

SCIAMACHY 临边散射探测的切高校正及敏感性研究

朱芳^{1,2}, 司福祺¹, 周海金¹, 赵敏杰¹, 窦科¹, 罗宇涵¹, 詹锴¹

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研究中心, 合肥 230031;

2. 中国科学技术大学, 合肥 230026

摘要: 针对临边紫外—可见光散射探测仪器在指向过程中由于失准等原因产生的切线高度偏移, 提出一种基于 UV 窄波段的切线高度反演 THRNB (Tangent Height Retrieved by UV Narrow Bands) 方法用于校正 SCIAMACHY 临边辐射切线高度。THRNB 方法通过分析多个紫外波段的临边辐射廓线形状和工程指向信息对切高修正的影响, 提出窄波段 (300—305 nm) 和新的工程切高 (43、46、49、52 和 55 km) 使测量矢量即保持较全灵敏度又减少维数。同时采用最优估计算法结合 SCIATRAN 模型, 从临边辐射反演切高偏差。实验结果表明 THRNB 法比 TRUE (Tangent height Retrieved by UV-B Exploitation) 方法进行切高校正的平均精度提高了 45%, 而算法的运行时间减少了 20%。与 ESA 提供的 SCIAMACHY L1B 切高信息相比, 切高校正的平均偏差小于 150 m, 说明该方法可以有效减少仪器指向信息错误引起的切高偏差。与 Bremen 大学提供的 SCIAMACHY v3.5 的臭氧廓线产品相比, 切高校正后的臭氧廓线反演平均误差在 13—38 km 范围内小于 10%; 而未校正的臭氧廓线反演误差在该范围内高达 22%, 说明切高校正能够提高后期大气痕量气体廓线反演的准确度。同时, 研究了大气压强、温度和臭氧廓线对切线高度反演的影响, 实验结果表明有效的臭氧和中性密度廓线是切线高度校正的关键。

关键词: 临边辐射, 切线高度, 校正, 膝点法, 臭氧廓线, 大气遥感

中图分类号: O433/P2

引用格式: 朱芳, 司福祺, 周海金, 赵敏杰, 窦科, 罗宇涵, 詹锴. 2023. SCIAMACHY 临边散射探测的切高校正及敏感性研究. 遥感学报, 27(10): 2418—2430

Zhu F, Si F Q, Zhou H J, Zhao M J, Dou K, Luo Y H and Zhan K. 2023. Tangent height correction and sensitivity studies from SCIAMACHY limb scattering detection. National Remote Sensing Bulletin, 27(10): 2418—2430 [DOI: 10.11834/jrs.20231649]

1 引言

基于紫外—可见光太阳辐射的卫星临边观测是研究地球大气化学成分的重要手段 (von Savigny 等, 2005a)。相较于天底和掩星模式, 临边观测在反演臭氧等痕量气体和气溶胶廓线上既具有较高的垂直分辨率又具有一定的全球覆盖率 (Degenstein 等, 2009)。具有临边探测技术的仪器最早是搭载在太阳中间层探测器 SME (Solar Mesosphere Explorer) 上用于臭氧探测的紫外光谱仪 UVS (Ultra Violet Spectrometer) 和用于二氧化氮

探测的可见光光谱仪 VLS (Visible Light Spectrometer) (Rusch 等, 1984)。其他采用临边观测技术的仪器还包括搭载在空间任务 STS-87 上的航天臭氧临边探测实验/临边臭氧反演实验 SOLSE/LORE (Shuttle Ozone Limb Sounding Experiment/Limb Ozone Retrieval Experiment) (McPeters 等, 2000)、搭载在 Odin 卫星上的光学光谱仪与红外成像系统 OSIRIS (Optical Spectrograph and InfraRed Imaging System) (Llewellyn 等, 2004)、搭载在 Meteor-3M 卫星上的平流层气溶胶和气体实验 SAGE III (Stratospheric Aerosol and Gas Experiment III) (Thomason 等, 1997; Rault,

收稿日期: 2021-11-02; 预印本: 2022-07-14

基金项目: 国家重点研发计划 (编号: 2019YFC0214702); 国家自然科学基金 (编号: 61905256); 中国科学院青年创新促进会 (编号: 2020439)

第一作者简介: 朱芳, 研究方向为紫外可见波段遥感痕量气体光学与光谱学监测。E-mail: zhufang160@163.com

通信作者简介: 司福祺, 研究方向为光信息处理、痕量气体光学与光谱学监测。E-mail: sifuqi@aiofm.ac.cn

2005)、搭载在环境卫星 ENVISAT 上的大气制图扫描成像吸收光谱仪 SCIAMACHY (Scanning Imaging Absorption Spectrometer for Atmospheric Chatography) (Bovensmann 等, 1999) 及搭载在美国极轨 SNPP (Suomi National Polar-Orbiting Partnership) 卫星上具有临边任务的臭氧制图和廓线仪 OMPS (Ozone Mapping and Profiler Suite) (Jaross 等, 2014)。

SCIAMACHY 于 2002 年 3 月搭载欧空局 ESA (European Space Agency) 环境卫星 ENVISAT 发射升空。该仪器在 214—2380 nm 的光谱范围内以临边、天底和掩星等 3 种方式工作, 其光谱分辨率为 0.22—1.48 nm (Wuttke 等, 2004; Kaiser 等, 2004)。临边散射观测的几何示意图如图 1 所示。SCIAMACHY 的临边观测扫描从地表到约 90 km 高度的大气散射太阳辐射, 垂直扫描间距约为 3.3 km。垂直指向即切线高度, 简称切高 TH (Tangent Height), 是临边观测产生痕量气体垂直信息的一个先决条件。错误的切线高度或指向信息会导致错误的气体廓线反演结果 (Flittner 等, 2000): 400 m 的 TH 误差会导致在某些海拔高度上反演的 O_3 浓度误差 $\geq 10\%$ (Wang 等, 2011; 朱芳等, 2021), 中间层臭氧浓度误差甚至高达 20% (Rohen 等, 2006)。切高误差也会导致反演的臭氧浓度峰值出现在不符合实际的海拔高度 (von Savigny 等, 2004)。

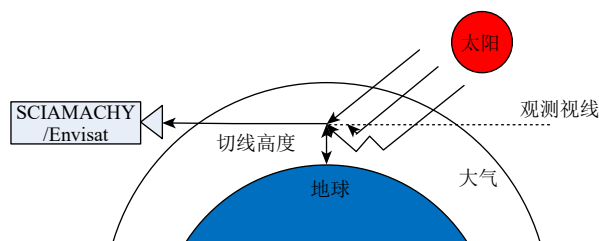


图1 临边观测几何示意图

Fig. 1 Observational geometry of limb-scattering

切高校正是基于临边散射反演的重要组成部分。Janz 等 (1996) 提出一种基于临边紫外辐射测量航天器姿态的仪器, 称为瑞利散射姿态传感器 RSAS (Rayleigh Scattering Attitude Sensor), 即利用 355 nm 波长的临边辐射在 20 km 以上的梯度推导仪器指向。随后, McPeters 等 (2000) 将 RSAS 方法应用于 345 nm 波长的 SOLSE/LORE 观测; Merkel 等 (2001) 将其应用于 215 和 236.5 nm 波长的 SNOE (Student Nitric Oxide Explorer) 观测; Sioris 等 (2003)

采用该方法分析 305 nm 附近的几个波长, 应用于 OSIRIS 的切线高度重建; Kaiser 等 (2004) 将 RSAS 方法进行了扩展, 提出了一种新的 TH 反演方法并将其命名为 TRUE (Tangent height Retrieval by UV-B Exploitation) 膝点法 (knee method); Rault (2005), Rault 和 Taha (2007) 使用改进的 RSAS 技术得出了 SAGE III 观测高度校准的平均标准偏差为 350 m; Taha 等 (2008) 将 350 nm 波长的 RSAS 切线高度算法分析 GOMOS (Global Ozone Monitoring by Occultation of Stars) 仪器指向, 与 GOMOS 已知的精确指向一致; Bourassa 等 (2018) 将 350 nm 临边辐射比率与 SASKTRAN (University of Saskatchewan radiative transfer model) 辐射传输模型计算的比率之间的差异最小化用来修正 OSIRIS 的指向漂移; Moy 等 (2017) 指出 RSAS 法受气溶胶干扰很大, 因此提出了在相对高度校准方面优于绝对高度校准的绝对辐射残差法 ARRM (Absolute Radiance Residual Method)。卫星遥感临边大气探测也是中国十分重视的大气探测模式, 其中临边切高指向校正是需要关注的首要问题, 目前国内在该方面的研究还很少, 相应算法研究也非常有限。

本文引用膝点法, 通过分析多个临边紫外辐射廓线的形状, 并研究 UV 波段和工程指向信息对切高修正的影响, 提出了一种基于少量 UV-B 波段和新工程指向的切线高度反演 THRUB (Tangent Height Retrieved by UV Narrow Bands) 方法, 并将其应用于 SCIAMACHY 临边探测; 通过与 ESA 提供的 SCIAMACHY L1B 切高信息相比较, 验证了该方法的有效性和稳定性; 其次, 全面分析了大气压强、温度和臭氧廓线的不确定性对 TH 反演的影响, 为后期反演臭氧廓线对气候学的依赖性提供了修正方向。最后结果表明, 校正后的切线高度能提供更准确和更高质量的臭氧廓线数据。

2 研究方法

根据 UV 波段临边探测的膝点特征建立正向辐射传输模型, 采用最优估计 OE (Optimal Estimation) 算法 (Rodgers, 1976, 2000) 对切高偏差进行迭代反演。其中, 为了减少对仪器效应、对流层云和地表反照率的敏感性, 对临边辐射廓线进行插值、采样以及正则化处理, 确定反演向量; 并基于牛顿迭代的最优估算方法进行切高偏差反演。切高反演流程图如图 2 所示。

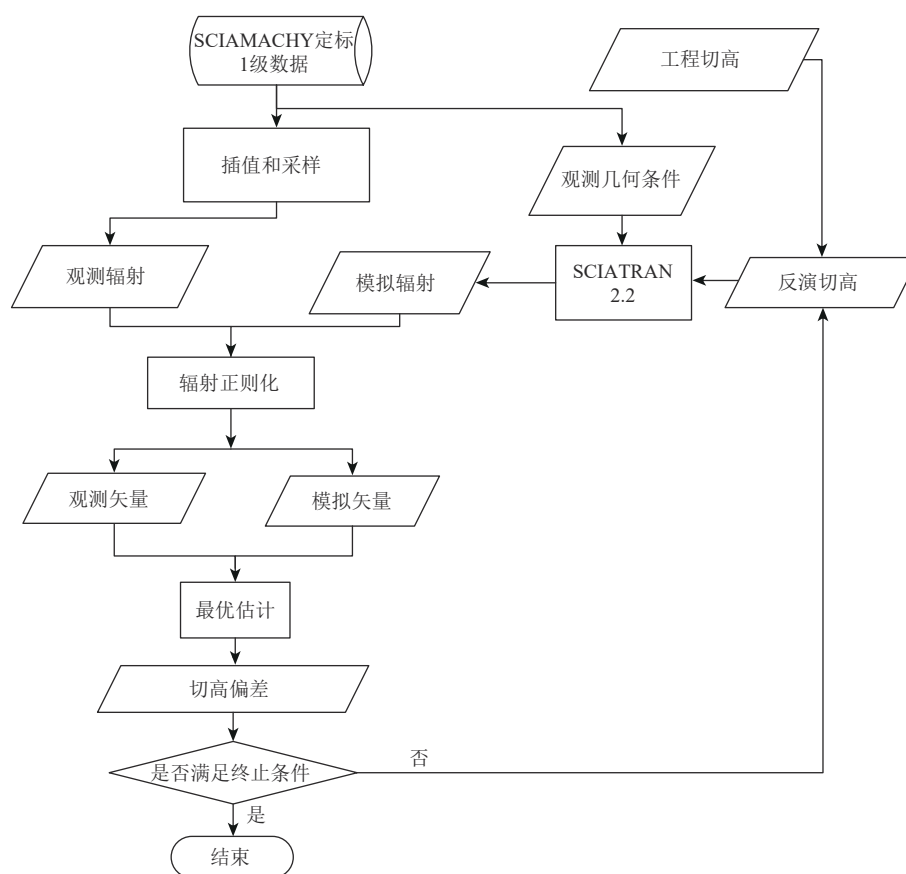


图2 临边辐射切高反演流程图

Fig. 2 Flowchart of the retrieval of tangent height from limb radiance

2.1 光学基础

临边卫星遥感记录沿地表上空不同高度的大气散射辐射, 具有一些独特的特性。由于大气中散射体的垂直分布, 临边辐射随着切线高度的增加而呈指数下降 (Flittner 等, 2000), 见图3。然而, 在UV光谱范围内, 这种下降仅限于平流层上部及以上高度。在较低的海拔高度, 辐射随着TH的下降保持不变甚至减少。这是由于大气中性密度随高度降低呈指数形式增加直到大气吸收引起的衰减足够大以至于抵消掉额外增加的散射。高度相关的瑞利散射强度和臭氧吸收的结合产生了一个最大的辐射强度。从图3中可以明显看出, 300 nm 和 305 nm 的辐射随海拔高度降低而指数增加, 但在海拔下降到一定高度时辐射不再增加, 甚至略有减少。因此, UV波段的临边辐射廓线在整个海拔高度上具有一个最大辐射值。这个最大值称为辐射廓线的膝点。

300—305 nm 的波长辐射膝点大约在 47 km 处。400 nm 及以上的波长辐射几乎没有膝点。膝点在

不同波长下的高度和形状几乎完全取决于平流层上层的中性密度和臭氧含量。在膝点以上, 瑞利散射和臭氧密度呈指数下降, 辐射强度随海拔高度的增加而减小。而膝点以下的臭氧吸收变大, 基本上阻止了大部分瑞利散射辐射到达卫星。

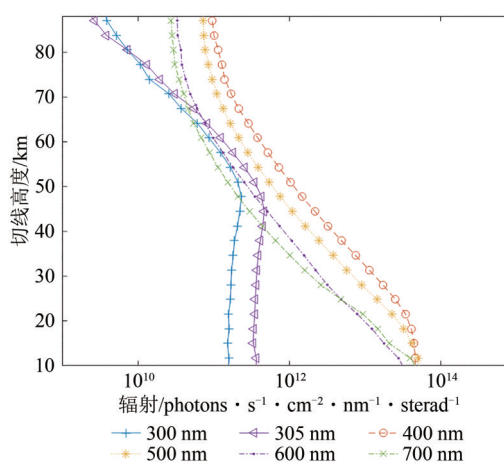


图3 SCIAMACHY 32980轨道观测到的300—700 nm的临边辐射廓线

Fig. 3 Limb radiance profiles between 300 nm and 700 nm wavelength observed by SCIAMACHY in orbit 32980

2.2 算法描述

目前切高校准的常用方法都是利用单一的波长从理论上计算膝点的高度而获得切线高度信息,比如RSAS技术就是350 nm波长处的临边辐射由于视线的较大光学厚度在近20 km海拔高度上具有“膝点”特征,而在30 km以上的临体辐射遵循指数梯度,这两个高度区域的辐射率与正向辐射传输模型计算的辐射率进行比较可以获得较准确的切线高度,请参见文献(Moy等, 2017)中图1。“膝点法”与之类似,将用于反演切线高度的临边辐射移到紫外波段(<310 nm),该波段的膝点特征处于高海拔地区,可以有效减少气溶胶的影响。本文研究UV波段中不同的波长范围对切高反演的影响,确定以300—305 nm的6个波长及其对应的辐射廓线的膝点高度、强度和形状来确定新的工程切高(43、46、49、52和55 km),结合SCIATRAN(the radiative transfer model for SCIAMACHY)模型,采用最优估计算法进行拟合来确定THs(Tangent Heights)。

在本研究中,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,将临边辐射正规化到参考切高上(Flittner等, 2000; 朱芳等, 2021),即归一化辐射 $I_N(\lambda, h_i)$ 是根据定标后的原始辐射数据 $I(\lambda, h_i)$ 在参考切高处的光谱计算得出的:

$$I_N(\lambda, h_i) = \frac{I(\lambda, h_i)}{I(\lambda, h_{\text{ref}})} \quad (1)$$

式中, λ 表示波长, h 表示切高, i 表示某切高处的索引,本文所选的参考切高 h_{ref} 为49 km,在波长辐射膝点的上方。因此,所有的多重辐射传输和仪器效应以及大部分太阳辐照度结构都得到了补偿(Kaiser等, 2004)。

进行大气遥感的光谱探测时,需要合适的光谱分辨率和光谱覆盖范围以及探测光谱信噪比等,才能满足廓线反演的应用需求(苗晶等, 2021)。本文使用SCIAMACHY通道1(214—314 nm)中第4组(Cluster)光谱(282—313.9 nm)测量值,此光谱区间的光谱分辨率约为0.11 nm。因此对归一化辐射 $I_N(\lambda, h_i)$ 进行线性插值,并在300, ..., 305 nm等6个波长处采样。用于反演算法分析的反演向量 $\mathbf{y}$ 由5个工程切线高度处的归一化辐射度样本组成:

$$y_{j,i} = I_N(\lambda_j, h_i), j = 1, \dots, 6; i = 1, \dots, 5 \quad (2)$$

波长和切线高度的选择使得测量矢量维数最小化,同时保持切线高度较全的灵敏度。

由于从临边观测数据中进行参数反演是一个不适定问题,因此必须使用正则化方法,即通过一个先验值和适当的协方差矩阵来实现。本文通过反演切高的参数化引入先验知识。切线高度序列 h_i 由偏移量 Δh 进行参数化:

$$h_i = h_i^{\text{eng}} + \Delta h \quad (3)$$

式中, h_i 表示模拟的切线高度, h_i^{eng} 表示工程的切线高度。因此,整个TH序列在 Δh 的反演过程中垂直移动。本方法在固定臭氧数密度廓线的情况下,只有 Δh 被拟合,由反演算法确定的状态向量 $\mathbf{x}$ 定义为

$$\mathbf{x} = (\Delta h) \quad (4)$$

对于非线性反演问题,基于牛顿迭代的最优估计的解如下:

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_0 + \mathbf{S}_{x_0} \mathbf{K}_n^T (\mathbf{K}_n \mathbf{S}_{x_0} \mathbf{K}_n^T + \mathbf{S}_y)^{-1} ((\mathbf{y} - \mathbf{y}_n) - \mathbf{K}_n(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_n)) \quad (5)$$

式(5)在临边卫星遥感切高反演中, $\mathbf{x}_0$ 表示需要反演的切线高度误差 Δh 的初始值。 $\mathbf{x}_n$ 是切线高度误差 Δh 第 n 次迭代估计值, $\mathbf{y}$ 表示卫星观测临边辐射反演向量, $\mathbf{y}_n$ 是切线高度误差为 $\mathbf{x}_n$ 时利用正向辐射传输模型模拟的临边辐射反演向量, $\mathbf{S}_{x_0}$ 为初始 $\mathbf{x}_0$ 的协方差矩阵, $\mathbf{S}_y$ 为观测值的协方差矩阵, $\mathbf{K}$ 是权函数矩阵。

解的协方差矩阵为

$$\hat{\mathbf{S}} = (\mathbf{S}_{x_0}^{-1} + \hat{\mathbf{K}}^T \mathbf{S}_y^{-1} \hat{\mathbf{K}})^{-1} \quad (6)$$

当 $n \rightarrow \infty$ 时, $\mathbf{x}_n \rightarrow \hat{\mathbf{x}}$,式中 $\hat{\mathbf{K}}$ 是在 $\hat{\mathbf{x}}$ 处估计的 $\mathbf{K}$ 值。

权函数矩阵 $\mathbf{K}$ 和模拟的反演向量 $\mathbf{y}_n$ 均由球形模式多重散射正向辐射传输模型SCIATRAN(Rozanov等, 2005)计算。权函数定义为波长300, ..., 305 nm在切线高度为43、46、49、52和55 km处的辐射变化。以扰动量为1%,基于SCIATRAN模型,模拟得到6个波长在5个切线高度上的临边散射辐射变化,即临边散射辐射对切线高度的敏感性。

$$\mathbf{K} = \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}} \approx \frac{\Delta \mathbf{y}}{\Delta \mathbf{x}} \quad (7)$$

式中, $\mathbf{y}$ 表示卫星观测临边辐射反演向量, $\mathbf{x}$ 表示

其切线高度。

2.3 正向辐射传输模型

利用 Rozanov 等 (2005) 针对 SCIAMACHY 仪器开发的临边辐射传输模型 SCIATRAN 2.2 作为本文模拟辐射的计算工具。大气压强和温度廓线取自加拿大气象局 McLinden 气候学廓线。区域和月平均臭氧气候学作为模型的臭氧廓线输入。使用的臭氧横截面来自 Burrows 等 (1999a), 采用多重散射模式, 地表反射率设定为 0.3, 选择 LOWTRAN 气溶胶廓线, 气溶胶相函数为 Henyey-Greenstein, 不考虑云。辐射传输计算模拟了球形、水平分层、无云且具有折射的大气中的两级散射和表面反射弯曲。因此, 所有射线路径包括在内的模型完全线性化, 即所有大气参数的加权函数都是准解析计算的。模型所需的输入参数包括观测几何结构, 即切线高度、太阳天顶角和相对方位角。

3 结果分析与讨论

3.1 不同波段与工程切高的分析

SCIAMACHY 临边探测的紫外波段可达 214 nm, 由于吸收 O₃ 的 Hartley 带 (200—310 nm) 而导致的 UV 临边辐射廓线的最大值 (即“膝点”) 为切高校正提供了合适的范围。而中波紫外波段简称 UVB, 波长 280—320 nm (SCIAMACHY 通道 1 的第 4 组数据也处于该波段), 该波段的临边辐射廓线既具有明显的膝点特征又能减少气溶胶影响。然而该波段中并非所有的波长都适合切高校正, 本文对 285—305 nm、295—305 nm 和 300—310 nm 等几种波段在相同实验条件下进行切高偏差反演, 发现反演结果与 SCIAMACHY L1B 产品信息偏差比较大, 并不适合作为切高反演的条件。为了验证本文所选的 300—305 nm 波段适合用于切高校正, 对其与文献 (Kaiser 等, 2004) 中所选的波段分别进行切高反演实验, 结果表明本文所选的波段运算时间短且能达到较好的精度。另考虑工程切高在膝点附近获取, 因此本文把工程切高确定在 43、46、49、52 和 55 km。4 种不同波段和工程切高的详细情况见表 1。选取 SCIAMACHY 32980—32992 轨道为实验对象。由于臭氧柱浓度的水平不均匀性无法在辐射传输模型中表现, 因此本文 TH 反演仅限于 30°S 以北的纬度。

表 1 4 种不同波段和工程切高的情况

Table 1 Four cases in different wave bands and engineering tangent heights

参数	序号			
	1	2	3	4
波长/nm	300, ..., 305	300, ..., 305	295, ..., 305	295, ..., 305
工程切高/km	43, ..., 55	37, ..., 49	43, ..., 55	37, ..., 49

图 4 为 32980 轨道的 4 种 TH 反演结果, 其他轨道均有类似结果。从结果可知, 同一轨道在这 4 种情况下反演切高时结果具有类似的变化趋势, 不同的是变化程度不一致。由图 4 可知, 第 1 种和第 3 种反演结果接近, 两者具有相同的工程切高, 不同的波段, 说明本文提出的窄波段可达到与较长波段反演相似的效果; 然而本文的波长只有 6 个 (第 1 种), 与第 3 种情况相比减少了近一半。第 2 种和第 4 种反演结果接近也说明类似的效果。第 1 种和第 2 种情况具有相同的波段, 不同的工程切高, 两者的 TH 偏差相差比较大是因为处于不同的切线高度, 从下表 2 可知这两种情况的精度差异比较小; 总的来说, 第 1 种组合用于 TH 反演效果最好。

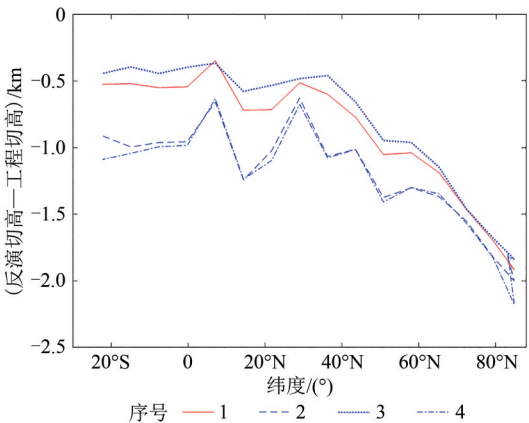


图 4 4 种情况的 TH 反演结果

Fig. 4 TH retrieved results in four cases

为了进一步验证这 4 种情况的切高反演效果, 将所有的 TH 反演结果与 ESA 提供的与之对应的 SCIAMACHY L1B 切高产品进行比较, 得到切高校正的精度:

$$Acc = |TH_{\text{retrieved}} - TH_{\text{product}}| \tag{8}$$

平均值、标准差和均方根的计算结果见表 2。由表 2 可知, 本文提出的新波段和新工程切高组合 (第 1 种) 反演的切高精度平均值、标准差和均方根较其他 3 种情况的好, 第 3 种次之, 第 2 种误差

最大。进行10次迭代后, 每条临边扫描序列所需运算的平均时间也是第1种较少。

表2 4种情况的精度平均值、标准差和均方根以及运算时间

4种情况	平均值	标准差	均方根	运算时间/s
1	0.1087	0.0827	0.1351	179.8
2	0.2157	0.1790	0.2769	180.1
3	0.1507	0.1018	0.1801	225.5
4	0.2000	0.1674	0.2576	225.8

3.2 敏感性分析

指向信息的反演误差很大程度上取决于痕量气体廓线的形状, 并且在一定程度上因气体不同而不同 (von Savigny 等, 2005b)。而各种痕量气体吸收截面受温度和压强的影响, 因此仪器指向的反演误差来源主要是大气压强、温度和臭氧廓线。本文讨

论了在不同缩放因子下这些量的TH反演灵敏度, 这里的实验对象为SCIAMACHY 32980轨道。

采用SCIATRAN软件包提供的McLinden气候学廓线文件, 这些廓线文件按月份和纬度分成多个包含温度、压强和 O_3 等气体体积混合比的文件。在保持其他成分不变的情况下, 将压强和温度数值分别按系数0.8、0.95、1.05和1.2进行缩放, 并将反演结果与标准反演结果进行了比较。结果表明, 压强和温度廓线的变化对TH反演具有较大影响, 见图5(a)。为了研究臭氧廓线对TH反演的影响, 将比例系数按照0.5、0.8、0.95、1.05、1.2和2的情况进行了从低到高臭氧浓度的TH反演, 并将反演结果与标准反演结果进行了比较。结果表明比例因子为0.5和2时, 反演的TH差异可达3 km。比例因子为0.8和1.2时产生的差异不高于1 km, 见图5(b)。

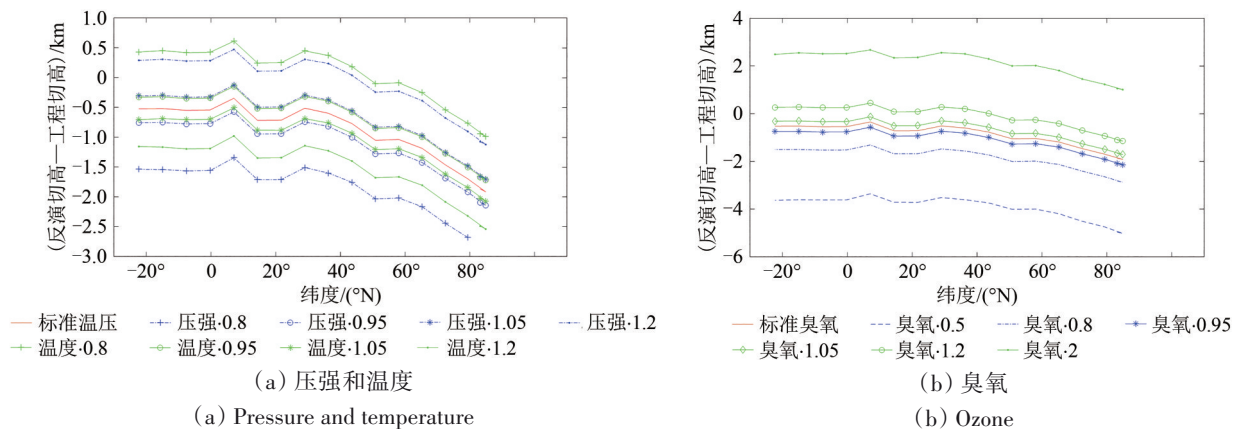


图5 不同系数下的压强、温度和臭氧廓线对TH反演的影响

Fig. 5 Effects of pressure, temperature and ozone profiles under different coefficients on TH retrieved

从图5可知, 反演的TH偏差在不同比例系数的廓线下具有类似的变化趋势; 当压强廓线由小变大时, 反演的TH偏差由小(负)变大(正); 当温度廓线由小变大时, 反演的TH偏差变化趋势与压强的相反; 而臭氧廓线由小变大时, 则与压强的相同。

另一项实验是将同一月份不同纬度的压强(温度、臭氧)值作为压强(温度、臭氧)廓线, 以25°N附近的临边扫描辐射为例进行TH反演, 并将反演结果与标准反演结果(-0.7147 km)进行比较, 见图6。不同纬度的压强、温度和臭氧廓线具有随机性, 因此反演结果也具有不固定性, 反演的TH差异最大可达700 m(85°N压强廓线贡献)。从图6可知, 30°N以北的廓线对反演结果影响比较

大; 而30°N以南的结果比较稳定, 这是因为30°N以南的压强、温度和臭氧廓线差异比较小。其中压强和臭氧廓线的变化对反演结果的影响比温度廓线的大。

为了更加明确地表现大气压强、温度和臭氧廓线对反演结果的影响, 将标准廓线输入的反演结果与其他非标准廓线的进行比较, 并且进行双尾 t 检验。 p 值为双尾 t 检验的结果, 当 $p>0.05$ 时, 表示标准与非标准无显著差异; 当 $0.01<p<0.05$ 时, 表示两者有显著差异; 当 $p>0.01$ 时, 表示差异特别大。特别说明, 均值差异为差异绝对值的均值。由表3可知, 压强、温度或臭氧廓线与对应标准廓线的差异在 $\pm 5\%$ 以内, 则它们对反演结果影响较小, TH反演差异为200 m左右; 而比例因子为0.8时,

3种廓线产生的平均TH差异达到近1 km；比例因子为1.2时，压强廓线的影响导致平均TH差异约为800 m，温度廓线的影响导致的平均TH差异只有600 m，臭氧廓线的介于两者之间；不同纬度的廓线对反演结果的影响，温度廓线最小，平均TH差异不到100 m，压强次之，臭氧最大。

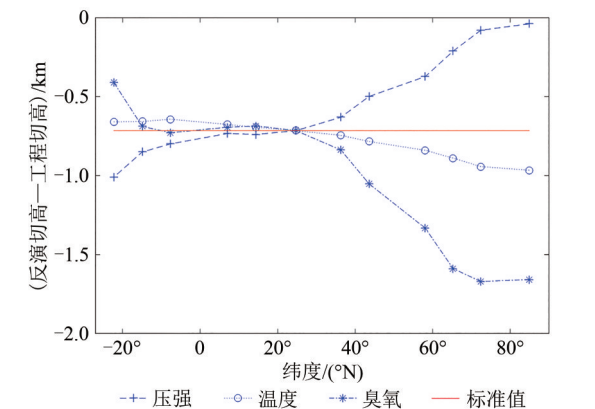


图6 不同纬度的压强、温度和臭氧廓线对TH反演的影响
Fig. 6 Effects of pressure, temperature and ozone profiles on TH retrieved at different latitudes

表3 标准与非标准的平均差异、最大差异、最小差异和p值
Table 3 Mean difference, maximum difference and minimum difference, and p value between standard and non-standard

	平均差异	最大差异	最小差异	p 值
压强·0.8	0.9721	1.0221	-0.7937	0.0000
压强·0.95	0.2283	0.2368	0.2215	0.2015
压强·1.05	0.2173	-0.2062	-0.2220	0.2256
压强·1.2	0.8122	-0.7859	-0.8342	0.0001
温度·0.8	0.9512	-0.9219	-0.9720	0.0000
温度·0.95	0.1967	-0.1897	-0.2030	0.2708
温度·1.05	0.1607	0.1809	0.1471	0.3637
温度·1.2	0.6302	0.6479	0.6180	0.0010
臭氧·0.5	3.0320	3.1056	2.9576	0.0000
臭氧·0.8	0.9611	0.9837	0.9424	0.0000
臭氧·0.95	0.2202	0.2277	0.2139	0.2173
臭氧·1.05	0.2100	-0.2000	-0.2156	0.2410
臭氧·1.2	0.7852	-0.7594	-0.8086	0.0001
臭氧·2	3.0239	-2.9158	-3.1058	0.0000
不同纬度的压强	0.2514	0.2947	-0.6766	—
不同纬度的温度	0.0935	0.2510	-0.0721	—
不同纬度的臭氧	0.3540	0.3540	-0.3055	—

注：—表示没有相应数据。

3.3 切高反演

本文将THRUNB法应用于SCIAMACHY在2008年6月21日期间获得的轨道32980—32992临边观测。

图7中绘制了反演的TH偏移量 Δh ，其是纬度的函数。由于臭氧柱总量在沿着轨道和垂直轨道方向的变化梯度都很陡（Burrows等，1999b），而水平不均匀性在SCIATRAN辐射传输模型中无法实现。因此，反演的TH偏移量 Δh 在南半球的中高纬度地区（即30°S以南）具有不稳定性。本文反演的TH仅限于能得到稳定结果的纬度范围即30°S到80°N。实验结果表明在32980—32992轨道上，反演的TH偏移量 Δh 相对稳定， Δh 的平滑性表明了切高反演算法和工程信息的稳定性。TH偏移具有纬度性，总体曲线随着卫星由南向北运行呈减少趋势，并且显示从一个轨道到另一个轨道的漂移。由于测量几何结构在不同轨道之间仅略有不同，漂移归因于热带和中纬度臭氧场的纬向变化，或归因于工程切线高度的误差。

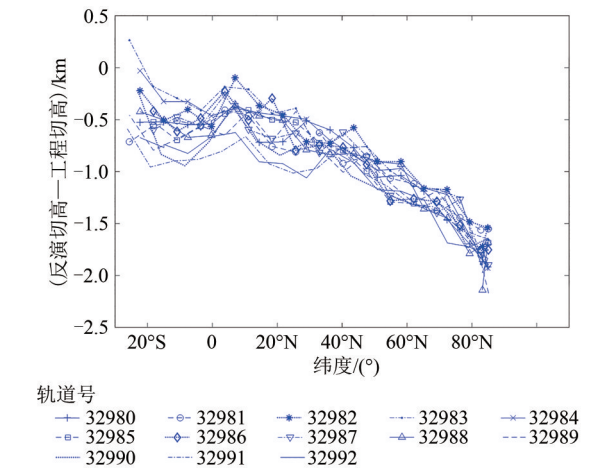


图7 32980—32992轨道反演切线高度偏移 Δh
Fig. 7 32980—32992 orbit inversion tangent height offset Δh

在固定臭氧浓度模式下进行切线高度反演，对每条轨道反演的所有切高偏移量 Δh 的平均值、标准差以及反演精度的平均值、标准差和均方根进行分析（表4）。由表4可知，虽然每轨反演的TH偏移量之间都存在几十米的漂移，但是整体上每轨的平均TH偏移量约为 -0.9 ± 0.5 km；每轨反演的TH精度约为 150 ± 100 m。

3.4 臭氧廓线的反演

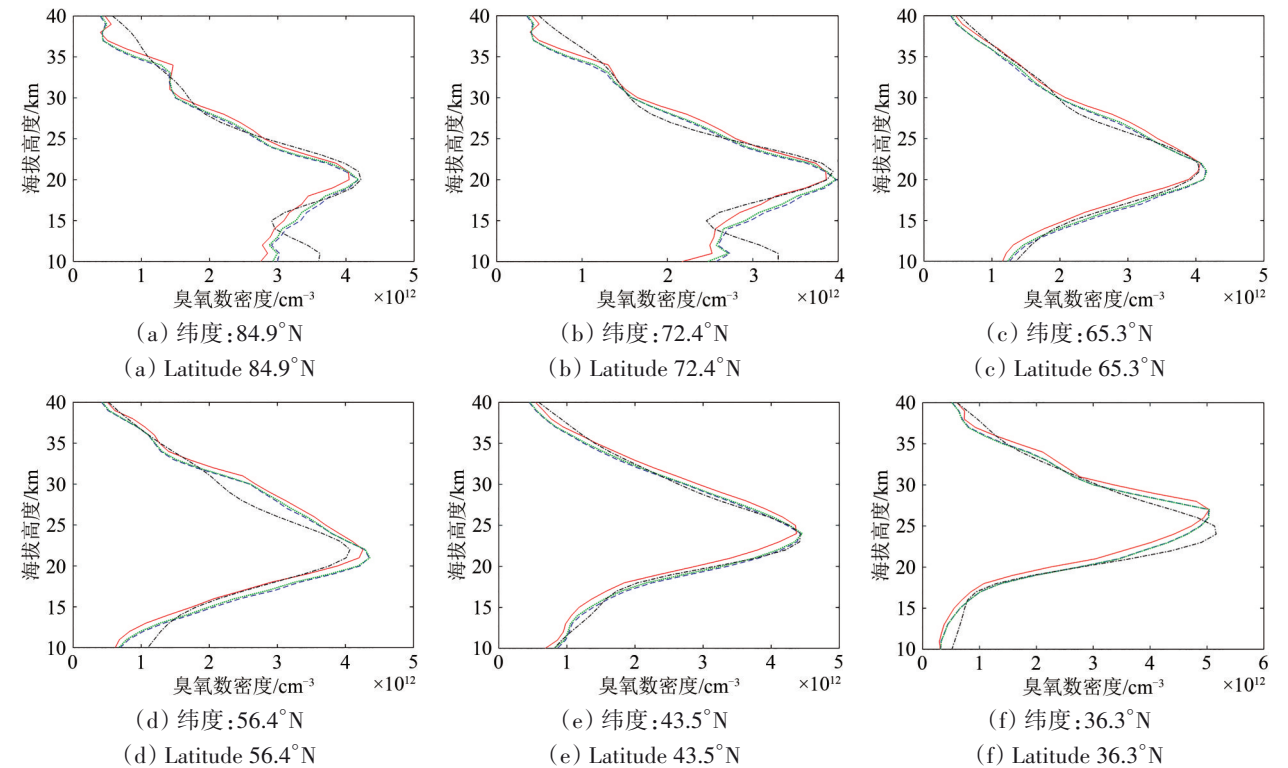
为了验证切高校正对反演臭氧廓线的影响，本文将未校正的切高、校正的切高和ESA提供的L1B切高产品分别进行臭氧廓线反演。该臭氧反演方法基于MART算法利用臭氧Chappuis吸收带反演平流层O₃廓线，详情请参考文献（朱芳等，2021）。以

2008 年 6 月 21 日轨道 32980 不同纬度的典型临边辐射廓线为例, 进行 3 种不同切高序列的臭氧廓线反演, 并与 Bremen 大学提供的 SCIAMACHY v3.5 臭氧产品在时空匹配的廓线进行比较, 结果如图 8 所示。从图 8 可知, 与校正的切高和 L1B 切高反演的臭氧廓线相比, 未校正的切高反演的臭氧廓线明显出现垂直向上偏移的现象, 然而 3 种反演的臭氧廓线的形状是类似的; 校正 THs 后的 O_3 廓线比未校正切高廓线更符合 SCIAMACHY v3.5 臭氧产品。图 9 显示了轨道对应纬度反演的臭氧廓线与 SCIAMACHY v3.5 臭氧廓线之间的相对差异以及切高校正与未校正臭氧廓线之间的相对差异。由于 SCIAMACHY v3.5 臭氧产品的垂直分辨率与本文的不同, 因此将其进行样条插值到 1 km 的高度网格上再进行比较。由图 9 可知, 未校正和校正的切高产生的臭氧反演相对误差在臭氧峰值以下为正值, 在臭氧峰值以上为负值; 说明未校正的切高反演的臭氧廓线存在垂直移动。校正后的切高反演的臭氧廓线与 ESA 提供的 L1B 切高反演的臭氧廓线一致性比较好, 平均相对误差在 $\pm 3.5\%$ 以内; 而与未校正的反演结果的平均相对误差为 $\pm 20\%$; 与 SCIAMACHY v3.5 的臭氧产品相比, 校正后的廓线

误差和未校正切高的误差曲线在海拔高度上的变化趋势类似; 但是校正切高的反演结果产生的平均相对误差在 13—38 km 范围内小于 $\pm 10\%$; 而未校正切高产生的平均误差在该范围内高达 22%。

表 4 每轨的 TH 偏移量的平均值和标准差以及每轨精度的平均值、标准差和均方根

Table 4 Mean value and standard deviation of TH offsets, and mean value, standard deviation and root mean square of accuracy per orbit					
轨道号	Δh 的平均值	Δh 的标准差	精度的平均值	精度的标准差	精度的均方根
32980	-0.9423	0.5111	0.1087	0.0827	0.1351
32981	-0.8949	0.3828	0.0927	0.0753	0.1423
32982	-0.7956	0.4775	0.0879	0.0872	0.1488
32983	-0.7238	0.5736	0.1362	0.1326	0.1873
32984	-0.8278	0.5492	0.1373	0.0993	0.1293
32985	-0.9485	0.4788	0.1312	0.1275	0.1239
32986	-0.9149	0.5026	0.1523	0.1273	0.1838
32987	-0.9120	0.4915	0.1631	0.0967	0.1431
32988	-0.9577	0.5324	0.2157	0.1173	0.2085
32989	-0.9650	0.5026	0.2516	0.1348	0.2166
32990	-0.9719	0.4165	0.1907	0.1330	0.2081
32991	-1.0639	0.3231	0.0936	0.0854	0.0857
32992	-1.0965	0.4338	0.1496	0.0873	0.1280
平均值	-0.9242	0.4750	0.1470	0.1066	0.1570



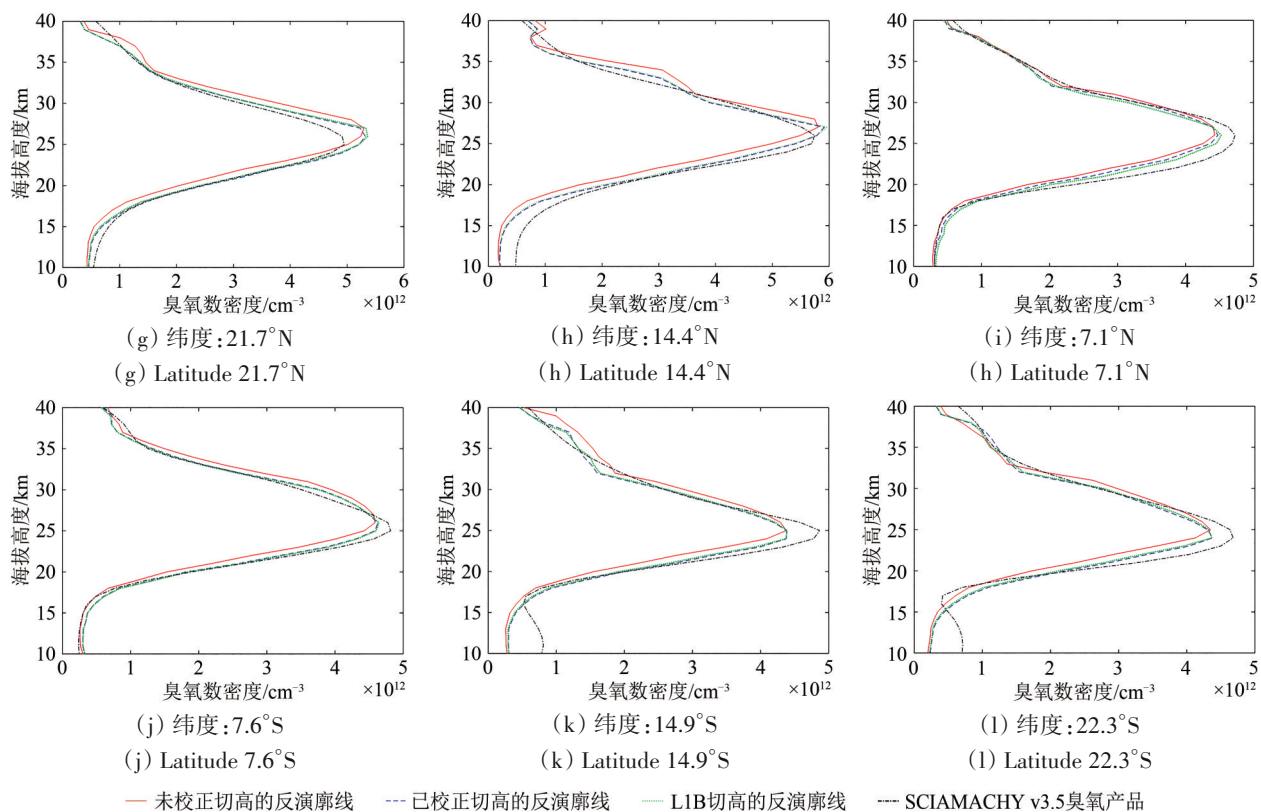
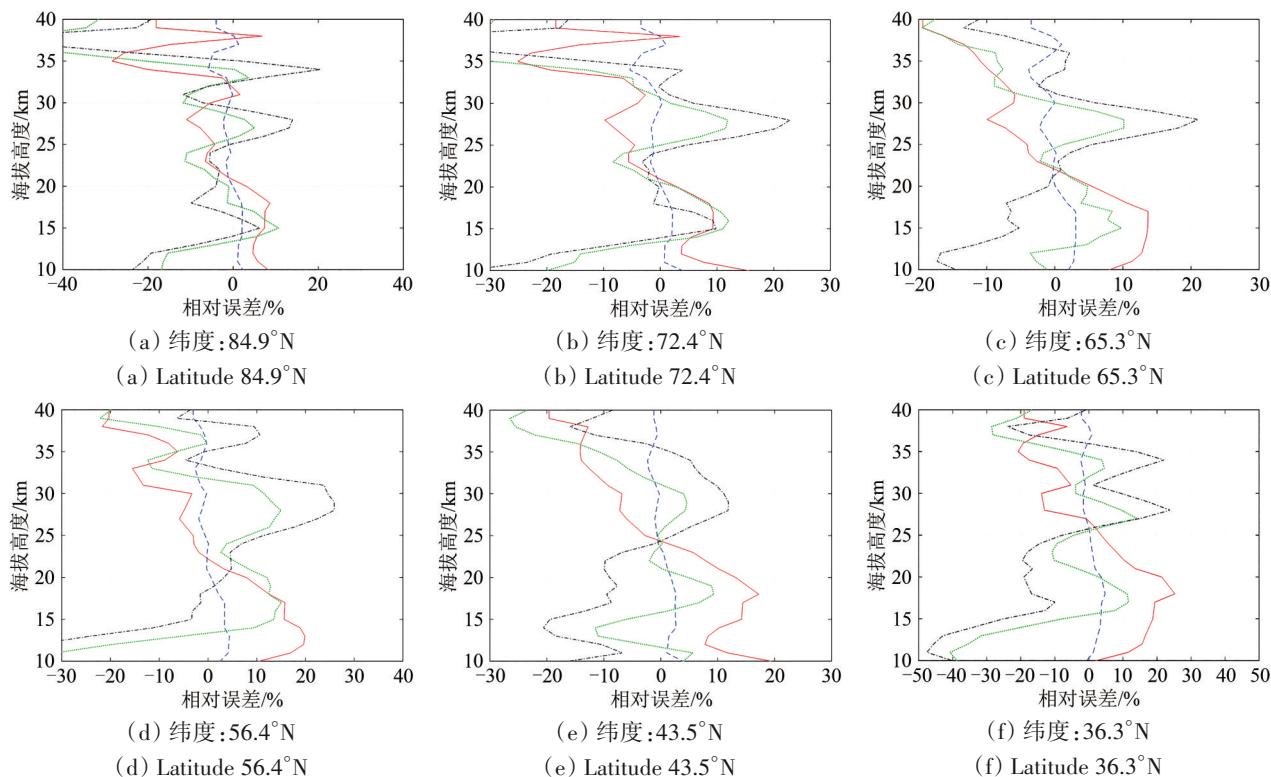


图8 32980轨道反演的臭氧廓线与 SCIAMACHY v3.5臭氧产品在不同纬度上的比较

Fig.8 Comparison between the retrieved ozone profile and SCIAMACHY v3.5 ozone products at different latitudes



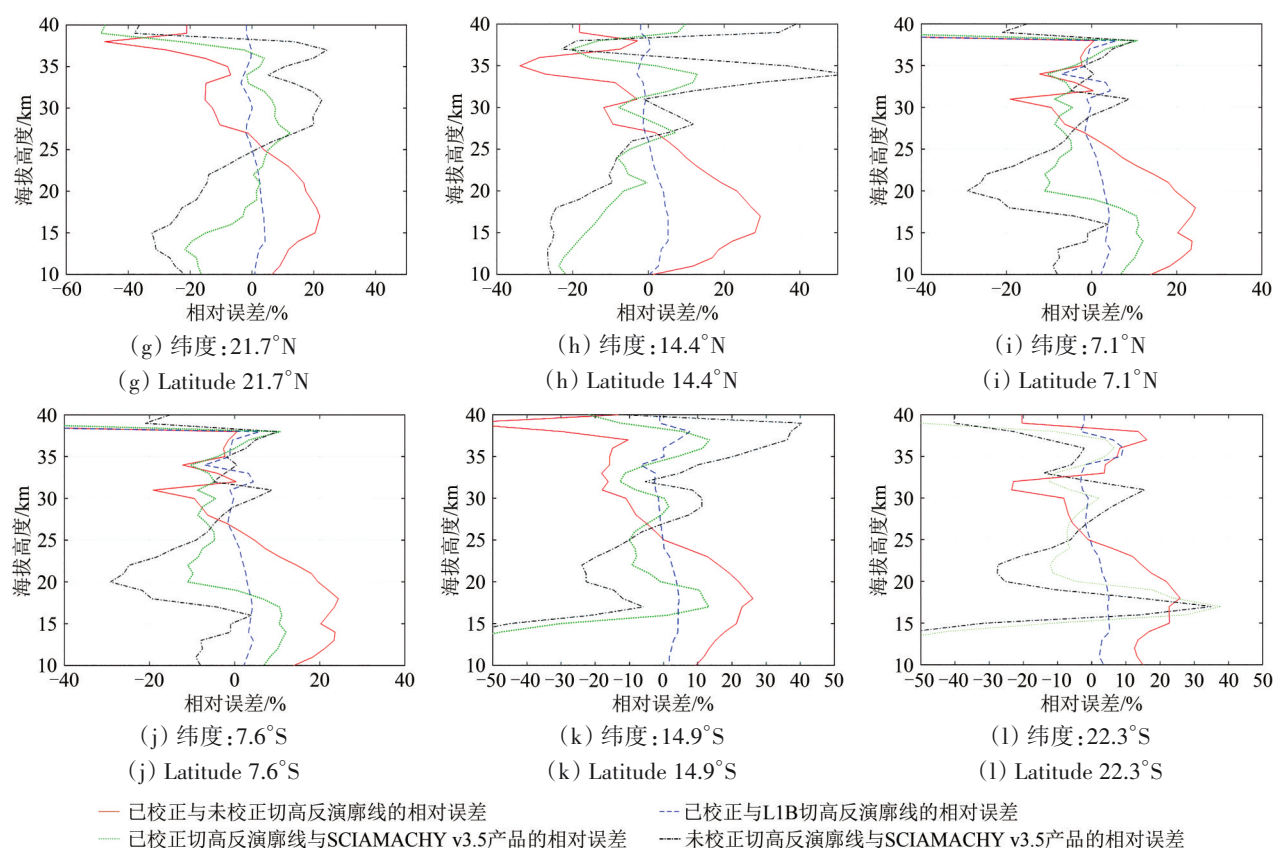


图9 切高校正和未校正反演的臭氧廓线之间以及反演结果与臭氧产品之间的相对差异

Fig. 9 Relative differences between the pointing corrected and uncorrected retrieved ozone profiles and between the retrievals and ozone products

4 结 论

切高偏移是临边散射观测反演痕量气体的主要误差来源之一。本文在膝点法的基础上提出了新的波段和新的工程切高使测量矢量在保持较全灵敏度的同时维数更小,并应用于SCIAMACHY临边辐射切高校正。采用THRUB方法反演得到了每个轨道的平均TH偏移量和相应的反演精度,切高校正显著提高了反演的臭氧廓线与SCIAMACHY臭氧廓线产品之间的一致性。主要结论如下:

(1) 对 SCIAMACHY 32980—32992 轨道的临边辐射进行切线高度校正,获得的平均TH偏移量约为 -0.9 ± 0.5 km,平均TH统计精度约为 150 ± 100 m。在该精度范围内的TH误差引起的臭氧廓线反演误差小于 $\pm 3.5\%$,验证了该方法的有效性和稳定性。与Bremen大学提供的SCIAMACHY v3.5臭氧廓线产品相比,校正后的臭氧廓线相对误差在13—38 km范围内比未校正的臭氧廓线误差下降了12%;说明在痕量气体廓线反演之前进行的切高校正显著提高了臭氧廓线反演的精度。

(2) 切高偏移的反演很大程度上取决于痕量气体廓线的形状,本文分析了压强、温度和臭氧廓线对TH反演的影响,发现压强和臭氧对TH反演的影响是正相关的,而温度是负相关的;臭氧廓线对TH反演的影响最大,压强次之,温度最小(相对而言)。本文还研究了地表反照率和气溶胶对TH反演的影响,结果发现地表反照率变化为0.1时,TH反演精度仅为0.2 m;有无气溶胶时,反演的TH偏移量的平均差异仅约为 ± 10 m;因此地表反照率和气溶胶对TH反演的影响可忽略。

(3) 准确的切线高度是临边散射辐射反演大气痕量气体成功的关键。切高校正技术比安装在航天器上的星体跟踪器更便宜,也更全面。利用校正后的切高反演的臭氧廓线可以用来验证其他仪器是否也存在指向信息错误,并对臭氧浓度监测和长期变化趋势提供高质量数据服务。本文的切高校正方法依赖于固定的臭氧廓线,因此下一步研究计划是将TH反演与臭氧廓线拟合同时进行,以期减少对臭氧的依赖性。

志 谢 本文所用实验数据为 SCIAMACHY L1B 临边数据, 均可由 ESA 提供的网页下载: <ftp://scia-ftp-ds.eo.esa.int/>; 臭氧廓线产品 (SCIAMACHY v3.5) 由 Bremen 大学环境与遥感物理研究所 (IUP/IFE) 提供, 下载网站: <https://www.iup.uni-bremen.de/scia-arc/>。同时对 Bremen 大学环境与遥感物理研究所 (IUP/IFE) 提供的 SCIAMACHY 定标和提取工具 (SciaL1C V.3.2) 表示衷心的感谢!

参考文献 (References)

- Bourassa A E, Roth C Z, Zawada D J, Rieger L A, McLinden C A and Degenstein D A. 2018. Drift-corrected Odin-OSIRIS ozone product: algorithm and updated stratospheric ozone trends. *Atmospheric Measurement Techniques*, 11(1): 489-498 [DOI: 10.5194/amt-11-489-2018]
- Bovensmann H, Burrows J P, Buchwitz M, Frerick J, Noël S, Rozanov V V, Chance K V and Goede A P H. 1999. SCIAMACHY: mission objectives and measurement modes. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 56(2): 127-150 [DOI: 10.1175/1520-0469(1999)056<0127:SMOAMM>2.0.CO;2]
- Burrows J P, Richter A, Dehn A, Deters B, Himmelmann S, Voigt S and Orphal J. 1999a. Atmospheric remote-sensing reference data from GOME-2. Temperature-dependent absorption cross sections of O₃ in the 231-794 nm range. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 61(4): 509-517 [DOI: 10.1016/S0022-4073(98)00037-5]
- Burrows J P, Weber M, Buchwitz M, Rozanov V, Ladstätter-Weißmayer A, Richter A, Debeek R, Hoogen R, Bramstedt K, Eichmann K U, Eisinger M and Perner D. 1999b. The Global Ozone Monitoring Experiment (GOME): mission concept and first scientific results. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 56(2): 151-175 [DOI: 10.1175/1520-0469(1999)056<0151:TGOMEG>2.0.CO;2]
- Degenstein D A, Bourassa A E, Roth C Z and Llewellyn E J. 2009. Limb scatter ozone retrieval from 10 to 60 km using a multiplicative algebraic reconstruction technique. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 9(17): 6521-6529 [DOI: 10.5194/acp-9-6521-2009]
- Flittner D E, Bhartia P K and Herman B M. 2000. O₃ profiles retrieved from limb scatter measurements: theory. *Geophysical Research Letters*, 27(17): 2601-2604 [DOI: 10.1029/1999GL011343]
- Janz S J, Hilsenrath E, Flittner D E and Heath D E. 1996. Rayleigh scattering attitude sensor//Proceedings Volume 2831, Ultraviolet Atmospheric and Space Remote Sensing: Methods and Instrumentation. Denver: SPIE: 146-153 [DOI: 10.1117/12.257207]
- Jaross G, Bhartia P K, Chen G, Kowitt M, Haken M, Chen Z, Xu P, Warner J and Kelly T. 2014. OMPS limb profiler instrument performance assessment. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 119(7): 4399-4412 [DOI: 10.1002/2013JD020482]
- Kaiser J W, von Savigny C, Eichmann K U, Noël S, Bovensmann H, Frerick J and Burrows J P. 2004. Satellite-pointing retrieval from atmospheric limb-scattering of solar UV-B radiation. *Canadian Journal of Physics*, 82(12): 1041-1052 [DOI: 10.1139/p04-071]
- Llewellyn E J, Lloyd N D, Degenstein D A, Gattinger R L, Petelina S V, Bourassa A E, Wiensz J T, Ivanov E V, McDade I C, Solheim B H, McConnell J C, Haley C S, von Savigny C, Sioris C E, McLinden C A, Griffioen E, Kaminski J, Evans W F J, Puckrin E, Strong K, Wehrle V, Hum R H, Kendall D J W, Matsushita J, Murtagh D P, Brohede S, Stegman J, Witt G, Barnes G, Payne W F, Piché L, Smith K, Warshaw G, Deslauniers D L, Marchand P, Richardson E H, King R A, Wevers I, McCreath W, Kyrölä E, Oikarinen L, Leppelmeier G W, Auvinen H, Mégie G, Hauchecorne A, Lefèvre F, de La Noë J, Ricaud P, Frisk U, Sjöberg F, von Schéele F and Nordh L. 2004. The OSIRIS instrument on the Odin spacecraft. *Canadian Journal of Physics*, 82(6): 411-422 [DOI: 10.1139/P04-005]
- McPeters R D, Janz S J, Hilsenrath E, Brown T L, Flittner D E and Heath D F. 2000. The retrieval of O₃ profiles from limb scatter measurements: results from the shuttle ozone limb sounding experiment. *Geophysical Research Letters*, 27(17): 2597-2600 [DOI: 10.1029/1999GL011342]
- Merkel A W, Barth C A and Bailey S M. 2001. Altitude determination of ultraviolet measurements made by the Student Nitric Oxide Explorer. *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, 106(A12): 30283-30290 [DOI: 10.1029/2001ja001111]
- Miao J, Li X Y, Wang H M, Wang Y P, Zhu S Y and Wang Z H. 2021. Atmospheric water vapor profiles retrieval algorithm for Occultation Satellite-based Infrared Payloads. *National Remote Sensing Bulletin*, 25(6): 1201-1215 (苗晶, 李小英, 王红梅, 王雅鹏, 朱松岩, 王智灏. 2021. GF-5 AIUS 水汽廓线反演算法研究. *遥感学报*, 25(6): 1201-1215) [DOI: 10.11834/jrs.20218343]
- Moy L, Bhartia P K, Jaross G, Loughman R, Kramarova N, Chen Z, Taha G, Chen G and Xu P. 2017. Altitude registration of limb-scattered radiation. *Atmospheric Measurement Techniques*, 10(1): 167-178 [DOI: 10.5194/amt-10-167-2017]
- Rault D F. 2005. Ozone profile retrieval from Stratospheric Aerosol and Gas Experiment (SAGE III) limb scatter measurements. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 110(D9): D09309 [DOI: 10.1029/2004JD004970]
- Rault D F and Taha G. 2007. Validation of ozone profiles retrieved from Stratospheric Aerosol and Gas Experiment III limb scatter measurements. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 112(D13): D13309 [DOI: 10.1029/2006JD007679]
- Rodgers C D. 1976. Retrieval of atmospheric temperature and composition from remote measurements of thermal radiation. *Reviews of Geophysics*, 14(4): 609-624 [DOI: 10.1029/RG014i004p00609]
- Rodgers C D. 2000. *Inverse Methods for Atmospheric Sounding: Theory and Practice*. Singapore: World Scientific [DOI: 10.1142/3171]
- Rohen G J, von Savigny C, Llewellyn E J, Kaiser J W, Eichmann K U,

- Bracher A, Bovensmann H and Burrows J P. 2006. First results of ozone profiles between 35 and 65km retrieved from SCIAMACHY limb spectra and observations of ozone depletion during the solar proton events in October/November 2003. *Advances in Space Research*, 37(12): 2263-2268 [DOI: 10.1016/j.asr.2005.03.160]
- Rozanov A, Rozanov V, Buchwitz M, Kokhanovsky A and Burrows J P. 2005. SCIATRAN 2.0-A new radiative transfer model for geophysical applications in the 175-2400 nm spectral region. *Advances in Space Research*, 36(5): 1015-1019 [DOI: 10.1016/j.asr.2005.03.012]
- Rusch D W, Mount G H, Barth C A, Thomas R J and Callan M T. 1984. Solar Mesosphere Explorer Ultraviolet Spectrometer: measurements of ozone in the 1.0-0.1 mbar region. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 89(D7): 11677-11687 [DOI: 10.1029/JD089iD07p11677]
- Sioris C E, Haley C S, McLinden C A, von Savigny C, McDade I C, McConnell J C, Evans W F J, Lloyd N D, Llewellyn E J, Chance K V, Kurosu T P, Murtagh D, Frisk U, Pfeilsticker K, Bösch H, Weidner F, Strong K, Stegman J and Mégie G. 2003. Stratospheric profiles of nitrogen dioxide observed by Optical Spectrograph and Infrared Imager System on the Odin satellite. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 108(D7): 4215 [DOI: 10.1029/2002jd002672]
- Taha G, Jaross G, Fussen D, Vanhellemont F, Kyrölä E and McPeters R D. 2008. Ozone profile retrieval from GOMOS limb scattering measurements. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 113(D23): D23307 [DOI: 10.1029/2007jd009409]
- Thomason L W, Chu W P and Pitts M C. 1997. Stratospheric aerosol and gas experiment III//*Proceedings Volume 3495, Satellite Remote Sensing of Clouds and the Atmosphere III*. Barcelona: SPIE: 286-291 [DOI: 10.1117/12.332682]
- von Savigny C, Kokhanovsky A, Bovensmann H, Eichmann K. U, Kaiser J W, Noël S, Rozanov A V, Skupin J, and Burrows J P. 2004. NLC detection and particle size determination: first results from SCIAMACHY on ENVISAT. *Advances in Space Research*, 34(4): 851-856
- von Savigny C, Kaiser J W, Bovensmann H, Burrows J P, McDermid I S and Leblanc T. 2005b. Spatial and temporal characterization of SCIAMACHY limb pointing errors during the first three years of the mission. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 5(10): 2593-2602 [DOI: 10.5194/acp-5-2593-2005]
- von Savigny C, McDade I C, Griffioen E, Haley C S, Sioris C E and Llewellyn E J. 2005a. Sensitivity studies and first validation of stratospheric ozone profile retrievals from Odin/OSIRIS observations of limb-scattered solar radiation. *Canadian Journal of Physics*, 83(9): 957-972 [DOI: 10.1139/p05-041]
- Wang Z J, Chen S B, Jin L H and Yang C Y. 2011. Ozone profiles retrieval from SCIAMACHY Chappuis-Wulf limb scattered spectra using MART. *Science China Physics, Mechanics and Astronomy*, 54(2): 273-280 [DOI: 10.1007/s11433-010-4210-z]
- Wuttke M W, Noël S, Skupin J, Gerilowski K, Bovensmann H and Burrows J P. 2004. SCIAMACHY on ENVISAT: instrument monitoring and calibration two years after launch//*Proceedings Volume 5570, Sensors, Systems, and Next-Generation Satellites VIII. Maspalomas: SPIE: 391-400* [DOI: 10.1117/12.565504]
- Zhu F, Si F Q, Zhan K, Dou K and Zhou H J. 2021. Inversion of ozone profile of limb radiation in Chappuis-Wulf band. *Acta Optica Sinica*, 41(4): 0401005 (朱芳, 司福祺, 詹锴, 窦科, 周海金. 2021. Chappuis-Wulf 波段临边辐射臭氧廓线的反演. *光学学报*, 41(4): 0401005) [DOI: 10.3788/AOS202141.0401005]

Tangent height correction and sensitivity studies from SCIAMACHY limb scattering detection

ZHU Fang^{1,2}, SI Fuqi¹, ZHOU Haijin¹, ZHAO Minjie¹, DOU Ke¹, LUO Yuhang¹, ZHAN Kai¹

1. Centre of Environmental Optics, 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 230026, China

Abstract: A tangent height retrieved by UV narrow bands (THRUNB) method is proposed to correct the tangent height from SCIAMACHY limb instrument to solve the tangent height offset caused by misalignment and other reasons in the pointing process of limb UV-VIS scattering detection instrument.

In this method, a narrow band (300—305 nm) and a new engineering tangent height sequence (43, 46, 49, 52, and 55 km) are proposed to maintain measurement vectors that are more sensitive and with less dimension by analyzing the influence of the limb radiance profile shape and engineering pointing information of multiple UV bands on the tangent height correction. At the same time, the optimal estimation algorithm combined with SCIATRAN model is used to retrieve the tangent height deviation from the limb radiance.

The experimental results show that the average accuracy of tangent height correction by the THRUNB method is improved by 45%,

and the running time of the algorithm is reduced by 20%, compared with TRUE (tangent height retrieved by UV-B exploitation) method. Compared with SCIAMACHY L1B tangent height data provided by ESA, the average deviation of tangent height is less than 150 m. Compared with the SCIAMACHY v3.5 ozone profile product provided by University of Bremen, the average relative error of the retrieved ozone profile with tangent height correction is less than 10% in the range of 13—38 km, and the average relative error without tangent height correction is as high as 22% in the same range. At the same time, the effects of atmospheric pressure, temperature, and ozone profile on tangent height retrieved are investigated. The experimental results show that the influence of pressure and ozone on TH retrieval is positively correlated, whereas the temperature is negatively correlated. The ozone profile has the greatest influence on TH retrieval, followed by pressure and temperature.

The THRUNB method can effectively reduce the tangent height offset caused by the instrument pointing information error. The accuracy of the retrieved atmospheric trace gas profile can be improved by correcting tangent height. The effective ozone and neutral density profiles are very important for tangent height correction.

Key words: limb radiance, tangent height, correction, knee method, ozone profile, atmospheric remote sensing

Supported by National Key Research and Development Plan (No. 2019YFC0214702); National Natural Science Foundation of China (No. 61905256); Youth Innovation Promotion Association of Chinese Academy of Sciences (No. 2020439)