

从地面高分辨率太阳光谱遥感 大气成分的信息内容*

王英鑑

(中国科学院空间物理所)

提 要

本文提出了一种利用地面高分辨率太阳光谱进行大气成分垂直分布反演时,消除太阳零吸收光谱曲线影响的方法,分析了这一方法的权函数特性,讨论了仪器的光谱分辨率、谱线光谱参量以及成分混合比高度分布特性对其可测量高度、垂直分辨率和误差放大率等信息内容的影响。结果指出:对混合比随高度增加或变化不大的大气成分,利用普通高分辨率光谱仪可给出20—30km高度以下混合比高度分布的信息。若采用外差技术,将光谱分辨率提高到 0.001cm^{-1} 以上,其最高测量高度可达40km以上。

一、引 言

从60年代以来,利用 CO_2 $15\mu\text{m}$ 和 $4.3\mu\text{m}$ 带进行对流层、平流层温度的卫星探测已获得满意的结果。但由于大气压力、密度随高度迅速减小,而大多数大气成分又集中在低层,因此,地对空大气遥感的能力一直是个有争议的问题。一些学者^[1,2]对此持否定态度,认为只能给出平流层大气参量的平均值。

随着高分辨率分光技术的发展,近年来一些工作者^[3-6]开展了高分辨率太阳光谱反演大气微量成分垂直分布的试验工作,给出了初步的测量结果。不幸的是:由于未进行过测量信息内容的仔细分析,正如本文将指出的其中一些结果是不可靠的。作者^[7,8]虽然也曾对大气成分地面遥感的能力作过讨论,但对其信息内容尚未进行全面分析,而且已做的讨论也是在假定太阳零吸收光谱曲线已知的条件下进行的。事实上,太阳零吸收光谱曲线一般无法直接测得,这将给大气成分的反演带来困难和误差。

本文的目的是给出一种消除太阳零吸收光谱曲线影响的方法,并分析这一方法用于大气成分地面遥感时的权函数特性和可测量高度、垂直分辨率以及误差放大率等信息内容。

二、权函数特性的理论分析

若到达地面的太阳光谱辐照度为 $I(\nu)$,测量仪器的仪器函数为 $\varphi(\nu)$,则通过该仪

1986年10月14日收到,1987年3月3日收到修改稿。

* 本工作得到中国科学院院内科基金资助。

器测得的太阳光谱辐照度 $I^{0b}(\nu)$ 应为两者的卷积

$$I^{0b}(\nu) = \int I(\nu') \varphi(\nu - \nu') d\nu' \quad (1)$$

其中, $I(\nu) = I_0(\nu)\tau(\nu)$, $I_0(\nu)$ 为地球大气外的太阳光谱辐射, $\tau(\nu)$ 为大气透过率。一般而言, 大气削弱包括分子散射、气溶胶散射、所考虑谱线的吸收以及其他谱线远翼的连续吸收, 即

$$\tau = \tau_m \tau_a \tau_l \tau_c$$

对所考虑谱线而言, 我们有

$$\tau_l = \exp \left[- \int_0^\infty \rho q K(\nu) \cdot \text{Ch}(\theta, z) dz \right] \quad (2)$$

其中, ρ 为大气密度, q 为所测成分的混合比, $K(\nu)$ 为吸收系数, $\text{Ch}(\theta, z)$ 为 Chapman 函数, θ 为太阳天顶角, z 为高度。一般 I_0 , τ_m , τ_a 和 τ_c 在红外波段均为波长的缓变函数, 在一窄光谱波段内它们可近似看成常数。这样, (1) 式可改写为:

$$I^{0b}(\nu)/I'_0 = \int \tau_l(\nu') \varphi(\nu - \nu') d\nu' \quad (3)$$

其中, $I'_0 = I_0 \tau_m \tau_a \tau_c$ 称为太阳零吸收光谱辐照度, 若 I'_0 已知, 则可由上式给出观测的大气透过率值, 这是我们以前^[7,8]分析的基础。但由于大气气溶胶和大气成分的不定性, 由测量直接给出 I'_0 是十分困难的。为了消除这一误差的影响, 我们采用了相对测量方法。

在高分辨率光谱测量中, 谱线的吸收可认为是相对谱线远翼而言的。事实上, 谱线其他点也可取为参考基准。若我们取谱线中心波长作为参考基准, 由 (3) 式可得:

$$\frac{I_i^{0b}}{I_0^{0b}} = \frac{\varphi_i * \tau_i}{\varphi_0 * \tau_0} \quad (4)$$

这里, $*$ 代表卷积。为简便起见, 将 $\varphi(\nu_i)$ 写为 φ_i , $\tau_i(\nu_i)$ 写为 τ_i , $I^{0b}(\nu_i)$ 写为 I_i^{0b} ; 而下标零代表谱线中心波长的各量。(4) 式中的 τ_i , τ_0 均为被测成分混合比的非线性函数。本文的目的是估计地对空大气遥感的信息内容, 它是作为这一方法探测能力的初步判断。至于反演这一非线性方程的方法我们将在以后的文章中给出。就信息内容的讨论而言, 我们可以认为其平均廓线已知, 考虑由于混合比的微小变化所引起的测量值的变化, 有

$$\Delta(I_i^{0b}/I_0^{0b}) = \int \Delta q dz \left\{ \frac{\rho \cdot \text{Ch}(\theta, z)}{\varphi_0 * \tau_0} \left[- \varphi_i * (K_i \tau_i) + \frac{\varphi_i * \tau_i}{\varphi_0 * \tau_0} \cdot \varphi_0 * (K_0 \tau_0) \right] \right\} \quad (5)$$

由 (4)、(5) 式, 可得

$$\Delta R/R = \int (\Delta q/q) \cdot W dz \quad (6)$$

其中, $R = I_i^{0b}/I_0^{0b}$, W 为权函数, 有

$$W = \rho q \text{Ch}(\theta, z) \left[\frac{\varphi_0 * (K_0 \tau_0)}{\varphi_0 * \tau_0} - \frac{\varphi_i * (K_i \tau_i)}{\varphi_i * \tau_i} \right] \quad (7)$$

为便于从理论上分析权函数的基本特性, 下面作一些简化。当仪器具有很高的光谱

分辨率时,可假定在仪器的光谱分辨区间内,单色透射率 τ 和乘积 $K\tau$ 近似为线性函数,即

$$\begin{aligned}\tau(\nu) &\approx \tau(\nu_i) + a(\nu - \nu_i) \\ K(\nu)\tau(\nu_i) &\approx K(\nu_i)\tau(\nu_i) + b(\nu - \nu_i)\end{aligned}\quad (8)$$

应该指出,由于谱线在中心波长两边为对称分布,故对谱线中心波长而言,上述假定是不正确的,但可对仪器光谱分辨区间的一半使用上述假定。一般光谱仪器的仪器函数为三角型或高斯型函数^[9],它们对光谱分辨区间的中间波长有明显的对称性

$$\varphi(\nu) = \varphi(|\nu - \nu_i|) \quad (9)$$

将(8)、(9)式代入(7)式,可得

$$W = \rho q \cdot \text{Ch}(\theta, z) [K_c - K_i] \quad (10)$$

这里 K_c 为波长 ν_c 处的吸收系数值。根据上述对谱线中心附近波长所作的假定,我们可以指出 $\nu_c - \nu_0 \approx \sigma/3$, σ 为仪器的光谱分辨率, ν_0 为谱线的中心波长。由(10)式表明,在上述假定下,权函数仅和单色吸收系数 K_i , K_c 有关。

在大气遥感中,通常吸收系数为 Voigt 函数,它是碰撞增宽和 Doppler 增宽的混合线型。利用谱频法进行大气遥感之所以可能是由于在该层大气区域中碰撞增宽起主导作用。为此,我们忽略 Doppler 增宽的影响,假定吸收系数 $K(\nu)$ 为 Lorentz 线型

$$K(\nu) = \frac{S}{\pi} \cdot \frac{\alpha}{(\nu - \nu_0)^2 + \alpha^2} \quad (11)$$

其中, α 为谱线半宽度

$$\alpha = \alpha_0 P \sqrt{T_0/T} \quad (12)$$

S 为谱线强度

$$S = S_0 \left(\frac{T_0}{T}\right)^m \exp\left[-1.439 E'' \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right] \quad (13)$$

这里, α_0 , S_0 为给定温度 T_0 和一个大气压下的谱线半宽度及谱线强度, E'' 为低态能级的能量, T 为大气温度, P 为大气压力。在红外区,对线型分子而言, $m = 1$; 对非线性型分子而言, $m = 1.5$ 。在大气中,温度的变化远小于压力的变化,而且对大部分谱线而言,谱线强度与半宽度有相反的温度变化趋势,因此,这里忽略权函数随温度的变化。将(11)、(12)式代入(10)式,并利用气体状态方程,可得

$$W = W_0 \frac{(2x + \Delta x)\Delta x P^2}{(x^2 + P^2)[(x + \Delta x)^2 + P^2]} \quad (14)$$

其中, $x = (\nu_c - \nu_0)/\alpha_0$, $\Delta x = (\nu_i - \nu_c)/\alpha_0$, 而

$$W_0 \propto \frac{S_0 q}{\alpha_0} \text{Ch}(\theta, z) \quad (15)$$

将(14)式对高度微分,很容易得出其峰值高度为:

$$P_m = x \sqrt{1 + \frac{\Delta x}{x}} \quad (16)$$

上式指出,权函数的峰值高度随 Δx 的增加而降低。但由静压公式知道,即使 $\Delta x = x$ 时,与 $\Delta x = 0$ 相比,其权函数的最高峰值高度仅降低约 $0.35H$, 这里 H 为大气标高。这

一最高峰值高度的降低可以忽略。取 $\Delta x = x$, 则权函数的最高峰值高度为:

$$P_m = \sqrt{2} x \quad (17)$$

这一结果与我们以前所给出的结果^[9]是基本一致的。利用(17)式, 权函数表达式(14)可改写为:

$$W = W_0 \frac{3t^2}{(1 + 2t^2)(2 + t^2)} \quad (18)$$

其中 $t = P/P_m$ 。由(15)式知, 当 q 随高度不变时, 在给定测量条件下, W_0 为一常数, 这时权函数 W 对峰值高度有很好的对称性。当 q 随高度缓慢增加时, 这时虽然权函数的峰值高度没有变化, 但其对权函数峰值高度以上区域有较大的权重; 而当混合比随高度迅速增加时, 将会提高权函数的峰值高度, 这都将使其测量到更高的高度。反之, 当混合比随高度减小时, 则可测量的最高高度将有所下降。表 1 给出了权函数(18)式的半值宽度, 这里假定 W_0 为常数。为了比较起见, 在表中也给出了利用卫星进行大气温度遥感时权函数的半值宽度^[10]。可以看出, 从地面高分辨率太阳光谱反演大气成分的垂直分布具有适当的高度分辨率, 其值介于两种卫星测量方法之间。

表 1 权函数的半值宽度

地面观测	权函数(18)式	1.85H
卫星观测	普通低分辨率测量	2.5H
	选择调制辐射计测量	1.25H

三、数值计算结果和讨论

为了进一步定量了解所提方法的信息内容, 我们利用 Backus-Gillbert 方法^[11]对(6)、(7)式进行了数值模拟计算。表 2 给出了计算时所选用的主要谱线参量, 它们取自大气吸收谱线参量汇编 1982 年版^[12]。大气模式取自 1976 年美国标准大气^[13], 大气成分混合比的分布取自文献[14]。在计算中, 假定仪器函数为三角型函数, 谱线线型为 Voigt 函数。

表 2 选用主要谱线的光谱参量

成分	ν_0 (cm^{-1})	S_0 (cm/molecule)	α_0 (cm^{-1})	K'' (cm^{-1})
O_3	990.6112	1.27E-21	0.083	1022.24
	1003.5090	9.67E-21	0.083	568.506
CH_4	1207.8332	1.04E-21	0.049	1095.981
N_2O	1248.6973	2.52E-20	0.0748	686.704
水汽	1906.0670	2.73E-24	0.0863	551.61

1. 仪器光谱分辨率的影响

图 1 给出了仪器光谱分辨率 σ 对可测量高度和垂直分辨率的影响。图中实线指出可

测量高度,虚线代表垂直分辨率,曲线上的数字指出了误差放大率,即反演混合比的相对误差与测量相对误差之比 $(\Delta q/q)/(\Delta R/R)$ 。计算是对 O_3 谱线进行的。从图中看出,当仪器的光谱分辨率为 0.06 cm^{-1} 时,它的最高可测量高度约为 20 km ,垂直分辨率约为 10 km 。这样,它仅能获得两个独立信息参量,而且其误差放大率达近 100 ,也就是说,当测量误差为 1% 时,反演 O_3 混合比的误差可高达 100% 。在这种情况下不可能进行大气成分垂直分布的有效测量,而仅能给出对流层或平流层大气参量的平均值,这和文献[2]所给出的结论基本上是一致的。但随着光谱分辨率的提高,可测高度和垂直分辨率将有所改善,误差放大率也有所减小。如仪器的光谱分辨率提高到 0.01 cm^{-1} 时,则最高可测量高度可达近 30 km ,在 15 km 以上高度的垂直分辨率约为 6 km ,误差放大率 $\eta=10$,这时可获得大约四个独立信息参量。若采用光外差技术将仪器光谱分辨率提高到 0.001 cm^{-1} ,则最高可测量高度可达 40 km 以上,在 15 km 以上高度的垂直分辨率进一步下降到近 5 km 。在 $20-40\text{ km}$ 的高度区间内,其误差放大率 $\eta=10$ 。这时可获得的独立信息参量进一步增加到大约 7 个,从而能给出较好的大气成分的垂直分布。总之,测量仪器的光谱分辨率不仅对可测量高度、垂直分辨率,而且对反演精度都有直接影响,在给定测量条件下,为获得更高精度和更高高度大气气体成分的垂直分布,必须采用较高分辨率的光谱仪器。

在上节中,我们给出了权函数的最高峰值高度表达式(17),它大致和这里所给的最高可测高度与垂直分辨率的半值之差相当。比较(17)式的计算结果与图 1 所给结果发现,(17)式计算结果普遍约低 7 km ,这是由于 O_3 混合比在 35 km 处有一最大值、在 35 km 以下混合比随高度增加的缘故。也由于这一原因,在低空反演 O_3 混合比的垂直分辨高度和误差放大率都迅速增大。

2. 被测成分混合比高度分布特性的影响

在大气中,气体成分混合比随高度的分布大致有三种类型:一是混合比在某一高度有一极大值,如 O_3 , HNO_3 等;二是混合比随高度基本保持不变,如 N_2O , CH_4 等;三是混合比随高度迅速减小,如水汽等。为了解它们对反演信息内容的影响,对 O_3 , N_2O 和水汽三种成分进行了计算,结果给出在图 2 中。比较指出,对 N_2O 的最高可测量高度比 O_3 约低 5 km ,基本上与(17)式的计算结果相符;而对水汽仅能获得 $7-8\text{ km}$ 以下高度混合比的信息,而随光谱分辨率的提高,在本文所考虑的光谱分辨率范围内 ($\sigma \geq 0.001\text{ cm}^{-1}$),其最高可测量高度也没有多大提高,这主要是由于水汽混合比在对流层迅速减小的缘故。就垂直分辨率和误差放大率而言,水汽和 N_2O 的误差放大率约为 $10-20$;而垂直分辨率约为 $3-8\text{ km}$,平均值约为 5 km ,且基本上随高度的降低而有所改善。与 O_3 的情况相比,它们在垂直分辨率和误差放大率方面,其低空的值均有所改善。这表明这一方法对测量混合比随高度增加或变化不大成分的垂直分布特性是较适用的;而对混合比随高度迅速减小的成分(如水汽),由于其最高可测量高度的限制仅能给出低对流层的分布特性。

应该指出,图 2 所采用的光谱分辨率与 Goldman 等人^[3]在南极考察中所使用的光谱分辨率相同,均为 0.02 cm^{-1} 。从上述分析看出,利用这一光谱分辨率不可能获得 $6-9$ 个独立信息参量,也不可能给出他们所得到的较高层的大气成分垂直分布的信息。

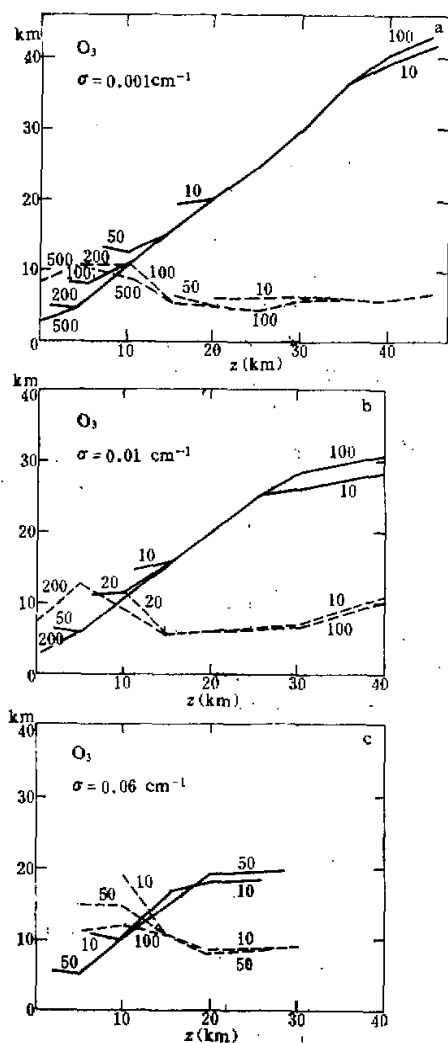


图1 仪器分辨率 σ 对可测量高度(实线)和垂直分辨率(虚线)的影响。曲线上的数字指出了误差放大率

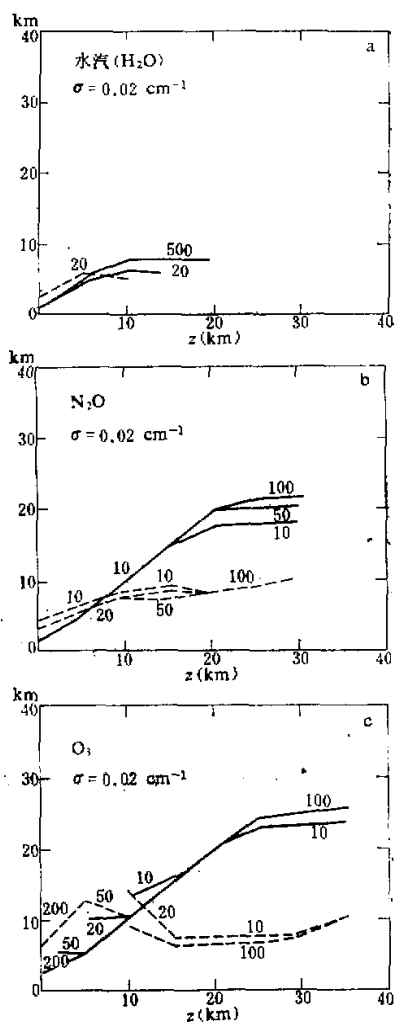


图2 混合比轮廓对可测量高度(实线)和垂直分辨率(虚线)的影响。曲线上的数字指出了误差放大率

3. 谱线光谱参数的影响

(15)、(16)式指出,谱线强度与权函数的峰值高度无关,它的大小仅仅改变 W_0 值,从而影响到被测的辐照度,但这一影响可通过测量天顶角的选取加以补偿。低态能级对测量信息量的影响主要是通过线强的温度效应。图3给出了 $S\alpha/T$ 随温度的变化曲线。从图中看出,在大气温度区间内,当 $E'' = 400-600\text{cm}^{-1}$ 时, $S\alpha/T$ 基本不随温度变化;而当

$E'' < 1000\text{cm}^{-1}$ 时,其随温度的变化也很小。

谱线半宽 α_0 对测量信息内容的影响可从(17)式看出。当 α_0 减小时,将使 x 增大,从而使可测高度降低。但在红外波段,各种大气成分谱线的半宽 $\alpha_0 \sim 0.1\text{cm}^{-1}$ 、且变化不大。由(17)式知,若 α_0 减小一半,其可测高度仅下降约 5km,这也为对 CH_4 的数值模拟计算结果所证实。

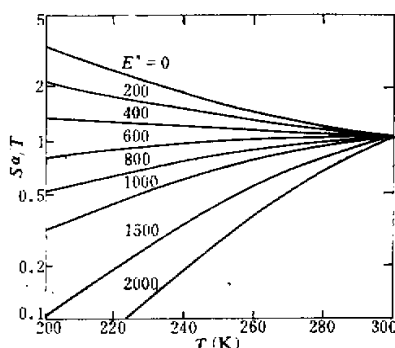


图3 $S\alpha/T$ 随温度 T 的变化

四、结 论

在利用地面高分辨率太阳光谱反演大气成分的过程中,太阳零吸收光谱曲线的确定是一个有很大不定性的因子,本文提出利用测量相对光谱辐照度的方法来消除这一影响。分析指出,这一方法有适当的权函数特性;它的最高可测量高度可粗略由(17)式给出;其垂直分辨率介于两种卫星温度遥感方法之间。当被测谱线在大气中有适当的吸收时,谱线的光谱参量对测量信息内容的影响很小。

数值计算指出,这一方法对混合比随高度增加或基本不变的成分较为适用,而为获得该成分较好的高度分布廓线,要求测量仪器的光谱分辨至少应高于 0.02cm^{-1} 。对混合比随高度迅速减小的水汽成分,在所考虑的光谱分辨率范围内 ($\sigma \geq 0.001\text{cm}^{-1}$),不可能给出高对流层和平流层中垂直分布的有效信息。

参 考 文 献

- [1] Shaffer, W. A. and Shaw, J. H., 1983, Resolution of vertical mixing-ratio profiles of atmospheric constituents retrieved from solar spectra, *Appl. Optics*, Vol. 22, 2977.
- [2] 曾庆存, 1974, 大气红外遥测原理, 科学出版社。
- [3] Goldman, A., et al., 1983, Spectral least square quantification of several atmospheric gases from high resolution infrared solar spectra obtained at the south pole, *JQSRT*, Vol. 29, 189—204.
- [4] Marche, P., et al., 1980, Ground based spectroscopic measurements of HCl, *Geophys. Res. Lett.*, Vol. 7, 869—872.
- [5] Niple, E., et al., 1980, Stratospheric NO_2 and H_2O mixing-ratio profiles from high resolution infrared solar spectra using nonlinear least squares, *Geophys. Res. Lett.*, Vol. 7, 489—492.
- [6] Abbas, M. M., et al., 1978, Stratospheric ozone measurement with an infrared heterodyne spectrometer,

- Geophys. Res. Lett.*, Vol. 5, 317--320.
- [7] Wang Yingjian, 1983, Feasibility of determining the vertical profiles of middle atmosphere composition from the ground, RL-83-080, Rutherford Appleton Laboratory, Chilton, Didcot, England.
- [8] Wang Yingjian, 1984, On the determination of middle atmosphere composition from high-resolution solar spectra, *Int. J. Remote Sensing*, Vol. 5, 843--847.
- [9] Thorne, A. P., 1974, *Spectrophysics*, Chapman and Hall, London.
- [10] Kaplan, L. D., et al., 1977, Spectral band passes for a high precision satellite sounder, *Appl. Opt.*, Vol. 16, 322--325.
- [11] Conrath, B. J., 1972, Vertical resolution of temperature profiles obtained from remote radiation measurements, *J. Atmos. Sci.*, Vol. 29, 1262--1271.
- [12] Rothman, L. S., et al., 1983, AFGL atmospheric absorption line parameters compilation: 1982 edition, *Appl. Opt.*, Vol. 22, 2247--2256.
- [13] National Oceanic and Atmospheric Administration, US Standard Atmosphere 1976, Washington D. C., Oct. 1976.
- [14] Smith, M. A. H., 1982, Compilation of atmospheric gas concentration profiles from 0 to 50 km, NASA TM-83289.

勘 误

本刊 12 卷 1 期有如下排校错误, 需作勘误:

页	行	误	正
4	倒 5	$R_1 < \frac{\pi^2}{R_2^2}(R_2 - \pi^2)$	$R_1 < \frac{\pi^2}{R_2^2}(R_2 - \pi^2)$
7	9	$(K_1)_{\text{初}}$	$(R_1)_{\text{初}}$
43	15	遂时	逐时