

# 臭氧吸收参数数据库精度检验和验证<sup>\* 1</sup>

黄富祥<sup>1</sup> 徐永福<sup>2</sup> 王维和<sup>1</sup> 董超华<sup>1</sup>

1 中国气象局中国遥感卫星辐射测量和定标重点开放实验室;国家卫星气象中心,北京,100081

2 中国科学院大气物理研究所大气边界层物理和大气化学国家实验室,北京,100029

## 摘 要

利用国际权威期刊上发表的臭氧吸收截面观测数据,检验和验证了现有的紫外正演模式 TOMRAD 臭氧吸收参数数据库。结果表明,在 Hartley 臭氧吸收带上,观测数据与数据库参数吻合状况很好;而在 Huggins 臭氧吸收带上,观测数据与数据库参数在部分波长上存在较大偏差,某些波长上的偏差超过 50%。鉴于此,FY-3 紫外臭氧探测仪资料处理计算中,选取臭氧吸收参数,必须特别慎重。

**关键词:** 臭氧, 分子吸收截面, 臭氧吸收带, TOMRAD 模式。

## 1 引 言

臭氧是大气中一种极其重要的微量气体。美国气象卫星从 1970 年开始尝试携带星载紫外臭氧探测仪,利用紫外后向散射技术探测大气臭氧,目前第四代卫星紫外臭氧探测仪 TOMS 和 SBUV/2 仍在业务运行中。现正在研制中的中国第二代极地轨道气象卫星 FY-3,也将携带类似的紫外臭氧探测仪。紫外后向散射技术探测大气臭氧的物理基础是,利用臭氧在太阳光紫外波段不同波长上吸收能力的不同而导致的后向散射辐射强度的差异,推断不同高度大气层的臭氧量<sup>[1-2]</sup>。大气臭氧探测的精度,在很大程度上依赖于臭氧吸收系数的计算精度。计算臭氧吸收系数,除了必须获得准确的臭氧吸收截面数据外,还要考虑臭氧在大气层中的分层分布以及大气温度廓线对臭氧吸收截面的影响,为此,必须开展不同温度下大气臭氧分子吸收的观测实验,并建立臭氧吸收截面随温度的精确函数关系。目前,FY-3 号紫外臭氧探测仪资料处理预研究正在进行中,首先必须解决的一个基础成问题是检验和确认现有模式中的臭氧吸收特性参数的准确性。

从 20 世纪 60 年代开始,国际上就开展了一系列的臭氧分子吸收观测实验,并探讨了臭氧吸收截

面随温度的变化规律<sup>[3-11]</sup>。研究表明,温度对臭氧分子吸收截面的影响在不同的吸收带上存在差异,在 Hartley 臭氧强吸收带(200—310 nm)上,温度对臭氧吸收的影响很弱,而在 Huggins 臭氧弱吸收带(310—350 nm)上,温度对臭氧吸收的影响却很显著,臭氧吸收截面随着温度的升高而增大。臭氧分子吸收截面随温度的变化规律是一个极其重要的研究课题,Voigt 等<sup>[11]</sup>根据对观测数据的最小二乘拟合,给出了一个依赖于波长的 3 参数指数拟合曲线;Malicet 等<sup>[9]</sup>则给出了在波长固定条件下,臭氧吸收截面随温度变化的二次多项式拟合曲线,并表明采用更高次多项式的曲线并不能提高拟合的精度;NESDIS 组织开展的大量观测实验研究<sup>[3-5]</sup>,也是采用二次多项式的拟合曲线,建立针对各个波长的二次多项式臭氧吸收系数数据库<sup>[12]</sup>,满足紫外臭氧资料处理的需要。近年来,国际期刊上又相继发表了大量的臭氧分子吸收截面观测数据<sup>[6-10]</sup>,这些研究大多侧重于数据本身,很少探讨臭氧吸收截面随温度的变化特性<sup>[13-14]</sup>。其中,法国科学家获得的数据,光谱分辨率更高,谱区范围更广,精度更优<sup>[8-10]</sup>。本文利用文献<sup>[9]</sup>中的数据,检验现有 TOMRAD 模式中臭氧吸收数据库中部分波长上的参数精度,为 FY-3 紫外臭氧探测仪的资料处理创造有利条件。

\* 初稿时间:2005 年 6 月 27 日;修改稿时间:2005 年 9 月 16 日。

资助课题:国家卫星气象中心事业课题《星载紫外臭氧探测仪及其反演方法研究》。

作者简介:黄富祥,1967 年生,博士。从事卫星遥感研究。email:hfx@nsmc.cma.gov.cn

## 2 基本数据

### 2.1 TOMRAD 臭氧吸收数据库

为了适应 TOMS 和 SBUV(/2) 等紫外臭氧探测仪正演模拟计算的需要, NESDIS 先后开发并不断改进了不同版本的 TOMRAD 计算模式。我们现有 TOMRAD V2.24 版本, 是由 Celarier 和 Flittner 在 2001 年开发的新版本, TOMRAD 软件包中链接有一个数据库文件 coe.dat, 给出臭氧吸收参数。臭氧吸收参数是在给定波长下, 臭氧分子吸收截面随温度的变化采用二次多项式拟合:

$$\sigma(\lambda) = C_0 + C_1 t + C_2 t^2$$

其中  $\sigma$  为波长  $\lambda$  对应的吸收截面,  $t$  为摄氏温度,  $C_0, C_1$  和  $C_2$  为一组拟合参数<sup>[9]</sup>。

数据库文件 coe.dat 针对各个波长, 列出了参数组  $C_0, C_1$  和  $C_2$  的取值。该参数库具有如下基本特点: (1) 光谱分辨率主要为 0.05 nm, 少数谱区为 1 nm; (2) 不同的数据库在数据覆盖范围上存在差异, 根据计算波长选择相应的数据库; (3) 不同的数据库在相同的谱区上保持一致性; (4) 为了便于直接利用气压计算臭氧吸收截面, 参数量纲转化为  $\text{atm}^{-1} \text{cm}^{-1}$ 。

### 2.2 臭氧吸收截面观测数据的来源及其特征

本文用来检验 TOMRAD 参数精度的不同温度下的臭氧吸收截面观测数据, 来源于法国科学家 Malicet 等 1995 年发表的论文数据, 基本特征见表 1。

表 1 臭氧吸收截面观测数据的基本特征<sup>[9]</sup>

Table 1 Characteristics of the ozone absorption cross-section observing data

观测温度 (K)	谱区范围 (nm)	光谱分辨率 (nm)	数据精度
218	195—650	0.01	在 Hartley 带上绝对误差大约 1.3%—1.5%;
228	195—520	0.01	
243	195—519	0.01	在 Huggins 带上大约 1.3%—3.5%。
273	299—520	0.01	
295	195—830	0.01	

## 3 研究方法

### 3.1 臭氧吸收截面对温度的回归拟合

分别在 Hartley 和 Huggins 带选取部分波长, 利用文献[9]中的臭氧吸收截面数据, 建立臭氧吸收截面对温度的回归方程, 考察臭氧吸收截面随温度的变化规律, 并将拟合结果与 TOMRAD 模式参数

进行比较。

### 3.2 TOMRAD 臭氧吸收参数的检验

为了进一步检验或验证现有臭氧吸收参数库的正确性, 选取部分波长, 利用 TOMRAD 臭氧吸收参数, 计算不同温度下的臭氧分子吸收截面, 将计算结果与文献[9]实测数据进行比较。

## 4 结果与分析

### 4.1 臭氧吸收截面对温度的拟合

为了考察臭氧吸收截面的温度变化特征, 分别在 Hartley 和 Huggins 臭氧吸收带随机选取部分波长, 利用文献[9]在 4—5 个温度下的观测数据, 采用二次多项式的模型形式, 建立臭氧吸收截面对温度的回归方程。拟合结果列于表 2 和表 3。

从表 2 和 3 可见, 在 Hartley 和 Huggins 臭氧吸收带随机选取的部分波长上, 采用二次多项式形式得到的回归方程, 除了极少数波长外, 在其他波长相关系数都非常高, 说明模型拟合效果比较理想。

为了检验 TOMRAD 模式臭氧吸收参数, 将表 2 和 3 中得到的二次多项式拟合系数与 TOMRAD 模式中相同(或相近)波长上的吸收参数进行比较。由于表 2 和 3 中的参数  $C_0, C_1$  和  $C_2$  量纲分别为分子<sup>-1</sup>、分子<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup>和分子<sup>-1</sup>·K<sup>-2</sup>, 而 TOMRAD 模式相应各参数量纲分别为  $\text{atm}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$ ,  $\text{atm}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$  和  $\text{atm}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-2}$ , 存在差异, 而 1 atm·cm 气柱臭氧包含  $2.6868 \times 10^{19}$  个臭氧分子, 为此, 首先必须转化表 2 和表 3 中的参数量纲。统一量纲后的比较结果见表 4 和表 5。

表 4 和表 5 中的偏差百分率的计算公式为: [本文拟合 - TOMRAD 模式] / TOMRAD 模式 × 100%。从表 4 和 5 可见, 本文得到的拟合参数与 TOMRAD 模式臭氧吸收参数库数据, 存在一些差别。造成差别的主要因素主要有: (1) 参数拟合过程中的误差, 可能导致比较结果一定程度上的差异, 实际上, 表 2 和 3 中用来回归的样本点数目只有 4 或 5 个, 拟合结果的代表性不十分充足; (2) 本文拟合的波长与 TOMRAD 模式数据库波长存在微小差异, 表中的比较并不是严格相同波长之间的比较, 这可能也造成了比较结果的差异; (3) 在大多数情况下, 表 4 中的差异大于表 5, 这可能与臭氧在 Hartley 带的吸收强于在 Huggins 带有关。基于这些原因, 要从表 4 和 5 的比较结果, 来推断 TOMRAD 模式参数的精度, 存在比较大的困难。

表 2 Hartley 吸收带部分波长臭氧吸收截面对温度的回归参数

Table 2 Regression coefficients of ozone absorption cross-section at some wavelengths in Hartley band to temperature

波长(nm)	$C_0$	$C_1$	$C_2$	$R^2$	样本数
245.5	$1 \times 10^{-17}$	$-3 \times 10^{-21}$	$-3 \times 10^{-23}$	0.9988	4
247.5	$1 \times 10^{-17}$	$-3 \times 10^{-21}$	$-4 \times 10^{-23}$	0.7271	4
250.0	$1 \times 10^{-17}$	$-3 \times 10^{-21}$	$-4 \times 10^{-23}$	0.7271	4
257.0	$1 \times 10^{-17}$	$5 \times 10^{-23}$	$5 \times 10^{-23}$	0.8516	4
280.5	$4 \times 10^{-18}$	$2 \times 10^{-21}$	$-2 \times 10^{-24}$	0.9950	4
285.0	$2 \times 10^{-18}$	$1 \times 10^{-21}$	$7 \times 10^{-24}$	0.9988	4
290.5	$1 \times 10^{-18}$	$1 \times 10^{-21}$	$2 \times 10^{-24}$	0.9988	4
300.0	$4 \times 10^{-19}$	$7 \times 10^{-22}$	$5 \times 10^{-24}$	0.9724	5
305.5	$2 \times 10^{-19}$	$4 \times 10^{-22}$	$3 \times 10^{-24}$	1.0000	5
310.0	$9 \times 10^{-20}$	$3 \times 10^{-23}$	$2 \times 10^{-24}$	0.9965	5

表 3 Huggins 吸收带部分波长臭氧吸收截面对温度的回归参数

Table 3 Regression coefficients of ozone absorption cross-section at some wavelengths in Huggins band to temperature

波长(nm)	$C_0$	$C_1$	$C_2$	$R^2$	样本数
311.0	$9 \times 10^{-20}$	$3 \times 10^{-22}$	$2 \times 10^{-24}$	0.9973	5
314.5	$5 \times 10^{-20}$	$2 \times 10^{-22}$	$1 \times 10^{-24}$	0.9959	5
318.5	$3 \times 10^{-20}$	$1 \times 10^{-22}$	$9 \times 10^{-25}$	0.9954	5
321.5	$2 \times 10^{-20}$	$9 \times 10^{-23}$	$6 \times 10^{-25}$	0.9989	5
328.0	$1 \times 10^{-20}$	$3 \times 10^{-23}$	$3 \times 10^{-25}$	0.9845	5
335.5	$1 \times 10^{-21}$	$2 \times 10^{-23}$	$1 \times 10^{-25}$	0.9998	5
339.0	$1 \times 10^{-21}$	$1 \times 10^{-23}$	$6 \times 10^{-26}$	0.9995	5
345.5	$5 \times 10^{-22}$	$8 \times 10^{-24}$	$7 \times 10^{-26}$	0.9776	5
347.5	$4 \times 10^{-22}$	$3 \times 10^{-24}$	$3 \times 10^{-26}$	0.9774	5
349.5	$3 \times 10^{-22}$	$5 \times 10^{-24}$	$3 \times 10^{-26}$	0.9984	5

表 4 Hartley 吸收带部分波长拟合参数与 TOMRAD 参数比较

Table 4 Comparison of the fitted coefficients at some wavelengths in Hartley band with that of TOMRAD model

波长(nm)	参数比较	$C_0$	$C_1$	$C_2$
245.5	本文拟合	$2.69 \times 10^2$	$-8.06 \times 10^{-2}$	$-8.06 \times 10^{-4}$
245.542	TOMRAD 模式	$2.74 \times 10^2$	$-6.60 \times 10^{-2}$	$-6.27 \times 10^{-4}$
	偏差百分率(%)	-1.82	22.1	28.5
247.5	本文拟合	$2.69 \times 10^2$	$-8.06 \times 10^{-2}$	$-1.07 \times 10^{-3}$
247.543	TOMRAD 模式	$2.86 \times 10^2$	$-5.87 \times 10^{-2}$	$-5.24 \times 10^{-4}$
	偏差百分率(%)	-5.94	37.3	104.0
250.0	本文拟合	$2.69 \times 10^2$	$-8.06 \times 10^{-2}$	$-1.07 \times 10^{-3}$
250.037	TOMRAD 模式	$3.00 \times 10^2$	$-3.63 \times 10^{-2}$	$-2.01 \times 10^{-4}$
	偏差百分率(%)	-10.3	122.0	432.0
257.0	本文拟合	$2.69 \times 10^2$	$1.34 \times 10^{-3}$	$1.34 \times 10^{-3}$
257.038	TOMRAD 模式	$3.03 \times 10^2$	$-2.07 \times 10^{-2}$	$3.53 \times 10^{-5}$
	偏差百分率(%)	-11.2	-106.0	3700.0
280.5	本文拟合	$1.07 \times 10^2$	$5.37 \times 10^{-2}$	$-5.37 \times 10^{-5}$
280.543	TOMRAD 模式	$1.00 \times 10^2$	$2.57 \times 10^{-2}$	$-5.44 \times 10^{-4}$
	偏差百分率(%)	7.0	109.0	-90.1
285.0	本文拟合	$5.37 \times 10^1$	$2.69 \times 10^{-2}$	$1.88 \times 10^{-4}$
285.043	TOMRAD 模式	$6.55 \times 10^1$	$3.24 \times 10^{-2}$	$-6.26 \times 10^{-5}$
	偏差百分率(%)	-18.0	-17.0	-400.0
290.5	本文拟合	$2.69 \times 10^1$	$2.69 \times 10^{-2}$	$5.37 \times 10^{-5}$
290.544	TOMRAD 模式	$3.54 \times 10^1$	$2.58 \times 10^{-2}$	$1.60 \times 10^{-5}$
	偏差百分率(%)	-24.0	4.26	236.0

续表 4

波长(nm)	参数比较	$C_0$	$C_1$	$C_2$
300.0	本文拟合	$1.07 \times 10^1$	$1.88 \times 10^{-2}$	$1.34 \times 10^{-4}$
300.039	TOMRAD 模式	$1.01 \times 10^1$	$1.95 \times 10^{-2}$	$1.29 \times 10^{-4}$
	偏差百分率(%)	5.94	-3.59	3.88
305.5	本文拟合	5.37	$1.07 \times 10^{-2}$	$8.06 \times 10^{-5}$
305.54	TOMRAD 模式	4.70	$1.04 \times 10^{-2}$	$4.97 \times 10^{-5}$
	偏差百分率(%)	14.3	2.88	62.2
310.0	本文拟合	2.42	$8.06 \times 10^{-3}$	$5.37 \times 10^{-5}$
310.04	TOMRAD 模式	2.55	$6.73 \times 10^{-3}$	$2.90 \times 10^{-5}$
	偏差百分率(%)	-5.1	19.8	85.2

表 5 Huggins 吸收带部分波长拟合参数与 TOMRAD 参数比较

Table 5 Comparison of the fitted coefficients at some wavelengths in Huggins band with that of TOMRAD model

波长(nm)	参数比较	$C_0$	$C_1$	$C_2$
311.0	本文拟合	2.42	$8.06 \times 10^{-3}$	$5.37 \times 10^{-5}$
311.04	TOMRAD 模式	2.32	$5.64 \times 10^{-3}$	$1.98 \times 10^{-5}$
	偏差百分率(%)	4.31	42.9	171.00
314.5	本文拟合	1.34	$5.37 \times 10^{-3}$	$2.69 \times 10^{-5}$
314.54	TOMRAD 模式	1.33	$5.07 \times 10^{-3}$	$2.45 \times 10^{-5}$
	偏差百分率(%)	0.75	5.92	9.8
318.5	本文拟合	$8.06 \times 10^{-1}$	$2.69 \times 10^{-3}$	$2.42 \times 10^{-5}$
318.541	TOMRAD 模式	$7.29 \times 10^{-1}$	$3.32 \times 10^{-3}$	$2.60 \times 10^{-5}$
	偏差百分率(%)	10.6	-19	-6.92
321.5	本文拟合	$5.37 \times 10^{-1}$	$2.42 \times 10^{-3}$	$1.61 \times 10^{-5}$
321.542	TOMRAD 模式	$4.50 \times 10^{-1}$	$2.29 \times 10^{-3}$	$9.92 \times 10^{-6}$
	偏差百分率(%)	19.3	5.68	62.3
328.0	本文拟合	$2.69 \times 10^{-1}$	$8.06 \times 10^{-4}$	$8.06 \times 10^{-6}$
328.034	TOMRAD 模式	$3.36 \times 10^{-1}$	$5.93 \times 10^{-4}$	$4.11 \times 10^{-6}$
	偏差百分率(%)	-19.9	35.9	96.1
335.5	本文拟合	$2.69 \times 10^{-2}$	$5.37 \times 10^{-4}$	$2.69 \times 10^{-6}$
335.536	TOMRAD 模式	$3.94 \times 10^{-2}$	$4.92 \times 10^{-4}$	$2.77 \times 10^{-6}$
	偏差百分率(%)	-31.7	9.15	-2.89
339.0	本文拟合	$2.69 \times 10^{-2}$	$2.69 \times 10^{-4}$	$1.61 \times 10^{-6}$
339.028	TOMRAD 模式	$2.62 \times 10^{-2}$	$3.78 \times 10^{-4}$	$2.40 \times 10^{-6}$
	偏差百分率(%)	2.67	-28.8	-32.9
345.5	本文拟合	$1.34 \times 10^{-2}$	$2.15 \times 10^{-4}$	$1.88 \times 10^{-6}$
345.543	TOMRAD 模式	$1.40 \times 10^{-2}$	$1.80 \times 10^{-4}$	$7.50 \times 10^{-7}$
	偏差百分率(%)	-4.29	19.4	151
347.5	本文拟合	$1.07 \times 10^{-2}$	$8.06 \times 10^{-5}$	$8.06 \times 10^{-7}$
347.524	TOMRAD 模式	$1.02 \times 10^{-2}$	$9.36 \times 10^{-5}$	$9.14 \times 10^{-7}$
	偏差百分率(%)	4.9	-13.9	-11.8
349.5	本文拟合	$8.06 \times 10^{-3}$	$1.34 \times 10^{-4}$	$8.06 \times 10^{-7}$
349.528	TOMRAD 模式	$6.28 \times 10^{-3}$	$1.55 \times 10^{-4}$	$1.05 \times 10^{-6}$
	偏差百分率(%)	28.3	-13.5	-23.2

#### 4.2 TOMRAD 臭氧吸收参数的检验

为了排除臭氧吸收参数拟合过程中的误差,一种更加科学的比较方法是,利用 TOMRAD 吸收参数计算文献[9]中相应温度下的臭氧吸收截面,将计算结果与观测数据进行对比。在 Hartley 和 Huggins 吸收带上随机选取部分波长,计算结果与观测数据的比较见表 6 和表 7。

表 6 和表 7 中的偏差百分率计算公式为:(计算值-实测值)/实测值 $\times 100\%$ ,表中计算值和观测值所在的波长非常接近,比较结果应该十分可靠。从表 6 可见,在 Hartley 臭氧吸收带波长上,计算得到的臭氧分子吸收截面值与文献[9]实际观测值吻合的情况很好,偏差百分率都在 3% 以下,说明在 Hartley 吸收带上 TOMRAD 吸收参数值得信赖。从表 7 可

表 6 Hartley 吸收带部分波长吸收截面计算值与观测值比较  
Table 6 Comparison of the calculated ozone absorption cross-section at some wavelengths in Hartley band with that of observed data

	波长(nm)	温 度				
		218 K(-55 °C)	228 K(-45 °C)	243 K(-30 °C)	273 K(0 °C)	295 K(22 °C)
计算值	245.392	$1.021 \times 10^{-17}$	$1.021 \times 10^{-17}$	$1.019 \times 10^{-17}$	$1.012 \times 10^{-17}$	$1.004 \times 10^{-17}$
实测值	245.39	$1.011 \times 10^{-17}$	$1.002 \times 10^{-17}$	$1.010 \times 10^{-17}$	缺	$9.908 \times 10^{-18}$
偏差百分率(%)		1.0	1.9	0.9		1.3
计算值	246.092	$1.031 \times 10^{-17}$	$1.033 \times 10^{-17}$	$1.035 \times 10^{-17}$	$1.031 \times 10^{-17}$	$1.022 \times 10^{-17}$
实测值	246.09	$1.019 \times 10^{-17}$	$1.011 \times 10^{-17}$	$1.019 \times 10^{-17}$	缺	$1.006 \times 10^{-17}$
偏差百分率(%)		1.2	2.2	1.6		1.6
计算值	250.837	$1.105 \times 10^{-17}$	$1.104 \times 10^{-17}$	$1.103 \times 10^{-17}$	$1.100 \times 10^{-17}$	$1.102 \times 10^{-17}$
实测值	250.84	$1.093 \times 10^{-17}$	$1.085 \times 10^{-17}$	$1.095 \times 10^{-17}$	缺	$1.080 \times 10^{-17}$
偏差百分率(%)		1.1	1.7	0.73		2.0
计算值	251.887	$1.161 \times 10^{-17}$	$1.160 \times 10^{-17}$	$1.158 \times 10^{-17}$	$1.154 \times 10^{-17}$	$1.149 \times 10^{-17}$
实测值	251.89	$1.145 \times 10^{-17}$	$1.138 \times 10^{-17}$	$1.142 \times 10^{-17}$	缺	$1.130 \times 10^{-17}$
偏差百分率(%)		1.4	1.9	1.4		1.7
计算值	252.938	$1.135 \times 10^{-17}$	$1.137 \times 10^{-17}$	$1.138 \times 10^{-17}$	$1.135 \times 10^{-17}$	$1.128 \times 10^{-17}$
实测值	252.94	$1.121 \times 10^{-17}$	$1.116 \times 10^{-17}$	$1.118 \times 10^{-17}$	缺	$1.113 \times 10^{-17}$
偏差百分率(%)		1.3	1.9	1.8		1.4
计算值	253.038	$1.137 \times 10^{-17}$	$1.137 \times 10^{-17}$	$1.135 \times 10^{-17}$	$3.760 \times 10^{-19}$	$1.128 \times 10^{-17}$
实测值	253.04	$1.123 \times 10^{-17}$	$1.118 \times 10^{-17}$	$1.119 \times 10^{-17}$	缺	$1.111 \times 10^{-17}$
偏差百分率(%)		1.3	1.7	1.4		1.5
计算值	254.088	$1.153 \times 10^{-17}$	$1.151 \times 10^{-17}$	$1.149 \times 10^{-17}$	$1.146 \times 10^{-17}$	$1.146 \times 10^{-17}$
实测值	254.09	$1.141 \times 10^{-17}$	$1.136 \times 10^{-17}$	$1.135 \times 10^{-17}$	缺	$1.132 \times 10^{-17}$
偏差百分率(%)		1.1	1.3	1.2		1.2
计算值	300.088	$3.508 \times 10^{-19}$	$3.543 \times 10^{-19}$	$3.604 \times 10^{-19}$	$3.760 \times 10^{-19}$	$3.900 \times 10^{-19}$
实测值	300.09	$3.491 \times 10^{-19}$	$3.522 \times 10^{-19}$	$3.595 \times 10^{-19}$	$3.675 \times 10^{-19}$	$3.885 \times 10^{-19}$
偏差百分率(%)		0.49	0.60	0.25	2.3	0.39
计算值	305.44	$1.601 \times 10^{-19}$	$1.627 \times 10^{-19}$	$1.672 \times 10^{-19}$	$1.780 \times 10^{-19}$	$1.881 \times 10^{-19}$
实测值	305.44	$1.592 \times 10^{-19}$	$1.601 \times 10^{-19}$	$1.636 \times 10^{-19}$	$1.731 \times 10^{-19}$	$1.847 \times 10^{-19}$
偏差百分率(%)		0.57	1.6	2.2	2.8	1.8
计算值	310.79	$7.939 \times 10^{-20}$	$8.042 \times 10^{-20}$	$8.250 \times 10^{-20}$	$8.860 \times 10^{-20}$	$9.468 \times 10^{-20}$
实测值	310.79	$7.854 \times 10^{-20}$	$7.909 \times 10^{-20}$	$8.173 \times 10^{-20}$	$8.658 \times 10^{-20}$	$9.339 \times 10^{-20}$
偏差百分率(%)		1.1	1.7	0.94	2.3	1.4

见,在 Huggins 臭氧吸收带波长上,计算得到的臭氧分子吸收截面与文献[9]实际观测值的吻合情况,在部分波长上比较差,某些波长上偏差百分率甚至超过 50%,说明在臭氧 Huggins 吸收带上 TOMRAD 吸收参数无法得到文献[9]的观测数据的验证,鉴于文献[9]的观测精度更好、光谱分辨率更高,有理由怀疑 TOMRAD 在 Huggins 臭氧吸收带上的吸收参数的准确性。

## 5 结论与讨论

(1) 利用文献[9]随机选取的部分波长上的臭氧吸收截面数据,采用二次多项式模型,拟合得到臭氧吸收参数,这些拟合参数与 TOMRAD 模式数据库参数进行比较。结果表明:二者存在比较大的差异,且在 Hartley 带上的偏差一般大于在 Huggins 带上

的偏差,造成这种差异的原因可能有多种。利用文献[9]中极其有限的数据库样本,无法拟合得到可靠的臭氧吸收参数。

(2) 利用 TOMRAD 模式臭氧吸收参数直接计算的吸收截面数据,与文献[9]观测值进行的比较,排除了数据拟合误差,比较结果具有说服力。比较的结果表明:在 Hartley 带上,计算结果与观测值吻合情况良好,在随机选取的波长上数据偏差百分率都在 3% 以下;而在 Huggins 吸收带上,则存在比较大的偏差,部分波长上的偏差百分率甚至超过 50%。这说明 TOMRAD 模式中的臭氧吸收参数,在 Hartley 吸收带上值得信赖,而在 Huggins 吸收带上,则值得怀疑。

(3) 在 FY-3 紫外臭氧探测仪的臭氧吸收计算中,选用 Huggins 带上的臭氧吸收参数时,必须特别

表 7 Huggins 吸收带部分波长吸收截面计算值与观测值比较  
Table 7 Comparison of the calculated ozone absorption cross-section at some wavelengths in Huggins band with that of observed data

	波长 (nm)	温 度				
		218 K	228 K	243 K	273 K	295 K
计算值	310.89	$7.833 \times 10^{-20}$	$7.932 \times 10^{-20}$	$8.130 \times 10^{-20}$	$8.709 \times 10^{-20}$	$9.288 \times 10^{-20}$
实测值	310.89	$7.711 \times 10^{-20}$	$7.778 \times 10^{-20}$	$8.044 \times 10^{-20}$	$8.534 \times 10^{-20}$	$9.257 \times 10^{-20}$
偏差百分率 (%)		1.6	2.0	1.1	2.1	0.34
计算值	314.041	$5.272 \times 10^{-20}$	$5.335 \times 10^{-20}$	$5.470 \times 10^{-20}$	$5.881 \times 10^{-20}$	$6.301 \times 10^{-20}$
实测值	314.04	$4.979 \times 10^{-20}$	$5.070 \times 10^{-20}$	$5.282 \times 10^{-20}$	$5.652 \times 10^{-20}$	$6.209 \times 10^{-20}$
偏差百分率 (%)		5.9	5.2	3.6	4.1	1.5
计算值	320.091	$2.786 \times 10^{-20}$	$2.810 \times 10^{-20}$	$2.864 \times 10^{-20}$	$3.030 \times 10^{-20}$	$3.202 \times 10^{-20}$
实测值	320.09	$2.628 \times 10^{-20}$	$2.694 \times 10^{-20}$	$2.771 \times 10^{-20}$	$2.909 \times 10^{-20}$	$3.168 \times 10^{-20}$
偏差百分率 (%)		6.0	4.3	3.4	4.2	1.1
计算值	330.085	$2.813 \times 10^{-21}$	$2.943 \times 10^{-21}$	$3.207 \times 10^{-21}$	$3.982 \times 10^{-21}$	$4.761 \times 10^{-21}$
实测值	330.09	$3.097 \times 10^{-21}$	$3.231 \times 10^{-21}$	$3.557 \times 10^{-21}$	$4.193 \times 10^{-21}$	$4.963 \times 10^{-21}$
偏差百分率 (%)		-9.2	-8.9	-9.8	-5.0	-4.1
计算值	340.679	$1.024 \times 10^{-21}$	$1.042 \times 10^{-21}$	$1.101 \times 10^{-21}$	$1.340 \times 10^{-21}$	$1.616 \times 10^{-21}$
实测值	340.68	$9.023 \times 10^{-22}$	$9.049 \times 10^{-22}$	$1.030 \times 10^{-21}$	$1.247 \times 10^{-21}$	$1.462 \times 10^{-21}$
偏差百分率 (%)		13.5	15.2	6.9	7.5	10.5
计算值	344.056	$1.153 \times 10^{-21}$	$1.178 \times 10^{-21}$	$1.223 \times 10^{-21}$	$1.340 \times 10^{-21}$	$1.440 \times 10^{-21}$
实测值	344.06	$1.232 \times 10^{-21}$	$1.200 \times 10^{-21}$	$1.233 \times 10^{-21}$	$1.286 \times 10^{-21}$	$1.380 \times 10^{-21}$
偏差百分率 (%)		-6.4	-1.8	-0.81	4.2	4.3
计算值	348.493	$7.584 \times 10^{-23}$	$8.031 \times 10^{-23}$	$9.830 \times 10^{-23}$	$1.750 \times 10^{-22}$	$2.656 \times 10^{-22}$
实测值	348.49	$8.660 \times 10^{-23}$	$9.831 \times 10^{-23}$	$1.262 \times 10^{-22}$	$1.833 \times 10^{-22}$	$2.711 \times 10^{-22}$
偏差百分率 (%)		-12.4	-18.3	-22.1	-4.5	-2.0
计算值	349.895	$3.952 \times 10^{-23}$	$5.392 \times 10^{-23}$	$8.827 \times 10^{-23}$	$2.028 \times 10^{-22}$	$3.257 \times 10^{-22}$
实测值	349.9	$6.191 \times 10^{-23}$	$7.718 \times 10^{-23}$	$1.136 \times 10^{-22}$	$1.994 \times 10^{-22}$	$3.104 \times 10^{-22}$
偏差百分率 (%)		-36.2	-30.1	-22.3	1.7	4.9
计算值	350.079	$3.262 \times 10^{-23}$	$4.524 \times 10^{-23}$	$7.730 \times 10^{-23}$	$1.887 \times 10^{-22}$	$3.105 \times 10^{-22}$
实测值	350.08	$6.338 \times 10^{-23}$	$7.877 \times 10^{-23}$	$1.137 \times 10^{-22}$	$1.937 \times 10^{-22}$	$2.878 \times 10^{-22}$
偏差百分率 (%)		-48.5	-42.6	-32.0	58.1	7.9
计算值	350.14	$3.132 \times 10^{-23}$	$4.431 \times 10^{-23}$	$7.693 \times 10^{-23}$	$1.890 \times 10^{-22}$	$3.120 \times 10^{-22}$
实测值	350.14	$6.552 \times 10^{-23}$	$8.074 \times 10^{-23}$	$1.166 \times 10^{-22}$	$1.979 \times 10^{-22}$	$3.010 \times 10^{-22}$
偏差百分率 (%)		-52.2	-45.1	-34.0	-4.5	3.7

慎重。为了保证计算精度,有必要对臭氧紫外吸收带 Huggins 上较长波长的吸收参数重新计算。

致谢: 法国国家卫星气象中心 D. Paul 教授、文献作者 D. Daumont 教授和 J. Malicet 教授等提供了臭氧吸收截面观测数据,在此一并致谢。

### 参考文献

- [1] Dave J V, Mateer C L. A preliminary study on the possibility of estimating total atmospheric ozone from satellite measurements. *J Atmos Sci*, 1967, 24: 414-427
- [2] Mateer C L, Heath D F, Krueger A J. Estimation of total ozone from satellite measurements of backscattered ultraviolet earth radiance. *J Atmos Sci*, 1971, 28: 1307-1311
- [3] Bass A M, Paur R J. The ultraviolet cross-sections of ozone, I. Measurements. In: Zeferos C, Ghazi A, ed. *Atmospheric Ozone, Proceedings of the Quadrennial Ozone Symposium*. Halkidiki, Greece. D Reidel Hingham Mass 1985. 606-616
- [4] Freeman D E, Yoshino K, Esmond J R, et al. Absolute absorption cross-section measurements of ozone. In: Zeferos C, Ghazi A ed. *Atmospheric Ozone, Proceedings of the Quadrennial Ozone Symposium*. Halkidiki, Greece. D Reidel Hingham Mass 1985. 622-624
- [5] WMO. *Atmospheric Ozone 1985, Assessment of Our Understanding of the Processes Controlling its Present Distribution and Changes*, Rep 16, Global Ozone Res and Monit Proj. Geneva, Switzerland, 1986
- [6] Molina L T, Molina M J. Absolute absorption cross sections of ozone in the 185- to 350-nm wavelength range. *J Geophys Res*, 1986, 91(D13): 14501-14508
- [7] Cacciani M, Sarra A D, Fiocco G, et al. Absolute determination of the cross sections of ozone in the wavelength region 339-355 nm at temperatures 220-293K. *J Geophys Res*, 1989, 94(D6): 8485-8490
- [8] Brion J, Chakir A, Daumont D, et al. High-resolution laboratory absorption cross section of  $O_3$ : Temperature effect. *Chem Phys Lett*, 1993, 213(5,6): 610-612
- [9] Malicet J, Daumont D, Charbonnier J, et al. Ozone UV spec-

- troscopy II Absorption cross-sections and temperature dependence. *J Atmos Chem*, 1995, 21:263-273
- [10] Brion J, Chakir A, Charbonnier J, et al. Absorption spectra measurements for the ozone molecule in the 350-830 nm region. *J Atmos Chem*, 1998, 30:291-299
- [11] Voigt S, Orphal J, Bogumil K, et al. The temperature dependence (203-293 K) of the absorption cross sections of O<sub>3</sub> in the 230—850 nm region measured by Fourier-transform spectroscopy. *J Photochem Photobiol A: Chemistry*, 2001, 143:1-9
- [12] Celarier E A, Flittner D E. What you need to know to Run TOMRAD. *TOMRAD User Guide*, 2001.
- [13] Hudson R D. Critical review of ultraviolet photoabsorption cross sections for molecules of astrophysical and aeronomic interest. *Rev Geophys*, 1971, 9:305-407
- [14] Klenk K F. Absorption coefficients of ozone for the backscatter UV experiment. *Appl Opt*, 1980, 19:236-242

## CHECKING AND VALIDATING THE ABSORPTION COEFFICIENTS OF OZONE IN THE UV BAND

Huang Fuxiang<sup>1</sup> Xu Yongfu<sup>2</sup> Wang Weihe<sup>1</sup> Dong Chaohua<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Key Laboratory of Radiometric Calibration and Validation for Environmental Satellite, China Meteorological Administration, LRCVES/CMA, Beijing 100081

<sup>2</sup> State Key Laboratory of Atmospheric Boundary Layer Physics and Atmospheric Chemistry, Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029

### Abstract

The knowledge of the absorption coefficients of ozone in the UV band is of major importance for the monitoring of the atmospheric ozone layer using the solar backscattering ultraviolet technique. In order to gain significant measurements of atmospheric ozone, accurate ozone absorption coefficients should be derived from the high accurate laboratory measurements of absorption cross-section of ozone. To make sure the absorption coefficients are precise, it was checked and validated the now existing ozone coefficients bank in the American TOMRAD model using these high accurate and high resolution laboratory measurements data published in the international journals in the past few years.

From 1980s, many papers on laboratory absorption cross of ozone measurement data with different spectrum resolution and measurement accuracy were published in all kinds of international journals. Among these, data from French Brion, et al. have much more higher spectrum resolution and measurement accuracy than others.

First, some wavelengths were randomly selected from Hartley and Huggins band respectively. For every wavelength, the regression model of the ozone absorption cross-section to temperature was built with the widely used polynomial formulas and the ozone absorption coefficients for these wavelengths were obtained. To check the now existing ozone absorption coefficients, the calculated coefficients were compared with that from the American TOMRAD model coefficient bank.

Second, to validate the coefficients of the TOMRAD model, at these randomly selected wavelengths, the ozone absorption cross-section under the same temperature were calculated with that of Ozone UV Spectroscopy II Absorption cross-sections and temperature dependence, and the calculated data were compared with the laboratory measurement data in Ozone UV Spectroscopy II Absorption cross-sections and temperature dependence.

The results show that the calculated cross-section at Hartley band using coefficients from the TOMRAD model is quite consistent with that laboratory measurement from Ozone UV Spectroscopy II Absorption cross-sections and temperature dependence, the variance at most randomly selected wavelengths is smaller than 3%. However, in the Huggins band, the variance at most wavelengths is much more bigger, at some wavelengths, the variance is bigger than 50%. Since, data from Ozone UV Spectroscopy II Absorption cross-sections and temperature dependence have higher spectrum resolution and accurate than that data by Bass and Paur, from which the now existing ozone absorption coefficients were drawn. It is reasons to suspect the validity of the now existing ozone absorption coefficients at some wavelength in Huggins band.

**Key words:** Ozone, Molecular absorption cross-section, Ozone absorption band, TOMRAD model.