

用太阳及天光光度计进行大气臭氧探测

薛庆渝 郭松 钮建国

(中国气象科学研究院,北京 100081)

提 要

在紫外光谱区,大气臭氧有较丰富的吸收带结构。作者用自制的太阳及天光光度计测量直射阳光、直射月光和曙暮光的紫外吸收光谱,并用带吸收法计算臭氧垂直柱总量及斜程含量。文中介绍了观测和计算方法,并给出北京地区晴朗天气条件下观测的初步结果。

关键词:太阳及天光光度计;臭氧;垂直柱含量;斜程含量;带吸收法。

1 引 言

大气臭氧层是保护人类及生物免遭太阳紫外辐射侵袭的天然屏障,也是平流层存在及维持全球气候稳定、生态平衡的重要因素。自南极臭氧洞现象发现以来,臭氧问题已引起全球学术界的关注。为了对臭氧等大气微量成分的观测,并研究它们变化的规律和机制,我们研制了一台太阳及天光光度计^[1]。本文将介绍用该仪器进行大气臭氧观测和数据处理的方法,并给出北京地区晴朗大气条件下一些初步观测的结果。

2 直射阳光及直射月光大气臭氧总量观测

2.1 观测

紫外光谱区臭氧有结构丰富的强吸收带,我们选择3250 Å至3450 Å进行观测,以忽略SO₂及NO₂吸收的影响。观测时仪器自动跟踪太阳或月亮,采样波长扫描步距1 Å或0.5 Å,光谱仪入、出射狭缝均为0.3 mm(相应的光谱分辨率为5 Å),为消除无用波段杂散光影响,入射光在交流调制之前,由一块宽带透紫玻璃(半带宽3100 Å至3900 Å)先行滤波。经调制、分光后的光信号由光电倍增管接收,锁相放大器放大,以提高信噪比。观测及数据存盘由微机控制自动进行,扫描一条光谱历时1—3分钟。观测光谱如图1(a)及(b)所示。

1991年1月28日收到,6月20日收到修改稿。

* 国家气象局科教司七五重点课题资助项目及国家人事部回国留学人员科技活动资助项目。

2.2 数据处理

用 Noxon 带吸收法^[2]进行数据处理。考虑辐射传输方程

$$I(\lambda) = I_0(\lambda) \cdot T_{\lambda} \cdot \exp[-\sigma_{O_3}(\lambda) \cdot x \cdot m - 0.00826 \cdot \lambda^{-4} \cdot m] \quad (1)$$

其中 $I(\lambda)$, $I_0(\lambda)$ 分别为地面及大气上界单色直射太阳辐射强度, $\sigma_{O_3}(\lambda)$ 为臭氧吸收截面 (cm^2/mol), x 表示臭氧垂直柱总量 (mol/cm^2), $T_{\lambda} = \exp[-\tau_{\lambda}(\lambda) \cdot m]$ 为气溶胶散射因子, m 为大气质量。

大气上界光谱 $I_0(\lambda)$ 由太阳光谱图集^[3]按下式计算处理^[4]

$$I_0(\lambda) = \int_{\lambda-\Delta\lambda}^{\lambda+\Delta\lambda} A(\lambda') \cdot \left(1 - \frac{|\lambda - \lambda'|}{\Delta\lambda}\right) d\lambda' \quad (2)$$

该图集中光谱 $A(\lambda')$ 分辨率 0.05 \AA , 为使计算出的 $I_0(\lambda)$ 与观测光谱分辨率匹配, $A(\lambda')$ 按观测光谱分辨率及单色狭缝函数积分。由此求得的大气上界太阳光谱如图 1(c) 所示, 由

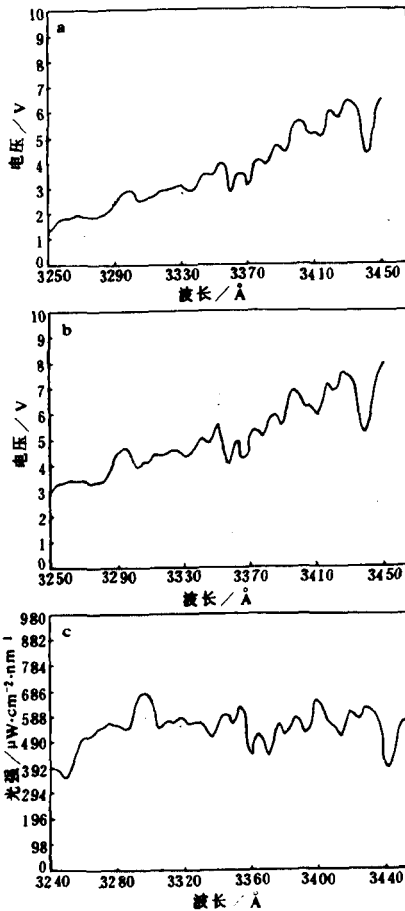


图1 (a)直射阳光 O_3 观测光谱
(b)直射月光 O_3 观测光谱
(c)大气上界太阳光谱(引自文献[3])

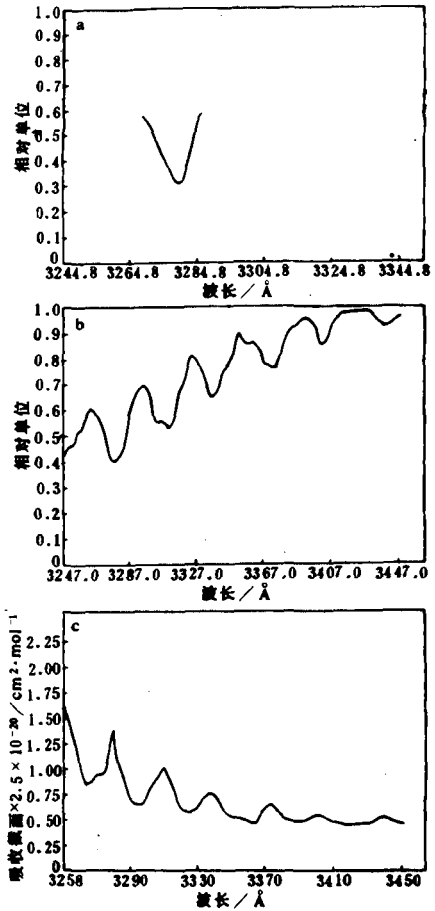


图2 比值光谱 (a)直射阳光
(b)暮光 (c) O_3
(引自文献[5])

图中太阳光谱的 Fraunhofer 结构可以看出观测到的太阳光谱与计算处理过的上界光谱两者基本一致。后者还被用来校准观测仪器的波长,最高校准精度 0.05 \AA 。为避开绝对测量,采用归一化的比值光谱进行计算。以中心波长为 3280 \AA 的吸收带为例,此归一化的比值光谱可表示为

$$\frac{I'(\lambda_k)}{I_0(\lambda_k)} \bigg/ \frac{I'(\lambda_0)}{I_0(\lambda_0)} = \exp\{[\sigma_{O_3}(\lambda_0) - \sigma_{O_3}(\lambda_k)]x \cdot m\} \quad (3)$$

其中 $I'(\lambda_k) = I(\lambda_k) \cdot T_{\lambda_k}^{-1} \cdot \exp[0.00826 \cdot \lambda_k^{-4} \cdot m]$, $k = 1, 2, 3, \dots$ 为观测点数,归一化波长 $\lambda_0 = 3266 \text{ \AA}$ 。

$$\begin{aligned} \text{设} \quad Z_k &= \log \left\{ \frac{I'(\lambda_k)}{I_0(\lambda_k)} \bigg/ \frac{I'(\lambda_0)}{I_0(\lambda_0)} \right\} \\ Y_k &= [\sigma_{O_3}(\lambda_0) - \sigma_{O_3}(\lambda_k)] \cdot m \end{aligned}$$

$$\text{由式(3)得} \quad Z_k = Y_k \cdot x \quad (4)$$

用最小二乘原理,臭氧垂直柱总量可按式计算

$$x = \frac{\sum_{k=1}^N [(Y_k - \bar{Y}) \cdot (Z_k - \bar{Z})]}{\sum_{k=1}^N (Y_k - \bar{Y})^2} \quad (5)$$

$$\text{其中} \quad \bar{Y} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N Y_k, \quad \bar{Z} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N Z_k$$

相关系数

$$r = \frac{\sum_{k=1}^N [(Y_k - \bar{Y})(Z_k - \bar{Z})]}{\left[\sum_{k=1}^N (Y_k - \bar{Y})^2 \sum_{k=1}^N (Z_k - \bar{Z})^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \quad (6)$$

计算中臭氧吸收截面采用 Molina 值^[5](数据步距 5 \AA , $T = 266 \text{ K}$)。此值先内插至观测步距,再按比值光谱同样的步距平滑。比值光谱和吸收截面如图 2(a) 及 (c) 所示。气溶胶按 Noxon 方法处理,即以无气溶胶存在时,具有相同吸收截面的两波长处,比值光谱有相同的值,将整个比值光谱中气溶胶的影响予以修正。大气光学质量按观测点的经、纬度、观测日期及时间进行计算。月光观测时,由月亮表查出的上中天及赤纬进行类似的计算。

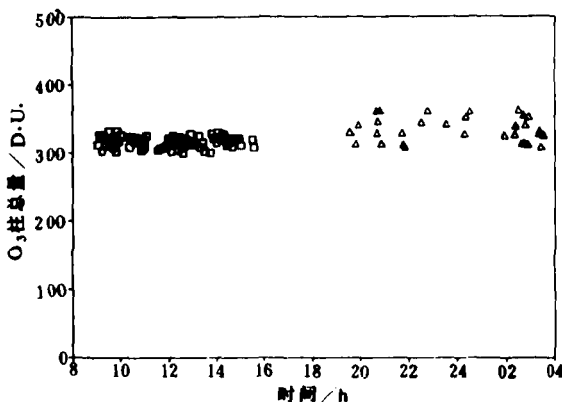


图3 1989年10月16日 O_3 垂直柱总量日变化观测结果
(□直射阳光 △直射月光)

2.3 观测结果

1989及1990年,在北京市区的晴朗大气条件下,用此仪器进行直射阳光和直射月光臭氧总量观测的结果列于表1。表中还列出 WMO 香河站 Dobson 分光光度计观测的结果,以及加拿大 Brewer 分光光度计同时观测的结果。本仪器相对 Dobson 和 Brewer 误差均值分别为 1.6% 和 1.5%。臭氧垂直柱总量日变化的观测结果示于图3。初步观测的结果显示夜间臭氧值略高于白天。

表1 太阳天光光度计, Brewer 仪, Dobson 仪北京地区 O₃ 总量比对观测结果

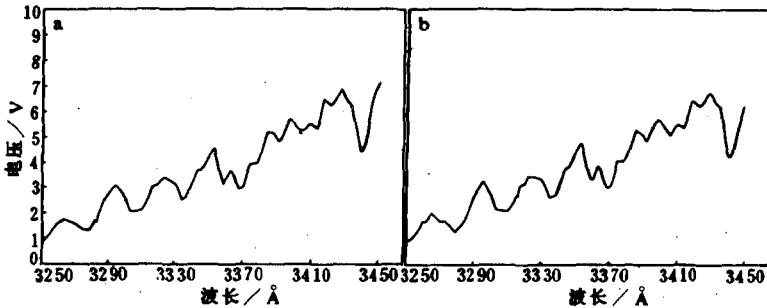
日期	臭氧总量日平均值(D. U.)			相对误差 (%)
	太阳天光光度计	Dobson 仪 (香河)	Brewer 仪 (北京)	
1989年10月5日	319	323		1.24
1989年10月6日	324	329		1.50
1989年10月7日	326	330		1.21
1989年10月8日	312	313		0.32
1989年10月13日	293	285		2.81
1989年10月16日	319	317		0.60
1990年5月7日	346	350		1.10
1990年5月26日	349	362		3.60
1990年6月2日	370	377		1.90
1990年11月6日	328		324	1.20
1990年11月9日	374		379	1.30
1990年11月21日	338		348	2.90
1990年11月22日	331		333	0.60
1989年10月13日	304*			
1989年10月16日	334*			

* 月光观测结果

3 曙暮光臭氧斜程含量探测

3.1 观测

进行观测时,仪器指向天顶,利用天顶散射光测量紫外波段的大气吸收光谱。波段范围及观测条件与直射阳光观测相同。1989年10月16日曙暮光观测光谱如图4(a)(b)所示,由于曙暮时刻光线在大气中较直射阳光时穿过更长的路径,光谱中臭氧的吸收变得更为明显。

图4 O₃ 曙光(a)暮光(b)观测光谱

3.2 数据处理及初步结果

以比值光谱表示的辐射传输方程可表达为

$$I(\lambda)/I_0(\lambda) = f(\lambda)\exp[g(\lambda) - N\sigma_{O_3}(\lambda)] \quad (7)$$

其中 $I(\lambda)$ 及 $I_0(\lambda)$ 分别表示地面接收到的天顶散射光强和参考光强。 $I_0(\lambda)$ 可选用大气上界太阳光谱或太阳天顶角较小时(如中午)观测的天顶散射光光谱,我们选用前面介绍过的大气上界太阳光谱计算值。

$$F(\lambda) = f(\lambda) \cdot \exp[g(\lambda)]$$

表示由分子散射、米散射及仪器常数等产生的光强衰减, $\sigma_{O_3}(\lambda)$ 和 N 表示臭氧的吸收截面和斜程含量。如前所述,计算前先将比值光谱进行归一化。比值光谱如图 2(b) 所示。由同一图中臭氧吸收截面可见,测量的比值光谱确实由臭氧吸收构成。 $F(\lambda)$ 由两步拟合求出。第一步,设指数为零,即

$$I(\lambda)/I_0(\lambda) = f(\lambda)$$

用一元 n 次曲线拟合,通过相关系数比较,按相关系数最大原则确定 $n = 3$,即 $f(\lambda)$ 为波长 λ 的三次多项式,并可求出其系数。第二步,将 $f(\lambda)$ 代入,用 $n + 1$ 元一次曲线拟合,经相关系数比较,确定 $n = 2$,即 $g(\lambda)$ 为波长 λ 的二次多项式,同时求得臭氧的斜程含量 N 。两步曲线拟合法参考 Ogawa 文章^[6]。

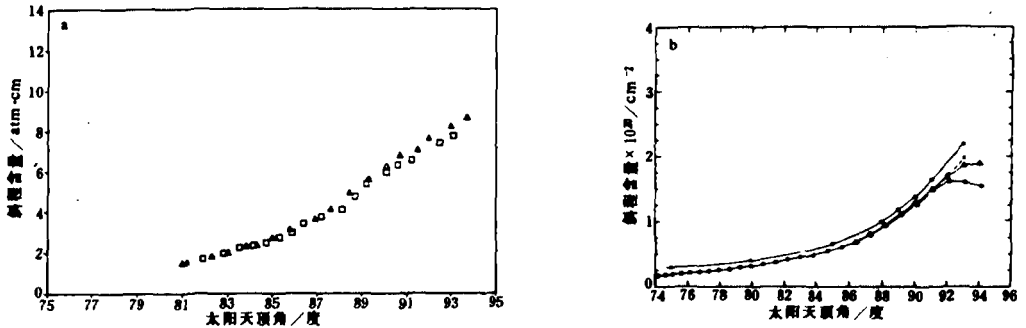


图 5 斜程含量随天顶角变化曲线 (a) 太阳天光光度计观测结果 (Δ 曙光 \square 暮光)
(b) 对照观测结果(引自文献[7])(Δ — Δ 曙光, \circ — \circ 暮光, \bullet — \bullet 计算值)

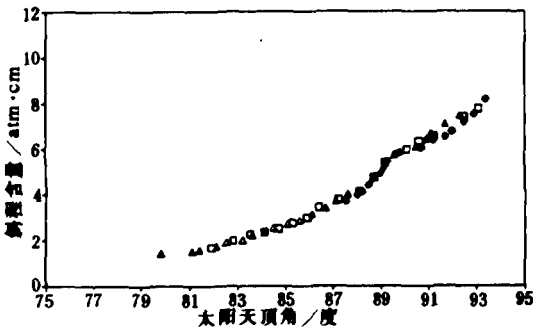


图 6 O_3 暮光日际变化观测结果(\square 1989年10月16日 Δ 1989年10月7日 \bullet 1990年6月22日)

用此法计算出的1989年10月16日臭氧斜程含量随天顶角变化曲线如图5(a)所示,图中给出1989年10月16日曙光及暮光的观测结果,曙光臭氧值略高于暮光臭氧值,尤其在太阳天顶角较大时更为明显。图5(b)为Solomon等^[7]1982年11月26日在加拿大Gimli用曙光进行观测的结果,图中曙光值略高于暮光值的趋势与我们的观测结果一致。图6还给出1989年10月16日、17日及1990年6月22日暮光臭氧日际变化的观测结果。斜程含量按:垂直柱总量=斜程含量/斜程因子可换算成垂直柱总量。以斜程因子 $L \sim 20$ 计算出的臭氧垂直柱总量如表2所示^[6]。此外,由曙暮光观测还可反演臭氧含量高度分布的廓线。此项工作正在进行之中。

表2 暮光观测的臭氧的垂直柱含量

日期	太阳天顶角	臭氧总量(DU)	
		暮光观测(L=20)	Dobson 仪测量结果
1989年10月16日	90.1°	298	317
1989年10月17日	90°	294	307
1990年6月22日	89.8°	290	324

4 误差分析

太阳及天光光度计用带吸收法进行臭氧总量观测和计算时,可能产生误差的原因如下:

(1)上界光谱:大气上界太阳光谱在臭氧总量计算中是一个关键参数,一般选择洁净地区用常法进行测量,观测时要求大气条件稳定。本文采用计算法,且假定此量不随时间变化,将引起误差。

(2)波长校准:光谱法中波长校准极为重要,本仪器采用平移滑动校准波长,滑动步距的大小,影响校准精度,从而引起误差。

(3)仪器误差:仪器内部光学部件性能变化、杂散光等对测量结果有影响,将产生误差。

(4)臭氧吸收截面:观测波长范围内臭氧吸收截面及其温度系数,直接影响总量的计算结果,采用不同作者的臭氧吸收截面及温度系数,将得到不同的计算结果。本仪器计算中未考虑温度系数也将产生误差。

(5)光谱分辨率:本仪器采用调节式狭缝,其开启大小影响光谱分辨率,从而产生误差。

此外,观测光谱范围内其它大气成分吸收及气溶胶等也会带来测量计算误差。由于我们选择的光谱范围内,其它大气成分(SO_2 , NO_2)的吸收很小,观测又都在洁净的晴朗大气条件下进行,故不考虑之。上述各项按最大误差估计,对臭氧总量反演结果的影响如表3所示,总均方根误差不超过3.7%。

本仪器与 Dobson 仪器虽不在同一地点观测,但据本仪器与 Brewer 仪器在同一地点比对观测结果看,一般误差不超过2%,Brewer 仪器与 Dobson 仪器的误差在1%以内,所以本仪器与 Dobson 仪器的结果比对观测误差不应超过3%。

表3 臭氧总量反演结果的误差分析

因素	扰动条件	对臭氧总量反演的影响 (相对误差 R/%)
上界光谱	1%随机误差	2
波长校准	0.1A 偏差	2.4
仪器误差	2%随机误差	1.5
吸收截面	2%	1
光谱分辨率	0.1A 偏差	1

表2所示曙暮时刻,由斜程含量转换的臭氧垂直柱总量均小于日均值,由斜程因子 L 决定。该因子受地理位置,大气条件影响,不易进行精确计算,文献中不同作者采用不同模式计算的结果可差30%,本文采用 $L \approx 20$,未考虑北京地区的地理位置和大气条件,所以有偏差。

致谢:感谢中国科学院大气物理研究所魏鼎文教授提供的 WMO 香河站 Dobson 臭氧观测资料。

参 考 文 献

- 1 薛庆渝,钮建国,赵学鹏,郭松. 大气微量成分遥感及多功能分光光度计. 气象学报(英文版),1991,5(3):352—359.
- 2 Noxon J. F. . Nitrogen dioxide in the stratosphere and troposphere measured by ground-based absorption spectroscopy. *Science*,1975,189:547—549.
- 3 Kurucz C. L. ,Furenliid I. ,et al. . Solar Flux Atlas from 296—1300nm. 1984.
- 4 张呈祥,赵柏林,毛节泰. 大气痕量气体 NO_2 的研究. 中国科学,1989,11:B辑,1223—1232.
- 5 Molina L. T. and M. J. Molina. Absolute absorption cross section of ozone in the 185—350 nm wavelength range. *J. Geophys. R.* ,1986,91(D13):14501—14508.
- 6 Ogawa T. ,et al. . Balloon observation of stratospheric NO_2 profile by visible absorption spectroscopy. *J. Meteor. Soc. of Japan*,1981 ,59(3):410—416.
- 7 Solomon S. ,et al. . On the interpretation of zenith sky absorption measurements. *J. Geophys. R.* ,1987,92(D7):8311—8319.
- 8 Keer J. B. and C. T. Mcelroy. Measurements of stratospheric nitrogen dioxide from the AES stratospheric balloon program. *Atmosphere*,1976,14:166—173.

OZONE MEASUREMENT WITH THE SOLAR AND SKYLIGHT SPECTROPHOTOMETER

Xue Qingyu Guo Song Niu Jianguo

(Chinese Academy of Meteorological Sciences, Beijing 100081)

Abstract

Ozone has intensive absorption in the UV band. By taking in the condition of direct sun, moon, and twilight zenith sky, the UV absorption spectrum is measured with a self-made Solar and Skylight Spectrophotometer. The vertical and slant column amount of ozone is computed by using the method of band absorption. The procedure of measuring and calculating ozone amount is introduced in the paper. Also the preliminary result of ozone under the clear weather condition in Beijing is given here.

Key words: Solar and Skylight Spectrophotometer; Ozone, Vertical and slant column amount of ozone; Band absorption method.