

臭氧卫星遥感六十年进展

赵少华¹, 杨晓钰², 李正强³, 王中挺¹, 张玉环¹, 王玉¹,
周春艳¹, 马鹏飞¹

1. 生态环境部卫星环境应用中心/国家环境保护卫星遥感重点实验室, 北京 100094;
2. 山东省济南生态环境监测中心, 济南 250101;
3. 中国科学院空天信息创新研究院, 北京 100101

摘要: 臭氧已成为中国继PM_{2.5}之后多地的首要污染物, 臭氧污染防治是中国“十四五”及未来大气污染防治的重点。本文回顾了近60年来国内外臭氧卫星观测方面的主要进展, 包括卫星探测载荷和臭氧相关的反演应用技术等, 分为3个阶段总结了卫星载荷天底、临边和掩星3种探测方式的发展历程。臭氧卫星遥感反演算法和监测应用也随着载荷的发展在不断更新, 本文重点介绍了臭氧柱总量和垂直廓线卫星遥感反演算法、近地面臭氧及其前体物观测、平流层臭氧入侵观测和区域传输、臭氧卫星观测数据的精度验证等方面的重要进展。对比国际臭氧卫星遥感监测, 中国臭氧监测卫星发展滞后, 虽然国家民用空间基础设施规划中陆续发射的高光谱观测卫星、大气环境监测卫星具有初步的臭氧监测能力, 但在卫星载荷在功能、性能等方面还有不小差距, 比如空间分辨率、信噪比等方面。在算法反演和监测应用方面, 目前臭氧柱总量反演精度较高, 还存在对流层中低层和近地面臭氧浓度反演精度不够, 臭氧污染评估及成因分析不足, 如近地面臭氧污染迁移转化过程、平流层臭氧侵入识别分析等问题, 是下一步要重点关注的方向。

关键词: 臭氧, 遥感, 柱总量和廓线反演, 平流层, 卫星载荷, 反演, 监测应用

引用格式: 赵少华, 杨晓钰, 李正强, 王中挺, 张玉环, 王玉, 周春艳, 马鹏飞. 2022. 臭氧卫星遥感六十年进展. 遥感学报, 26(5): 817-833

Zhao S H, Yang X Y, Li Z Q, Wang Z T, Zhang Y H, Wang Y, Zhou C Y and Ma P F. 2022. Advances of ozone satellite remote sensing in 60 years. National Remote Sensing Bulletin, 26(5): 817-833 [DOI:10.11834/jrs.20221632]

1 引言

作为地球大气的重要组成部分, 臭氧是一种微量气体, 可吸收太阳光线中绝大部分短波的紫外线, 保护地球上的生物免收紫外线辐射损害, 此外臭氧在9.6 μm的红外波段具有很强的吸收带, 故还是一种温室气体, 在对流层产生温室效应, 具有保温作用 (Cracknell 等, 2012; 彭晓琳, 2017)。约90%的臭氧分布于10—50 km高度的平流层, 10%分布在10 km以下的对流层, 在区域、全球大气和气候系统中发挥着重要作用。近地面的臭氧对人体健康和生态环境影响较大, 若其浓度较高, 则刺激人的眼、鼻、呼吸道、肺等组织,

造成损伤。近年来, 臭氧污染引起愈来愈多关注, 臭氧已成为中国继PM_{2.5}之后多地的首要污染物, 春夏季尤为突出。

近地面臭氧主要由光化学反应过程产生, 为二次污染物, 由氮氧化物(NO_x)与挥发性有机物(VOCs)在太阳紫外线照射下, 经过一系列光化学反应生成。特别是NO_x饱和的城市地区, 通常在城市区域臭氧生成受VOCs控制、郊区和偏远地区受NO_x控制。这两种前体物与臭氧存在复杂的非线性关系, 准确地获取臭氧及其前体物的时空分布信息对制定有效的防控措施至关重要 (陈良富等, 2019)。

目前地面观测站点可提供近地面臭氧的时空

收稿日期: 2021-09-30; 预印本: 2022-02-17

基金项目: 政府间国际科技创新合作重点专项(编号:2021YFE0117100); 国家高分辨率对地观测系统重大科技专项(编号:05-Y30B01-9001-19/20-3)

第一作者简介: 赵少华, 研究方向为环境遥感。E-mail: zshyitt@126.com

通信作者简介: 马鹏飞, 研究方向为大气环境遥感。E-mail: mpf136@163.com

分布信息,但主要反映该站点及其周边附近臭氧的信息,其空间上的代表性、准确性与观测站点疏密程度有关,站点密度高,空间上的准确性就高。但总体上地面观测仍主要反映站点上的信息。卫星遥感可以获取大范围臭氧的时空分布信息,并可以反映整层的臭氧信息(陈良富等,2019)。

国内外学者使用紫外和热红外高光谱数据开发了多种算法进行卫星反演,包括臭氧柱浓度和臭氧廓线,对相关前体物的监测也进行了不少尝试(包括HCHO、NO_x等),通过观测臭氧在大气化学中参与的演化运移过程,进行模式预测和再分析研究,评估减排量,污染物运输和空气质量。目前,臭氧柱浓度反演基本上较为成熟,精度可达到95%以上,对流层柱浓度反演精度约85%;但臭氧廓线产品、近地面臭氧浓度反演精度较低,受限于卫星观测重返周期、传感器分辨率、大气气候条件等,近地面臭氧对健康和生态的影响研究还有待进一步探索。国内对大气臭氧观测主要依靠地面和探空测量,自主研发的卫星载荷还处于单星观测的进展中,系统介绍其工作的进展研究目前还较为缺乏。当前臭氧和颗粒物协同治理是中国空气污染治理的关键阶段,如何利用卫星数据协同其他观测数据在污染治理中至关重要。本文主要从国内外卫星探测器发展进程、反演算法、观测综合手段和探测结果、存在的问题和发展趋势等方面概述臭氧卫星遥感进展。

2 臭氧卫星探测技术发展

美国NOAA/国家环境卫星数据与信息服务中心(NESDIS)有关臭氧探测卫星的资料(<http://rammb.cira.colostate.edu/dev/hillger/ozone-monitoring.htm>[2021-11-15])、NASA EOSDIS收录的卫星遥感仪器(<https://earthdata.nasa.gov/learn/remote-sensors>[2021-11-15])和欧盟卫星数据库(<https://directory.eoportal.org/web/eoportal/satellite-missions/>[2021-11-15])资料显示,各国自1960年至今已发射80余颗航天器、卫星,均可进行臭氧相关观测。这些卫星和传感器的贡献来自美国、俄罗斯、英国、荷兰、芬兰、法国、日本、巴西、韩国和中国等。观测方式也由单一卫星发展向协同轨道星座(如A-train)、全球地球同步星座(如NASA TEMPO, KARI GEO-KOMPSAT-2B和ESA Sentinel-4的合作开创)(Ackerman等,2019)。卫星探测传感器种

类迄今有50余种,包括后向散射紫外光谱仪/辐射计/观测仪(TOMS、BUV/SBUV)、多通道滤波器辐射计(GOME)、临边大气传感器(ILAS)、红外干涉光谱仪(IRIS、IASI)、红外临边热传感器(LIMS)、高分辨率红外辐射测深仪(TOVS、HIRS)、掩星探测器(SAGE、HALOE、POAM、ATMOS、GOMOS)、微波临边探测器(MLS)、激光雷达探测仪等。

全球臭氧探测仪器主要利用紫外和热红外光谱探测,探测方式包括天底、临边和掩星3种探测方式,天底观测可获得高精度臭氧柱总量和低垂直分辨率的臭氧廓线。掩星和临边探测主要获取中高层大气臭氧浓度,掩星探测可获得高垂直分辨率和高精度臭氧廓线,但受限采样频率、数据量少。临边探测可利用紫外、红外和微波波段开展全天候臭氧监测,具有高垂直分辨率和采样频率。下面按发展时期和传感器观测方式分别介绍如下。

2.1 探索期(1960年—1977年)

自1960年8月美国回声1号气球卫星(发射失败)的第1次尝试,国际上逐步展开卫星探测器观测大气层的探索。始于1963年的Nimbus计划是NASA的气象研发卫星计划(与NOAA TIROS计划平行),其主要目标是引入传感器技术测试新的仪器,次要目的是提供大气数据以改善天气预报,后续该系列发展成为一个针对海洋、陆表和大气研究的地球科学计划。大气成分的测量始于1970年,Nimbus-4搭载太阳后向散射紫外仪BUV开始获取全球臭氧层观测数据,首次测量了大气中的臭氧柱浓度和廓线,首次确认了臭氧空洞。但常态化卫星观测到1978年Nimbus-7卫星发射才开始(Wargan等,2020; Wallington, 2019)。

2.2 成长期(1978年—2000年)

2.2.1 紫外载荷的发展

1978年,随着Nimbus-7卫星的发射,其搭载的臭氧总量光谱仪TOMS(Total Ozone Mapping Spectrometer)、太阳后向散射紫外仪SBUV(Solar Backscatter UV)载荷实现了对臭氧柱总量和廓线的全球业务化监测。Nimbus项目后续也记录了南半球春季每年臭氧空洞恢复进展。改进的SBUV搭载于Nimbus-7上,获取了1978年—1994年的臭氧数

据,一直持续到第二代仪器SBUV/2,即始于1984年的NOAA TIROS系列卫星。Nimbus-7(1978年—1993年)、METEOR-3卫星(1991年—1994年)、Earth Polar(1996年以后,升级为TOMS-EP高分辨率测量)卫星上搭载的TOMS在近紫外区域的6个窄光谱带上测量地球大气的反照率每天提供可靠的高分辨率全球臭氧量图。1995年欧洲空间局(ESA)发射ERS-2卫星搭载了全球臭氧监测实验仪器GOME(在发展飞跃期继续使用,搭载于MetOp-A、B、C上),该天底观测仪器以0.2—2.4 nm的分辨率测量大气中240—790 nm的后向散射辐射,可监测臭氧以及在对流层和平流层具有重要影响的痕量气体,如HCHO和CHOCHO等,并获得臭氧廓线产品。

2.2.2 掩星载荷的发展

自1985年以来,南极洲每年发生严重的季节性臭氧层消耗(“臭氧空洞”)。基于对平流层臭氧空洞恢复情况的长期观测需求,卫星观测具有大尺度和连续观测的优势,可用来估算臭氧全球范围内的长波辐射效应,量化辐射强迫。臭氧空洞研究的迫切需求促使掩星观测仪器的发展,多数采用太阳掩星观测,如卤素掩星实验(HALOE)仪器(搭载于高层大气研究卫星(UARS)上),大气痕量分子光谱实验ATMOS,极地臭氧和气溶胶测量POAM II(1993年)和POAM III(1998年)(搭载于法国SPOT-3和SPOT-4)。平流层气溶胶和气体实验SAGE I、II和III,SAGE III的月球掩星模式,搭载在ENVISAT-1上的全球臭氧掩星监测仪(GOMOS)以恒星作为掩星测量的光源,相比太阳掩星仪,均增加了掩星技术的空间覆盖范围。然而从探测成分角度,利用太阳掩星测量的技术中,如1991年发射的UARS卫星上的HALOE仪器与SAGE II相比,在红外区域的观测值可测量更多大气成分,除臭氧和水汽,还可测量甲烷、HCl和反应性氮等;此外,极地臭氧和气溶胶测量POAM II仪(1993-09—1996-11)和POAM III(1998-03)是搭载于SPOT-3和SPOT-4的太阳掩星设备,用于测量垂直方向臭氧、水汽、二氧化氮和各种气溶胶分布及各参数的平流层柱浓度;同样利用太阳掩星观测的ATMOS使用了宽光谱范围的干涉,可在非常高的光谱分辨率下观察各种痕量气体的吸收特征。

2.3 飞跃期(2001年至今)

2001年后世界各国朝着积累长期高质量的观测数据目标发展,臭氧探测器更加多样化、稳定化,开发了高光谱高分辨率、多方位观测的载荷器件,形成序列卫星、系列载荷,且多国开展合作观测。

2.3.1 临边载荷的发展

天底观测可测量各种痕量气体的柱总量,但无法获得中高层大气高垂直分辨率的痕量气体廓线(王雅鹏等,2016);而临边扫描可获得平流层中痕量气体和气溶胶分布。使用临边或天底点几何观测取决于对流层还是平流层臭氧监测,对应于臭氧空洞或气候变化及空气质量研究(Cracknell和Varotsos,2014)。

红外临边传感器由于可以在白天和黑夜连续测量地球大气的临边发出的长波辐射,因此其覆盖范围比太阳掩星仪更好。其发展经过了40余年的发展过程,在通道数目、信噪比、可探测目标种类、冷冻技术、在轨寿命方面都有明显改进。其中红外高光谱测量有温室气体干涉测量仪(IMG,ADEOS卫星)(Coheur等,2005)、大气红外探测器(AIRS,AQUA卫星)(Divakarla等,2008)、对流层发射光谱仪(TES,EOS-AURA卫星)(Worden等,2007;Nassar等,2008),红外大气探测干涉仪(IASI,搭载MetOp-A卫星)(Clerbaux等,2009;Boynard等,2009)和交叉轨道红外探测器(CrIS,搭载Suomi-NPP卫星)(Glumb等,2002;Ma等,2016)。

2002年发射的ENVISAT卫星上搭载的SCIAMACHY利用临边散射技术,具有天底、临边和掩星3种不同的观测方式,光谱范围为240—2400 nm;极地平流层云以及自由基、氧化溴、二氧化氯和二氧化氮的SCIAMACHY临边廓线数据有利于理清臭氧空洞及其对平流层环流和化学成分的相关性。2004年发射的EOS-Aura卫星搭载的臭氧监测仪OMI,是至今服役时间最长、数据连贯性最好的卫星传感器,通过天底、临边和掩星多种观测方式观测,比先驱传感器提高了空间分辨率和全球连续覆盖度,继承了NASA的TOMS和ESA的ERS-2卫星上的GOME,比TOMS可测量更多的大气成分如SO₂、NO₂、BrO、HCHO、OCLO、气溶胶(Zhang等,2019),比GOME具备更好的

空间分辨率。中国于2016年9月发射的天宫二号空间实验室搭载的多波段紫外临边成像光谱仪,实现了国际首创的臭氧天底紫外环形探测和前向临边多方位探测组合及反演比对,达到比一般临边探测更高水平的层析反演,得到中间层和低热层的臭氧、大气密度以及其他大气微量气体的垂直结构和三维动态分布。

2.3.2 载荷系列的发展

随着光谱分辨率、辐射度性能和时空覆盖率的提高,为观测臭氧层消耗与恢复需要长时间序列的数据累积和应用比对,相同观测方式的载荷通过升级连续服役,稳定经历了不同卫星的搭载和升级,如BUV/SBUV系列、TOMS系列、GOME系列(均采用后向散射紫外技术)。NOAA系列卫星是观测臭氧序列卫星的突出代表,跨越了两个发展时期。自1979年NOAA-6开始,NOAA-6、7、8均携带了高分辨率红外辐射探测器(HIRS-2);1985年开始NOAA-9、11、13、14、16、17、18、19共8颗卫星均使用了太阳后向散射紫外线计(SBUV-2)对平流层臭氧监测;其中第五代NOAA(NOAA-15(1998))—NOAA-18(2005))还采用改进型高分辨率辐射仪(AVHRR)和TIROS垂直探测仪(TOVS)(NOAA TIROS垂直探测仪(TOVS)由3种仪器组成:高分辨率红外辐射探测仪(HIRS),微波探测仪(MSU)和平流层探测仪(SSU))。

中国风云三号系列极轨气象卫星是第二代极轨气象卫星,其FY-3A(2008-05)、FY-3B(2010-11)、FY-3C(2013-09)三星上均搭载了臭氧成像光谱仪、紫外臭氧总量探测仪和太阳后向散射紫外仪(即OMS(Ozone Mapping Spectrometer),TOU(Total Ozone Unit),SBUS(Solar Backscatter Ultraviolet Sounder),可探测平流层臭氧垂直分布和总量。TOU的工作原理与TOMS基本类似,TOU和SBUS是中国自主研发的首台分别用于全球臭氧总量测量、短期和长期全球臭氧垂直分布变化观测的仪器(FY-3A SBUS因机械故障在2008年11月停止工作)。

2.3.3 高时空、高光谱分辨率载荷的发展

此时期的一些载荷逐步发展成为多方位、高光谱、多时空分辨率观测。考虑对臭氧观测精度、对流层大气观测时效要求的提高,静止卫星探测在全球3个地区覆盖观测并积累数据,如已发射在

轨和即将发射的观测亚洲地区的GEMS卫星(KSA)、观测欧洲地区的Sentinel-4(ESA)和观测北美地区的TEMPO(NASA)。中国风云四号气象卫星是第二代静止气象卫星,搭载多通道可见光红外扫描成像仪和红外高光谱探测仪(干涉式大气垂直探测仪GIIRS),能够监测大气温度和湿度参数的垂直结构、大气不稳定指数、强对流天气等。

目前在轨卫星空间分辨率最高的是2017年ESA发射的Sentinel-5P极轨卫星上搭载的对流层监测光谱仪TROPOMI(3.5 km×7 km),观测光谱覆盖紫外、可见光、近红外、短波红外,可监测O₃、NO₂、SO₂、HCHO、CO、CH₄、气溶胶等(Xia等,2021a;夏丛紫等,2020;Su等,2020)。

FY-3D搭载红外高光谱大气探测仪(HIRAS)是具有3个频段1370个通道的迈克尔逊干涉仪,目标是温度/湿度探测,臭氧廓线和温室气体柱浓度。国家卫星气象中心于2008年11月发布TOU监测的总臭氧结果。2018年5月发射的高分五号卫星和2021年9月发射的高光谱观测卫星,均携带了大气痕量气体差分吸收光谱仪(EMI),可以探测臭氧、二氧化氮、二氧化硫等痕量气体(Zhang等,2018,2020;Xia等,2021b)。

经过约60年发展,臭氧各类主要探测卫星及载荷情况如表1,众多载荷发展积累了大量宝贵长期观测数据集。美国近40余年臭氧的卫星观测数据包含NIMBUS-7(1979年—1992年)和Meteor(1993年—1994年)上搭载的TOMS数据、NASA Earth Probe TOMS(1996年—2004年)、Aura的OMI数据(2004年—2016年)和Suomi NPP上OMPS探测数据(2016至今)等。欧盟积累了1970年至今的臭氧月度栅格数据集,包含全球臭氧浓度、混合比和摩尔含量的每月平均值的估计值,符合GCOS(全球气候观测系统)定义的“卫星基气候产品的系统观测要求”。中国风云卫星遥感数据服务网提供风云四号L1数据及部分臭氧总量产品(<http://satellite.nsmc.org.cn/PortalSite/Data/Satellite.asp> [2021-12-01])。中国传感器的设计大多基于国际技术发展,在轨卫星目前仅有紫外探测仪,空间分辨率相对国外较低,最新发射的高光谱卫星搭载的EMI和全球最先进的紫外高光谱载荷TROPOMI的主要参数对比如表2。在臭氧及相关化学过程前体物探测数据产品积累、算法开发、质量评估、产品验证、数据同化、产品应用等相关研发上尚处于初级阶段。

表1 主要星载臭氧观测载荷一览表

Table 1 The list of major spaceborne ozone observation payloads

卫星(发射时间), 国别	载荷	用途
Nimbus-7(1978), 美国	SBUV(太阳后向散射紫外辐射计); LIMS(平流层临边红外监测仪)	星下点的大气臭氧总量、垂直分布, 监测平流层臭氧
Nimbus-7(1978), Meteor-3(美国和俄罗斯, 1991), TOMS-EP(美国, 1996), ADEOS-1(日本, 1996), Earth Probe(USA, 1996), Meteor-3M N1(俄罗斯, 2001)	TOMS(臭氧总量测绘光谱仪)	高分辨率臭氧总量全球分布、臭氧垂直分布
NOAA-9(1984), NOAA-11(1988), NOAA-14(1994), NOAA-16(2000), NOAA-17(2002), NOAA-18(2005), NOAA-19(2009), 美国	SBUV-2(太阳后向散射紫外辐射计)	臭氧垂直分布, 臭氧部分柱浓度
ERS-2(1995), 美国	GOME-1(全球臭氧监测实验)	臭氧、二氧化氮、水蒸气、二氧化硫、氯和一氧化溴及其他痕量气体柱浓度和气溶胶分布
MetOp-A(2006), MetOp-B(2012), MetOp-C(2018), 美国	GOME-2(全球臭氧监测实验)	高光谱分辨率臭氧含量和廓线
Explorer-60, ERBS(1984), 美国	SAGE II(平流层气溶胶和气体实验)	SAGE II 气溶胶、臭氧、NO ₂ 和水汽廓线, SAGE III 比 II 添加了温度、气压廓线
Meteor-3M(1999), 国际空间站(2001), 美国和俄罗斯	SAGE III(平流层气溶胶和气体实验)	臭氧、水、二氧化氮和水蒸气廓线图, 以及对流层顶、平流层和中间层的气溶胶探测。太阳同步极地轨道掩星技术探测高纬度地区; 空间站倾斜轨道太阳掩星探测热带到中纬度地区; 月球掩星覆盖广泛纬度, 测量NO ₃ 和OClO。比 SAGE II 扩展了近红外区域测量能力
NOAA-6—NOAA-14(9颗卫星), 美国	HIRS/2 高分辨率红外辐射探测器	
NOAA-15(1998), NOAA-16(2000), NOAA-17(2002), NOAA-18(2005), 美国	HIRS/3 高分辨率红外辐射探测器/3	温度和湿度分布、表面温度、云参数和总臭氧的信息
NOAA-19(2009), MetOp-A(2006), MetOp-B(2012), MetOp-C(2018), 美国	HIRS/4 高分辨率红外辐射探测器/4	
ADEOS-II 先进地球观测卫星-II(1999), 美国	ILAS-II	高纬度平流层臭氧, 臭氧相关的物种如二氧化氮、甲烷、硝酸氯和氯氟烃等的垂直分布
AQUA(2002), 美国	AIRS	高光谱高精度的大气温湿度及云、地表、臭氧等参数资料
AQUA(2002), TERRA(1999), 美国	MODIS	臭氧柱浓度
MetOp-A(2006), 美国	IASI 超高光谱红外大气探测仪	高分辨率高精度大气温、湿度廓线、大气化学成分探测(痕量气体臭氧、甲烷、一氧化碳、N ₂ O 和 CO ₂), 具备准确测量已知影响气候的气体水平和循环模式的能力, 如对流层—平流层交换等
SPOT-3(1993), 法国	POAM II	测量整体平流层中臭氧、水蒸气、二氧化氮和各种气溶胶丰度、垂直分布
SPOT-4(1998), 法国	POAM III	
	SCIAMACHY	天底测量多种大气痕量气体成分总柱浓度和气溶胶分布, 临边扫描提供良好的痕量气体和气溶胶的廓线
Envisat(2002), 欧盟	GOMOS(全球恒星掩星臭氧监测)	高精度和高垂直分辨率监测平流层和中间层的臭氧和臭氧趋势, 与平流层臭氧化学相关的大气参数, 如NO ₂ 、NO ₃ 和气溶胶, 以及臭氧动力学, 如温度、空气密度和湍流
	MIPAS(迈克尔逊干涉仪)	高分辨率光谱发射测量痕量气体成分廓线
高层大气研究卫星 UARS(1991), 美国	CLAES(低温临边阵列标准具光谱仪)	HNO ₃ 、NO ₂ 和HCL等大气成分测量

续表

卫星(发射时间),国别	载荷	用途
	HALOE(卤素掩星实验)	臭氧、水蒸气、甲烷、卤素储层物种(HCL和HF)、活性氮等大气成分浓度廓线
高层大气研究卫星 UARS(1991), EOS-AURA(2004),美国	MLS(微波临边探测器)	平流层 CLO、HNO ₃ 和臭氧,对流层上部的 H ₂ O 大气成分、温度和冰云垂直廓线,Aura 上的 MLS改进增加了自由基和储层物种浓度探测
EOS-AURA(2004),美国	HIRDLS(高分辨率动力学临边测深仪)	测量高层大气中的温度,并确定臭氧、甲烷、水蒸气、一氧化二氮、二氧化氮、硝酸氯和各种氯氟烃、极地平流层云,以及痕量成分分布的小尺度动态变化
	OMI(臭氧监测仪)	监测臭氧层恢复,总臭氧柱浓度、气溶胶、紫外辐射和其他大气成分的分布和廓线,有效地延续了 TOMS对臭氧总量测量的记录
	TES(对流层发射光谱仪)	测量对流层臭氧和其他物种分布,以及平流层下部的物种
SciSat(2003),美国	ACE-FTS(大气化学实验—傅里叶变换光谱仪)	主要测量臭氧、二氧化氮和气溶胶/云消光,可获得温度、气压和包括臭氧在内的 24 种微量或者痕量气体浓度的廓线分布
JPSS-SNPP(2011),日本	OMPS(臭氧成像廓线仪)	臭氧总量和垂直分布
JPSS-SNPP(2011),NOAA-20(JPSS-1)(2017),日本	CrIS(高光谱红外探测仪)	是 HIRS 的重大改进,测高光谱高精度的大气温湿度资料及云、地表、臭氧等参数资料
Sentinel-5P(2017),欧盟	TROPOMI	高时空分辨率的空气质量、臭氧和紫外线辐射以及气候监测和预测
Meteosat 9(2005),欧盟	SEVIRI	地表和大气的温度、大气水汽含量、云的形成、风暴、飓风、大雨和大雾
FY-3A(2008)、FY-3B(2010)、FY-3C(2013),中国	TOU(臭氧总量探测仪) SBUS(紫外臭氧垂直探测仪)	大气臭氧总量分布 臭氧垂直廓线,总臭氧量
TG-2(2016)空间实验室,中国	紫外临边成像光谱仪	全球臭氧浓度分布、预报紫外线指数等
GF-5(2018),中国	EMI(大气痕量差分吸收光谱仪)	二氧化氮、二氧化硫、臭氧和甲醛等污染气体总量分布
GF-5-02(2021),中国	EMI(大气痕量差分吸收光谱仪)	二氧化氮、二氧化硫、臭氧和甲醛等污染气体总量分布

表 2 EMI 和 TROPOMI 载荷对比表

Table 2 EMI and TROPOMI

主要参数	国产高光谱卫星 EMI 载荷	ESA SP-5/TROPOMI
光谱范围/nm	240—315,311—403 401—550,545—710	270—500,675—775 2305—2385
光谱分辨率/nm	0.3—0.6	0.2—0.65
总视场/(°)	114	108
空间分辨率	优于 24 km×13 km	7 km×3.5 km

3 臭氧卫星遥感应用进展

3.1 臭氧卫星遥感估算方法

国内外学者发展了多种臭氧卫星遥感估算方法,主要包括臭氧柱总量反演算法、臭氧廓线反演算法和近地面臭氧数据融合估算方法等,主要

进展如下。

3.1.1 臭氧柱总量反演算法

臭氧柱总量获取方法主要包括比值法、紫外后向散射法、差分光学吸收光谱法(DOAS)和产品合成法。(1)比值法最早是通过卫星在紫外两个波长的比率计算,一个被臭氧强烈吸收,另一个很少吸收,如 312 nm 和 331 nm。(2)紫外后向散射法主要利用紫外波段的散射特性估算臭氧柱总量,如 NOAA-16 星 SBUV-2 测量了 252—340 nm 的紫外散射,通过使用最大似然反演算法,从 8 个波段的观测数据估计臭氧垂直廓线,利用较长的 4 个波段获得臭氧总柱浓度。紫外后向散射反演臭氧总量的算法都将云考虑成不透明的朗伯反射体,

并假定云顶有效反照率不随波长的变化而变化, 江芳等(2007)模拟发现云顶的有效反照率与波长相关, 即使光学厚度较大的云, 辐射也可由云顶继续向下传输, 受到云顶以下臭氧吸收影响, 用V7方法反演臭氧总量值比真实值偏大, 因此建立一套反演算法大大减弱了云影响。(3) DOAS方法去除气溶胶、地表等影响, 从OMI等高光谱紫外数据获得臭氧总量观测结果。针对DOAS方法在高纬度地区反演GOME数据的高估问题, Coldewey-Egbers等(2004)采用加权函数改进的DOAS方法(WFM-DOAS), 该法考虑大的太阳天顶角观测的波长依赖性, 消除对大气质量因子AMF转换的需要, 减少了其与地面数据的差异, 改善了拟合残差。(4) 产品合成法是结合地面观测数据等, 基于一种或多种柱总量产品, 采用时空重建或重采样等方法优化合成时空连续的柱浓度产品。张莹等(2014)利用最邻近重采样方法将TOMS、OMI、FY-3A TOU臭氧总量产品生成一套近30 a空间分辨率为 $0.25^{\circ} \times 0.25^{\circ}$ 的数据集, 以WOUDC地面站点数据对OMI和TOU数据回归分析以订正反演数据, 发现2000年后中国上空臭氧下降速率减缓, 2005年后总量上升趋势与全球趋势一致。张艳等(2015)利用OMI的V8反演产品、FY-3 TOU的V7反演产品、TOMS V8产品插值获得1979年—2014年的臭氧总量数据, 发现中高纬度地区臭氧的不均匀性, 尤其青藏高原的臭氧增长大于同纬度其他地区, 并用FY-3 TOU观测了南极臭氧洞面积日变化和北极臭氧月均变化。针对OMI等卫星数据空间覆盖面积不够导致赤道附近出现条带状的缺失现象, 彭晓琳(2017)基于时空加权回归的重建方法建立目标数据与多时相辅助数据的时空关系模型, 实现研究区域内卫星OMI臭氧总量产品时空无缝, 生成一套2004年—2014年每日时空连续的全球臭氧总量产品。王晴等(2019)利用1980年—2017年欧洲和美国大气温度再分析资料对比同期TOMS和OMI的臭氧总量数据显示1980年—2007年高原上空臭氧总量主要呈减少趋势, 2008年—2017年呈增加趋势, 2008年以来高原地区温度和臭氧总量的逆转趋势吻合。

臭氧柱总量反演算法总体较为成熟、反演精度较高(可达90%—95%左右), 目前应用较多的主要是差分吸收DOAS方法和改进的WF-DOAS方法。WF-DOAS算法对于低空间分辨率的传感器

(如OMPS)反演稳定性较差, 相较标准DOAS方法, 不需要AMF转换, 直接对垂直柱总量进行拟合, 反演精度较高。

3.1.2 臭氧廓线反演算法

臭氧廓线反演的关键是选取合适的辐射传输模型, 最优估计算法和特征向量法都较有效, 但特征向量的数目能根据对求解的稳定条件约束而变化时, 特征向量法更灵活, 如基于GOMETRAN模型的FURM(Full Retrieval Method)算法, 该法和基于DOAS反演的柱浓度相关性较好。(刘建国等, 2003)。

常规臭氧探空廓线数据自1970年的德国、美国、日本、南极地区开始, 70年代后期有对北大西洋和南大西洋海洋边界层的船载监测(Cooper等, 2014); 现在从南美洲向东到西太平洋的热带地区都有足够的观测数据(臭氧探空仪、卫星、飞机)(Gaudel等, 2018)。Petrovavlovskikh等(2005)提出了一种新的Umkehr臭氧廓线反演算法(UMK04), 该算法已优化用于研究月平均距平的长期变化, 以评估多年时间序列中的气候变异性, 其平流层的不确定性低于5%, 并不受先验信息影响。黄富祥等(2008)介绍FY-3卫星紫外臭氧垂直廓线反演算法FY-V1.0, 并与美国NOAA两种业务反演算法V6和V8比较差异, 结果表明FYV1.0反演廓线都与V8产品很好吻合, FY-V1算法相对反演精度在 $\pm 2\%$ 以内。Yang(2009)基于SAGE II、HALOE和TOMS的1994年—2004年的总臭氧数据集分析臭氧廓线, 发现在冬季、春季和秋季, 东部地区(105°E — 135°E)的臭氧浓度明显高于西部地区(75°E — 105°E); 夏季北纬 50°N — 55°N 的臭氧廓线东西差异很小, 而北纬 40°N — 55°N 的西部臭氧廓线差异主要存在于平流层最低层和对流层。美国SBUV及SBUV/2积累了近40年的全球臭氧垂直廓线数据(黄富祥等, 2013)。NASA以TOLNet的名义启动了一个机构间臭氧激光雷达观测网络, 测量连续的高分辨率臭氧廓线(Newchurch等, 2016)。

臭氧垂直廓线信息需要进行准确的波长和辐射定标以及使用准确的前向模型, 刘诚(2018)介绍了一种卫星遥感大气臭氧廓线反演算法, 主要利用OMI紫外辐射光谱数据, 计算辐射光谱模拟值和权重函数参数, 基于最优估计技术反演地

表至 60 km 大气臭氧廓线信息。Zhao 等 (2021) 基于 GOME、GOME-2、OMI 和 OMPS 的最优估计方法, 修正其在拟合窗口、仪器纵切函数和波长/辐射校正等, 用于 TROPOMI 臭氧廓线反演, 反演的对流层臭氧柱、平流层臭氧柱与全球臭氧探空仪、合肥的傅里叶变换光谱、北京臭氧探空仪数据非常吻合。

获取高精度的对流层臭氧浓度还需要 UV、VIS、TIR 等波段联合反演。Natraj 等 (2011) 对多种臭氧混合比的大气廓线仿真表明, 将可见光 (VIS) 观测添加到紫外 (UV) 观测中可以显著提高对最低对流层臭氧的敏感度, 但只会稍微改善信号的总自由度 (DFS); UV 和热红外 (TIR) 的组合可显著改善总 DFS 以及最低的对流层 DFS; UV+VIS, UV+TIR 和 UV+VIS+TIR 组合有可能满足观测对流层臭氧的要求。Zoogman 等 (2011) 从利用 2001 年 7 月每小时臭氧数据模拟测试地球同步卫星在 UV、VIS 和 TIR 光谱区域测量臭氧的能力, 研究表明与太阳同步轨道的每日观测相比, 地球静止轨道的每小时臭氧观测大大改善了同化结果; UV+VIS 和 UV+TIR 光谱组合极大地改善了近地面的臭氧信息; UV+TIR 在高灵敏度、表面热对比度强的情况下较好, 而 UV+VIS 在低灵敏度条件下更好; UV+VIS+TIR 仪器的数据可以将地表臭氧的误差减少两倍; TIR 观测对于获得对流层上层臭氧信息至关重要。

臭氧廓线反演算法起步相对较晚发展迅速, 但受限于卫星数据、受云和方法影响等因素其反演精度不高 (可达 70%—75% 左右), 目前应用较多的主要是最优估计方法, 该方法对先验廓线尤其在对流层中低层依赖较大, 反演信息几乎全部来自先验信息。基于多光谱联合的臭氧廓线反演方法可以有效提高对流层中低层臭氧廓线反演精度。

3.1.3 近地面臭氧多源遥感数据融合估算方法

近地面臭氧多源遥感数据融合估算方法是近年来快速发展起来的, 结合地面观测数据, 通过对多种卫星遥感臭氧产品的大量样本数据迭代优化估算近地面臭氧浓度, 主要以机器学习和深度神经网络学习为代表的融合技术获取近地面臭氧浓度。Felder 等 (2013) 升级了神经网络系统, 结合 METOP 传感器 GOME-2 和 IASI 及 AVHRR

的云信息, 用先进的元学习技术, 具有两个或 3 个隐藏层的深度神经网络训练时间减少了大约两个数量级, 反演系统更加稳定。Li 等 (2020) 以海南岛 O_3 含量的时空变化及其对健康的潜在影响为观测对象, 对比不同算法在臭氧预测中的表现, 随机森林模型实现了最佳性能, 极端梯度增强算法表现性能最佳。李一蜚 (2020) 运用机器学习算法, 结合 OMI、TROPOMI 的 NO_2 数据、EMCWF 气象数据、MEIC 排放清单数据等, 与国控站点观测的近地面 O_3 浓度数据训练拟合, 获取高时空分辨率的近地面 O_3 浓度分布, 时空地理加权回归、随机森林、梯度提升回归树等模型中梯度提升回归树表现最佳。Mo 等 (2021) 提出新的 CAMS (哥白尼大气监测服务) 臭氧改善方法, 采用支持向量机对最显著的区域臭氧模式分类, 将气象、地理、大气环流监测系统臭氧和地面臭氧数据输入随机森林, 进行区域调控训练和预测, 与地面结果相比能较好反映地面臭氧日浓度分布, 优于统计模型。

所有的数据融合方法, 基于卫星数据或模式数据, 采用随机森林等机器学习方法都表明可以有效提高近地面臭氧的反演精度, 但是这些方法存在鲁棒性差, 反演结果容易过拟合等问题。下一步需要在算法中优化特征选择以避免过拟合, 进而建立一种高性能的泛化的近地面臭氧浓度反演模型。

3.3 臭氧及其前体物对空气质量的影响

从对臭氧平流层到对流层变化的观测、全球尺度到局域尺度的观测, 均关注其对人类健康的影响。美国环保局自 1996 年以来发布了 4 次臭氧和相关光化学氧化剂的综合科学评估 (ISA) 报告, 评估和整合臭氧对健康和环境的影响, 以支持其对国家空气环境质量的臭氧审查; ISA2013 提到卫星提供的 NO_2 、VOCs 和 CO 的时空分布可用于评估排放清单; 尽管基于卫星的测量存在不确定性, 但多项研究显示自上向下约束 O_3 前体物排放的效用 (ISA2013); ISA2020 相比之前的报告更大程度上应用了卫星监测的结果。

依据大气化学反应机理, 平流层臭氧消耗增加了对流层中 UV-B 光的强度, 这影响了对流层臭氧产生, 这种影响很大程度上取决于氮氧化物浓度, 若氮浓度低则会增加臭氧产生, Sillman 和

Samson (1995) 最先建立过氧化物和硝酸的“指标比率”, 以诊断臭氧形成的化学敏感性, 指出 O_3 形成通常早晨对VOCs更敏感, 并随着 NO_x 消耗而对 NO_x 更加敏感。Martin等(2004)证实了通过设定甲醛与 NO_2 的空间对流层柱比(FNR)的阈值来确定VOCs控制与 NO_x 控制的 O_3 形成机制的指标, 以 $FNR < 1.0$ 表示VOC控制机制, $FNR > 2.0$ 表示 NO_x 控制机制, 而FNR在1.0—2.0表示过渡机制。Duncan等(2010)将OMI甲醛与 NO_2 比率作为空气质量因子, 以CMAQ和光化学箱模型模拟发现该比例应用的指示阈值, 并指出洛杉矶等美国大型城市 NO_x 减排使得臭氧生成对 NO_x 水平变得更加敏感。Jin和Holloway(2015)指出OMI过境时间是一天中 NO_x 最敏感时间, 利用OMI数据发现午后近地表气温 $> 20^\circ C$ 时, 中国华北平原、长江三角洲和珠江三角洲普遍处于FNR过渡机制, 这些区域之外 NO_x 限制机制占主导地位; 到2030年中国大部分地区为过渡机制, 在大城市如广州、上海和北京 NO_2 减少了, 已在2013年从VOC控制转变为过渡机制。Liu等(2016)和Su等(2017)使用OMI FNR阈值分析了2014年APEC峰会、2015年大阅兵及2016年G20峰会等国家重大事件期间 O_3 的控制机制。Jin等(2017)使用GEOS-Chem全球化学传输模型评估OMI的FNR在3个北中纬度地区定量效果, 发现FNR是预测近地面 O_3 生成的可靠因子, FNR需要考虑HCHO和 NO_2 垂直廓线的差异, 中纬度北部源区上的主要城市(例如纽约、伦敦和汉城)在春季显示 NO_x 控制区的转换提前一个月。陈良富等(2019)面向区域 O_3 污染分析和防控应用, 综述了卫星遥感对 O_3 及前体物的代表性物种 NO_2 、HCHO、CHOCHO的探测能力及利用遥感手段分析区域 O_3 及其前体物传输, 从 O_3 与 NO_x 、VOCs关系分析利用卫星反演的前体物表征 O_3 生成风险的可行性。Su等(2019)基于OMPS评估了直接排放和二次氧化生成对大气总HCHO的贡献, 发现冬季直接排放的贡献可能超过二次生成成为大气HCHO的主要来源, 因此需要使用二次生成的HCHO与 NO_2 的比值分析 O_3 形成机制。

除VOCs与 NO_x 的指示机制外, 仍有学者建立了相应的臭氧相关污染物量化关系、产品数据集等。全球生物源排放的异戊二烯氧化贡献47%的乙二醛, Jin和Holloway(2015)指出乙二醛可用

于初级和次级HCHO划分; 由于乙二醛由大多数VOCs的氧化作用形成, 因此其卫星产品也可直接表征 O_3 敏感性。Kim(2015)基于OMI和AIRS观测数据开发了新的高分辨率 O_3 -CO相关性数据库, 并根据飞机监测的痕量气体原位廓线验证, 用全球化学传输模型解释其相关性, 结果支持模型中6—8月北美输出量(燃烧源)和12月—次年2月在南大西洋观测到的最大臭氧量。赵富强等(2017)利用辐射传输模型通过敏感性实验模拟发现吸收性气溶胶指数AAI和臭氧总量之间正相关, 而臭氧总量的反演误差对AAI指数的反演影响不大。王雅鹏等(2020)综述了可用于甲醛和乙醛监测的传感器发展现状、遥感反演算法进展及产品现状, 指出基于卫星观测的二者产品集的应用。

化学传输和气候全球模型估计约30%的对流层臭氧归因于人类活动。新冠肺炎疫情期间的社会活动减少导致一定程度上的污染减排, 形成了特殊情景特征, 为研究排放控制措施的影响提供了良好的参照(Fan等, 2020)。然而观测发现中国地区对流层臭氧在某些地区并未随生产活动减少而减少。Zhao等(2020)发现华东地区从2020-01-23封城前后的20 d平均值对比, 虽然 NO_2 下降63%, 对流层臭氧柱浓度却增长10%。同样在新冠肺炎疫情封锁期间, 墨西哥城大都会区的 NO_x 大量减少, 以致臭氧生成迅速从VOC敏感区转移为 NO_x 敏感区。Peralta等(2021)以人口密度为背景变量, 利用2018年—2020年臭氧季节(03-01—05-31)地面观测的CO、 NO_x 和 O_3 每小时浓度, 对比了地面站点TROPOMI观测的CO、 NO_2 和HCHO柱浓度, 利用CO/ NO_2 、HCHO/ NO_2 、CO/HCHO的柱浓度平均比率显示不同城市区域划分的浓度降幅差别, 发现受经济社会活动、财富分布、生态分布的影响。

3.3 平流层臭氧入侵观测和区域传输

平流层臭氧在特定气象条件下可侵入对流层, 有时可影响近地面臭氧浓度(尤其高海拔地区), 美国环保局将此称作“平流层臭氧侵入例外事件”, 侵入的平流层臭氧是地面监测中背景臭氧的一类(此外还包括森林火灾和异地传输), 并于2018年颁布《关于可能影响臭氧浓度的平流层臭氧侵入例外事件申请陈述指南》。王鹏等(2020)详细阐述了美国相关实操案例对“例外事件”的

识别、判定技术和业务化处理流程及其对中国探索开展“例外事件”在臭氧达标考核剔除工作的启示。平流层侵入的特征是极低的对流层顶高度、极低的相对和特定的湿度及高浓度臭氧。平流层侵入在冬季/春季更常见。虽然卫星无法直接观测到达地表空气的平流层入侵,但可清楚了解对流层上部和下平流层动态条件,通过识别水蒸气通道中水分含量(6.2、6.5和6.9 μm) (Langford等, 2015b)。美国NOAA全球预报系统模型(GFS)对高对流层/低平流层中的某些变量分析和预测可识别当前和未来平流层侵入事件。

Knowland等(2017)通过MERRA-2再分析和Goddard地球观测系统模型模拟,研究科罗拉多州2012年春季平流层侵入影响的 O_3 超标案例,证明MERRA-2再分析评估影响地面空气质量的平流层侵入时的能力。Lin等(2012a)采用高分辨率全球化学—气候模型GFDL AM3对原位测量和AIRS的CO和 O_3 总柱浓度综合分析,发现平流层侵入对美国西部高海拔地区春季的高 O_3 事件起重要作用,2010-04-06污染传输过程中,平流层侵入将背景臭氧浓度提高到60—75 ppbv。在美国西部高海拔地区,当观测臭氧为60—70 ppbv时,平流层贡献25%—75%。Lin等(2012b)以AM3重分析风场,检验了亚洲污染羽流向美国西部地面空气的传输所涉及的机制,认为亚洲排放物可能会导致美国西部高海拔地区发生高 O_3 事件,来自平流层残余物输送可能贡献了加利福尼亚海岸以上2—4 km之间50%—60%的独特 O_3 层。Langford等(2015b)采用激光雷达臭氧观测及地面点位 O_3 、CO数据和气象参数,同时同化OMI总柱臭氧、MLS臭氧廓线、MODIS气溶胶,评估2013年内华达州克拉克县平流层至对流层传输和远距离传输对地面臭氧的季节性贡献,分析表明平流层至对流层传输直接导致克拉克县3个 O_3 值超标,来自亚洲远距离运输对地面 O_3 贡献较小。刘宁微(2019)采用高分辨率全球大气化学—环流模式,结合中国区域6个大气本底观测站数据和OMI、MLS等卫星观测数据,研究了中国区域对流层 O_3 及其前体物的时空分布特征,分析14个不同纬度带上生成的 O_3 对中国区域对流层 O_3 时空分布变化及大气本底站近地面 O_3 季节变化的贡献,研究不同大陆地区污染气团远距离输送对中国不同地区 O_3 变化的影响。

对流层臭氧在大气底层的浓度占比低于整体大气20%,受气溶胶和云及观测误差等方面影响,卫星近地面臭氧反演结果不确定度很高。生物质燃烧和森林火灾对近地面臭氧浓度升高有所贡献。Gao等(2011)通过GEOS Chem模拟捕获了地面臭氧的季节性、天气和每日变化,结果与CASTNet观测数据一致性很好,在发生活跃火灾区域中近地面臭氧浓度明显增加。Langford等(2015a)利用RAMS实时同化OMI总臭氧柱浓度和MLS臭氧廓线及MODIS气溶胶光学厚度初始化预测,研究表明高空槽火灾危险可通过增加深对流层褶皱形成将极干燥富含臭氧的空气从对流层和平流层下层输送到地表,以斯普林斯大火为例说明平流层侵入既可通过运输直接增加地表臭氧,又可通过其影响野外火灾间接增加。

卫星遥感的臭氧浓度同化后可评估臭氧的影响。Zoogman等(2014)在联合数据同化框架中的 O_3 -CO模型误差相关性研究发现夏季北美边界层的臭氧和CO对边界层深度的相反敏感性,但在小规模污染羽流中存在正误差强相关性。Quesada-Ruiz等(2020)基于Sentinel-4和Sentinel-5P的臭氧数据对2003年夏季模拟表明卫星数据为整个同化期和欧洲带来了200 hPa左右的直接增加值,且在自由对流层中Sentinel-5P的臭氧附加值与Sentinel-4的接近。Jing等(2019)在临近空间资料同化预报系统中加入SABER和MLS臭氧遥感观测同化接口,以2016年2月一次平流层爆发性增温过程试验,结果表明同化遥感的臭氧浓度得到的分析场能较真实反映北极上空平流层臭氧廓线随时间的演变特征,且与ERA5再分析资料一致性很好;同化臭氧观测对臭氧分析和预报误差的改善效果主要体现在南半球高纬平流层和北半球中高纬平流层中上层—中间层底部;同化SABER和MLS臭氧体积浓度资料能更好改善0—5 d下平流层和中间层底部臭氧的预报效果。

3.4 臭氧卫星观测数据的精度验证比对

对流层臭氧的浓度由于源、汇和生命周期的非均一性使得在空间和时间上随季节、年际和年代际时间尺度而变化很大,全球观测难以一种观测或科学模式来整体解释世界上不同地区的臭氧趋势与分布关联。学界纷纷尝试地表、探空、航空、航天飞机(如NASA的航天飞机太阳后向散射紫外线探测

仪 SSUBUV、大气—航天飞机载荷 CRISTA-SPAS、中层大气高分辨率光谱调查 MAHRSI) 和卫星资料协同应用的方式, 在卫星和模式模拟的不确定性改进上尝试验证和修正。较全面的验证数据集集中式长期存档中心有美国 Aura 验证数据中心 (AVDC) (<https://avdc.gsfc.nasa.gov/>[2021-12-13]), 由美国国家航空和航天局 (NASA) 戈达德太空飞行中心 (GSFC) 的大气化学和动力学部门托管, 其任务是支持地球观测系统 (EOS)-Aura 验证和科学活动以及未来的“A-Train”地球科学卫星验证活动。

Bian 等 (2002) 利用 Dobson 和 TOMS 资料分析北京和昆明大气臭氧总量表明北京和昆明 1979 年 (或 1980 年)—2000 年的长期变化趋势分别为 -0.642 DU/a 和 -0.009 DU/a; 存在较强的季节内变化; Dobson 和 TOMS 对臭氧总量的测量结果基本一致。Müller 等 (2003) 开发了神经网络臭氧反演系统比传统技术快约 103—105 倍, 将平流层臭氧的标准偏差降低了约 40%, 对流层臭氧标准偏差相应减少了 10%—30%; 与臭氧探空仪和经典的反演方法比较结果相吻合, 与月均 TOMS v7 的总臭氧浓度的误差在 $\pm 5\%$ 之内; 但在高太阳天顶角和非常低的臭氧值下, 局部偏差为 10%—20%。陈丹等 (2008) 获取了 2006-12—2007-12 上海地区臭氧柱浓度地基观测结果, 实验测量误差约 6%—7%, 地基观测结果与美国 TOMS 臭氧观测资料变化趋势基本一致, 相关系数为 0.81, 但地基观测结果普遍较低。蔡兆男等 (2009) 利用 1996-03—2003-06 拉萨、西宁、北京 3 个站的臭氧探空资料验证了 GOME 卫星臭氧廓线及对流层臭氧柱总量, 在对流层上层/平流层下层区域, GOME 与臭氧探空的平均偏差在北京明显高于拉萨和西宁; GOME 最低层 (0—2.5 km) 月平均臭氧浓度同地面观测值有很好的相关性; 对流层柱总量的平均偏差都在 10% 以内。Wang 等 (2011) 提出将差分光学吸收光谱技术与乘法代数重建技术相结合, 利用大气临边散射测量来获取垂直臭氧廓线, 与用无云重合 SCIAMACHY 的臭氧测量有良好的一致性, 偏差小于 $\pm 10\%$ (海拔 17—47 km 时为 $\pm 5\%$)。van Peet 等 (2014) 描述了臭氧廓线反演算法 (OPERA) 的设置, 并给出 GOME 和 GOME-2 观测结果, 反演结果与世界臭氧和紫外线辐射数据中心 WOUDC 的相对差异在对流层为 20%, 平流层为 15%。Hong 等 (2014) 将

2008 年—2010 年 OMI-DOAS 算法得出的总臭氧柱 (TOCs-OMI) 与首尔地面观测得到的臭氧柱 (TOCs-Ground) 比较表明: TOCs-OMI 的季节性平均低估 2.68% (单日最高为 18.33%), 特别是夏季; 由于 OMI-DOAS 算法中使用的倾斜柱浓度 (GCD) 不能完全解释首尔云顶以下的对流层臭氧量, 利用新 GCD 的 TOCs-OMI 与 TOCs-Ground 的平均偏差误差从 2.16% 下降到 0.60%。

郑向东等 (2017) 根据臭氧探空数据研究发现气球炸点臭氧浓度定值法 (CMR) 易高估剩余臭氧; 卫星 (SBUV 和 MLS) 纬向平均法确定的剩余臭氧对气球炸点高度不敏感; 在中国东部的臭氧总量高值区或青藏高原及低纬度臭氧低值区, 剩余臭氧呈现近 10 DU 以上低值。张雷等 (2020) 用 2008 年中山站、Amundesen-cott 南极站和 Neumayer 站臭氧探空数据, 验证 AIRS 第六版臭氧垂直廓线产品在南极的精度, 总体上显著一致, AIRS 臭氧反演精度在平流层优于对流层, 最大值出现在 UT-LS 区域 (达 40%) 且在“臭氧洞”期间明显增大。AIRS 产品精度在南极沿岸和内陆存在差异。陈源等 (2020) 选取 2016 年—2018 年北京地区臭氧探空资料对 OMPS 臭氧廓线及总量对比发现 OMPS 的臭氧垂直分布与臭氧探空资料在平流层中上层一致性较好, 相对偏差小于 10%; 在对流层中上层相对偏差较大, 为 15%—40%; OMPS 平流层臭氧总量与臭氧探空廓线积分的结果相对偏差较小 (小于 5%), 相关系数达到 0.89; 二者对流层臭氧总量平均偏差超过 30%。

Cooper 等 (2014) 发现全球人为臭氧前体物的排放由北美和欧洲的减少到东亚地区的增加, 在北半球的高纬度地区转向低纬度地区; 用 TOMS 的对流层柱臭氧结果, 在中纬度太平洋上、热带南大西洋, 印度、中国南部、东南亚的广大地区都有显著的正趋势 (2010 年—2011 年 5%—9%)。Zawada 等 (2018) 开发了一种针对 OMPS-LP 的二维或层析成像反演算法, 反演廓线的垂直分辨率为 1—2 km, 而沿轨道分辨率为 300—400 km。验证比较显示该算法数据集与 MLS 同时进行的观测值几乎完全一致, 时间差小于 20 min, 在大多数地区平流层差异小于 5%。王宛楠 (2018) 基于 AURA 的 OMI 和 MLS, 利用对流层臭氧残差法构建了对流层臭氧估算模型, 选取 WOUDC 的香港、日本、荷兰和波兰共 4 个站点的臭氧探空数据资料作

为验证数据,将OMI官方对流层臭氧浓度结果的相关性从0.35提高至0.62,模型在香港和日本站点平均误差约为10%,荷兰和波兰站点平均误差约为13%,春秋两季、夏冬两季的平均误差分别约为9%、11%。McPeters等(2019)对来自Suomi NPP的OMPS天底点臭氧绘图仪和OMPS天底点臭氧廓线仪的数据,识别并校正了仪器伪影,应用了改进的散射光校正和波长配准,并且实施了软校准技术,在大多数地区,对流层臭氧的一致性在10%以内。马明亮(2020)提出一套针对OMI/MLS和TOMS/SBUV的长时间序列对流层臭氧处理方案,得到一套长时间范围全球对流层臭氧数据,该数据和地基数据的一致性提高44.89%,分析发现华北区域夏季对流层臭氧上升趋势可达0.154 DU/年,显著高于全球其他区域,秸秆燃烧使整个东亚6月对流层臭氧平均含量升高约8% (4.0 DU),紫外辐射、纬向风速和经向风速是华北区域夏季对流层臭氧高值形成的另外3个主要因素。

近地面臭氧污染成因、臭氧空洞恢复等科学问题越来越受到科研工作者和管理决策人员的关注,卫星大尺度、连续观测的优势也得以体现,在这些科学研究和应用需求推动下,卫星反演臭氧柱总量和垂直廓线的精度也越来越高,反演算法不断改进,但目前在近地面臭氧浓度反演、平流层臭氧侵入对近地面臭氧浓度影响的量化研究等方面仍需做进一步拓展研究。

4 结 语

论文回顾总结了国内外臭氧卫星探测载荷3个时期的发展历程,以及臭氧卫星遥感监测应用方面的研究进展,国内外学者在这两方面做了大量的研究工作。国产卫星探测载荷和反演应用技术起步较晚,近年来随着国家民用空间基础设施规划的实施,各项技术得到了较快发展,但仍存在一些不足的地方。

(1) 国产臭氧监测卫星发展滞后。国外监测臭氧的卫星及应用较为成熟,国内相关卫星较少且非常滞后,虽然国家民用空间基础设施规划中陆续将发射的高光谱观测卫星、大气环境监测卫星具有初步的臭氧监测能力,但在卫星载荷的功能、性能等方面还有不小差距,比如空间分辨率、信噪比等方面,主动激光雷达,因此急需发展国产臭氧监测卫星,甚至高轨观测卫星,来有效提

升臭氧的空间分辨率、时间分辨率等监测能力。

(2) 对流层中低层和近地面臭氧浓度反演精度不高。目前臭氧柱浓度监测精度较高,但与人体健康、环境污染更密切相关的对流层中低层和近地面臭氧浓度的反演精度还不高,需要主被动结合的臭氧观测载荷,大幅提高臭氧廓线、对流层中低层和近地面臭氧反演精度。

(3) 臭氧污染评估及成因分析等不足。如近地面臭氧污染迁移转化过程、平流层臭氧侵入识别分析等。臭氧污染的大气化学过程较为复杂,其主要前体物氮氧化物和挥发性有机物的遥感反演监测也很重要,要做好臭氧污染防控,需要准确分析评估其污染成因,不同区域、行业差距较大,但关键就要控制其前体物的排放,目前这方面开展了不少研究,但应用的还不多,特别是挥发性有机物种类非常繁多,只有甲醛、乙二醛开展了少量的遥感监测和应用,其监测技术、反演精度、地面观测验证等亟待加强。

参考文献(References)

- Ackerman A A, Platnick S, Bhartia P K, Duncan B, L'Ecuyer T, Heidinger A, Skofronick-Jackson G, Loeb N, Schmit T and Smith N. 2019. Satellites see the world's atmosphere. *Hou M T, Li J H, trans. Advances in Meteorological Science and Technology*, 9(S1): 52-72 (Ackerman S A, Platnick S, Bhartia P K, Duncan B, L'Ecuyer T, Heidinger A, Skofronick-Jackson G, Loeb N, Schmit T, Smith N. 2019. 第4章 地球大气的卫星观测. 侯美亭,李婧华,译. 气象科技进展, 9(S1): 52-72) [DOI: 10.3969/j.issn.2095-1973.2019.z1.005]
- Bian J C, Chen H B, Zhao Y L and Lü D R. 2002. Variation features of total atmospheric ozone in Beijing and Kunming based on Dobson and TOMS data. *Advances in Atmospheric Sciences*, 19(2): 279-286 [DOI: 10.1007/s00376-002-0022-z]
- Boynard A, Clerbaux C, Coheur P F, Hurtmans D, Turquety S, George M, Hadji-Lazaro J, Keim C and Meyer-Arnek J. 2009. Measurements of total and tropospheric ozone from IASI: comparison with correlative satellite, ground-based and ozonesonde observations. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 9(16): 6255-6271 [DOI: 10.5194/acp-9-6255-2009]
- Cai Z N, Wang Y, Liu X, Zheng X D, Chance K and Liu Y. 2009. Validation of GOME ozone profiles and tropospheric column ozone with ozone Sonde over China. *Journal of Applied Meteorological Science*, 20(3): 337-345 (蔡兆男,王永, Liu X,郑向东, Chance K,刘毅. 2009. 利用探空资料验证GOME卫星臭氧数据. 应用气象学报, 20(3): 337-345) [DOI: 10.3969/j.issn.1001-7313.2009.03.010]

- Chen D, Zhou B and Chen L M. 2008. The retrieval of atmospheric ozone column densities using zenith-sky scattered light observations. *Journal of Fudan University (Natural Science)*, 47(4): 478-486 (陈丹, 周斌, 陈立民. 2008. 利用天顶散射光观测反演大气臭氧柱浓度. *复旦学报(自然科学版)*, 47(4): 478-486) [DOI: 10.15943/j.cnki.fdx-b-jns.2008.04.015]
- Chen L F, Wang Y P, Zhang X X, Wang Z F, Tao J H, Wang L L and Zhang Y. 2019. Satellite remote sensing monitoring of ozone and its precursors for regional secondary pollution risk control. *Environmental Monitoring and Forewarning*, 11(5): 13-21 (陈良富, 王雅鹏, 张欣欣, 王子峰, 陶金花, 王莉莉, 张莹. 2019. 面向区域二次污染风险控制的臭氧及其前体物卫星遥感监测. *环境监控与预警*, 11(5): 13-21) [DOI: 10.3969/j.issn.1674-6732.2019.05.003]
- Chen Y, Liu H L, Duan M Z, Lü D R and Zhang J Q. 2020. Validation of ozone product by satellite OMPS with sounding measurements over Beijing. *Remote Sensing Technology and Application*, 35(3): 723-730 (陈源, 刘海磊, 段民征, 吕达仁, 张金强. 2020. 利用探空资料验证北京地区 OMPS 卫星臭氧产品. *遥感技术与应用*, 35(3): 723-730) [DOI: 10.11873/j.issn.1004-0323.2020.3.0723]
- Clerbaux C, Boynard A, Clarisse L, George M, Hadji-Lazaro J, Herbin H, Hurtmans D, Pommier M, Razavi A, Turquety S, Wespes C and Coheur P F. 2009. Monitoring of atmospheric composition using the thermal infrared IASI/MetOp sounder. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 9(16): 6041-6054 [DOI: 10.5194/acp-9-6041-2009]
- Coheur P F, Barret B, Turquety S, Hurtmans D, Hadji-Lazaro J and Clerbaux C. 2005. Retrieval and characterization of ozone vertical profiles from a thermal infrared nadir sounder. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 110(D24): D24303 [DOI: 10.1029/2005JD005845]
- Coldewey-Egbers M, Weber M, Buchwitz M and Burrows J P. 2004. Application of a modified DOAS method for total ozone retrieval from GOME data at high polar latitudes. *Advances in Space Research*, 34(4): 749-753 [DOI: 10.1016/j.asr.2003.05.051]
- Cooper O R, Parrish D D, Ziemke J, Balashov N V, Cupeiro M, Galbally I E, Gilge S, Horowitz L, Jensen N R, Lamarque J F, Naik V, Oltmans S J, Schwab J, Shindell D T, Thompson A M, Thouret V, Wang Y and Zbinden R M. 2014. Global distribution and trends of tropospheric ozone: an observation-based review. *Elementa: Science of the Anthropocene*, 2: 000029 [DOI: 10.12952/journal.elementa.000029]
- Cracknell A P and Varotsos C A. 2012. *Remote Sensing and Atmospheric Ozone: Human Activities versus Natural Variability*. Berlin, Heidelberg: Springer [DOI: 10.1007/978-3-642-10334-6]
- Cracknell A P and Varotsos C A. 2014. Satellite systems for atmospheric ozone observations. *International Journal of Remote Sensing*, 35(15): 5566-5597
- Divakarla M, Barnet C, Goldberg M, Maddy E, Irion F, Newchurch M, Liu X P, Wolf W, Flynn L, Labow G, Xiong X Z, Wei J and Zhou L H. 2008. Evaluation of Atmospheric Infrared Sounder ozone profiles and total ozone retrievals with matched ozonesonde measurements, ECMWF ozone data, and Ozone Monitoring Instrument retrievals. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 113(D15): D15308 [DOI: 10.1029/2007JD009317]
- Duncan B N, Yoshida Y, Olson J R, Sillman S, Martin R V, Lamsal L, Hu Y T, Pickering K E, Retscher C, Allen D J and Crawford J H. 2010. Application of OMI observations to a space-based indicator of NO_x and VOC controls on surface ozone formation. *Atmospheric Environment*, 44(18): 2213-2223 [DOI: 10.1016/j.atmosenv.2010.03.010]
- Fan C, Li Y, Guang J, Li Z Q, Elnashar A, Allam M and de Leeuw G. 2020. The impact of the control measures during the COVID-19 outbreak on air pollution in China. *Remote Sensing*, 12(10): 1613 [DOI: 10.3390/rs12101613]
- Felder M, Sehnke F and Kaifel A. 2013. Combined ozone retrieval from METOP sensors using META-training of deep neural networks//ESA Living Planet Symposium. Edinburgh: ESA
- Gao M, Li Q B, Mao Y H and Randerson J. 2011. Biomass burning impact on surface ozone in the western U. S.//5th International GEOS-Chem (IGC) Meeting. Cambridge, MA: Harvard University
- Gaudel A, Cooper O R, Ancellet G, Barret B, Boynard A, Burrows J P, Clerbaux C, Coheur P F, Cuesta J, Cuevas E, Doniki S, Dufour G, Ebojic F, Foret G, Garcia O, Granados-Muñoz M J, Hannigan J W, Hase F, Hassler B, Huang G, Hurtmans D, Jaffe D, Jones N, Kalabokas P, Kerridge B, Kulawik S, Latter B, Leblanc T, Le Flochmoën E, Lin W, Liu J, Liu X, Mahieu E, McClure-Begley A, Neu J L, Osman M, Palm M, Petetin H, Petropavlovskikh I, Querrel R, Rappoe N, Rozanov A, Schultz M G, Schwab J, Siddans R, Smale D, Steinbacher M, Tanimoto H, Tarasick D W, Thouret V, Thompson A M, Trickl T, Weatherhead E, Wespes C, Worden H M, Vigouroux C, Xu X, Zeng G and Ziemke J. 2018. Tropospheric Ozone Assessment Report: present-day distribution and trends of tropospheric ozone relevant to climate and global atmospheric chemistry model evaluation. *Elementa: Science of the Anthropocene*, 6: 39 [DOI: 10.1525/elementa.291]
- Glumb R J, Jordan D C and Mantica P. 2002. Development of the Crosstrack Infrared Sounder (CrIS) sensor design//Proceedings Volume 4486, *Infrared Spaceborne Remote Sensing IX*. San Diego, CA: SPIE: 411-424 [DOI: 10.1117/12.455124]
- Hong H, Lee H, Kim J and Lee Y G. 2014. First comparison of OMI-DOAS total ozone using ground-based observations at a megacity site in East Asia: causes of discrepancy and improvement in OMI-DOAS total ozone during summer. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 119(16): 10058-10067 [DOI: 10.1002/2014JD021829]
- Huang F X, Huang Y, Flynn L E, Wang W H, Cao D J and Wang S R. 2013. Radiometric calibration of the solar backscatter ultraviolet sounder and validation of ozone profile retrievals. *Advances in Met S&T*, 3(4): 108-115 (黄富祥, 黄煜, Flynn L E, 王维和, 曹冬杰, 王淑荣. 2013. 紫外臭氧垂直探测仪(SBUS)辐射定标和反

- 演臭氧垂直廓线验证. 气象科技进展, 3(4): 108-115 [DOI: 10.3969/j.issn.2095-1973.2013.04.011]
- Huang F X, Zhao M X, Yang C J and Dong C H. 2008. Ozone profile retrievals from FY-3 and validation. *Progress in Natural Science*, 18(10): 1136-1142 (黄富祥, 赵明现, 杨昌军, 董超华. 2008. 风云三号卫星紫外臭氧垂直廓线反演算法及对比反演试验. 自然科学进展, 18(10): 1136-1142) [DOI: 10.3321/j.issn:1002-008X.2008.10.007]
- Jiang F, Wang W H, Wang Y M and Wang Y J. 2012. Calibration in-orbit and retrieval result study of FY-3 Total Ozone Unit (TOU). *Chinese Journal of Geophysics*, 55(3): 760-767 (江芳, 王维和, 王咏梅, 王英鉴. 2012. FY-3 气象卫星紫外臭氧总量探测仪辐亮度在轨定标与反演结果分析. 地球物理学报, 55(3): 760-767) [DOI: 10.6038/j.issn.0001-5733.2012.03.005]
- Jin X M, Fiore A M, Murray L T, Valin L C, Lamsal L N, Duncan B, Boersma K F, De Smedt I, Abad G G, Chance K and Tonnesen G S. 2017. Evaluating a space-based indicator of surface ozone-NO_x-VOC sensitivity over midlatitude source regions and application to decadal trends. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 122(19): 10439-10461 [DOI: 10.1002/2017JD026720]
- Jin X M and Holloway T. 2015. Spatial and temporal variability of ozone sensitivity over China observed from the Ozone Monitoring Instrument. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 120(14): 7229-7246 [DOI: 10.1002/2015JD023250]
- Jing W Q, Wang Y G, Cui Y Y, Cai Q F and Lan W R. 2019. Assimilation of near space ozone data from SABER and MLS observations into the whole atmosphere community climate model and data assimilation research test-bed. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences*, 43(2): 233-250 [DOI: 10.3878/j.issn.1006-9895.1803.17184]
- Kim S. 2015. *Particulate Matter and Ozone: Remote Sensing and Source Attribution*. Cambridge, MA: Harvard University
- Knowland K E, Ott L E, Duncan B N and Wargan K. 2017. Stratospheric intrusion-influenced ozone air quality exceedances investigated in the NASA MERRA-2 reanalysis. *Geophysical Research Letters*, 44(20): 10691-10701 [DOI: 10.1002/2017GL074532]
- Langford A O, Pierce R B and Schultz P J. 2015a. Stratospheric intrusions, the Santa Ana winds, and wildland fires in southern California. *Geophysical Research Letters*, 42(14): 6091-6097 [DOI: 10.1002/2015GL064964]
- Langford A O, Senff C J, Alvarez R J II, Brioude J, Cooper O R, Holloway J S, Lin M Y, Marchbanks R D, Pierce R B, Sandberg S P, Weickmann A M and Williams E J. 2015b. An overview of the 2013 Las Vegas Ozone Study (LVOS): impact of stratospheric intrusions and long-range transport on surface air quality. *Atmospheric Environment*, 109: 305-322 [DOI: 10.1016/j.atmosenv.2014.08.040]
- Li R, Cui L L, Fu H B, Li J L, Zhao Y L and Chen J M. 2020. Satellite-based estimation of full-coverage ozone (O₃) concentration and health effect assessment across Hainan Island. *Journal of Cleaner Production*, 244: 118773 [DOI: 10.1016/j.jclepro.2019.118773]
- Li Y F. 2020. Remote Sensing-Based Estimating Ground-Level O₃ Concentrations in China Using Gradient Boosting Regressor Tree. Xuzhou: China University of Mining and Technology (李一聿. 2020. 基于梯度提升回归树的中国近地面 O₃ 浓度遥感估算. 徐州: 中国矿业大学)
- Lin M Y, Fiore A M, Cooper O R, Horowitz L W, Langford A O, Levy H II, Johnson B J, Naik V, Oltmans S J and Senff C J. 2012a. Springtime high surface ozone events over the western United States: quantifying the role of stratospheric intrusions. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 117(D21): D00V22 [DOI: 10.1029/2012JD018151]
- Lin M Y, Fiore A M, Horowitz L W, Cooper O R, Naik V, Holloway J, Johnson B J, Middlebrook A M, Oltmans S J, Pollack I B, Ryerson T B, Warner J X, Wiedinmyer C, Wilson J and Wyman B. 2012b. Transport of Asian ozone pollution into surface air over the western United States in spring. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 117(D21): D00V07 [DOI: 10.1029/2011JD016961]
- Liu C. 2018. An algorithm for the retrieval of ozone profiles from satellite measurements. China, CN201810259400.2 (刘诚. 2018. 一种卫星遥感大气臭氧廓线反演算法. 中国, CN201810259400.2)
- Liu H R, Liu C, Xie Z Q, Li Y, Huang X, Wang S S, Xu J and Xie P H. 2016. A paradox for air pollution controlling in China revealed by "APEC Blue" and "Parade Blue". *Scientific Reports*, 6(1): 34408 [DOI: 10.1038/srep34408]
- Liu J G, Liu W Q and Lu Y H. 2003. Ozone profile retrieval algorithm from satellite data//The first International Symposium on Environmental Remote Sensing Application Technology. Lijiang: [s.n.]: 170-175 (刘建国, 刘文清, 陆亦怀. 2003. 大气臭氧廓线的卫星数据反演方法//第一届环境遥感应用技术国际研讨会论文集. 丽江: [s.n.]: 170-175)
- Liu N W. 2019. *Seasonal-Spatial Variations of Surface Ozone over China and the Influence of Long Range Transport*. Beijing: Chinese Academy of Meteorological Sciences (刘宁薇. 2019. 中国区域近地面臭氧时空分布变化及远距离输送影响研究. 北京: 中国气象科学研究院)
- Ma M L. 2020. Temporal and spatial analysis of tropospheric ozone, simulation of influencing factors and surface ozone estimation. *Acta Geodaetica et Cartographica Sinica*, 49(11): 1507 (马明亮. 2020. 对流层臭氧时空分析影响因素研究及近地面臭氧估算. 测绘学报, 49(11): 1507) [DOI: 10.11947/j.AGCS.2020.20190438]
- Ma P F, Chen L F, Wang Z T, Zhao S H, Li Q, Tao M H and Wang Z F. 2016. Ozone profile retrievals from the cross-track infrared sounder. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 54(7): 3985-3994 [DOI: 10.1109/TGRS.2016.2532353]
- Martin R V, Fiore A M and Van Donkelaar A. 2004. Space-based diagnosis of surface ozone sensitivity to anthropogenic emissions. *Geophysical Research Letters*, 31(6): L06120 [DOI: 10.1029/2004GL019416]
- McPeters R, Frith S, Kramarova N, Ziemke J and Labow G. 2019.

- Trend quality ozone from NPP OMPS: the version 2 processing. *Atmospheric Measurement Techniques*, 12(2): 977-985 [DOI: 10.5194/amt-12-977-2019]
- Mo Y Q, Li Q, Karimian H, Zhang S T, Kong X Y, Fang S W and Tang B Y. 2021. Daily spatiotemporal prediction of surface ozone at the national level in China: a improvement of CAMS ozone product. *Atmospheric Pollution Research*, 12(1): 391-402 [DOI: 10.1016/j.apr.2020.09.020]
- Müller M D, Kaifel A K, Weber M, Tellmann S, Burrows J P and Loyola D. 2003. Ozone profile retrieval from Global Ozone Monitoring Experiment (GOME) data using a neural network approach (Neural Network Ozone Retrieval System (NNORSY)). *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 108(D16): 4497 [DOI: 10.1029/2002JD002784]
- Nassar R, Logan J A, Worden H M, Megretskaja I A, Bowman K W, Osterman G B, Thompson A M, Tarasick D W, Austin S, Claude H, Dubey M K, Hocking W K, Johnson B J, Joseph E, Merrill J, Morris G A, Newchurch M, Oltmans S J, Posny F, Schmidlin F J, Vömel H, Whiteman D N and Witte J C. 2008. Validation of Tropospheric Emission Spectrometer (TES) nadir ozone profiles using ozonesonde measurements. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 113(D15): D15S17 [DOI: 10.1029/2007JD008819]
- Natraj V, Liu X, Kulawik S, Chance K, Chatfield R, Edwards D P, Eldering A, Francis G, Kurosu T, Pickering K, Spurr R and Worden H. 2011. Multi-spectral sensitivity studies for the retrieval of tropospheric and lowermost tropospheric ozone from simulated clear-sky GEO-CAPE measurements. *Atmospheric Environment*, 45(39): 7151-7165 [DOI: 10.1016/j.atmosenv.2011.09.014]
- Newchurch M J, Kuang S, Leblanc T, Alvarez R J II, Langford A O, Senff C J, Burris J F, McGee T J, Sullivan J T, DeYoung R J, Al-Saadi J, Johnson M and Pszenny A. 2016. TOLNet - a tropospheric ozone lidar profiling network for satellite continuity and process studies. *EPJ Web of Conferences*, 119: 20001 [DOI: 10.1051/epjconf/201611920001]
- Peng X L. 2017. Spatio-temporal Reconstruction for Globally Remotely Sensed Total Ozone Production. Wuhan: Wuhan University (彭晓琳. 2017. 全球卫星臭氧产品的时空重建研究. 武汉: 武汉大学)
- Peralta O, Ortíz-Alvarez A, Torres-Jardón R, Suárez-Lastra M, Castro T and Ruíz-Suárez L G. 2021. Ozone over Mexico City during the COVID-19 pandemic. *Science of the Total Environment*, 761: 143183 [DOI: 10.1016/j.scitotenv.2020.143183]
- Petropavlovskikh I, Bhartia P K and DeLuisi J. 2005. New Umkehr ozone profile retrieval algorithm optimized for climatological studies. *Geophysical Research Letters*, 32(16): L16808 [DOI: 10.1029/2005GL023323]
- Quesada-Ruiz S, Attié J L, Lahoz W A, Abida R, Ricaud P, El Amraoui L, Zbinden R, Piacentini A, Joly M, Eskes H, Segers A, Curier L, de Haan J, Kujanpää J, Oude Nijhuis A C P, Tamminen J, Timmermans R and Veeckind P. 2020. Benefit of ozone observations from Sentinel-5P and future Sentinel-4 missions on tropospheric composition. *Atmospheric Measurement Techniques*, 13(1): 131-152 [DOI: 10.5194/amt-13-131-2020]
- Sillman S and Samson P J. 1995. Impact of temperature on oxidant photochemistry in urban, polluted rural and remote environments. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 100(D6): 11497-11508 [DOI: 10.1029/94JD02146]
- Su W J, Liu C, Chan K L, Hu Q H, Liu H R, Ji X G, Zhu Y Z, Liu T, Zhang C X, Chen Y J and Liu J G. 2020. An improved TROPOMI tropospheric HCHO retrieval over China. *Atmospheric Measurement Techniques*, 13(11): 6271-6292 [DOI: 10.5194/amt-13-6271-2020]
- Su W J, Liu C, Hu Q H, Fan G Q, Xie Z Q, Huang X, Zhang T S, Chen Z Y, Dong Y S, Ji X G, Liu H R, Wang Z and Liu J G. 2017. Characterization of ozone in the lower troposphere during the 2016 G20 conference in Hangzhou. *Scientific Reports*, 7(1): 17368 [DOI: 10.1038/s41598-017-17646-x]
- van Peet J C A, van der A R J, Tuinder O N E, Wolfram E, Salvador J, Levelt P F and Kelder H M. 2014. Ozone Profile Retrieval Algorithm (OPERA) for nadir-looking satellite instruments in the UV-VIS. *Atmospheric Measurement Techniques*, 7(3): 859-876 [DOI: 10.5194/amt-7-859-2014]
- Wallington T J, Seinfeld J H and Barker J R. 2019. 100 years of progress in gas-phase atmospheric chemistry research. Zhang D Y, Tian X Y, trans. *Advances in Meteorological Science and Technology*, 9(S1): 144-158 (提摩太·约翰·沃林顿, Seinfeld J H, Barker J R, 张定媛, 田晓阳. 2019. 第10章气相大气化学研究的百年进展. 张定媛, 田晓阳, 译. *气象科技进展*, 9(S1): 144-158) [DOI: 10.3969/j.issn.2095-1973.2019.zl.011]
- Wang P, Wang M, Feng X Z, Zhao M X and Du X L. 2020. The implementation of stratospheric ozone intrusion exceptional event in the United States and its implication for ozone control in China. *Environment and Sustainable Development*, 45(3): 149-154 (王鹏, 王敏, 冯相昭, 赵梦雪, 杜晓林. 2020. “平流层臭氧侵入例外事件”美国做法及其对中国臭氧污染防控的启示. *环境与可持续发展*, 45(3): 149-154) [DOI: 10.19758/j.cnki.issn1673-288x.202003149]
- Wang Q, Huang F X and Xia X Q. 2019. Reversal trends of atmospheric temperature in spring over the Tibetan Plateau after 2008 and possible links with total ozone trends. *Climate Change Research*, 15(4): 385-394 (王晴, 黄富祥, 夏学齐. 2019. 2008年以来青藏高原春季大气温度逆转趋势及其与臭氧总量变化之间的可能联系. *气候变化研究进展*, 15(4): 385-394) [DOI: 10.12006/j.issn.1673-1719.2019.061]
- Wang Y N. 2018. Remote Sensing Estimation Model of Tropospheric Ozone over China. Beijing: University of Chinese Academy of Sciences (Institute of Remote Sensing and Digital Earth, Chinese Academy of Sciences) (王宛楠. 2018. 中国区域对流层臭氧卫星遥感估算模型研究. 北京: 中国科学院大学(中国科学院遥感与数字地球研究所))

- Wang Y P, Li X Y, Chen L F, Zhang Y, Zou M M, Zhang H and Zhu S Y. 2016. Overview of infrared limb sounding. *Journal of Remote Sensing*, 20(4): 513-527 (王雅鹏, 李小英, 陈良富, 张莹, 邹铭敏, 张晗, 朱松岩. 2016. 红外临边探测发展现状. *遥感学报*, 20(4): 513-527) [DOI: 10.11834/jrs.20165302]
- Wang Y P, Tao J H, Yu C, Cheng L X, Gu J B, Fan M, Zhang Y, Husi L T and Chen L F. 2020. Overview of formaldehyde and glyoxal monitoring and application based on satellite remote sensing. *Ecology and Environmental Monitoring of Three Gorges*, 5(3): 43-52 (王雅鹏, 陶金花, 余超, 程良晓, 顾坚斌, 范萌, 张莹, 胡斯勒图, 陈良富. 2020. 基于卫星遥感的甲醛和乙二醛监测与应用综述. *三峡生态环境监测*, 5(3): 43-52) [DOI: 10.19478/j.cnki.2096-2347.2020.03.05]
- Wang Z J, Chen S B, Yang C Y and Jin L H. 2011. A method for retrieving vertical ozone profiles from limb scattered measurements. *Acta Meteorologica Sinica*, 25(5): 659-668 [DOI: 10.1007/s13351-011-0509-6]
- Wargan K, Pawson S, Coy L and Conaty A. 2020. Ozone data from ultraviolet satellite measurements in GEOS products. *GMAO Research Brief*
- Worden H M, Logan J A, Worden J R, et al. Comparisons of Tropospheric Emission Spectrometer (TES) ozone profiles to ozone sondes: Methods and initial results. *Journal of Geophysical Research*, *J. Geophys. Res.*, 112, D03309, 2007, [DOI: 10.1029/2006JD007258]
- Xia C Z, Liu C, Cai Z N, Duan X N, Hu Q H, Zhao F, Liu H R, Ji X H, Zhang C X and Liu Y. 2021b. Improved anthropogenic SO₂ retrieval from high-spatial-resolution satellite and its application during the COVID-19 pandemic. *Environmental Science and Technology*, 55(17): 11538-11548 [DOI: 10.1021/acs.est.1c01970]
- Xia C Z, Liu C, Cai Z N, Duan X N, Zhao F, Liu H R, Ji X G and Liu J G. 2020. Evaluation of the accuracy of the Sentinel-5 Precursor operational SO₂ products over China. *Chinese Science Bulletin*, 65(20): 2106-2111 (夏丛紫, 刘诚, 蔡兆男, 段晓男, 赵飞, 刘浩然, 季祥光, 刘建国. 2020. 哨兵5号欧洲业务二氧化硫产品在我国的准确性评估. *科学通报*, 65(20): 2106-2111) [DOI: 10.1360/TB-2019-0772]
- Xia C Z, Liu C, Cai Z N, Zhao F, Su W J, Zhang C X and Liu Y. 2021a. First sulfur dioxide observations from the environmental trace gases monitoring instrument (EMI) onboard the GeoFen-5 satellite. *Science Bulletin*, 66(10): 969-973
- Yang J M. 2009. Vertical distribution of stratospheric ozone over China. *Atmospheric and Oceanic Science Letters*, 2(1): 51-56 [DOI: 10.1080/16742834.2009.11446777]
- Zawada D J, Rieger L A, Bourassa A E and Degenstein D A. 2018. Tomographic retrievals of ozone with the OMPS Limb Profiler: algorithm description and preliminary results. *Atmospheric Measurement Techniques*, 11(4): 2375-2393 [DOI: 10.5194/amt-11-2375-2018]
- Zhang C X, Liu C, Chan K L, Hu Q H, Liu H R, Li B, Xing C Z, Tan W, Zhou H J, Si F Q and Liu J G. 2020. First observation of tropospheric nitrogen dioxide from the Environmental Trace Gases Monitoring Instrument onboard the GaoFen-5 satellite. *Light: Science and Applications*, 9(1): 66 [DOI: 10.1038/s41377-020-0306-z]
- Zhang C X, Liu C, Hu Q H, Cai Z N, Su W J, Xia C Z, Zhu Y Z, Wang S W and Liu J G. 2019. Satellite UV-Vis spectroscopy: implications for air quality trends and their driving forces in China during 2005-2017. *Light: Science and Applications*, 8(1): 100 [DOI: 10.1038/s41377-019-0210-6]
- Zhang C X, Liu C, Wang Y, Si F Q, Zhou H J, Zhao M J, Su W J, Zhang W Q, Chan K L, Liu X, Xie P H, Liu J G and Wagner T. 2018. Preflight Evaluation of the performance of the Chinese environmental trace gas monitoring instrument (EMI) by spectral analyses of nitrogen dioxide. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 56(6): 3323-3332 [DOI: 10.1109/TGRS.2018.2798038]
- Zhang L, Ding M H, Bian L G and Li J. 2020. Validation of AIRS temperature and ozone profiles over Antarctica. *Chinese Journal of Geophysics*, 63(4): 1318-1331 (张雷, 丁明虎, 卞林根, 李建. 2020. AIRS 卫星温度和臭氧廓线在南极的验证分析. *地球物理学报*, 63(4): 1318-1331) [DOI: 10.6038/cjg2020M0698]
- Zhang Y, Gao Y, Zhu S Y and Zhang G X. 2014. Variation of total ozone over China for 30 years analyzed by multi-source satellite remote sensing data. *Journal of Geo-Information Science*, 16(6): 971-978 (张莹, 高场, 祝善友, 张桂欣. 2014. 近30年中国上空臭氧总量时空变化遥感监测分析. *地球信息科学学报*, 16(6): 971-978) [DOI: 10.3724/SP.J.1047.2014.00971]
- Zhang Y, Wang W H and Zhang X Y. 2015. Distribution and variation of atmospheric total column ozone based on satellite remote sensing data. *Science and Technology Review*, 33(17): 23-29 (张艳, 王维和, 张兴赢. 2015. 卫星遥感监测大气臭氧总量分布和变化. *科技导报*, 33(17): 23-29) [DOI: 10.3981/j.issn.1000-7857.2015.17.002]
- Zhao F, Liu C, Cai Z N, Liu X, Bak J, Kim J, Hu Q H, Xia C Z, Zhang C X, Sun Y W, Wang W and Liu J G. 2021. Ozone profile retrievals from TROPOMI: implication for the variation of tropospheric ozone during the outbreak of COVID-19 in China. *Science of the Total Environment*, 764: 142886 [DOI: 10.1016/j.scitotenv.2020.142886]
- Zhao F Q, Wang W H, Deng X B, Yang Y and Peng Y J. 2017. Relationship between absorbing aerosol index and total column ozone. *Journal of Remote Sensing*, 21(4): 500-508 (赵富强, 王维和, 邓小波, 杨阳, 彭永杰. 2017. 大气臭氧总量与吸收性气溶胶指数的关系. *遥感学报*, 21(4): 500-508) [DOI: 10.11834/jrs.20176324]
- Zheng X D, Tian H M and Liu M Q. 2017. Residual ozone and ozone-sonde correction factor over different sites of China. *Chinese Journal of Space Science*, 37(5): 564-573 (郑向东, 田宏民, 刘梦琪. 2017. 中国不同地区剩余臭氧及臭氧探空订正因子. *空间科学学报*, 37(5): 564-573) [DOI: 10.11728/cjss2017.05.564]

Zoogman P, Jacob D J, Chance K, Worden H M, Edwards D P and Zhang L. 2014. Improved monitoring of surface ozone by joint assimilation of geostationary satellite observations of ozone and CO. *Atmospheric Environment*, 84: 254-261 [DOI: 10.1016/j.atmosenv.2013.11.048]

Zoogman P, Jacob D J, Chance K, Zhang L, Le Sager P, Fiore A M, El-dering A, Liu X, Natraj V and Kulawik S S. 2011. Ozone air quality measurement requirements for a geostationary satellite mission. *Atmospheric Environment*, 45(39): 7143-7150 [DOI: 10.1016/j.atmosenv.2011.05.058]

Advances of ozone satellite remote sensing in 60 years

ZHAO Shaohua¹, YANG Xiaoyu², LI Zhengqiang³, WANG Zhongting¹, ZHANG Yuhuan¹, WANG Yu¹, ZHOU Chunyan¹, MA Pengfei¹

1. State Environmental Protection Key Lab of Satellite Remote Sensing, Ministry of Ecology and Environment Center for Satellite Application on Ecology and Environment, Beijing 100094, China;

2. Jinan Environmental Monitoring Center of Shandong Province, Jinan 250101, China;

3. Chinese Academy of Sciences, Aerospace Information Research Institute, Beijing 100101, China

Abstract: Ozone is an important trace gas which absorbs UV radiation and protects life on earth from its potentially harmful effects. It is an important greenhouse gas in the troposphere. On average, approximately 90% of the atmospheric ozone is found in the stratosphere, and 10% is found in the troposphere. After the PM_{2.5} reduction, the increasing surface ozone concentration has become the primary concern in China, which is a significant pollution control task in the Chinese “14th Five-Year Plan.” This study reviews the substantial development of international ozone satellite observations in the past 60 years, including the satellite payloads, ozone retrieval, and monitoring application. The development of satellite can be divided into three stages with three viewing geometries (limb, occultation, and nadir), the limb and occultation observations are mainly focused on the middle and upper atmospheres, while the nadir observation can provide effective information on the troposphere, with a better horizontal resolution and the capability to derive the ozone in low middle layer of troposphere by retrieval method. The ozone retrieval methods and monitoring applications are constantly updated with the development of the satellite. This study focuses on the important progress in the satellite remote sensing retrieval algorithm for total ozone column and vertical ozone profiles, the observation of surface ozone concentration and its precursors, the observation and regional transmission of stratospheric ozone intrusion, and the validation of ozone satellite observation data. The algorithm of the total ozone column retrieval has high accuracy (up to about 90%—95%) while the ozone profile retrieval algorithm limited by satellite payloads, clouds and method, its accuracy is relatively low (up to about 70%—75%). There are some problems in the retrieval of the near surface ozone concentration by machine learning method, which has poor robustness and easy to overfitting. Satellite remote sensing combined with other data can monitor stratospheric ozone intrusion, but it is still difficult to quantify the impact of surface ozone concentration. Compared with that of the international ozone satellite remote sensing monitoring, the development of China’s ozone monitoring satellites lags behind. Although the hyperspectral observation satellites and atmospheric environment monitoring satellites to be launched in succession in the national civil space infrastructure planning have preliminary ozone monitoring capabilities, a large gap exists in the function and performance of satellite payloads, such as spatial resolution and signal-to-noise ratio. In terms of retrieval algorithm and monitoring application, the retrieval accuracy of the total amount of ozone column at present is relatively high. Retrieval accuracy of ozone concentration in the middle and lower troposphere and near surface is insufficient. Evaluation and cause analysis of ozone pollution, such as the migration and transformation process of near surface ozone pollution and the stratospheric ozone intrusion identification, are also inadequate. These are the key problems that need to be solved in the next step.

Key words: Ozone, remote sensing, total column and profile retrieval, stratosphere, satellite payloads, retrieval, monitoring application

Supported by Key Special Project of “Inter-Government International Science and Technology Innovation Cooperation Project”. (No. 2021YFE0117100); National Science and Technology Major Project, Chinese High-resolution Earth Observation System (CHEOS) Special Project (No. 05-Y30B01-9001-19/20-3)