

## Chappuis-Wulf 波段临边辐射臭氧廓线的反演

朱芳<sup>1,2</sup>, 司福祺<sup>1\*</sup>, 詹锴<sup>1</sup>, 窦科<sup>1</sup>, 周海金<sup>1</sup><sup>1</sup>中国科学院合肥物质研究院安徽光学精密机械研究所环境光学研究中心, 安徽 合肥 230031;<sup>2</sup>中国科学技术大学, 安徽 合肥 230026

**摘要** 临边辐射探测技术是一种新型卫星探测技术, 主要利用紫外-可见光-红外太阳散射光谱获得臭氧等痕量气体在垂直方向上的分辨率廓线信息。基于波长配对光谱分析法、乘代数重建技术以及 SCIATRAN 正向模型, 用 SCIAMACHY 仪器临边辐射反演垂直高度为 10~40 km、分辨率为 1 km 的臭氧数密度。首先, 根据臭氧在 Chappuis-Wulf 波段的吸收特性分析波长配对的机理, 并结合临边辐射权重函数确定臭氧反演的波长和反演范围。然后, 分析了几种典型的波长配对组合对反演结果的影响, 确定一组较好的波长配对组合。最后, 对迭代算法反演过程中的误差来源如迭代次数、先验廓线、切线高度和 NO<sub>2</sub> 浓度参量进行不同程度的偏差反演, 误差结果表明, 这些参数都会明显影响垂直高度小于 20 km 的臭氧廓线反演结果。

**关键词** 大气光学; 临边辐射; 波长配对; 乘代数重建技术; 臭氧廓线; 反演

中图分类号 O433

文献标志码 A

doi: 10.3788/AOS202141.0401005

## Inversion of Ozone Profile of Limb Radiation in Chappuis-Wulf Band

Zhu Fang<sup>1,2</sup>, Si Fuqi<sup>1\*</sup>, Zhan Kai<sup>1</sup>, Dou Ke<sup>1</sup>, Zhou Haijin<sup>1</sup><sup>1</sup>Centre of Environmental Optics, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Hefei Institutes of Physical Science, Chinese Academy of Sciences, Hefei, Anhui 230031, China;<sup>2</sup>University of Science and Technology of China, Hefei, Anhui 230026, China

**Abstract** Limb radiation detection is a new type of satellite detection technology, which mainly uses ultraviolet-visible-infrared solar scattering spectrum to obtain the vertical resolution profile information of trace gases such as ozone. In this paper, based on wavelength pairing spectral analysis method, multiplicative algebraic reconstruction technology, and SCIATRAN forward model, the ozone number density with vertical height of 10–40 km and resolution of 1 km is retrieved by using the limb radiation of SCIAMACHY instrument. First, according to the absorption characteristics of ozone in Chappuis-Wulf band, the mechanism of wavelength pairing is analyzed, and the wavelength and inversion range of ozone inversion are determined by combining the limb radiation weighting function. Then, the influence of several typical wavelength pairing combinations on the inversion results are analyzed, and a group of better wavelength pairing combination is determined. Finally, the error sources in the inversion process of iterative algorithm, such as iteration times, prior profile, tangent height and NO<sub>2</sub> concentration are inverted in different degrees. The error results show that these parameters will affect the inversion results of ozone profile with vertical height less than 20 km.

**Key words** atmospheric optics; limb radiation; wavelength pairing; multiplicative algebraic reconstruction technique; ozone profile; inversion

**OCIS codes** 010.1290; 300.6550; 010.1280; 280.1310

收稿日期: 2020-06-23; 修回日期: 2020-09-14; 录用日期: 2020-10-09

基金项目: 国家重点研发计划(2019YFC0214702、2017YFB0503901)、国家自然科学基金(41705016)

\* E-mail: sifuqi@aiofm.ac.cn

## 1 引言

臭氧( $O_3$ )作为一种重要的大气痕量气体,可以吸收太阳紫外辐射,保护人类和生物,其含量也能反映人类对环境的污染破坏<sup>[1]</sup>。因此,研究大气臭氧的时空分布是当前大气环境监测领域的一个热点问题<sup>[2]</sup>。对臭氧等痕量气体的探测从最早的 Dobson 臭氧探测仪到基于卫星遥感探测的后向散射仪器(如 TOMS<sup>[3]</sup>、GOME<sup>[4]</sup>、OMI<sup>[5]</sup>)和掩星探测模式(如 GOMOS<sup>[6]</sup>)。近年来,一系列具有临边扫描技术卫星仪器(如 OSIRIS<sup>[7]</sup>、SAGE III<sup>[8]</sup>、SCIAMACHY<sup>[9]</sup>、OMPS<sup>[10]</sup>)的发射标志着一种新的卫星临边散射探测技术可应用于大气化学成分探测。临边模式可观测从地表到一定大气高度的大气散射太阳辐射,相比掩星模式,既能获得较高垂直分辨率的痕量气体和气溶胶廓线,又具有较好的空间覆盖率<sup>[11]</sup>。

Rusch 等<sup>[12]</sup>将临边散射技术应用于太阳中间层探测器(SME)卫星上的紫外光谱仪(UVS),以反演中间层臭氧廓线。基于临边散射太阳辐射光谱的大气臭氧垂直廓线反演方法主要有直接法<sup>[13]</sup>和光谱分析法<sup>[14]</sup>。直接法利用两个切线高度(下文简称为切高, $T$ )上的辐射差值<sup>[15]</sup>或辐射比值<sup>[16]</sup>作为反演源。该方法仅使用单一波长进行反演,缺乏对光谱信息的有效利用。光谱分析法又分为差分光学吸收光谱法(DOAS)<sup>[17]</sup>和波长配对法<sup>[18]</sup>,即使用多个波长数据进行光谱分析,提高或保持对反演成分的敏感性。近年来,临边辐射臭氧廓线的反演一般是基于光谱分析技术,结合光谱分析后的临边辐射数据和迭代反演算法求解大气状态参量。如 Haley 等<sup>[19]</sup>利用 571~617 nm 的 OSIRIS 临边辐射光谱作为 DOAS 的分析窗口,并结合最优估计(OE)算法反演高度为 12~45 km 的臭氧垂直廓线;Roth 等<sup>[20]</sup>采用 Chappuis 波段中的两个波长配对组合与 SaskMART (Saskatchewan multiplicative algebraic reconstructive technique)算法反演无云环境下高度为 10~35 km 的臭氧垂直数密度,可减少仪器噪声;Wang 等<sup>[21]</sup>使用 525,600,675 nm 三种波长配对结合乘代数重建技术(MART)反演平流层 15~40 km 的臭氧廓线;von Savigny 等<sup>[1,22]</sup>和 Rault 等<sup>[23]</sup>结合波长配对法和 OE 算法以及 OSIRIS 和 OMPS 临边散射光谱反演平流层臭氧廓线。相比国外成熟的临边散射技术如反演痕量气体算法,国内对相关方面的研究较少,相应算法的研究也非常有限。

本文主要根据 Chappuis-Wulf 波段的臭氧吸收情况,研究不同波长配对组合对臭氧反演的影响,提出了一种新的波长配对组合并结合 MART 将其应用于 SCIAMACHY 仪器临边散射臭氧廓线的反演,使其在无云条件下反演的最低海拔延伸到 10 km,同时分析了反演臭氧廓线的主要误差来源;将反演结果与 SCIAMACHY V3.5 臭氧产品进行对比,验证了本方法的有效性和稳定性,实验中利用球形几何辐射传输模型 SCIATRAN<sup>[24]</sup>模拟临边观测值。

## 2 研究方法

根据臭氧在 Chappuis-Wulf 波段的吸收特性,用卫星临边辐射反演臭氧廓线,包括光谱分析和反演算法。其中,光谱分析技术采用波长配对法进行光谱预处理,包括临边辐射权函数、辐射正规化和波长配对三个步骤。反演算法采用简单、易实现和能产生稳定解的 MART<sup>[21]</sup>。根据卫星观测条件和初始臭氧廓线,用模型得到模拟的临边辐射,并将模拟和实测辐射值分别进行波长配对后作为反演量,通过 MART 修正臭氧廓线,反复迭代处理得到收敛的臭氧廓线。反演流程如图 1 所示,其中,L1B 为

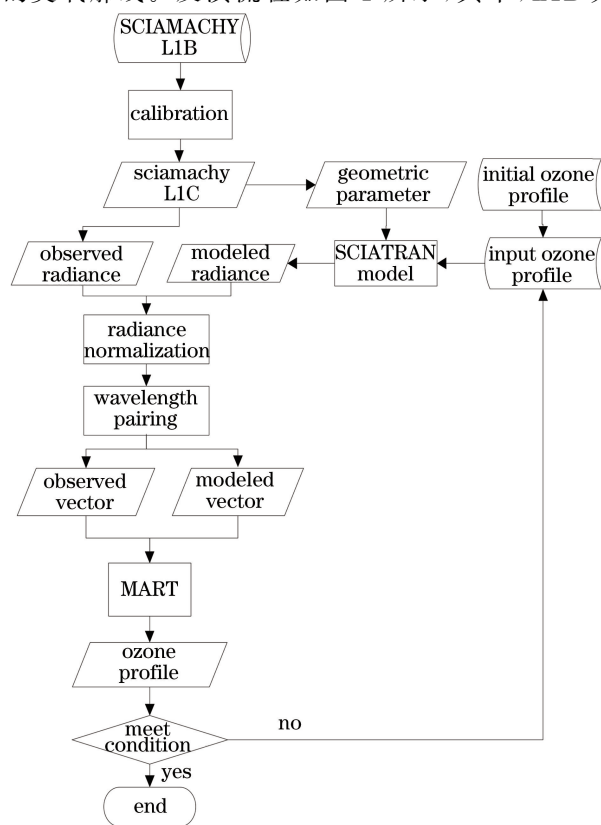


图 1 临边辐射臭氧廓线反演流程图

Fig. 1 Flow chart of the inversion of ozone profile from limb radiance

SCIAMACHY 的一级原始数据, L1C 为一级定标数据。

### 2.1 波长配对

基于 MART 的临边辐射臭氧廓线反演, 首先求解临边散射太阳辐射作为观测数据与正向辐射传输模型产生的模拟数据的比值, 然后对其进行迭代求解。该比值必须与臭氧的数密度有关, 且随臭氧数密度的变化而变化。使用的观测数据并非卫星实测的辐射值, 而是对所需光谱数据进行预处理即光谱分析后得到的数据。

波长配对是临边散射辐射反演痕量气体的一种光谱分析方法, McPeters 等<sup>[25]</sup> 将其用于 LORE/SOLSE 临边实验辐射数据反演臭氧廓线。根据臭氧在可见光波段的吸收特性, 在 Chappuis 波段(约 400~650 nm)和 Wulf 波段(约 600~790 nm)选择波长配对反演对流层上部到平流层的臭氧垂直数密度, 如图 2 所示。选择 Chappuis-Wulf 波段中的三种波长进行配对, 得到某切高  $j$  处的反演量  $y_{cj}$  为

$$y_{cj} = \ln\left(\frac{\sqrt{I_s \cdot I_l}}{I_p}\right), \quad (1)$$

式中,  $I_s$ 、 $I_l$ 、 $I_p$  分别为对臭氧吸收的弱短吸收波长、弱长吸收波长和强吸收波长的辐射正规化值, 弱短吸收波长为可见光波段臭氧吸收较弱的短波长, 如 535 nm; 弱长吸收波长为可见光波段臭氧吸收较弱的长波长, 如 664 nm; 强吸收波长为可见光波段臭氧吸收峰值的波长, 如 602 nm。该反演量  $y_{cj}$  必须

满足: 1) 在反演范围内随着臭氧数密度的增加而增大; 2) 如果大气中没有臭氧, 其值为常数; 3) 必须为正相关量。

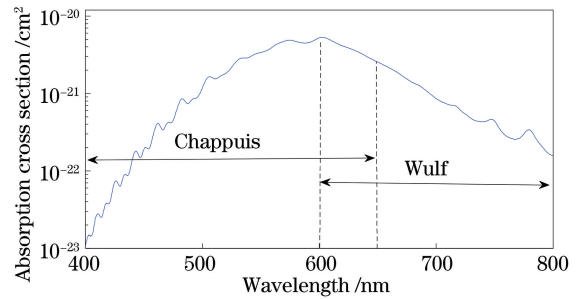


图 2 臭氧在 Chappuis-Wulf 波段的吸收截面  
Fig. 2 Absorption cross section of the ozone in Chappuis-Wulf band

臭氧吸收截面在紫外和可见光波段都具有高吸收峰特性, 但不同波长对臭氧的敏感性和敏感高度范围不同。临边散射辐射权函数可以反映临边散射辐射随臭氧数密度的变化情况<sup>[2]</sup>, 权函数可表示为

$$K = \frac{\partial I(\lambda, T_j)}{\partial n_k} = \frac{\Delta I(\lambda, T_j)}{\Delta n_k}, \quad (2)$$

式中,  $I(\lambda, T_j)$  为波长  $\lambda$  在第  $j$  个切高  $T_j$  处的辐射值,  $n_k$  为大气高度为  $k$  时的臭氧数密度。以扰动量为 10% (臭氧廓线的数密度为 110%) 改变高度为 0~50 km、步长为 1 km 的大气臭氧数密度, 基于 SCIATRAN 模型模拟 Chappuis-Wulf 波段中三个波长的辐射值, 计算得到的临边辐射权函数如图 3 所示, 其中,  $R$  为辐射值,  $n_{O_3}$  为臭氧的数密度。

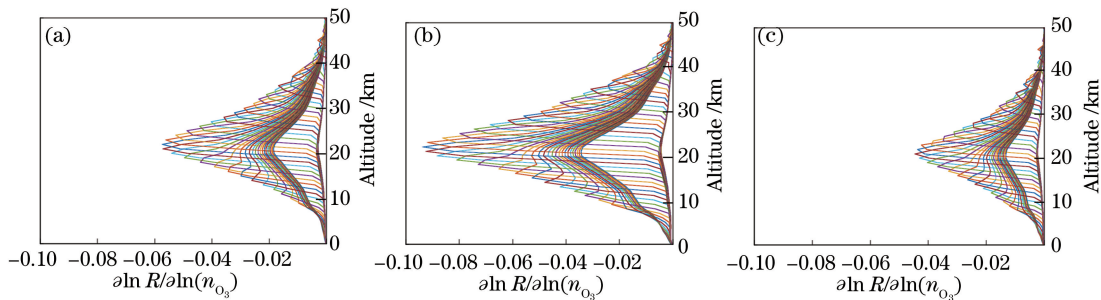


图 3 进行波长配对的三个波长的权函数。(a) 弱短吸收波长; (b) 强吸收波长; (c) 弱长吸收波长  
Fig. 3 Weighting functions of three wavelengths for wavelength pairing. (a) Weak short absorption wavelength; (b) strong absorption wavelength; (c) weak long absorption wavelength

从图 3 可以发现, 随着大气高度的增加, 权函数具有峰值特性, 与臭氧的数密度分布是一致的, 这表明波长在该范围内对臭氧变化的敏感性较强; 强吸收波长的权函数比弱吸收波长的权函数小(负相关), 即波长对臭氧的吸收更明显(臭氧的增加导致辐射强度降低)。根据临边辐射权函数可选择合适的波长, 以反演不同高度范围的臭氧廓线, 因此 Chappuis-

Wulf 波段适用于探测低平流层的臭氧数密度。

为了减小仪器定标误差的影响并降低辐射对云和地表反照率的敏感性<sup>[18]</sup>, 将组成反演向量的三个波长都归一化到一个参考切高上。该参考切高是反演波长对臭氧不敏感的某一高度, 根据图 3 中的临边辐射权函数反演波长对臭氧数密度(大气高度大于 43 km)的敏感性非常小, 因此实验选取的参考切



高约为 43 km。辐射正规化可表示为

$$I_N(\lambda, T) = \frac{I(\lambda, T)}{I(\lambda, T_{ref})}, \quad (3)$$

式中,  $I_N(\lambda, T)$ 、 $I(\lambda, T)$  分别为正规化后的辐射值和实际辐射值,  $I(\lambda, T_{ref})$  为参考切高  $T_{ref}$  上的实际辐射值。对 SCIAMACHY 仪器的临边散射辐

射数据通常进行全定标, 辐射正规化可以减少云和地表反照率对反演结果的影响, 正规化对云的敏感性如图 4 所示。可以看出, 有云和无云条件下, 正规化后的辐射值基本重合, 只在高度较低时略有差异。不同的地表反照率下, 也具有类似效果。

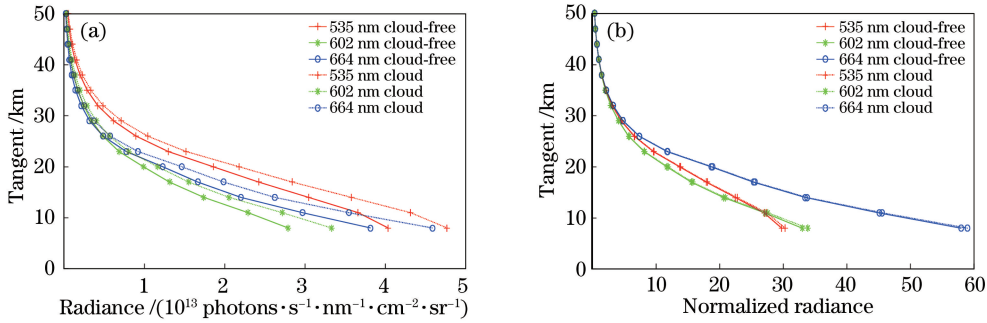


图 4 有云和无云条件下三个波长正规化前后的辐射廓线。(a)辐射廓线;(b)正规化辐射廓线

Fig. 4 Radiation profiles before and after normalization of the three wavelengths with and without cloud conditions.

(a) Radiation profile; (b) normalized radiation profile

根据(1)式用多个波长的正规化辐射值组合代替直接辐射值作为反演向量(CTV), 即波长配对。Chappuis-Wulf 波段的三个波长辐射值进行配对后成为一个反演向量, 该 CTV 的权函数对臭氧数密度具有敏感性, 随臭氧数密度的变化而变化, 且为正相关, 如图 5(a)所示。随着海拔的不断降低, 臭氧总量增加到一定值时, 强吸收波长呈指数增加的辐射值逐渐下降, 此时 CTV 呈增加趋势, 如图 5(b)所示。此外, 波长配对可减少气溶胶散射效应<sup>[2]</sup>, 如图 5(c)所示。

从图 5 可以发现, 对于臭氧含量较小的高海拔,

组成 CTV 波长的视线辐射不经过该区域, 因此波长辐射对 CTV 的影响很小。臭氧的增加会增加波长吸收、减少辐射, 从而增加 CTV。臭氧含量减少后, CTV 也会减小。因此, 根据 CTV 的变化情况可确定臭氧反演的可用范围为 10~40 km。图 5(c)为无气溶胶和不同气溶胶边界层能见度(BLV)的 CTV 变化, 可以发现, 有无气溶胶对小于 20 km 的反演高度有明显影响, 且不同 BLV 下的 CTV 几乎重合, 因此波长配对可以减少边界层能见度对反演结果的影响。

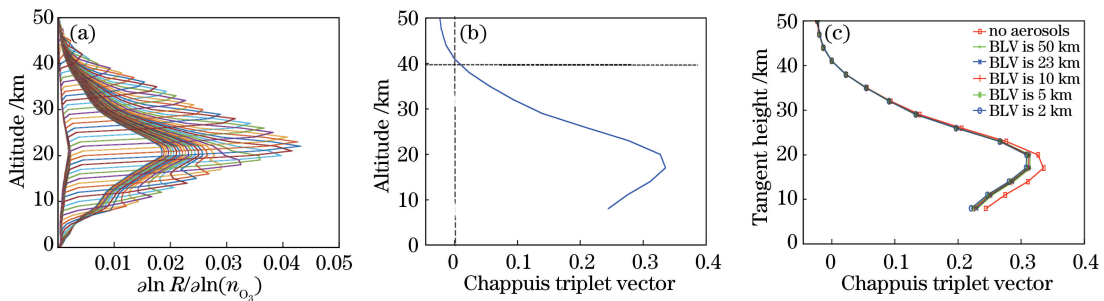


图 5 波长配对后的 CTV。(a) CTV 对臭氧数密度敏感性;(b) CTV;(c)不同气溶胶情况下的 CTV

Fig. 5 CTV after wavelength pairing. (a) Sensitivity of CTV to ozone number density; (b) CTV;

(c) CTV under different aerosol conditions

## 2.2 乘代数重建技术

Rodgers<sup>[26]</sup>将基于非线性牛顿迭代的 OE 算法作为反演算法, 但该算法的最终状态参量解依赖于先验信息的正确性。MART 通过实际观测值和模拟观测值的比迭代更新大气状态参量, 与 Chahine<sup>[27]</sup>提出的非线性松弛迭代类似, 但 MART

可以利用低于某切高的多个视线观测值反演该大气高度的状态参量。

反演大气状态参量本身是病态的<sup>[13]</sup>, 不能显式求解出观测值( $y_i^{measured}$ )与某大气状态参量( $x_i$ )之间的正向传输关系式, 而是利用辐射传输模型(实验使用 SCIAMACHY 2.2)通过设置参数产生模拟观测值



( $y_i^{\text{modelled}}$ ), 将模拟观测值与实际观测值进行对比并用相关的算法迭代求解出最匹配观测值的大气状态参量。最早的松弛迭代可表示为

$$x_i^{n+1} = x_i^n \frac{y_i^{\text{measured}}}{y_i^{\text{modelled}}}, \quad (4)$$

式中,  $n$  为迭代次数。模拟观测值是利用正向传输模型在状态参量  $x_i^n$  下计算出来的, 通过模拟值与实际值的比修正或更改状态参量。当观测值大于模拟值时, 状态参量增加; 反之, 状态参量减小, 直到满足迭代次数或达到预定义的误差范围内结束。该方法简单、稳定性高, 但在反演中很难衡量误差且相邻切高之间缺乏反演廓线信息。因此, Degenstein 等<sup>[28]</sup> 提出改进的迭代方程即 MART, 可表示为

$$x_i^{n+1} = x_i^n \sum_j \left( \frac{y_j^{\text{measured}}}{y_j^{\text{modelled}}} W_{ji} \right), \quad (5)$$

式中,  $W_{ji}$  为权因子, 表示第  $j$  个观测值对高度  $i$  的气体重视程度, 可反映多条视线对反演高度气体的贡献。虽然 Degenstein 等<sup>[28]</sup> 设置的权因子与视线的路径成比例, 但并不是必须的, 权因子必须被归化为 1, 即

$$\sum_j W_{ji} = 1. \quad (6)$$

对每个高度进行大气反演时所有参与的观测值是一致的, 除了反演高度的最底层和倒数第二层。最底层只有一条视线, 即  $W_{11} = 1$ ; 倒数第二层有两条视线, 即  $W_{21} = 0.25, W_{22} = 0.75$ 。Roth 等<sup>[20]</sup> 发现对于其他高度仅需采用三条视线。因此, 采用与文献<sup>[20]</sup> 相同的权因子:  $W_{ji} = 0.6, W_{(j-1)i} = 0.3, W_{(j-2)i} = 0.1$ 。由于只考虑低于某高度的三条视线, 因此, 高于  $j$  和低于  $j-2$  高度的权因子均为 0。

由于观测值对状态参量的敏感度必须为正相关, 因此, 在迭代反演之前由(3)式和(1)式给出观测值和模拟值相应的反演量  $y_{cj}^{\text{measured}}$  和  $y_{cj}^{\text{modelled}}$ 。在每次迭代过程中, 观测值与模拟值的比与权因子加权平均形成了乘代数因子  $\alpha_i$ , 可表示为

$$\alpha_i = \sum_j \left( \frac{y_{cj}^{\text{measured}}}{y_{cj}^{\text{modelled}}} W_{ji} \right). \quad (7)$$

$\alpha_i$  可用来更新大气状态参量, 用 MART 实现状态参量垂直数密度反演, 得到大气气体的垂直分辨率对应于 SCIAMACHY 卫星扫描中观测值的切高分辨率, 即  $i = j$ 。为了适应 SCIATRAN 模型中的廓线文件, 每次迭代后使用线性插值法增加乘代数因子  $\alpha_i$ , 并将插值网格单元大小设置为 1 km, 大于反演高度的所有乘代数因子取最大切高的乘代数

因子, 小于反演高度的所有乘代数因子取最小切高的乘代数因子。

### 2.3 SCIATRAN 模型及参数说明

SCIATRAN 模型是德国不莱梅大学环境与遥感物理研究所 (IUP/IFE) Rozanov 等<sup>[29]</sup> 针对 SCIAMACHY 仪器开发的临边辐射传输模型。利用有限差分方法解辐射传输方程, 考虑了多次散射、折射情况。模型可以根据几何观测方式 (临边、天底等)、地表条件 (地表反照率等)、大气条件 (中性气体、痕量气体、太阳光谱等) 制定模拟条件, 在前向传输模块中快速进行计算。辐射传输模型覆盖的波长范围为 175 ~ 2380 nm, 包括 Schuman-Runge 和 Herzberg 氧吸收带<sup>[29]</sup>。利用 SCIAMACHY 临边测量光谱数据进行臭氧廓线反演, 选择 SCIATRAN 2.2 版本在球形模式下运行得到的参数作为大气前向传输模型的模拟观测值。SCIATRAN 模型中使用的臭氧横截面来自文献<sup>[30]</sup>, 采用多重散射模式, 地表反射为定值, 选择 LOWTRAN 气溶胶廓线, 气溶胶相函数为 Henyey-Greenstein, 不考虑云。

## 3 分析与讨论

### 3.1 不同波长配对的分析

根据 Chappuis-Wulf 波段的波长配对要求, 选择臭氧吸收截面峰值处的波长作为强吸收波长和峰值两边各一个弱吸收波长进行配对组成 CTV。由于符合该条件的波长比较多, 而实验对象为搭载在 Envisat 卫星上具有临边观测技术的 SCIAMACHY 仪器, 其光谱分辨率约为 0.24 nm 且臭氧吸收截面有两个 601 nm 和 571 nm 的小波峰, 理论上都可以作为强吸收波长。文献<sup>[20]</sup> 在不改变两个弱吸收波长的基础上对两个峰值附近的多个波长进行配对反演, 发现选择 601 nm 附近的波长作为强吸收波长的结果与 SAGE II 结果的一致性更好。为了使反演的结果更好, 使用的三个波长参考文献<sup>[22]</sup> ( $\lambda_s = 532.2$  nm,  $\lambda_p = 602.0$  nm 和  $\lambda_l = 671.2$  nm)。针对搭载在 Odin 卫星上的 OSIRIS 临边散射辐射数据, 主要列举几种波长配对情况并使用 MART 方法反演的结果, 波长选择情况如表 1 所示。CTV2 的波长参考文献<sup>[22]</sup>, CTV3 的波长参考文献<sup>[21]</sup>。CTV1 和 CTV2 具有相同的峰值波长, 不同的弱吸收波长; CTV3 和 CTV4 具有相同的弱吸收波长, 不同的峰值波长。

表 1 几种波长配对的参数

Table 1 Parameters of several wavelength pairings

| Wavelength  | CTV1   | CTV2 <sup>[22]</sup> | CTV3 <sup>[21]</sup> | CTV4   |
|-------------|--------|----------------------|----------------------|--------|
| $\lambda_s$ | 535.16 | 532.12               | 525.09               | 525.09 |
| $\lambda_p$ | 602.02 | 602.02               | 600.01               | 599.11 |
| $\lambda_l$ | 664.12 | 671.10               | 675.11               | 675.11 |

unit: nm

图 6 为 2011 年 8 月 1 日 SCIAMACHY 仪器轨道 49255 中一条临边扫描在不同波长配对下的臭氧

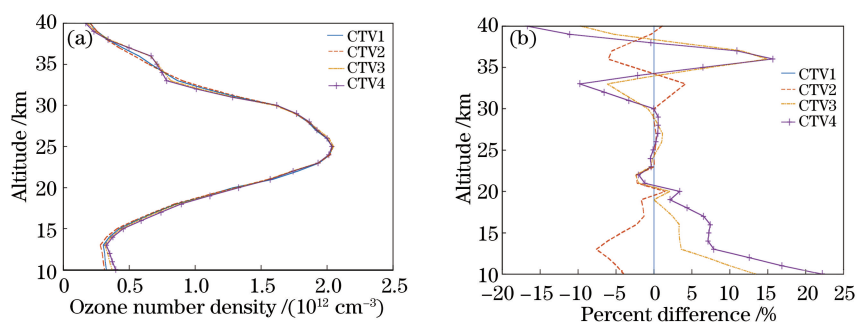


图 6 不同 CTV 的臭氧反演结果。(a) 臭氧数密度; (b) 相对误差

Fig. 6 Ozone inversion results of different CTV. (a) Ozone number density; (b) relative errors

### 3.2 反演误差分析

关于临边散射辐射臭氧反演的敏感性分析,文献[31]采用波长配对和 OE 算法对地表反照率、气溶胶、压力、温度、臭氧吸收截面等进行敏感性分析;文献[20]根据 SaskMART 技术分析了迭代次数、先验廓线、SASKTRAN 模型的多重散射次数和仪器噪声等参量对 OSIRIS 临边散射辐射臭氧廓线反演的影响;文献[32]全面分析了对流层云对反演臭氧廓线的敏感性。实验主要分析了 MART 作为迭代算法反演平流层臭氧廓线存在的误差,包括迭代次数、先验廓线、切线高度偏差、NO<sub>2</sub> 浓度。

根据(5)式可知,大气目标气体的浓度随算法的迭代而更新,实验结果表明,经过一定次数迭代后最终解是收敛的,但合适的迭代次数有利于解的合理性。因此,将迭代次数设置为 10,分别在多条不同

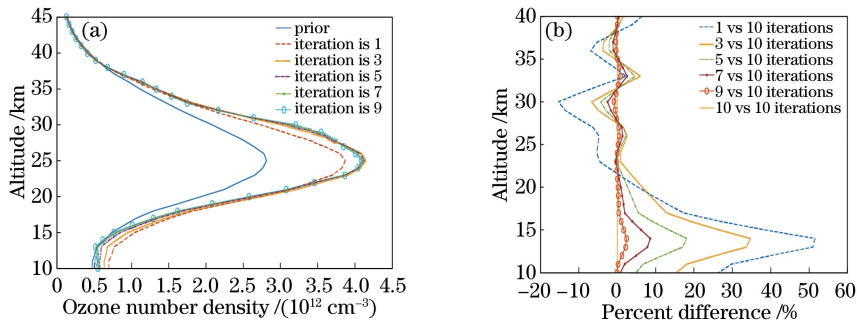


图 7 不同迭代次数的臭氧反演结果。(a) 臭氧数密度; (b) 相对误差

Fig. 7 Ozone inversion results with different iterations. (a) Ozone number density; (b) relative errors

反演结果,可以发现,第 1 种情况反演曲线的平滑性较好,第 4 种情况反演曲线的波动性较大。与其他 CTV 反演的结果进行偏差对比发现,第 1 种和第 2 种情况的相对偏差较小(小于 10%);第 3 种和第 4 种情况的相对偏差在较低和较高海拔区域都较大(小于 25%)。这表明峰值波长对反演结果的影响比弱吸收波长大。综合考虑后,采用第 1 种配对组合的三个波长进行配对反演。

SCIAMACHY 临边扫描数据上进行实验,其中典型的结果如图 7 所示。可以发现,随着迭代次数的增加,海拔较高的廓线最先收敛至小误差百分比(小于 1%),海拔较低的廓线最终收敛的误差小于 3%。继续增加迭代次数,相邻两次迭代之间的反演结果差异几乎不变。因此,实验采用的迭代次数为 10 次。

首次迭代需要初始臭氧数密度廓线(先验廓线),因此,采用 SCIATRAN 软件包提供的 McLinden 气候学廓线文件,不确定度为 0.66。这些廓线文件按月份和纬度分成多个包含温度、压力、O<sub>3</sub>、NO<sub>2</sub>、BrO 和 OClO 等气体体积的混合比且垂直分布为 0~100 km 的文件。理论上,任何合理的廓线都可作为先验廓线。但不同初始廓线对反演精度的影响是不同的,实验表明,采用与临边扫描数据源纬度位置和时间月份接近的先验廓线,反演结果

更符合实际情况,在臭氧反演范围上下边界的误差更小。以实际测量地理纬度为  $34.8^{\circ}\text{N}$  的一条临边扫描序列为例,选取数据库中  $5^{\circ}\text{N}$ 、 $35^{\circ}\text{N}$ 、 $65^{\circ}\text{N}$ 、 $35^{\circ}\text{S}$ 、 $65^{\circ}\text{S}$  的廓线文件作为先验廓线,结果如图 8 所示(其他扫描位置均有类似结果)。可以发现,不同初始廓线反演的廓线曲线形状与对应初始廓线的形状相似,这表明反演廓线受初始廓线的影响,但最

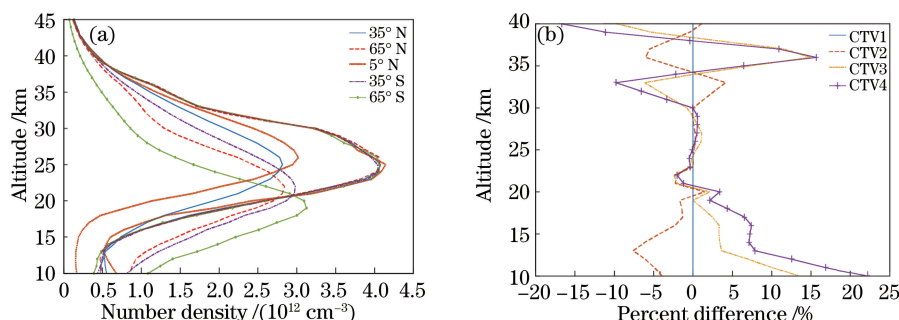


图 8 不同先验廓线的臭氧反演结果。(a) 臭氧数密度;(b) 相对误差

Fig. 8 Ozone inversion results of different prior profiles. (a) Ozone number density; (b) relative errors

终都收敛到近似的位置。其他反演廓线与  $35^{\circ}\text{N}$  反演廓线的差异由大到小依次为  $5^{\circ}\text{N}$ 、 $35^{\circ}\text{S}$ 、 $65^{\circ}\text{S}$ 、 $65^{\circ}\text{N}$ ;由于  $65^{\circ}\text{N}$  与  $35^{\circ}\text{N}$  同属于北半球中纬度地区,因此差异比其他先验廓线小;所有先验廓线在反演范围下边界处(高度小于  $15\text{ km}$ ) 的差异都偏大,原因是反演边界之外的海拔高度臭氧浓度存在不确定性,对应的测量辐射也存在一定的误差。

临边仪器进行垂直扫描的分辨率理论上是固定不变的,但随着使用时间的增加,观测视线切高会发生漂移<sup>[2]</sup>。为了研究切高定位引起的误差,采用不同的切高网格反演臭氧廓线。将切高网格在原始基础上分别增加  $0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1\text{ km}$ (即  $\Delta T_{\text{H}}$  为  $0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1\text{ km}$ ),作为不正确的切线高度进行反演,并与实际切线高度反演结果进行对比,结果如图 9 所示。可以发现,切线高度偏移得越厉害,反演误差就越大,且误差曲线的形状类似;误差在  $25\text{ km}$  以下为负值,在  $17\text{ km}$  左右达到最大;而误差在  $25\text{ km}$  以上为正值,在  $37\text{ km}$  处达到最大。

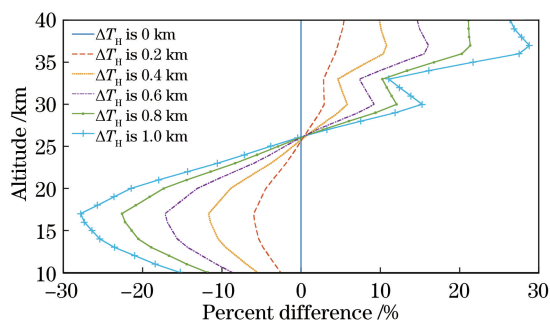


图 9 不同切线高度偏差引起的相对误差  
Fig. 9 Relative errors caused by different tangent height deviation

用 SCIATRAN 模型建立正向传输模型需要考虑大气中存在气体的浓度,反演臭氧时仅考虑  $\text{NO}_2$  气体的浓度。为了研究  $\text{NO}_2$  气体浓度对臭氧反演的影响,将相同廓线文件中  $\text{NO}_2$  气体浓度的原始值作为正确廓线,反演得到正确的臭氧数密度。取

$\text{NO}_2$  气体浓度的  $0.1, 0.5, 2, 5, 10$  倍分别作为不正确的廓线,反演得到带有误差的臭氧数密度,相对误差结果如图 10 所示。可以发现,臭氧的相对误差随着  $\text{NO}_2$  偏差的增大而增大; $\text{NO}_2$  浓度偏小时,反演相对误差在  $23\text{ km}$  以下为正值,在  $23\text{ km}$  以上为负值,且均小于  $0.5\%$ ;  $\text{NO}_2$  浓度偏大时,反演相对误差与偏小时完全相反。

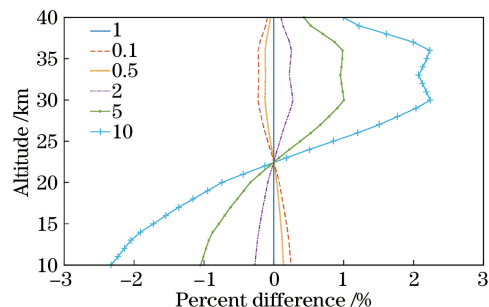


图 10 不同  $\text{NO}_2$  浓度引起的相对误差  
Fig. 10 Relative errors caused by different  $\text{NO}_2$  concentration

### 3.3 臭氧反演结果

为了评估 SCIAMACHY 临边散射辐射反演的效果,选择 2011 年 8 月 1 日 49255 轨道中天顶角小于  $90^{\circ}$ 、共 24 条臭氧反演廓线与 Bremen 大学提供的 SCIAMACHY V3.5 在时间和空间匹配的所有廓线的平均值进行对比。该产品由与本实验不同的波长配对和 OE 算法进行反演获得,具体算法描述参考文献[13]。

图 11 分别显示了在  $10\sim 40\text{ km}$  反演范围内



反演的 49255 轨道中 24 条臭氧廓线和与其匹配的 SCIAMACHY 臭氧反演产品。可以发现,两者的臭氧浓度在纬度和大气高度的分布一致性较好,只有在轨道起始处的臭氧廓线浓度差异较大。图 12 为提取的 49255 轨道中 24 条廓线的 6 条不同纬度的臭氧廓线反演结果对比,包括南、北半球高、中、低纬度不同位置。可以发现,在高纬度或轨道起始处,臭氧反演的差异较大,而在中、低纬

度处臭氧廓线的一致性比较好。原因可能是轨道扫描开始和结束时太阳天顶角较大(图 12(a)中廓线的太阳天顶角约为  $87.2^\circ$ ,图 12(f)中廓线的太阳天顶角约为  $85.5^\circ$ ),接近  $90^\circ$ ,此时太阳辐射较弱,导致高纬度地区反演的臭氧浓度差异较大;而临边辐射受太阳天顶角的影响更明显,随着天顶角的减小,中、低纬度反演的臭氧廓线一致性也较好。

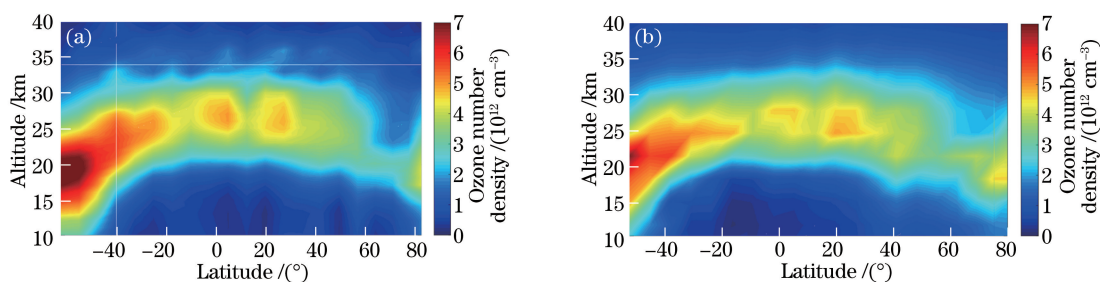


图 11 49255 轨道的 24 条臭氧廓线(纬度: $60^\circ\text{S}\sim 80^\circ\text{N}$ )。(a)本方法反演的臭氧结果;(b) SCIAMACHY V3.5

Fig. 11 Twenty four ozone profiles of 49255 orbit (latitude: $60^\circ\text{S}\sim 80^\circ\text{N}$ ).

(a) Inversion ozone results of our method; (b) SCIAMACHY V3.5

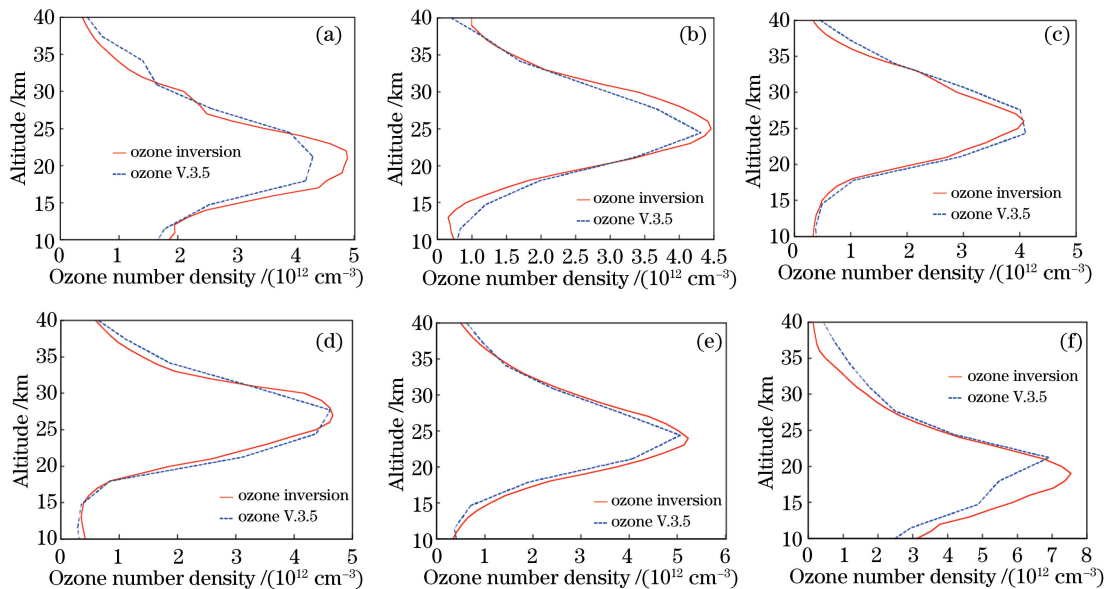


图 12 不同纬度的臭氧廓线对比。(a)  $73.1^\circ\text{N}, 291.5^\circ\text{E}$ ; (b)  $34.8^\circ\text{N}, 140.2^\circ\text{E}$ ;

(c)  $13.1^\circ\text{N}, 134.8^\circ\text{E}$ ; (d)  $1.4^\circ\text{S}, 131.7^\circ\text{E}$ ; (e)  $30.6^\circ\text{S}, 124.8^\circ\text{E}$ ; (f)  $59.4^\circ\text{S}, 113.2^\circ\text{E}$

Fig. 12 Comparison of ozone profiles in different latitudes. (a)  $73.1^\circ\text{N}, 291.5^\circ\text{E}$ ; (b)  $34.8^\circ\text{N}, 140.2^\circ\text{E}$ ;

(c)  $13.1^\circ\text{N}, 134.8^\circ\text{E}$ ; (d)  $1.4^\circ\text{S}, 131.7^\circ\text{E}$ ; (e)  $30.6^\circ\text{S}, 124.8^\circ\text{E}$ ; (f)  $59.4^\circ\text{S}, 113.2^\circ\text{E}$

## 4 结 论

详细描述了波长配对方法的机理,同时分析了 Chappuis-Wulf 波段中不同波长组合对臭氧廓线反演结果的影响,将 535, 602, 664 nm 波长作为配对波长。反演算法采用自适应的 MART, 结合球形

SCIATRAN 对 SCIAMACHY 临边散射辐射进行 10~40 km 的臭氧数密度反演,垂直分辨率为 1 km。实验结果表明,本方法与 SCIAMACHY V3.5 的反演结果表现出较好的一致性,只在轨道起始处具有较大误差,原因可能是太阳天顶角比较大,太阳辐射较弱。总体上,在轨数据反演中,反演的臭

氧廓线和臭氧产品廓线在形状、峰值等方面比较吻合,证实了本反演方法的可行性及可靠性。除此之外,还分析了算法迭代引起的臭氧反演误差,误差来源包括迭代次数、先验廓线、切高偏差和  $\text{NO}_2$  气体浓度。实验结果表明,迭代次数和先验廓线对反演结果的影响在海拔 20 km 以下都比较大,且随海拔的增加逐渐减小或保持较小值;而切高偏差和  $\text{NO}_2$  浓度偏差越大则反演误差越大。

### 参 考 文 献

- [1] von Savigny C. Retrieval of stratospheric ozone density profiles from OSIRIS scattered sunlight observations[D]. Toronto: York University, 2002: 1-21.
- [2] Wang Z J. Study on retrieval of atmospheric trace gas concentration from satellite based limb radiance[D]. Changchun: Jilin University, 2011: 1-38.  
汪自军. 基于卫星临边辐射的大气痕量气体含量反演研究[D]. 长春: 吉林大学, 2011: 1-38.
- [3] Stolarski R S, Bloomfield P, McPeters R D, et al. Total ozone trends deduced from Nimbus 7 TOMS data[J]. Geophysical Research Letters, 1991, 18(6): 1015-1018.
- [4] Burrows J P, Weber M, Buchwitz M, et al. The global ozone monitoring experiment(GOME): mission concept, and first scientific results[J]. Journal of the Atmospheric Science, 1999, 56: 151-175.
- [5] de Vries J, van den Oord G H J, Hilsenrath E, et al. Ozone monitoring instrument ( OMI ) [ J ]. Proceedings of SPIE, 2002, 4480: 315-325.
- [6] Bertaux J L, Mégie G, Widemann T, et al. Monitoring of ozone trend by stellar occultations: the GOMOS instrument [ J ]. Advances in Space Research, 1991, 11(3): 237-242.
- [7] Llewellyn E J, Lloyd N D, Degenstein D, et al. The OSIRIS instrument on the Odin spacecraft [ J ]. Canadian Journal of Physics, 2004, 82(6): 411-422.
- [8] Thomason L W, Chu W P, Pitts M C. Stratospheric aerosol and gas experiment III [ J ]. Proceedings of SPIE, 1998, 3495: 286-291.
- [9] Bovensmann H, Burrows J P, Buchwitz M, et al. SCIAMACHY: mission objectives and measurement modes [ J ]. Journal of the Atmospheric Sciences, 1999, 56(2): 127-150.
- [10] Jaross G, Bhartia P K, Chen G, et al. OMPS limb profiler instrument performance assessment [ J ]. Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 2014, 119(7): 4399-4412.
- [11] Degenstein D A, Bourassa A E, Roth C Z, et al. Limb scatter ozone retrieval from 10 to 60 km using a multiplicative algebraic reconstruction technique [ J ]. Atmospheric Chemistry and Physics Discussions, 2008, 8(3): 11853-11877.
- [12] Rusch D W, Mount G H, Barth C A, et al. Solar mesosphere explorer ultraviolet spectrometer: measurements of ozone in the 1.0–0.1 mbar region [ J ]. Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 1984, 89(D7): 11677-11687.
- [13] Kaiser J W. Atmospheric parameter retrieval from UV-vis-NIR limb scattering measurements [ D ]. Bremen: University of Bremen, 2001: 22-48.
- [14] Haley C S, von Savigny C, Brohede S, et al. A comparison of methods for retrieving stratospheric ozone profiles from OSIRIS limb-scatter measurements [ J ]. Advances in Space Research, 2004, 34(4): 769-774.
- [15] Guo X, Lu D R. Feasibility study for joint retrieval of air density and ozone in the stratosphere and mesosphere with the limb-scan technique [ J ]. Applied Optics, 2006, 45(35): 9021-9030.
- [16] Rohen G J, von Savigny C, Llewellyn E J, et al. First results of ozone profiles between 35 and 65 km retrieved from SCIAMACHY limb spectra and observations of ozone depletion during the solar proton events in October/November 2003 [ J ]. Advances in Space Research, 2006, 37(12): 2263-2268.
- [17] McDade I C, Strong K, Haley C S, et al. A method for recovering stratospheric minor species densities from the Odin/OSIRIS scattered-sunlight measurements [ J ]. Canadian Journal of Physics, 2011, 80(4): 395-408.
- [18] Flittner D E, Bhartia P K, Herman B M.  $\text{O}_3$  profiles retrieved from limb scatter measurements: theory [ J ]. Geophysical Research Letters, 2000, 27(17): 2601-2604.
- [19] Haley C S, Brohede S M, Sioris C E, et al. Retrieval of stratospheric  $\text{O}_3$  and  $\text{NO}_2$  profiles from odin optical spectrograph and infrared imager system (OSIRIS) limb-scattered sunlight measurements [ J ]. Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 2004, 109(D16): D16303.
- [20] Roth C Z, Degenstein D A, Bourassa A E, et al. The retrieval of vertical profiles of the ozone number density using Chappuis band absorption information and a multiplicative algebraic reconstruction technique [ J ]. Canadian Journal of Physics, 2007, 85(11): 1225-1243.
- [21] Wang Z J, Chen S B, Jin L H, et al. Ozone profiles retrieval from SCIAMACHY Chappuis-Wulf limb

- scattered spectra using MART [J]. *Science China Physics, Mechanics and Astronomy*, 2011, 54(2): 273-280.
- [22] von Savigny C, Haley C S, Sioris C E, et al. Stratospheric ozone profiles retrieved from limb scattered sunlight radiance spectra measured by the OSIRIS instrument on the Odin satellite [J]. *Geophysical Research Letters*, 2003, 30(14): 1755-1758.
- [23] Rault D F, Loughman R P. The OMPS limb profiler environmental data record algorithm theoretical basis document and expected performance [J]. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 2013, 51(5): 2505-2527.
- [24] Rozanov A, Rozanov V, Burrows J P. A numerical radiative transfer model for a spherical planetary atmosphere: combined differential-integral approach involving the Picard iterative approximation [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2001, 69(4): 491-512.
- [25] McPeters R D, Janz S J, Hilsenrath E, et al. The retrieval of  $O_3$  profiles from limb scatter measurements: results from the shuttle ozone limb sounding experiment [J]. *Geophysical Research Letters*, 2000, 27(17): 2597-2600.
- [26] Rodgers C D. Retrieval of atmospheric temperature and composition from remote measurements of thermal radiation [J]. *Reviews of Geophysics*, 1976, 14(4): 609-624.
- [27] Chahine M T. A general relaxation method for inverse solution of the full radiative transfer equation [J]. *Atmospheric Sciences*, 1972, 29: 741-747.
- [28] Degenstein D A, Llewellyn E J, Lloyd N D. Volume emission rate tomography from a satellite platform [J]. *Applied Optics*, 2003, 42(8): 1441-1450.
- [29] Rozanov A, Rozanov V, Buchwitz M, et al. SCIATRAN 2.0: a new radiative transfer model for geophysical applications in the 175–2400 nm spectral region [J]. *Advances in Space Research*, 2005, 36(5): 1015-1019.
- [30] Burrows J P, Richter A, Dehn A, et al. Atmospheric remote-sensing reference data from GOME—2. temperature-dependent absorption cross sections of  $O_3$  in the 231–794 nm range [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 1999, 61(4): 509-517.
- [31] Rahpoe N, Von Savigny C, Weber M, et al. Error budget analysis of SCIAMACHY limb ozone profile retrievals using the SCIATRAN model [J]. *Atmospheric Measurement Techniques Discussions*, 2013, 6(3): 4645-4676.
- [32] Sonkaew T, Rozanov V V, von Savigny C, et al. Cloud sensitivity studies for stratospheric and lower mesospheric ozone profile retrievals from measurements of limb-scattered solar radiation [J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2009, 2(2): 653-678.