

# 基于加权乘代数算法分析全球平流层臭氧垂直分布差异\*

徐自强<sup>1)2)</sup> 杨太平<sup>1)</sup> 钱园园<sup>1)2)</sup> 司福祺<sup>1)†</sup>

1) (中国科学院, 合肥物质科学研究院, 安徽光学精密机械研究所, 环境光学与技术重点实验室, 合肥 230031)

2) (中国科学技术大学, 合肥 230026)

(2022年6月30日收到; 2022年9月27日收到修改稿)

全球气候变化与南极臭氧空洞的形成促使人们关注大气臭氧含量的变化. 臭氧通常通过天底卫星实现全球连续观测, 进而获得全球柱浓度, 但随着对臭氧的深入研究, 全球臭氧分层观测问题也随之出现. 本文将加权乘代数算法与辐射传输模型 SCIATRAN 相结合, 采用 2011 年 Chappuis-Wulf 波段的 SCIAMACHY 临边辐射数据, 反演出 15—40 km 高度之间的平流层臭氧廓线, 解决了全球臭氧分层观测问题. 在全球臭氧分层图中, 观测到全球臭氧传输从低纬度地区的形成上升到中高纬度地区的消耗下降的整个过程, 这与布鲁尔-多布森环流直接相关. 在 9—10 月南极臭氧空洞最严重时期, 南极高地环流对臭氧传输的阻碍作用明显, 极地环流出现“透明墙”效果. 一方面赤道臭氧难以传输至南极地区进行补充, 另一方面南极地区上空存在的臭氧消耗物质滞留导致臭氧消耗加速, 低补充和高消耗共同造成南极臭氧空洞. 全球臭氧分层观测为全球臭氧研究提供了新的视角, 将会促进人们对臭氧形成、传输以及消耗过程的研究.

**关键词:** 全球臭氧分层, 临边卫星, 加权乘代数算法, 波长配对

**PACS:** 42.79.Pw, 42.68.Ca, 93.85.Pq, 06.20.fb

**DOI:** 10.7498/aps.72.20221290

## 1 引言

1987 年《蒙特利尔议定书》签订后, 各国逐步禁止消耗臭氧层物质的生产与销售<sup>[1]</sup>, 自此平流层臭氧开始出现恢复迹象<sup>[2]</sup>. 目前, 臭氧正朝着 1980 年以前的水平缓慢恢复. 温度对化学反应速率的影响<sup>[3]</sup>, 平流层环流对温室气体浓度的响应都将影响臭氧的恢复<sup>[4,5]</sup>. 氯氟烃的排放<sup>[6–8]</sup>和含溴反应中间物也有着不可忽视的影响<sup>[9]</sup>. 在大气热力学、动力学和化学性质不断变化的背景下, 各类变化因素对臭氧垂直分布产生的影响需要通过临边卫星持续观测<sup>[10]</sup>.

卫星遥感技术传统上分为天底、掩星和临边三

种类型<sup>[11]</sup>. 天底观测卫星最先提出, 发展时间最长, 1978 年 10 月 24 日发射的 Nimbus 7 号上携带的臭氧总量绘图系统 (total ozone mapping spectrometer, TOMS), 用于观测全球臭氧分布, 并在 1981 年首次由卫星数据绘制了全球臭氧总量分布图<sup>[12]</sup>. 此后的臭氧监测一直关注全球范围大气臭氧总量的变化, 并在 1982 年冬季首次观测到南极臭氧洞<sup>[13]</sup>. 臭氧总量分布问题得到解决, 但臭氧垂直分布问题随之而来, 掩星观测由此应运而生. 1995 年欧洲航天局 (European Space Agency, ESA) 发射的欧洲遥感卫星-2 (European remote sensing-2, ERS-2) 搭载全球臭氧观测仪 (global ozone monitor instrument, GOME), 其 265—340 nm 的紫外波段可以进行臭氧垂直廓线的反演<sup>[14]</sup>. 臭氧的垂直

\* 国家重点研发计划 (批准号: 2019YFC0214702) 和国家自然科学基金 (批准号: 41705016) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: sifuqi@aiofm.ac.cn

分布问题得到初步解决,但是掩星观测技术只有在太阳或其他恒星穿过地平线时,才能观测到有效数据.这极大地限制了观测数量,得到的臭氧垂直分布图空间覆盖率非常有限.针对极为有限的空间分布问题,后续又提出临边观测.2002年ESA发射的环境卫星(environmental satellite, Envisat)上搭载大气扫描成像吸收光谱仪(scanning imaging absorption spectrometer for atmospheric cartography, SCIAMACHY)同时具有临边和对地观测模式<sup>[15]</sup>.由SCIAMACHY得到臭氧垂直分布很好地解决了掩星观测有限的空间分布问题,实现了全球范围内的臭氧垂直分布监测,为全球臭氧垂直分布研究带来新的思路.

临边观测技术由搭载在太阳中间层探测卫星(solar mesosphere explorer, SME)上的紫外光谱仪(the ultraviolet spectrometer, UVS)率先应用,并成功获得了臭氧剖面图<sup>[16]</sup>.目前应用临边观测技术的载荷除了有搭载在Envisat上的SCIAMACHY外,还包括搭载在Odin卫星上的光学光谱和红外成像系统(optical spectrograph and infrared imager system, OSIRIS)<sup>[17]</sup>、搭载在Meteor-3M卫星上的平流层气溶胶和气体实验-III(tratospheric aerosol and gas experiment-III, SAGE-III)<sup>[18]</sup>、搭载在国家极轨卫星(national polar-orbiting partnership, NPP)上的臭氧测绘与廓线探测-临边廓线(ozone mapping and profiler suite-limb profiler, OMPS-LP)<sup>[19]</sup>.目前中国尚未有在轨的临边观测卫星,由中国科学院安徽光学精密机械研究所在研的大气临边观测卫星将于近几年发射,将在国内首次获得全球临边观测数据<sup>[20,21]</sup>.

目前临边数据反演臭氧垂直廓线的方法主要有数值模拟和光谱分析两大类.1982年,Aruga和Heath<sup>[22]</sup>使用辐射差值的方法对平流层至中间层的臭氧垂直分布进行了临边反演的可行性分析.2006年,郭霞等<sup>[23]</sup>使用辐射差值的方法基于临边观测数据进行了平流层空气密度和臭氧反演的研究.2002年,Auvinen等<sup>[24]</sup>将改进剥洋葱法(modified onion-peeling approach, MOP)首次应用到OSIRIS临边观测数据中,使用低切高的透射光谱与平流层顶的参考光谱进行比值反演出多种臭氧的垂直廓线.2006年,Rohen等<sup>[25]</sup>使用SCIAMACHY的UV波段临边观测数据,将辐射正规化和最优估计(optimal estimation, OE)相结合成功反演出平流

层上层到中间层下层的臭氧垂直廓线.2011年,汪自军<sup>[26]</sup>采用断层扫描技术反演臭氧,并得到大气臭氧的数密度分布.目前学界已经提出了许多从临边卫星的散射辐射数据中反演平流层臭氧廓线的方法.本文研究的重点是将SCIAMACHY临边数据进行归一化和波长配对再结合加权乘代数方法,最终反演出平流层臭氧垂直数密度廓线<sup>[27]</sup>.

本文先对临边反演的原理做简要概述,再运用临边算法反演出全球臭氧分层图,最后分析全球臭氧的分布特点.

## 2 临边观测几何与原理

相较于传统的天底观测,临边观测在研究臭氧垂直精细结构方面具有巨大提升.在轨卫星水平方向观测获得大气反射的辐射数据,通过算法反演即可得到大气垂直结构廓线.反演时,由于大气的非线性,故而无法通过辐射直接求出线性解,即臭氧垂直廓线.这需要先建立正向辐射传输模型,通过不断调整先验廓线求解辐射值,再与观测值逼近,最后得到合理的臭氧垂直廓线.

### 2.1 临边观测几何

如图1中水平淡蓝线所示,临边观测卫星在水平方向上扫描分层大气的结构,同时记录大气的发射光谱和散射光谱.不同的扫描视线穿过不同的分层,对大气的扫描通常从地表高度开始,按照一定的角度向上逐次扫描,得到不同大气分层的数据.最后一次扫描指向深空以记录暗电流对数据的影响便于日后校正.沿着飞行方向,不同分层扫描出的切点构成一个切面.组成切面的切点不在同一地理位置上空,因此得到的切面不垂直于水平面.完成一次扫描后电机再次回到原始位置进行下一轮的扫描.图1中太阳天顶角(solar zenith angles, SZA)、太阳散射角(single scattering albedo, SSA)和SAA(solar azimuth angle, SAA)分别表示太阳天顶角、太阳散射角和太阳方位角.图1中非水平淡蓝线与淡蓝字表示临边观测的各种辐射源及其相关标注.临边观测到的辐射源主要包括单次大气散射光(single scatter, SS)、多次大气散射光(multiple scatter, MS)和地表散射光(albedo scatter, AS)三种.辐射来源中SS占据最大的比重,但是MS和AS的影响也不可忽略.

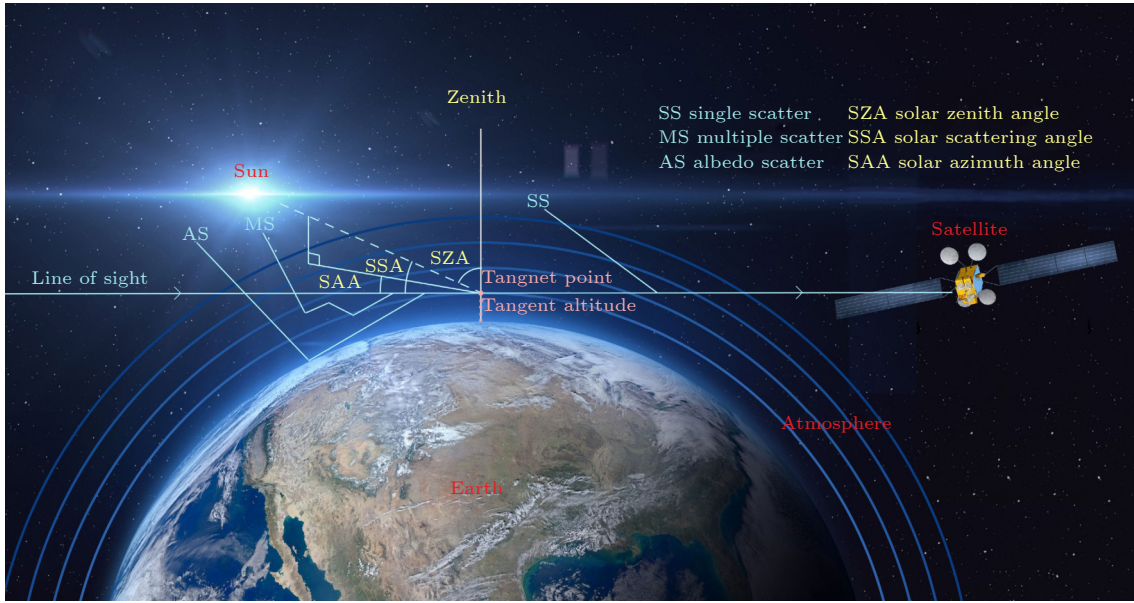


图 1 临边观测几何图

Fig. 1. Limb observation geometry.

## 2.2 临边观测原理

大气遥感逆问题大多是非线性的, 因此需要通过数值模拟逼近的方法解决非线性问题. 由于辐射传输问题的复杂性与非线性, 正向模型使用数值模拟计算是可行的, 但反之则不可行. 通过正向模拟与实际值比较, 修正预估参数, 多次修正之后即可得到近似准确的预估值<sup>[28]</sup>.

### 2.2.1 临边观测分层

图 2 中内圆表示地球, 外层的圆环代表大气层. 为了便于介绍, 这里将大气分成 3 层, 实际中按照卫星参数将分层控制在 10—20 层之间. 图 2 中水平蓝线表示卫星观测视线,  $i$ ,  $i-1$ ,  $i-2$  和  $i-3$  分别表示视线的 4 个交点. 命名交点  $i$  与交点  $i-1$  之间的大气为第  $i$  层大气, 以此类推, 共有第  $i$ ,  $i-1$  和  $i-2$  三层大气.  $r_e$  表示地球半径,  $t_h$  表示相对与海平面的高度,  $r_i$  表示第  $i$  层大气底端到地心的距离,  $r_{i-1}$  表示第  $i-1$  层大气底端到地心的距离,  $r_{i-2}$  表示第  $i-2$  层大气底端到地心的距离,  $r_{i-3}$  表示第  $i-3$  层大气底端到地心的距离.

视线依次穿过不同的大气分层, 但在每个分层的光程并不相同. 光程的长短会影响最终的结果, 因此需要计算出穿过每层大气的光程. 光程的长度计算如下:

$$S_i = 2 \left( \sqrt{r_{i-1}^2 - r_i^2} \right), \quad (1)$$

$$S_{i-1} = 2 \left( \sqrt{r_{i-2}^2 - r_i^2} - \sqrt{r_{i-1}^2 - r_i^2} \right), \quad (2)$$

$$S_{i-2} = 2 \left( \sqrt{r_{i-3}^2 - r_i^2} - \sqrt{r_{i-2}^2 - r_i^2} \right), \quad (3)$$

其中,  $S_i$  表示第  $i$  分层的光程;  $S_{i-1}$  表示第  $i-1$  分层的光程;  $S_{i-2}$  表示第  $i-2$  分层的光程.

再计算每个分层的光程占整个光程的比重时, 由于  $S_{i-2}$  后面的光程数值远小于前 3 个光程, 因此可以忽略占比, 仅考虑前 3 个的占比. 代入卫星参数计算权重占比如下:

$$W_i = \begin{cases} \frac{S_i}{S_i + S_{i-1} + S_{i-2}} \approx 0.6, & i > 2, \\ \frac{S_i}{S_i + S_{i-1}} \approx 0.75, & i = 2, \\ \frac{S_i}{S_i} = 1, & i = 1, \end{cases} \quad (4)$$

$$W_{i-1} = \begin{cases} \frac{S_{i-1}}{S_i + S_{i-1} + S_{i-2}} \approx 0.3, & i > 2, \\ \frac{S_{i-1}}{S_i + S_{i-1}} \approx 0.25, & i = 2, \end{cases} \quad (5)$$

$$W_{i-2} = \frac{S_{i-2}}{S_i + S_{i-1} + S_{i-2}} \approx 0.1, \quad i > 2, \quad (6)$$

其中  $W_i$  表示第  $i$  分层的光程占总光程的权重;  $W_{i-1}$  表示第  $i-1$  分层的光程占总光程的权重;  $W_{i-2}$  表示第  $i-2$  分层的光程占总光程的权重. 这里有两个特殊情况: 当反演的层数是最外层时,

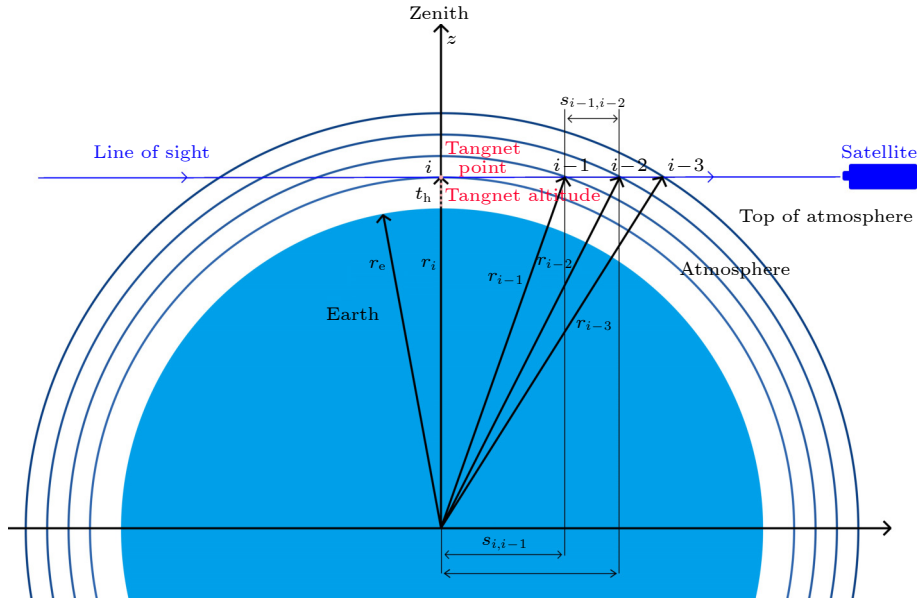


图 2 临边观测原理图

Fig. 2. Limb observation schematic.

$W_1 = 1$ ; 当反演的层数是外两层时,  $W_2 \approx 0.75$ ,  $W_1 \approx 0.25$ . 对于每个切点  $i$ , 权重因子  $W_i$  总和为 1. 现实中多层大气超过一定高度后臭氧含量非常稀薄, 无法得到有效数据, 因此有效层数的选择需要依靠臭氧先验廓线确定.

### 2.2.2 辐射归一化与波长配对

云高、气溶胶和仪器误差等干扰因素不可避免存在, 并且每次干扰因素的值是变量. 将每个高度临边辐射值归一化到参考高度处的辐射值则能很好地排除这些因素的干扰<sup>[29]</sup>. 归一化公式如下:

$$I_n(\lambda, h_i) = \frac{I(\lambda, h_i)}{I(\lambda, h_{\text{ref}})}, \quad (7)$$

其中,  $I(\lambda, h_i)$  表示波长  $\lambda$  在切线高度  $h_i$  处的临边辐射;  $I(\lambda, h_{\text{ref}})$  表示波长  $\lambda$  在参考切线高度  $h_{\text{ref}}$  处的临边辐射,  $h_{\text{ref}}$  取 40 km;  $I_n(\lambda, h_i)$  表示波长  $\lambda$  在切线高度  $h_i$  处的归一化临边辐射.

单个归一化辐射值直接反演的精度和灵敏度都不高, 而一个吸收峰和相邻的两个吸收谷进行配对运用则可以提高反演精度和灵敏度. 3 个波长配对公式如下:

$$y(h_i) = \ln\left(\frac{\sqrt{I_n(\lambda_1, h_i)I_n(\lambda_3, h_i)}}{I_n(\lambda_2, h_i)}\right), \quad (8)$$

其中,  $y(h_i)$  是将高度  $h_i$  处的 3 个波长配对后的观测向量. 这里  $\lambda_2$  表示选定的波峰 599.11 nm,  $\lambda_1$  和  $\lambda_3$  表示选定的波谷 532.16 nm 和 664.12 nm.

图 3 所示为观测向量与模型模拟向量. 第一次模拟向量  $y(h_i)$  是通过先验臭氧廓线得到, 与实测向量  $y(h_i)$  有较大的差距. 随着迭代次数的增加, 模拟向量  $y(h_i)$  与实测向量  $y(h_i)$  值逐渐接近. 迭代到第 9 次时二者基本一致, 迭代到第 14 次时误差更小. 理论上随着迭代次数的无限增加, 实测  $y(h_i)$  与模拟  $y(h_i)$  会无限接近. 迭代次数过少误差变大, 迭代次数过多计算时间变长, 迭代次数的选择下文将会介绍.

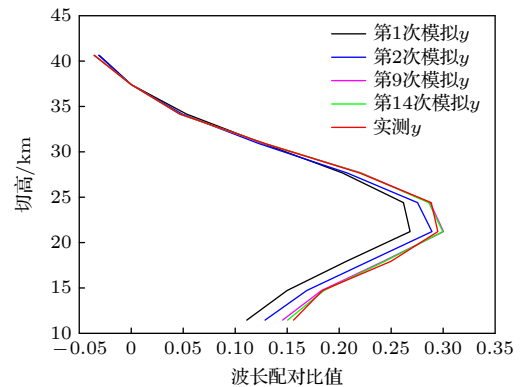


图 3 辐射归一化与波长配对图

Fig. 3. Radiance normalization and wavelength pairing diagram.

### 2.2.3 加权乘代数算法

将加权乘代数算法与大气辐射传输模型 SCIATRAN<sup>[18]</sup> 相结合即可从临边卫星数据反演平流层臭氧密度廓线. 加权乘代数算法使用多个观测

向量反演目标高度的臭氧廓线. 在每次迭代中, 用于更新每个高度的臭氧含量的权重因子是观测到的和建模的测量向量元素的比值<sup>[30]</sup>. 迭代方程如下:

$$x_{h_i}^{(n+1)} = \begin{cases} x_{h_i}^{(n)} \sum_{j=i-2}^i \left( \frac{y(h_j)_{\text{observation}}}{y(h_j)_{\text{model}}^{(n)}} W_j \right), & i > 2, \\ x_{h_i}^{(n)} \sum_{j=1}^2 \left( \frac{y(h_j)_{\text{observation}}}{y(h_j)_{\text{model}}^{(n)}} W_j \right), & i = 2, \\ x_{h_i}^{(n)} \sum_{j=1}^1 \left( \frac{y(h_j)_{\text{observation}}}{y(h_j)_{\text{model}}^{(n)}} W_j \right), & i = 1, \end{cases} \quad (9)$$

其中,  $x_{h_i}^{(n)}$  是第  $n$  次迭代后臭氧在  $h_i$  高度处的数密度;  $x_{h_i}^{(n+1)}$  是第  $n+1$  次迭代后臭氧在  $h_i$  高度处的数密度;  $y(h_j)_{\text{observation}}$  表示在  $h_i$  高度处臭氧观测向量;  $y(h_j)_{\text{model}}^{(n)}$  表示 SCIATRAN 模型在  $h_i$  高度处第  $n$  次迭代后臭氧模拟向量;  $W_j$  表示第  $j$  个视线对  $h_i$  高度处臭氧数密度的权重因子. 在每个高度  $h_i$ , 权重因子  $\sum W_j$  总和为 1. Roth 等<sup>[31]</sup> 发现本层和相邻两个外分层大气就可以反演高度  $h_i$  处的臭氧. 如图 2 所示, 内层大气不影响高度  $h_i$  处的臭氧反演, 相隔两层以外的外分层大气由于光程占总光程过小, 对高度  $h_i$  处的臭氧反演影响可以忽略.

图 4 是先验臭氧廓线与模拟臭氧廓线. 先验廓线在前几次迭代后改变迅速, 迭代到第 9 次与第 14 次后, 两条曲线差异不大, 并在 36 km 高度臭氧廓线出现精细结构. 随着迭代次数增加, 理论上臭氧廓线会无限接近真实值. 但是迭代次数增大, 反演计算成本会增高. 因此将反演终止条件设为观测向量  $y(h_j)_{\text{observation}}$  与模拟向量  $y(h_j)_{\text{model}}^{(n)}$  的相对误差低于 3% 即可, 这在保证精度的情况下也限制迭代次数.

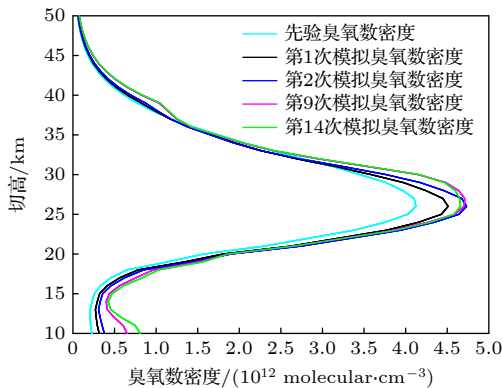


图 4 臭氧数密度图

Fig. 4. Ozone number density profile.

### 3 实测数据及反演结果

本节运用 SCIAMACHY 临边观测数据和 SCIATRAN 模型, 通过加权乘代数方法反演出全球臭氧对流层分布.

#### 3.1 SCIAMACHY 临边数据和 SCIATRAN 模型

2002 年 3 月, SCIAMACHY 发射至 799.8 km 高度的太阳同步极地轨道上. 卫星的倾角为  $98.55^\circ$ , 下降节点的赤道穿越时间大约是上午十点<sup>[18]</sup>. SCIAMACHY 是被动遥感光谱仪, 观测辐射分辨率为 16 位, 光谱分辨率的范围从 0.24—1.5 nm, 具体取决于光谱范围<sup>[19]</sup>. 除了天底和掩星测量模式外, SCIAMACHY 还包括临边测量模式. 其测量的切高从 0—100 km, 垂直分辨率约为 3 km. 临边模式下的瞬时视场在切点处水平宽度约为 110 km, 垂直高度约为 2.6 km<sup>[22]</sup>.

为了反演出需要的大气参数, 需要一个正向模型模拟预期的 SCIAMACHY 临边辐射数据, 并且正向模型模拟的临边数据能反映大气参数的变化. 该正向模型应能模拟 3 种主要的辐射源: SS, MS 和 AS(见图 1). 其中 SS 是主要因素, 但 MS 和 AS 不可忽视. 临边观测与天底观测不同, 由于通过大气层的视线路径长度较长, 因此在临边散射正向模型中还需要考虑地表曲率的影响. Pohl 等<sup>[32]</sup> 开发的球面多重散射辐射传输模型 SCIATRAN(the spherical multiple scattering radiative transfer model) 符合这些要求. 其覆盖 175—2400 nm 光谱范围, 并有足够的光谱分辨率, 因此被选作本研究的正向模型. SCIATRAN 包含微量气体的吸收特征, 并具有可选的输入参数. 其中包括中性大气、太阳光谱、吸收截面、次要气体的垂直廓线、气溶胶和地表反照率, 这些参数可用于反演计算.

#### 3.2 全球臭氧分布变化

反演的臭氧数据高度从 15—40 km, 再按照月份和海拔高度分类描绘出不同的全球臭氧分布图. 图 5—图 8 展示了 1 月、4 月、7 月、10 月在 15 km, 20 km, 30 km, 40 km 海拔高度的 16 张臭氧分布全球图. 总体来看, 这些图中都可以观察到的在南北极地区存在与极地环流相关的纬向不对称性, 在非极地区, 臭氧分布在纬向分布上较为均匀.

由于反演过程对太阳天顶角有限制, 高于  $95^\circ$  的数据无法准确反演. 因此在南北极地地区存在无数据区域, 并且这些区域大小随着季节改变而改变. 在南大西洋异常区, 臭氧分布图出现明显的异常高值. 这是因为在南大西洋上空地磁强度变弱, 阻挡太阳粒子的辐射带在这一地区明显向地面凹陷, 粒子更容易到达近地面<sup>[33]</sup>. 图 5—图 8 中南大西洋异常区域在 15 km 高度无明显异常, 在 20 km 高度异常开始显现, 在 30 km 与 40 km 高度异常明显.

1963 年, 由 Gordon Dobson 和 Alan Brewer 首次提出“布鲁尔-多布森环流”. 布鲁尔-多布森环流是指热带对流层空气受热上升到平流层, 然后热空气冷却下降的同时向极地方向移动的全球大气环流模式<sup>[34]</sup>. 如图 5 所示, 在 15 km 高度(平流层下层) 中高纬度地区臭氧浓度较全球其他区域较高, 但不明显, 并且纬向不均匀. 纬向不均匀的原因是受重力波冲破“极地环流”的封闭状态, 不明显的高值则受平流层布鲁尔-多布森环流影响将少量臭氧传输至此, 臭氧主要传输至 15 km 以上的高度. 如图 6 所示, 在 20 km(平流层中下层) 中高纬度地区臭氧浓度明显高于全球其他区域, 并且纬向均匀. 在此高度中高纬度区域臭氧主要受布鲁尔-多布森环流影响大量传输至此. 如图 7 所示,

在 30 km(平流层中层) 低纬度地区臭氧浓度明显高于全球其他区域, 并且纬向均匀. 在此高度低纬度区域臭氧大量生成, 并作为布鲁尔-多布森环流的源头向极地传输. 如图 8 所示, 在 40 km(平流层上层) 全球臭氧浓度趋于 0. 臭氧在 40 km 高度已经近乎消失. 从图 9 平流层臭氧分布图中可以发现, 中高纬度地区平流层臭氧总含量要高于赤道地区, 这是因为布鲁尔-多布森环流将臭氧从热带传输至两极, 直接影响平流层臭氧的分布和丰度, 导致热带的臭氧含量比极地低.

### 3.3 南极臭氧空洞年变化

南极地区臭氧 7 月开始减少, 在 8—11 月出现明显的空洞现象, 12 月空洞恢复. 其中 9 月和 10 月的臭氧空洞最为明显. 图 10 展示了 2011 年 8 月至 11 月南极地区臭氧在平流层的空洞现象. 由于不同月份太阳天顶角不同, 极地无数据地区的面积大小也各不相同. 六七月南极地区天顶角最大, 因此无数据地区最大. 但此时臭氧空洞尚未形成, 对观测影响不大.

南极空洞的形成与极地环流密切相关. 在南极极夜期间极地环流强盛, 在大陆架的边缘会形成极大风速区, 高度从近地面到平流层顶, 持续几个月.

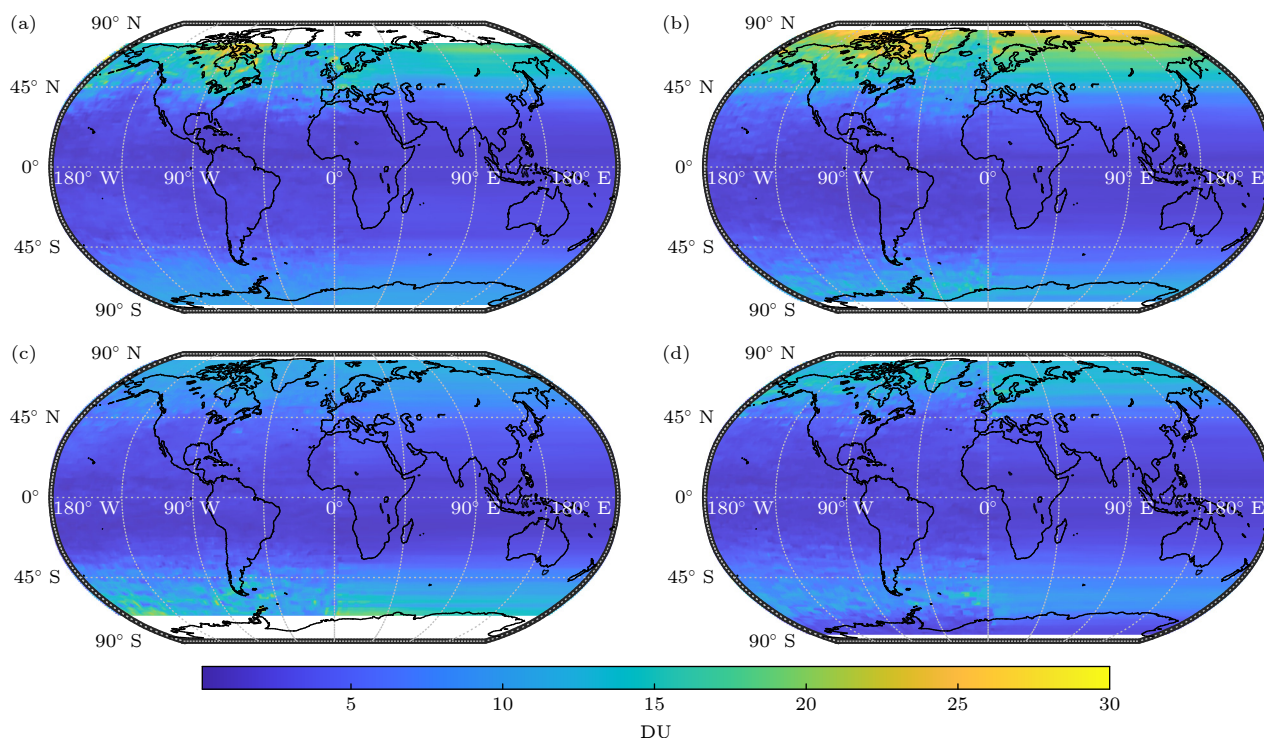


图 5 15 km 处 2011 年臭氧分布图 (a) 1 月; (b) 4 月; (c) 7 月; (d) 10 月

Fig. 5. Ozone distribution map at 15 km in 2011: (a) January; (b) April; (c) July; (d) October.

长时间高海拔大范围的极地环流将南极地区的大气封闭, 减缓了气体交换的进程, 臭氧难以补充. 因此在这段时间会形成极地臭氧低值区, 这是大气

封闭造成的自然现象. 人类活动造成的消耗臭氧物质在南极上空滞留, 加快了臭氧的消耗. 最终, 高消耗低补充造成南极臭氧空洞的形成.

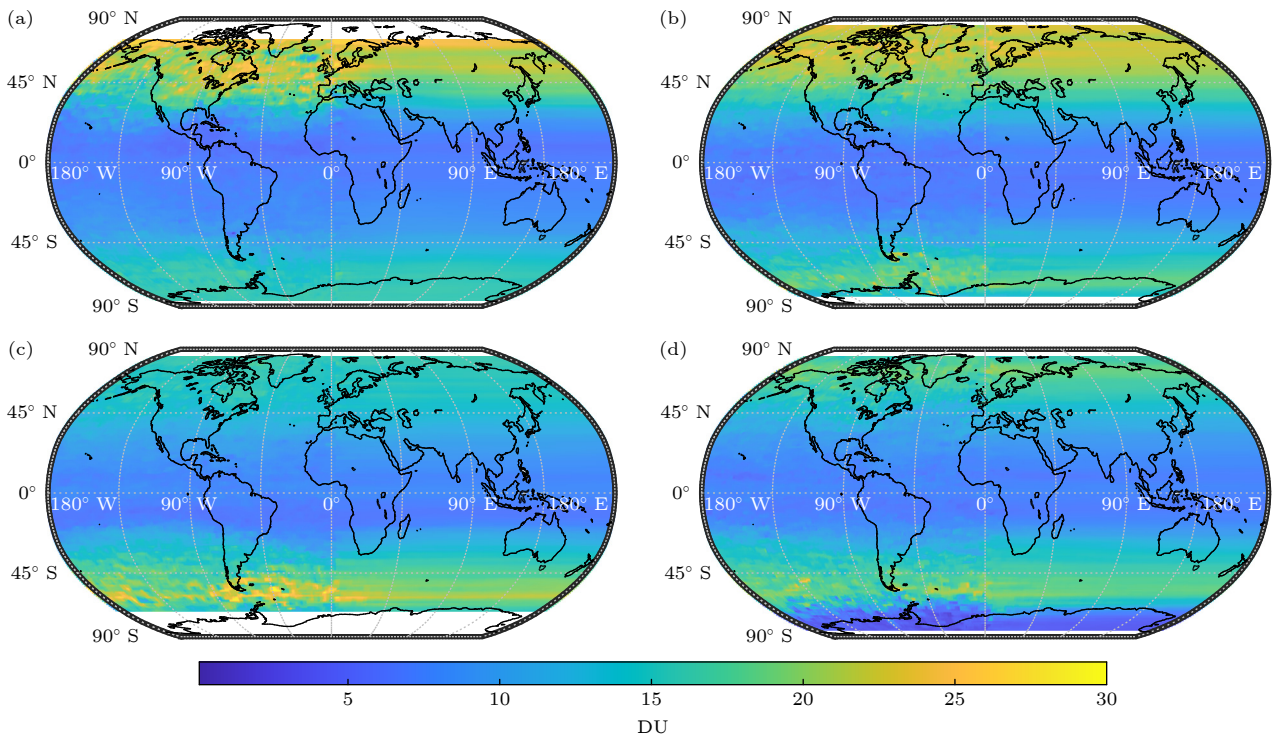


图 6 20 km 处 2011 年臭氧分布图 (a) 1 月; (b) 4 月; (c) 7 月; (d) 10 月

Fig. 6. Ozone distribution map at 20 km in 2011: (a) January; (b) April; (c) July; (d) October.

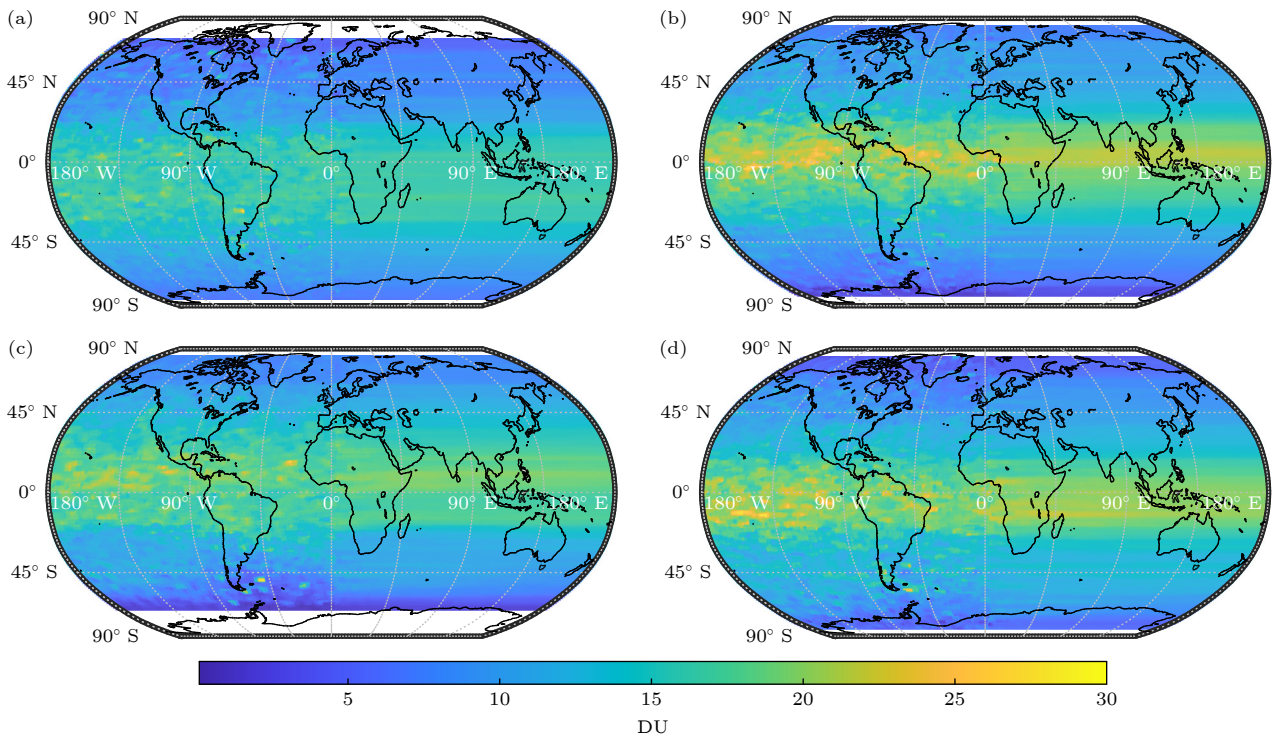


图 7 30 km 处 2011 年臭氧分布图 (a) 1 月; (b) 4 月; (c) 7 月; (d) 10 月

Fig. 7. Ozone distribution map at 30 km in 2011: (a) January; (b) April; (c) July; (d) October.

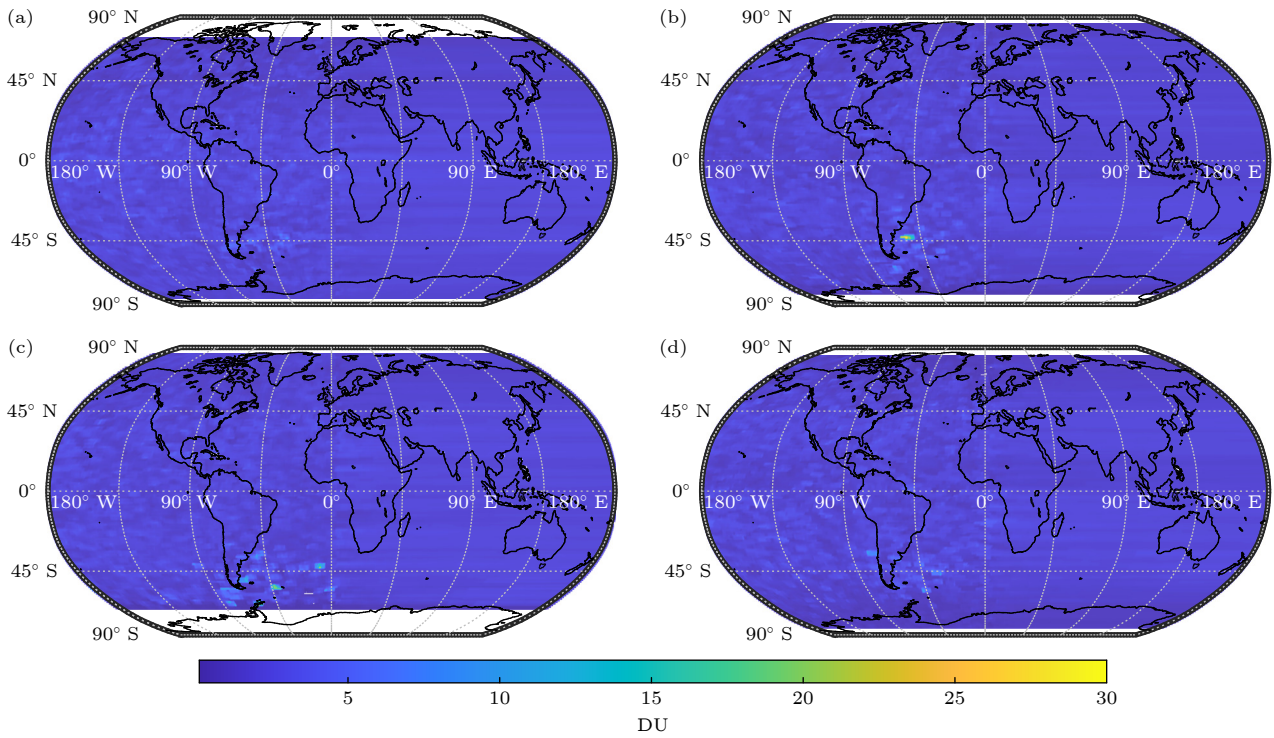


图 8 40 km 处 2011 年臭氧分布图 (a) 1 月; (b) 4 月; (c) 7 月; (d) 10 月  
 Fig. 8. Ozone distribution map at 40 km in 2011: (a) January; (b) April; (c) July; (d) October.

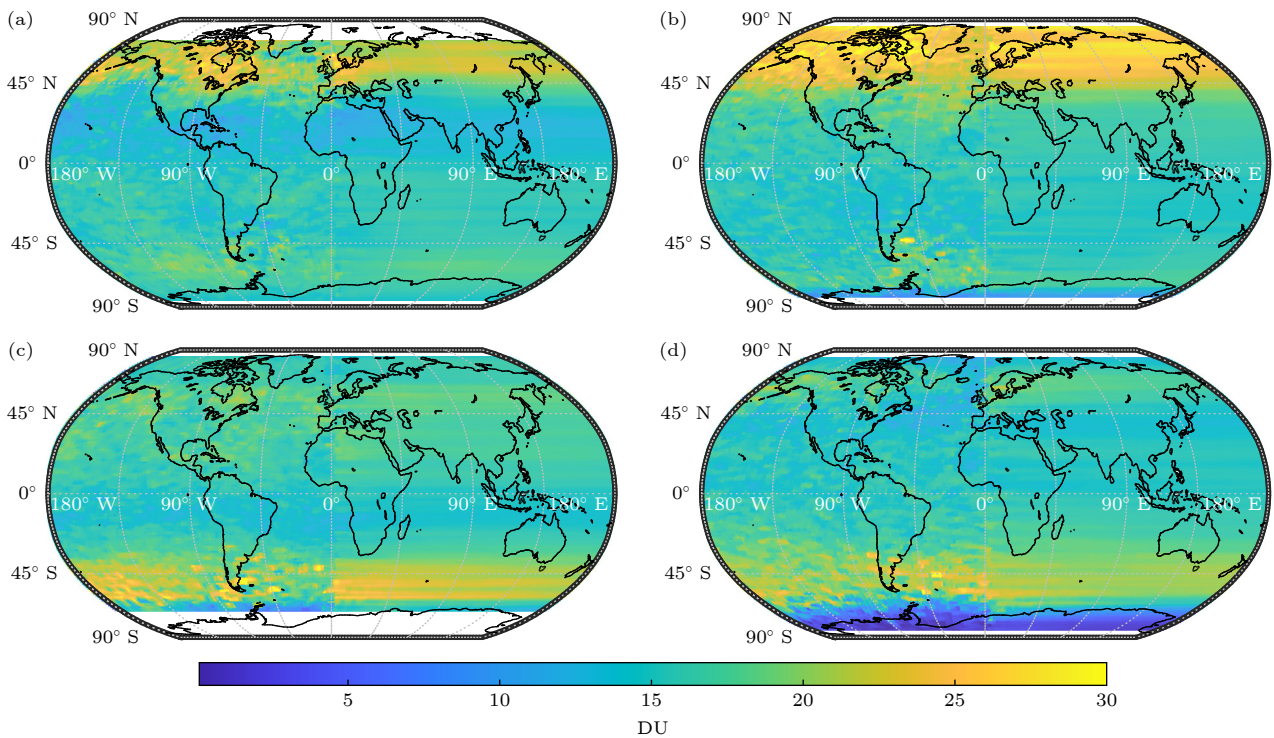


图 9 平流层 2011 年臭氧分布图 (a) 1 月; (b) 4 月; (c) 7 月; (d) 10 月  
 Fig. 9. Ozone distribution map in the stratosphere for 2011: (a) January; (b) April; (c) July; (d) October.

#### 4 讨论部分

卫星反演数据的有效性需要验证, 本文采用

9 月 9 日 10 点的第 49821 轨数据进行验证. 此时臭氧空洞已经形成, 这一轨数据也可以说明布鲁尔-多布森环流对全球臭氧传输的影响, 南半球的

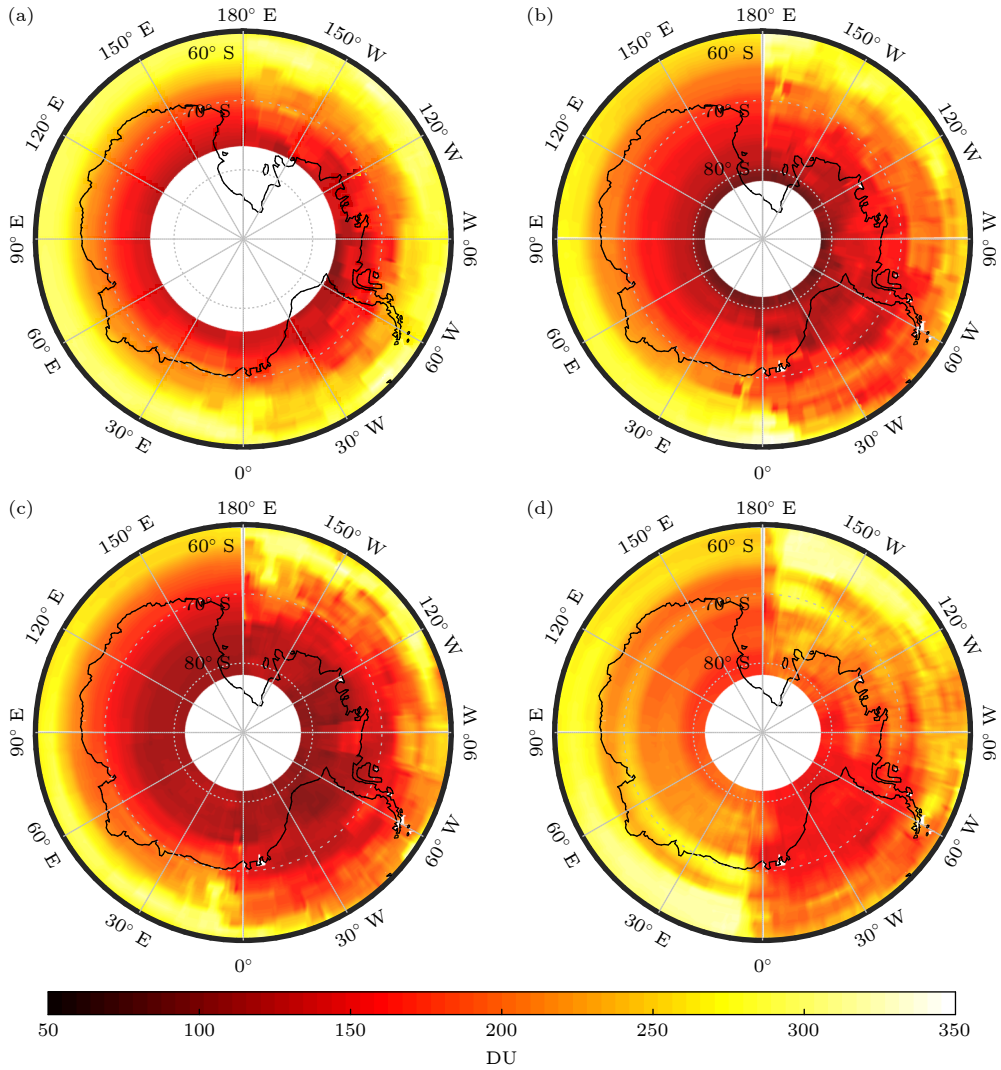


图 10 南极地区 2011 年平流层臭氧空洞图 (a) 8 月; (b) 9 月; (c) 10 月; (d) 11 月

Fig. 10. Antarctic stratospheric ozone hole map in 2011: (a) August; (b) September; (c) October; (d) November.

变化也可以说明南极极地环流对臭氧空洞造成的影响. 本文的臭氧数据与发布的臭氧产品在中低纬度一致, 在高纬度地区较为一致, 本文的臭氧数据总体有效性良好.

#### 4.1 臭氧经向传输

图 11 分别是 SCIAMACHY 臭氧产品和本文的臭氧数据, 总体趋势一致, 极大值与极小值区域一致. 图中横坐标负数表示南纬, 正数表示北纬. 在低纬度地区, 热带强紫外线大量形成臭氧, 同时上升气流将臭氧向上推至平流层中上层. 向上的热空气是布鲁尔-多布森环流的动力源, 在高空冷却后气流下降并向着极地方向移动, 到达中高纬度地区平流层中下层. 在气流上升和下降的过程中, 臭氧也随之从低纬度向中高纬度传输, 图 11 可以清

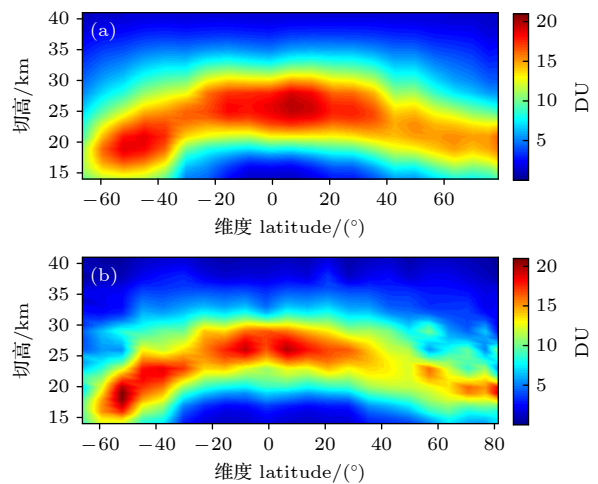


图 11 9 月 9 日 49821 轨臭氧结果 (a) SCIAMACHY V3.5; (b) 本文结果

Fig. 11. 49821 orbital ozone results on 9 September: (a) SCIAMACHY V3.5; (b) the results of this paper.

晰地看出全球臭氧传输过程. 南北半球总体呈现对称趋势, 但在高纬度地区南北极则出现明显地不同. 北半球高纬度地区臭氧浓度逐渐降低过程平缓, 无异常低值, 而南半球高纬度地区臭氧浓度在南极圈外积累形成一个局部极大值, 之后便突然形成极低值, 即臭氧空洞. 南极极地环流像是一堵“透明墙”, 把低纬度地区传输来的臭氧阻隔在南极圈外. 再有消耗臭氧物质在南极上空聚集, 高消耗低补充共同造成南极臭氧空洞.

### 4.2 数据误差分析

为了便于直观地展示和比较本文反演数据的有效性, 将 SCIMACHY 产品数据作为参考值, 进行本文反演数据与 SCIMACHY 产品数据的相关系数与绝对误差分析:

$$R(X, Y) = \frac{\text{Cov}(X, Y)}{\sqrt{\text{Var}(X)\text{Var}(Y)}}, \quad (10)$$

$$\text{BIAS} = X - Y, \quad (11)$$

其中,  $X$  表示本文反演数据,  $Y$  表示 SCIMACHY 产品数据,  $\text{Cov}(X, Y)$  表示  $X$  与  $Y$  的协方差,  $\text{Var}(X)$  与  $\text{Var}(Y)$  表示  $X$  与  $Y$  的方差,  $\text{BIAS}$  表示  $X$  与  $Y$  的绝对误差.

图 12 是 9 月 9 日 49821 轨数据相关系数和绝对误差图. 横坐标负数表示南纬, 正数表示北纬. 从相关系数分布来看, 在中低纬度本文反演数据与 SCIMACHY 产品数据大部分有着高达 0.99 的

相关性, 臭氧浓度的绝对误差均值在 1DU, 极少数区域误差在 3DU; 在南北半球的高纬度地区本文反演数据与 SCIMACHY 产品数据的相关性降低, 只有 0.93 左右, 臭氧浓度的绝对误差均值增至 3DU, 极少数区域误差增至 6DU. 太阳天顶角在两极地区变大, 只选取了小于  $95^\circ$  的辐射数据进行反演. 在超过  $95^\circ$  后, 辐射数据无法反演臭氧. 因此有理由认为极地的太阳天顶角过大是造成数据可靠性下降的主要因素.

### 5 结论

本文运用加权乘代数方法从 SCIMACHY 临边辐射数据反演出 2011 年全球臭氧分层图, 并验证具有良好的准确性. 通过对全球臭氧分层的观测与臭氧精细结构的研究, 观察到全球臭氧传输与布鲁尔-多布森环流的联系. 通过对南极地区臭氧的分层研究, 得到南极臭氧空洞、南极极地环流以及消耗臭氧物质三者之间的关系. 本文最终得出如下结论:

1) 将本文反演的臭氧数据与 SCIMACHY 产品进行误差分析, 二者在中低纬度地区有 0.99 的相关系数与平均 1DU 的绝对误差, 数据有效. 受太阳天定角过大的影响, 极点地区没有臭氧数据, 高纬度地区相关系数降至 0.93, 绝对误差均值增至 3DU, 但数据仍旧有效.

2) 全球臭氧传输从低纬度地区开始, 热带地区平流层生成大量臭氧, 随着热气流上升至平流层中上层, 冷却下降向着极地方向传输. 布鲁尔-多布森环流将臭氧从热带移向两极输送, 影响平流层臭氧的分布和丰度, 导致热带地区的臭氧浓度比极地地区少. 在不同高度的平流层, 臭氧含量全球分布各不相同. 在 15 km 和 20 km 处, 臭氧在高纬度地区聚集; 在 30 km 处, 臭氧在低纬度地区聚集.

3) 9 月与 10 月的南极臭氧空洞与极地环流密切相关, 南极极地环流造成的“透明墙”效果在这一时段最为明显, 热带地区的臭氧无法补充到南极, 再有消耗臭氧物质在南极上空滞留导致臭氧消耗加快. 低补充高消耗导致南极臭氧空洞的形成. 在 3 月与 4 月的北极地区, 由于大陆与海洋交替导致重力波变化, 北极极地环流封闭性被破坏, 无法产生“透明墙”效果, 因此没有形成臭氧空洞的条件.

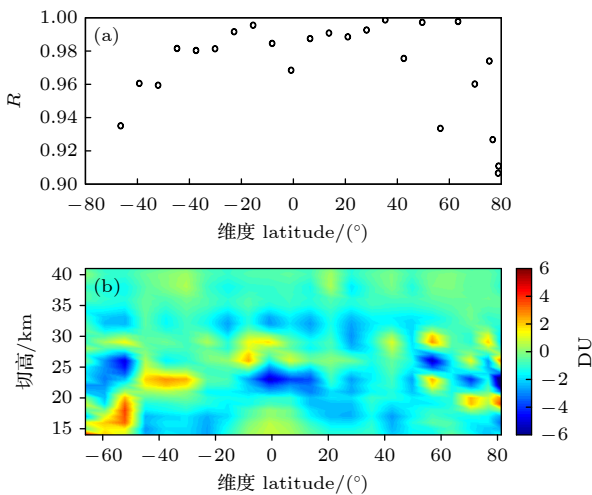


图 12 9 月 9 日 49821 轨误差分析 (a) 相关系数; (b) 绝对误差;

Fig. 12. Error analysis of 49821 orbital on 9 September: (a) Correlation coefficient; (b) absolute error.

本文重点关注全球臭氧分层观测并分析全球臭氧分层分布特点. 对臭氧的形成、传输和消耗全过程有了更清晰的认识. 受限于南极点附近的无数数据区域, 无法绘制全部地区的臭氧分布图, 未来需要改进算法或改进卫星观测方式得到完整的全球数据. 臭氧垂直分辨率也偏低, 只有 3 km, 未来硬件方面的升级将会提升垂直分辨率. 由于近地面辐射数据受地形、气溶胶和云层等因素干扰, 对流层臭氧反演问题有待解决. 全球臭氧变化是一个漫长的过程, 往往以年为单位, 因此也需要长时间多卫星联合观测. 在研的国产临边卫星技术参数指标与 SCIMACHY 相近, 本研究将为未来的国产临边卫星数据反演提供基础数据.

## 参考文献

- [1] Sofieva V F, Tamminen J, Kyrölä E, Mielonen T, Veeffkind P., Hassler B, Bodeker G E 2014 *Atmospheric Chem. Phys.* **14** 283
- [2] Liu Y Z, Deng X L, Li S, Gan Y, Li J, Long J Y 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 113301 (in Chinese) [刘玉柱, 邓绪兰, 李帅, 管跃, 李静, 龙金友, 张冰 2016 *物理学报* **65** 113301]
- [3] Zheng S, Deng S H 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4277 (in Chinese) [郑彬, 施春华 2007 *物理学报* **56** 4277]
- [4] Dhomse S S, Kinnison D, Chipperfield M P, Salawitch R J, Cionni I, Hegglin M I, Zeng G. 2018 *Atmospheric Chem. Phys.* **18** 8409
- [5] Meul S, Dameris M, Langematz U, Abalichin J, Kerschbaumer A, Kubin A, Oberländer H S 2016 *Geophys. Res. Lett.* **43** 2919
- [6] Fang X, Pyle J A, Chipperfield M P, Daniel J S, Park S, Prinn R G 2019 *Nat. Geosci.* **12** 592
- [7] Montzka S A, Dutton G S, Yu P, Ray E, Portmann R W, Daniel J S, Elkins J W 2018 *Nature* **557** 413
- [8] Zeng X Y, Liu C, Shan C G, Xie Y, Hu Q H, Sun Y W, Polyakov A V 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 200201 (in Chinese) [曾祥昱, 王薇, 刘诚, 单昌功, 谢宇, 胡启后, 孙友文, Polyakov A V 2021 *物理学报* **70** 200201]
- [9] Oman L D, Douglass A R, Salawitch R J, Canty T P, Ziemke J R, Manyin M 2016 *Geophys. Res. Lett.* **43** 9869
- [10] Wargan K, Kramarova N, Weir B, Pawson S, Davis S M 2020 *Geophys. Res. Atmos.* **125** e2019JD031892
- [11] Noel S, Bovensmann H, Wuttke M W, Burrows J P, Gottwald M, Krieg E, Muller C 2002 *Adv. Space Res.* **29** 1819
- [12] Stolarski R S, Bloomfield P, McPeters R D, Herman J R 1991 *Geophys. Res. Lett.* **18** 1015
- [13] Farman J C, Gardiner B G, Shanklin J D 1985 *Nature* **315** 207
- [14] Burrows J P, Weber M, Buchwitz M, Rozanov V, Ladstätter-Weißmayer A, Richter A, Perner D 1999 *J. Atmos. Sci.* **56** 151
- [15] Bovensmann H, Burrows J P, Buchwitz M, Frerick J, Noël S, Rozanov V V, Goede A P H 1999 *J. Atmos. Sci.* **56** 127
- [16] Thomas R J, Barth C A, Rusch D W, Sanders R W 1984 *J. Geophys. Res. Atmos.* **89** 9569
- [17] Degenstein D A, Bourassa A E, Lloyd N D, Llewellyn E J, McLinden C A, Piché L P, Roth C Z 2015 *Optical Payloads for Space Missions* (Beijing: World Book Publishing Company) p677
- [18] Kizer S, Roell M, Flittner D, Damadeo R, Leavor K, Roller C, Querel R 2022 *Continuing the Legacy of SAGE Data Products* Vienna, Austria, May 23–27, 2022, EGU22-13523
- [19] Taha G, Loughman R, Zhu T, Thomason L, Kar J, Rieger L, Bourassa A 2021 *Atmos. Meas. Tech.* **14** 1015
- [20] Liu J, Si F Q, Zhou H J, Zhao M J, Dou K, Wang Y, Liu W Q 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 214204 (in Chinese) [刘进, 司福祺, 周海金, 赵敏杰, 窦科, 王煜, 刘文清 2014 *物理学报* **63** 214204]
- [21] Zhao M J, Si F Q, Lu Y H, Wang S M, Jiang Y, Zhou H J, Liu W Q 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 249301 (in Chinese) [赵敏杰, 司福祺, 陆亦怀, 汪世美, 江宇, 周海金, 刘文清 2013 *物理学报* **62** 249301]
- [22] Aruga T, Heath D F 1982 *Appl. Opt.* **21** 3047
- [23] Guo X, Lu Y, Lü D 2004 *Prog. Mater. Sci.* **14** 504
- [24] Auvinen H, Oikarinen L, Kyrölä E 2002 *J. Geophys. Res.* **107** ACH
- [25] Rohen G J, Savigny C., Llewellyn E J, Kaiser J W, Eichmann K U, Bracher A, Burrows J P 2006 *Adv. Space Res.* **37** 2263
- [26] Wang Z J 2011 *Ph. D. Dissertation* (Jilin: Jilin University) (in Chinese) [汪自军 2011 博士学位论文 (吉林: 吉林大学)]
- [27] Wang Z, Chen S 2011 *Chin Geogr Sci* **21** 554
- [28] Zhu F, Si F Q, Zhan K, Dou K, Zhou H J *Acta Opt. Sin.* **41** 0401005 (in Chinese) [朱芳, 司福祺, 詹锴, 窦科, 周海金 2021 *光学学报* **41** 0401005]
- [29] Flittner D E, Bhartia P K, Herman B M 2000 *Geophys. Res. Lett.* **27** 2601
- [30] Degenstein D A, Bourassa A E, Roth C Z, Llewellyn E J 2009 *Atmospheric Chem. Phys.* **9** 6521
- [31] Roth C Z, Degenstein D A, Bourassa A E, Llewellyn E J 2007 *Can. J. Phys.* **85** 1225
- [32] Pohl C, Rozanov V V, Mei L, Burrows J P, Heygster G, Spreen G 2020 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **253** 107118
- [33] Kovar, P, Sommer, M 2021 *Remote Sens.* **13** 1274
- [34] Butchart N 2014 *Rev. Geophys.* **52** 157

# Analysis of vertical distribution differences of global stratospheric ozone based on weighted multiplication algebraic algorithm\*

Xu Zi-Qiang<sup>1)2)</sup> Yang Tai-Ping<sup>1)</sup> Qian Yuan-Yuan<sup>1)2)</sup> Si Fu-Qi<sup>1)†</sup>

1) (*Key Laboratory of Environment Optics and technology, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Hefei Institutes of Physical Science, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China*)

2) (*University of Science and Technology of China, Hefei, Anhui 230026, China*)

( Received 30 June 2022; revised manuscript received 27 September 2022 )

## Abstract

Global climate change and the formation of the Antarctic ozone hole have prompted people to pay attention to the changes in atmospheric ozone content. The global continuous observation of ozone is achieved by retrieving the global total column concentration from nadir satellite data. In this work, the weighted multiplication algebraic algorithm is combined with the radiative transfer model SCIATRAN, by using the 2011 Chappuis-Wulf band SCIAMACHY limb radiation data to retrieve the stratospheric ozone profile between 15- and 40 km altitude, solving the ozone global stratified observation problems. In the ozone global stratification map, the whole process of the global transmission of ozone formed in low latitude regions to high latitude regions is observed, which is directly related to the Brewer-Dobson circulation. During the most severe period of the Antarctic ozone hole from September to October, the Antarctic polar vortex has an obvious hindering effect on ozone transmission, and the polar vortex has a “transparent wall” effect. On the one hand, it is difficult to transfer ozone from the equatorial region to the Antarctic region for replenishment. On the other hand, the retention of ozone-depleting substances over the Antarctic region leads to the acceleration of ozone depletion, and the combination of low replenishment and high depletion contributes to the Antarctic ozone hole. Compared with the global total column concentration of ozone, the observation of global ozone stratification is very valuable for scientific research and will promote the detailed study of the whole process of ozone formation, transmission, and consumption.

**Keywords:** ozone global stratification, Limb satellites, weighted multiply algebra, wavelength pairing

**PACS:** 42.79.Pw, 42.68.Ca, 93.85.Pq, 06.20.fb

**DOI:** [10.7498/aps.72.20221290](https://doi.org/10.7498/aps.72.20221290)

\* Project supported by the National Key Research and Development Program of China (Grant No. 2019YFC0214702), and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 41705016 ).

† Corresponding author. E-mail: [sifuqi@aiofm.ac.cn](mailto:sifuqi@aiofm.ac.cn)



基于加权乘代数算法分析全球平流层臭氧垂直分布差异

徐自强 杨太平 钱圆圆 司福祺

**Analysis of vertical distribution differences of global stratospheric ozone based on weighted multiplication algebraic algorithm**

Xu Zi-Qiang Yang Tai-Ping Qian Yuan-Yuan Si Fu-Qi

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 014209 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20221290

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221290>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

基于加权 $K$ -阶传播数的节点重要性

Node importance based on the weighted  $K$ -order propagation number algorithm

物理学报. 2019, 68(12): 128901 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190087>

ENSO气温关联网络结构特征差异及成因分析

Analysis of structural differences and causes of ENSO temperature network

物理学报. 2021, 70(24): 249201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210825>

浅海环境中基于模态衰减规律加权的子空间检测方法

Weighted subspace detection method based on modal attenuation law in shallow water

物理学报. 2020, 69(16): 164301 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191948>

一种基于离散数据从局部到全局的网络重构算法

Discrete data based local-to-global network reconstruction algorithm

物理学报. 2021, 70(8): 088901 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201756>

基于指数加权-核在线序列极限学习机的混沌系统动态重构研究

Dynamic reconstruction of chaotic system based on exponential weighted online sequential extreme learning machine with kernel

物理学报. 2019, 68(10): 100503 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190156>

基于复杂网络动力学模型的无向加权网络节点重要性评估

Evaluation methods of node importance in undirected weighted networks based on complex network dynamics models

物理学报. 2018, 67(9): 098901 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172295>