

基于 O_2 分子 $1.27 \mu\text{m}$ 气辉反演临近空间温度廓线的新方法

王道琦¹, 王后茂², 胡向瑞¹, 何微微¹, 李发泉³, 武魁军^{1*}

(1. 烟台大学 物理与电子信息学院, 山东 烟台 264005;

2. 中国科学院国家空间科学中心, 北京 100190;

3. 中国科学院精密测量科学与技术创新研究院, 湖北 武汉 430071)

摘要: $1.27 \mu\text{m}$ 波段 $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉的辐射强度高、自吸收效应弱, 是反演临近空间大气温度的理想目标源。基于 O_2 分子气辉光谱理论以及“剥洋葱”算法, 利用扫描成像大气吸收光谱仪 (SCIAMACHY) 的近红外临边观测数据, 成功反演 $50\sim 100 \text{ km}$ 区域的大气温度廓线。与 SABER、ACE-FTS 及激光雷达的观测结果对比表明, 在 $55\sim 85 \text{ km}$ 的切线高度范围内温度测量误差优于 $\pm 10 \text{ K}$, 而在 55 km 以下与 85 km 以上空间区域, 由于受到自吸收效应、大气散射以及 OH 气辉的光谱污染等干扰, 温度反演结果出现显著偏差。

关键词: 临近空间; $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉; 临边观测; 剥洋葱算法; 温度反演

中图分类号: P407.6 文献标识码: A

A new method for retrieving the near-space temperature profile based on the $1.27 \mu\text{m}$ O_2 airglow

WANG Dao-Qi¹, WANG Hou-Mao², HU Xiang-Rui¹, HE Wei-Wei¹, LI Fa-Quan³, WU Kui-Jun^{1*}

(1. School of Physics and Electronic Information, Yantai University, Yantai 264005, China;

2. National Space Science Center, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;

3. Innovation Academy for Precision Measurement Science and Technology, Chinese Academy of Sciences, Wuhan 430071, China)

Abstract: The high radiation intensity and weak self-absorption effect of the $O_2(a^1\Delta_g)$ airglow in the $1.27 \mu\text{m}$ band make it an ideal target source for retrieval of the atmospheric temperature in the near-space. Based on the theory of O_2 airglow spectral and the "onion-peeling" algorithm, the near-infrared limb-viewing data of the SCanning Imaging Absorption SpectroMeter for Atmospheric CHartographyY (SCIAMACHY) were successfully used to retrieve the atmospheric temperature profiles in the range of $50\sim 100 \text{ km}$. Comparison with SABER, ACE-FTS and LIDAR observations shows that the temperature measurement error is better than $\pm 10 \text{ K}$ in the tangential altitude of $55\sim 85 \text{ km}$. However, in the space region below 55 km and above 85 km , the temperature retrieval results show significant bias due to the influences of self-absorption effects, atmospheric scattering, and spectral contamination from OH airglow.

Key words: near-space, $O_2(a^1\Delta_g)$ airglow, limb-viewing, onion peeling algorithm, temperature retrieval

引言

临近空间是指地球大气层与太空之间的过渡

区域, 其距离地面一般在 $20\sim 100 \text{ km}$ 之间^[1]。由于其独特的地理位置和气象特性, 临近空间大气环境

收稿日期: 2023-06-05, 修回日期: 2023-07-19

Received date: 2023-06-05, Revised date: 2023-07-19

基金项目: 国家自然科学基金项目 (62305283, 41975039, 41704178); 山东省高校青年创新技术项目 (2021KJ008); 山东省自然科学基金项目 (ZR2021QD088) 资助; 烟台大学研究生科研创新基金项目 (GGIFYTU2313)

Foundation items: Supported by the National Natural Science Foundation of China (62305283, 41975039, 41704178), the Youth Innovation Technology Project of Higher School in Shandong Province (2021KJ008), the Natural Science Foundation of Shandong Province of China (ZR2021QD088), the Graduate Innovation Foundation of Yantai University (GGIFYTU2313)

作者简介 (Biography): 王道琦 (2000-), 男, 山东济宁人, 硕士研究生, 主要研究领域为临近空间大气温度场星载探测遥感. E-mail: wangdaoqi@s.ytu.edu.cn

* 通讯作者 (Corresponding author): E-mail: wukuijun@ytu.edu.cn

的研究与探索已成为国际关注热点。其中,温度是表征临近空间大气状态的主要指标之一,其三维分布的精准探测对于研究大气动力学、热力学、大气波动以及上下层耦合关系具有重要的科学研究价值。此外,临近空间也是航空航天活动的过渡区域,其大气温度场的变化对于空间天气预报以及航天器发射与再入轨过程的安全性均具有重大影响,精准探测临近空间大气温度,可以为空间飞行活动、航天活动等提供大气环境保障^[2]。

临近空间大气探测数据,尤其是温度廓线数据,相对较为缺乏。传统的地基遥感探测手段如 Rayleigh 激光雷达^[3]、Raman 激光雷达^[4]、流星雷达^[5]、气象火箭^[6]等能够获得特定区域的温度廓线,且具有较高的探测精度,但普遍存在探测高度覆盖范围不足、时间连续性差、受天气条件限制大等诸多局限性,难以建立全球尺度的临近空间大气温度场三维分布数据库。近年来,空间技术的迅猛发展使得卫星遥感成为临近空间大气温度探测的重要手段之一。相较于地基探测方式,星载探测不受天气和地理情况的限制,能够实现全球大尺度范围的全天候连续观测,已经成为卫星遥感领域的研究热点^[7]。

O_2 分子在大气中的浓度相对稳定,其气辉有显著的辐射光谱特征,是大气探测的重要目标源。 O_2 气辉的谱带形状与大气温度相关,可以通过测量其辐射谱线的相对强度反演大气温度廓线^[8]。2001年,高层大气研究卫星(Upper Airway Resistance Syndrome, UARS)上搭载的高分辨率多普勒成像仪(High Resolution Doppler Imager, HRDI)和 Odin 卫星上搭载的光学光谱仪和红外成像系统(Optical Spectrograph and InfraRed Imaging System, OSIRIS)通过观测 O_2 分子在 762 nm 波段的 A 带跃迁($b^1\Sigma_g^+ \leftarrow X^3\Sigma_g^-$)的气辉光谱强度,在临边模式下,实现了 80~105 km 区域的温度探测,精度分别为 5~7 K 与 2~8 K^[9-10]。2019年,美国 NASA 发射的 ICON 卫星上搭载的迈克尔逊全球高分辨率热层成像干涉仪(Michelson Interferometer for Global High-resolution Thermospheric Imaging, MIGHTI)利用五个光谱通道测量 O_2 -A 波段气辉光谱形状,反演得到了 90~140 km 区域内的大气温度廓线,反演精度达 1~3 K^[11]。由于低空大气中 O_2 浓度较高,A 波段范围内 O_2 分子对自身辐射的吸收非常强烈,因此 O_2 -A 波段气辉具有较强的自吸收效应,难以对 80 km 以下的

中低空区域的大气温度进行有效探测。

与 762 nm 的 A 波段气辉相比, O_2 分子 $a^1\Delta_g \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ 跃迁在 1.27 μm 波段产生的近红外气辉,具有更强的辐射信号以及更大的空间跨度,且自吸收效应更弱,适用于临近空间区域的温度探测。加拿大 StaSci 计划部署的中间层迈克尔逊干涉仪(Mesospheric Imaging Michelson Interferometer, MIMI)以及 NASA 的 MISDEX 计划支持的波迈克尔逊干涉仪(Waves Michelson Interferometer, WAMI),均采用 O_2 ($a^1\Delta_g$)气辉作为目标源,以探测 45~95 km 高度范围内的大气风场及温度场信息^[12]。2019年, Wu^[13]等提出了临近空间风温成像干涉仪(Near-space Wind and Temperature Sensing Interferometer, NWTSI),拟通过临边模式观测 1.27 μm O_2 ($a^1\Delta_g$)气辉测量临近空间的大气风场、温度场信息。

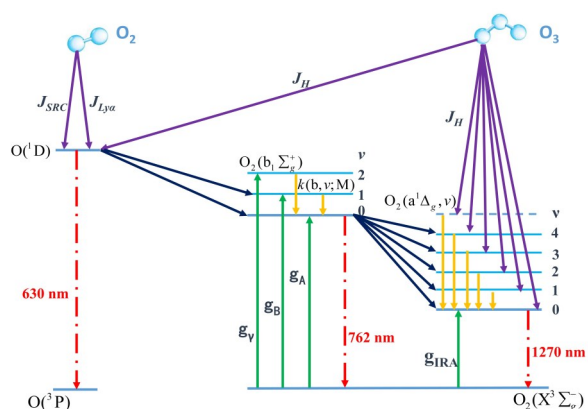
本文利用扫描成像大气吸收光谱仪(SCanning Imaging Absorption SpectroMeter for Atmospheric CHartographY, SCIAMACHY) 1050~1700 nm 通道的 O_2 红外大气波段气辉观测数据,实现了临近空间的大气温度廓线反演。文章首先介绍红外大气波段的光谱概念,并详细描述利用 1.27 μm O_2 ($a^1\Delta_g$)气辉反演大气温度的原理;然后描述利用 1.27 μm O_2 ($a^1\Delta_g$)气辉观测数据反演大气温度的具体方法;最后通过与 SABER、ACE-FTS 及激光雷达的温度数据对比,验证反演温度廓线的可靠性与准确性,并对反演误差进行分析。

1 光谱概念

1.1 $O_2(a^1\Delta_g)$ 光化学反应原理

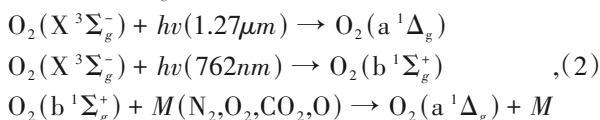
气辉是一种由大气中的原子或分子受到太阳辐射作用发生电子态激发而产生的光子辐射。 O_2 分子从第一激发态 $a^1\Delta_g$ 自发辐射到基态 $X^3\Sigma_g^-$,可以产生 1.27 μm 气辉。由于其气辉辐射的谱带形状满足玻尔兹曼分布定律,且单条谱线的线型为多普勒展宽,均含有温度信息,因而可以作为大气温度场遥感的重要示踪物。1.27 μm 波段的气辉辐射源是激发态 $O_2(a^1\Delta_g)$ 分子,其主要产生机制为 O_3 的紫外光解、太阳辐射的共振吸收,以及 $O(^1D)$ 的能量转移。图 1 显示了 $O_2(a^1\Delta_g)$ 态产生和损耗的主要光化学过程。

O_3 分子在 Hartley 波段中吸收太阳紫外辐射发生光解,可以直接产生 $O_2(a^1\Delta_g)$,其在 80 km 以下的中低空区域占主导地位,反应方程式如下所示:

图1 O₂(a¹Δ_g)气辉的产生及湮灭机制Fig. 1 Production and loss mechanisms of the O₂(a¹Δ_g) air-glow

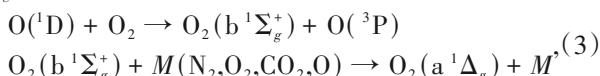
$O_3 + hv(210 - 310\text{nm}) \rightarrow O_2(a^1\Delta_g) + O(^1D)$, (1)
式中, h 为普朗克常数, ν 为光子的频率, $O(^1D)$ 为光解产生的高能级态。

O₂分子在大气带A波段(762 nm)和红外大气带(1.27 μm)的共振吸收也是O₂(a¹Δ_g)态产生的重要机制。1.27 μm波段的光激发只能产生O₂(b¹Σ_g⁺), O₂(b¹Σ_g⁺)与O₂或N₂等大气分子发生碰撞,通过淬灭反应才能产生O₂(a¹Δ_g)。而相比于1.27 μm的红外大气带,O₂分子在762 nm的A波段的谱线强度相对较强,因此762 nm波段共振吸收产生O₂(a¹Δ_g)的过程虽然间接,但其生成效率远高于1.27 μm波段,尤其对于80 km左右的空间高度,其对O₂(a¹Δ_g)态的贡献约占50%。O₂(b¹Σ_g⁺)和O₂(a¹Δ_g)态的共振激发过程以及O₂(b¹Σ_g⁺)态的能量转移过程可以表示为:



其中, O₂(X³Σ_g⁻)为基态O₂分子, M 表示为大气中的其他分子或原子如N₂、O₂、CO₂、O。

O(^1D)与O₂分子发生碰撞也会导致能量转移,产生O₂(b¹Σ_g⁺)态分子,然后经过淬灭反应产生O₂(a¹Δ_g)态,其反应方程可以表示为:



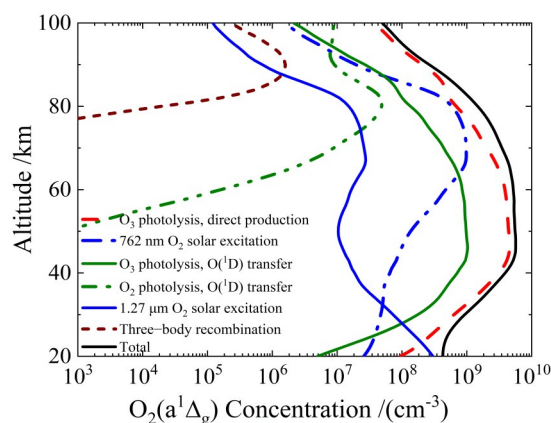
其中, O(^3P)为激发态O原子。

在光化学平衡假设成立的条件下,考虑与N₂、O₂、CO₂、O₃、O(^3P)等基本大气成分的淬灭过程, O₂(a¹Δ_g)的数密度可由下式计算^[14]:

$$n_{O_2(a^1\Delta_g)} = \frac{\phi_\alpha R_1 [O_3] + \sum_{i=1}^5 K_i [Y_i] \frac{[O_2] \{R_2 + \phi_\eta R_3 [O(^1D)]\}}{A_{O_2(b^1\Sigma_g^+)} + \sum_{i=1}^5 K_i [Y_i]}}{A_{O_2(a^1\Delta_g)} + \sum_{i=1}^3 C_i [X_i]} \quad (4)$$

其中, $A_{O_2(a^1\Delta_g)}$ 为爱因斯坦系数, $X = \{O_2, N_2, O\}$, $Y = \{N_2, O_2, CO_2, O_3, O\}$, ϕ 为量子效率, $0.54 < \phi_\eta < 1.0$, R 为光解速率, $R_1 = 8.1 \times 10^{-3}$, $R_2 = 5.35 \times 10^{-9}$, $R_3 = 3.2 \times 10^{-11} \exp(70/T)$, K 为O₂(b¹Σ_g⁺)分子与大气成分发生淬灭反应时的淬灭速率, $K_1 = 2.1 \times 10^{-15}$, $K_2 = 4.2 \times 10^{-13}$, $K_3 = 2.2 \times 10^{-11}$, $K_4 = 8.0 \times 10^{-14}$, $K_5 = 3.9 \times 10^{-17}$, C 为O₂(a¹Δ_g)分子与大气成分发生淬灭反应时的淬灭速率, $C_1 = 3.6 \times 10^{-18} e^{-220/T}$, $C_2 = 1.0 \times 10^{-20}$, 以及 $C_3 = 1.3 \times 10^{-16}$ 。

综合考虑上述所有产生机制的贡献计算得到的O₂(a¹Δ_g)态的密度廓线如图2所示。其中包括光解和光激发过程涉及的所有速率常数均取自Yankovsky等^[15-16]的研究成果,跃迁概率的计算基于HITRAN 2016数据库^[17], O、O₂、N₂和CO₂的数密度廓线来自NRLMSIS的大气模型^[18]。所有产生和损耗机制的贡献在图中单独进行了描述和标记,可以明显看出O₂(a¹Δ_g)的主要来源是O₃的光解效应, O(^1D)的能量转移机制在100 km附近的辐射过程中占据主导地位,而O₂(b¹Σ_g⁺)光激发诱导在60~90 km之间的空间高度是O₂(a¹Δ_g)的主要贡献者。

图2 不同物理及化学机制下产生的O₂(a¹Δ_g)浓度Fig. 2 Concentration of O₂(a¹Δ_g) generated under different physical and chemical mechanisms

1.2 O₂(a¹Δ_g)临边辐射光谱

O₂的红外大气带(1.27 μm)气辉由第一激发态到基态的振动跃迁产生,即O₂(a¹Δ_g, v' = 0) → O₂(X³Σ_g⁻, v'' = 0)。该光谱带是由一系列光谱

间隔很小的谱线组成,并分为两个P分支和两个R分支。其光谱分布取决于其各自旋转统计权值 $2J+1$ 和旋转温度 T ,并服从玻尔兹曼分布。

转动量子数为 J 时,每个 $O_2(a^1\Delta_g)$ 的辐射率可通过跃迁概率 $A_{O_2(a^1\Delta_g)}$ 与其实际分布相乘得到,即^[19]:

$$\varepsilon_J = A_{O_2(a^1\Delta_g)} \cdot \frac{Q(J,T)}{\sum Q(J,T)} \quad (5)$$

式中, $Q(J,T)$ 为转动量子数 J 的配分函数,其计算公式为:

$$Q(J,T) = (2J+1) \exp\left(-\frac{hcE_J'}{k_B T}\right) \quad (6)$$

其中 E_J' 为低态能, h 为普朗克常数, c 为光速, $k_B = 1.38065 \times 10^{-23}$ J/K为玻尔兹曼常数。

图3显示了在100 K和400 K两种不同温度下, $O_2(a^1\Delta_g)$ 波段的辐射光谱随跃迁波长的变化情况。可以看出,随着温度的升高,波段中心的谱线强度降低,两翼谱线的强度增加。这表明温度决定光谱带的形状,因此可以通过测量不同波长的相对谱线强度反演得到大气的温度信息。谱线的辐射强度除了受温度影响以外,还会受到气辉分子总量的影响。当激发态分子数密度增加时,气辉辐射光谱的整体强度也会随之增强。在进行大气温度反演时,可以通过对不同波长的辐射强度做比值消除气辉分子总量的影响,使得温度反演的结果更加准确可靠。

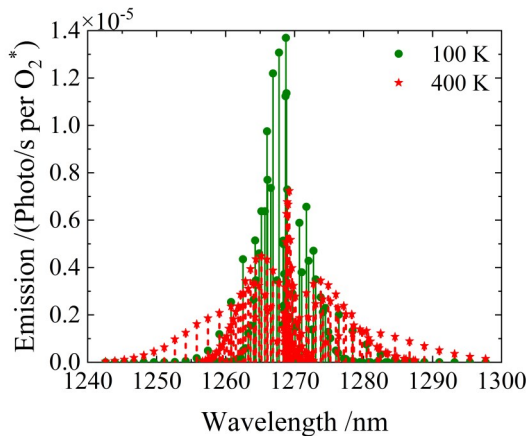


图3 不同温度下 $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉辐射的光谱分布
Fig. 3 Spectral distribution of $O_2(a^1\Delta_g)$ airglow radiation at different temperatures

在临边观测模式下,卫星测得的信号强度是地球大气各层辐射信息在其视线方向上沿路径的积分。对于原子气辉等不需要考虑自吸收效应的临

边观测,其光谱亮度可以被视为沿视线路径的体辐射率的Abel型积分。而对于1.27 μm 波段的 $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉,在60 km以下的切线高度上,由于自吸收效应较强且不可忽视,Abel型积分算法不再适用于临边光谱亮度的计算。为了准确模拟观测到的 $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉光谱亮度,在沿视线路径的体辐射率积分计算中必须考虑自吸收效应的具体影响。

临边观测模式下,每个观测方向都定义了一条视线路径^[20],如图4所示。假设由大气层和视线路径相交所定义的路径段具有相同的辐射和吸收特性,则在逐层积分的基础上,任意转动量子数 J 的光谱亮度作为波数 ν 的函数可以表示为^[21]:

$$L(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} \eta(s) D(\nu, s) \exp\left[-\int_{-s}^{\infty} n(s') \sigma(s') ds'\right] ds \quad (7)$$

其中 $\eta(s)$ 为体辐射率, $D(\nu, s)$ 为谱线的多普勒线形, $n(s)$ 为 O_2 分子的数密度, $\sigma(s)$ 为吸收截面, s 为沿视线的距离。

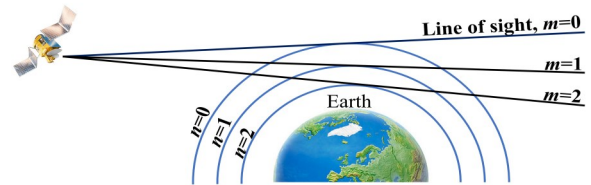


图4 临边观测几何模型
Fig. 4 Limb viewing geometry modeling

图5(a)、(b)显示了70 km和50 km切线高度处模拟的1.27 μm $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉临边光谱亮度。为了便于比较,同时绘制了忽略自吸收的Abel型积分计算的谱线亮度。图5(c)则显示了考虑自吸收效应和不考虑自吸收效应的谱线亮度比值。可以看出,在60 km以上区域,自吸收效应可以忽略不计,而在60 km以下区域,自吸收效应对 $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉临边观测强度的影响随高度的降低愈发显著。此外,还可以看出谱线强度的分布也会随海拔高度变化,这是由于不同海拔高度下大气温度的非均匀分布导致玻尔兹曼分布有所差异以及谱线自吸收效应共同引起的。吸收的程度,或者说有效光学厚度,很大程度上取决于沿视线的 O_2 分子数密度。对于单条谱线或整个谱带,由于吸收截面在中心处最大并逐渐向两侧减小,因此从单条谱线的线形或整个谱带的旋转结构得出的温度将会高于动力学温度。 $O_2(a^1\Delta_g)$ 波段两翼的转动谱线的吸收截面相对较小,

受自吸收效应的影响也小,因此这些波长区域的辐射谱线能够提供更加准确的温度信息。

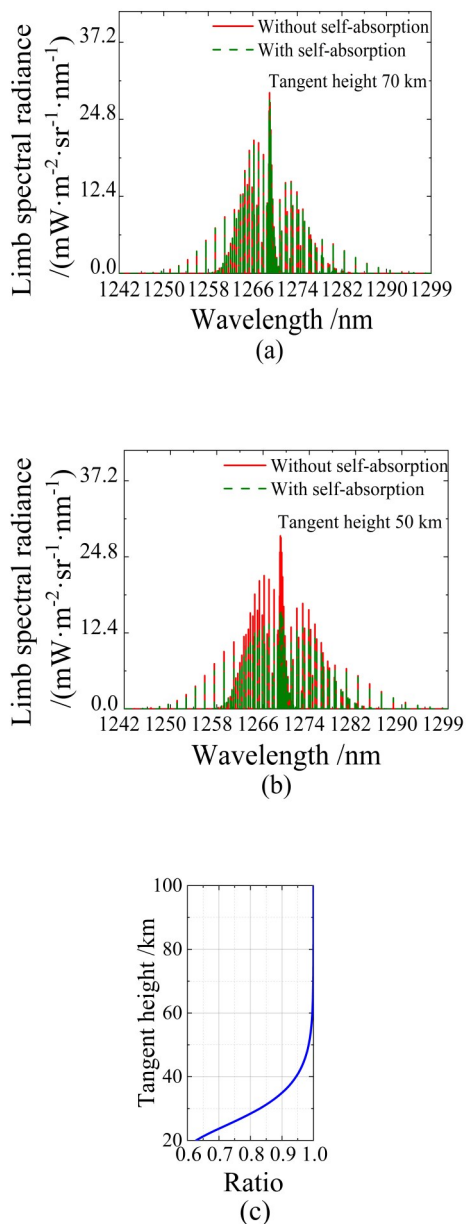


图5 自吸收效应对 $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉临近光谱亮度的影响:(a) 70 km 处有无自吸收效应的临近光谱亮度;(b) 50 km 处有无自吸收效应的临近光谱亮度;(c) 考虑自吸收效应和不考虑自吸收效应的谱线亮度之比

Fig. 5 Influence of self-absorption effect on $O_2(a^1\Delta_g)$ airglow limb spectral brightness: (a) limb spectral brightness with or without self absorption effect at 70 km; (b) limb spectral brightness with or without self absorption effect at 50 km; (c) the ratio of spectral line brightness considering self-absorption effect and not considering self-absorption effect

2 数据与方法

2.1 SCIAMACHY 临边观测光谱预处理

SCIAMACHY 是一个 8 通道光栅光谱仪,主要用于测量来自地表和大气 240~2 380 nm 波长范围内的辐射、散射和反射光谱。该仪器搭载于 Envisat 卫星,并在 2002 年 3 月到 2012 年 4 月期间在太阳同步轨道上运行^[22]。SCIAMACHY 有 3 种不同的观测模式:天底、临边和掩星。在临边观测模式下,SCIAMACHY 以 3.3 km 的垂直分辨率观测近地面到 150 km 空间范围内的大气散射及辐射信息。对于每个临边切点,SCIAMACHY 的沿轨水平分辨率约为 400 km,跨轨水平分辨率为 240 km。本研究使用 SCIAMACHY 数据集 8.02 版本的 1b 级光谱数据,并借助 SCIAMACHY 命令行工具 SciaL1c 对临边观测光谱数据进行校准。

为了有效覆盖 $O_2(a^1\Delta_g)$ 波段(1 240~1 300 nm),从 SCIAMACHY 仪器的第 6 光谱通道(1 050~1 700 nm)中提取临边观测光谱数据,并且 SCIAMACHY 仪器在 $1.27 \mu\text{m}$ 波段具有很高的光谱分辨率(约 1.5 nm)。由于临边观测模式下采集的数据中除了气辉辐射信号外,还存在着来自地球大气的多次散射信号。因此,为了获得纯净的气辉辐射信号,需要从每个临边光谱中减来自同一探测切线高度的背景信号。每个背景信号均可近似为通道两翼波段对应的临边光谱。在每次校正之前,需对背景进行缩放,使其带外辐射与要校正的临边光谱的带外辐射相匹配,以确保校正后带外辐射强度为零。对于 $1.27 \mu\text{m}$ $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉谱带,可以利用 SCIAMACHY 仪器光谱通道 6 的 1 210~1 240 nm 和 1 300~1 340 nm 两个带外光谱区域的信号进行背景强度校正^[23]。

2.2 “剥洋葱”算法

对于临边观测模式,卫星载荷观测到的信号是沿视线方向上体辐射率的积分。为了获得某一特定切线高度的强度信息,需要从最高层向低层处理,对该切线线段以上所有高度层的气辉辐射贡献进行几何量化并从积分总量中去除,得到目标层辐射信号。这一提取目标层信号的方法叫做“剥洋葱”算法。

由 1.2 节可知,对于 $1.27 \mu\text{m}$ $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉辐射光谱,60 km 以上高度区域的自吸收效应可以忽略不计。在假设地球大气是球对称的前提下,若特定高度处的单位长度的辐射强度定义为 $R(v, s)$,则

SCIAMACHY 仪器第 m 视线路径观测到的光谱强度 I_m 可以用沿该视线辐射强度的积分表示,即:

$$I_m = \int_0^{\infty} R(v,s) ds \quad (8)$$

通过将各高度层的辐射强度作离散化积分处理,可将公式(8)中的积分近似表示为代数求和的形式:

$$B_m(v) = \sum_{n=0}^{N-1} R_n(v) w_{mn} \quad (9)$$

其中, B_m 为离散化处理后 SCIAMACHY 第 m 视线路径所观测到的气辉辐射强度, n 代表某高度层, N 是高度层的数量, R_n 为第 n 高度层处的单位长度的气辉辐射强度, w_{mn} 是临边观测几何模型决定的权重。

公式(9)中的非线性方程组的解可以通过“剥洋葱”算法进行反置换求得。“剥洋葱”算法是一种从最上层开始求解的数学处理过程。每一层的求解结果都作为下一层的输入,依次向下求解。由于顶层高度没有其他高度的贡献,因此可以直接求得顶层目标层的信号强度。然后,去除顶层高度在第二层测量值中的贡献,即可得到第二层目标段的信号强度。如此往复,就可以得到各临边高度目标层的信号强度信息。“剥洋葱”算法的数学表达方式可以写为:

$$R_0(v) = \frac{1}{w_{00}} B_0(v)$$

$$R_m(v) = \frac{1}{w_{mm}} \left(B_m(v) - \sum_{n=0}^{N-1} R_n(v) w_{mn} \right) \quad (10)$$

图6(a)显示了SCIAMACHY在2011年3月1日测得的 $O_2(a^1\Delta_g)$ 日间气辉光谱辐射强度(轨道编号47071),图6(b)所示为采用“剥洋葱”算法对视线方向上的临边观测光谱信号进行处理得到的目标层气辉光谱辐射效率。两个子图中的4条谱线对应的临边高度分别为50 km、60 km、70 km、80 km。需要指出的是,图6的临边光谱信号已经做了背景强度校正处理。此外,对于该波段1 262.267 nm和1 282.128 nm处测量光谱的两个坏点可以通过数值替换的方式校正处理,即将它们该点的坏数据用相邻两个像素的平均值替换,以减小后期光谱积分处理反演温度时的系统误差。由图可见,日间 $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉在不同切线高度下呈现出的光谱形状有所差异,这是因为不同的切线高度的大气温度不同。温度决定分子能级跃迁的玻尔兹曼分布,从而导致气辉辐射光谱带的形状随大气高度变化,大气温度越高,谱带中心处的辐射强度相对越低,而两翼处

的辐射强度相对越高。因此,可以通过气辉辐射光谱带的形状反演大气温度廓线信息。

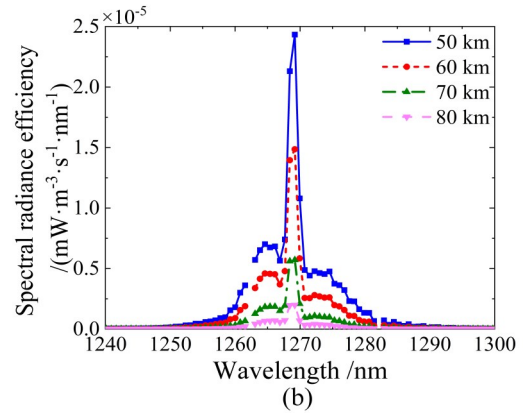
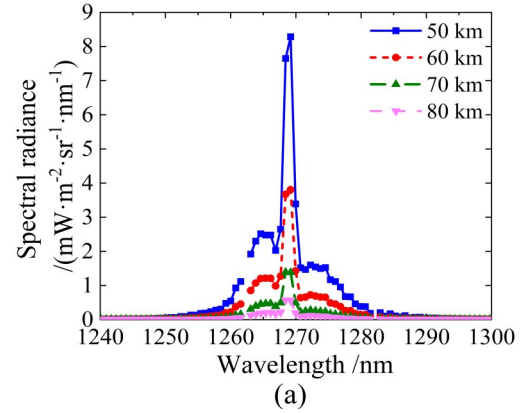


图6 不同临边高度下 $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉光谱辐射信号:(a)沿视线方向上的气辉光谱辐射强度;(b)目标层的气辉光谱辐射效率

Fig. 6 $O_2(a^1\Delta_g)$ airglow spectral radiance signal at different limb heights:(a) spectral radiance of airglow along the line of sight;(b) spectral radiance efficiency of airglow in the target layer

2.3 温度反演方法

在大气反演过程中,可以利用 $1.27 \mu m$ $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉谱带中各谱线温度敏感性的不同将其分为A波段(1 250~1 265 nm)、B波段(1 265~1 274 nm)和C波段(1 274~1 294 nm),其中A波段和C波段位于气辉谱带的两翼,其谱线强度随温度升高而增大;B波段位于气辉谱带的中心区域,其谱线强度随温度升高而降低。A、C两波段信号的总强度与B波段的信号强度随温度的变化关系如图7(a)所示。图7(b)显示了随着温度的增加,A、C两波段信号的总强度与B波段的信号强度的比值呈单调上升趋势。因此

可以通过测量三波段辐射强度并作比值处理从而实现大气温度的精确反演。根据波段强度比值与温度的数值关系,可以拟合得到如下函数:

$$T = 9.684 \times 10^{-6} \exp(16 \times R) + 65.5 \exp(2.35 \times R) \quad (11)$$

其中, R 为A、C两波段信号的总和与B波段信号的强度比值, T 为反演得到的大气温度。

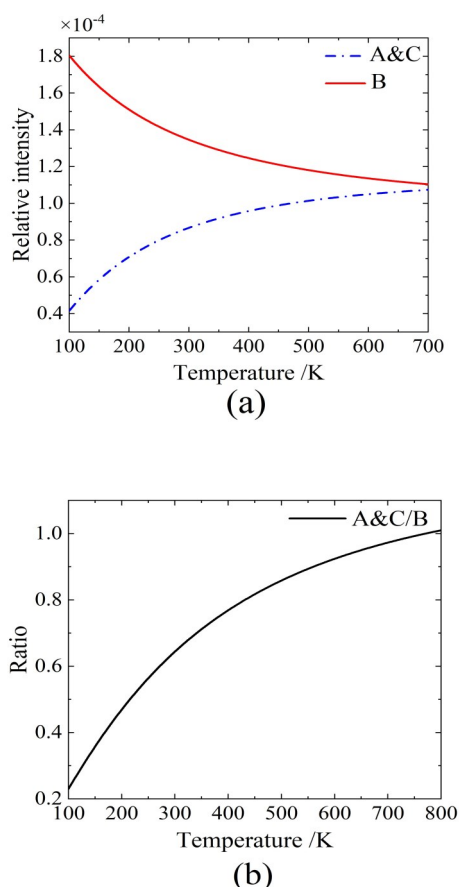


图7 $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉A、B、C波段相对辐射强度及其比值随温度的变化趋势:(a)A、C波段之和与B波段的相对强度随温度的变化趋势;(b)A、C波段之和与B波段相对强度的比值随温度的变化趋势

Fig. 7 The trend of relative radiant intensities of O_2 airglow in A, B and C bands and their ratios as a function of temperature: (a) the trend of the relative intensity of the sum of A and C bands and the relative intensity of B band as a function of temperature; (b) the trend of the ratio of the sum of relative intensity in A and C bands to the relative intensity in B band as a function of temperature

根据图6(b)所示的采用“剥洋葱”算法获取的 $1.27\ \mu\text{m}$ $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉在目标层的相对强度,结合公

式(11)给出的强度比值与温度的函数关系,即可反演得到大气温度廓线。在此需要指出的是,临近空间区域沿水平方向温度变化不明显,而温度随空间高度的变化十分显著。因此,遥感卫星一般采用临边观测探测温度廓线以获取较高的垂直分辨能力,当然可能会牺牲一定的水平分辨率。根据Rahnama等在SWIFT仪器设计的科学评估中建议,卫星遥感仪器的水平分辨率需优于 $400\sim 600\ \text{km}$,以便进行风温全球水平分布研究^[24]。SCIAMACHY临边观测下的水平分辨率为 $400\ \text{km}$,满足建立全球尺度的临近空间大气温度场三维分布数据库的条件。

3 对比

为评估利用 $1.27\ \mu\text{m}$ $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉反演临近空间大气温度廓线的可靠性与准确性,本节将利用不同技术手段实测的温度廓线数据对SCIAMACHY的反演结果进行对比验证,实测验证数据的来源包括采用天基探测平台的SABER、ACE-FTS卫星的遥感数据,以及地基探测平台的子午工程激光雷达的观测数据。由于不同卫星载荷、激光雷达独立运行且时空交汇概率较低,同时临近空间区域的大气温度场的时空变化较为显著,因此需要分别选取在相近时间以及经纬度贴合的数据进行对比,以确保比较结果的科学性和可靠性,从而进一步验证SCIAMACHY反演结果的准确性。

3.1 与SABER的比较

热层-电离层-中间层能量动力学卫星(Thermosphere Ionosphere Mesosphere Energetics Dynamics, TIMED)上搭载的宽带辐射大气测量仪(Sounding of the Atmosphere using Broadband Emission Radiometry, SABER)自2002年以来一直运行。SABER通过扫描测量 $15\ \mu\text{m}$ 和 $4.3\ \mu\text{m}$ CO_2 红外辐射来反演获得 $15\sim 110\ \text{km}$ 高度范围的大气温度,数据可靠性高,覆盖范围广。这里采用SABER v2.07温度数据,其垂直分辨率为 $2\ \text{km}$,温度误差在平流层下部为 $\pm 1.4\ \text{K}$,平流层中部为 $\pm 1\ \text{K}$,平流层上部和中间层为 $\pm 2\ \text{K}$,可以用来验证利用 $1.27\ \mu\text{m}$ $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉获得的温度反演结果。

图8绘制了2011年3月16日当地时间10时与4月7日当地时间8时,SCIAMACHY和SABER的温度廓线的测量结果以及二者在不同经纬度相对应(同颜色标注)的温度偏差。由于 O_2 红外波段气辉在低海拔自吸收效应显著(见图5),因此本节选取 $50\ \text{km}$ 作为温度廓线比较的下限。从图中可以看

出,SCIAMACHY 和 SABER 的温度反演结果在 55~85 km 范围内表现出较好的一致性,两个仪器的温度剖面偏差优于 ± 10 K。根据 Rochon 等利用加拿大中层大气模型进行的科学影响研究可知,温度的误差上限控制在 5~10 K,可以提高数据同化分析的精度和可靠性,从而改善天气预报系统的准确性^[25]。因此 SCIAMACHY 在该区域的温度反演结果具备较高的可靠性。在 85 km 以上的区域,随着高度的增加,SCIAMACHY 和 SABER 的温度廓线之间的差异愈加显著,其主要原因可能是高空区域存在 OH Meinel 波段气辉辐射,其与 O₂ 红外波段的气辉发生光谱重叠,对光谱信号造成污染,也会增加 SCIAMACHY 的反演误差。

3.2 与 ACE-FTS 的比较

为避免利用 SABER 验证 SCIAMACHY 反演结果的偶然性,我们同时采用大气化学试验卫星 (Atmospheric Chemistry Experiment, ACE) 上搭载的傅

里叶变换光谱仪 (ACE-FTS) 进行 SCIAMACHY 反演结果可靠性的验证。ACE-FTS 是一种太阳掩星高分辨率 (0.02 cm^{-1}) 仪器,自 2004 年 2 月以来一直通过太阳掩星探测地球大气,实现了近乎全球的覆盖^[26]。ACE-FTS 通过测量 CO₂ 透射率实现了 15~125 km 区域的温度反演。在反演过程中,对于 50 km 以下的高度假定 CO₂ 混合比为固定值,而在 50 km 以上的高度采用经验函数来描述 CO₂ 混合比,以确保反演结果的平滑性。这里采用 ACE-FTS 数据 4.1 版本的温度剖面来比较从 SCIAMACHY 气辉中反演得到的温度,其垂直分辨率限制为 3~4 km,精度达 1~3 K。

图 9(a) 比较了 SCIAMACHY (实线) 与 ACE-FTS (虚线) 反演得到的临近空间大气温度廓线。选取的 ACE-FTS 观测日期分别为 2011 年 3 月 1 日当地时间 5 时,以红线标注,2011 年 3 月 5 日当地时间 5 时,以蓝线标注,以及 2011 年 4 月 10 日当地时间 18

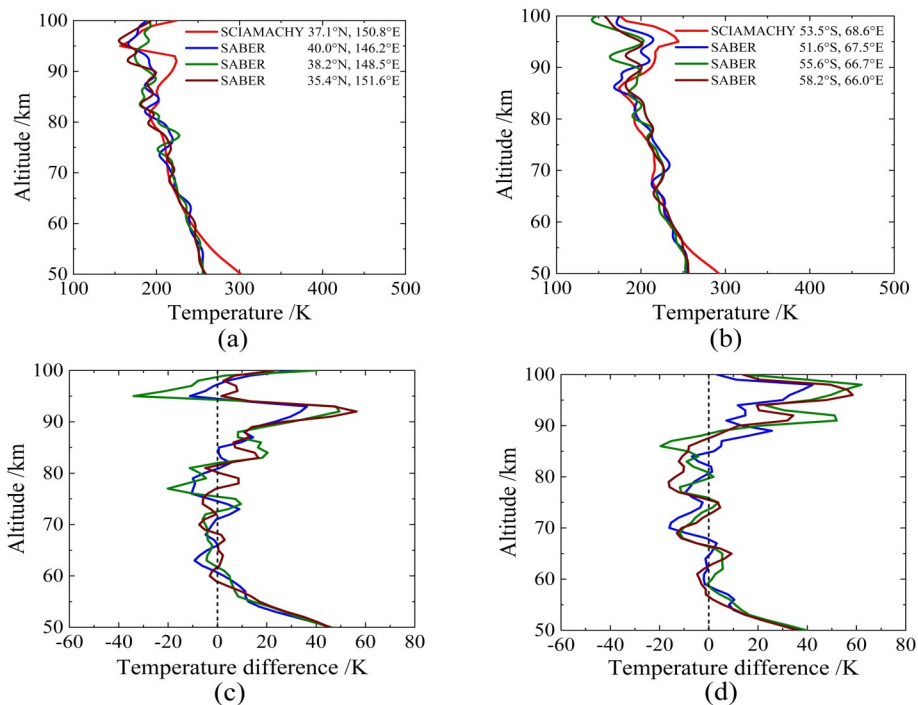


图 8 SCIAMACHY 卫星反演的温度廓线与 SABER 卫星的温度产品的对比以及二者相对应的温度差:(a) SCIAMACHY 与 SABER 在 2011 年 3 月 16 日当地时间 10 时相近位置的温度数据对比;(b) SCIAMACHY 与 SABER 在 2011 年 4 月 7 日当地时间 8 时相近位置的温度数据对比;(c) SCIAMACHY 与 SABER 在 2011 年 3 月 16 日的温度差;(d) SCIAMACHY 与 SABER 在 2011 年 4 月 7 日的温度差

Fig. 8 Comparison of temperature profiles retrieved from SCIAMACHY with temperature products from SABER and its corresponding temperature difference: (a) comparison of temperature data between SCIAMACHY and SABER at close positions at 10:00 local time on March 16, 2011; (b) comparison of temperature data between SCIAMACHY and SABER at close positions at 8:00 local time on April 7, 2011; (c) temperature difference between SCIAMACHY and SABER on March 16, 2011; (d) temperature difference between SCIAMACHY and SABER on April 7, 2011

时,以绿线标注,其与 SCIAMACHY 的数据测量时间差在 1 小时以内。图 9(b) 显示了 SCIAMACHY 与 ACE-FTS 反演得到的温度廓线之间的温度差。从图中可以看出,在 55~85 km 之间的区域,SCIAMACHY 与 ACE-FTS 之间的温度偏差优于 ± 10 K,其温度分布吻合性较好。而在 85 km 以上空间区域,SCIAMACHY 与 ACE-FTS 反演结果之间的差别增大。此外,对于 50 km 左右的高度区域,两者的反演结果也有较大差异,主要原因是低空区域 O_2 自吸收效应以及大气散射对 SCIAMACHY 温度反演的影响较大引起的。

3.3 与激光雷达的比较

地基探测结果与天基遥感结果进行对比,也是验证反演算法准确性的重要方式。瑞利散射激光雷达技术能够探测平流层区域的大气温度廓线数据,与 SCIAMACHY 反演得到的温度廓线在空间高度上有一定区域的覆盖,可以相互印证测量精度。位于北京延庆(40.47°N , 115.97°E)的子午工程激光雷达可以通过探测激光与大气相互作用后的瑞利散射回波信号探测 30~60 km 范围的大气温度,可以作为评估 SCIAMACHY 反演结果的参考。

由于激光雷达只在夜间采取数据,而 SCIAMACHY 主要反演日间温度,因此我们选择两者探测时间相近的数据结果进行比较。具体地,一般要求 SCIAMACHY 与激光雷达的观测时间相差不超过 100 分钟,以避免长时间差导致反演结果不匹配的问题。图 10 显示了激光雷达在 2011 年 1 月 23 日当地时间 4 时获取的大气温度数据与 SCIAMACHY 在反演得到的温度分布的比较。从图中可以看出,55~60 km 范围内二者温度分布一致性较好,温度误差 $< \pm 5$ K,其影响因素可能是两个仪器之间的观测时间存在一定差距导致的。

4 结论

本文使用“剥洋葱”算法,对 SCIAMACHY 临近测量的 O_2 红外波段气辉进行处理,反演得到了临近空间区域(50~100 km)的大气温度廓线,并与其他卫星遥感数据以及地基激光雷达数据进行了对比,验证了反演结果的科学性及其准确性。

首先基于 $O_2(a^1\Delta_g)$ 的光化学产生机理,计算得到了 $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉的临边辐射光谱,并研究了气辉的光谱分布特征以及气辉谱线随温度的变化规律。然后采用“剥洋葱”算法对 SCIAMACHY 临边测量的 $1.27 \mu\text{m}$ $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉辐射光谱进行处理,得到了目

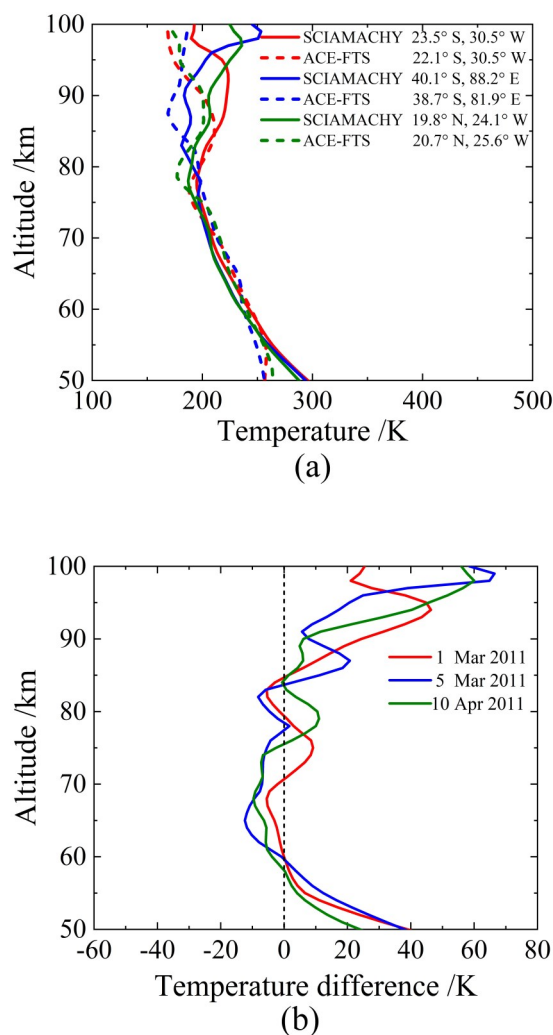


图 9 SCIAMACHY 卫星反演的温度廓线与 ACE-FTS 卫星的温度产品的对比以及两者的温度差:(a) SCIAMACHY 与 ACE-FTS 的温度廓线对比;(b) SCIAMACHY 与 ACE-FTS 之间的温度差

Fig. 9 Comparison of temperature profiles retrieved from SCIAMACHY with temperature products from ACE-FTS and the temperature difference between the two: (a) comparison of temperature profiles between SCIAMACHY and ACE-FTS; (b) temperature difference between SCIAMACHY and ACE-FTS

标层的气辉辐射光谱强度,并结合其与大气温度的函数关系,成功反演了临近空间大气温度廓线。最后通过与 SABER、ACE-FTS 等卫星的遥感数据以及子午工程激光雷达的观测数据进行对比,验证了在中间层空间区域内利用 $1.27 \mu\text{m}$ $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉反演温度的准确性与可靠性,对比结果表明在这个空间范围内,采用“剥洋葱”算法处理 SCIAMACHY 仪器

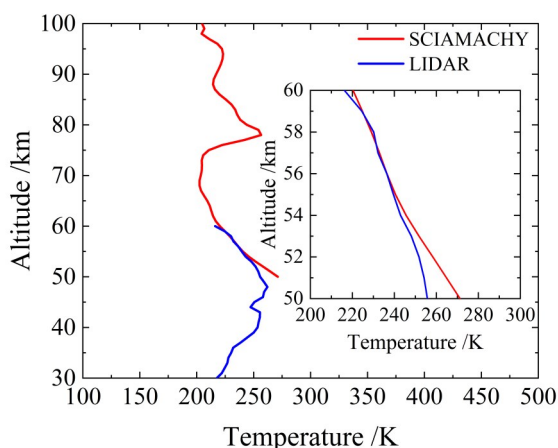


图10 SCIAMACHY卫星反演的温度廓线与子午工程激光雷达的温度产品之间的对比情况

Fig. 10 Comparison of temperature profiles retrieved from SCIAMACHY with temperature products from Meridian Engineering Lidar

的 O_2 红外波段气辉数据进行温度反演的误差在10 K以内。研究中还发现, $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉在50 km附近受到自吸收效应和大气散射的影响,而在85 km以上受到OH气辉的光谱干扰,这些影响因素会导致SCIAMACHY在反演温度时出现结果异常现象。

1. $27\ \mu\text{m}\ O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉在临近空间探测方面的优越性能,表明了其在星载探测中的巨大科学价值和工程意义,将成为研究临近空间这一航空航天过渡区域的温度遥感的有利工具,并有助于促进光化学耦合物理机制的理解。在未来的工作中,我们将重点解决 $1.27\ \mu\text{m}\ O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉在60 km以下区域受自吸收效应影响,以及在85 km以上受OH气辉光谱污染影响两个技术难题,开发一种消除自吸收效应和光谱污染影响的反演算法,以进一步完善利用 $1.27\ \mu\text{m}\ O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉反演温度的精度。

References

- [1] Wang W Q, Cai J Y, Peng Q C, *et al.* Near-space microwave radar remote sensing: potentials and challenge analysis [J]. *Remote sensing*, 2010, **2**(3): 717-739.
- [2] YANG Xiao-Jun, WNAG Hou-Mao, LI Ye-Fei, *et al.* Temperature in the near space from the emission spectra of oxygen A band [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis* (杨晓君, 王后茂, 李叶飞, 等. 基于氧气A波段发射谱线临近空间大气温度的反演及分析 [J]. *光谱学与光谱分析*), 2021, **41**(01): 5-10.
- [3] WANG Yu, ZHANG Xian-Zhong, WU Tong, *et al.* Research on Atmospheric Temperature Retrieval Based on Rayleigh Lidar Using Optimal Estimation Method [J]. *Chinese Journal of Space Science* (王煜, 张献中, 吴同, 等. 基于最优估计法的瑞利激光雷达反演大气温度研究

- [J]. *空间科学学报*), 2023, **43**(04): 627-639.
- [4] Liu F C, Wang R, Yi F, *et al.* Pure rotational Raman lidar for full-day troposphere temperature measurement at Zhongshan Station (69.37°S , 76.37°E), Antarctica [J]. *Optics express*, 2021, **29**(7): 10059-10076.
- [5] Stober G, Chau J L, Vieriner J, *et al.* Retrieving horizontally resolved wind fields using multi-static meteor radar observations [J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2018, **11**(8): 4891-4907.
- [6] SONG Ping. Analysis of atmospheric environment characteristics of China's near space based on satellite, rocket and balloon exploration Data [D]. Hunan, Changsha: National University of Defense Technology (宋平. 基于卫星、火箭和气球探测资料的我国临近空间大气环境特征分析 [D]. 湖南,长沙:国防科技大学), 2020.
- [7] DU Ming-Bin, CUI Lin-Li, LU Feng, *et al.* Quality evaluation of FY-4A/GIIRS atmospheric temperature profile [J]. *Journal of Infrared and Millimeter Waves* (杜明斌, 崔林丽, 陆风, 等. FY-4A/GIIRS 大气温度廓线产品质量评估 [J]. *红外与毫米波学报*), 2023, **42**(3): 399-409.
- [8] LI Cun-Xia, LIU Yang-He, LI Zi-Jian, *et al.* MTF study of GBaII for detecting airglow 90~100 km above the earth [J]. *Acta Photonica Sinica* (李存霞, 刘洋河, 李子健, 等. GBaII探测地球上空90~100 km气辉MTF研究 [J]. *光子学报*), 2022, **51**(03): 290-297.
- [9] HE Wei-Wei, WU Kui-Jun, WANG Shu-Na, *et al.* Observation technology of wind and temperature by onboard imaging interferometer with $1.27\ \mu\text{m}$ airglow [J]. *Optics & Optoelectronic Technology* (何微微, 武魁军, 王姝娜, 等. $1.27\ \mu\text{m}$ 气辉的星载成像干涉仪风温探测技术 [J]. *光学与光电技术*), 2019, **17**(02): 72-78.
- [10] Sheese P E, Strong G K, Llewellyn E J, *et al.* Assessment of the quality of OSIRIS mesospheric temperatures using satellite and ground-based measurements [J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2012, **5**(12): 2993-3006.
- [11] HU Xiang-Rui, LI Fa-Quan, WANG Hou-Mao, *et al.* Retrieval and verification of mid upper atmospheric temperature from MIGHTI/ICON satellite [J]. *Acta Optica Sinica* (胡向瑞, 李发泉, 王后茂, 等. MIGHTI/ICON卫星的中高层大气温度反演与验证 [J]. *光学学报*), 2023, **43**(12): 63-71.
- [12] Ward W E, Gault W A, Shepherd G G, *et al.* Waves Michelson interferometer: a visible/near-IR interferometer for observing middle atmosphere dynamics and constituents [J]. *Proceedings of SPIE-The International Society for Optical Engineering*, 2001, **4540**: 100-111.
- [13] He W W, Wu K J, Feng Y T, *et al.* The near-space wind and temperature sensing interferometer: forward model and measurement simulation [J]. *Remote Sensing*, 2019, **11**(8): 914.
- [14] Wu K J, Fu D, Feng Y T, *et al.* Simulation and application of the emission line $O_{19}P_{18}$ of $O_2(a^1\Delta_g)$ dayglow near $1.27\ \mu\text{m}$ for wind observations from limb-viewing satellites [J]. *Optics Express*, 2018, **26**(13): 16984-16999.
- [15] Yankovsky V A, Martyshenko K V, Manuilova R O, *et al.* Oxygen dayglow emissions as proxies for atomic oxygen and ozone in the mesosphere and lower thermosphere [J]. *Journal of Molecular Spectroscopy*, 2016, **327**: 209-231.
- [16] Martyshenko K V, Yankovsky V A. IR Band of O_2 at 1.27

- μm as the Tracer of O_3 in the Mesosphere and Lower Thermosphere: Correction of the Method [J]. *Geomagnetism and Aeronomy*, 2017, **57**: 229–241.
- [17] Gordon I E, Rothman L S, Hill C, *et al.* The HITRAN 2016 molecular spectroscopic database [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2017, **203**: 3–69.
- [18] Emmert J T, Drob D P, Picone J M, *et al.* NRLMSIS 2.0: A whole-atmosphere empirical model of temperature and neutral species densities [J]. *Earth and Space Science*, 2021, **8**(3): e2020EA001321.
- [19] He W W, Hu X R, Wang H M, *et al.* Influence of scattered sunlight for wind measurements with the $O_2(a^1\Delta_g)$ dayglow [J]. *Remote Sensing*, 2023, **15**(1): 232.
- [20] WU Kui-Jun, WU Chuan-Hang, HU Xiang-Rui, *et al.* Hyperspectral-resolved radiative transmission theory of $O_2(a^1\Delta_g)$ dayglow on Mars [J]. *Chinese Journal of Geophysics* (武魁军, 吴传航, 胡向瑞, 等. 火星 $O_2(a^1\Delta_g)$ 气辉高光谱分辨辐射传输特性研究 [J]. *地球物理学报*), 2023, **66**(5): 1864–1875.
- [21] Wu K J, He W W, Feng Y T, *et al.* Effect of OH emission on the temperature and wind measurements derived from limb-viewing observations of the $1.27 \mu\text{m}$ O_2 dayglow [J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2020, **13**(4): 1817–1824.
- [22] Zarbo A, Bender S, Burrows J P, *et al.* Retrieval of $O_2(^1\Sigma)$ and $O_2(^1\Delta)$ volume emission rates in the mesosphere and lower thermosphere using SCIAMACHY MLT limb scans [J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2018, **11**(1): 473–487.
- [23] Sun K, Yousefi M, Miller C C, *et al.* An optimal estimation-based retrieval of upper atmospheric oxygen airglow and temperature from SCIAMACHY limb observations [J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2022, **15**(12): 3721–3745.
- [24] Rahnama P, Gault W A, Mcdade I C, *et al.* Scientific Assessment of the SWIFT Instrument Design [J]. *Journal of Atmospheric & Oceanic Technology*, 2013, **30**(9): 2081–2094.
- [25] Rochon Y J, Rahnama P, Mcdade I C. Satellite Measurement of Stratospheric Winds and Ozone Using Doppler Michelson Interferometry. Part II: Retrieval Method and Expected Performance [J]. *Journal of Atmospheric & Oceanic Technology*, 2006, **23**(6): 770.
- [26] Boone C D, Bernath P F, Cok D, *et al.* Version 4 Retrievals for the Atmospheric Chemistry Experiment Fourier Transform Spectrometer (ACE-FTS) and Imagers [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2020, **247**: 106939.