一维最大概率法反演夜光云散射系数廓线的研究

1南京信息工程大学中国气象局气溶胶与云降水重点开放实验室, 江苏南京 210044;

²南京信息工程大学大气物理学院, 江苏 南京 210044;

³南京信息工程大学大气科学学院, 江苏 南京 210044

摘要 介绍了最大概率法的数学原理及迭代方程的使用过程,以卫星遥感观测的夜光云数据为例,阐述了最大概 率法在实例中的使用方法,并反演得到了夜光云体散射比廓线及散射系数廓线。与传统洋葱剥皮法的反演结果进 行对比,结果表明:最大概率法的结果几乎没有失真现象,但洋葱剥皮法得到的散射比存在严重的失真现象。其根 本原因在于传统方法假设夜光云体散射强度值在大气层结中为均匀分布,而最大概率法则假设体散射强度值在层 结中可以在一定的变化范围内呈现不均匀的分布,后者的假设更符合夜光云这类短时间内可能会出现大幅值空间 分布变化的自然现象。

关键词 大气光学; 夜光云; 最大概率法; 散射系数 中图分类号 P407.4 文献标识码 A doi: 10.3788/LOP54.120101

Inversion of the Scattering Coefficient of Polar Mesospheric Clouds by Using One-Dimensional Maximum Probability Method

Gao Haiyang^{1,2}, Bu Lingbing^{1,2}, Wang Zhen^{1,2}, Zhu Hong³

¹ Key Laboratory for Aerosol-Cloud-Precipitation of China Meteorological Administration, Nanjing University of Information Science and Technology, Nanjing, Jiangsu 210044, China;

² School of Atmospheric Physics, Nanjing University of Information Science and Technology, Nanjing,

Jiangsu 210044, China;

³ School of Atmospheric Science, Nanjing University of Information Science and Technology, Nanjing, Jiangsu 210044, China

Abstract Both the mathematical principle of the maximum probability (MP) method and the process of iterative equations are introduced. Then we use the real satellite data as an example to demonstrate the calculation of MP method and obtain the volume scattering ratio profiles and scattering coefficient profiles of polar mesospheric clouds (PMCs). We compare the inversion results of the MP method with those of the traditional onion peeling (OP) method, and find that the former hardly have any distortion, while the latter show serious distortion. The fundamental reason for this difference is that the OP method assumes that the volume scattering intensity has a uniform distribution in the same atmospheric layer, while the MP method assumes that the volume scattering intensity can exhibit a non-uniform distribution within a certain varied range of the layer. This assumption of MP method is more suitable for the natural characteristics of PMCs, because the spatial distribution of PMCs often changes greatly in a short time.

Key words atmospheric optics; polar mesospheric clouds; maximum probability method; scattering coefficient **OCIS codes** 010.0280, 010.1310, 290.1090

基金项目:国家自然科学基金(41304124,41675133)、江苏省基础研究计划(BK20141480)

作者简介: 郜海阳(1984—), 男, 博士, 讲师, 主要从事夜光云物理及中高层大气光学遥感探测方面的研究。

收稿日期: 2017-05-31; 收到修改稿日期: 2017-07-11

1 引 言

夜光云(NLCs)是地球大气层中最高的一种云,一般在高纬度地区(55°~90°)夏季的高层大气 (80~85 km)区域出现,当使用星载仪器观测时也会称其为极区中间层云(PMCs)^[1-2]。一些研究发现它的 出现频率在高纬度地区(大于 65°)呈逐渐增长的趋势^[3-7],并与低层大气的温室效应有一定的联系,因此逐渐 成为了研究热点。近年来,随着技术的不断进步,使用星载仪器对夜光云实施光学遥感探测已经成为主要的 研究手段之一^[8-11]。但是,夜光云在空间分布上的不均匀性,以及星载仪器自身空间分辨率的限制,使得如 何从光学遥感数据中准确地反演云层特性成为了该领域一个重要的研究课题。

计算层析(CT)是基于待测量穿过探测区域的线积分信号重建待测参量的空间分布。计算层析技术一 直以来都受到高度的关注,并早已成功应用在全球定位系统(GPS)卫星探测电离层电子密度、临边遥感痕量 气体分布等遥感领域中。20世纪80年代后,该技术开始被应用于高层大气气辉和极光的探测,如AE (Atmospheric Explorer)卫星上搭载了一台可见光波段气辉光度计(VAE),Solomon等^[12-13]利用层析技术 对其可见光波段的热层气辉[N⁺₂、O(¹S)、O(¹D)]体发射率信息进行了有效的反演。McDade等^[14]也曾利 用类似的方法从火箭观测的极光数据中反演了630 nm 波段的体发射率信息。另外,文献[15-16]在卫星遥 感的层析观测模式方面也做出了一些相应的计算机模拟工作,为该技术在星载仪器上的顺利实施奠定了 基础。

但是,层析技术最近才被应用于夜光云遥感领域。加拿大和瑞典等国共同研制的 Odin 卫星于 2001 年 发射升空,其中搭载的 OSIRIS(Optical Spectrograph and Infra-Red Imager System)仪器在 2010 和 2011 这 2 年的夏季期间,对北半球夜光云的太阳光后向散射信号进行了共计 180 条轨道的层析模式观测^[17]。随后, Hultgren 等^[18]使用二维层析技术和 T-Matrix 从散射信号中反演了夜光云的云层整体特性及相关微物理参 数,并揭示了云层在形成过程中的相关物理机制。虽然二维的 CT 反演技术能够获得极高的空间分辨率,有 利于分析小尺度的结构变化,但其需要星载仪器具备特定的临边观测模式,即视线方向要与轨道方向一致, 而常规的卫星光学遥感并不满足这一条件,使得这一技术的应用范围存在一定的局限性。另外,在传统的临 边观测模式中,常用的"洋葱剥皮(OP)"方法可以有效地反演气辉的体发射率信息,但对于极光和夜光云这 类层间不均匀性较强的光学现象并不适用。于是,Lloyd 和 Llewellyn^[19]在早期开发了一种一维层析反演模 式,并根据其特点称其为一维最大概率法,对法布里-珀罗干涉仪(FPI)观测 O(¹S)气辉的条纹进行了较好的 复原。因此,本文研究如何利用一维最大概率法对卫星光学遥感观测的夜光云散射系数廓线进行准确反演, 详细介绍一维最大概率法的原理,给出反演过程的实例,并与传统的 OP 法结果进行对比分析,阐述该方法 的优势,适用性及局限性。

2 最大概率法的原理

最大概率法实际是一维层析技术的迭代模式,基于 Lloyd 和 Llewellyn 提出的迭代模式^[19],对一维最大概率法的假设条件和数学逻辑进行详细推导,同时给出迭代方程组的适用条件,为后文在夜光云临边遥感反演中的应用提供理论基础。

2.1 4个重要的基本参量

在推导过程开始之前,将4个重要的基本参量定义如下。

 B_i :为观测值序列,其中 $i=1,2,\dots,N_{obs}$, N_{obs} 为观测序列 **B** 的数据总数,即 i 的最大值;

 T_j :为原始数据序列或需要反演得到的数据值序列,其中 $j=1,2,\dots,N_{inv},N_{inv}$ 是反演序列**T**的数据总数,即j的最大值;

 A_{ii} :为每一个原始数据 T_i 对观测值 B_i 的贡献率;

 P_{ii} :为围绕平均值 $A_{ii}T_i$ 作浮动变化的浮动贡献值。

通常认为观测序列 B 和反演序列 T 之间存在线性关系,这种线性关系可以通过矩阵方程 B=AT 表达, 而 A 为贡献率矩阵。

图 1 简明地解释了矩阵 $B \setminus A \setminus T$ 之间的关系,从图 1(a)的示意图中可以看到,观测到的 B_a 值来自 T_1 ,

 $T_2, \dots, T_{N_{inv}}$ 共同贡献,而每一个 T_j 的贡献率分别为 $A_{31}, A_{32}, \dots, A_{3N_{inv}}$;相对而言,图 1(b)中 T_3 又可以对 每一个 B_i 产生贡献,其贡献率分别为 $A_{13}, A_{23}, \dots, A_{N_{obs}^3}$ 。因此, B_i 可以写成

$$B_{i} = \sum_{j=0}^{N_{\text{inv}}} \left(A_{ij} \cdot T_{j} \right) \,. \tag{1}$$



图1 基本参量 B、T、A 之间的关系

Fig. 1 Relationship among the basic parameters **B**, **T** and **A**

2.2 最大概率法的数学原理

将(

根据(1)式的关系,传统的反演方法认为 A_{ij}T_j为固定值,且最终的解趋于极限时的平均值。但实际观测中,A_{ij}T_j可以在围绕其极限平均值附近作浮动变化,且在探测器上得到的往往是离散值。故假设用一个随机变化的离散的浮动贡献值 P_{ij}来代替 A_{ij}T_j,即(1)式可以改写为

$$B_i = \sum_{j=1}^{N_{\rm inv}} P_{ij} \,. \tag{2}$$

根据探测器中光子计数涨落的特性,可以假设 P_{ij}在其浮动变化区间内出现各个离散值的概率满足泊 松分布。离散值的泊松分布满足方程

$$Q(x=l) = (\eta^l/l!) \exp(-\eta) .$$
⁽³⁾

(3)式给出了当随机事件 x 取值为 l 时的出现概率,即 x 服从参数为 η 的泊松分布,其中 η 为该分布的数学 期望。因此,可以将上述定义与(3)式相对应,l 即为 P_{ij} ,而 η 即 $A_{ij}T_j$,故(3)式可写为

$$Q(P_{ij}) = [(A_{ij} \cdot T_j)^{P_{ij}} / P_{ij}!] \exp(-A_{ij} \cdot T_j) .$$
(4)

当*i*值一定时,假设每一个 B_i 的计数值为 S_i ,且贡献给 B_i 的 P_{ij} 可以取 0~ S_i 中的任意离散整数值,加之 *i* 值一定时 P_{ij} 的总数为 N_{inv} ,那么根据排列组合的原理,将有 N_i 种不同 P_{ij} 的组合能够满足(2)式的约束 条件:

$$N_{i} = (N_{inv} + S_{i} - 1) ! / [(N_{inv} - 1) ! S_{i} !] .$$
(5)

因此,最大概率法的任务即在满足(2)式的基础上,从 N_i 个组合中找出一组概率之和最大的 P_{ij} ,从而完成反演。为方便计算,对(4)式两端取自然对数,并令 $W_{ii} = \ln[Q(P_{ii})]$,那么所有 W_{ii} 相加后可表示为

$$W = \sum W_{ij} = \sum_{i=1}^{N_{obs}} \sum_{j=1}^{N_{inv}} \ln \left[Q(P_{ij}) \right] = \sum_{i=1}^{N_{obs}} \sum_{j=1}^{N_{inv}} \left[P_{ij} \cdot \ln(A_{ij} \cdot T_j) - A_{ij} \cdot T_j - \ln(P_{ij}!) \right].$$
(6)

将(6)式对 P_{ij}求偏导,但其中 ln(P_{ij}!)的导数需要借助斯特灵公式(Stirling's asymptotic formula)

$$\ln(x!) = (x + 1/2) \ln(x + 1) - (x + 1) + \ln(2\pi) / 2 + [12(x + 1)]^{-1},$$
7) 式代人(6) 式,并对(6) 式求偏导,可以得到
(7)

$$\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial P_{ij}} = \ln\left(\frac{A_{ij} \cdot T_j}{P_{ij} + 1}\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{P_{ij} + 1}\right) + \frac{1}{12}\left(\frac{1}{P_{ij} + 1}\right)^2,\tag{8}$$

而实际(8)式并不能直接进行取零的运算,因为有约束条件(2)式的存在,所以必须引入拉格朗日乘数 (Lagrange Multiplier)的算法来解决求解极值的问题。

在数学中的最优化问题里,拉格朗日乘数法是一种寻找多元函数在其变量受到一个或多个条件约束时 的极值的方法。这种方法中引入了一个新的系数λ,即拉格朗日乘数,并将约束条件与原函数组合成为一个 新的方程:

$$F(P_{ij},\lambda) = f(P_{ij}) + \sum_{k} \lambda_{k} g(P_{ij}), \qquad (9)$$

式中 $f(P_{ij})$ 为原始函数 $W(P_{ij})$,并由(6)式决定,即

$$f(P_{ij}) = W(P_{ij}), \qquad (10)$$

而 g(P_{ii})可由约束条件(2)式变换得到

$$g(P_{ij}) = \sum_{m=1}^{N_{inv}} P_{km} - B_k, \qquad (11)$$

将(10)式和(11)式代入(9)式,可以得到

$$F(P_{ij},\lambda) = W(P_{ij}) + \sum_{k=1}^{N_{obs}} \lambda_k \left(\sum_{m=1}^{N_{inv}} P_{km} - B_k \right), \qquad (12)$$

将(12)式对 P_{ij} 求导,并令 $\partial F/\partial P_{ij}=0$,则有

$$PF/\partial P_{ij} = \partial W/\partial P_{ij} + \sum_{k=1}^{N_{obs}} \lambda_k \left(\sum_{m=1}^{N_{inv}} \partial P_{km} / \partial P_{ij} - \partial B_k / \partial P_{ij} \right) = 0, \qquad (13)$$

显然, $B_k 与 P_{ij}$ 无关,于是有 $\partial B_k / \partial P_{ij} = 0$ 。而 $\partial P_{km} / \partial P_{ij}$ 只有当k = i和m = j时才有意义,且 $\partial P_{km} / \partial P_{ij} = 1$ (当k = i, m = j时),因此 λ_k 当且仅当k = i时才会存在,记为 λ_i 。于是(13)式被简化为

$$\partial W / \partial P_{ii} + \lambda_i = 0, \qquad (14)$$

式中 $\partial W/\partial P_{ij}$ 可由(8)式来表达,且当 $P_{ij} \ge 1$ 时,(8)式等号右端后 2项又可被忽略,因此,将(8)式代入(14)式后,结果又可以被进一步简化为

$$\ln [A_{ij} \cdot T_j / (P_{ij} + 1)] + \lambda_i = 0, \qquad (15)$$

(15)式也可以改写为

$$P_{ij} = A_{ij} \cdot T_j \cdot \exp(\lambda_i) - 1, \qquad (16)$$

为了求得 $\exp(\lambda_i)$,将(16)式代入(2)式可以得到

$$\sum_{j=1}^{N_{\text{inv}}} P_{ij} = \sum_{j=1}^{N_{\text{inv}}} \left[A_{ij} \cdot T_j \cdot \exp(\lambda_i) - 1 \right] = B_i, \qquad (17)$$

从而得到

$$\exp(\lambda_i) = (B_i + N_{inv}) / \left(\sum_{j=1}^{N_{inv}} A_{ij} \cdot T_j\right), \qquad (18)$$

将(18)式的 exp(λ_i)值代回到(16)式中,并对下标作改动,即可得到

$$P_{ij} = (B_i + N_{inv}) \cdot A_{ij} \cdot T_j / \left(\sum_{m=1}^{N_{inv}} A_{im} \cdot T_m\right) - 1, \qquad (19)$$

由(14)~(19)式的计算过程可以看出(19)式显然是一个迭代方程,下面将介绍如何构建和求解这一迭代 方程。

2.3 迭代方程的执行过程

在(19)式中, B_i 、 N_{inv} 和 A_{ij} 均为已知,假设 T_j 已知,那么与每一个 A_{ij} 对应的 P_{ij} 均可通过(19)式计算 得到。但实际中 T_j 是一个未知量,所以最大概率算法在计算开启时要首先给出一组 T_j 序列的初始估计 值,再执行(19)式的计算。然而 P_{ij} 的值又受观测数据B=AT的影响,故在初始估计值 T_j 的基础上求得的 光子 P_{ij} 和 T_j 并不一致。而且,当有些 A_{ij} 对应的 P_{ij} 极大地超过了平均期望值 $A_{ij}T_j$,而其他 A_{ij} 对应的 P_{ij} 又远低于 $A_{ij}T_j$ 时, P_{ij} 的值才更有可能接近平均期望值 $A_{ij}T_j$ 。因此,要想使 T_j 序列的估计值被更正到接 近平均期望值 $A_{ij}T_j$,就需要再次使用给 T_j 初始估计值赋值时的方法,将首次计算出的 P_{ij} 代入来求得新的 T_j^{new} 序列,然后再利用 T_j^{new} 代入(19)式得到新的 P_{ij}^{new} ,然后不断重复这一迭代过程,直到偏差 T_j 序列自身 的偏差收敛为止。

T; 的初始估计值为

$$T_{j} \approx B_{i} / \sum_{m=1}^{N_{\text{inv}}} A_{im} , \qquad (20)$$

将(20)式得到的初始估计值代入(19)式计算出 Pij,并将 Pij与平均期望值 Aij Tj 比较,根据其大小再次调

整 T_i 的值,因此(20)式中的 B_i 可用(2)式来取代,从而得到比较方程

$$T_{j}^{\text{new}} \approx \sum_{k=1}^{N_{\text{obs}}} P_{kj} / \sum_{k=1}^{N_{\text{obs}}} A_{kj} ,$$
 (21)

这样,(19)和(21)式可联合组成迭代方程,重新整理后得到

$$P_{ij}^{(n)} = (B_i + N_{inv}) \cdot A_{ij} \cdot T_j^{(n)} / \left[\sum_{m=1}^{N_{inv}} A_{im} \cdot T_m^{(n)}\right] - 1, \qquad (22)$$

$$T_{j}^{(n+1)} = \sum_{k=1}^{N_{obs}} P_{kj}^{(n)} / \sum_{k=1}^{N_{obs}} A_{kj} , \qquad (23)$$

式中上标(n)和(n+1)代表迭代次序,一般在 15~20 次后会收敛。至此,(22)式和(23)式即为最终要得到的最大概率法的迭代方程。

3 实际反演中的应用

3.1 WINDII/UARS 数据及观测模式

目前,全球在轨的基于临边模式观测夜光云的星载仪器十分有限,常使用的仪器有 SOFIE(Solar Occultation for Ice Experiment)^[20]、SBUV(Solar Backscatter Ultraviolet)^[21]、OSIRIS^[17]等,这些仪器的产品数据相对成熟,且并未提供积分路径的原始观测数据,而只是直接提供了不同波段的体散射或吸收系数的垂直廓线。本文使用搭载于 UARS(Upper Atmospheric Research Satellite)卫星上的 WINDII(Wind Imaging Interferometer)观测的夜光云 level 0 级原始数据,借助最大概率法,反演夜光云相关信息。

UARS 卫星于 1991 年 9 月 12 日成功升空,轨道高度为 585 km,赤道倾角为 57°。UARS 由 10 种仪器 组成有效载荷,其中 WINDII 主要用于探测卫星覆盖范围的大气风场、温度及气辉体发射率等信息,探测谱 线分别为 557.7 nm 的绿光和 630.0 nm 的红光,以及相关的几条弱红外谱线^[22]。但是,WINDII 在 1993—1995 年北半球的夏季期间,利用 553.1 nm(带宽 1.6 nm)的通道对大气背景散射进行了高时空分辨率的连 续观测,其垂直分辨率为 1.1、2.2 km,水平分辨率为 7、14、35 km,纬度范围为 45°~72°,高度为70~105 km, 有 45°、135°的双通道,时间分辨率为 7~26 s^[23-24]。这段数据虽时隔已久,但质量极高,且其 level 0 级数据为 积分路径的原始观测数据,刚好适用于本文提出的最大概率反演方法。

对于 WINDII 的 CCD 探测器而言,每一个像素获取的信号值可表示为

 $I_{\rm r} = A \cdot S_{\rm in} \cdot T_{\rm at} \cdot R_{\rm ins} \cdot \Delta z \cdot (V_{\rm m} + V_{\rm PMC}) / (z_{\rm f} \cdot z_{\rm b}) + I_{\rm b}, \qquad (24)$

式中 I_r 是 CCD 探测器接收到的总信号值; I_b 是背景噪声,主要由探测器热噪声和进入光学系统的杂散背景 光引起; S_{in} 是入射的太阳光强; T_{at} 是 553.1 nm 的大气整体透过率; R_{ins} 是仪器的响应度,与仪器本身的各项 参数如透过系数、探测器量子效率、模数(A/D)转换率、曝光时间等有关;A 为镜头有效面积; Δz 为在视线 方向上大气层结的积分长度; z_f 为大气层结最前端与探测器的距离; z_b 为大气层结末端与探测器的距离; V_m 为观测视线上单位体积大气分子造成的瑞利体散射强度; V_{PMC} 为夜光云的体散射强度;并设 $V=V_m$ + V_{PMC} 为总体的体散射强度。

通过实验室和在轨的严格定标,探测器各像素的 R_{ins} 和 A 可以被确定为常数, S_{in} 和 T_{at} 也可被认为短时间不变的常量,那么可以定义一个常数 $k = AR_{ins}S_{in}T_{at}$,实际上 k 的取值与反演结果关系并不大,在后续求解后向散射比的过程中,系数 k 会被消掉。另外,设有效信号强度为 $I_s = I_r - I_b$,同时设与视线有关的参数 为 $L = \Delta z / (z_f z_b)$, L 会随着大气层结的不同而变化,如图 2 所示,图中 FOV 为视场角,LOS 为视线。对不同大气层结划分成网格状,并将 L 改写成矩阵形式,可表示为

$$\boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{21} & \cdots & L_{k1} \\ L_{12} & L_{22} & \cdots & L_{k2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ L_{1m} & L_{2m} & \cdots & L_{km} \end{pmatrix},$$
(25)

(25)式中的L_{km}又可表示为



图 2 WINDII/UARS 观测模式及大气层结划分示意图

Fig. 2 Sketch map of WINDII/UARS observation mode and atmospheric stratification

$$\begin{cases} L_{km} = \frac{\Delta z_{km}}{z_{i-km} z_{b-km}} + \frac{\Delta z_{km}}{z_{i-km} z_{b-km}'}, & k \neq m \\ L_{km} = \frac{2\Delta z_{kk}}{z_{i-kk} z_{b-kk}'} = \frac{2\Delta z_{mm}}{z_{i-mm} z_{b-mm}'}, & k = m \end{cases}$$
(26)

式中 Δ*z_{km}*为不同大气层结网格的视线积分长度,并以视线与层结的切点来划分,*z_{f-km}、z_{b-km}*分别为图 2 中 右半部分的不同大气层结网格与探测器相距的前后距离,同理,*z'_{f-km}、z'_{b-km}*分别为图 2 中左半部分的不同大 气层结网格与探测器相距的前后距离,具体的计算结果为

$$\begin{cases} \Delta z_{km} = \sqrt{\left[r_{e} + h_{m} + (h_{m-1} - h_{m})/2\right]^{2} - (r_{e} + h_{k})^{2}} - \sqrt{\left[r_{e} + h_{m+1} + (h_{m} - h_{m+1})/2\right]^{2} - (r_{e} + h_{k})^{2}} \\ z_{f-km} = z_{k} - \sqrt{\left[r_{e} + h_{m} + (h_{m-1} - h_{m})/2\right]^{2} - (r_{e} + h_{k})^{2}} \\ z_{b-km} = z_{k} - \sqrt{\left[r_{e} + h_{m+1} + (h_{m} - h_{m+1})/2\right]^{2} - (r_{e} + h_{k})^{2}} \\ z_{f-km} = z_{k} + \sqrt{\left[r_{e} + h_{m+1} + (h_{m} - h_{m+1})/2\right]^{2} - (r_{e} + h_{k})^{2}} \\ z_{b-km} = z_{k} + \sqrt{\left[r_{e} + h_{m+1} + (h_{m} - h_{m+1})/2\right]^{2} - (r_{e} + h_{k})^{2}} \end{cases}$$

$$(27)$$

式中 z_k 为视线与大气层结的切点距离,r_e表示地球半径,h_m 等表示大气层结高度。在实际应用中,还要根据地球的曲率和卫星轨道的状态对高度和距离参数进行细微的修正。设置参数 K = kL,使得(24)式进一步简化为线性方程组

$$\boldsymbol{I}_{s} = \boldsymbol{K} \times \boldsymbol{V}_{o} \tag{28}$$

基于(28)式,可使用常规方法或最大概率法来求解V。但在具体的反演过程中,首先要借助去噪后的含有夜 光云信息的数据来求解V,然后再对同日不同轨道中同纬度范围内没有夜光云信息的数据求取平均值,作为 单纯含有瑞利散射的背景信息来求解V_m,得到散射比的廓线值为

$$\mathbf{R} = \mathbf{V} / \mathbf{V}_{\rm m} = (\mathbf{V}_{\rm m} + \mathbf{V}_{\rm PMC}) / \mathbf{V}_{\rm m} = \mathbf{1} + \mathbf{V}_{\rm PMC} / \mathbf{V}_{\rm m} \,. \tag{29}$$

3.2 传统的 OP 方法的使用

如果(28)式为病态方程组时,通常在用 OP 方法求解过程中使用约束性线性反演方法(如吉洪诺夫正则 化,Tikhonov Regularization)来获取最优化的方程解。以 WINDII 早期针对气辉体发射率廓线的反演为参考^[25-26],如果用于夜光云散射信号的反演,在(28)式的基础上,这种方法可以写成

$$\mathbf{V} = (\mathbf{K}^{\mathrm{T}}\mathbf{K} + \mu \mathbf{H}^{\mathrm{T}}\mathbf{H})^{-1}\mathbf{K}^{\mathrm{T}}\mathbf{I}_{\mathrm{s}}, \qquad (30)$$

式中μ是一个权重因子系数,用来调节最终解的平滑度,Η 为加权二阶差分希尔伯特矩阵。

3.3 最大概率法的使用

使用最大概率法实际上就是应用 2.2 节中的(22)式和(23)式。对 WINDII 的数据而言,观测数据序列 的长度与需要反演的体散射强度序列长度一样,即 $N_{inv} = N_{obs}$ 。其中, B_i 对应着矩阵 I_s 中的 I_{si} , A_{ij} 对应着 矩阵 K 中的 K_{ij} , T_i 对应着矩阵 V 中的 V_{ij} 。初始的 V 使用(20)式给出。于是重新改写(20)、(22)和(23)式为

$$\begin{cases} T_{j}^{(0)} = I_{si} / \sum_{m=1}^{N_{obs}} K_{im} \\ P_{ij}^{(n)} = (I_{si} + N_{obs}) \cdot K_{ij} \cdot V_{j}^{(n)} / \left[\sum_{m=1}^{N_{obs}} K_{im} \cdot V_{m}^{(n)} \right] - 1, \\ V_{j}^{(n+1)} = \sum_{k=1}^{N_{obs}} P_{kj}^{(n)} / \sum_{k=1}^{N_{obs}} K_{kj} \end{cases}$$
(31)

另外,还需要定义一个中间量Y"来考量迭代过程中的收敛情况:

$$Y_{n} = \sqrt{\sum_{j=1}^{N_{\text{obs}}} \left[V_{j}^{(n)} - V_{j}^{(n+1)} \right]^{2} / N_{\text{obs}}}$$
(32)

3.4 2种方法反演结果的比较

以WINDII 在 1993 年 7 月 24 日世界协调时间 07:19 时拍摄的 level 0 级散射信号数据图像为例,图 3 (a)给出了原始图像,数据编号为 No.14415,中心经度/纬度为 68.01°N/18.42°E。由于采用了 5×1 的 Binning 技术,所以 CCD 最终获取的成像数据由 31×36 个网格点数组成,这也意味着 1 次拍摄获取了 31 条 廓线。考虑到卫星运动带来的像移效应,水平分辨率大概为 7 km,垂直方向高度覆盖范围为 71~107 km,因此带来了 1.1 km 的高垂直分辨率,且由于观测时仪器有一定的倾斜,因此最后复原的数据图在高度上需要作出修正。从图 3(a)中可以清晰地看到,在 80 km 处水平方向上有一条窄且强的散射信号出现,并有一些波状的结构存在,这便是叠加在瑞利散射背景上的夜光云引起的强散射信号。

在使用该数据进行反演之前,首先需要去除噪声。通常认为,在 95 km 以上中性大气极其稀薄,分子瑞 利散射信号极其微弱,因此探测器的观测数值几乎不再变化,呈现固定值。将这部分固定值作为探测器的噪 声来处理,一般包括 CCD 本身的热噪声和进入光学系统的杂散光。例如图 3(a)中背景噪声计数为 114.07±1.92,可以看出标准偏差极小,而图 3(b)即为 3(a)基础上减掉背景噪声后的有效数据,可被用来进 行下一步的反演。





(b) effective data by removing the background noise

最大概率法的计算过程,需要借助(31)式进行,式中的系数矩阵 K 要借助(24)~(27)式来求得。在迭 代过程均选取 18 次,实际上在 12 次以后,(32)式的 Y 变化已经很小。在逐列的反演后,再通过(29)式获得 最终的体散射比廓线,结果如图 4(a)所示。

传统的 OP 方法使用(30)式来计算,权重因子系数 μ 的作用实际上是对反演的廓线进行一定程度的平 滑处理,而当该值取 300 甚至更大时,其变化已经不再明显。因此,本文反演时取 μ 值为 300,并通过(29)式 获得体散射比廓线,结果如图 4(b)所示。

图 4(a)和4(b)中的共同之处为在 79~83 km 处均存在一层较强的夜光云回波信号,且从左向右呈现由 高到低的倾斜分布,与图 3 中原始积分强度图像有些相似,并且也均展示出了一些周期性的波状结构,而在 73~75 km 处的中部,均有 1 个次级峰的存在。这些结果证明了这 2 种方法均能够用来反演出夜光云的体



图 4 体散射比的反演结果。(a)最大概率法的反演结果;(b)传统 OP 法的反演结果

Fig. 4 Inversion results of volume scattering ratios. (a) By using the maximum probability method;

(b) by using the traditional OP method

散射比垂直廓线。

但是,当观察图 4(a)和 4(b)的差异时,可以看出最大概率法的优势以及 OP 法的失真问题。其中,最重要的差异是白色等值线包络的区域,该区域表示散射比 R 小于 1 的区域。图 4(a)中仅有 2 个较小的 R 小于 1 的区域,一个在 73~75 km 高度和 0~30 km 水平距离处分布,另一个在 84~87 km 高度和 126~150 km 水平距离处,相比之下,图 4(b)的 R 小于 1 区域分布比图 4(a)广泛得多,在云层上部和下部均有出现,且面积更大,有些区域甚至出现了负值。真实情况中,R 值通常不能小于 1,然而因为瑞利散射背景强度并非同时和同步测量,所以在一定误差范围内 R 值小于 1 是有可能的。但是,如图 4(b)所示这种大面积的 R 小于 1 和负值区域的存在说明反演方法和条件的假设本身存在着一定缺陷,而最终的反演数据存在严重失真的问题,并不能够准确地用来进行后续的科学分析。图 4(b)这种大范围的 R 小于 1 和负值区域的出现,也必然导致其最大的体散射比的数值偏大,达到了 34.39,而图 4(a)中的最大体散射比仅为 28.03。假如不考虑这种失真情况,那么在后续科学问题的分析中必然会带来较大的误差。因此,图 4(a)和 4(b)的结果证明了最大概率法在临边遥感反演夜光云中的准确性和实用性。

为了更清楚地显示图 4(a)和 4(b)的差异,将每一条廓线重新展示在图 5(a)和 5(b)中。红色直线表示 R 值为 1 的界限,图 5(a)为最大概率法的反演结果,而图 5(b)表示 OP 法的结果,可以看出最大概率法在准确反演夜光云廓线方面的优势非常明显。



图 5 体散射比的廓线。(a)最大概率法的反演结果;(b)传统 OP 法的反演结果 Fig. 5 Volume scattering ratio profiles. (a) By using the maximum probability method; (b) by using the traditional OP method

3.5 散射系数廓线的反演

在得到了散射比廓线的基础上,夜光云散射系数 β_{PMC} 廓线可由下述方法获取。由于分子瑞利散射和夜 光云散射的视线积分路径和观测立体角相同,(29)式中的体散射比 R 也可用散射系数 β_{PMC} 和 β_m 表示,并作 变换得到 $\beta_{\rm PMC}$

$$=\beta_{\rm m}\left(R-1\right)\,,\tag{33}$$

式中分子瑞利散射系数表示为

$$\beta_{\rm m} = N_{\rm m} \cdot d\sigma(\theta, \lambda) / d\Omega, \qquad (34)$$

其中 dΩ 为立体角元; N_m 为分子数密度,虽然没有同机的测量值,但可以先通过 NRL-MSISE00 大气模型获 取同时同地的中性大气密度廓线,再根据干空气的摩尔质量来获取^[27]。这一方法相对成熟,并且其误差对 最终结果的影响较小。而瑞利散射截面大小可表示为^[28]

$$\{ d\sigma(\theta, \lambda) / d\Omega \}_{cm^2 \cdot sr^{-1}} = 5.45 \times 10^{-28} \left(\{ \lambda \}_{\mu m} / 0.55 \right)^{-4} \times \frac{1}{2} \left(1 + \cos^2 \{ \theta \}_{\mu m} \right) \,. \tag{35}$$

对于 3.4 节中的个例,其观测散射角约为 135°,而波长为 553.1 nm,这样便可反演出最终的散射系数 β_{PMC} ,如图 6 所示,夜光云的散射系数变化范围在 10⁻¹⁰ m⁻¹•sr⁻¹的量级,与已有的研究基本吻合,并且这一 个例属于较强的云层现象^[17-18]。与图 5(a)有一些细微的差别,其中 78~83 km 主云层的高度变化并不大, 但云层内部的波状结构更加明显,这与不同高度瑞利散射的背景强度有关。另外,一些多层结构能够更清晰 地观测到,如水平距离 0~20 km 处,在 76~78 km 高度上存在 1 个较弱的次级峰;而在水平距离 70~130 km和 73~76 km 的区间里,有 1 个明显较强的次级峰出现;而次级峰出现高度如此低,并不多见, 其出现的状态和机理将在后续的研究工作中探讨。



Fig. 6 Result of PMC scattering coefficient β_{PMC}

3.6 夜光云整季的统计结果分析

上述结果证明了最大概率法在反演夜光云中所具备的优势,于是使用这种方法对 WINDII 在 1993 年夏 季北半球高纬地区获取的所有夜光云数据进行统计分析。在 1993 年的整个夜光云季期间,WINDII 实施了 不同空间和时间分辨率模式的探测,其中最具代表性并已通过地基仪器标定过的是由 1×5 的网格点数进行 探测的系列数据,时空分辨率与图 3~6 相同,且连续实施了 32 d 的观测(从 7 月 3 日至 8 月 3 日),其中每天 有 7 或 8 条轨道在该模式下操作,最终获取了约 1.5 万幅二维图像数据。使用最大概率法对所有数据进行 反演,并将得到的所有夜光云散射系数廓线在纬度(间隔 1°)和垂直高度(1 km 分辨率)上进行平均,从而考 察总体的统计分布特征,其结果如图 7 所示。

WINDII 有 2 个正交的视场,分别与轨道成 45°和 135°,因此图 7(a)和(c)分别为 FOV1 中反演前的夜光 云积分散射信号和反演后的散射系数,而图 7(b)和(d)为 FOV2 中反演前的夜光云积分散射信号和反演后 的散射系数。纵向来看,最大概率法均能够有效地反演 2 个视场中的夜光云散射系数,云层高度随纬度的增 加而略微增加,主要受适于云层存在的低温结构随纬度的变化所调制^[5,10],这也与中间层顶高度的变化趋势 一致^[29],同时 2 个云层内部也均出现了一些明显的结构,尤其在 60°附近存在明显的弱云,这也将是后续研 究需要针对性解决的云物理相关问题。横向来看,2 个视场观测的云层散射系数并不完全一致。1)由于仪 器的设计和视场的朝向问题,FOV1 的观测范围能够向下延伸到 50°附近,而 FOV2 仅延伸到 56°附近,高纬 的上限均为 72°左右。2) 2 个视场平均后的积分散射信号和散射系数值均有一定的差异,一方面是因为 2 个视场经过同一采样区域有 7 min 的时间间隔,另一方面,2 个视场正交导致散射角的差异也会引起散射信号 值的不同,而这一由散射角引起的差异将是后续反演冰晶粒子微物理特征的关键所在。



图 7 1993 年夏季 WINDII 观测的夜光云随纬度变化的统计特征。(a)(b) 2 个视场(FOV1 和 FOV2)反演前的积分 散射信号;(c)(d) 2 个视场反演后的散射系数信息

Fig. 7 Statistical characteristics of PMCs observed by WINDII in the summer 1993 versus latitude. (a) and (b) Integration scattering signals before inversion for FOV1 and FOV2, respectively; (c) and (d) scattering coefficients of PMCs after inversion for FOV1 and FOV2, respectively

4 讨 论

从图 4 和图 5 的对比结果中,能够看到最大概率法在夜光云反演中存在明显的优势,其结果能够直接用 于散射系数廓线的计算和后续分析,而 OP 法存在反演结果严重失真的问题,不能够用于后续的科学分析。 造成这一差异的根本原因在于反演方法的假设前提,最大概率法假设体散射强度值在层结中可以在一定的 变化范围内呈现不均匀的分布,这样在迭代的过程中可以通过不断地调整来逼近真实解。而 OP 法假设体 散射强度值在层结中必须均匀分布,这样的线性求解方法速度快,且在气辉的反演中能够被广泛并准确地使 用,这是因为气辉在空间分布上的相对均匀性,即使受到波动等动力过程的扰动,其变化幅度也能够通过一 些数学手段进行修复,但是,不能将 OP 法应用到极光和夜光云这类可能会短时间内出现大幅值空间分布变 化的现象。因此一维最大概率法在普通的临边观测反演夜光云特性廓线中有较好的实用性,可以为这类问 题反演提供一个有效的手段。另外,本文并未过多地涉及反演精度的评估,后续的工作中将重点研究这部分 内容,进一步完善最大概率法的应用效果。

从图 6 中可以发现云层中存在明显的双层甚至多层结构,这一结构在过去的研究工作中有所涉及^[11]。 虽然从物理机制上,这种结构是完全能够存在的,但也有可能是卫星观测模式导致的同层云错位现象,即由 于同一层云空间分布的不均匀性,更低高度上的观测视场出现误测。因为其掩星观测模式的局限性,过去使 用 SOFIE 仪器的数据无法分析这一可能性; 而 WINDII 的临边高时空分辨率观测模式刚好解决了这一问题,这也将是后续工作需要深入研究的问题。

5 结 论

使用合适的方法从临边遥感观测数据中准确地反演夜光云特性是该研究领域的一个技术难点。本文提出利用一维最大概率法从夜光云散射信息中反演其散射系数廓线。文中给出了最大概率法的数学原理,介绍了迭代方程的使用过程,以UARS卫星上搭载的WINDII的观测数据为例,阐述了最大概率法在实例中的使用方法,计算并得到了夜光云体散射强度以及散射比廓线,并与传统 OP 法的反演结果进行了对比。对

比结果表明,OP 法得到的散射比存在严重的失真现象,而最大概率法的结果几乎没有失真现象。其根本原因在于反演方法的假设前提不同,传统的 OP 法假设体散射强度值在大气层结中为均匀分布,而最大概率法 假设体散射强度值在层结中可以在一定的变化范围内呈现不均匀的分布,后者的这种假设更符合夜光云这 类可能会短时间内出现大幅值空间分布变化的自然现象。

致谢 衷心感谢加拿大 York 大学 Gordon Shepherd 教授(WINDII 的 PI)提供 WINDII 原始数据,并感谢 Youngmin Cho 博士在数据处理方面提供帮助。

参考文献

- [1] Gadsden M, Schroder W. Noctilucent clouds [M]. Berlin: Springer-Verlag Press, 1989: 279-340.
- [2] Liu X, Yue J, Xu J, et al. Five-day waves in polar stratosphere and mesosphere temperature and mesospheric ice water measured by SOFIE/AIM[J]. Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 2015, 120(9): 3872-3887.
- [3] Gadsden M. The north-west Europe data on noctilucent clouds: A survey [J]. Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics, 1998, 60(12): 1163-1174.
- [4] Thomas G E, Olivero J J, Jensen E J, et al. Relation between increasing methane and the presence of ice clouds at the mesopause[J]. Nature, 1989, 338(6215): 490-492.
- [5] Thomas G E. Are noctilucent clouds harbingers of global change in the middle atmosphere? [J]. Advances in Space Research, 2003, 32(9): 1737-1746.
- [6] Deland M T, Shettle E P, Thomas G E, et al. A quarter-century of satellite polar mesospheric cloud observations[J]. Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics, 2006, 68(1): 9-29.
- [7] Lubken F J, Berger U. Latitudinal and interhemispheric variation of stratospheric effects on mesospheric ice layer trends
 [J]. Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 2011, 116(D4): D00P03.
- [8] Russell J M, Bailey S M, Gordley L L, *et al.* The Aeronomy of Ice in the Mesosphere (AIM) mission: Overview and early science results[J]. Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics, 2009, 71(3): 289-299.
- [9] Gao Haiyang, Zhang Zuyi, Bu Lingbing, *et al.* Statistical characteristics of albedo variation in noctilucent clouds induced by small-scale gravity waves[J]. Chinese Journal of Space Science, 2017, 37(1): 82-93.
 部海阳,张祖熠, 卜令兵, 等. 小尺度重力波引起夜光云反照率变化的统计特征[J]. 空间科学学报, 2017, 37(1): 82-93.
- [10] Bu Lingbing, Zhang Zuyi, Gao Haiyang, *et al*. Characteristics of perturbations induced by small-scale gravity waves on ice particle size distribution of noctilucent clouds[J]. Chinese Journal of Geophysics-Chinese Edition, 2016, 59(2): 453-464.
 卜令兵,张祖熠,郜海阳,等.夜光云内小尺度重力波对冰晶粒径谱的影响规律研究[J].地球物理学报, 2016, 59 (2): 453-464.
- [11] Gao H, Shepherd G G, Tang Y, et al. Double-layer structure in polar mesospheric clouds observed from SOFIE/AIM
 [J]. Annales Geophysicae, 2017, 35(2): 295-309.
- [12] Solomon S C, Hays P B, Abreu V J. Tomographic inversion of satellite photometry[J]. Applied Optics, 1984, 23 (19): 3409-3414.
- [13] Yee E, Paulson K V, Shepherd G G. Minimum cross-entropy inversion of satellite photometer data [J]. Applied Optics, 1987, 26(11): 2106-2110.
- [14] McDade I C, Lloyd N D, Llewellyn E J. A rocket tomography measurement of the N₂⁺ 3914 Å emission rates within an auroral arc[J]. Planetary & Space Science, 1991, 39(6): 895-906.
- [15] McDade I C, Llewellyn E J. Inversion techniques for recovering two-dimensional distributions of auroral emission rates from tomographic rocket photometer measurements[J]. Canadian Journal of Physics, 1991, 69(8/9): 1059-1068.
- [16] Frey S, Mende S B, Frey H U. Satellite limb tomography applied to airglow of the 630 nm emission[J]. Journal of Geophysical Research: Space Physics, 2001, 106(A10): 21367-21380.
- [17] Hultgren K, Gumbel J, Degenstein D, et al. First simultaneous retrievals of horizontal and vertical structures of polar mesospheric clouds from Odin/OSIRIS tomography[J]. Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics, 2013, 104(2): 213-223.

120101-11

- [18] Hultgren K, Gumbel J. Tomographic and spectral views on the lifecycle of polar mesospheric clouds from Odin/OSIRIS
 [J]. Journal of Geophysical Research Atmospheres, 2014, 119(24): 14129-14143.
- [19] Lloyd N D, Llewellyn E J. Deconvolution of blurred images using photon counting statistics and maximum probability
 [J]. Canadian Journal of Physics, 1989, 67(1): 89-94.
- [20] Hervig M E, Gordley L L, Stevens M H, et al. Interpretation of SOFIE PMC measurements: Cloud identification and derivation of mass density, particle shape, and particle size[J]. Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics, 2009, 71(3): 316-330.
- [21] Deland M T, Thomas G E. Updated PMC trends derived from SBUV data[J]. Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 2015, 120(5): 2140-2166.
- [22] Shepherd G G, Thuillier G, Gault W A, *et al*. WINDII, the wind imaging interferometer on the upper atmosphere research satellite[J]. Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 1993, 98(D6): 10725-10750.
- [23] Evans W F J, Laframboise L R, Sine K R, et al. Observation of polar mesospheric clouds in summer, 1993 by the WINDII Instrument on UARS[J]. Geophysical Research Letters, 2013, 22(20): 2793-2796.
- [24] Wiens R H, Evans W F J, Zalcik M S, et al. WINDII observation of a PMC breakup event during ANLC-93[J]. Geophysical Research Letters, 1995, 22(20): 2797-2800.
- [25] Shepherd G G, Thuillier G, Cho Y M, *et al*. The wind imaging interferometer (WINDII) on the upper atmosphere research satellite: A 20 year perspective[J]. Reviews of Geophysics, 2012, 50(2): RG2007.
- [26] Rochon Y J. The retrieval of winds, Doppler temperatures, and emission rates for the WINDII experiment [D]. Toronto: York University, 2001: 36-45.
- [27] Vergados P, Shepherd M G. Retrieving mesospheric water vapour from observations of volume scattering radiances[J]. Annales Geophysicae: Atmospheres, Hydrospheres and Space Sciences, 2009, 27(2): 487-501.
- [28] Collis R T H, Russell P B. Lidar measurement of particles and gases by elastic backscattering and differential absorption[M]. Berlin: Springer-Verlag Press, 1976: 89-90.
- [29] Russell J M, Rong P, Bailey S M, et al. Relationship between the summer mesopause and polar mesospheric cloud heights[J]. Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 2010, 115(D16): D16209.