

基于多轴差分光学吸收光谱测量北京地区对流层 NO₂ 的研究

朱鹏程¹, 刘浩然^{1*}, 季祥光², 李启华¹, 刘国华¹, 田园¹, 徐恒¹

1. 安徽大学物质科学与信息技术研究院, 安徽 合肥 230601

2. 中国科学技术大学环境科学与光电技术学院, 安徽 合肥 230026

摘要 由于二氧化氮(NO₂)在大气的物理和化学机制进程中有着十分重要的作用,并且对环境、气候以及人体健康产生影响,合理、有效地监测和控制大气中NO₂浓度已成为十分重要的课题。地基多轴差分吸收光谱(MAX-DOAS)仪是利用太阳散射光的被动DOAS仪器,相较于小范围测量的点式仪器、利用光源和反射装置的主动DOAS仪器,具有时间分辨率高、高灵敏度、测量范围广和不受搭建平台制约等优势特点。2018年在北京中国气象科学研究院(116.32°E, 39.95°N)开展了基于地基MAX-DOAS的对流层NO₂全年连续观测,采集得到原始吸收光谱并运用光谱处理软件QDOAS进行反演得到NO₂斜柱浓度(SCD),选择较为简单的几何近似方法计算出大气质量因子(AMF),从而将NO₂SCD转换为垂直柱浓度(VCD),据此研究分析了北京地区NO₂VCD月均值和季节均值变化、季节的日平均变化以及一周内日平均变化的特征。结果表明,北京地区对流层NO₂VCD随季节变化较为明显,呈现冬季最高而夏季最低的趋势,其中冬季季节均值达到 2.94×10^{16} molec·cm⁻²,为夏季的1.6倍,不同季节的日均变化一般在下午表现出明显的差异,最大相差为 2.17×10^{16} molec·cm⁻²。一周内每日的浓度变化有一定规律性,周日平均浓度较其他时间降低17%左右,出现了一定程度的周末效应。通过将地基MAX-DOAS观测结果和地面国控站点官园监测站(116.339°E, 39.929°N)2018全年数据结果进行对比,显示出两者变化趋势具有好的一致性,相关系数 r 可达0.81。研究表明,地基MAX-DOAS不仅可以对区域污染气体如NO₂的实时快速监测及变化规律的研究分析提供一种有效手段,也可以对其他数据来源进行校验。

关键词 地基多轴差分吸收光谱;北京;二氧化氮;垂直柱浓度

中图分类号: O433.4 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2021)07-2153-06

引言

北京作为中国首都,是中国的政治、经济和文化中心,当今快速发展的城市化和工业化所带来的一系列空气污染问题在北京及其周边地区尤为明显。NO₂作为大气中一种重要的痕量气体,不仅在环境、气候系统的运转中具有重要作用,还与空气质量直接相关,时刻影响着人类的健康^[1]。对北京地区大气中NO₂浓度进行长期连续的监测和分析活动十分必要,在开展后续的大气污染防治工作中也具有价值。

现阶段国内大气监测领域应用较多的仪器主要包括多种点式仪器、激光雷达、遥感卫星和主被动DOAS等。地基多轴差分吸收光谱(MAX-DOAS)仪是利用太阳散射光的被动DOAS仪器,可以同时测量NO₂, O₃, SO₂等多种痕量气体柱浓度信息,避免主动DOAS仪器受到搭建平台制约的问题,相对其他光学监测方法具有时间分辨率高、高灵敏度、多组分和容易搭建等特点,非常适合对大气痕量气体的实时追踪^[1]。已有研究表明,MAX-DOAS仪作为一种监测大气污染物的有效手段^[3],也能够对卫星数据、地面国控点数据等进行校验。

在前人研究的基础上,利用安放在北京中国气象科学研

收稿日期: 2020-06-29, **修订日期:** 2020-11-07

基金项目: 国家自然科学基金项目(41575021, 51778596, 41722501, 91544212), 国家重点研发计划项目(2017YFC0210002, 2018YFC0213104, 2016YFC0200404, 2016YFC0203302, 2017YFC0212800, 2019YFC0214702, 2018YFC0213201), 国家高分辨率对地观测重大科技专项项目(二期, 05-Y30B01-9001-19/20-3), 安徽省科技重大专项(18030801111), 安徽省重点研究与开发计划项目(202004i07020002), 安徽省青年项目(2008085QD180)资助

作者简介: 朱鹏程, 1997年生, 安徽大学物质科学与信息技术研究院硕士研究生 e-mail: i.pczhu@outlook.com

* 通讯作者 e-mail: hrl@ahu.edu.cn

究院站点的地基 MAX-DOAS 仪开展了时间跨度极长、工作量极大的北京地区对流层 NO₂ 全年连续观测,通过 QDOAS 等软件对监测获得的 2018 年全年数据进行反演,从多个角度系统地研究分析了北京地区对流层 NO₂ VCD 不同季节和时间段的变化特征,得到比短期阶段观测更具代表性的结论,并与地面国控站点数据进行了对比。

1 实验部分

1.1 实验场地

MAX-DOAS 仪器搭设在北京中国气象科学研究院(116.32°E, 39.95°N),位于中关村大街,周边建筑多为高校及研究机构,无工业排放点;多数时间周边路段交通流量正常,拥堵情况较少。该仪器所在位置为院内最高建筑物顶层,距离地面高度约为 42 m;观测方位角设置为 130°,仪器四周尤其是观测方向上无遮挡,可以进行长时间观测。

1.2 MAX-DOAS 测量

MAX-DOAS 仪器系统^[4]包括三个主要部分:一个望远镜单元,两个温度控制在 20°的光谱仪和一台作为控制和数据采集单元的计算机;望远镜的观测仰角由步进电机控制。望远镜采集的散射太阳光通过棱镜反射镜和石英光纤导入到光谱仪中。两个光谱仪分别覆盖了紫外(300~460 nm)和可见(400~560 nm)波长范围,光谱分辨率均为 0.6 nm。光学光谱仪配备了具有 2 048 个像素的 CCD 探测器(DU 440-BU 型)。仪器的视场约小于 0.3°。

观测中设置一个完整的测量扫描序列包括 11 个仰角,即 1°, 2°, 3°, 4°, 5°, 6°, 8°, 10°, 15°, 30°和 90°。每次测量仰角的积分曝光时间固定为 60 000 ms,完整的测量过程大约需要 11 min。可以通过使用机械快门阻挡入射光来测量暗电流和电子偏置,并在进行光谱分析之前将其从测量光谱中扣除。为了降低平流层吸收的影响,数据分析过程中太阳天顶角(solar zenith angle, SZA)大于 80°的光谱均被过滤。

1.3 光谱反演分析

QDOAS 是由比利时高空大气物理研究所(BIRA-IASB)开发的新一代跨平台光谱数据处理工具软件,具有批量处理功能和交互式可视化界面,可以通过设置不同参数来实现对光谱数据的处理。

利用 QDOAS 软件对所测量光谱进行分析,NO₂ 的反演波段选择 338~370 nm,拟合多项式设置为 5 阶,非线性选择设置为 offset^[5-6]。表 1 为参与 NO₂ 气体拟合过程中的气体吸收主要包括 HCHO, O₃, O₄, BrO 和 Ring 以及残差。图 1 为 2018 年 8 月 12 日 11:30 时刻仰角为 15°、太阳天顶角为 27.323°时 NO₂ 气体的拟合示意图,其中 NO₂ 拟合残差为 6.37×10⁻⁴。

通过光谱分析可以获得 NO₂ SCD,即大气中痕量气体沿着光路的积分浓度^[7]。其为对流层 SCD 和平流层 SCD 的总值,见式(1)

$$\text{SCD}_{\text{meas}} = \text{SCD}_{\text{trop}} + \text{SCD}_{\text{strat}} \quad (1)$$

太阳表面发出的连续光谱,因部分单色光被大气吸收而形成吸收线,这种太阳光谱被称为 Fraunhofer 谱。由于

表 1 二氧化氮差分斜柱浓度(DSCD)反演设置

Table 1 Setting used for nitrogen dioxide DSCDs retrieval

Parameter	Data Source
NO ₂	Vandaele et al. (1998), 294 K
HCHO	Meller and Moortgat (2000), 297 K
O ₃	Serdyuchenko et al. (2014), 223 K
O _{3a}	Serdyuchenko et al. (2014), 223 K
O ₄	Thalman and Volkamer (2013), 293 K
BrO	Fleischmann et al. (2004), 223 K
Ring	Ring spectra calculated with QDOAS, according to chance and Spurr (1997)
Polynomial degree	Order5
Intensity offset	Order1

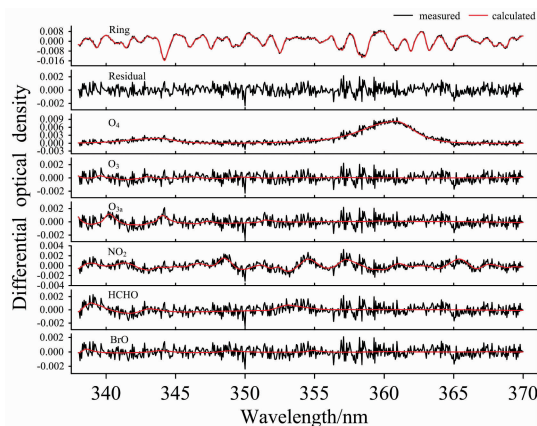


图 1 一条典型光谱的拟合示意图

Fig. 1 An example of fitting a measured spectrum

Fraunhofer 谱事实上包含大气中的痕量气体吸收,因此通过 MAX-DOAS 反演得到的应该是差分斜柱浓度,即 SCD_{meas} 除去作为参考光谱的 Fraunhofer 光谱(SCD_{ref})得出的斜柱浓度 $\text{DSCD}_{\text{meas}}$ 。通常表示为式(2)

$$\text{DSCD}_{\text{meas}} = \text{SCD}_{\text{meas}} - \text{SCD}_{\text{ref}} \quad (2)$$

对于观测仰角 α 的一个测量序列,通常选择包含痕量气体吸收较少的光谱作为参考光谱,例如正午在天顶方向(即 $\alpha = 90^\circ$)测得的光谱。由式(1)和式(2)得式(3)

$$\text{DSCD}_{\text{meas}}(\alpha) = \text{SCD}_{\text{trop}}(\alpha) + \text{SCD}_{\text{strat}}(\alpha) - \text{SCD}_{\text{trop}}(90^\circ) - \text{SCD}_{\text{strat}}(90^\circ) \quad (3)$$

由于差分斜柱浓度会受到观测位置、观测方向及其他条件的影响,所以一般将包含在光谱中的 SCD 通过大气质量因子(AMF)转化成与观测路径等无关的垂直柱浓度(VCD)^[8-9]。AMF 定义为斜柱浓度和垂直柱浓度的比值,见式(4)

$$\text{AMF} = \frac{\text{SCD}}{\text{VCD}} \quad (4)$$

此时式(2)演变为式(5)

$$\begin{aligned} \text{DSCD}_{\text{meas}}(\alpha) &= \text{AMF}_{\text{meas}}(\alpha) \text{VCD}_{\text{meas}} - \text{AMF}_{\text{ref}}(\alpha) \text{VCD}_{\text{meas}} \\ \Rightarrow \text{VCD}_{\text{meas}} &= \frac{\text{DSCD}_{\text{meas}}(\alpha)}{\text{AMF}_{\text{meas}}(\alpha) - \text{AMF}_{\text{meas}}(90^\circ)} = \frac{\text{DSCD}_{\text{meas}}(\alpha)}{\text{DAMF}_{\text{meas}}(\alpha)} \end{aligned} \quad (5)$$

在很多的情况下，可以对 AMF 进行几何近似，见式(6)

$$AMF \approx \frac{1}{\sin(\alpha)} \quad (6)$$

且平流层斜柱浓度 SCD_{strat} 可以近似看作与观测角度无关^[10]，见式(7)

$$SCD_{strat}(\alpha \neq 90^\circ) \approx SCD_{strat}(90^\circ) \quad (7)$$

则式(3)满足式(8)

$$DSCD_{meas}(\alpha) = DSCD_{trop}(\alpha) \quad (8)$$

联立式(5)和式(8)则得到对流层垂直柱浓度，见式(9)

$$VCD_{trop} = \frac{DSCD_{trop}(\alpha)}{\frac{1}{\sin(\alpha)} - 1} \quad (9)$$

几何近似是一种简单有效计算 AMF 的方法^[11]，其中在 30°处的得到的对流层 DSCD 与在该角度几何近似得到的 VCD 近似^[12]，其偏差小于在其他仰角处反演得到的 VCD。

2 结果与讨论

2.1 对流层 NO₂ 全年变化

图 2 所示为 2018 年 1 月初至 12 月底的对流层 NO₂ 垂直柱浓度的月平均结果，全年 NO₂ 变化呈现为双峰值结构。第一个浓度峰值出现在 3 月份，为 $3.76 \times 10^{16} \text{ molec} \cdot \text{cm}^{-2}$ ；第二个浓度峰值出现在 11 月份，为 $4.01 \times 10^{16} \text{ molec} \cdot \text{cm}^{-2}$ 。而月均浓度年最低值出现在 8 月份 ($1.75 \times 10^{16} \text{ molec} \cdot \text{cm}^{-2}$)，4 月—8 月份浓度整体呈持续下降的趋势，8 月—11 月份的 NO₂ 浓度逐月升高。

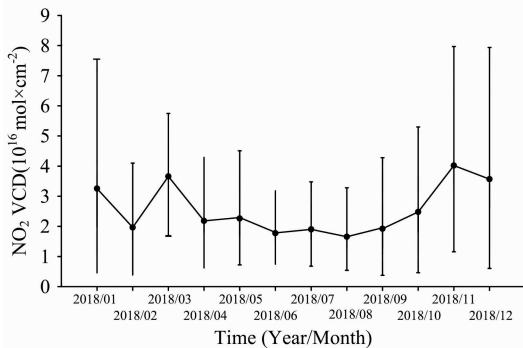


图 2 2018 年全年对流层 NO₂ 垂直柱浓度月均值时序分布
Fig. 2 Time-series distribution of monthly mean values of vertical column concentration of troposphere NO₂ in 2018

Low (high) error bars indicate that 10% (90%) of the overall date corresponds to date points, and solid points indicate the mean value

北京的 NO₂ 浓度随季节变化较为明显。表 2 给出了站点不同季节对流层 NO₂ VCD 的浓度均值，除夏季均值浓度 ($1.88 \times 10^{16} \text{ molec} \cdot \text{cm}^{-2}$) 低于全年浓度均值 ($2.61 \times 10^{16} \text{ molec} \cdot \text{cm}^{-2}$) 外，其他季节均高于全年浓度均值且呈现出冬季 > 秋季 > 春季 > 夏季的特征。其中，冬季与夏季的差异较为明显，冬季均值浓度 ($2.94 \times 10^{16} \text{ molec} \cdot \text{cm}^{-2}$) 达到夏季的 1.6 倍，说明北京在冬季时污染最为严重，分析认为冬季大气结构比较稳定且容易形成逆温层，本地排放易于积聚形

成局地污染高值^[13]；另一方面，夏季由于光照较强，大气中的污染物如 NO₂ 容易在较为强烈的物理和化学过程中发生转化和扩散，从而出现了如上所述的全年浓度分布情况。

表 2 四季对流层 NO₂ VCD 均值

Table 2 Mean of tropospheric NO₂ VCD in different seasons

季节	浓度均值/(molec · cm ⁻²)
春(3—5月)	2.78×10^{16}
夏(6—8月)	1.88×10^{16}
秋(9—11月)	2.83×10^{16}
冬(12—2月)	2.94×10^{16}
全年	2.61×10^{16}

2.2 对流层 NO₂ 不同季节平均日变化

图 3 所示为 2018 年北京地区不同季节对流层 NO₂ VCD 的平均日变化。显示对流层 NO₂ VCD 在不同季节的日平均变化特征差异较为明显。其中，除春季浓度日变化不十分明显之外，夏、秋、冬均有较为明显的日变化，尤其在上午和下午时段对比较为明显。

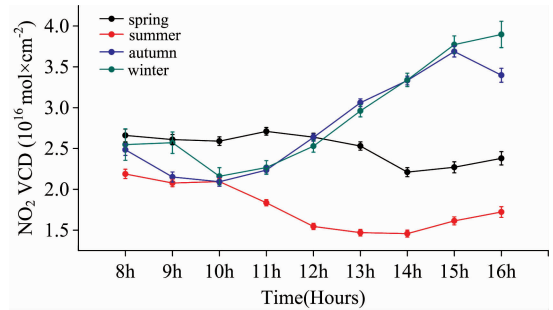


图 3 2018 年不同季节对流层 NO₂ VCD 平均日变化
 The low (high) error bar indicates that the overall date corresponds to 25% (75%) of the data point, and the solid point indicates the mean value

Fig. 3 The average daily change of NO₂ VCD in the troposphere in different seasons in 2018

The low (high) error bar indicates that the overall date corresponds to 25% (75%) of the data point, and the solid point indicates the mean value

从 NO₂ 日平均浓度时间序列来看，春季浓度在上午 11:00 之前变化不大，整体变化幅度在 $0.18 \times 10^{16} \text{ molec} \cdot \text{cm}^{-2}$ 内，11:00 达到日均最高值 ($2.71 \times 10^{16} \text{ molec} \cdot \text{cm}^{-2}$)；之后呈现下降趋势，日均最高值与最低值相差 $0.5 \times 10^{16} \text{ molec} \cdot \text{cm}^{-2}$ ，总体来看全天日变化较为平缓，差异不明显。夏季日均浓度整体水平偏低，从 10:00 之后有较为明显的降低，直至 14:00 出现最低值 ($1.46 \times 10^{16} \text{ molec} \cdot \text{cm}^{-2}$)，下午时段仅有少量的抬升；秋季和冬季日变化趋势较为相近，全天 NO₂ VCD 普遍偏高，且均在傍晚附近时段出现高值，其中，冬季全天的升高趋势更为明显，在 16:00 达到最高值 ($3.9 \times 10^{16} \text{ molec} \cdot \text{cm}^{-2}$)。

总体来看，不同季节对流层 NO₂ VCD 在上午相差较小，在 9:00 最大相差为 $0.36 \times 10^{16} \text{ molec} \cdot \text{cm}^{-2}$ ；而在下午差异较大，在 16:00 最大相差为 $2.17 \times 10^{16} \text{ molec} \cdot \text{cm}^{-2}$ ，最大

差值约为上午的 6 倍, 主要原因为排放、光化学反应以及外来输送间复杂的相互作用。秋冬季节 NO_2 的浓度升高更为明显, 一方面来自于地区本地排放的增多, 另一方面是由于大气结构更为稳定, NO_2 寿命较长, 易于产生积累。与上一节的分析结果基本符合。

2.3 对流层 NO_2 周变化

图 4 为 2018 年全年 NO_2 VCD 按周进行平均后得到的每日浓度分布时间序列, 数据显示的为半小时均值。根据图 4, 周一到周六全天 NO_2 浓度均未出现突然增高或降低, 基本保持平缓的日变化, 且整体上呈现出下午时段比上午时段略高的情况, 表 3 列出了一周 7 天内对流层 NO_2 VCD 的均值浓度。总体分析, 周一到周六 NO_2 日平均浓度最高值出现在周四, 为 $2.72 \times 10^{16} \text{ molec} \cdot \text{cm}^{-2}$, 最低值出现在周三, 为 $2.47 \times 10^{16} \text{ molec} \cdot \text{cm}^{-2}$; 最低值较最高值相差仅 8%, 未表现出明显的差异。而周日的日均浓度为 $2.27 \times 10^{16} \text{ molec} \cdot \text{cm}^{-2}$ 比一周内的其他时间出现了相对明显的降低, 与工作日的最大相差达到 17%。研究表明^[14], 城市 NO_2 的排放主要来源于工业和交通, 这可能是导致一定程度上“周末效应”出现的原因。

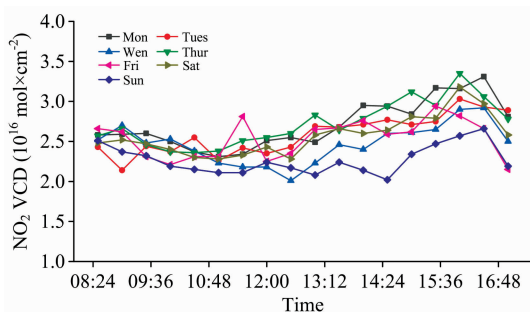


图 4 2018 年对流层 NO_2 VCD 周平均的日变化

Fig. 4 Daily average daily change of tropospheric NO_2 VCD in 2018

表 3 一周内对流层 NO_2 VCD 日均值

Table 3 Daily mean value of NO_2 VCD in the troposphere in one week

日期	日均浓度/($\text{molec} \cdot \text{cm}^{-2}$)
星期一	2.70×10^{16}
星期二	2.59×10^{16}
星期三	2.47×10^{16}
星期四	2.72×10^{16}
星期五	2.54×10^{16}
星期六	2.57×10^{16}
星期日	2.27×10^{16}

2.4 MAX-DOAS 与国控站点结果对比

为了对 MAX-DOAS 测量结果的可靠性和准确性进行验证, 选择使用地面国控站点数据对 MAX-DOAS 数据进行对比。大气环境监测数据来自北京市空气质量自动监测网络。为了使数据之间的可对比性达到最大, 选择与气科院所在位置最为接近的官园监测站 (116.339°E , 39.929°N)。由于两

站点虽位于同一路段区域, 但实际距离仍在 2 km 左右, 且 MAX-DOAS 有一定的空间分辨率, 而国控站点是固定一点的精确测量, 因此研究选用两站点月均值做整体趋势分析, 仍可以说明之间的联系。

如图 5 所示, 对两组浓度数据进行相同的处理。由 3.1 节中的分析可知, 2018 全年的对流层 NO_2 VCD 分别在 3 月和 11 月出现了峰值。从国控点监测得到的地面浓度来看, 3 月份的月均浓度为 $62.44 \mu\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$, 11 月份的月均浓度为 $66.24 \mu\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$, 分别出现了全年范围内的明显高值。可以看到, 地面浓度按照时序变化的总体趋势和 MAX-DOAS 的 VCD 月平均时序变化趋势相同; 图中两站点的其他数据点 [低(高)值、四分位点及中位数] 也呈现一致的变化趋势。

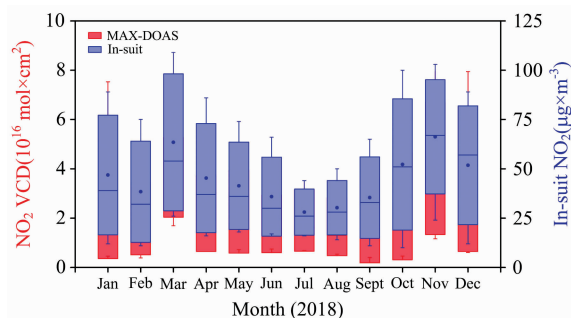


图 5 地基 MAX-DOAS 和地面站点月平均变化对比

低(高)误差条, 箱体分别是 10%(90%), 25%(75%) 对应数据点, 实心点表示均值

Fig. 5 Comparison of monthly average changes of ground-based MAX-DOAS and ground stations

Low (high) error bars, the boxes are 10% (90%), 25% (75%) correspond to data points, the solid points represent the mean

由图 6 可见, 地基 MAX-DOAS 测量数据与国控点地面数据的月均值相关系数 R^2 为 0.81。体现在变化趋势上的区别在于测量的对流层 NO_2 VCD 月平均浓度最低值出现在 8 月份, 而国控点地面数据月平均浓度最低值出现在 7 月份, 为 $28.05 \mu\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$ 。分析认为是由于 7、8 月份处在夏季, 污染物浓度本底值较低, 加之 MAX-DOAS 测量结果误差限的

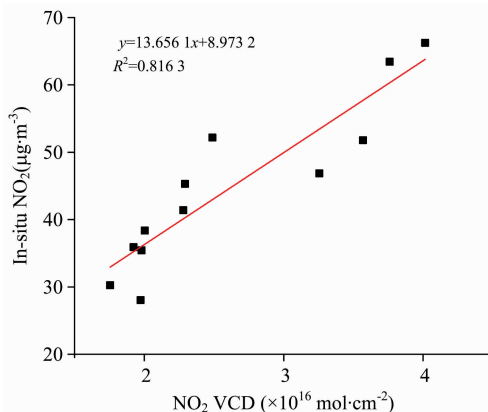


图 6 地基 MAX-DOAS 和地面站点数据结果相关性

Fig. 6 Correlation between ground-based MAX-DOAS and ground station data results

存在,使得浓度变化趋势存在一定的差异。

3 结 论

利用搭建在北京中国气象科学研究所的地基 MAX-DOAS 采集得到的 2018 全年数据,基于 QDOAS 软件反演分析了北京地区对流层 NO₂ VCD 全年变化、季节变化和日变化特征,并将 MAX-DOAS 观测结果与国控点数据进行对比,得到如下结果:

(1) 北京地区对流层 NO₂ VCD 全年月均值和季节均值变化显著,冬季浓度最高,夏季浓度最低,冬季季节均值可达 2.94×10^{16} molec · cm⁻²,为夏季的 1.6 倍。

(2) 不同季节的 NO₂ VCD 平均日变化模式有较大差异,秋冬季节日变化更为明显,NO₂ 浓度基本处于全天增长且整体较高的状态,其中冬季全天的升高趋势更为明显,在傍晚 16:00 达到最高值(3.9×10^{16} molec · cm⁻²)。

(3) 一周内的 NO₂ VCD 日变化随时间呈现一定的规律性,且周日的日均浓度较一周内的其他时间出现了相对明显的降低,最大相差达到 17%,体现出一定程度上的“周末效应”。

(4) 通过将 MAX-DOAS 数据结果和国控点地面数据进行比对,发现两者的变化趋势具有较好的一致性,相关系数达到 0.81。说明 MAX-DOAS 可以较好地完成区域对流层 NO₂ 变化及分布特征的探测,且具有较高可靠性和准确性。

References

- [1] Zhang C, Liu C, Chan K L, et al. Light: Science & Applications, 2020, 9(1): 3323.
- [2] Tian X, Xie P, Xu J, et al. J. Environ. Sci., 2018, 71(09): 207.
- [3] Davis Z Y W, Baray S, Mclinden C A, et al. Atmos. Chem. Phys., 2019, 19(22): 13871.
- [4] Xing C, Liu C, Wang S, et al. Atmos. Meas. Tech., 2019, 12(6): 3289.
- [5] Xing C, Liu C, Hu Q, et al. Science of the Total Environment, 2020, 715: 136258.
- [6] Zhang C, Liu C, Wang Y, et al. IEEE T. Geosic. Remote., 2018, 56(6): 1.
- [7] LI Xiao-mei, XIE Pin-hua, XU Jin, et al(李晓梅,谢品华,徐晋,等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2020, 40(3): 712.
- [8] Su W, Liu C, Hu Q, et al. Atmos. Chem. Phys., 2019, 19(10): 6717.
- [9] Zhang C, Liu C, Hu Q, et al. Light: Science & Applications, 2019, 8(1): 100.
- [10] Tan W, Liu C, Wang S, et al. Atmos. Chem. Phys., 2018, 18(20): 15387.
- [11] Tian X, Xie P, Xu J, et al. Atmos. Chem. Phys., 2019, 19(5): 3375.
- [12] Khokhar M, Naveed S, Butt J, et al. Atmosphere, 2016, 7: 68.
- [13] Drosoglou T, Bais A F, Zyrichidou I, et al. Atmos. Chem. Phys., 2017, 17(9): 5829.
- [14] Xing C, Liu C, Wang S, et al. Atmos. Chem. Phys., 2017, 17(23): 14275.

Study on Measurement of Tropospheric NO₂ in Beijing by MAX-DOAS

ZHU Peng-cheng¹, LIU Hao-ran^{1*}, JI Xiang-guang², LI Qi-hua¹, LIU Guo-hua¹, TIAN Yuan¹, XU Heng¹

1. Institute of Physical Science and Information Technology, Anhui University, Hefei 230601, China

2. School of Environmental Science and Optoelectronic Technology, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China

Abstract Due to the importance of nitrogen dioxide (NO₂) in the atmosphere's physical and chemical processes and its impact on the environment, climate and human health, reasonable and effective monitoring and control of NO₂ concentration in the atmosphere has become a very important topic. The Differential optical absorption spectroscopy (MAX-DOAS) instrument is a passive DOAS instrument that uses the sun's scattered light. Compared with the point type instrument which measures in a small range and the active DOAS instrument that uses the light source and reflection device, it has high time resolution, high sensitivity, wide measurement range and not restricted by the platform. In 2018, the annual continuous observation of tropospheric NO₂ based on ground-based MAX-DOAS was carried out at the China Academy of Meteorological Sciences (116.32° E, 39.95°N) in Beijing. The original absorption spectra were collected and retrieved using the spectral processing software QDOAS to obtain the NO₂ slant column concentration (SCD). Combined with the simpler geometric approximation method of atmospheric quality factor (AMF), the NO₂ SCD was converted into vertical column concentration (VCD), and based on this, the Beijing area was studied and analyzed. The characteristics of monthly and seasonal mean change of NO₂ VCD, seasonal daily mean change and daily mean change in a week. The results show that the tropospheric NO₂ VCD changes obviously with seasons

in Beijing, showing the highest in winter and the lowest in summer. The mean value in winter is 2.94×10^{16} molec \cdot cm $^{-2}$, which is 1.6 times that in summer. The average daily change in different seasons generally shows the obvious difference in the afternoon, and the maximum difference is 2.17×10^{16} molec \cdot cm $^{-2}$. There is a certain regularity in the daily concentration change in a week. The average concentration on Sunday is about 17% lower than that on other days, and there is a certain weekend effect. By comparing the observation results of MAX-DOAS on the ground with the state control station's data on the ground, the change trend of the two has good consistency, and the correlation coefficient r can reach 0.81. The research shows that ground-based MAX-DOAS can provide an effective means for real-time and rapid monitoring of regional pollution gases and analysis of variation rules and can verify the data obtained from other sources.

Keywords MAX-DOAS; Beijing; NO $_2$; Vertical column concentration

(Received Jun. 29, 2020; accepted Nov. 7, 2020)

* Corresponding author

《光谱学与光谱分析》期刊社决定采用 ScholarOne Manuscripts 在线投稿审稿系统

《光谱学与光谱分析》期刊社与汤森路透集团签约,自 2010 年 12 月 1 日起《光谱学与光谱分析》决定采用 Thomson Reuters 旗下的 ScholarOne Manuscripts 在线投稿审稿系统。

- ScholarOne Manuscripts, 该系统不仅能轻松处理稿件,而且能提速科技交流。
- 全球已有 360 多家学会和出版社的 3 800 多种期刊选用了 ScholarOne Manuscripts 系统作为在线投稿、审稿平台,全球拥有超过 1 350 万的注册用户,代表着全球学术期刊在线投审稿的一流水平。
- ScholarOne Manuscripts 与 EndNote, Web of Science 无缝链接和整合;使科研探索、论文评阅和信息传播效率大为提高。
- ScholarOne Manuscripts 是汤森路透科技集团的一个业务部门,拥有丰富的学术期刊业务经验,为学术期刊提供综合管理工作流程系统,使期刊更有效管理投稿、同行评审、加工和发表过程,提高作者心中的专业形象,缩短论文发表时间,削减管理成本,帮助期刊提高科研绩效和实现学术创新。

《光谱学与光谱分析》采用“全球学术期刊首选的在线投稿审稿系统—ScholarOne Manuscripts”,势必对 2010 年 11 月 30 日以前向本刊投稿的作者在查阅稿件信息时,会带来某些不便,在此深表歉意!为了推进本刊的网络化、数字化、国际化进程,以实现与国际先进出版系统对接;为了不断提高期刊质量,加快网络化、数字化建设,加快与国际接轨的进程,希望能得到广大作者、读者们的支持与理解,对您的理解和配合深表感激。这是一件新事物,肯定有不周全、不完善的地方,让我们共同努力,不断改进和完善起来。

《光谱学与光谱分析》期刊社

2010 年 12 月 1 日