、スパイク判定フラグ、走査速度安定性フラグ、インタフェログラム品質フラグ、スペクトル品質フラグ、ヨーステアリングフラグ</p>
FTS-2 L2 事前処理 処理結果より転記	<p>FTS-2 偏光成分別 2 μm 帯雲判定に使用したノイズレベルで規格化した輝度の平均値。</p>

* サブバンドとは、導出処理で使用する観測輝度スペクトルの個々の波数範囲を指す。

4. FTS-2 SWIR L2 処理アルゴリズム

4.1 アルゴリズムの概要

FTS-2 SWIR L2 処理からは、FTS-2 SWIR L2 クロロフィル蛍光・proxy 法プロダクトと FTS-2 SWIR L2 カラム平均気体濃度プロダクトが得られる。

FTS-2 SWIR L2 クロロフィル蛍光・proxy 法プロダクトは、雲・エアロソルが存在しないという仮定のもと、限定した波数範囲の観測輝度スペクトルを用いて推定対象物理量を導出した結果をまとめたものである。使用する波数範囲は FTS-2 SWIR 3 バンドから 2 通りずつの計 6 通りであり、それぞれの導出処理は独立に実施される。これら 6 種類の導出処理を総称して『導出処理 (SIF・proxy 法)』と呼ぶ。FTS-2 Band 1 からは酸素の吸収の影響のない波数域に存在する Fraunhofer 線を利用したクロロフィル蛍光輝度推定、酸素の吸収帯を利用した地表面気圧推定を、FTS-2 Band 2 からは CO₂ の 1.6 μm 帯と CH₄ の 1.67 μm 帯からそれぞれ CO₂, H₂O と CH₄, H₂O のカラム平均気体濃度を、FTS-2 Band 3 からは CO₂ の 2.08 μm 帯と CO の 2.3 μm 帯からそれぞれ CO₂, H₂O と CO, CH₄, H₂O のカラム平均気体濃度を求める。クロロフィル蛍光輝度推定では、陸域植生が光合成の際に発する太陽光励起クロロフィル蛍光 (solar-induced chlorophyll fluorescence; SIF) により太陽光の Fraunhofer 線の深さが変化する性質を用いて SIF を推定する (Frankenberg et al., 2011b)。しかしながら、衛星観測スペクトルによる Fraunhofer 線の深さの変化量 (filling-in signal; FS) には SIF のみならず、観測装置特性の誤差等に起因する信号 (undesirable signal; US) が含まれるため、SIF を得るには FS から US を差し引く必要がある (以下、クロロフィル蛍光輝度補正)。US は雪氷域や裸地等といった SIF がないとみなせる領域における FS の推定結果から評価する。US が時間変化する可能性を考慮し、その評価に必要なデータ数を確保するために最低限必要な時間間隔としてクロロフィル蛍光輝度補正処理は月単位で実施することとする。クロロフィル蛍光輝度推定以外の残りの導出処理では地球大気の吸収帯の観測スペクトルを利用する。雲・エアロソル無を仮定しているため、導出されたカラム平均気体濃度には光路長変動の影響が含まれており、仮にモデル計算等で比較的精度よくカラム平均濃度が得られる気体があるならば、導出値と比較することで光路長変動の度合いを評価することができる。雲・エアロソルが多少存在していたとしても、光路長変動の度合いは波長が近ければ同程度であると考えられるため、評価した光路長変動の度合いを別の気体のカラム平均濃度導出結果に含まれる光路長変動の影響の補正に利用することが可能であり、これを proxy 法と呼ぶ。従前研究では、CO₂ の 1.6 μm 帯と CH₄ の 1.67 μm 帯からそれぞれ導出した XCO₂, XCH₄ と XCO₂ のモデル計算値を利用した proxy 法による XCH₄ の結果が多く示されている (Frankenberg et al., 2011a, Parker et al., 2011, etc.)。また、雲・エアロソル無を仮定して得られた地表面気圧の導出値と先験値との違いや、異なる波長帯から導出した同一気体のカラム平均

濃度の違いも、雲・エアロソルによる光路長変動の指標となることが期待される。これは FTS-2 自身による雲・エアロソル情報として有用であり、観測時刻・視線方向に違いが生じうる CAI-2 による雲情報と合わせて利用することで FTS-2 視野内状況のより深い理解に繋がる。これらの点を考慮し、FTS-2 SWIR L2 クロロフィル蛍光・proxy 法プロダクトには、全ての FTS-2 SWIR 観測事例に対する処理結果を格納する。

その一方で、FTS-2 SWIR L2 カラム平均気体濃度プロダクトは複数の波長帯を一度に利用し、雲・エアロソル等を考慮に入れて複数気体 (CO_2 , CH_4 , H_2O , CO) のカラム平均濃度を同時推定した結果である。この導出処理を光路長変動の扱い方にちなみ『導出処理 (full-physics 法)』と呼ぶ。full-physics 法とは、雲・エアロソルによる光路長変動をフォワードモデル内で大気中の散乱過程として扱う手法のことである。proxy 法と異なり、full-physics 法では導出対象気体に制約はつかないというメリットがあるものの、proxy 法に比べて雲・エアロソルに起因する光路長変動の影響を受けやすいというデメリットがある。そのため、雲・エアロソルの影響が大きい観測事例は導出処理 (full-physics 法) の処理対象から外し、処理対象となった観測事例のうち収束した観測事例のみを FTS-2 SWIR L2 カラム平均気体濃度プロダクトに格納する。

なお、両導出処理は使用する観測輝度スペクトルの波数範囲、推定対象物理量、および、処理の前提となる仮定が異なるものの、これらの違いは全て導出処理に対する処理条件の違いとして取扱い、導出処理としては同一の手法 (maximum a posteriori (MAP) 解析法, Rodgers, 2000) を用いる。

処理単位の違いから、FTS-2 SWIR L2 処理を導出処理部とそれぞれの後処理部に分けて取り扱う。導出処理部の概略フローを図 4.1-1 に、後処理部 (クロロフィル蛍光・proxy 法) の概略フローを図 4.1-2 に、後処理部 (カラム平均気体濃度) の概略フローを図 4.1-3 にそれぞれ示す。

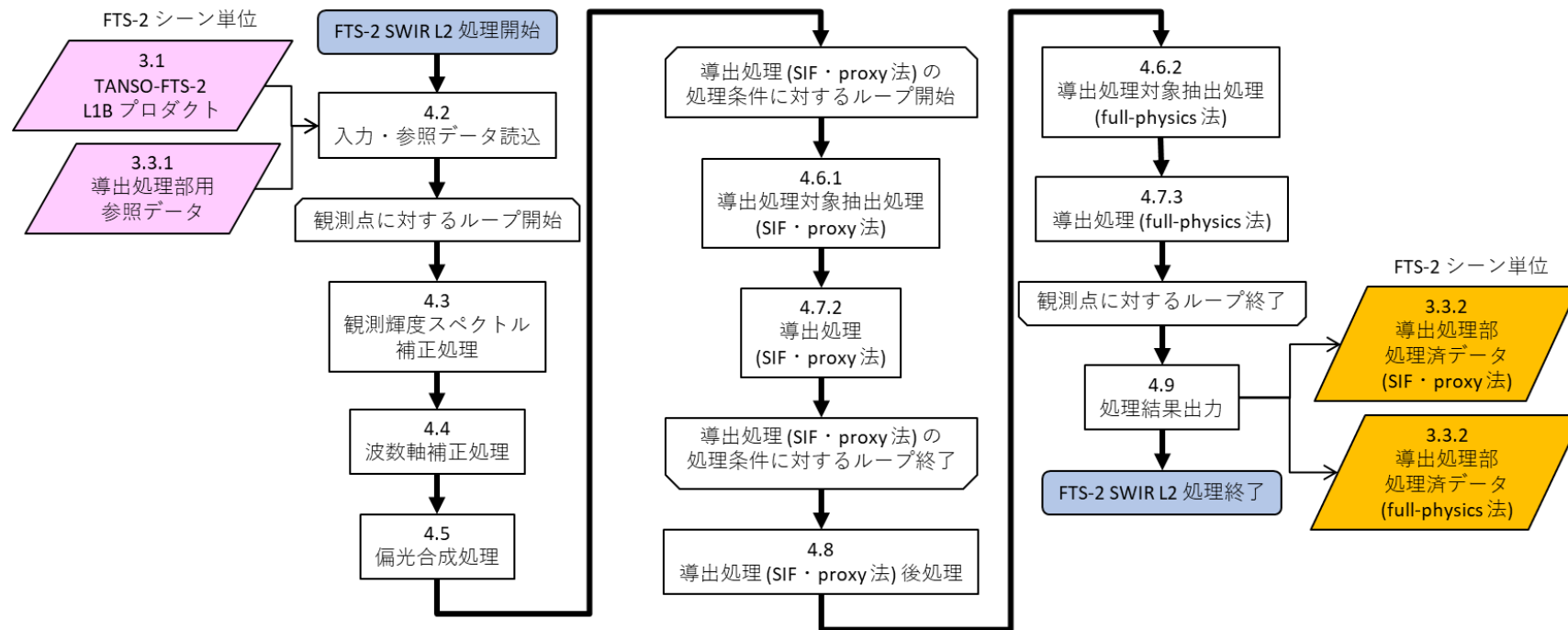


図 4.1-1 FTS-2 SWIR L2 処理 導出処理部の概略フロー。FTS-2 L1B プロダクトのシーン単位で処理が行われる。

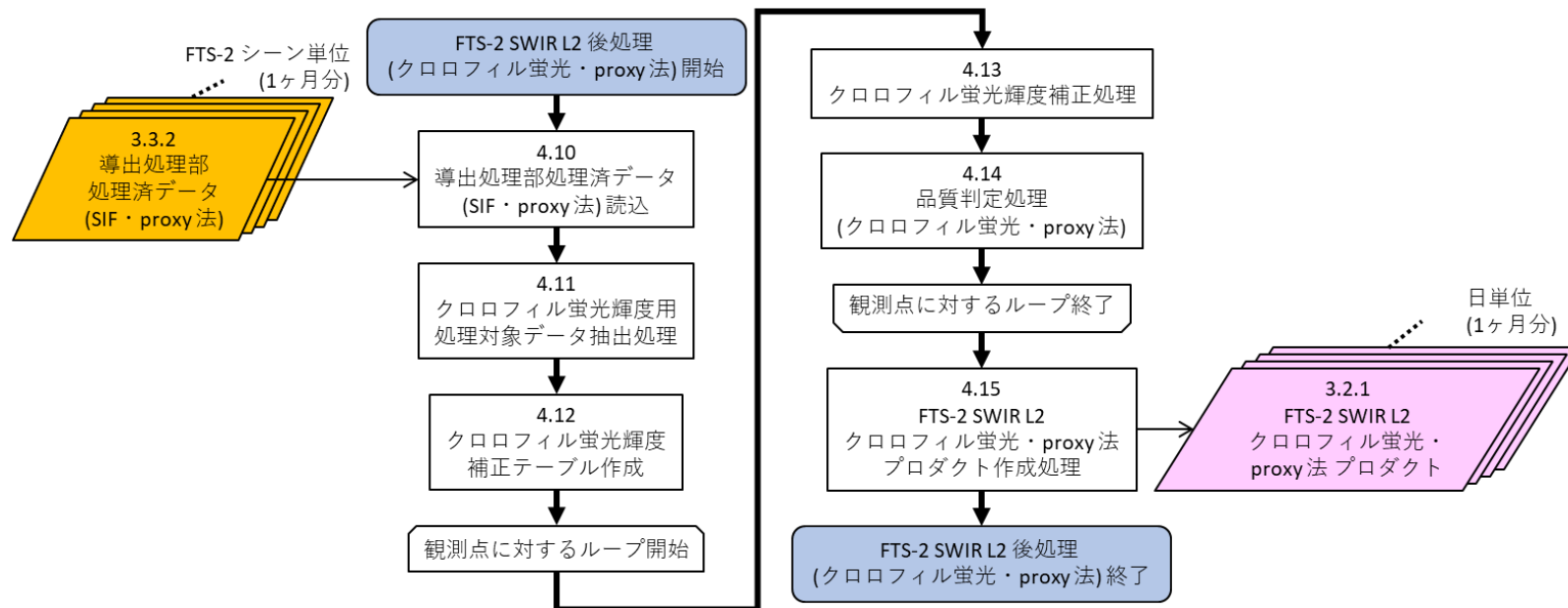


図 4.1-2 FTS-2 SWIR L2 処理 後処理部 (クロロフィル蛍光・proxy 法) の概略フロー。月単位で処理が行われ、日別の SWIR L2 プロダクトが作成される。

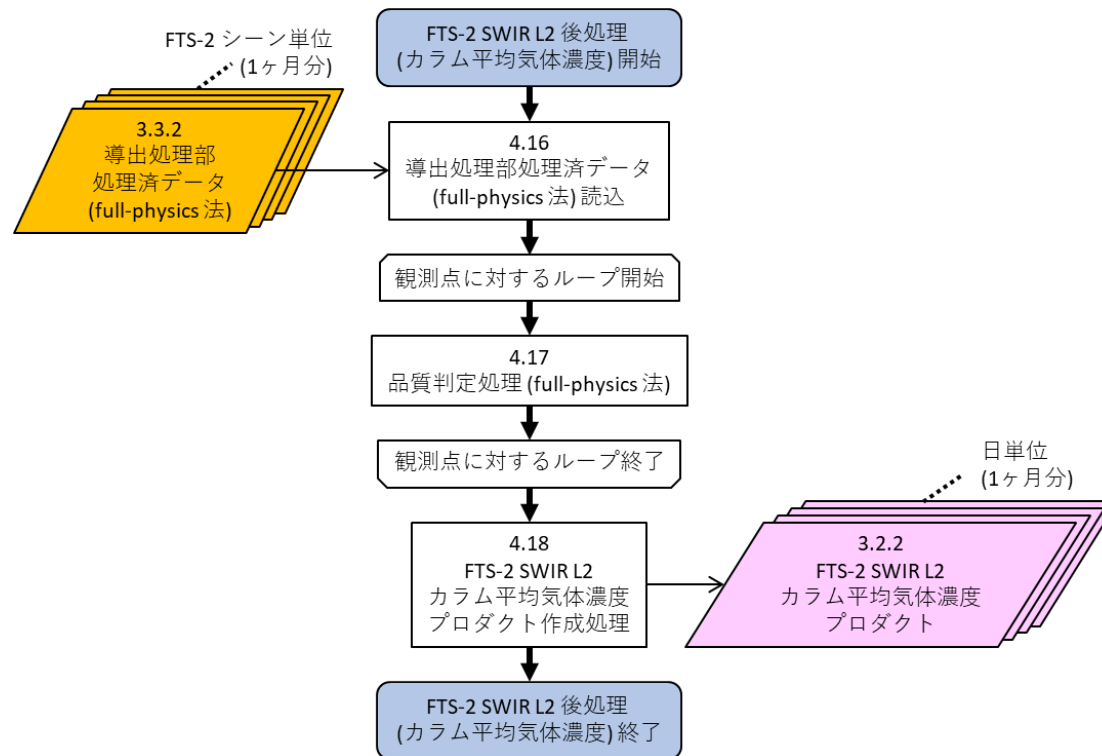


図 4.1-3 FTS-2 SWIR L2 処理 後処理部 (カラム平均気体濃度) の概略フロー。月単位で処理が行われ、日別の SWIR L2 プロダクトが作成される。

4.2 入力・参照データ読込

3.1 節に示した入力データ (FTS-2 L1B プロダクト)、および、3.3.1 項に示した参照データを読み込む。

4.3 観測輝度スペクトル補正処理

FTS-2 SWIR 観測輝度スペクトルの輝度値に対し必要な補正を行う。FTS-2 では TANSO-FTS Band 2S に見られたようなチャネリングの発生は確認されていないため、感度劣化補正のみを実施する。便宜上、補正前の観測輝度スペクトルを $S_0(\nu)$ 、補正後の観測輝度スペクトルを $S_{corr}(\nu)$ と表す。ここで ν は波数である。

4.3.1 感度劣化補正

衛星打上後、FTS-2 の感度は経年変化することが想定される。軌道上で取得した太陽照度校正データや月校正データ、定期的に行われる代替校正により評価された感度変化データを用いて観測輝度の補正を行う。衛星打上後、最初の感度変化評価結果が得られるまでは、打上前から感度変化がないものとして扱う。

FTS-2 の感度変化は基準日 (2019.02.05) からの経過日数 t [day] に対する関数で表されており、2019.04.23 に最初の評価結果が JAXA から提示され、その後 2019.08.01, 2020.05.25 に改訂が行われた (図 4.3.1-1 参照)。改訂に応じて感度劣化モデルに改良が加えられており、2020.05.25 版では感度劣化が式 (4.3.1-1) で表され、式 (4.3.1-2) を用いて補正される。式中の係数 $a_1, a_2, a_3, a_4, d, e, f$ の値は表 3.3.1-1 に示す FTS-2 SWIR 装置特性で与えられる。なお、2020.05.25 版において、2019.07.12 に実施された FTS-2 の温度設定変更に伴う感度変化のギャップ (Suto et al., 2021) が取り入れられた。

$$C_{degradation}(\nu, t) = (a_1 + a_2 \cdot \nu + a_3 \cdot \nu^2 + a_4 \cdot \nu^3) \cdot \left[d + e \cdot \exp\left(-\frac{t}{f}\right) \right] \quad (4.3.1-1)$$

$$S_{corr}(\nu) = \frac{S_0(\nu)}{C_{degradation}(\nu, t)} \quad (4.3.1-2)$$

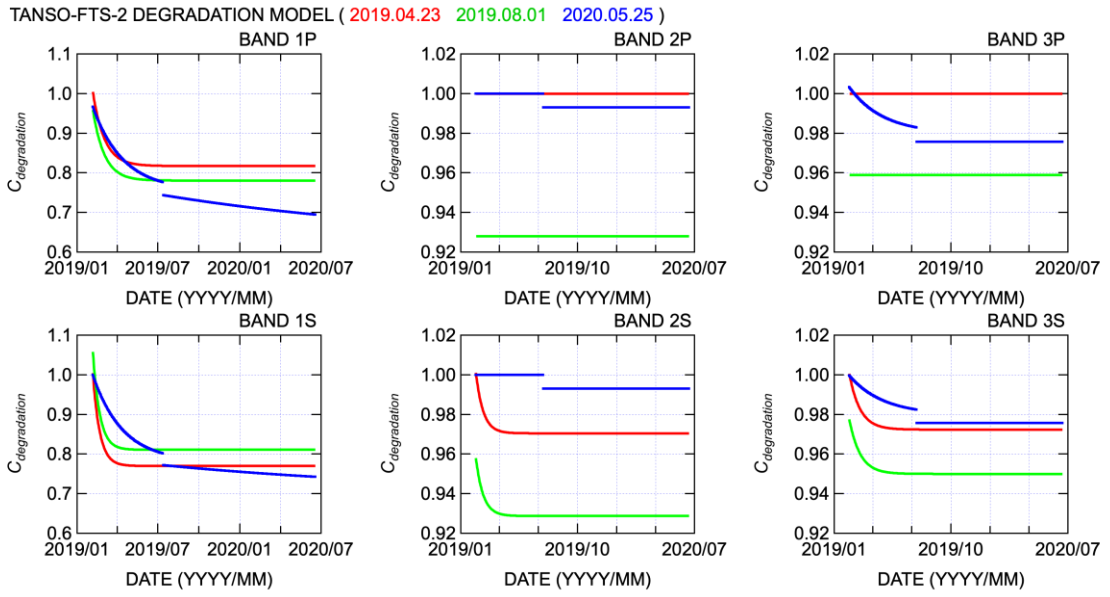


図 4.3.1-1 TANSO-FTS-2 感度劣化モデル。

4.4 波数軸補正

FTS-2 L1B プロダクトに格納されているスペクトルデータの開始波数・波数間隔はノミナル値であり、実際にはセルフアポダイゼーションやサンプリングレーザ波長の温度依存性、FTS-2 のアライメントずれによって観測毎に若干変動することが想定されるため、その補正を行う。

フーリエ変換分光計の波数軸は波数間隔 $\Delta\nu$ の整数倍として定義される。FTS-2 L1B プロダクトに格納されているノミナルな波数間隔 $\Delta\nu_0$ と実際の波数間隔 $\Delta\nu_{cor}$ とは補正係数 ρ を用いて式 (4.4-1) で関係づけられるため、観測輝度スペクトルの波数軸は FTS-2 L1B プロダクトに格納されている開始波数 ν_s を用いて式 (4.4-2) で与えられる。

$$\Delta\nu_{cor} = \rho \cdot \Delta\nu_0 \quad (4.4-1)$$

$$\nu_{cor,i} = \rho \cdot [\nu_s + (i-1) \cdot \Delta\nu_0] \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (4.4-2)$$

補正係数 ρ は FTS-2 L1B プロダクトに格納されている観測輝度スペクトル S_{obs} と計算で求めた参照輝度スペクトル S_{ref} の相互相関係数 $C(\rho)$ を極大とする値として golden section search 法により反復計算によりバンド毎に求める。この際、表 2.1-1 で示された波数範囲の観測輝度スペクトルデータを使用する。

$$C(\rho) = \sum_{i=i_{sta}}^{i_{end}} [S_{ref,P}(\nu_{sat,i}) \cdot S_{obs,P}(\nu_{cor,i}) + S_{ref,S}(\nu_{sat,i}) \cdot S_{obs,S}(\nu_{cor,i})] \quad (4.4-3)$$

ここで、添字の P, S は各偏光成分を表す。 i_{sta}, i_{end} はそれぞれ波数範囲の始点・終点に対応する要素を表す。

参照輝度スペクトル S_{ref} は単色輝度スペクトル I を FTS-2 の装置関数 ILS で畳込み積分することで得られる。装置関数は表 3.3.1-1 に示す FTS-2 SWIR 装置特性で与えられる。

$$\begin{aligned} S_{ref,P/S}(\nu_{sat,i}) &= ILS_{P/S}(\nu_{sat,i}, \nu) \otimes I(\nu) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} ILS_{P/S}(\nu_{sat,i} - \nu) \cdot I(\nu) d\nu \\ &= \sum_{j=-N_w}^{N_w} ILS_{P/S,i}(-j \cdot \delta\nu) \cdot I(\nu_{sat,i} + j \cdot \delta\nu) \end{aligned} \quad (4.4-4)$$

$$\begin{aligned}
& ILS_{P/S,i}(-j \cdot \delta\nu) \\
&= \frac{V_{END} - V_{sat,i}}{V_{END} - V_{STA}} \cdot ILS_{P/S,V_{STA}}(-j \cdot \delta\nu) + \frac{V_{sat,i} - V_{STA}}{V_{END} - V_{STA}} \cdot ILS_{P/S,V_{END}}(-j \cdot \delta\nu)
\end{aligned} \tag{4.4-5}$$

ここで、 \otimes は畳込み積分を表す。 $\delta\nu$ は畳込み積分を数値的に実行する際の波数刻みであり、 $\Delta\nu_0 = n_w \cdot \delta\nu$ (n_w は整数値) を満たす 0.01 cm^{-1} に最も近い値とする。整数値 N_w は畳込み積分の積分範囲 $N_w \cdot \delta\nu$ がおおよそ 20 cm^{-1} となるように指定する。 V_{STA} , V_{END} は装置関数が提供されている波数点のうち、それぞれ $v_{STA} \leq V_{sat,ista}$, $V_{sat,iend} \leq V_{END}$ を満たす $v_{sat,ista}$, $v_{sat,iend}$ に最も近い波数点を表す。

単色輝度スペクトル I は FTS-2 L2 事前処理で求めた太陽天頂角 θ_0 、衛星天頂角 θ_1 、太陽に対するドップラー速度 $v_{dop,sun}$ 、衛星に対するドップラー速度 $v_{dop,sat}$ と FTS-2 L1B プロダクトに格納されている太陽-観測点間距離 $D_{sun-obs}$ [AU] を用いて以下のように計算する。

$$I(v_{sat,k}) = \frac{F_0(v_{sun,k})}{D_{sun-obs}^2} \cdot \exp\left[-\left(\frac{1}{\cos\theta_0} + \frac{1}{|\cos\theta_1|}\right) \cdot \tau(v_{srf,k})\right] \tag{4.4-6}$$

$$v_{sat,k} = \left(1 + \frac{v_{dop,sat}}{c}\right) \cdot v_{srf,k} \tag{4.4-7}$$

$$v_{sun,k} = \left(1 - \frac{v_{dop,sun}}{c}\right) \cdot v_{srf,k} \tag{4.4-8}$$

ここで、添字 k は単色輝度スペクトルに対応する要素を表す。

F_0 は太陽から 1 天文単位離れた地点における太陽照度であり (表 3.3.1-1)、太陽照度データから 4 点 Lagrange 補間 (式 4.4-9) をして求める。また、 τ は表 3.3.1-1 に示す参照スペクトル用光学的厚さである。式 (4.4-4) の畳込み積分の際には、式 (4.4-6) で計算された単色輝度スペクトルを 4 点 Lagrange 補間 (式 4.4-9) することで求める。

$$\begin{aligned}
I(\nu) = & \frac{(\nu - \nu_k) \cdot (\nu - \nu_{k+1}) \cdot (\nu - \nu_{k+2})}{(\nu_{k-1} - \nu_k) \cdot (\nu_{k-1} - \nu_{k+1}) \cdot (\nu_{k-1} - \nu_{k+2})} \cdot I(\nu_{k-1}) \\
& + \frac{(\nu - \nu_{k-1}) \cdot (\nu - \nu_{k+1}) \cdot (\nu - \nu_{k+2})}{(\nu_k - \nu_{k-1}) \cdot (\nu_k - \nu_{k+1}) \cdot (\nu_k - \nu_{k+2})} \cdot I(\nu_k) \\
& + \frac{(\nu - \nu_{k-1}) \cdot (\nu - \nu_k) \cdot (\nu - \nu_{k+2})}{(\nu_{k+1} - \nu_{k-1}) \cdot (\nu_{k+1} - \nu_k) \cdot (\nu_{k+1} - \nu_{k+2})} \cdot I(\nu_{k+1}) \\
& + \frac{(\nu - \nu_{k-1}) \cdot (\nu - \nu_k) \cdot (\nu - \nu_{k+1})}{(\nu_{k+2} - \nu_{k-1}) \cdot (\nu_{k+2} - \nu_k) \cdot (\nu_{k+2} - \nu_{k+1})} \cdot I(\nu_{k+2})
\end{aligned} \tag{4.4-9}$$

ここで、 $I(\nu_k)$ は太陽照度データもしくは単色輝度スペクトルを、 ν_k は対応する波数軸を表し、 $\nu_k \leq \nu \leq \nu_{k+1}$ を満たす波数点 4 点から計算する。

4.5 偏光合成処理

偏光を考慮した放射伝達計算は計算コストが大きいため、フォワードモデルにおいて偏光を扱わない放射伝達コードを用いる。そのため、偏光二成分の観測輝度スペクトルから FTS-2 に入射する全放射輝度スペクトルを算出しておく。

FTS-2 で観測される光のストークスペクトル $\mathbf{I}_{P/S}$ は走査鏡における反射、後置光学系の効率、偏光ビームスプリッタの特性を表すミュラー行列と偏光基準面の回転行列と FTS-2 に入射する光のストークスペクトル \mathbf{I}_m を用いて以下のように表される。P, S 偏光の観測輝度スペクトル、および FTS-2 に入射する全放射輝度スペクトルはそれぞれ $\mathbf{I}_{P/S}$, \mathbf{I}_m の第一成分である。なお、ミュラー行列とストークスペクトルは波数の関数であるが、以下では省略してある。

$$\mathbf{I}_P = \mathbf{M}_{BS,P} \cdot \mathbf{M}_{opt} \cdot \mathbf{L}(\theta_{PM-DET}) \cdot \mathbf{M}_{phase}(\theta_{in}) \cdot \mathbf{M}_{PM}(\theta_{in}) \cdot \mathbf{L}(\theta_{RT-PM}) \cdot \mathbf{I}_m \quad (4.5-1)$$

$$\mathbf{I}_S = \mathbf{M}_{BS,S} \cdot \mathbf{M}_{opt} \cdot \mathbf{L}(\theta_{PM-DET}) \cdot \mathbf{M}_{phase}(\theta_{in}) \cdot \mathbf{M}_{PM}(\theta_{in}) \cdot \mathbf{L}(\theta_{RT-PM}) \cdot \mathbf{I}_m \quad (4.5-2)$$

$$\mathbf{L}(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos 2\theta & \sin 2\theta & 0 \\ 0 & -\sin 2\theta & \cos 2\theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.5-3)$$

$$\mathbf{M}_{PM}(\theta) = \begin{pmatrix} M_{PM,1}(\theta) & M_{PM,2}(\theta) & 0 & 0 \\ M_{PM,2}(\theta) & M_{PM,1}(\theta) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M_{PM,3}(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & M_{PM,3}(\theta) \end{pmatrix} \quad (4.5-4)$$

$$\begin{cases} M_{PM,1}(\theta) = \frac{R_{//}(\theta) + R_{\perp}(\theta)}{2} \\ M_{PM,2}(\theta) = \frac{R_{//}(\theta) - R_{\perp}(\theta)}{2} \\ M_{PM,3}(\theta) = \sqrt{R_{//}(\theta) \cdot R_{\perp}(\theta)} \end{cases} \quad (4.5-5)$$

$$\mathbf{M}_{phase}(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \delta(\theta) & \sin \delta(\theta) \\ 0 & 0 & -\sin \delta(\theta) & \cos \delta(\theta) \end{pmatrix} \quad (4.5-6)$$

$$\begin{cases} R_{//}(\theta) = r_{//}(\theta) \cdot r_{//}(\theta) \\ R_{\perp}(\theta) = r_{\perp}(\theta) \cdot r_{\perp}(\theta) \\ \delta(\theta) = \tan^{-1} \left\{ \frac{\text{Im}[r_{//}(\theta) \cdot r_{\perp}(\theta)]}{\text{Re}[r_{//}(\theta) \cdot r_{\perp}(\theta)]} \right\} \end{cases} \quad (4.5-7)$$

$$\begin{cases} r_{//}(\theta) = \frac{m^2 \cdot \cos \theta - \sqrt{m^2 - \sin^2 \theta}}{m^2 \cdot \cos \theta + \sqrt{m^2 - \sin^2 \theta}} \\ r_{\perp}(\theta) = \frac{\cos \theta - \sqrt{m^2 - \sin^2 \theta}}{\cos \theta + \sqrt{m^2 - \sin^2 \theta}} \end{cases} \quad (4.5-8)$$

$$\mathbf{M}_{BS,P} \cdot \mathbf{M}_{opt} = W_P \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.5-9)$$

$$\mathbf{M}_{BS,S} \cdot \mathbf{M}_{opt} = W_S \cdot \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.5-10)$$

$$\mathbf{I} = \begin{pmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{pmatrix} \quad (4.5-11)$$

ここで、 θ_{RT-PM} は放射伝達基準面とスキャンミラー反射基準面とのなす角、 θ_m はスキャンミラーに対する入射角、 θ_{PM-DET} はスキャンミラー反射基準面と FTS-2 検出器基準面のなす角で表 3.3.1-1 に示す FTS-2 L2 事前処理 処理結果で与えられる。また、 m は走査鏡の複素屈折率、 W_P 、 W_S は後置光学系の効率で、表 3.3.1-1 に示す FTS-2 SWIR 装置特性で与えられる。

式 (4.5-1)、(4.5-2) を整理すると、P、S 偏光成分の観測輝度スペクトルはそれぞれ式 (4.5-12)、(4.5-13) で与えられる。

$$S_P = ILS_{P,i} \otimes (A_P \cdot I_{in} + B_P \cdot Q_{in} + C_P \cdot U_{in} + D_P \cdot V_{in}) \quad (4.5-12)$$

$$S_S = ILS_{S,i} \otimes (A_S \cdot I_{in} + B_S \cdot Q_{in} + C_S \cdot U_{in} + D_S \cdot V_{in}) \quad (4.5-13)$$

$$A_P = W_P \cdot [R_{//}(\theta_{in}) \cdot \cos^2 \theta_{PM-DET} + R_{\perp}(\theta_{in}) \cdot \sin^2 \theta_{PM-DET}] \quad (4.5-14)$$

$$B_P = W_P \cdot [R_{//}(\theta_{in}) \cdot \cos^2 \theta_{PM-DET} - R_{\perp}(\theta_{in}) \cdot \sin^2 \theta_{PM-DET}] \cdot \cos 2\theta_{RT-PM} \\ - W_P \cdot \sqrt{R_{//}(\theta_{in}) \cdot R_{\perp}(\theta_{in})} \cdot \cos \delta(\theta_{in}) \cdot \sin 2\theta_{PM-DET} \cdot \sin 2\theta_{RT-PM} \quad (4.5-15)$$

$$C_P = W_P \cdot [R_{//}(\theta_{in}) \cdot \cos^2 \theta_{PM-DET} - R_{\perp}(\theta_{in}) \cdot \sin^2 \theta_{PM-DET}] \cdot \sin 2\theta_{RT-PM} \\ + W_P \cdot \sqrt{R_{//}(\theta_{in}) \cdot R_{\perp}(\theta_{in})} \cdot \cos \delta(\theta_{in}) \cdot \sin 2\theta_{PM-DET} \cdot \cos 2\theta_{RT-PM} \quad (4.5-16)$$

$$D_P = W_P \cdot \sqrt{R_{//}(\theta_{in}) \cdot R_{\perp}(\theta_{in})} \cdot \sin \delta(\theta_{in}) \cdot \sin 2\theta_{PM-DET} \quad (4.5-17)$$

$$A_S = W_S \cdot [R_{//}(\theta_{in}) \cdot \sin^2 \theta_{PM-DET} + R_{\perp}(\theta_{in}) \cdot \cos^2 \theta_{PM-DET}] \quad (4.5-18)$$

$$B_S = W_S \cdot [R_{//}(\theta_{in}) \cdot \sin^2 \theta_{PM-DET} - R_{\perp}(\theta_{in}) \cdot \cos^2 \theta_{PM-DET}] \cdot \cos 2\theta_{RT-PM} \\ + W_S \cdot \sqrt{R_{//}(\theta_{in}) \cdot R_{\perp}(\theta_{in})} \cdot \cos \delta(\theta_{in}) \cdot \sin 2\theta_{PM-DET} \cdot \sin 2\theta_{RT-PM} \quad (4.5-19)$$

$$C_S = W_S \cdot [R_{//}(\theta_{in}) \cdot \sin^2 \theta_{PM-DET} - R_{\perp}(\theta_{in}) \cdot \cos^2 \theta_{PM-DET}] \cdot \sin 2\theta_{RT-PM} \\ - W_S \cdot \sqrt{R_{//}(\theta_{in}) \cdot R_{\perp}(\theta_{in})} \cdot \cos \delta(\theta_{in}) \cdot \sin 2\theta_{PM-DET} \cdot \cos 2\theta_{RT-PM} \quad (4.5-20)$$

$$D_S = -W_S \cdot \sqrt{R_{//}(\theta_{in}) \cdot R_{\perp}(\theta_{in})} \cdot \sin \delta(\theta_{in}) \cdot \sin 2\theta_{PM-DET} \quad (4.5-21)$$

2つの観測成分から4つのストークスパラメータを求めるには何らかの仮定が必要となる。大気放射伝達において、ストークスパラメータ V_{in} は十分に小さく無視できる。また、**single-scattering** 近似を用いると、ストークスパラメータの Q_{in}, U_{in} は FTS-2 L2 事前処理で求めた観測光偏光面と放射伝達基準面のなす角 χ_{ss} を用いて式 (4.5-22) のように関係づけられる。

$$\frac{U_{in}}{Q_{in}} = \tan 2\chi_{ss} \quad (4.5-22)$$

以上に加え、P 偏光成分と S 偏光成分の装置関数の違いが無視できるとし、加えて、式 (4.5-14) ~ (4.5-21) の係数 $A_{P/S} \sim D_{P/S}$ の波数依存性が畳込み積分の範囲内で無視できると仮定すると、全強度スペクトル（を装置関数で畳込んだスペクトル）は式 (4.5-23) で求められる。また、対応する観測誤差分散、および SNR はそれぞれ式 (4.5-24)、式

(4.5-27) で求められる。

$$\begin{aligned} S_{synth} &= ILS_i \otimes I_{in} = \frac{(B_S + C_S \cdot \tan 2\chi_{ss}) \cdot S_P - (B_P + C_P \cdot \tan 2\chi_{ss}) \cdot S_S}{(B_S + C_S \cdot \tan 2\chi_{ss}) \cdot A_P - (B_P + C_P \cdot \tan 2\chi_{ss}) \cdot A_S} \\ &= C_{synth,P} \cdot S_P - C_{synth,S} \cdot S_S \end{aligned} \quad (4.5-23)$$

$$\sigma_{synth}^2 = (C_{synth,P} \cdot \sigma_P)^2 + (C_{synth,S} \cdot \sigma_S)^2 \quad (4.5-24)$$

$$\begin{aligned} C_{synth,P/S} &= \frac{B_{S/P} \cdot \cos 2\chi_{ss} + C_{S/P} \cdot \sin 2\chi_{ss}}{(B_S \cdot \cos 2\chi_{ss} + C_S \cdot \sin 2\chi_{ss}) \cdot A_P - (B_P \cdot \cos 2\chi_{ss} + C_P \cdot \sin 2\chi_{ss}) \cdot A_S} \end{aligned} \quad (4.5-25)$$

$$\sigma_{P/S} = \frac{Max(S_{P/S})}{SNR_{P/S}} \quad (4.5-26)$$

$$SNR_{synth} = \frac{Max(S_{synth})}{\sigma_{synth}} \quad (4.5-27)$$

ここで、 $Max(S)$ は観測輝度スペクトル S の帯域内最大値を表す。

なお、式中では波数の表記を省略しているが、後置光学系の効率 w_p, w_s は FTS-2 実機で取得されたデータに基づき作成されているため、波数軸補正未適用の FTS-2 のノミナルな波数軸を用いる。他方、走査鏡の複素屈折率は FTS-2 実機ではなく独立に取得されたデータに基づき作成されているため、波数軸補正適用の波数軸を用いる。波数方向への内挿は、スプライン補間を用いる。

4.6 導出処理対象抽出処理

pre-screening 条件に基づき、各導出処理の対象となる事例を抽出する。処理対象外と識別された場合は、該当する導出処理を実施せず、処理結果には無効値を設定する。なお、下記の pre-screening 条件は、品質評価結果等に基づき適宜変更される。

4.6.1 導出処理対象抽出処理 (SIF・proxy 法)

導出処理 (SIF・proxy 法) の対象となる事例を抽出する。導出処理 (SIF・proxy 法) はクロロフィル蛍光・proxy 法によるカラム平均気体濃度の導出のみならず、光路長変動に関する情報の取得も目的であるため、原則すべての FTS-2 SWIR 観測事例を対象とするが、処理の安定性を考慮し、以下の条件のいずれかに該当する場合には処理対象外とする。

- ・ 導出処理で使用するバンドの欠損有無フラグ (FTS-2 L1B プロダクト : QualityInfo/missingFlag) が "正常" 以外の場合。
- ・ 導出処理で使用するバンドの飽和フラグ (FTS-2 L1B プロダクト : QualityInfo/saturationFlag) が "正常" 以外の場合。
- ・ 導出処理で使用するバンドのインタフェログラム品質フラグ (FTS-2 L1B プロダクト : QualityInfo/interferogramQualityFlag) が "正常" 以外の場合。
- ・ 導出処理で使用するバンドのスペクトル品質フラグ (FTS-2 L1B プロダクト : QualityInfo/spectrumQualityFlag) が "正常" 以外の場合。
- ・ FTS-2 L2 事前処理で計算された太陽天頂角が 80 度を超えている場合。

4.6.2 導出処理対象抽出処理 (full-physics 法)

導出処理 (full-physics 法) の対象となる事例を抽出する。導出処理 (full-physics 法) はカラム平均気体濃度導出のため、雲・エアロソルの影響の少ない良質な FTS-2 SWIR 観測事例を対象とするため、以下の条件のいずれかに該当する場合には処理対象外とする。

- ・ 観測点毎の品質フラグ (FTS-2 L1B プロダクト : QualityInfo/soundingQualityFlag) が "Poor" もしくは "NG" の場合。
- ・ データ無効フラグ (FTS-2 L1B プロダクト : QualityInfo/dataInvalidFlag) が "有効" 以外の場合。
- ・ IMC 安定度フラグ (FTS-2 L1B プロダクト : QualityInfo/IMC_StabilityFlag) が "安定" 以外の場合。
- ・ 走査速度安定性フラグ (FTS-2 L1B プロダクト : QualityInfo/scanStabilityFlag) が "安定" 以外の場合。
- ・ 導出処理で使用するバンドの欠損有無フラグ (FTS-2 L1B プロダクト : QualityInfo/missingFlag) が "正常" 以外の場合。

- ・ 導出処理で使用するバンドの飽和フラグ (FTS-2 L1B プロダクト : QualityInfo/saturationFlag) が "正常" 以外の場合。
- ・ 導出処理で使用するバンドのスパイク判定フラグ (FTS-2 L1B プロダクト : QualityInfo/spikeFlag) が "正常 (スパイクなし)" 以外の場合。
- ・ 導出処理で使用するバンドのインタフェログラム品質フラグ (FTS-2 L1B プロダクト : QualityInfo/interferogramQualityFlag) が "正常" 以外の場合。
- ・ 導出処理で使用するバンドのスペクトル品質フラグ (FTS-2 L1B プロダクト : QualityInfo/spectrumQualityFlag) が "正常" 以外の場合。
- ・ バンド 1 の SNR_{synth} (式 (4.5-27)) が 70 未満の場合。
- ・ FTS-2 L2 事前処理で計算された太陽天頂角が 70 度を超えている場合。
- ・ 式 (4.6.2-1) で計算される FTS-2 視野内陸率 f_{LAND} [%] が 10% より大きく、60% より小さい場合。
- ・ FTS-2 L2 事前処理で計算された CAI-2 L2 雲識別プロダクトによる雲判定結果で雲有だった場合。
- ・ FTS-2 L2 事前処理で計算された FTS-2 偏光成分別 2 μm 帯雲判定結果のいずれかで雲有だった場合。

$$f_{LAND} = \frac{N_{LSmsk_land}}{N_{LSmsk_total}} \cdot 100 \quad (4.6.2-1)$$

ここで、 N_{LSmsk_land} , N_{LSmsk_total} はそれぞれ FTS-2 L2 事前処理で計算された FTS-2 視野内の陸海マスクデータの陸グリッド点数、および、グリッド点総数。

4.7 導出処理

前述したとおり、導出処理 (SIF・proxy 法)、(full-physics 法) はどちらも 4.7.1 項に示す MAP 解析法を用いる。個々の導出処理における観測輝度スペクトルの波数範囲、推定対象物理量といった処理条件を 4.7.2 項にまとめた。また、4.7.3 項には鉛直グリッドについて、4.7.4 項には MAP 解析法で使用するフォワードモデルについて、4.7.5 項には推定対象物理量の先験値、及び、各種光学特性について、4.7.6 項にはヤコビアンについて記載した。

4.7.1 MAP 解析法

MAP 解析法では、推定対象物理量を表すベクトル (state vector) \mathbf{x} の最適値は、式 (4.7.1-1) で表される評価関数 $J(\mathbf{x})$ を最小にすることによって得られる。

$$J(\mathbf{x}) = [\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{c})]^T \cdot \mathbf{S}_\varepsilon^{-1} \cdot [\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{c})] + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)^T \cdot \mathbf{S}_a^{-1} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) \quad (4.7.1-1)$$

ここで、 \mathbf{y} は観測輝度スペクトル、 $\mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{c})$ はフォワードモデル、 \mathbf{c} は state vector に含まれないフォワードモデルの記述に必要な変数、 \mathbf{x}_a は state vector の先験値、 \mathbf{S}_a は先験値に対する分散・共分散行列、 \mathbf{S}_ε は観測誤差とフォワードモデルに対する分散・共分散行列を表す。

FTS-2 SWIR L2 処理では、解 \mathbf{x} に制約条件

$$\mathbf{x}_{\min} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{x}_{\max} \quad (4.7.1-2)$$

を課した上で、式 (4.7.1-3) で表される Levenberg-Marquardt 法による解を反復計算によって求める。なお、FTS-2 SWIR L2 処理では、中川・小柳 (1982) を参考として、種々の工夫を取り入れている。

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + (\mathbf{K}_i^T \cdot \mathbf{S}_\varepsilon^{-1} \cdot \mathbf{K}_i + \mathbf{S}_a^{-1} + \lambda \cdot \mathbf{D}^2)^{-1} \cdot \{\mathbf{K}_i^T \cdot \mathbf{S}_\varepsilon^{-1} \cdot [\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}_i)] - \mathbf{S}_a^{-1} \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_a)\} \quad (4.7.1-3)$$

ここで、添字 i は反復回数、 $\mathbf{K} = \partial \mathbf{F}(\mathbf{x}) / \partial \mathbf{x}$ はヤコビアン、 \mathbf{D} は安定化のための対角行列、 λ は反復の各ステップで評価関数が減少するようにその値が調整される係数を表す。

実際には式 (4.7.1-3) を直接計算せずに、 \mathbf{S}_ε と \mathbf{S}_a の Cholesky 分解 (式 (4.7.1-6), (4.7.1-7)) を用いて式 (4.7.1-4), (4.7.1-5) のように変形し、LAPACK の DGELSS を用

いて $\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_a$ に関して解く。なお、係数 λ の初期値はゼロとし、以降は式 (4.7.1-5) を計算するたびに後述の方法で更新する。

$$\begin{aligned} & (\mathbf{K}_i^T \cdot \mathbf{S}_\varepsilon^{-1} \cdot \mathbf{K}_i + \mathbf{S}_a^{-1} + \lambda \cdot \mathbf{D}^2) \cdot (\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_a) \\ &= \mathbf{K}_i^T \cdot \mathbf{S}_\varepsilon^{-1} \cdot [\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}_i) + \mathbf{K}_i \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_a)] + \lambda \cdot \mathbf{D}^2 \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_a) \end{aligned} \quad (4.7.1-4)$$

$$\begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{K}}_i \\ \mathbf{T}_{ainv} \\ \sqrt{\lambda} \mathbf{D} \end{pmatrix} \cdot (\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_a) = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{y}}_i + \tilde{\mathbf{K}}_i \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_a) \\ 0 \\ \sqrt{\lambda} \cdot \mathbf{D} \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_a) \end{pmatrix} \quad (4.7.1-5)$$

$$\mathbf{S}_\varepsilon = \mathbf{T}_\varepsilon^T \cdot \mathbf{T}_\varepsilon \quad (4.7.1-6)$$

$$\mathbf{S}_a^{-1} = \mathbf{T}_{ainv}^T \cdot \mathbf{T}_{ainv} \quad (4.7.1-7)$$

$$\mathbf{D}^2 = \text{diag}(\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A}) \quad (4.7.1-8)$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{K}}_i \\ \mathbf{T}_{ainv} \end{pmatrix} \quad (4.7.1-9)$$

$$\tilde{\mathbf{y}}_i = \mathbf{T}_\varepsilon^{-T} \cdot [\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}_i)] \quad (4.7.1-10)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_i = \mathbf{T}_\varepsilon^{-T} \cdot \mathbf{K}_i \quad (4.7.1-11)$$

式 (4.7.1-2) の制約条件のもとで反復計算による state vector の更新を行うにあたり、収束の安定化のため、解の変化量に対して信頼領域法を適用し、評価関数 (式 (4.7.1-1)) が減少するよう係数 λ の値を調整する。

まず、式 (4.7.1-2) の制約条件を満たす解を求める。式 (4.7.1-5) を解いて得られる $\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_a$ から計算される修正ベクトルを $\Delta \mathbf{x}_1$ 、式 (4.7.1-2) の制約条件を満たすよう縮小因子 α を用いてスケーリングした修正ベクトルを $\Delta \mathbf{x}_2$ とする。

$$\Delta \mathbf{x}_1 = (\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_a) + \mathbf{x}_a - \mathbf{x}_i \quad (4.7.1-12)$$

$$\Delta \mathbf{x}_2 = \alpha \cdot \Delta \mathbf{x}_1 \quad (4.7.1-13)$$

縮小因子 α を以下の手順で求める。 α の決定にあたり、state vector \mathbf{x} の各要素 $x(j)$ を \mathbf{x}_E と \mathbf{x}_S の 2 つの組に分類する。ここで、 \mathbf{x}_E は式 (4.7.1-2) の制約条件を等式の意味で満たし、 \mathbf{x}_S は不等式の意味で満たすことを表す。下記の手順は α を決定しなおす

度を実施する。

- (1) 全ての変数が \mathbf{x}_S の組に属しているものとする。
- (2) 式 (4.7.1-5) を解き、式 (4.7.1-12) を計算する。
- (3) \mathbf{x}_S に属し、かつ、 $x(j) + \Delta x_1(j) < x_{\min}(j)$ となる全ての state vector 要素 $x(j)$ に対して ($\Delta x_1(j) < 0$)、 $x(j) + \alpha_1 \cdot \Delta x_1(j) \geq x_{\min}(j)$ を満たす最大の正数 $\alpha_1 (< 1)$ を求める。
- (4) \mathbf{x}_S に属し、かつ、 $x(j) + \Delta x_1(j) > x_{\max}(j)$ となる全ての state vector 要素 $x(j)$ に対して ($\Delta x_1(j) > 0$)、 $x(j) + \alpha_2 \cdot \Delta x_1(j) \leq x_{\max}(j)$ を満たす最大の正数 $\alpha_2 (< 1)$ を求める。
- (5) $\alpha = \min(\alpha_1, \alpha_2)$ とし、 α に対応する state vector 要素を \mathbf{x}_E の組へ移動する。
- (6) $\alpha = 0$ となった場合、 \mathbf{x}_S の組の中に \mathbf{x}_E の組に属すべき要素が含まれていたことを意味する。この場合には、 α を与える state vector 要素に対応する Jacobian 行列の列をゼロに置き換え、(2) に戻る。
- (7) 得られた正数 α を用いて、式 (4.7.1-13) を計算する。

係数 λ を更新する方法を説明する。式 (4.7.1-3) は式 (4.7.1-14) ~ 式 (4.7.1-16) のように変形できる。ここで、式 (4.7.1-19) は行列 $\mathbf{A} \cdot \mathbf{D}^{-1}$ の特異値分解を表す。

$$(\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A} + \lambda \cdot \mathbf{D}^2) \cdot \Delta \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (4.7.1-14)$$

$$\left[(\mathbf{A} \cdot \mathbf{D}^{-1})^T \cdot (\mathbf{A} \cdot \mathbf{D}^{-1}) + \lambda \cdot \mathbf{I} \right] \cdot \mathbf{D} \cdot \Delta \mathbf{x} = \mathbf{D}^{-1} \cdot \mathbf{b} \quad (4.7.1-15)$$

$$(\mathbf{\Lambda}^2 + \lambda \cdot \mathbf{I}) \cdot \mathbf{V}^T \cdot \mathbf{D} \cdot \Delta \mathbf{x} = \mathbf{V}^T \cdot \mathbf{D}^{-1} \cdot \mathbf{b} \quad (4.7.1-16)$$

$$\mathbf{b} = \tilde{\mathbf{K}}_i^T \cdot \tilde{\mathbf{y}}_i - \mathbf{S}_a^{-1} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) \quad (4.7.1-17)$$

$$\Delta \mathbf{x} = \mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i \quad (4.7.1-18)$$

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{D}^{-1} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{V}^T \quad (4.7.1-19)$$

式 (4.7.1-16) より、 $\mathbf{V} \cdot \mathbf{V}^T = \mathbf{I}$ であることを利用すると、解の変化量 $|\mathbf{D} \cdot \Delta \mathbf{x}|$ は式 (4.7.1-20) のように表される。

$$|\mathbf{D} \cdot \Delta \mathbf{x}| = |\mathbf{V}^T \cdot \mathbf{D} \cdot \Delta \mathbf{x}| = \left| (\mathbf{\Lambda}^2 + \lambda \cdot \mathbf{I})^{-1} \cdot \mathbf{V}^T \cdot \mathbf{D}^{-1} \cdot \mathbf{b} \right| \quad (4.7.1-20)$$

解の変化量に対する信頼領域の半径を δ とすると、

$$|\mathbf{D} \cdot \Delta \mathbf{x}_2| = \left| (\mathbf{\Lambda}^2 + \lambda \cdot \mathbf{I})^{-1} \cdot \mathbf{V}^T \cdot \mathbf{D}^{-1} \cdot \mathbf{b} \right| \leq \delta \quad (4.7.1-21)$$

を満たす最小の $\lambda (\geq 0)$ を、式 (4.7.1-21) から数値的に求めることができる。ここで、 δ の初期値は、式 (4.7.1-5) を最初に解いて得られた解を用いて、式 (4.7.1-22) の右辺を計算した値とする。

$$\delta = |\mathbf{D} \cdot \Delta \mathbf{x}_1| \quad (4.7.1-22)$$

こうして得られた修正ベクトル $\Delta \mathbf{x}_2$ を用いて解 \mathbf{x}_i を更新し、次の反復計算のステップに進む前に、フォワードモデルの非線形性の影響を評価し、信頼領域の半径 δ を更新する。ここで、式 (4.7.1-23) で表されるパラメータ r を考える。

$$r = \frac{J(\mathbf{x}_i + \Delta \mathbf{x}_2) - J(\mathbf{x}_i)}{J'(\mathbf{x}_i + \Delta \mathbf{x}_2) - J(\mathbf{x}_i)} = \frac{J(\mathbf{x}_i + \Delta \mathbf{x}_2) - J(\mathbf{x}_i)}{-\Delta \mathbf{x}_2^T \cdot (\tilde{\mathbf{K}}_i^T \cdot \tilde{\mathbf{K}}_i + \mathbf{S}_a^{-1} + 2 \cdot \lambda \cdot \mathbf{D}^2) \cdot \Delta \mathbf{x}_2} \quad (4.7.1-23)$$

ここで、 $J'(\mathbf{x}_i + \Delta \mathbf{x}_2)$ はフォワードモデルが線形 ($\mathbf{F}(\mathbf{x}_i + \Delta \mathbf{x}_2) = \mathbf{F}(\mathbf{x}_i) + \mathbf{K}_i \cdot \Delta \mathbf{x}_2$) であるとして評価した評価関数を表す。

$r > 10^{-4}$ の場合、修正ベクトル $\Delta \mathbf{x}_2$ を採用し、次の反復計算のステップへ進む。この際、 $\max(0.5, \min(2, 0.5 / |r - 1|))$ が 1 を超えていれば δ の増加を要求する。 δ の増加が二度以上連続して要求された場合、もしくは $\max(0.5, \min(2, 0.5 / |r - 1|))$ が 1 以下の場合には、 δ を $\max(0.5, \min(2, 0.5 / |r - 1|))$ 倍する。初回の増加要求で δ を増加させないのは、 δ の振動を防止するためである。

$r \leq 10^{-4}$ の場合、修正ベクトル $\Delta \mathbf{x}_2$ を棄却し、 $\min(\delta, \delta)$ を 0.5 倍して式 (4.7.1-5) を解きなおす。ここで、 δ は直近の $\Delta \mathbf{x}_1$ を用いて式 (4.7.1-22) で計算した δ である。なお、この場合は解が発散していることを意味する。反復計算のステップが進まないまま、発散が規定回数以上繰り返された場合には、解なしとして導出処理を終了する。

なお、更新された δ は、 δ の初期値を超えないものとする。

最後に反復計算の終了条件について説明する。式 (4.7.1-24), (4.7.1-25) を両方満たした場合、解が収束したと判断する。前者はスペクトル残差の変化が十分に小さいことを、後者は解の変化が十分に小さいことを意味する。

$$\frac{|J(\mathbf{x}_{i+1}) - J(\mathbf{x}_i)|}{m} < f_{tol} \quad (4.7.1-24)$$

$$\frac{|(\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i)^T \cdot \mathbf{S}^{-1} \cdot (\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i)|}{n} < x_{tol} \quad (4.7.1-25)$$

$$\mathbf{S} = (\tilde{\mathbf{K}}_i^T \cdot \tilde{\mathbf{K}}_i + \mathbf{S}_a^{-1})^{-1} \quad (4.7.1-26)$$

ここで、 m は観測輝度スペクトル \mathbf{y} の要素数を、 n は state vector \mathbf{x} の要素数を表す。

反復計算は、解が収束した場合、もしくは、規定の最大反復回数に達しても解が収束しなかった場合、および、前述の規定の最大連続発散回数に達しても解が発散した場合に終了する。最大反復回数、最大連続発散回数、 f_{tol} 、 x_{tol} は導出処理毎に定める。

<反復計算終了後の事後処理>

反復計算終了後に以下の計算を行う。但し、式 (4.7.1-31) ~ (4.7.1-43) はカラム平均気体濃度が推定対象になっている場合のみ実施する。なお、添字 x, c はそれぞれ計算対象となる気体種に対応する成分、対応しない成分を表し、ベクトル・行列に対しては対応する要素で構成される小行列を指す。

- ・ 残差スペクトルの二乗平均

$$\chi_{SB}^2 = \frac{\tilde{\mathbf{y}}_{SB}^T \cdot \tilde{\mathbf{y}}_{SB}}{m_{SB}} \quad (4.7.1-27)$$

ここで、添字 SB は対象となるサブバンドを表し、ベクトルは対応する要素のみで構成される。

- ・ 誤差共分散行列

$$\mathbf{S} = (\tilde{\mathbf{K}}^T \cdot \tilde{\mathbf{K}} + \mathbf{S}_a^{-1})^{-1} \quad (4.7.1-28)$$

- ・ アベレージングカーネル行列

$$\mathbf{AK} = \tilde{\mathbf{G}} \cdot \tilde{\mathbf{K}} \quad (4.7.1-29)$$

$$\tilde{\mathbf{G}} = \mathbf{S} \cdot \tilde{\mathbf{K}}^T \quad (4.7.1-30)$$

- ・ 気圧荷重関数

$$(\mathbf{h})_j = h_j = \frac{w_{dry,j}}{\sum_j w_{dry,j}} \quad (4.7.1-31)$$

ここで、添字 j は鉛直グリッドを表す。

- ・ カラム平均気体濃度

$$X_x = \mathbf{h}^T \cdot \mathbf{x}_x \quad (4.7.1-32)$$

- カラム平均気体濃度の DFS (degree of freedom for signals)

$$DFS_x = \text{trace}(\mathbf{A}\mathbf{K}_{xx}) \quad (4.7.1-33)$$

$$\mathbf{A}\mathbf{K}_{xx} = \tilde{\mathbf{G}}_x \cdot \tilde{\mathbf{K}}_x \quad (4.7.1-34)$$

- カラム平均気体濃度のカラムアベレージングカーネル

$$(\mathbf{a}_x)_j = a_{x,j} = (\mathbf{h}^T \cdot \mathbf{A}\mathbf{K}_{xx})_j \cdot \frac{1}{h_j} \quad (4.7.1-35)$$

- カラム平均気体濃度のリトリーバルノイズ

$$\mathbf{S}_{m,x} = \tilde{\mathbf{G}}_x \cdot \tilde{\mathbf{G}}_x^T \quad (4.7.1-36)$$

$$\sigma_{m,x} = \sqrt{\mathbf{h}^T \cdot \mathbf{S}_{m,x} \cdot \mathbf{h}} \quad (4.7.1-37)$$

- カラム平均気体濃度の平滑化誤差

$$\mathbf{S}_{s,x} = (\mathbf{A}\mathbf{K}_{xx} - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{S}_{a,xx} \cdot (\mathbf{A}\mathbf{K}_{xx} - \mathbf{I})^T \quad (4.7.1-38)$$

$$\sigma_{s,x} = \sqrt{\mathbf{h}^T \cdot \mathbf{S}_{s,x} \cdot \mathbf{h}} \quad (4.7.1-39)$$

- カラム平均気体濃度の干渉誤差

$$\mathbf{S}_{i,x} = \mathbf{A}\mathbf{K}_{xc} \cdot \mathbf{S}_{a,xc} \cdot \mathbf{A}\mathbf{K}_{xc}^T \quad (4.7.1-40)$$

$$\sigma_{i,x} = \sqrt{\mathbf{h}^T \cdot \mathbf{S}_{i,x} \cdot \mathbf{h}} \quad (4.7.1-41)$$

$$\mathbf{A}\mathbf{K}_{xc} = \tilde{\mathbf{G}}_x \cdot \tilde{\mathbf{K}}_c \quad (4.7.1-42)$$

- カラム平均気体濃度の不確定性

$$\sigma_x = \sqrt{\sigma_{m,x}^2 + \sigma_{s,x}^2 + \sigma_{i,x}^2} \quad (4.7.1-43)$$

ここで、添字 SB はサブバンドを表す。

また、観測輝度スペクトル \mathbf{y} 、および、フォワードモデル $\mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{c})$ は輝度スペクトルをサブバンド順に並べた列ベクトル、観測誤差とフォワードモデルに対する分散・共分散行列 \mathbf{S}_ε は個々のサブバンドの分散・共分散行列を並べた行列となり、式 (4.7.2-4) ~ (4.7.2-6) のように表される。なお、 \mathbf{y} の要素は式 (4.5-23) で与えられる偏光合成観測輝度スペクトルである。

$$\mathbf{y} = (\mathbf{y}_{SB1}^T \quad \mathbf{y}_{SB2}^T \quad \dots)^T \quad (4.7.2-4)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{c}) = (\mathbf{F}_{SB1}(\mathbf{x}, \mathbf{c})^T \quad \mathbf{F}_{SB2}(\mathbf{x}, \mathbf{c})^T \quad \dots)^T \quad (4.7.2-5)$$

$$\mathbf{S}_\varepsilon = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{\varepsilon, SB1} & & 0 \\ & \mathbf{S}_{\varepsilon, SB2} & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.7.2-6)$$

\mathbf{S}_ε の設定に際し、フォワードモデル誤差の寄与は式 (4.7.2-7) のように経験的に取り込むこととし、これを経験的ノイズと呼ぶ。 \mathbf{S}_ε は $\sigma_{empirical, SB}^2$ を対角要素にもつ対角行列である。

$$\sigma_{empirical, SB}^2 = \sigma_{synth, SB}^2 \cdot [a_{0, SB} + a_{1, SB} \cdot SNR_{SB} + a_{2, SB} \cdot SNR_{SB}^2] \quad (4.7.2-7)$$

ここで、係数 a_0, a_1, a_2 は \mathbf{S}_ε として観測誤差のみを考慮した導出処理を行った際に得られる残差スペクトルの二乗平均を SNR の関数としてプロットした時の下部包絡面を SNR の二次関数でフィッティングして得られる係数で、サブバンド別に評価する (図 4.7.2-1 参照)。

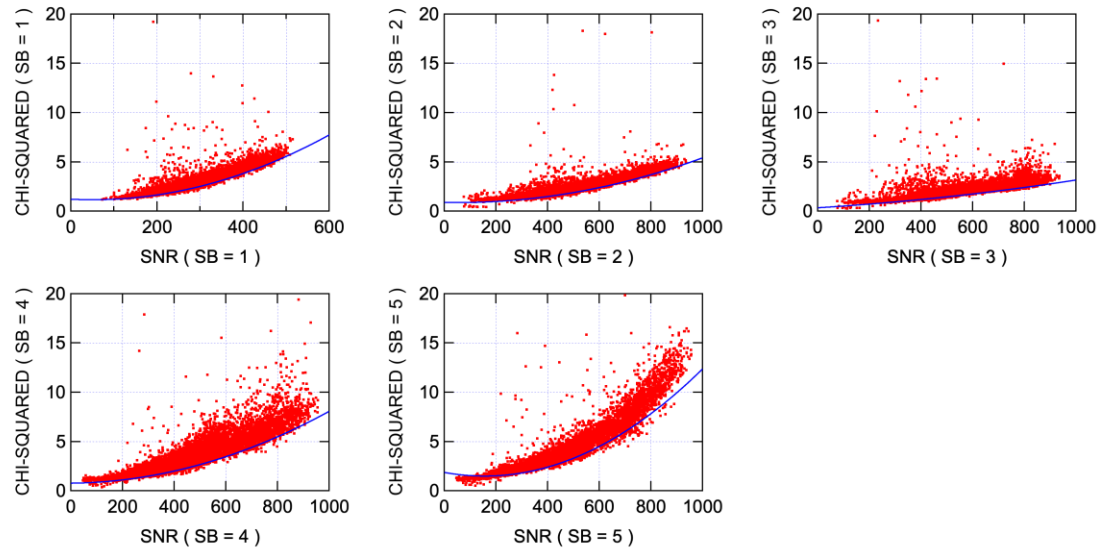


図 4.7.2-1 経験的ノイズの例。赤点が \mathbf{S}_e として観測誤差のみを考慮した導出処理を行った際に得られる残差スペクトルの二乗平均を、青線が下部包絡面を SNR の二次関数でフィッティングした結果。

個々の導出処理で使用する観測輝度スペクトルの波数範囲や推定対象物理量等の条件は表 4.7.2-1 ~ 4.7.2-7 を参照のこと。なお、現状は TANSO-FTS-2 視野内の陸海の状態によらず、地表面は Lambert 面であるとしている。

表 4.7.2-1 導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 1 クロロフィル蛍光

項目	内容	備考
処理 ID	B1_SIF	
波数範囲	13173 ~ 13227 cm ⁻¹	偏光合成観測輝度
推定対象物理量	ゼロレベルオフセット	FS (= US + SIF) に相当 (4.1 節参照)
	地表面アルベド (2 波数点)	折線近似
	波数軸補正係数	
フォワードモデル	雲・エアロソル無	

表 4.7.2-2 導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 1 地表面気圧

項目	内容	備考
処理 ID	B1_Psrf	
波数範囲	12950 ~ 13200 cm ⁻¹	偏光合成観測輝度
推定対象物理量	地表面気圧	
	気温高度分布のシフト量	
	地表面アルベド (2 波数点)	折線近似
	波数軸補正係数	
フォワードモデル	雲・エアロソル無	

表 4.7.2-3 導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 2 CO₂ 1.6 μm 帯 カラム平均気体濃度

項目	内容	備考
処理 ID	B2_1590	
波数範囲	6180 ~ 6380 cm ⁻¹	偏光合成観測輝度
推定対象物理量	CO ₂ 高度分布 (15 層)	層内平均濃度
	H ₂ O 高度分布 (15 層)	層内平均濃度
	地表面アルベド (9 波数点)	折線近似
	波数軸補正係数	
フォワードモデル	雲・エアロソル無	

表 4.7.2-4 導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 2 CH₄ 1.67 μm 帯 カラム平均気体濃度

項目	内容	備考
処理 ID	B2_1660	
波数範囲	5900 ~ 6150 cm ⁻¹	偏光合成観測輝度
推定対象物理量	CH ₄ 高度分布 (15 層)	層内平均濃度
	H ₂ O 高度分布 (15 層)	層内平均濃度
	地表面アルベド (11 波数点)	折線近似
	波数軸補正係数	
フォワードモデル	雲・エアロソル無	

表 4.7.2-5 導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 3 CO₂ 2.08 μm 帯 カラム平均気体濃度

項目	内容	備考
処理 ID	B3_2060	
波数範囲	4800 ~ 4900 cm ⁻¹	偏光合成観測輝度
推定対象物理量	CO ₂ 高度分布 (15 層)	層内平均濃度
	H ₂ O 高度分布 (15 層)	層内平均濃度
	地表面アルベド (5 波数点)	折線近似
	波数軸補正係数	
フォワードモデル	雲・エアロソル無	

表 4.7.2-6 導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 3 CO 2.3 μm 帯 カラム平均気体濃度

項目	内容	備考
処理 ID	B3_2350	
波数範囲	4200 ~ 4300 cm ⁻¹	偏光合成観測輝度
推定対象物理量	CO 高度分布 (15 層)	層内平均濃度
	CH ₄ 高度分布 (15 層)	層内平均濃度
	H ₂ O 高度分布 (15 層)	層内平均濃度
	地表面アルベド (5 波数点)	折線近似
	波数軸補正係数	
フォワードモデル	雲・エアロソル無	

表 4.7.2-7 導出処理 (full-physics 法) : カラム平均気体濃度

項目	内容	備考
処理 ID	SWFP	
波数範囲	SB1 : 12950 ~ 13200 cm ⁻¹ SB2 : 6180 ~ 6380 cm ⁻¹ SB3 : 5900 ~ 6150 cm ⁻¹ SB4 : 4800 ~ 4900 cm ⁻¹ SB5 : 4200 ~ 4300 cm ⁻¹	偏光合成観測輝度 並び順にサブバンド (SB) 1, 2, 3, 4, 5 とする。
推定対象物理量	CO ₂ 高度分布 (15 層)	層内平均濃度
	CH ₄ 高度分布 (15 層)	層内平均濃度
	CO 高度分布 (15 層)	層内平均濃度
	H ₂ O 高度分布 (15 層)	層内平均濃度
	エアロソル高度分布 (15 層、2 タイプ)	基準波長における光学的厚 さの対数
	地表面気圧	
	気温高度分布のシフト量	
	クロロフィル蛍光 (基準波数における輝度)	
	クロロフィル蛍光 (波数に対する傾き)	
	地表面アルベド (SB1~5 に対し 2, 9, 11, 5, 5 波数点)	SB 毎に折線近似
	波数軸補正係数 (SB 別)	
	ゼロレベルオフセット (SB 別)	V02.00 で追加
装置関数伸縮係数 (SB 別)	V02.00 で追加	
フォワードモデル	雲無	

4.7.3 鉛直グリッド

FTS-2 SWIR L2 処理用に次の 3 種類の鉛直グリッドを定義する (図 4.7.3-1)。

(a) Main-layer

大気を気圧で等分割した鉛直グリッドを **Main-layer** とし、導出処理において高度分布が推定対象となる物理量の記述に用いる。気体濃度については、**Main-layer** の層ごとの層内平均濃度 (部分カラム平均濃度) が、エアロソルについては、**Main-layer** の層ごとの光学的厚さが対応する。**Main-layer** の層数 N_m を 15 層とする。

(b) Sub-layer

気体分子の吸収断面積は気圧・気温の関数であるため、気体吸収の光学的厚さを精度よく計算するためには **Main-layer** 内部の気圧・気温の鉛直変化を考慮する必要がある。そこで、**Main-layer** の各層をさらに N_d 個の層に分割した鉛直グリッドを **Sub-layer** として定義する。この際 **Main-layer** の最上層に対してのみ気圧の対数で等間隔に、それ以外の層に対しては気圧で等間隔に分割する。自明であるが、個々の **Sub-layer** はいずれかの **Main-layer** に属することとなる。**Sub-layer** は **Main-layer** の各層の気体吸収の光学的厚さを計算する場合にのみ利用する。分割層数 N_d を 12 層とする。そのため、**Sub-layer** の全層数 N_s は $N_s = N_m \cdot N_d = 180$ 層となる。

(c) RT-layer

FTS-2 SWIR L2 処理において雲を考慮した放射伝達計算を行うにあたり、雲の雲頂気圧と雲底気圧を層境界に追加する必要がある。**Main-layer** に雲頂気圧と雲底気圧を層境界として追加した鉛直グリッドを **RT-layer** として定義する。境界を 1 つ追加することで既存の層が 2 つに分割されるが、この際、既存の層の光学的厚さを分割されて生じる 2 つの層の気圧差に比例するように分配する。ただし、追加される境界が既存の境界に極めて近い場合には (気圧差に比例する分配比の一方が 10^{-6} を下回る場合)、境界を追加せずに既存の境界で代用する。そのため **RT-layer** の層数 N_r は固定値とはならず、 $N_m \sim (N_m + 2)$ 層の範囲に存在する。個々の **RT-layer** もいずれかの **Main-layer** に属する。なお、導出処理において『雲無』が仮定されている場合には、**RT-layer** は **Main-layer** に等しい。

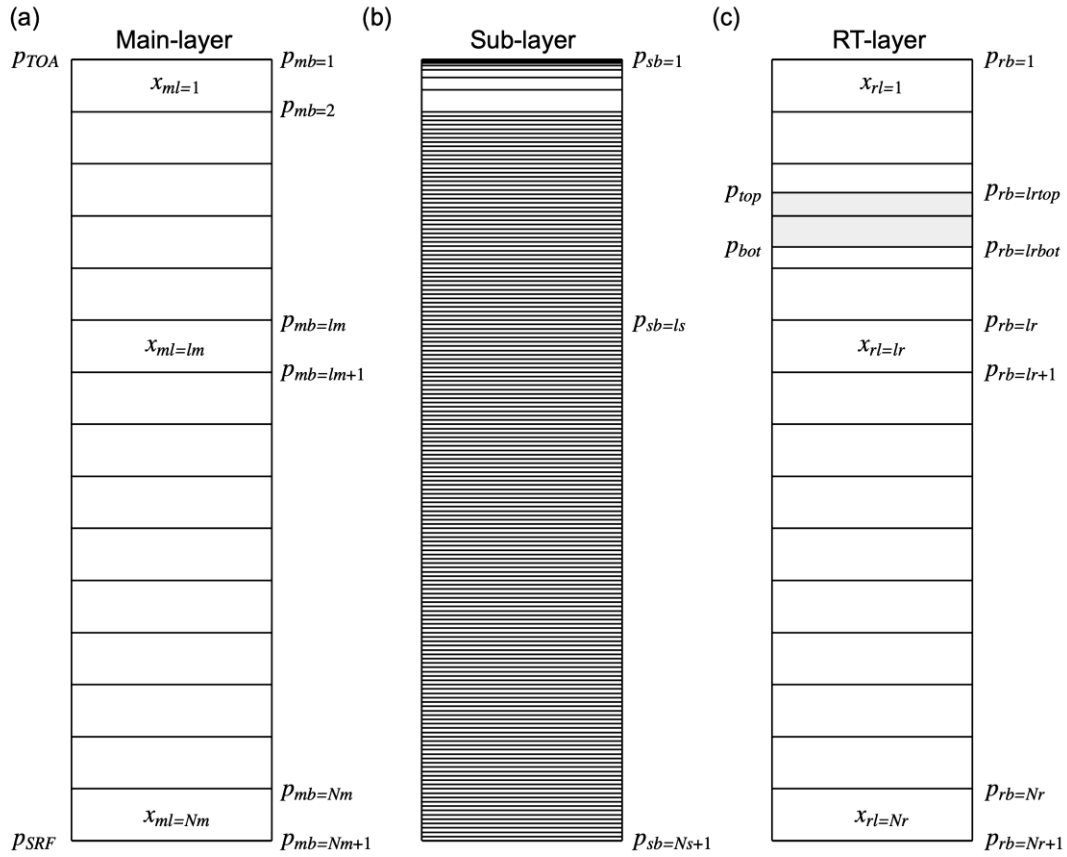


図 4.7.3-1 FTS-2 SWIR L2 処理で使用する鉛直グリッド。(a) Main-layer、(b) Sub-layer、(c) RT-layer。 x は任意の物理量であり、添字 mb, sb, rb はそれぞれ Main-layer, Sub-layer, RT-layer の境界における値であることを、添字 ml, sl, rl はそれぞれ Main-layer, Sub-layer, RT-layer の層内の値であることを示す。

フォワードモデルにおける大気上端 (top-of-the-atmosphere: TOA) の気圧 p_{TOA} は、計算領域外の気柱量が無視できる程度に十分小さく、かつ、局所熱力学平衡が成り立つ程度に高いことが望ましいため、0.1 hPa とする。これと地表面気圧 p_{SRF} を用いると、Main-layer, Sub-layer の各境界における気圧はそれぞれ式 (4.7.3-1), (4.7.3-2) で与えられる。

$$p_{mb=lm} = \frac{Nm+1-lm}{Nm} \cdot p_{TOA} + \frac{lm-1}{Nm} \cdot p_{SRF} \quad lm = 1, 2, 3, \dots, Nm+1 \quad (4.7.3-1)$$

$$p_{sb=ls} = \begin{cases} p_{TOA} \cdot \left(1 + \frac{1}{Nm} \cdot \frac{p_{SRF} - p_{TOA}}{p_{TOA}} \right)^{(ls-1)/Nd} & 1 \leq ls \leq Nd \\ \frac{Ns+1-ls}{Ns} \cdot p_{TOA} + \frac{ls-1}{Ns} \cdot p_{SRF} & Nd+1 \leq ls \leq Ns+1 \end{cases} \quad (4.7.3-2)$$

RT-layer において、雲頂気圧 p_{top} に対応する境界の要素を lr_{top} 、雲底気圧 p_{bot} に対応する境界の要素を lr_{bot} とする。RT-layer の要素 lr が属する Main-layer の要素を $lm(lr)$ のように表すと、境界の追加に伴う Main-layer に対する RT-layer の分配比 $frc_{RT}(lr)$ は式 (4.7.3-3) で与えられる。

$$frc_{RT}(lr) = \begin{cases} \frac{p_{rb=lr+1} - p_{rb=lr}}{p_{mb=lm(lr)+1} - p_{mb=lm(lr)}} = \frac{Nm \cdot (p_{rb=lr+1} - p_{rb=lr})}{p_{SRF} - p_{TOA}} & lr_{top} - 1 \leq lr \leq lr_{bot} \\ 1 & others \end{cases} \quad (4.7.3-3)$$

また、巻雲の光学的厚さに対する RT-layer の分配比 $frc_{CLD}(lr)$ は式 (4.7.3-4) で与えられる。

$$frc_{CLD}(lr) = \begin{cases} \frac{p_{rb=lr+1} - p_{rb=lr}}{p_{rb=lr_{bot}} - p_{rb=lr_{top}}} & lr_{top} \leq lr \leq lr_{bot} - 1 \\ 0 & others \end{cases} \quad (4.7.3-4)$$

4.7.4 フォワードモデル

フォワードモデルは大気上端における上向きストークスペクトル、および、光学的厚さ等に対する荷重関数を計算する放射伝達計算部と、得られたストークスペクトル等に装置特性を作用させ、FTS-2 の観測による観測輝度スペクトルと等価な理論輝度スペクトルやヤコビアンを計算する装置特性作用部からなる。

(a) 概要

偏光を考慮した一次元放射伝達方程式は式 (4.7.4-1) のように表される。

$$\mu \cdot \frac{\partial \mathbf{I}(\tau, \mu, \phi)}{\partial \tau} = -\mathbf{I}(\tau, \mu, \phi) + \omega \cdot \int_{-1}^1 d\mu' \int_0^{2\pi} d\phi' \mathbf{P}(\tau, \mu, \phi; \mu', \phi') \cdot \mathbf{I}(\tau, \mu', \phi') + (1 - \omega) \cdot \mathbf{B}(\tau) \quad (4.7.4-1)$$

ここで、 $\mathbf{I} = (I, Q, U, V)^T$ はストークスペクトルで第一成分 I が放射輝度を表す、 τ は大気上端からの光学的厚さ、 μ は $+\tau$ 軸（鉛直下向きの軸）からの極角の余弦、 ϕ は方位角、 ω は一次散乱アルベド、 \mathbf{P} は散乱位相行列、 \mathbf{B} は熱放射ベクトルを表す。

式 (4.7.4-1) を解いて大気上端における上向きのストークスペクトルを算出する手法として、ここでは偏光放射伝達コード `pstar` (Ota et al. 2010) を採用した。`pstar` のソースコードは `OpenCLASTR` (<https://ccsr.aori.u-tokyo.ac.jp/~clastr/>) から入手可能である（註：ここでは本文書執筆時点で未公開の `pstar4` を利用している）。

`pstar` では、一次元放射伝達方程式を解く際に、鉛直不均質な大気をそれぞれが均質とみなせる複数の大気層に分割し、個々の大気層の反射・透過・射出関数を `Discrete-Ordinate` 法を用いて計算した後に、`Matrix Operator` 法を用いて任意の位置における任意の方向のストークスペクトルを計算しており、少ないストリーム数でも高精度でストークスペクトルを計算できるようにするため、`TMS` 法 (Nakajima and Tanaka 1988) を採用している。より詳細は Ota et al. (2010) を参照のこと。今回用いる `pstar4` では、ストークスペクトルに加えて、各大気層の吸収による光学的厚さ、気体分子散乱による光学的厚さ、雲・エアロソル散乱による光学的厚さ、および、地表面アルベドもしくは地上風速に対する荷重関数を同時に計算することができる。

後続の装置特性作用部において装置特性を適切に考慮するためには、`TANSO-FTS-2` の波数刻み 0.2 cm^{-1} よりも十分に細かな波数刻みを持つストークスペクトルや荷重関数が必要となる。放射伝達計算部では 0.01 cm^{-1} 刻みとしているが、この波数刻みで必要な波数範囲の全波数点 (> 20000 波数点) に対して `pstar` による計算を行うには多くの計算コストを要することから、Duan et al. (2005) に基づく高速放射伝達計算法を組み合わせる。ただし、Duan et al. (2005) による高速放射伝達計算法では、雲・エアロソルの散乱特性や地表面反射率の波数依存性が考慮されていないことから、それらを考慮するための独自拡張を行った。

また、クロロフィル蛍光輝度については上記の高速放射伝達計算法との併用が困難であることから近似式を用いて計算し、高速放射伝達計算法から得られるストークスペクトルや荷重関数に加算する。

装置特性作用部ではこのようにして得られたストークスペクトルや荷重関数に対して `FTS-2` の装置特性を考慮したうえで、装置関数の畳込み積分を行う。

以下にフォワードモデルの詳細を示すが、放射伝達計算部のうち `pstar` 自身の詳細説

明については Ota et al. (2010) に任せることとし、それ以外の部分について説明する。

(b) 放射伝達計算部 : pstar 入出力

前述したとおり、放射伝達コード pstar に関する詳細説明は省略するため、pstar とのインタフェースとなる入出力変数を以下に示す。

・入力変数

RT-layer の各層における

光学的厚さ $\tau_i(\nu)$

Rayleigh 散乱の光学的厚さ $\tau_{sca,m,ri}(\nu)$

Rayleigh 散乱以外の散乱成分のタイプ別光学的厚さ $\tau_{sca,p,type,ri}(\nu)$

Rayleigh 散乱以外の散乱成分のタイプ別散乱位相行列 $\mathbf{P}_{p,type,ri}(\Theta, \nu)$

* Θ は散乱角

Rayleigh 散乱の偏光解消因子 $\delta_i(\nu)$

地表面反射を等方的 (Lambert 面) として扱う場合、

地表面アルベド $\alpha(\nu)$

地表面反射を Cox-Munk の海面モデル (Cox and Munk, 1954) として扱う場合、

地上風速 u_{10}

水の複素屈折率 $m_{wat}(\nu)$

大気上端における入射光照射度 $f_0(\nu)$

入射光単位ベクトルと $+\tau$ 軸がなす角の余弦 $\mu_0 = \cos(\theta_0)$

観測光単位ベクトルと $+\tau$ 軸がなす角の余弦 $\mu_1 = -\cos(\theta_1)$

入射光単位ベクトル-観測光単位ベクトル間の相対方位角 $\phi = \phi_0 - \phi_1 + \pi$

ここで、 $\theta_0, \phi_0, \theta_1, \phi_1$ はそれぞれ FTS-2 L2 事前処理で得られた太陽天頂角、太陽方位角、衛星天頂角、衛星方位角である。

・出力変数

大気上端における衛星方向のストークスペクトル $\mathbf{I}_{RT}(\nu)$

spherical albedo r

RT-layer の各層の

Rayleigh 散乱の光学的厚さに対する荷重関数

$$\partial \mathbf{I}_{RT}(\nu) / \partial \ln(\tau_{sca,m,ri}(\nu)), \partial r(\nu) / \partial \ln(\tau_{sca,m,ri}(\nu))$$

Rayleigh 散乱以外の散乱成分のタイプ別光学的厚さに対する荷重関数

$$\partial \mathbf{I}_{RT}(\nu) / \partial \ln(\tau_{sca,p,type,ri}(\nu)), \partial r(\nu) / \partial \ln(\tau_{sca,p,type,ri}(\nu))$$

吸収の光学的厚さに対する荷重関数 $\partial \mathbf{I}_{RT}(\nu) / \ln(\partial \tau_{abs,ri}(\nu)), \partial r(\nu) / \ln(\partial \tau_{abs,ri}(\nu))$

地表面反射を等方的 (Lamgert 面) として扱った場合、

地表面アルベドに対する荷重関数 $\partial \mathbf{I}_{RT}(\nu) / \partial \alpha(\nu)$
 地表面反射を Cox-Munk の海面モデルとして扱った場合、
 地上風速に対する荷重関数 $\partial \mathbf{I}_{RT}(\nu) / \partial u_{10}$

ここで、添字 *sca*, *abs* はそれぞれ散乱成分、吸収成分を、添字 *m*, *p* は気体分子、エアロソルと雲の集合 (Rayleigh 散乱以外の散乱成分に相当)、添字 *type* はエアロソル・雲のタイプを表す。

偏光放射伝達コード *pstar* は汎用的な放射伝達コードであるが、FTS-2 SWIR L2 処理においては以下の条件のもとで使用する。

- ストークスパラメータ $\mathbf{I}_{RT}(\nu) = (I, Q, U, V)^T$ のうち、 $I(\nu)$ のみを計算する
- 半球あたりのストリーム数 6
- 熱放射を考慮しない
- FTS-2 視野範囲内の陸海状況によらず、地表面反射を等方的 (Lambert 面) として扱う

(c) 放射伝達計算部：高速放射伝達計算法

高速放射伝達計算法の基礎となるアイデアは、数万波数点における大気パラメータを、ある種の類似性を表す数個のパラメータによってグループ化し、グループ化パラメータを用いて放射輝度をパラメタライズすることである。計算波数範囲から抽出された標本点に対して *pstar* を用いた放射伝達計算を行い、グループ化パラメータを用いてテーブルを作成した後に、計算波数範囲内の全ての波数点に対してテーブル補間によってストークスベクトルや荷重関数等を計算することで大幅な計算コスト削減を図る。

大気全体の気体吸収と散乱による光学的厚さをそれぞれ τ_{abs} , τ_{sca} とし、散乱が起こる典型的な高度 z_{sca} までのそれぞれの成分を τ'_{abs} , τ'_{sca} とした場合、Duan et al. (2005) では、 z_{sca} を $\tau'_{sca} = \min(1, \tau_{sca} / 2)$ となる高度、 τ_{abs} と $\xi = \tau'_{abs} / \tau_{abs}$ をグループ化パラメータとしている。

大気上端に入射した太陽照度の放射伝達を扱う場合、大気上端における上向きのストークスベクトル $\mathbf{I}_{RT} = (I, Q, U, V)^T$ は、一次散乱成分 \mathbf{I}^{ss} と多重散乱成分 \mathbf{I}^{ms} とに分離することができる。

$$\mathbf{I}_{RT}(\nu) = f_{sol}(\nu) \cdot [\mathbf{I}^{ss}(\nu) + \mathbf{I}^{ms}(\nu)] \quad (4.7.4-2)$$

$$\frac{\partial \mathbf{I}_{RT}(\nu)}{\partial x} = f_{sol}(\nu) \cdot \left[\frac{\partial \mathbf{I}^{ss}(\nu)}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{I}^{ms}(\nu)}{\partial x} \right] \quad (4.7.4-3)$$

ここで $f_{sol} = F_0 / (D_{sun-obs})^2$ は大気上端に入射する太陽照度 ($F_0, D_{sun-obs}$ については式 (4.4-6) 参照)、 x は $\tau_{sca,m}, \tau_{sca,p,type}, \tau_{abs}, \alpha, u_{10}$ のいずれかを表す。

$\mathbf{I}^{ss}, \partial\mathbf{I}^{ss}/\partial x$ は近似せずとも高速に計算することが可能であるため、各波数点毎に厳密に計算する。他方、 $\mathbf{I}^{ms}, \partial\mathbf{I}^{ms}/\partial x$ はグループ化パラメータを用いて次式の用にパラメタライズする。

$$\mathbf{I}^{ms}(\tau_{abs}(\nu), \xi(\nu)) = \exp\{g_1(\tau_{abs}) - \beta_1(\tau_{abs}) \cdot [\ln \xi - \ln \xi_0(\tau_{abs})]\} \quad (4.7.4-4)$$

$$\frac{\partial\mathbf{I}^{ms}(\tau_{abs}(\nu), \xi(\nu))}{\partial x} = g_x(\tau_{abs}) - \beta_x(\tau_{abs}) \cdot [\ln \xi - \ln \xi_0(\tau_{abs})] \quad (4.7.4-5)$$

ここで、 $\xi_0(\tau_{abs})$ は光学的厚さ τ_{abs} における ξ の平均値を表す。

計算波数範囲から標本点を適切に設定することで $\xi_0(\tau_{abs})$ のテーブルを、標本点に対する放射伝達計算結果から、 $g(\tau_{abs}), \beta(\tau_{abs})$ のテーブルを作成することができる。作成されたテーブルを用いることで、計算波数範囲内の全ての波数点に対して $\mathbf{I}^{ms}, \partial\mathbf{I}^{ms}/\partial x$ をテーブル補間によって計算することができる。ここで、放射伝達計算時の大気上端における入射光強度 $f_0 = 1$ である。

式 (4.7.4-4), (4.7.4-5) は計算波数範囲内で τ_{abs} 以外の光学特性が一定であることを前提としているため、計算はサブバンド毎に行うこととし、サブバンド内における雲・エアロソルによる散乱特性や地表面反射率の波数依存性を以下のように考慮する。

まず、雲・エアロソルの光学的厚さ、一次散乱アルベドの波数依存性については、計算波数範囲内で線形近似が成り立つようサブバンドの波数範囲が設定されていることを前提とする。また、散乱位相行列についてはサブバンド内の波数依存性を無視し、サブバンドの中心波数における散乱位相行列を使用する。この前提のもとで、計算波数範囲内の任意の波数におけるストークスペクトル・荷重関数は、サブバンドの両端の波数における光学特性を用いて計算されたストークスペクトル・荷重関数を線形補間することで計算される。

次に、地表面反射率の波数依存性については、以下のように対応する。地表面が反射率 α の Lambert 面であるとする、 $\alpha = 0, \alpha_m$ の時の大気上端ストークスペクトル $\mathbf{I}_{RT,0}, \mathbf{I}_{RT,m}$ を用いて、任意の地表面反射率 α に対する大気上端放射輝度 $\mathbf{I}_{RT,\alpha}$ は次式のよう表される (Liou, 2002)。

$$\mathbf{I}_{RT,\alpha}(\nu) = \mathbf{I}_{RT,0}(\nu) + [\mathbf{I}_{RT,m}(\nu) - \mathbf{I}_{RT,0}(\nu)] \cdot \frac{1 - r(\nu) \cdot \alpha_m}{\alpha_m} \cdot \frac{\alpha(\nu)}{1 - r(\nu) \cdot \alpha(\nu)} \quad (4.7.4-6)$$

ここで r は spherical albedo を表す。

地表面アルベドに対する荷重関数は式 (4.7.4-7) で、各光学的厚さに対する荷重関数については式 (4.7.4-8) で表される。なお、 $r, \partial r/\partial x$ に対しても式 (4.7.4-4), (4.7.4-5) と同様のパラメタライズを行う。

$$\frac{\partial \mathbf{I}_{RT,\alpha}(\nu)}{\partial \alpha(\nu)} = [\mathbf{I}_{RT,m}(\nu) - \mathbf{I}_{RT,0}(\nu)] \cdot \frac{1 - r(\nu) \cdot \alpha_m}{\alpha_m} \cdot \frac{1}{[1 - r(\nu) \cdot \alpha(\nu)]^2} \quad (4.7.4-7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{I}_{RT,\alpha}(\nu)}{\partial x} &= \frac{\partial \mathbf{I}_{RT,0}(\nu)}{\partial x} + \left[\frac{\partial \mathbf{I}_{RT,m}(\nu)}{\partial x} - \frac{\partial \mathbf{I}_{RT,0}(\nu)}{\partial x} \right] \cdot \frac{1 - r(\nu) \cdot \alpha_m}{\alpha_m} \cdot \frac{\alpha(\nu)}{1 - r(\nu) \cdot \alpha(\nu)} \\ &+ [\mathbf{I}_{RT,m}(\nu) - \mathbf{I}_{RT,0}(\nu)] \cdot \frac{\alpha(\nu) \cdot [\alpha(\nu) - \alpha_m]}{\alpha_m \cdot [1 - r(\nu) \cdot \alpha(\nu)]^2} \cdot \frac{\partial r(\nu)}{\partial x} \end{aligned} \quad (4.7.4-8)$$

ここで x は $\tau_{sca,m}, \tau_{sca,p,type}, \tau_{abs}$ のいずれかを表す。

以上より、地表面反射を等方的 (Lambert 面) に扱う場合にはサブバンドの両端の波数に対応する光学特性と、地表面反射率 $\alpha = 0, \alpha_m$ の四通りの組み合わせに対応するテーブルを、地表面反射を Cox-Munk の海面モデルとして扱う場合にはサブバンドの両端の波数に対応する二通りの光学特性に対応するテーブルを用意することで、雲・エアロソールによる散乱特性や地表面反射率の波数依存性を考慮した高速放射伝達計算を行う。

(d) 放射伝達計算部：クロロフィル蛍光輝度

TANSO-FTS-2 Band 1 の波数範囲にはクロロフィル蛍光が存在する。放射伝達計算部において、クロロフィル蛍光は太陽光とは独立な光源として扱う。Frankenberg et al. (2011b) 同様、衛星が観測するクロロフィル蛍光輝度 \mathbf{I}_{SIF} は、地表面におけるクロロフィル蛍光輝度 $\mathbf{I}_{SIF,srf}$ が気体吸収により減衰したもので表されると近似する。また、クロロフィル蛍光の偏光状態は未知であるため、ここでは無偏光として扱う ($\mathbf{I}_{SIF} = (I_{SIF}, 0, 0, 0)^T$)。

$$I_{SIF}(\nu) = I_{SIF,srf}(\nu) \cdot \exp\left[-\frac{\tau_{abs}(\nu)}{\mu_1}\right] \quad (4.7.4-9)$$

$$I_{SIF,srf}(\nu) = \begin{cases} SIF_{ref} \cdot [1 + SIF_{slp} \cdot (\nu - 13245)] & \text{for Band 1} \\ 0 & \text{for Band 2, 3} \end{cases} \quad (4.7.4-10)$$

ここで、 τ_{abs} は大気全体の気体吸収による光学的厚さ、 SIF_{ref} は基準波長 (755 nm、波数 13245 cm^{-1} に対応) におけるクロロフィル蛍光輝度、 SIF_{slp} はクロロフィル

蛍光輝度の波数に対する傾きである。

(e) 装置特性作用部

大気上端におけるストークスペクトル ($\mathbf{I}_{RT} + \mathbf{I}_{SIF}$) に対し、放射輝度補正係数 f_1 、ゼロレベルオフセット $\mathbf{I}_{ZLO} = (I_{ZLO}, 0, 0, 0)^T$ の補正を施したストークスペクトル \mathbf{I}_{mono} は式 (4.7.4-11) で与えられる。

$$\mathbf{I}_{mono}(\nu) = [\mathbf{I}_{RT}(\nu) + \mathbf{I}_{SIF}(\nu)] \cdot f_1 + \mathbf{I}_{ZLO} \quad (4.7.4-11)$$

波数軸補正係数 $\Delta\rho$ を考慮した波数軸

$$\nu_{ret,i} = \rho \cdot (1 + \Delta\rho) \cdot [\nu_s + (i-1) \cdot \Delta\nu_0] \quad (4.7.4-12)$$

に対して装置関数の畳込み積分を行うことで、フォワードモデルとヤコビアンが得られる。

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{c}) = ILS \otimes \mathbf{I}_{mono}(\nu) \quad (4.7.4-13)$$

$$\mathbf{K} = \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{c})}{\partial \mathbf{x}} = ILS \otimes \frac{\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu)}{\partial \mathbf{x}} \quad (4.7.4-14)$$

なお、特に指定のない限り、 $f_1 = 1.0$ 、 $I_{ZLO} = 0.0$ 、 $\Delta\rho = 0.0$ とする。

FTS-2 SWIR L2 V02 処理以降では、軌道上校正データで見られた装置関数の半値全幅の変動を、提供されている装置関数の波数刻み幅を伸縮されることで模擬する。提供されている装置関数データの波数軸 $\nu_{ILSO,i}$ は波数刻み幅 $\Delta\nu_{ILSO} = 0.01 \text{ cm}^{-1}$ を用いて式 (4.7.4-15) で表される。

$$\nu_{ILSO,i} = i \cdot \Delta\nu_{ILSO} \quad i = -5000, -4999, \dots, 0, \dots, 5000 \quad (4.7.4-15)$$

装置関数伸縮係数 ρ_{ILS} を考慮した波数軸 $\nu_{ILS,i}$ と提供されている装置関数データ ILS_i が対応するものとして、波数差 0 cm^{-1} でピークを取り、積分値が 1 となるように規格化し、使用する。

$$\nu_{ILS,i} = i \cdot \rho_{ILS} \cdot \Delta\nu_{ILSO} \quad (4.7.4-16)$$

4.7.5 推定対象物理量の先験値、及び、各種光学特性

4.7.5.1 気体濃度の先験値

Main-layer の層内平均濃度（部分カラム平均濃度）が推定対象物理量であり、その先験値は乾燥空気の部分気柱量に対する対象気体の部分気柱量の比として与えられる。

<乾燥空気の気柱量>

FTS-2 L2 事前処理で得られた FTS-2 視野中心位置における気圧 p [hPa]・重力加速度 g [m/s²]・H₂O 濃度 C_{H_2O} [ppm] の高度分布データ（大気上端から地表面へ向かう同一の鉛直グリッドの境界における値として与えられる）を用いて乾燥空気の気柱量を計算する。ここで、上記源泉データの層数を N_o 、添字 ob, ol, lo はそれぞれ境界における値、層内における値、鉛直グリッドの要素を、添字 air, dry, H_2O はそれぞれ空気、乾燥空気、水蒸気を表すものとする。

静水圧平衡の式（ $dp/dz = -\rho \cdot g$ ）より、層 lo の空気の質量 $m_{air,ol=lo}$ [kg/cm²] は式 (4.7.5.1-1) で与えられる。

$$m_{air,ol=lo} = \int \rho_{air} dz = \int \frac{10^{-2} dp}{g} = \frac{P_{ob=lo+1} - P_{ob=lo}}{g_{ol=lo}} \cdot 10^{-2} \quad (4.7.5.1-1)$$

$$g_{ol=lo} = \frac{g_{ob=lo+1} + g_{ob=lo}}{2} \quad (4.7.5.1-2)$$

ここで、 ρ は質量密度 [kg/cm³]、 z は高度 [km] である。

空気の質量密度は乾燥空気の質量密度と水蒸気の質量密度の和であることから、

$$\begin{aligned} \rho_{air,ol=lo} &= \rho_{dry,ol=lo} + \rho_{H_2O,ol=lo} = u \cdot (\mu_{dry} \cdot n_{dry,ol=lo} + \mu_{H_2O} \cdot n_{H_2O,ol=lo}) \\ &= u \cdot n_{dry,ol=lo} \cdot (\mu_{dry} + \mu_{H_2O} \cdot C_{H_2O,ol=lo} \cdot 10^{-6}) \end{aligned} \quad (4.7.5.1-3)$$

$$C_{H_2O,ol=lo} = \frac{n_{H_2O,ol=lo}}{n_{dry,ol=lo}} \cdot 10^6 = \frac{C_{H_2O,ob=lo} + C_{H_2O,ob=lo+1}}{2} \quad (4.7.5.1-4)$$

ここで、 u は統一原子質量単位 [kg]、 μ は平均分子量、 n は数密度 [molecules/cm³] である。

以上より、層 lo の乾燥空気の部分気柱量 $w_{dry,ol=lo}$ [molecules/cm²] は、

$$\begin{aligned}
w_{dry,ol=lo} &= \int n_{dry} dz = \int \frac{10^{-2} dp}{g \cdot u \cdot (\mu_{dry} + \mu_{H_2O} \cdot C_{H_2O} \cdot 10^{-6})} \\
&= \frac{m_{air,ol=lo}}{u \cdot (\mu_{dry} + \mu_{H_2O} \cdot C_{H_2O,ol=lo} \cdot 10^{-6})}
\end{aligned} \tag{4.7.5.1-5}$$

大気上端から境界面 $p_{ob=lo}$ まで積算した乾燥空気の部分気柱量 $W_{dry,ob=lo}$ は、

$$W_{dry,ob=lo} = \begin{cases} 0 & lo = 1 \\ W_{dry,ob=lo-1} + w_{dry,ol=lo-1} & 1 < lo \leq No + 1 \end{cases} \tag{4.7.5.1-6}$$

大気上端から任意の境界面 p までの乾燥空気の積算部分気柱量は $W_{dry,ob=lo}$ を気圧に対して線形内挿することで得られるため、Main-layer の層 lm 、Sub-layer の層 ls の乾燥空気の部分気柱量は、式 (4.7.5.1-7)、(4.7.5.1-8) のように計算できる。

$$w_{dry,ml=lm} = W_{dry,mb=lm+1} - W_{dry,mb=lm} \tag{4.7.5.1-7}$$

$$w_{dry,sl=ls} = W_{dry,sb=ls+1} - W_{dry,sb=ls} \tag{4.7.5.1-8}$$

全ての鉛直グリッドの最下端は地表面であるため、乾燥空気の総気柱量 $W_{dry,SRF}$ は鉛直グリッドによらず一定値である。

$$W_{dry,SRF} = W_{dry,ob=No+1} = W_{dry,mb=Nm+1} = W_{dry,sb=Ns+1} = W_{dry,rb=Nr+1} \tag{4.7.5.1-9}$$

< 気体濃度の remap >

FTS-2 SWIR L2 処理で使用する気体濃度の源泉データは多岐にわたり、それぞれで異なる鉛直グリッドが使用されている（詳細は 1.2 節 (3) GOSAT-2 TANSO-FTS-2 L2 事前処理 アルゴリズム基準書 を参照）。乾燥空気の気柱量同様、各気体成分についても気柱量を保存するように Main-layer や Sub-layer の各層に含まれる各気体成分の濃度を求めることを考える。対象とする気体種 gas の鉛直グリッドの層数を N_{gas} 、気体濃度を C_{gas} [ppm]、添字 gb, gl, lg はそれぞれ境界における値、層内における値、鉛直グリッドの要素を表すものとする。

対象気体の部分気柱量 w_{gas} は式 (4.7.5.1-10) のように表される。

$$w_{gas} = \int C_{gas} \cdot n_{dry} dz = \int C_{gas} dW_{dry} \quad (4.7.5.1-10)$$

気体濃度データ鉛直グリッドの各層で気体濃度が区分的に W_{dry} の一次関数で表されるとすると、 $p_{gb=lg} \leq p_1 < p_2 \leq p_{gb=lg+1}$ を満たす境界 p_1, p_2 で構成される層内の対象気体の部分気柱量 $w_{gas,p1-p2}$ は、式 (4.7.5.1-11) で与えられる。

$$\begin{aligned} w_{gas,p1-p2} &= \int_{W_{dry,p1}}^{W_{dry,p2}} \left[\frac{C_{gas,gb=lg+1} - C_{gas,gb=lg}}{W_{dry,gb=lg+1} - W_{dry,gb=lg}} \cdot (W_{dry} - W_{dry,gb=lg}) + C_{gas,gb=lg} \right] dW_{dry} \\ &= \left[(1 - A_{gl=lg,p1-p2}) \cdot C_{gas,gb=lg} + A_{gl=lg,p1-p2} \cdot C_{gas,gb=lg+1} \right] \cdot (W_{dry,p2} - W_{dry,p1}) \end{aligned} \quad (4.7.5.1-11)$$

$$A_{gl=lg,p1-p2} = \frac{\frac{1}{2} \cdot (W_{dry,p2} + W_{dry,p1}) - W_{dry,gb=lg}}{W_{dry,gb=lg+1} - W_{dry,gb=lg}} \quad (4.7.5.1-12)$$

これより、Main-layer の層 lm における対象気体の部分カラム平均濃度 $C_{gas,ml=lm}$ は、対象気体の部分気柱量 (式 4.7.5.1-14) と乾燥空気の部分気柱量の比として式 (4.7.5.1-13) のように表される。ここで、対象気体の鉛直グリッド範囲が Main-layer の鉛直グリッド範囲に満たない場合には、不足分の領域の気体濃度が最近隣の境界の濃度と同じであるとした。

$$C_{gas,ml=lm} = \frac{w_{gas,ml=lm}}{w_{dry,ml=lm}} = \frac{W_{gas,ml=lm}}{W_{dry,mb=lm+1} - W_{dry,mb=lm}} \quad (4.7.5.1-13)$$

$$\begin{aligned} &W_{gas,ml=lm} \\ &= \sum_{lg=1}^{Ngas} \left[(1 - A_{gl=lg,p1-p2}) \cdot C_{gas,gb=lg} + A_{gl=lg,p1-p2} \cdot C_{gas,gb=lg+1} \right] \cdot \Delta_{p1-p2} \\ &+ C_{gas,gb=1} \cdot \Delta_0 + C_{gas,gb=Ngas+1} \cdot \Delta_{Ngas} \end{aligned} \quad (4.7.5.1-14)$$

$$\Delta_{p1-p2} = \max(W_{dry,p2} - W_{dry,p1}, 0) \quad (4.7.5.1-15)$$

$$W_{dry,p1} = \max(W_{dry,gb=lg}, W_{dry,mb=lm}) \quad (4.7.5.1-16)$$

$$W_{dry,p2} = \min(W_{dry,gb=lg+1}, W_{dry,mb=lm+1}) \quad (4.7.5.1-17)$$

$$\Delta_0 = \max(W_{dry,p0} - W_{dry,mb=1}, 0) \quad (4.7.5.1-18)$$

$$\Delta_{Ngas} = \max(W_{dry,mb=lm+1} - W_{dry,p3}, 0) \quad (4.7.5.1-19)$$

$$W_{dry,p0} = \min(W_{dry,gb=1}, W_{dry,mb=lm+1}) \quad (4.7.5.1-20)$$

$$W_{dry,p3} = \max(W_{dry,gb=Ngas+1}, W_{dry,mb=lm}) \quad (4.7.5.1-21)$$

式 (4.7.5.1-13) 右辺を式 (4.7.5.1-14) を用いて $C_{gas,gb=1} \sim C_{gas,gb=Ngas+1}$ のそれぞれについて整理したときの各係数を要素にもつ行列を \mathbf{W}_{mg} 、対象気体の鉛直グリッドの境界における気体濃度を要素にもつ列ベクトルを $\mathbf{C}_{gas,gb}$ 、その分散・共分散行列を $\mathbf{S}_{a,gas,gb}$ 、Main-layer の各層の部分カラム平均濃度を要素に持つ列ベクトルを $\mathbf{C}_{gas,ml}$ 、その分散・共分散行列を $\mathbf{S}_{a,gas,ml}$ とすると、

$$\mathbf{C}_{gas,ml} = \mathbf{W}_{mg} \cdot \mathbf{C}_{gas,gb} \quad (4.7.5.1-22)$$

$$\mathbf{S}_{a,gas,ml} = \mathbf{W}_{mg} \cdot \mathbf{S}_{a,gas,gb} \cdot \mathbf{W}_{mg}^T \quad (4.7.5.1-23)$$

Sub-layer に対しても同様に作成した行列 \mathbf{W}_{sg} を用いることで、鉛直グリッドの変換ができる。

4.7.5.2 気体分子の吸収による光学的厚さ

TANSO-FTS-2 は気体分子の吸収による微細な波数構造を観測できる波数分解能を有しているため、フォワードモデルにおいてもこれを再現する必要がある。気体のカラム平均濃度を精度良く求めるためには、気体分子の吸収断面積の計算において line mixing 等の効果を考慮する必要があるが、計算コストが大きいという問題がある。そのため、特定の気圧・気温に対して計算した気体分子の吸収断面積を Look-Up-Table (LUT) としてまとめておき (3.3.1 項参照)、個々の解析においては、対応する気圧・気温を用いて内挿処理を行うこととする。

前述の通り、気体吸収による光学的厚さの計算には Sub-layer を用いる。Sub-layer の各境界における気温 $T_{sb=ls}$ は、気温高度分布の源泉データに気温高度分布のシフト量を加えたうえで、気圧の対数に対して線形内挿を行い求める。

Main-layer の層 lm における気体の吸収による光学的厚さ $\tau_{abs,m,ml=lm}$ は、式 (4.7.5.2-1) で与えられるため、RT-layer の層 lr における気体の吸収による光学的厚さ $\tau_{abs,m,rl=lr}$ は式 (4.7.5.2-2) で与えられる。

$$\tau_{abs,m,ml=lm}(\nu) = \sum_{gas} \tau_{abs,gas,ml=lm}(\nu) \quad (4.7.5.2-1)$$

$$\tau_{abs,m,rl=lr}(\nu) = \tau_{abs,m,ml=lm(lr)}(\nu) \cdot frc_{RT}(lr) \quad (4.7.5.2-2)$$

$$\tau_{abs,gas,ml=lm}(\nu) = \sum_{ls \in lm} \sigma_{abs,gas,sl=ls}(\nu; p_{sl=ls}, T_{sl=ls}) \cdot w_{gas,sl=ls} \quad (4.7.5.2-3)$$

$$\sigma_{abs,gas,sl=ls}(\nu; p_{sl=ls}, T_{sl=ls}) = \begin{cases} \left[\begin{aligned} & ak_{gas}(\nu; p_{sl=ls}, T_{sl=ls}) \\ & + ak_{cnt,slf}(\nu; T_{sl=ls}) \cdot \frac{p_{sl=ls}}{p_0} \cdot \frac{T_0}{T_{sl=ls}} \cdot \frac{C_{H_2O,sl=ls}}{10^6 + C_{H_2O,sl=ls}} \\ & + ak_{cnt,frn}(\nu; T_{sl=ls}) \cdot \frac{p_{sl=ls}}{p_0} \cdot \frac{T_0}{T_{sl=ls}} \cdot \frac{10^6}{10^6 + C_{H_2O,sl=ls}} \end{aligned} \right] \quad \text{for } H_2O \\ \\ ak_{gas}(\nu; p_{sl=ls}, T_{sl=ls}) + ak_{cnt,O_3}(\nu; T_{sl=ls}) \quad \text{for } O_3 \\ \\ ak_{gas}(\nu; p_{sl=ls}, T_{sl=ls}) \quad \text{others} \end{cases} \quad (4.7.5.2-4)$$

$$p_{sl=ls} = \frac{p_{sb=ls} + p_{sb=ls+1}}{2} \quad (4.7.5.2-5)$$

$$T_{sl=ls} = \frac{T_{sb=ls} + T_{sb=ls+1}}{2} \quad (4.7.5.2-6)$$

ここで、 $\sigma_{abs,gas}$ は気体種 gas の吸収断面積 [$\text{cm}^2/\text{molecules}$] で、 ak_{gas} , ak_{cnt} は気体分子の吸収断面積の LUT から式 (4.7.5.2-7), (4.7.5.2-8) に従い線形内挿して得られる。添字 slf , frn はそれぞれ水蒸気の連続吸収の self-continuum, foreign-continuum 成分を表す。また、 $p_0 = 1013.25$ hPa、 $T_0 = 296$ K である。

$$\begin{aligned}
ak_{gas}(\nu; p, T) &= \frac{p_{i+1} - p}{p_{i+1} - p_i} \cdot \frac{T_{i,j+1} - T}{T_{i,j+1} - T_{i,j}} \cdot ak_{gasLUT,i,j}(\nu) \\
&+ \frac{p_{i+1} - p}{p_{i+1} - p_i} \cdot \frac{T - T_{i,j}}{T_{i,j+1} - T_{i,j}} \cdot ak_{gasLUT,i,j+1}(\nu) \\
&+ \frac{p - p_i}{p_{i+1} - p_i} \cdot \frac{T_{i+1,k+1} - T}{T_{i+1,k+1} - T_{i+1,k}} \cdot ak_{gasLUT,i+1,k}(\nu) \\
&+ \frac{p - p_i}{p_{i+1} - p_i} \cdot \frac{T - T_{i+1,k}}{T_{i+1,k+1} - T_{i+1,k}} \cdot ak_{gasLUT,i+1,k+1}(\nu)
\end{aligned} \tag{4.7.5.2-7}$$

ここで、 ak_{gasLUT} は気体種 gas の吸収断面積の LUT の値、添字 i, j, k は LUT のグリッド点を表し、それぞれ $p_i < p \leq p_{i+1}$, $T_{ij} < T \leq T_{ij+1}$, $T_{i+1,k} < T \leq T_{i+1,k+1}$ を満たすものとする。

$$ak_{cnt,gas}(\nu; T) = \frac{T_{i+1} - T}{T_{i+1} - T_i} \cdot ak_{cnt,gasLUT,i}(\nu) + \frac{T - T_i}{T_{i+1} - T_i} \cdot ak_{cnt,gasLUT,i+1}(\nu) \tag{4.7.5.2-8}$$

ここで、添字 i は LUT のグリッド点を表し、 $T_i < T \leq T_{i+1}$ を満たすものとする。

4.7.5.3 気体分子の散乱 (Rayleigh 散乱) による光学的厚さ

< 空気の部分気柱量 >

Main-layer の層 lm における空気の部分気柱量は、水蒸気の部分カラム平均濃度 $C_{H_2O,ml=lm}$ [ppm] を用いて式 (4.7.5.3-1) で与えられる。

$$w_{air,ml=lm} = w_{dry,ml=lm} \cdot (1 + C_{H_2O,ml=lm} \cdot 10^{-6}) \tag{4.7.5.3-1}$$

< 気体分子の散乱による光学的厚さ >

地球大気による太陽光の散乱 (Rayleigh 散乱) を考える。Main-layer の層 lm における気体分子 1 個当たりの Rayleigh 散乱の散乱断面積 $\sigma_{sca,m,ml=lm}$ [cm²/molecules] は式 (4.7.5.3-2) で与えられる。

$$\sigma_{sca,m,ml=lm}(\lambda) = \frac{24 \cdot \pi^3 \cdot (nr_{air,ml=lm}^2 - 1)^2}{\lambda^4 \cdot n_{air}^2 \cdot (nr_{air,ml=lm}^2 + 2)^2} \left(\frac{6 + 3 \cdot \delta_{ml=lm}}{6 - 7 \cdot \delta_{ml=lm}} \right) \cdot 10^{16} \tag{4.7.5.3-2}$$

ここで、 λ は波長 [μm] で波数 ν [cm⁻¹] の逆数 ($\lambda = 10000 / \nu$)、 nr_{air} は大気の屈折率、 $n_{air} = 2.546899 \times 10^{19}$ [molecules/cm³] は気体分子数密度、 δ は偏光解消因

子である。

式 (4.7.5.3-2) 右辺の各変数は、Bodhaine et al. (1999) に従い、二酸化炭素の部分カラム平均濃度 $C_{CO_2,ml=lm}$ [ppm] の関数として、式(4.7.5.3-3) ~ 式 (4.7.5.3-8) より計算する。

$$nr_{air,ml=lm} = 1 + (n_{300} - 1) \cdot \left[1 + 0.0054 \cdot (C_{CO_2,ml=lm} \cdot 10^{-4} - 0.03) \right] \quad (4.7.5.3-3)$$

$$(n_{300} - 1) = \left(8060.51 + \frac{2480990}{132.274 - \lambda^{-2}} + \frac{17455.7}{39.32957 - \lambda^{-2}} \right) \cdot 10^{-8} \quad (4.7.5.3-4)$$

$$\begin{aligned} \frac{6 + 3 \cdot \delta_{ml=lm}}{6 - 7 \cdot \delta_{ml=lm}} &= F_{air,ml=lm} \\ &= \frac{78.084 \cdot F_{N_2} + 20.946 \cdot F_{O_2} + 0.934 \times 1.00 + C_{CO_2,ml=lm} \cdot 10^{-4} \times 1.15}{78.084 + 20.946 + 0.934 + C_{CO_2,ml=lm} \cdot 10^{-4}} \end{aligned} \quad (4.7.5.3-5)$$

$$F_{N_2} = 1.034 + \frac{3.17 \cdot 10^{-4}}{\lambda^2} \quad (4.7.5.3-6)$$

$$F_{O_2} = 1.096 + \frac{1.385 \cdot 10^{-3}}{\lambda^2} + \frac{1.448 \cdot 10^{-4}}{\lambda^4} \quad (4.7.5.3-7)$$

$$\delta_{ml=lm} = \frac{6 \cdot (F_{air,ml=lm} - 1)}{7 \cdot F_{air,ml=lm} + 3} \quad (4.7.5.3-8)$$

以上より、Main-layer の層 lm における気体分子の散乱による光学的厚さ $\tau_{sca,m,ml=lm}$ は式 (4.7.5.3-9) で与えられるため、RT-layer の層 lr における気体分子の散乱による光学的厚さ $\tau_{sca,m,rl=lr}$ は式 (4.7.5.3-10) で与えられる。

$$\tau_{sca,m,ml=lm}(\nu) = \sigma_{sca,m,ml=lm}(\lambda(\nu)) \cdot w_{air,ml=lm} \quad (4.7.5.3-9)$$

$$\tau_{sca,m,rl=lr}(\nu) = \tau_{sca,m,ml=lm(lr)}(\nu) \cdot frc_{RT}(lr) \quad (4.7.5.3-10)$$

また、Rayleigh 散乱の偏光解消因子 $\delta_{rl=lr}(\nu)$ は RT-layer の層 lr が属する Main-layer の偏光解消因子 (式 4.7.5.3-8) を用いる。

4.7.5.4 エアロソルの先験値

カラム平均気体濃度の導出に際してエアロソルを同時推定することで、その散乱の影響を考慮する。エアロソルは多種多様であり、その時間・空間分布を考慮するためエアロソル輸送モデル SPRINTARS の結果を利用する (1.2 節 (3) GOSAT-2 TANSO-FTS-2 L2 事前処理 アルゴリズム基準書 参照)。しかしながら、観測輝度スペクトルからはそれらを識別するための十分な情報は得られないため、FTS-2 SWIR L2 処理では 2 タイプのエアロソル (各タイプは複数のエアロソル種からなる) を扱う。なお、エアロソル光学的厚さは波長依存性を示すものの、それぞれのエアロソルタイプで相対的な波長構造は一意に決まることから、エアロソルタイプ毎の基準波長における光学的厚さの対数を同時推定対象物理量として設定する。なお、カラム平均気体濃度の導出に対するエアロソルの影響度を考慮するという観点から、基準波長は $1.6 \mu\text{m}$ とする。

SPRINTARS からは砂塵性エアロソル (10 粒径別)・炭素性エアロソル (4 種)・硫酸塩エアロソル (1 種)・海塩エアロソル (4 粒径別) の鉛直グリッドの境界における 19 種のエアロソル質量混合比 [kg/kg] が得られる。FTS-2 L2 SWIR 処理で扱う 2 タイプのエアロソルを、表 4.7.5.4-1 に示すように分類する。なお、吸湿性エアロソルの散乱特性が相対湿度に応じて変化する性質はエアロソル散乱特性 LUT において異なる成分として取り扱われており、全 19 種 75 成分に対し、19 種の区別に添字 *aer*、75 成分の区別に添字 *aerLUT* を用いる。

表 4.7.5.4-1 FTS-2 L2 SWIR 処理におけるエアロソル種のタイプ分類と吸湿性の有無。

エアロソル種		タイプ	吸湿性	成分数
砂 塵 性 エ ア ロ ソ ル	粒径 0.13 μm	2	無	1
	粒径 0.20 μm	2	無	1
	粒径 0.33 μm	2	無	1
	粒径 0.52 μm	2	無	1
	粒径 0.82 μm	2	無	1
	粒径 1.27 μm	2	無	1
	粒径 2.02 μm	2	無	1
	粒径 3.20 μm	2	無	1
	粒径 5.06 μm	2	無	1
	粒径 8.02 μm	2	無	1
炭素 性エ アロ ソル	黒色 / 有機 0.3	1	有	8
	黒色 / 有機 0.15	1	有	8
	黒色 / 有機 0.0	1	有	8
	純黒色炭素	1	無	1
硫酸塩エアロソル		1	有	8
海塩 エア ロソ ル	粒径 0.178 μm	2	有	8
	粒径 0.562 μm	2	有	8
	粒径 1.780 μm	2	有	8
	粒径 5.620 μm	2	有	8

01

<エアロソル質量混合比の remap>

SPRINTARS の鉛直グリッドの境界におけるエアロソル質量混合比 $C_{aer,ab-la}$ [kg/kg] を、Main-layer の各層の部分気柱質量 $m_{aer,ml-lm}$ [g/cm²] に変換する。ここで、SPRINTARS の層数を $Naer$ 、添字 ab, al, la はそれぞれ境界における値、層内における値、鉛直グリッドの要素を表すものとする。

エアロソルの部分気柱質量は空気の質量密度を用いて式 (4.7.5.4-1) で表されるため、気体濃度の remap と同様に計算できる。

$$m_{aerLUT} = \int C_{aerLUT} \cdot \rho_{air} dz = \int C_{aerLUT} dM_{air} \quad (4.7.5.4-1)$$

$$M_{air,ob=lo} = \begin{cases} 0 & lo = 1 \\ M_{air,ob=lo-1} + m_{air,ol=lo-1} & 1 < lo \leq No + 1 \end{cases} \quad (4.7.5.4-2)$$

$$\begin{aligned}
m_{aerLUT,ml=lm} = & \sum_{la=1}^{Naer} \left[(1 - A_{al=la,p1-p2}) \cdot C_{aerLUT,ab=la} + A_{al=la,p1-p2} \cdot C_{aerLUT,ab=la+1} \right] \cdot \Delta_{p1-p2} \\
& + C_{aerLUT,ab=1} \cdot \Delta_0 + C_{aerLUT,ab=Na+1} \cdot \Delta_{Naer}
\end{aligned} \tag{4.7.5.4-3}$$

ここで、係数 A , Δ は式 (4.7.5.1-12), 式 (4.7.5.1-15) ~ (4.7.5.1-21) の W_{dry} を M_{air} に、 $Ngas$, gl , gb , lg をそれぞれ $Naer$, al , ab , la に置き換えたもので与えられる。

吸湿性エアロソルに対しては、LUT の散乱特性を相対湿度に対して線形内挿したものをを用いるが、計算の都合上、エアロソル部分気柱質量を相対湿度に応じて分配するという形をとる。相対湿度 rh は、水蒸気圧 e と飽和水蒸気圧 $e_{sat}(T)$ を用いて式 (4.7.5.4-4) で与えられる。

$$rh_{ml=lm} = \frac{e_{ml=lm}}{e_{sat,ml=lm}(T_{ml=lm})} \tag{4.7.5.4-4}$$

$$e_{ml=lm} = \frac{C_{H_2O,ml=lm}}{10^6 + C_{H_2O,ml=lm}} \cdot P_{ml=lm} \tag{4.7.5.4-5}$$

飽和水蒸気圧 $e_{sat}(T)$ は Tetens の式より、

$$e_{sat}(T) = \begin{cases} 6.11 \times 10^{\frac{7.5(T-273.15)}{237.3+(T-273.15)}} & T \geq 273.15 \\ 6.11 \times 10^{\frac{9.5(T-273.15)}{265.5+(T-273.15)}} & T < 273.15 \end{cases} \tag{4.7.5.4-6}$$

エアロソル散乱特性 LUT で使用している相対湿度 8 種を rh_i (i は要素) とすると、相対湿度による部分気柱質量の分配は式 (4.7.5.4-7) で与えられる。

$$m_{aer,rhi,ml=lm} = \begin{cases} m_{aer,ml=lm} \cdot \frac{rh_{ml=lm} - rh_{irh}}{rh_{irh+1} - rh_{irh}} & i = irh \\ m_{aer,ml=lm} \cdot \frac{rh_{irh+1} - rh_{ml=lm}}{rh_{irh+1} - rh_{irh}} & i = irh + 1 \\ 0 & others \end{cases} \tag{4.7.5.4-7}$$

ここで、 irh は $rh_{irh} < rh_{ml=lm} \leq rh_{irh+1}$ を満たす要素を表す。なお、相対湿度グリッ

ド点との対応を明確にするため、便宜上 *aer,rhi* という添字を用いているが、本来は添字 *aerLUT* で表される。

< 基準波長におけるエアロソル光学的厚さ >

基準波長 λ_{ref} (対応する波数を ν_{ref} とする) におけるタイプ別のエアロソル光学的厚さは式 (4.7.5.4-8) で表され、これの対数をとったものが先験値となる。また、エアロソルタイプ毎の規格化光学的厚さ、一次散乱アルベド、散乱位相行列は式 (4.7.5.4-11), (4.7.5.4-12), (4.7.5.4-13) で表される。

$$\tau_{a,type,ml=lm}(\nu_{ref}) = \sum_{aerLUT \in type} \sigma_{ext,aerLUT}(\nu_{ref}) \cdot m_{aerLUT,ml=lm} \quad (4.7.5.4-8)$$

$$\sigma_{ext,aerLUT}(\nu) = \sigma_{ext,aerLUT,i} \cdot \left(\frac{\lambda}{\lambda_i} \right)^\alpha \quad (4.7.5.4-9)$$

$$\alpha = \frac{\log(\sigma_{ext,aerLUT,i+1} / \sigma_{ext,aerLUT,i})}{\log(\lambda_{i+1} / \lambda_i)} \quad (4.7.5.4-10)$$

$$\bar{\tau}_{a,type,ml=lm}(\nu) = \frac{\tau_{a,type,ml=lm}(\nu)}{\tau_{a,type,ml=lm}(\nu_{ref})} \quad (4.7.5.4-11)$$

$$\omega_{a,type,ml=lm}(\nu) = \frac{\tau_{sca,a,type,ml=lm}(\nu)}{\tau_{a,type,ml=lm}(\nu)} \quad (4.7.5.4-12)$$

$$\mathbf{P}_{a,type,ml=lm}(\Theta, \nu) = \frac{\sum_{aerLUT \in type} \sigma_{sca,aerLUT}(\nu) \cdot \mathbf{P}_{aerLUT}(\Theta, \nu) \cdot m_{aerLUT,ml=lm}}{\tau_{sca,a,type,ml=lm}(\nu)} \quad (4.7.5.4-13)$$

$$\tau_{sca,a,type,ml=lm}(\nu) = \sum_{aerLUT \in type} \sigma_{sca,aerLUT}(\nu) \cdot m_{aerLUT,ml=lm} \quad (4.7.5.4-14)$$

$$\begin{aligned} & \sigma_{sca,aerLUT}(\nu) \\ &= \sigma_{ext,aerLUT}(\nu) \cdot \left(\frac{\sigma_{sca,aerLUT,i}}{\sigma_{ext,aerLUT,i}} \cdot \frac{\lambda_{i+1} - \lambda}{\lambda_{i+1} - \lambda_i} + \frac{\sigma_{sca,aerLUT,i+1}}{\sigma_{ext,aerLUT,i+1}} \cdot \frac{\lambda - \lambda_i}{\lambda_{i+1} - \lambda_i} \right) \end{aligned} \quad (4.7.5.4-15)$$

$$\mathbf{P}_{aerLUT}(\Theta, \nu) = \mathbf{P}_{aerLUT,i}(\Theta) \cdot \frac{\lambda_{i+1} - \lambda}{\lambda_{i+1} - \lambda_i} + \mathbf{P}_{aerLUT,i+1}(\Theta) \cdot \frac{\lambda - \lambda_i}{\lambda_{i+1} - \lambda_i} \quad (4.7.5.4-16)$$

ここで、 λ は波数 ν に対応する波長、 $\sigma_{ext,aerLUT}$ 、 $\sigma_{sca,aerLUT}$ 、 \mathbf{P}_{aerLUT} はそれぞれエアロソル成分 *aerLUT* に対応するエアロソル散乱特性 LUT の消散係数 [cm²/g]、

散乱係数 [cm²/g]、散乱位相行列で、添字 i は $\lambda_i < \lambda \leq \lambda_{i+1}$ を満たす LUT の要素を表す。

4.7.5.5 エアロソルタイプ別の光学的厚さ、散乱の光学的厚さ、散乱位相行列

RT-layer の層 lr におけるエアロソル散乱特性は式 (4.7.5.4-8), (4.7.5.4-11) ~ (4.7.5.4-12) を用いて、式 (4.7.5.5-1) ~ (4.7.5.5-3) のように計算できる。

$$\tau_{a,type,rl=lr}(\nu) = \bar{\tau}_{a,type,ml=lm(lr)}(\nu) \cdot \tau_{a,type,ml=lm(lr)}(\nu_{ref}) \cdot frc_{RT}(lr) \quad (4.7.5.5-1)$$

$$\tau_{sca,a,type,rl=lr}(\nu) = \bar{\omega}_{a,type,ml=lm(lr)}(\nu) \cdot \tau_{a,type,rl=lr}(\nu) \quad (4.7.5.5-2)$$

$$\mathbf{P}_{a,type,rl=lr}(\Theta, \nu) = \mathbf{P}_{a,type,ml=lm(lr)}(\Theta, \nu) \quad (4.7.5.5-3)$$

4.7.5.6 雲タイプ別の光学的厚さ、散乱の光学的厚さ、散乱位相行列

TANSO-FTS-2 SWIR L2 処理では、単層均質な氷雲 1 タイプを扱う。RT_layer の層 lr における雲の散乱特性は、基準波長 λ_{ref} における光学的厚さを用いて式 (4.7.5.6-1) ~ (4.7.5.6-3) で与えられる。

$$\tau_{c,type,rl=lr}(\nu) = \frac{\sigma_{ext,cld}(\nu, D_{eff})}{\sigma_{ext,cld}(\nu_{ref}, D_{eff})} \cdot \tau_{c,type}(\nu_{ref}) \cdot frc_{CLD}(lr) \quad (4.7.5.6-1)$$

$$\tau_{sca,c,type,rl=lr}(\nu) = \bar{\omega}_{cld}(\nu, D_{eff}) \cdot \tau_{c,type,rl=lr}(\nu) \quad (4.7.5.6-2)$$

$$\mathbf{P}_{c,type,rl=lr}(\Theta, \nu) = \mathbf{P}_{cld}(\Theta, \nu, D_{eff}) \quad (4.7.5.6-3)$$

ここで、 $\sigma_{ext,cld}$, $\bar{\omega}_{cld}$, \mathbf{P}_{cld} は雲散乱特性 LUT (3.3.1 項参照) から各波長グリッドにおける値を有効粒径 D_{eff} に対して 4 点 Lagrange 補間で求めたのちに、波数 ν に対応する波長に対して補間することで求める。波長の補間は $\sigma_{ext,cld}$ に対しては rational function based constrained interpolation profile method (Xiao et al. 1996)、 $\bar{\omega}_{cld}$, \mathbf{P}_{cld} に対しては線形補間とする。

4.7.5.7 地表面アルベド

地表面アルベドの波数依存性を、波数範囲内の複数の標本点を連結して表される折線状の構造で近似する。サブバンド内を $(nalbSB - 1)$ 個の等波数間隔で区切り、 $nalbSB$ 個の標本点を定める。この標本点における地表面アルベドの値を推定対象物理量とす

る。隣り合う標本点間において、地表面アルベドは区分的に波数の一次関数で表される。 i 番目の標本点における地表面アルベドを $\alpha_{SB,i}$ とすると、地表面アルベドは式 (4.7.5.7-1) で与えられる。

$$\alpha(\nu) = \frac{\nu_{i+1} - \nu}{\nu_{i+1} - \nu_i} \cdot \alpha_{SB,i} + \frac{\nu - \nu_i}{\nu_{i+1} - \nu_i} \cdot \alpha_{SB,i+1} \quad \nu_i < \nu \leq \nu_{i+1} \quad (4.7.5.7-1)$$

$$\nu_i = \nu_{SB,sta} + \frac{\nu_{SB,end} - \nu_{SB,sta}}{nalbSB - 1} \cdot (i - 1) \quad i = 1, 2, \dots, nalbSB \quad (4.7.5.7-2)$$

ここで、添字 SB,sta , SB,end はそれぞれサブバンド SB の開始波数点、終了波数点を表す。

また、地表面アルベドの先験値は気体吸収の影響が相対的に小さい波数点の偏光合成観測輝度スペクトルから式 (4.7.5.7-3) を用いてサブバンド毎に計算する。サブバンド内のすべての標本点に対し、同一の値を設定する。

$$\alpha_{prior,SB} = \overline{\alpha_{clr,SB}(\nu)} \Big|_{\alpha_{clr,SB}(\nu) \geq 0.98 \cdot \text{Max}(\alpha_{clr,SB}(\nu))} \quad (4.7.5.7-3)$$

$$\alpha_{clr,SB}(\nu) = \frac{\pi \cdot D_{sun-obs}^2 \cdot S_{synth,SB}(\nu)}{\cos \theta_0 \cdot F_0(\nu)} \quad (4.7.5.7-4)$$

ここで、 $\overline{x} \Big|_{condition}$ は条件 $condition$ を満たす x に対する平均値を表す。

4.7.5.8 推定対象物理量の先験値と分散・共分散行列（まとめ）

各推定対象物理量に対し、先験値とその分散・共分散行列の情報を表 4.7.5.8-1 にまとめる。

表 4.7.5.8-1 各推定対象物理量の先験値とその分散・共分散行列。

推定対象物理量	先験値とその分散・共分散行列
CO ₂ 高度分布 (15 層)	FTS-2 L2 事前処理 処理結果をもとに式 (4.7.5.1-22), (4.7.5.1-23) によりそれぞれ計算。
CH ₄ 高度分布 (15 層)	FTS-2 L2 事前処理 処理結果をもとに式 (4.7.5.1-22), (4.7.5.1-23) によりそれぞれ計算。
CO 高度分布 (15 層)	FTS-2 L2 事前処理 処理結果をもとに式 (4.7.5.1-22), (4.7.5.1-23) によりそれぞれ計算。
H ₂ O 高度分布 (15 層)	FTS-2 L2 事前処理 処理結果をもとに式 (4.7.5.1-22), (4.7.5.1-23) によりそれぞれ計算。
エアロゾル高度分布 (15 層、2 タイプ)	先験値は、FTS-2 L2 事前処理 処理結果をもとに式 (4.7.5.4-8) により計算した基準波数における光学的厚さの対数。分散は (0.2) ² とする。
地表面気圧	先験値は FTS-2 L2 事前処理 処理結果を使用。分散は (5 [hPa]) ² とする。
気温高度分布のシフト量	先験値は 0.0 [K]、分散は (5 [K]) ² とする。
クロロフィル蛍光 (基準波数における輝度)	先験値は 1.0×10^{-9} [W/cm ² /str/cm ⁻¹]、分散は $(1.0 \times 10^{-9}$ [W/cm ² /str/cm ⁻¹]) ² とする。 式 (4.7.4-10) 参照。
クロロフィル蛍光 (波数に対する傾き)	先験値は 1.8×10^{-3} [cm]、分散は $(7.0 \times 10^{-4}$ [cm]) ² とする。 式 (4.7.4-10) 参照。
地表面アルベド	先験値は式 (4.7.5.7-3) により計算。分散は導出処理 (SIF・proxy 法) では (0.1) ² 、導出処理 (full-physics 法) では (0.01) ² とする。
ゼロレベルオフセット	先験値は 0.0 [W/cm ² /str/cm ⁻¹]、分散は $(1.0 \times 10^{-8}$ [W/cm ² /str/cm ⁻¹]) ² とする。 式 (4.7.4-11) 参照。
波数軸補正係数	先験値は 0.0、分散は $(1.0 \times 10^{-5})^2$ とする。 式 (4.7.4-12) 参照。
装置関数伸縮係数	先験値は 1.0、分散は $(1.0 \times 10^{-3})^2$ とする。 式 (4.7.4-16) 参照。

4.7.5.9 散乱特性と pstar 入力変数の対応 (まとめ)

散乱特性と pstar 入力変数の対応を表 4.7.5.9-1 にまとめる。

表 4.7.5.9-1 散乱特性と pstar 入力変数の対応。

pstar 入力変数	散乱特性
RT-layer の各層における光学的厚さ $\tau_{rl}(\nu)$	$\tau_{rl}(\nu) = \tau_{abs,m,rl}(\nu) + \tau_{sca,m,rl}(\nu) + \sum \tau_{a,type,rl}(\nu) + \sum \tau_{c,type,rl}(\nu)$ 式 (4.7.5.2-2)、(4.7.5.3-10)、(4.7.5.5-1)、(4.7.5.6-1)
RT-layer の各層における Rayleigh 散乱の光学的厚さ $\tau_{sca,m,rl}(\nu)$	式 (4.7.5.3-10)
RT-layer の各層における Rayleigh 散乱以外の散乱成分のタイプ別光学的厚さ $\tau_{sca,p,type,rl}(\nu)$	式 (4.7.5.5-2)、(4.7.5.6-2)
RT-layer の各層における Rayleigh 散乱以外の散乱成分のタイプ別散乱位相行列 $\mathbf{P}_{p,type,rl}(\Theta, \nu)$	式 (4.7.5.5-3)、(4.7.5.6-3)
RT-layer の各層における Rayleigh 散乱の偏光解消因子 $\delta_{rl}(\nu)$	式 (4.7.5.3-8)
地表面アルベド $\alpha(\nu)$	式 (4.7.5.7-1)

4.7.6 ヤコビアン

式 (4.7.4-14) 右辺の $\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu)/\partial \mathbf{x}$ を pstar 出力変数の関数として各 state vector に対して求める。なお、必要に応じて $\partial \mathbf{I}/\partial \ln(x) = x \times \partial \mathbf{I}/\partial x$ の関係を用いる。

(a) 層内平均気体濃度

層内平均気体濃度 $C_{gas,ml=lm}$ に対するヤコビアンは式 (4.7.6-1) で与えられる $\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu)/\partial C_{gas,ml=lm}$ を用いて計算できる。

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu)}{\partial C_{gas,ml=lm}} &= \sum_{lr \in lm} \frac{\partial \tau_{abs,gas,ml=lm(lr)}(\nu)}{\partial C_{gas,ml=lm(lr)}} \cdot \frac{\partial \tau_{abs,gas,rl=lr}(\nu)}{\partial \tau_{abs,gas,ml=lm(lr)}(\nu)} \cdot \frac{\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu)}{\partial \tau_{abs,rl=lr}(\nu)} \\
 &= \frac{f_{\mathbf{I}} \cdot [\tau_{abs,gas,ml=lm}(\nu) + \Delta \tau_{ml=lm}]}{C_{gas,ml=lm}} \cdot \sum_{lr \in lm} frc_{RT}(lr) \cdot \frac{\partial \mathbf{I}_{RT}(\nu)}{\partial \tau_{abs,rl=lr}(\nu)}
 \end{aligned} \tag{4.7.6-1}$$

$$\Delta\tau_{ml=lm} = \begin{cases} C_{H_2O,ml=lm} \cdot \sum_{ls \in lm} w_{H_2O,sl=ls} \cdot \frac{\partial\sigma_{abs,H_2O,sl=ls}(\nu)}{\partial C_{H_2O,sl=ls}} & \text{for } H_2O \\ 0 & \text{others} \end{cases} \quad (4.7.6-2)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial\sigma_{abs,H_2O,sl=ls}(\nu)}{\partial C_{H_2O,sl=ls}} \\ &= \left[ak_{cnt,slf}(\nu; T_{sl=ls}) - ak_{cnt,frm}(\nu; T_{sl=ls}) \right] \cdot \frac{p_{sl=ls}}{p_0} \cdot \frac{T_0}{T_{sl=ls}} \cdot \frac{10^6}{(10^6 + C_{H_2O,sl=ls})^2} \end{aligned} \quad (4.7.6-3)$$

(b) エアロソル：層別光学的厚さの対数

エアロソルの層別光学的厚さの対数 $\ln(\tau_{a,type,ml=lm})$ に対するヤコビアンは式 (4.7.6-4) で与えられる $\partial\mathbf{I}_{mono}(\nu)/\partial\ln(\tau_{a,type,ml=lm})$ を用いて計算できる。

$$\begin{aligned} & \frac{\partial\mathbf{I}_{mono}(\nu)}{\partial\ln(\tau_{a,type,ml=lm}(\nu_{ref}))} \\ &= \sum_{lr \in lm} \frac{\partial\tau_{abs,a,type,ml=lm(lr)}(\nu)}{\partial\ln(\tau_{a,type,ml=lm}(\nu_{ref}))} \cdot \frac{\partial\tau_{abs,rl=lr}(\nu)}{\partial\tau_{abs,a,type,ml=lm(lr)}(\nu)} \cdot \frac{\partial\mathbf{I}_{mono}(\nu)}{\partial\tau_{abs,rl=lr}(\nu)} \\ &+ \sum_{lr \in lm} \frac{\partial\tau_{sca,a,type,ml=lm(lr)}(\nu)}{\partial\ln(\tau_{a,type,ml=lm}(\nu_{ref}))} \cdot \frac{\partial\tau_{sca,a,type,rl=lr}(\nu)}{\partial\tau_{sca,a,type,ml=lm(lr)}(\nu)} \cdot \frac{\partial\mathbf{I}_{mono}(\nu)}{\partial\tau_{sca,a,type,rl=lr}(\nu)} \quad (4.7.6-4) \\ &= f_I \cdot \tau_{abs,a,type,ml=lm}(\nu) \cdot \sum_{lr \in lm} frc_{RT}(lr) \cdot \frac{\partial\mathbf{I}_{RT}(\nu)}{\partial\tau_{abs,rl=lr}(\nu)} \\ &+ f_I \cdot \tau_{sca,a,type,ml=lm}(\nu) \cdot \sum_{lr \in lm} frc_{RT}(lr) \cdot \frac{\partial\mathbf{I}_{RT}(\nu)}{\partial\tau_{sca,a,type,rl=lr}(\nu)} \end{aligned}$$

(c) 地表面気圧

地表面気圧 p_{SRF} に対するヤコビアンは式 (4.7.6-5) で与えられる $\partial\mathbf{I}_{mono}(\nu)/\partial p_{SRF}$ を用いて計算できる。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu)}{\partial p_{SRF}} &= \sum_{lr=1}^{Nr} \frac{\partial \tau_{abs,m,rl=lr}(\nu)}{\partial p_{SRF}} \cdot \frac{\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu)}{\partial \tau_{abs,rl=lr}(\nu)} + \sum_{lr=1}^{Nr} \frac{\partial \tau_{sca,m,rl=lr}(\nu)}{\partial p_{SRF}} \cdot \frac{\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu)}{\partial \tau_{sca,m,rl=lr}(\nu)} \\
&+ \sum_{lr=1}^{Nr} \sum_{type} \frac{\partial \tau_{abs,a,type,rl=lr}(\nu)}{\partial p_{SRF}} \cdot \frac{\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu)}{\partial \tau_{abs,rl=lr}(\nu)} \\
&+ \sum_{lr=1}^{Nr} \sum_{type} \frac{\partial \tau_{sca,a,type,rl=lr}(\nu)}{\partial p_{SRF}} \cdot \frac{\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu)}{\partial \tau_{sca,a,type,rl=lr}(\nu)} \\
&+ \sum_{lr=1}^{Nr} \sum_{type} \frac{\partial \tau_{abs,c,type,rl=lr}(\nu)}{\partial p_{SRF}} \cdot \frac{\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu)}{\partial \tau_{abs,rl=lr}(\nu)} \\
&+ \sum_{lr=1}^{Nr} \sum_{type} \frac{\partial \tau_{sca,c,type,rl=lr}(\nu)}{\partial p_{SRF}} \cdot \frac{\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu)}{\partial \tau_{sca,c,type,rl=lr}(\nu)} \\
&= f_{\mathbf{I}} \cdot \sum_{lr=1}^{Nr} \frac{\partial \tau_{abs,m,ml=lm(lr)}(\nu)}{\partial p_{SRF}} \cdot frc_{RT}(lr) \cdot \frac{\partial \mathbf{I}_{RT}(\nu)}{\partial \tau_{abs,rl=lr}(\nu)} \\
&+ f_{\mathbf{I}} \cdot \sum_{lr=1}^{Nr} \tau_{abs,m,ml=lm(lr)}(\nu) \cdot \frac{\partial frc_{RT}(lr)}{\partial p_{SRF}} \cdot \frac{\partial \mathbf{I}_{RT}(\nu)}{\partial \tau_{abs,rl=lr}(\nu)} \\
&+ f_{\mathbf{I}} \cdot \sum_{lr=1}^{Nr} \frac{\partial \tau_{sca,m,ml=lm(lr)}(\nu)}{\partial p_{SRF}} \cdot frc_{RT}(lr) \cdot \frac{\partial \mathbf{I}_{RT}(\nu)}{\partial \tau_{sca,m,rl=lr}(\nu)} \\
&+ f_{\mathbf{I}} \cdot \sum_{lr=1}^{Nr} \tau_{sca,m,ml=lm(lr)}(\nu) \cdot \frac{\partial frc_{RT}(lr)}{\partial p_{SRF}} \cdot \frac{\partial \mathbf{I}_{RT}(\nu)}{\partial \tau_{sca,m,rl=lr}(\nu)} \\
&+ f_{\mathbf{I}} \cdot \sum_{lr=1}^{Nr} \sum_{type} \tau_{abs,a,type,ml=lm(lr)}(\nu) \cdot \frac{\partial frc_{RT}(lr)}{\partial p_{SRF}} \cdot \frac{\partial \mathbf{I}_{RT}(\nu)}{\partial \tau_{abs,rl=lr}(\nu)} \\
&+ f_{\mathbf{I}} \cdot \sum_{lr=1}^{Nr} \sum_{type} \tau_{sca,a,type,ml=lm(lr)}(\nu) \cdot \frac{\partial frc_{RT}(lr)}{\partial p_{SRF}} \cdot \frac{\partial \mathbf{I}_{RT}(\nu)}{\partial \tau_{sca,a,type,rl=lr}(\nu)} \\
&+ f_{\mathbf{I}} \cdot \sum_{lr=1}^{Nr} \sum_{type} \tau_{abs,c,type}(\nu) \cdot \frac{\partial frc_{CLD,type}(lr)}{\partial p_{SRF}} \cdot \frac{\partial \mathbf{I}_{RT}(\nu)}{\partial \tau_{abs,rl=lr}(\nu)} \\
&+ f_{\mathbf{I}} \cdot \sum_{lr=1}^{Nr} \sum_{type} \tau_{sca,c,type}(\nu) \cdot \frac{\partial frc_{CLD,type}(lr)}{\partial p_{SRF}} \cdot \frac{\partial \mathbf{I}_{RT}(\nu)}{\partial \tau_{sca,a,type,rl=lr}(\nu)}
\end{aligned} \tag{4.7.6-5}$$

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \tau_{abs,m,ml=lm}(\nu)}{\partial p_{SRF}} \\
&= \sum_{gas} \sum_{ls \in lm} \left[\frac{\partial p_{sl=ls}}{\partial p_{SRF}} \cdot \frac{\partial \sigma_{abs,gas,sl=ls}(\nu; p_{sl=ls}, T_{sl=ls})}{\partial p_{sl=ls}} \cdot w_{gas,sl=ls} \right] + \frac{\tau_{abs,m,ml=lm}(\nu)}{p_{SRF} - p_{TOA}}
\end{aligned} \tag{4.7.6-6}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial p_{sl=ls}}{\partial p_{SRF}} \\
& = \begin{cases} \frac{\left[\frac{ls \cdot p_{sb=ls+1}}{Nd} + \frac{(ls-1) \cdot p_{sb=ls}}{Nd} \right] \cdot \left(1 - \frac{p_{mb=1}}{p_{mb=2}} \right)}{2 \cdot (p_{SRF} - p_{TOA})} & 1 \leq ls \leq Nd \\ \frac{p_{sl=ls} - p_{TOA}}{p_{SRF} - p_{TOA}} & Nd + 1 \leq ls \leq Ns + 1 \end{cases}
\end{aligned} \tag{4.7.6-7}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \sigma_{abs, gas, sl=ls}(\nu; p_{sl=ls}, T_{sl=ls})}{\partial p_{sl=ls}} \\
& = \begin{cases} \frac{\partial ak_{gas}(\nu; p_{sl=ls}, T_{sl=ls})}{\partial p_{sl=ls}} \\ + ak_{cnt, stf}(\nu; T_{sl=ls}) \cdot \frac{1}{p_0} \cdot \frac{T_0}{T_{sl=ls}} \cdot \frac{C_{H_2O, sl=ls}}{10^6 + C_{H_2O, sl=ls}} & \text{for } H_2O \\ + ak_{cnt, frm}(\nu; T_{sl=ls}) \cdot \frac{1}{p_0} \cdot \frac{T_0}{T_{sl=ls}} \cdot \frac{10^6}{10^6 + C_{H_2O, sl=ls}} \\ \frac{\partial ak_{gas}(\nu; p_{sl=ls}, T_{sl=ls})}{\partial p_{sl=ls}} & \text{others} \end{cases}
\end{aligned} \tag{4.7.6-8}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial ak_{gas}(\nu; p, T)}{\partial p} & = - \frac{1}{p_{i+1} - p_i} \cdot \frac{T_{i,j+1} - T}{T_{i,j+1} - T_{i,j}} \cdot ak_{gasLUT, i, j}(\nu) \\
& - \frac{1}{p_{i+1} - p_i} \cdot \frac{T - T_{i,j}}{T_{i,j+1} - T_{i,j}} \cdot ak_{gasLUT, i, j+1}(\nu) \\
& + \frac{1}{p_{i+1} - p_i} \cdot \frac{T_{i+1, k+1} - T}{T_{i+1, k+1} - T_{i+1, k}} \cdot ak_{gasLUT, i+1, k}(\nu) \\
& + \frac{1}{p_{i+1} - p_i} \cdot \frac{T - T_{i+1, k}}{T_{i+1, k+1} - T_{i+1, k}} \cdot ak_{gasLUT, i+1, k+1}(\nu)
\end{aligned} \tag{4.7.6-9}$$

$$\frac{\partial \tau_{sca, m, ml=lm}(\nu)}{\partial p_{SRF}} = \frac{\tau_{sca, m, ml=lm}(\nu)}{p_{SRF} - p_{TOA}} \tag{4.7.6-10}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial frc_{RT}(lr)}{\partial p_{SRF}} \\
& = \begin{cases} \frac{-Nm \cdot (p_{rb=lr+1} - p_{rb=lr})}{(p_{SRF} - p_{TOA})^2} & \begin{cases} p_{rb=lr} \notin P_{mb} \\ p_{rb=lr+1} \notin P_{mb} \end{cases} \\ \frac{[lm(lr+1)-1] \cdot (p_{SRF} - p_{TOA}) - Nm \cdot (p_{rb=lr+1} - p_{rb=lr})}{(p_{SRF} - p_{TOA})^2} & \begin{cases} p_{rb=lr} \notin P_{mb} \\ p_{rb=lr+1} \in P_{mb} \end{cases} \\ \frac{[1-lm(lr)] \cdot (p_{SRF} - p_{TOA}) - Nm \cdot (p_{rb=lr+1} - p_{rb=lr})}{(p_{SRF} - p_{TOA})^2} & \begin{cases} p_{rb=lr} \in P_{mb} \\ p_{rb=lr+1} \notin P_{mb} \end{cases} \\ 0 & \text{others} \end{cases}
\end{aligned} \tag{4.7.6-11}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial frc_{CLD,type}(lr)}{\partial p_{SRF}} \\
& = \begin{cases} \frac{lm(lr+1) - lm(lr)}{Nm \cdot (p_{rb=lrbot_{type}} - p_{rb=lrtop_{type}})} & \begin{cases} lrtop_{type} \leq lr \leq lrbot_{type} - 1 \\ p_{rb=lr} \in P_{mb} \\ p_{rb=lr+1} \in P_{mb} \end{cases} \\ \frac{lm(lr+1) - 1}{Nm \cdot (p_{rb=lrbot_{type}} - p_{rb=lrtop_{type}})} & \begin{cases} lrtop_{type} \leq lr \leq lrbot_{type} - 1 \\ p_{rb=lr} \notin P_{mb} \\ p_{rb=lr+1} \in P_{mb} \end{cases} \\ \frac{1 - lm(lr)}{Nm \cdot (p_{rb=lrbot_{type}} - p_{rb=lrtop_{type}})} & \begin{cases} lrtop_{type} \leq lr \leq lrbot_{type} - 1 \\ p_{rb=lr} \in P_{mb} \\ p_{rb=lr+1} \notin P_{mb} \end{cases} \\ 0 & \text{others} \end{cases}
\end{aligned} \tag{4.7.6-12}$$

(d) 気温の高度分布のシフト量

気温の高度分布のシフト量 ΔT に対するヤコビアンは式 (4.7.6-13) で与えられる $\partial \mathbf{I}_{mono}(v) / \partial \Delta T$ を用いて計算できる。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathbf{I}_{mono}(\mathbf{v})}{\partial \Delta T} &= \sum_{lr=1}^{Nr} \frac{\partial \tau_{abs,rl=lr}(\mathbf{v})}{\partial \Delta T} \cdot \frac{\partial \mathbf{I}_{mono}(\mathbf{v})}{\partial \tau_{abs,rl=lr}(\mathbf{v})} \\
&= f_{\mathbf{I}} \cdot \sum_{lr=1}^{Nr} \frac{\partial \tau_{abs,m,ml=lm(lr)}(\mathbf{v})}{\partial \Delta T} \cdot frc_{RT}(lr) \cdot \frac{\partial \mathbf{I}_{RT}(\mathbf{v})}{\partial \tau_{abs,rl=lr}(\mathbf{v})}
\end{aligned} \tag{4.7.6-13}$$

$$\frac{\partial \tau_{abs,m,ml=lm}(\mathbf{v})}{\partial \Delta T} = \sum_{gas} \sum_{ls \in lm} \frac{\partial \sigma_{abs,gas,sl=ls}(\mathbf{v}; p_{sl=ls}, T_{sl=ls})}{\partial T_{sl=ls}} \cdot w_{gas,sl=ls} \tag{4.7.6-14}$$

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \sigma_{abs,gas,sl=ls}(\mathbf{v}; p_{sl=ls}, T_{sl=ls})}{\partial T_{sl=ls}} \\
&= \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial ak_{H_2O}(\mathbf{v}; p_{sl=ls}, T_{sl=ls})}{\partial T_{sl=ls}} \\ + \left[\frac{\partial ak_{cnt,slf}(\mathbf{v}; T_{sl=ls})}{\partial T_{sl=ls}} - \frac{ak_{cnt,slf}(\mathbf{v}; T_{sl=ls})}{T_{sl=ls}} \right] \cdot \frac{p_{sl=ls}}{p_0} \cdot \frac{T_0}{T_{sl=ls}} \cdot \frac{C_{H_2O,sl=ls}}{10^6 + C_{H_2O,sl=ls}} \\ + \left[\frac{\partial ak_{cnt,fln}(\mathbf{v}; T_{sl=ls})}{\partial T_{sl=ls}} - \frac{ak_{cnt,fln}(\mathbf{v}; T_{sl=ls})}{T_{sl=ls}} \right] \cdot \frac{p_{sl=ls}}{p_0} \cdot \frac{T_0}{T_{sl=ls}} \cdot \frac{10^6}{10^6 + C_{H_2O,sl=ls}} \\ \text{for } H_2O \\ \frac{\partial ak_{O_3}(\mathbf{v}; p_{sl=ls}, T_{sl=ls})}{\partial T_{sl=ls}} + \frac{\partial ak_{cnt,O_3}(\mathbf{v}; T_{sl=ls})}{\partial T_{sl=ls}} \\ \text{for } O_3 \\ \frac{\partial ak_{gas}(\mathbf{v}; p_{sl=ls}, T_{sl=ls})}{\partial T_{sl=ls}} \\ \text{others} \end{array} \right.
\end{aligned} \tag{4.7.6-15}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial ak_{gas}(\mathbf{v}; p, T)}{\partial T} &= -\frac{p_{i+1} - p}{p_{i+1} - p_i} \cdot \frac{1}{T_{i,j+1} - T_{i,j}} \cdot ak_{gasLUT,i,j}(\mathbf{v}) \\
&+ \frac{p_{i+1} - p}{p_{i+1} - p_i} \cdot \frac{1}{T_{i,j+1} - T_{i,j}} \cdot ak_{gasLUT,i,j+1}(\mathbf{v}) \\
&- \frac{p - p_i}{p_{i+1} - p_i} \cdot \frac{1}{T_{i+1,k+1} - T_{i+1,k}} \cdot ak_{gasLUT,i+1,k}(\mathbf{v}) \\
&+ \frac{p - p_i}{p_{i+1} - p_i} \cdot \frac{1}{T_{i+1,k+1} - T_{i+1,k}} \cdot ak_{gasLUT,i+1,k+1}(\mathbf{v})
\end{aligned} \tag{4.7.6-16}$$

$$\frac{\partial ak_{cnt,gas}(\mathbf{v}; T)}{\partial T} = \frac{1}{T_{i+1} - T_i} \cdot [ak_{cnt,gasLUT,i+1}(\mathbf{v}) - ak_{cnt,gasLUT,i}(\mathbf{v})] \tag{4.7.6-17}$$

(e) クロロフィル蛍光：基準波数における蛍光輝度

クロロフィル蛍光の基準波数における蛍光輝度 SIF_{ref} に対するヤコビアンは式 (4.7.6-18) で与えられる $\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu)/\partial SIF_{ref}$ を用いて計算できる。

$$\frac{\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu)}{\partial SIF_{ref}} = f_{\mathbf{I}} \cdot \frac{\partial \mathbf{I}_{SIF}(\nu)}{\partial SIF_{ref}}$$

$$= \begin{cases} \left(\begin{array}{c} f_{\mathbf{I}} \cdot [1 + SIF_{slp} \cdot (\nu - 13245)] \cdot \exp\left[-\frac{\tau_{gas}(\nu)}{|\cos\theta_1|}\right] \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right) & \text{for Band 1} \\ \left(\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 0 \\ (0 \ 0 \ 0 \ 0)^T \end{array} \right) & \text{for Band 2,3} \end{cases}$$

(4.7.6-18)

(f) クロロフィル蛍光：波数に対する傾き

クロロフィル蛍光の波数に対する傾き SIF_{slp} に対するヤコビアンは式 (4.7.6-19) で与えられる $\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu)/\partial SIF_{slp}$ を用いて計算できる。

$$\frac{\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu)}{\partial SIF_{slp}} = f_{\mathbf{I}} \cdot \frac{\partial \mathbf{I}_{SIF}(\nu)}{\partial SIF_{slp}}$$

$$= \begin{cases} \left(\begin{array}{c} f_{\mathbf{I}} \cdot SIF_{ref} \cdot (\nu - 13245) \cdot \exp\left[-\frac{\tau_{gas}(\nu)}{|\cos\theta_1|}\right] \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right) & \text{for Band 1} \\ \left(\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 0 \\ (0 \ 0 \ 0 \ 0)^T \end{array} \right) & \text{for Band 2,3} \end{cases}$$

(4.7.6-19)

(g) 地表面アルベド

地表面アルベドを折線近似した場合の標本点における地表面アルベド α_i に対するヤコビアンは式 (4.7.6-20) で与えられる $\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu)/\partial \alpha_i$ を用いて計算できる。

$$\frac{\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu)}{\partial \alpha_i} = f_{\mathbf{I}} \cdot \frac{\partial \alpha(\nu)}{\partial \alpha_i} \cdot \frac{\partial \mathbf{I}_{RT}(\nu)}{\partial \alpha(\nu)} \quad (4.7.6-20)$$

$$\frac{\partial \alpha(\nu)}{\partial \alpha_i} = \begin{cases} \frac{\nu_{i+1} - \nu}{\nu_{i+1} - \nu_i} & \nu_{i-1} < \nu \leq \nu_i \\ \frac{\nu - \nu_i}{\nu_{i+1} - \nu_i} & \nu_i < \nu \leq \nu_{i+1} \\ 0 & \text{others} \end{cases} \quad i = 1, 2, \dots, n_{albSB} \quad (4.7.6-21)$$

(h) ゼロレベルオフセット

ゼロレベルオフセット \mathbf{I}_{ZLO} に対するヤコビアンは式 (4.7.6-22) で与えられる $\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu) / \partial \mathbf{I}_{ZLO}$ を用いて計算できる。

$$\frac{\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu)}{\partial \mathbf{I}_{ZLO}} = 1 \quad (4.7.6-22)$$

(i) 波数軸補正係数

波数軸補正係数 $\Delta \rho$ に対するヤコビアンは式 (4.7.6-23) で与えられる $\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu) / \partial \Delta \rho$ を用いて計算できる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{I}_{mono}(\nu)}{\partial \Delta \rho} &= f_{\mathbf{I}} \cdot \frac{\partial [\mathbf{I}_{RT}(\nu) + \mathbf{I}_{SIF}(\nu)]}{\partial \nu} \\ &= f_{\mathbf{I}} \cdot C_{\nu, k-1} \cdot [\mathbf{I}_{RT}(\nu_{k-1}) + \mathbf{I}_{SIF}(\nu_{k-1})] \\ &\quad + f_{\mathbf{I}} \cdot C_{\nu, k} \cdot [\mathbf{I}_{RT}(\nu_k) + \mathbf{I}_{SIF}(\nu_k)] \\ &\quad + f_{\mathbf{I}} \cdot C_{\nu, k+1} \cdot [\mathbf{I}_{RT}(\nu_{k+1}) + \mathbf{I}_{SIF}(\nu_{k+1})] \\ &\quad + f_{\mathbf{I}} \cdot C_{\nu, k+2} \cdot [\mathbf{I}_{RT}(\nu_{k+2}) + \mathbf{I}_{SIF}(\nu_{k+2})] \end{aligned} \quad (4.7.6-23)$$

$$\begin{cases} C_{\nu, k-1} = \frac{(\nu - \nu_{k+1}) \cdot (\nu - \nu_{k+2}) + (\nu - \nu_k) \cdot (\nu - \nu_{k+2}) + (\nu - \nu_k) \cdot (\nu - \nu_{k+1})}{(\nu_{k-1} - \nu_k) \cdot (\nu_{k-1} - \nu_{k+1}) \cdot (\nu_{k-1} - \nu_{k+2})} \\ C_{\nu, k} = \frac{(\nu - \nu_{k+1}) \cdot (\nu - \nu_{k+2}) + (\nu - \nu_{k-1}) \cdot (\nu - \nu_{k+2}) + (\nu - \nu_{k-1}) \cdot (\nu - \nu_{k+1})}{(\nu_k - \nu_{k-1}) \cdot (\nu_k - \nu_{k+1}) \cdot (\nu_k - \nu_{k+2})} \\ C_{\nu, k+1} = \frac{(\nu - \nu_k) \cdot (\nu - \nu_{k+2}) + (\nu - \nu_{k-1}) \cdot (\nu - \nu_{k+2}) + (\nu - \nu_{k-1}) \cdot (\nu - \nu_k)}{(\nu_{k+1} - \nu_{k-1}) \cdot (\nu_{k+1} - \nu_k) \cdot (\nu_{k+1} - \nu_{k+2})} \\ C_{\nu, k+2} = \frac{(\nu - \nu_k) \cdot (\nu - \nu_{k+1}) + (\nu - \nu_{k-1}) \cdot (\nu - \nu_{k+1}) + (\nu - \nu_{k-1}) \cdot (\nu - \nu_k)}{(\nu_{k+2} - \nu_{k-1}) \cdot (\nu_{k+2} - \nu_k) \cdot (\nu_{k+2} - \nu_{k+1})} \end{cases} \quad (4.7.6-24)$$

(j) 装置関数伸縮係数

装置関数伸縮係数 ρ_{LS} に対するヤコビアンは、数値微分により計算する。

4.8 導出処理 (SIF・proxy 法) 後処理

導出処理 (SIF・proxy 法) の処理結果を用いて proxy 法によるカラム平均気体濃度、および、光路長変動の指標となるパラメータを求める。なお、対応する導出処理のいずれかで未収束の場合は無効値を設定する。

- ・ XCH₄ (proxy 法)

導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 2 CO₂ 1.6 μm 帯 カラム平均気体濃度で求めた $XCO2_{B2,CLR}$ 、導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 2 CH₄ 1.67 μm 帯 カラム平均気体濃度で求めた $XCH4_{B2,CLR}$ 、先験値から計算された $XCO2_{MDL}$ を用いて、XCH₄ (proxy 法) $XCH4_{Proxy}$ は式 (4.8-1) で与えられる。

$$XCH4_{Proxy} = \frac{XCH4_{B2,CLR}}{XCO2_{B2,CLR}} \cdot XCO2_{MDL} \quad (4.8-1)$$

- ・ XCO (proxy 法)

導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 3 CO 2.3 μm 帯 カラム平均気体濃度で求めた $XCO_{B3,CLR}$ 、 $XCH4_{B3,CLR}$ と $XCH4_{Proxy}$ を用いて、XCO (proxy 法) XCO_{Proxy} は式 (4.8-2) で与えられる。

$$XCO_{Proxy} = \frac{XCO_{B3,CLR}}{XCH4_{B3,CLR}} \cdot XCH4_{Proxy} \quad (4.8-2)$$

- ・ 地表面気圧差

導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 1 地表面気圧で求めた $p_{SRF,B1,CLR}$ とその先験値 $p_{SRF,prior}$ を用いて、地表面気圧差 Δp_{SRF} は式 (4.8-3) で与えられる。

$$\Delta p_{SRF} = p_{SRF,B1,CLR} - p_{SRF,prior} \quad (4.8-3)$$

- ・ H₂O バンド間比

導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 2 CO₂ 1.6 μm 帯 カラム平均気体濃度で求めた $XH2O_{B2,CLR}$ 、導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 3 CO₂ 2.08 μm 帯 カラム平均気体濃度で求めた $XH2O_{B3,CLR}$ を用いて、H₂O バンド間比 $H2ORatio$ は式 (4.8-4) で与えられる。

$$H2ORatio = \frac{XH2O_{B3,CLR}}{XH2O_{B2,CLR}} \quad (4.8-4)$$

・ CO₂ バンド間比

導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 2 CO₂ 1.6 μm 帯 カラム平均気体濃度で求めた $XCO2_{B2,CLR}$ 、導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 3 CO₂ 2.08 μm 帯 カラム平均気体濃度で求めた $XCO2_{B3,CLR}$ を用いて、CO₂ バンド間比 $CO2Ratio$ は式 (4.8-5) で与えられる。

$$CO2Ratio = \frac{XCO2_{B3,CLR}}{XCO2_{B2,CLR}} \quad (4.8-5)$$

・ CH₄ バンド間比

導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 2 CH₄ 1.67 μm 帯 カラム平均気体濃度で求めた $XCH4_{B2,CLR}$ 、導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 3 CO 2.3 μm 帯 カラム平均気体濃度で求めた $XCH4_{B3,CLR}$ を用いて、CH₄ バンド間比 $CH4Ratio$ は式 (4.8-6) で与えられる。

$$CH4Ratio = \frac{XCH4_{B3,CLR}}{XCH4_{B2,CLR}} \quad (4.8-6)$$

4.9 処理結果出力

導出処理 (SIF・proxy 法) の処理結果を FTS-2 SWIR L2 処理済みデータ (SIF・proxy 法) に、導出処理 (full-physics 法) の処理結果を FTS-2 SWIR L2 処理済みデータ (full-physics 法) として出力する。これらのファイルの主たる格納内容は 3.3.2 項 導出処理部処理済みデータを参照のこと。

4.10 FTS-2 SWIR L2 処理済みデータ (SIF・proxy 法) 読込

処理対象月 1 ヶ月分の FTS-2 SWIR L2 処理済みデータ (SIF・proxy 法) を読み込む。

4.11 クロロフィル蛍光輝度用 処理対象データ抽出処理

導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 1 クロロフィル蛍光 で導出したゼロレベルオフセットは、4.1 節で述べた filling-in signal (FS) に相当するため、SIF を得るためには US の補正 (クロロフィル蛍光輝度補正処理) が必要となる。US の大きさは、装置へ入射する光の強度に依存して変化するため、入射光強度と US の大きさの関係をクロロフィル蛍光輝度補正用テーブルとして評価し、クロロフィル蛍光輝度補正処理に適用する。本節ではクロロフィル蛍光輝度補正処理の対象となる事例、及び、クロロフィル蛍光輝度補正用テーブル作成に用いられる事例を抽出する条件を示す。

<クロロフィル蛍光輝度補正処理に対する抽出条件>

以下の条件のいずれかに該当する場合には処理対象外とする。

- ・観測点ごとの品質フラグ (FTS-2 L1B プロダクト : QualityInfo/soundingQualityFlag) が "Poor" もしくは "NG" の場合。
- ・IMC 安定度フラグ (FTS-2 L1B プロダクト : QualityInfo/IMC_StabilityFlag) が "安定" 以外の場合。
- ・走査速度安定性フラグ (FTS-2 L1B プロダクト : QualityInfo/scanStabilityFlag) が "安定" 以外の場合。
- ・バンド 1P もしくはバンド 1S のスパイク判定フラグ (FTS-2 L1B プロダクト : QualityInfo/spikeFlag) が "正常" 以外の場合。
- ・ヨーステアリングフラグ (FTS-2 L1B プロダクト : SatelliteGeometry/yawSteeringFlag) が "実施している" 以外の場合。
- ・FTS-2 視野内陸率 (式 (4.6.2-1)) が 100% 未満の場合。
- ・バンド 1 の偏光合成光に対する SNR (式 (4.5-27)) が 70 未満の場合。
- ・導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 1 クロロフィル蛍光 が収束しなかった場合。
- ・導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 1 クロロフィル蛍光 で state vector のいずれかの要素が式 (4.7.1-2) の制約条件の上限値もしくは下限値に達した場合。
- ・導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 1 クロロフィル蛍光 の残差スペクトルの二乗平均 (式 (4.7.1-27)) が 2.0 より大きい場合。

<クロロフィル蛍光輝度補正用テーブル作成に対する抽出条件>

クロロフィル蛍光輝度補正処理に対する抽出条件を満たす事例のうち、以下のいずれ

かの条件を満たす場合を SIF がない事例とみなし、補正テーブル作成に利用する。

- ・ 導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 1 地表面気圧、及び、導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 2 CO₂ 1.6 μm 帯 カラム平均気体濃度がどちらも収束しており、 $R_{B1_Psurf} < R_{B2_1590}$ の場合。
- ・ 導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 2 CO₂ 1.6 μm 帯 カラム平均気体濃度、及び、導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 3 CO₂ 2.08 μm 帯 カラム平均気体濃度がどちらも収束しており、 $R_{B2_1590} < R_{B3_2060}$ の場合。

$$R_{ID} = \frac{\sum_{i=1}^{nalbSB} \alpha_{SB,i}}{nalbSB} \quad (4.11-1)$$

ここで、添字 ID は表 4.7.2-1 ~ 4.7.2-6 に示す処理 ID である。

4.12 クロロフィル蛍光輝度補正テーブル作成

4.11 節に示したクロロフィル蛍光輝度補正用テーブル作成に対する抽出条件を満たす事例の処理結果を用いてクロロフィル蛍光輝度補正用テーブルを作成する。

導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 1 クロロフィル蛍光 で使用する波数範囲内の最大輝度値 $S_{synth,max}$ を入射光強度の指標とし、テーブル作成最小入射光強度 $S_{tbl,min}$ と輝度分割間隔 Δ_{rad} を用いて入射光強度レベル l_r を決定する。

$$l_r = \text{int} \left(\frac{S_{synth,max} - S_{tbl,min}}{\Delta_{rad}} \right) \quad (4.12-1)$$

ここで、 $\text{int}(x)$ は x の小数点以下を切り捨て得られる整数を表す。

入射光強度レベル毎に US の平均値 US_{ave} とその不確定性 US_{err} を求める。入射光強度レベル l_r に属する事例数 N_{lr} がゼロの場合は対応する US_{ave} , US_{err} に無効値を設定する。入射光強度レベル l_r と対応する N_{lr} , US_{ave} , US_{err} で構成されるテーブルをクロロフィル蛍光輝度補正用テーブルとする。

$$US_{ave,lr} = \frac{\sum_{i=1}^{N_{lr}} \frac{ZLO_{ret,i}}{\sigma_{ZLO,i}^2}}{\sum_{i=1}^{N_{lr}} \frac{1}{\sigma_{ZLO,i}^2}} \quad (4.12-2)$$

$$US_{err,lr} = \sqrt{\frac{1}{\sum_{i=1}^{N_r} \frac{1}{\sigma_{ZLO,i}^2}}} \quad (4.12-3)$$

ここで、添字 i は処理対象となる事例に対応する要素を表し、 ZLO_{ret} 、 σ_{ZLO} はそれぞれ導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 1 クロロフィル蛍光 で得られたゼロレベルオフセット導出値とその不確定性である。

4.13 クロロフィル蛍光輝度補正処理

4.11 節に示したクロロフィル蛍光輝度補正処理に対する抽出条件を満たす事例毎に式 (4.12-1) に従い入射光強度レベル l_r を求め、対応する $US_{ave,lr}$ 、 $US_{err,lr}$ の値を用いて、式 (4.13-1)、(4.13-2) の補正処理を行う。ただし、対応する $N_r = 0$ の場合は無効値を設定する。

$$SIF_i = fct_{SIF} \cdot (ZLO_{ret,i} - US_{ave,lr}) \quad (4.13-1)$$

$$SIF_{uncert,i} = fct_{SIF} \cdot \sqrt{\sigma_{ZLO,i}^2 + US_{err,lr}^2} \quad (4.13-2)$$

ここで、添字 i は処理対象となる事例に対応する要素を表し、 $fct_{SIF} = 1.7424 \times 10^8$ は輝度の単位を $[W/cm^2/str/cm^{-1}]$ から $[mW/m^2/nm/str]$ に変換する係数である。

4.14 品質判定処理 (クロロフィル蛍光・proxy 法)

FTS-2 SWIR L2 クロロフィル蛍光・proxy 法プロダクトの主要格納項目である 755 nm におけるクロロフィル蛍光輝度 (補正済) (データセット名 : SolarInducedFluorescence/SIF)、XCH₄ (proxy 法) (データセット名 : GasColumn_Proxy/XCH4_proxy)、XCO (proxy 法) (データセット名 : GasColumn_Proxy/XCO_proxy) に対し、"Good", "Fair", "Poor", "NG" の四段階の品質フラグを付与する。

<755 nm におけるクロロフィル蛍光輝度 (補正済)>

以下の条件のいずれかに該当する場合には品質フラグを "NG" とする。

- ・導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 1 クロロフィル蛍光の処理対象外の場合 (4.6.1 項参照)。
- ・導出処理対象抽出処理 (SIF・proxy 法) : Band 1 クロロフィル蛍光が未収束の場合 (4.7.1 項参照)。

- ・クロロフィル蛍光輝度補正処理の処理対象外の場合 (4.11 節参照)。

残りの事例のうち、以下の条件のいずれかに該当する場合には品質フラグを "Poor" とする。

- ・クロロフィル蛍光輝度補正処理において入射光強度レベルに対応する N_r がゼロの場合 (4.13 節参照)。

残りの事例の品質フラグを "Good" とする。

註) 現状、"Fair" に相当する条件は存在しない。

<XCH₄ (proxy 法)>

以下の条件のいずれかに該当する場合には品質フラグを "NG" とする。

- ・導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 2 CO₂ 1.6 μm 帯 カラム平均気体濃度、及び、導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 2 CH₄ 1.67 μm 帯 カラム平均気体濃度のいずれかが処理対象外の場合 (4.6.1 項参照)。
- ・導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 2 CO₂ 1.6 μm 帯 カラム平均気体濃度、及び、導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 2 CH₄ 1.67 μm 帯 カラム平均気体濃度のいずれかが未収束の場合。

残りの事例のうち、以下の条件のいずれかに該当する場合には品質フラグを "Poor" とする。

- ・FTS-2 偏光成分別 2 μm 帯雲判定に使用したノイズレベルで規格化した輝度の平均値のいずれかが 10.0 以上の場合。
- ・導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 2 CO₂ 1.6 μm 帯 カラム平均気体濃度の残差スペクトルの二乗平均が 2.0 以上の場合。
- ・導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 2 CH₄ 1.67 μm 帯 カラム平均気体濃度の残差スペクトルの二乗平均が 2.5 以上の場合。
- ・導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 2 CO₂ 1.6 μm 帯 カラム平均気体濃度の XCO₂ の DFS が 0.8 より小さい場合。
- ・導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 2 CH₄ 1.67 μm 帯 カラム平均気体濃度の XCH₄ の DFS が 0.8 より小さい場合。

残りの事例のうち、以下の条件のいずれかに該当する場合には品質フラグを "Fair" とする。

- ・導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 2 CO₂ 1.6 μm 帯 カラム平均気体濃度の XCO₂ の DFS が 1.0 より小さい場合。
- ・導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 2 CH₄ 1.67 μm 帯 カラム平均気体濃度の XCH₄ の DFS が 1.0 より小さい場合。

残りの事例の品質フラグを "Good" とする。

<XCO (proxy 法)>

以下の条件のいずれかに該当する場合には品質フラグを "NG" とする。

- ・ 導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 3 CO 2.3 μm 帯 カラム平均気体濃度の処理対象外の場合 (4.6.1 項参照)。
- ・ 導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 3 CO 2.3 μm 帯 カラム平均気体濃度が未収束の場合。
- ・ XCH₄ (proxy 法) の品質フラグが "NG" の場合。

残りの事例のうち、以下の条件のいずれかに該当する場合には品質フラグを "Poor" とする。

- ・ 導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 3 CO 2.3 μm 帯 カラム平均気体濃度の残差スペクトルの二乗平均が 2.5 以上の場合。
- ・ 導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 3 CO 2.3 μm 帯 カラム平均気体濃度の XCO の DFS、XCH₄ の DFS のいずれかが 0.8 より小さい場合。
- ・ XCH₄ (proxy 法) の品質フラグが "Poor" の場合。

残りの事例のうち、以下の条件のいずれかに該当する場合には品質フラグを "Fair" とする。

- ・ 導出処理 (SIF・proxy 法) : Band 3 CO 2.3 μm 帯 カラム平均気体濃度の XCO の DFS、XCH₄ の DFS のいずれかが 1.0 より小さい場合。
- ・ XCH₄ (proxy 法) の品質フラグが "Fair" の場合。

残りの事例の品質フラグを "Good" とする。

4.15 FTS-2 SWIR L2 クロロフィル蛍光・proxy 法プロダクト作成処理

1 ヶ月分の FTS-2 SWIR L2 後処理 (クロロフィル蛍光・proxy 法) の処理結果を 観測日別の FHD5 形式のファイルとして所定のフォーマットで出力する。出力項目は 3.2.1 項を、プロダクトのフォーマットは 1.2 節 (5) 国立環境研究所 GOSAT-2 プロダクトファイルフォーマット説明書 (プロダクト編) 第 4 分冊 GOSAT-2 TANSO-FTS-2 SWIR L2 クロロフィル蛍光・proxy 法プロダクト を参照のこと。

4.16 FTS-2 SWIR L2 処理済みデータ (full-physics 法) 読込

処理対象月 1 ヶ月分の FTS-2 SWIR L2 処理済みデータ (full-physics 法) を読み込む。

4.17 品質判定処理 (full-physics 法)

FTS-2 SWIR L2 カラム平均気体濃度プロダクトの主要格納項目である XCO₂ (データセット名: RetrievalResult/xco2)、XCH₄ (データセット名: RetrievalResult/xch4)、XCO (データセット名: RetrievalResult/xco)、XH₂O (データセット名: RetrievalResult/xh2o) それぞれに対し、"Good", "Fair", "Poor", "NG" の四段階の品質フラグを付与する。以下の条件のうち、全気体共通の条件に "(共通)" を、各気体固有の条件に "(固有)" を付けて示す。

以下の条件のいずれかに該当する場合には品質フラグを "NG" とする。

- (共通) 導出処理 (full-physics 法): カラム平均気体濃度の処理対象外の場合 (4.6.2 項参照)。
- (共通) 導出処理 (full-physics 法): カラム平均気体濃度が未収束の場合。

残りの事例のうち、以下の条件のいずれかに該当する場合には品質フラグを "Poor" とする。

- (固有) 導出処理 (full-physics 法): カラム平均気体濃度の対象気体の DFS が 0.8 より小さい場合。

残りの事例のうち、以下の条件のいずれかに該当する場合には品質フラグを "Fair" とする。

- (共通) 導出処理 (full-physics 法): カラム平均気体濃度のサブバンド 1 の残差スペクトルの二乗平均が表 4.17-1 に示す閾値より大きい場合。
- (共通) 導出処理 (full-physics 法): カラム平均気体濃度のサブバンド 2 の残差スペクトルの二乗平均が表 4.17-1 に示す閾値より大きい場合。
- (共通) 導出処理 (full-physics 法): カラム平均気体濃度のサブバンド 3 の残差スペクトルの二乗平均が表 4.17-1 に示す閾値より大きい場合。
- (共通) 導出処理 (full-physics 法): カラム平均気体濃度のサブバンド 4 の残差スペクトルの二乗平均が表 4.17-1 に示す閾値より大きい場合。
- (共通) 導出処理 (full-physics 法): カラム平均気体濃度のサブバンド 5 の残差スペクトルの二乗平均が表 4.17-1 に示す閾値より大きい場合。
- (共通) 導出処理 (full-physics 法): カラム平均気体濃度の blended albedo (式 (4.17-1)) が 1.0 より大きい場合。

- ・(共通) 導出処理 (full-physics 法) : カラム平均気体濃度の地表面気圧導出値が制約条件の上限値もしくは下限値に達した場合。
- ・(固有) 導出処理 (full-physics 法) : カラム平均気体濃度の対象気体の DFS が 1.0 より小さい場合。

残りの事例の品質フラグを "Good" とする。

$$blended_albedo = 2.4 \cdot \bar{\alpha}_{SB=1} - 1.13 \cdot \bar{\alpha}_{SB=4} \quad (4.17-1)$$

$$\bar{\alpha}_{SB} = \frac{0.5 \cdot (\alpha_{SB,1} + \alpha_{SB,nalbSB}) + \sum_{i=2}^{nalbSB-1} \alpha_{SB,i}}{nalbSB - 1} \quad (4.17-2)$$

表 4.17-1 品質判定処理 (full-physics 法) で用いる閾値。

項目	FTS-2 SWIR L2	FTS-2 SWIR L2
	V01	V02
サブバンド 1 の残差スペクトルの二乗平均	1.5	1.8
サブバンド 2 の残差スペクトルの二乗平均	-	1.7
サブバンド 3 の残差スペクトルの二乗平均	1.6	2.0
サブバンド 4 の残差スペクトルの二乗平均	-	2.0
サブバンド 5 の残差スペクトルの二乗平均	-	1.8

01

4.18 FTS-2 SWIR L2 カラム平均気体濃度プロダクト作成処理

1 ヶ月分の FTS-2 SWIR L2 後処理 (full-physics 法) の処理結果を、品質フラグが "NG" である事例を除き、観測日別の HDF5 形式のファイルとして所定のフォーマットで出力する。出力項目は 3.2.2 項を、プロダクトのフォーマットは 1.2 節 (5) 国立環境研究所 GOSAT-2 プロダクトファイルフォーマット説明書 (プロダクト編) 第 5 分冊 GOSAT-2 TANSO-FTS-2 SWIR L2 カラム平均気体濃度プロダクト を参照のこと。

5. アルゴリズム検証

FTS-2 SWIR L2 処理アルゴリズムの検証は、導出結果のデータ質を評価することで実施する。

検証用のカラム平均気体濃度データは、全量炭素カラム観測ネットワーク (Total Carbon Column Observing Network; TCCON) (Wunch et al., 2011) を主として利用する他、航空機による大気観測プロジェクト (Comprehensive Observation Network for Trace gases by Airliner; CONTRAIL) (Machida et al., 2008, Matsueda et al., 2008) による空港上空の上昇・下降時の濃度データから計算したカラム平均気体濃度データなども併用し、データ質を評価する。

また、クロロフィル蛍光については他衛星プロダクトと相互比較することでその妥当性を確認する。

6. 前提条件・制約事項

FTS-2 装置特性情報の一部は FTS-2 SWIR L2 処理用にあらかじめ加工したものを
用いる。詳細は表 3.3-1 注釈 2) を参照のこと。

4.4 節 波数軸補正、4.5 節 偏光合成処理では、FTS-2 のノミナルな波数間隔、開始
波数と波数軸補正係数が P 偏光と S 偏光で同一であることを前提としている。

4.5 節 偏光合成処理では、ストークスパラメータ V_{in} は十分に小さく無視できる、ス
トークスパラメータの Q_{in} , U_{in} は single-scattering 近似で関係づけられる (式
(4.5-22))、P 偏光成分と S 偏光成分の装置関数の違いが無視できる、式 (4.5-14) ~
(4.5-21) の係数 $A_{P/S} \sim D_{P/S}$ の波数依存性が畳込み積分の範囲内で無視できると仮定して
いる。

4.7.2 節 処理条件では、FTS-2 視野内の陸海状況に関わらず、地表面を Lambert 面
として扱っている。また、観測輝度スペクトルとして偏光合成観測輝度スペクトルを用
いている。導出処理 (SIF・proxy 法) では雲・エアロソル無を、導出処理 (full-physics
法) では雲無を仮定している。

4.7.4 項 フォワードモデルで用いている偏光放射伝達子コード `pstar` では平行平板
大気が仮定されている。また、高速放射伝達計算のため、雲・エアロソルの散乱特性は
サブバンド内で線形近似できることを前提とし、熱放射は考慮せず、クロロフィル蛍光
輝度は気体吸収による減衰のみを考慮した簡便なモデルとする。

この版に記載されている FTS-2 SWIR L2 V02 に関する情報の適用範囲は
full-physics 法に限定される。

7. 参考文献

- Baum, B.A., P. Yang, A.J. Heymsfield, A. Bansemer, B.H. Cole, A. Merrelli, C. Schmitt, and C. Wang (2014): Ice cloud single-scattering property models with the full phase matrix at wavelengths from 0.2 to 100 μm . *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 146, 123-139.
- Birk, M., G. Wagner, J. Loos, D. Mondelain, and A. Campargue (2017): ESA SEOM-IAS — Spectroscopic parameters database 2.3 μm region. <https://zenodo.org/record/1009122>. 01
- Bodhaine, B.A., N.B. Wood, E.G. Dutton, and J.R. Slusser (1999): On Rayleigh optical depth calculation. *J. Atmos. Ocean. Tech.*, 16, 1854-1861.
- Coddington, O.M., E.C. Richard, D. Harber, P. Pilewskie, T.N. Woods, K. Chance, X. Liu, and K. Sun (2021): The TSIS-1 Hybrid Solar Reference Spectrum. *Geophys. Res. Lett.*, 48, e2020GL091709, doi:10.1029/2020GL091709. 01
- Cox, C., and W.H. Munk (1954): Measurement of the roughness of the sea surface from photographs of the Sun's glitter. *J. Opt. Soc. Am.*, 44, 838-850.
- Devi, V.M., D.C. Benner, M.A.H. Smith, A.W. Mantz, K. Sung, L.R. Brown, and A. Predoi-Cross (2012): Spectral line parameters including temperature dependences of self- and air-broadening in the $2 \leftarrow 0$ band of CO at 2.3 μm . *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 113, 1013-1033.
- Devi, V.M., D.C. Benner, K. Sung, T.J. Crawford, S. Yu, L.R. Brown, M.A.H. Smith, A.W. Mantz, V. Boudon, and S. Ismail (2015): Self- and air-broadened line shapes in the $2\nu_3$ P and R branches of $^{12}\text{CH}_4$. *J. Mol. Spectrosc.*, 315, 114-136.
- Devi, V.M., D.C. Benner, K. Sung, L.R. Brown, T.J. Crawford, S. Yu, M.A.H. Smith, A.W. Mantz, V. Boudon, and S. Ismail (2016): Spectral line parameters including line shapes in the $2\nu_3$ Q branch of $^{12}\text{CH}_4$. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 177, 152-169.
- Drouin, B.J., D.C. Benner, L.R. Brown, M.J. Cich, T.J. Crawford, V.M. Devi, A. Guillaume, J.T. Hodges, E.J. Mlawer, D.J. Robichaud, F. Oyafuso, V.H. Payne, K.

- Sung, E.H. Wishnow, and S. Yu (2017): Multispectrum analysis of the oxygen A-band. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 186, 118-138.
- Duan, M., Q. Min, and J. Li (2005): A fast radiative transfer model for simulating high-resolution absorption bands, *J. Geophys. Res.*, 110, D15201, doi:10.1029/2004JD005590.
- Frankenberg, C., I. Aben, P. Bergamaschi, E.J. Dlugokencky, R. van Hees, S. Houweling, P. van der Meer, R. Snel, and P. Tol (2011a): Global column-averaged methane mixing ratios from 2003 to 2009 as derived from SCIAMACHY: Trends and variability. *J. Geophys. Res.*, 116, D04302, doi:10.1029/2010JD014849.
- Frankenberg, C., J.B. Fisher, J. Worden, G. Badgley, S.S. Saatchi, J.-E. Lee, G.C. Toon, A. Butz, M. Jung, A. Kuze, and T. Yokota (2011b): New global observations of the terrestrial carbon cycle from GOSAT: Patterns of plant fluorescence with gross primary productivity. *Geophys. Res. Lett.*, 38, L17706, doi:10.1029/2011GL048738.
- Gordon, I.E., L.S. Rothman, C. Hill, R.V. Kochanov, Y. Tan, P.F. Bernath, M. Birk, V. Boudon, A. Campargue, K.V. Chance, B.J. Drouin, J.-M. Flaud, R.R. Gamache, J.T. Hodges, D. Jacquemart, V.I. Perevalov, A. Perrin, K.P. Shine, M.-A.H. Smith, J. Tennyson, G.C. Toon, H. Tran, V.G. Tyuterev, A. Barbe, A.G. Császár, V.M. Devi, T. Furtenbacher, J.J. Harrison, J.-M. Hartmann, A. Jolly, T.J. Johnson, T. Karman, I. Kleiner, A.A. Kyuberis, J. Loos, O.M. Lyulin, S.T. Massie, S.N. Mikhailenko, N. Moazzen-Ahmadi, H.S.P. Müller, O.V. Naumenko, A.V. Nikitin, O.L. Polyansky, M. Rey, M. Rotger, S.W. Sharpe, K. Sung, E. Starikova, S.A. Tashkun, J. Vander Auwera, G. Wagner, J. Wilzewski, P. Wcisło, S. Yu, and E.J. Zak (2017): The HITRAN2016 molecular spectroscopic database. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 203, 3-69.
- Lamouroux, J., H. Tran, A.L. Laraia, R.R. Gamache, L.S. Rothman, I.E. Gordon, and J.-M. Hartmann (2010): Updated database plus software for line-mixing in CO₂ infrared spectra and their test using laboratory spectra in the 1.5-2.3 μm region. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 111, 2321-2331.
- Liou, K.N. (2002): *An Introduction to Atmospheric Radiation: Second Edition*.

- Academic Press, New York.
- Machida, T., H. Matsueda, Y. Sawa, Y. Nakagawa, K. Hirotsu, N. Kondo, K. Goto, T. Nakazawa, K. Ishikawa, and T. Ogawa (2008): Worldwide measurements of atmospheric CO₂ and other trace gas species using commercial airlines. *J. Atmos. Oceanic Technol.*, 25, 1744-1754, doi:10.1175/2008JTECHA1082.1.
- Matsueda, H., T. Machida, Y. Sawa, Y. Nakagawa, K. Hirotsu, H. Ikeda, N. Kondo, and K. Goto (2008): Evaluation of atmospheric CO₂ measurements from new flask air sampling of JAL airliner observations. *Pap. Meteorol. Geophys.*, 59, 1-17, doi:10.2467/mripapers.59.1.
- Mlawer, E.J., V.H. Payne, J.-L. Moncet, J.S. Delamere, M.J. Alvarado, and D.C. Tobin (2012): Development and recent evaluation of the MT_CKD model of continuum absorption. *Phil. Trans. R. Soc. A*, 370, 2520-2556.
- Nakajima, T., and M. Tanaka (1988): Algorithms for radiative intensity calculations in moderately thick atmospheres using a truncation approximation. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 40, 51-69.
- Ota, Y., A. Higurashi, T. Nakajima, and T. Yokota (2010): Matrix formulations of radiative transfer including the polarization effect in a coupled atmosphere-ocean system. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 111, 878-894.
- Parker, R., H. Boesch, A. Cogan, A. Fraser, L. Feng, P.I. Palmer, J. Messerschmidt, N. Deutscher, D.W.T. Griffith, J. Notholt, P.O. Wennberg, and D. Wunch (2011): Methane observations from the Greenhouse Gases Observing SATellite: Comparison to ground-based TCCON data and model calculations. *Geophys. Res. Lett.*, 38, L15807, doi:10.1029/2011GL047871.
- Rodgers, C.D. (2000): *Inverse Methods for Atmospheric Sounding: Theory and Practice*. World Sci., Singapore.
- Suto, H., F. Kataoka, N. Kikuchi, R.O. Knuteson, A. Butz, M. Haun, H. Buijs, K. Shiomi, H. Imai, and A. Kuze (2021): Thermal and near-infrared sensor for carbon observation Fourier-transform spectrometer-2 (TANSO-FTS-2) on the

- Greenhouse Gases Observing Satellite-2 (GOSAT-2) during its first year in orbit. *Atmos. Meas. Tech.*, 14, 2013-2039, doi:10.5194/amt-14-2013-2021.
- Toon, G.C. (2015a): Atmospheric line list for the 2014 TCCON data release (Version GGG2014.R0). TCCON data archive, hosted by CaltechDATA, California Institute of Technology, Pasadena, CA, USA, <https://doi.org/10.14291/TCCON.GGG2014.ATM.R0/1221656>.
- Toon, G.C. (2015b): Solar line list for the TCCON 2014 data release (Version GGG2014.R0). TCCON data archive, hosted by CaltechDATA, California Institute of Technology, Pasadena, CA, USA, <https://doi.org/10.14291/TCCON.GGG2014.SOLAR.R0/1221658>.
- 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 (TCCON). *Philos. T. Roy. Soc. A.*, 369, 2087-2112, doi:10.1098/rsta.2010.0240.
- Xiao, F., T. Yabe, and T. Ito (1996): Constructing oscillation preventing scheme for advection equation by rational function. *Comput. Phys. Commun.*, 93, 1-12.
- 中川徹、小柳義夫 (1982): 最小二乗法による実験データ解析 - プログラム SALS. 東京大学出版会.