



# 风云三号F星紫外高光谱臭氧探测器-天底型(OMS-N)臭氧总量观测

许健<sup>1</sup>, 王雅鹏<sup>2,5,6\*</sup>, 陈林<sup>2,5,6</sup>, Dmitry EFREMENKO<sup>3</sup>, 饶兰兰<sup>1</sup>, 格根塔娜<sup>1</sup>, 刘双慧<sup>1</sup>, 王倩<sup>2,5,6</sup>, 毛靖华<sup>1</sup>, 王咏梅<sup>1</sup>, 孙凌<sup>2,5,6</sup>, 闫欢欢<sup>2,5,6</sup>, 徐娜<sup>2,5,6</sup>, 胡秀清<sup>2,5,6</sup>, 胡斯勒图<sup>4</sup>, 施建成<sup>1</sup>

1. 中国科学院国家空间科学中心, 北京 100190

2. 中国气象局国家卫星气象中心, 北京 100081

3. Remote Sensing Technology Institute, German Aerospace Center (DLR), Oberpfaffenhofen 82234, Germany

4. 中国科学院空天信息创新研究院, 北京 100094

5. 许健民气象卫星创新中心(FYSIC), 北京 100081

6. 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, 北京 100081

\* 通讯作者, E-mail: wangyp@cma.gov.cn

收稿日期: 2025-02-14; 收修改稿日期: 2025-08-26; 接受日期: 2025-09-02; 网络版发表日期: 2025-10-17

国家重点研发计划项目(2023YFB3907500)、国家自然科学基金项目(42375142、42305154)、风云卫星应用先行计划许健民气象卫星创新中心专项项目(FY-APP-ZX-2022.0214)和国家民用空间基础设施项目(Y5BZ31AC60)资助

**摘要** 紫外高光谱臭氧探测器-天底型(Ozone Monitoring Suite-Nadir, OMS-N)搭载于中国风云三号F星(FengYun-3F, FY-3F)上, 于2023年8月发射. OMS-N采用高光谱紫外-可见光(UV-VIS)探测技术, 具备7km×7km的空间分辨率, 为晨昏轨道观测提供了先进的技术支持, 标志着全球大气成分监测能力的重要提升. 本文开展了基于OMS-N的臭氧总量(Total Ozone Column, TOC)反演研究, 基于改进的差分吸收光谱法(Differential Optical Absorption Spectroscopy, DOAS)算法构建反演框架. 该算法通过引入辐射传输计算优化和直接基于OMS-N观测光谱反演地表属性和臭氧廓线等先验信息, 克服了传统DOAS方法依赖外部资料或气候场的局限. 利用来自33个地面观测站的Brewer、Dobson和SAOZ仪器数据进行验证, 结果显示OMS-N TOC反演产品与地面观测数据高度一致, 相关系数大多超过0.9. 与国际主流卫星载荷TROPOMI和GOME-2B的对比也表明, OMS-N能够稳定捕捉全球季节性臭氧分布特征, 南北半球各季节偏差普遍小于2%. 研究结果表明, OMS-N具备可靠的高分辨率臭氧动态监测能力, 可为气候变化和环境问题研究提供有力支持.

**关键词** 风云三号F星, OMS-N, 臭氧, 紫外-可见光高光谱, 遥感

**中文引用格式:** 许健, 王雅鹏, 陈林, Efremenko D, 饶兰兰, 格根塔娜, 刘双慧, 王倩, 毛靖华, 王咏梅, 孙凌, 闫欢欢, 徐娜, 胡秀清, 胡斯勒图, 施建成. 2025. 风云三号F星紫外高光谱臭氧探测器-天底型(OMS-N)臭氧总量观测. 中国科学: 地球科学, 55(11): 3806–3825, doi: 10.1360/N072025-0050

**英文引用格式:** Xu J, Wang Y, Chen L, Efremenko D, Rao L, Tana G, Liu S, Wang Q, Mao J, Wang Y, Sun L, Yan H, Xu N, Hu X, Letu H, Shi J. 2025. First total ozone column observations from the Ozone Monitoring Suite-Nadir (OMS-N) onboard China's FengYun-3F satellite. Science China Earth Sciences, 68(11): 3665–3683, <https://doi.org/10.1007/s11430-025-1686-0>

## 1 引言

尽管其浓度相对较低, 臭氧在平流层和对流层中均是关键的大气成分. 观测平流层和对流层中的臭氧有助于深入理解大气的动力和光化学过程, 以及空气污染物的输送机制(Barnes等, 2019; Archibald等, 2020; Xia等, 2021a, 2021b, 2023). 幸运的是, 臭氧及其他痕量气体(如 $\text{NO}_2$ 和 $\text{SO}_2$ 等污染物)在大气中的存在, 可通过其独特的光谱特征进行有效探测. 搭载在卫星上的遥感器可接收到达大气顶的电磁辐射, 包括大气和地表对紫外-可见光(UV-VIS)波段的散射太阳辐射, 以及地球表面和大气在红外-微波波段的热辐射(Xu等, 2024). 这些独特的光谱特征反映了臭氧对电磁辐射的吸收/发射效应, 尤其在臭氧层中表现显著. 臭氧的重要吸收波段包括Hartley-Huggins吸收带(270~350nm)和Chappuis吸收带(中心波长约600nm)(Gorshchev等, 2014; Hassler等, 2014).

在过去50年间, 全球多家科研机构 and 高校已研制并发射了50余种臭氧遥感载荷. 根据美国国家海洋和大气管理局(NOAA)环境卫星数据与信息服务中心(National Environmental Satellite Data and Information Service, NESDIS)(<http://rammb.cira.colostate.edu/dev/hillger/ozone-monitoring>)、美国宇航局(NASA)地球观测系统数据与信息系(Earth Observing System Data and Information System, EOSDIS)(<https://www.earth-data.nasa.gov/data/instruments>), 以及欧盟卫星数据目录(<https://directory.eoportal.org/web/eoportal/satellite-missions/>)提供的信息, 自1960年以来, 全球已发射80余颗可进行臭氧相关观测的卫星与航天器.

当前已运行的先进极轨卫星传感器, 如NASA的臭氧测绘与廓线探测套件(Ozone Mapping and Profiler Suite, OMPS)(Jaross等, 2014; Seftor等, 2014)和欧空局(ESA)的对流层监测光谱仪(TROPOspheric Monitoring Instrument, TROPOMI)(Veeckind等, 2012), 已成为高空间分辨率全球臭氧日常观测的主要数据源. 这些先进传感器可提供多种形式的臭氧浓度产品, 包括臭氧总量(Total Ozone Column, TOC)(Garane等, 2019; Inness等, 2019)、臭氧廓线(Bak等, 2017; Mettig等, 2021; Keppens等, 2024)、对流层臭氧(Hubert等, 2021; Heue等, 2022)及近地面臭氧(Zhu等, 2022a, 2022b). 相较于传统卫星传感载荷, 如NASA的臭氧总量测绘光谱仪

(Total Ozone Mapping Spectrometers, TOMS)系列(Heath等, 1975; Jaross等, 1995)、ESA的大气制图扫描成像吸收光谱仪(SCanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CHartographY, SCIMACHY)(Bovensmann等, 1999; Gottwald和Bovensmann, 2011)、全球臭氧监测实验(Global Ozone Monitoring Experiment, GOME)系列(Burrows等, 1999; Munro等, 2016)、臭氧监测仪(Ozone Monitoring Instrument, OMI)(Levelt等, 2006, 2018), 这些新一代传感器实现了重大提升. 此外, 中国高分五号(GaoFen-5, GF-5)和大气一号(DaQi-1, DQ-1)卫星搭载的环境痕量气体监测仪(Environmental Trace Gases Monitoring Instrument, EMI)系列自2019年以来也具备探测臭氧的能力(Qian等, 2023; Wu等, 2024). 近年来, 机器学习技术已被应用于基于卫星高光谱UV-VIS观测的臭氧反演中(Di Noia等, 2013; Zhang等, 2021; Zong等, 2024). 尽管这些方法由于物理可解释性有限、较多依赖数据驱动模式, 在提升精度方面存在一定局限, 但其在处理效率和应对复杂数据方面具有显著优势.

臭氧观测任务也已从单一卫星向协同观测的轨道星座演化, 例如A-train卫星队列, 以及全球同步轨道星座, 如NASA的对流层排放污染监测仪(Tropospheric Emissions: Monitoring of Pollution, TEMPO)(Zoogman等, 2017)、韩国搭载于GEO-KOMPSAT-2卫星的静止环境监测光谱仪(Geostationary Environment Monitoring Spectrometer, GEMS)(Kim等, 2020), 以及ESA第三代气象卫星上的哨兵4号载荷(Sentinel-4).

风云三号(FY-3)系列是中国第二代极轨气象卫星, 具备了更强的功能与技术能力(Yang等, 2012; Zhang等, 2019; 陈林等, 2025). 最新的FY-3F卫星于2023年8月发射, 旨在提供全球大气状态观测, 服务于中长期天气预报和气候研究. 作为FY-3A/B/C卫星上紫外臭氧总量探测仪(Total Ozone Unit, TOU)(王咏梅等, 2009)和太阳后向散射紫外探测仪(Solar Backscatter Ultraviolet Sounder, SBUS)(Yang等, 2012)的替代载荷, FY-3F卫星上的紫外高光谱臭氧探测仪(Ozone Monitoring Suite, OMS)具备天底(OMS-N)与临边(OMS-L)组合观测能力, 可同时获取臭氧总量与垂直廓线. 本文聚焦于OMS-N的臭氧总量反演.

传统的大气反演方法通过最小化观测光谱与模拟光谱之间的残差(如辐射亮度、反射率或透射率), 以

重建目标参数。这类最小化问题通常采用大气反演中广泛使用的方法求解, 包括确定性方法(如Tikhonov型正则化算法)(Xu等, 2016, 2020)与随机方法(如贝叶斯算法)(Rodgers, 2000; Maahn等, 2020)。差分吸收光谱技术(Differential Optical Absorption Spectroscopy, DOAS)(Platt和Stutz, 2008)已广泛应用于从天底观测的散射太阳辐射中反演痕量气体(Theys等, 2017; Seo等, 2019; Liu等, 2021; Chan等, 2022; 迟雨蕾和赵传峰, 2023)。得益于其计算效率高、稳定性强, DOAS框架已成为多个高光谱卫星传感器中臭氧总量反演的业务化算法(Veefkind等, 2006; Loyola等, 2011; Hao等, 2014; Garane等, 2019; Qian等, 2023; 赵冉等, 2025)。

考虑到DOAS反演结果常受到地表反照率与臭氧廓线等参数误差影响, 学者们已提出基于物理机制的快速算法, 用于根据观测条件动态获取更可靠的先验信息, 以提升反演精度(Xu等, 2017; Loyola等, 2018, 2020; Liu等, 2021; Li等, 2022)。本研究旨在介绍一套为OMS-N研发的新型臭氧总量反演算法。该算法的主要创新包括从卫星观测数据中直接高效推导地表反照率和先验臭氧廓线形状, 从而显著减少由地表属性和臭氧垂直分布误差带来的反演不确定性。尽管OMS-N自2023年8月发射以来, 在轨观测时间有限, 但对其观测能力与产品性能的评估已具有重要意义。

## 2 OMS-N载荷及任务概况

OMS-N是搭载于FY-3F卫星上的天底观测型宽视场成像光谱仪, 运行于太阳同步轨道, 轨道高度为836.4km, 过赤道时间为地方时上午10:00降交点。仪器包含两台成像光栅光谱仪, 分别覆盖紫外和可见光波段, 均采用二维帧转移型CCD探测器。其观测波段包括: UV1(250~300nm)、UV2(300~320nm)以及VIS(310~493nm)。

OMS-N的在轨工作目前面临若干挑战, 在短波区域存在噪声干扰和器件退化问题, 故当前研究采用VIS波段进行TOC反演。VIS波段的光谱分辨率为0.5nm, 光谱采样间隔约为0.197nm, 波长精度为0.01nm。VIS波段的地面像元分辨率为7km×7km(星下点)。每条扫描线包含1024个光谱维度和238个跨轨像元, 对应扫描宽度为2900km, 视场角为112°。该配置支持每日全球无缝覆盖, 相比EMI/GF-5B和GOME-2等

载荷在高纬度区域具备更大的轨道重叠率。

设计信噪比(Signal-to-Noise Ratio, SNR)在312~340nm波段超过250, 辐亮度水平约为 $1.274\mu\text{W cm}^{-2}\text{ sr}^{-1}\text{ nm}^{-1}$ 。OMS-N的地面辐射定标和光谱定标数据已在前期研究中发布(Mao等, 2024; Wang Q等, 2024)。轨道在轨定标结果表明, OMS-N VIS波段的辐射和光谱性能均满足预期要求。

OMS-N一级数据(版本1, V1)已于2024年7月20日正式发布, 包含自2023年10月起的重处理数据。本文使用该版本数据开展算法研制与验证。同期发布的还有仪器光谱响应函数(ISRF), 可通过国家卫星气象中心数据门户网站获取(<https://satellite.nsmc.org.cn/Data-Portal/cn/support/document.html?TypeID=596>)。该ISRF由发射前的光谱定标数据生成, 具体过程详见Wang Q等(2024)。为提升ISRF的表征精度, 本研究基于OMS-N辐照度观测结果计算其在轨ISRF, 并与地面定标结果进行对比。结果表明, 激光基准测量提供了更为精确的OMS-N光谱响应特性。

需指出, OMS-N一级数据的定标工作仍在持续推进。V1版本数据中发现的像元空间非对称性是当前重点改进内容, 预计将在后续的V2版本中加以解决, 从而进一步提升TOC反演的精度与稳定性。

## 3 TOC反演框架

一般来说, 大气遥感反演问题属于病态的非线性问题(Rodgers, 2000; Doicu等, 2010), 可以表述为 $\mathbf{y}^\delta = \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{b}) + \delta$ ,  $\mathbf{x}$ 和 $\delta$ 分别表示状态向量和噪声向量。前向模型 $\mathbf{F}$ 用于结合包含仪器特性和大气状态参数的模型参数 $\mathbf{b}$ , 模拟观测向量 $\mathbf{y}^\delta$ 。前向建模过程包括利用物理适配模块将大气物理参数转换为光学参数, 通常需将大气垂直离散为多个层次, 并将其表示为具有光学活性的介质。为确保模拟结果的准确性, 需设定合理的边界条件。前向模型的详细描述见第3.1节。

DOAS技术在过去几十年中被广泛应用于地基和星载平台的痕量气体遥感反演中。DOAS反演的基本原理源于比尔-朗伯定律, 通过测量气体在特定窄波段的吸收特征以推导其浓度(Platt和Stutz, 2008)。该方法的核心在于从观测光谱中分离目标气体的窄带吸收结构, 去除由Rayleigh和Mie散射、地表反射率变化以及仪器效应引起的宽带光谱特征。DOAS算法通过聚焦

于差分吸收特征, 并有效去除干扰分量, 具有获取痕量气体浓度的高灵敏度与高可靠性.

图1展示了面向OMS-N的TOC反演算法整体流程图. TOC指从地表至大气顶层的臭氧垂直柱浓度(Vertical Column Density, VCD). 反演的第一步是通过拟合地球反照散射辐亮度 $I(\lambda)$ 与地球大气层顶外太阳辐照度 $E_{\text{sun}}(\lambda)$ 的比值函数, 来确定臭氧斜柱浓度(Slant Column Density, SCD):

$$\ln\left(\frac{\pi I(\lambda)}{\mu E_{\text{sun}}(\lambda)}\right) = -\sum_g N_{s,g}(\theta) \cdot \sigma_g(\lambda) - p(\lambda) - N_{s,R}(\theta) \cdot \sigma_R(\lambda), \quad (1)$$

其中,  $\mu$ 表示天顶角的余弦,  $N_{s,g}$ 和 $\sigma_g$ 分别为目标吸收气体 $g$ (本文为臭氧)的有效SCD和吸收截面;  $\theta$ 表示观测几何, 包括传感器天顶角、太阳天顶角和两者之间的相对方位角. 低阶多项式 $p(\lambda)$ 表征地表反射、气溶胶/云散射及仪器效应引起的宽带光谱变化. 项 $N_{s,R}(\theta) \cdot \sigma_R(\lambda)$ 用于校正由分子拉曼散射引起的Ring效应, 以避免其对拟合精度的影响.

为了计算大气质量因子(Air Mass Factor, AMF), 需综合考虑几何与大气条件, 包括太阳和观测几何、地表反照率以及先验臭氧廓线等. AMF用于量化斜路径与垂直路径之间的关系, 其计算目标吸收气体 $M_g$ 的典型公式可表述为

$$M_g = \frac{\log(I_g/I_g)}{\tau_g}, \quad (2)$$

其中,  $I_g$ 和 $I_g$ 分别表示有目标吸收气体 $g$ 和无目标吸收气体 $g$ 的大气辐亮度. 本研究在328.125nm计算AMF, 而非传统的325.5nm, 原因是前者在多数地球物理条件下具有更小的系统误差. 在实际操作中, AMF计算考虑了部分云覆盖情形, 并采用独立像元近似方法(Marshak等, 1998). 具体而言, 对于被云污染的像元, 其辐亮度被建模为晴空与云覆盖情形下辐亮度的线性组合, 权重由云占比决定. 有关云处理方法的更多细节见第3.2节.

在传统DOAS反演中, SCD拟合与AMF计算通常是相互独立的两个过程. 然而, 这种解耦方法在假设的臭氧廓线或总量与真实大气状态存在显著偏差时, 会导致较大的AMF误差, 尤其是在高臭氧浓度或大太阳天顶角(Solar Zenith Angle, SZA)条件下更为突出.

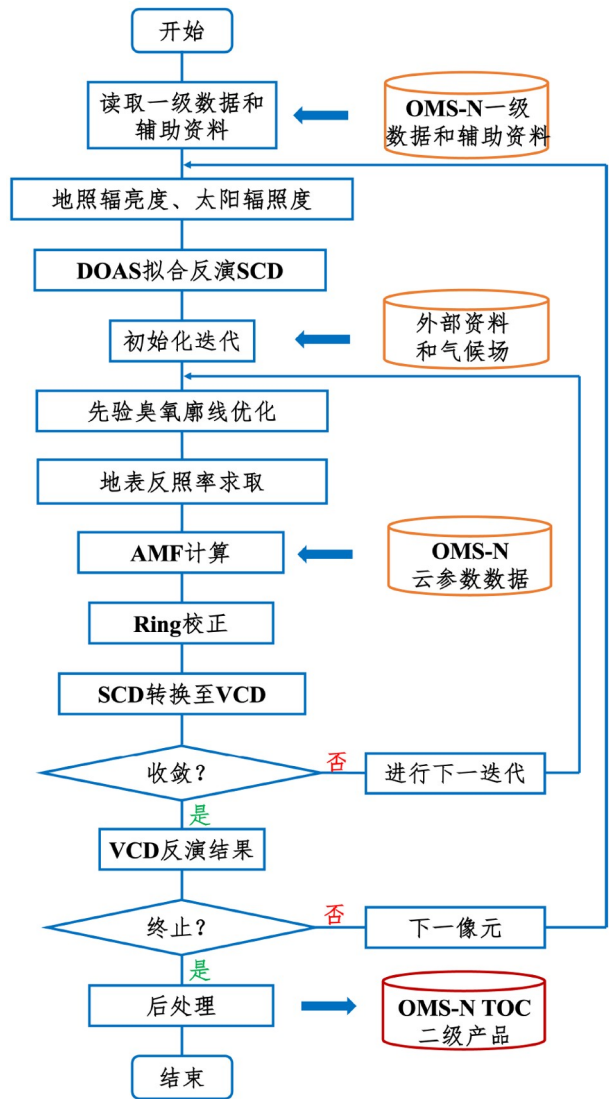


图1 OMS-N臭氧总量反演流程图, 其中AMF和VCD分别表示气体质量因子和垂直柱密度

为克服该局限性, 本研究引入了迭代AMF方法, 即通过前一轮计算得到的VCD动态调整臭氧廓线. 在每次迭代中, 都会在DOAS拟合得到的SCD上施加分子Ring效应校正, 然后用于更新VCD. 有关先验信息(臭氧廓线和地表参数)优化的进一步细节将在第3.3节中介绍.

### 3.1 前向模型和算法

在伪球面大气模型中, 某点 $r$ 沿方向 $\Omega = (\mu, \varphi)$ 的漫反射辐亮度 $I(r, \Omega)$ 满足辐射传输方程:

$$\mu \frac{dI}{dr}(r, \Omega) = -\sigma_{\text{ext}}(r)I(r, \Omega) + J(r, \Omega). \quad (3)$$

源函数  $J(r, \Omega)$  由单次散射项  $J_{\text{ss}}(r, \Omega)$  与多次散射项  $J_{\text{ms}}(r, \Omega)$  构成:

$$J(r, \Omega) = J_{\text{ss}}(r, \Omega) + J_{\text{ms}}(r, \Omega),$$

$$J_{\text{ss}}(r, \Omega) = F_0 \frac{\sigma_{\text{sct}}(r)}{4\pi} P(r, \Omega, \Omega_0) e^{-\tau_{\text{ext}}^0(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\text{TOA}}(\mathbf{r})|)},$$

$$J_{\text{ms}}(r, \Omega) = \frac{\sigma_{\text{sct}}(r)}{4\pi} \int_{4\pi} P(r, \Omega, \Omega') I(r, \Omega') d\Omega',$$

其中,  $\sigma_{\text{ext}}$  和  $\sigma_{\text{sct}}$  分别表示消光系数和散射系数,  $F_0$  为入射太阳通量,  $P$  为散射相函数,  $\Omega_0 = (-\mu_0, \varphi_0)$  ( $\mu_0 > 0$ ) 表示太阳入射方向,  $\tau_{\text{ext}}^0(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\text{TOA}}(\mathbf{r})|)$  表示球面大气中从点  $\mathbf{r}$  到大气层顶  $\mathbf{r}_{\text{TOA}}$  的太阳光学厚度, 散射相函数  $P$  可通过归一化勒让德多项式  $P_n$  展开表示:

$$\begin{aligned} P(r, \Omega, \Omega') &= P(r, \cos\Theta) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2n+1}{2}} \chi_n(r) P_n(\cos\Theta), \end{aligned} \quad (4)$$

其中  $\cos\Theta = \Omega \cdot \Omega'$ . 辐射传输方程的边界条件包括:

(1) 大气层顶部 ( $r = r_{\text{TOA}}$ ):

$$I(r_{\text{TOA}}, \Omega^-) = 0, \quad (5)$$

(2) 地表 ( $\mathbf{r} = \mathbf{r}_s$ ):

$$\begin{aligned} I(\mathbf{r}_s, \Omega^+) &= F_0 \frac{A}{\pi} \mu_0 e^{-\tau_{\text{ext}}^0(|\mathbf{r}_s - \mathbf{r}_{\text{TOA}}(\mathbf{r}_s)|)} \\ &+ \frac{A}{\pi} \int_{2\pi} I(\mathbf{r}_s, \Omega^-) \left| \mu^- \right| d\Omega^-, \end{aligned} \quad (6)$$

其中  $A$  为地表反照率,  $\Omega^+$  和  $\Omega^-$  分别表示向上和向下的方向.

前向模型考虑了两种云和气溶胶层的表现形式: 不透明的朗伯面反射体与散射粒子层. 朗伯反射体设置于某一气压层顶, 而散射层可采用 Henyey-Greenstein 或 Mie 相函数 (或偏振矩阵) 建模. Henyey-Greenstein 模型中, 光学厚度随波长变化, 可通过 Ångström 指数表示, 并利用单次散射反照率表征吸收. Mie 散射则采用预计算的相函数展开系数文件.

如前所述, 前向模型假设每个像元包含无云与含云区域, 云占比介于 0 到 1. 大气被划分为多个垂直气压层, 最低层为地表气压, 以上各层由预定义的气压层数给出. 利用流体静力平衡假设, 通过流体静力学方程将气压转换为高度坐标.

吸收截面是卫星与地基仪器探测臭氧等痕量气体的关键参数 (Orphal 等, 2016). 吸收截面的不确定性是反演误差的重要来源, 可能造成约  $\pm 2\%$  的系统偏差 (Xu 等, 2024). 在 Huggins 波段中, 臭氧吸收截面随温度变化显著. 实践中常采用两个不同温度  $T_1$  和  $T_2$  下测量的臭氧截面  $\sigma(T_1)$  和  $\sigma(T_2)$  的线性组合表示该依赖性:

$$\sigma(T_{\text{eff}}) = \sigma(T_1) + \frac{(\sigma(T_1) - \sigma(T_2))(T_{\text{eff}} - T_1)}{(T_1 - T_2)}, \quad (7)$$

其中,  $\sigma(T_{\text{eff}})$  表示对应于反演得到的有效温度  $T_{\text{eff}}$  的有效吸收截面, 该温度与斜柱浓度一同获得. 这一设定使得斜柱浓度能够针对实际臭氧廓线的加权平均大气温度进行调整.

对于紫外波段卫星仪器的 TOC 反演, 20 世纪 80 年代 Bass-Paur 实验室数据 (Bass 和 Paur, 1985) 与基于发射前定标的飞行模型 (FM) 数据 (Burrows 等, 1999; Bogumil 等, 2003) 被广泛采用. 使用 FM 数据可在不依赖于仪器狭缝函数的前提下提升 DOAS 拟合精度, 但若其本身存在系统偏差, 可能引入较大的拟合残差与波长漂移 (Weber 等, 2016). Brion-Daumont-Malicet (BDM) 臭氧截面 (Daumont 等, 1992; Malicet 等, 1995; Brion 等, 1998) 具有高光谱分辨率, 在多种紫外卫星仪器中被广泛使用 (Loyola 等, 2011; Bhartia 等, 2013; Lerot 等, 2014; Hao 等, 2014; Garane 等, 2019). Serdyuchenko 等 (2014) 提供的高分辨率臭氧截面数据覆盖 213~1100nm, 测量温度达 11 个, 分辨率为 0.02~0.24nm. 在 325~335nm 的拟合窗口中, BDM 与 Serdyuchenko 数据在反演质量方面未表现出显著差异, 但臭氧柱浓度存在 1%~2% 的变化, 反映了截面测量的固有不确定性.

### 3.2 云处理

TOC 反演中对云污染像元的处理至关重要. 云具有空间非均匀性, 且在短时间尺度内变化剧烈, 因此准确模拟云的分布极其困难, 几乎无法实现. 采用三维辐射传输模型模拟云的辐射效应计算复杂、耗时较长. 为此, 通常采用一维辐射传输模型配合简化参数化方法近似考虑云的影响. 在常规痕量气体反演框架中, 云可被视为完全反射边界, 或光学均匀的散射粒子层. 云参数可通过氧分子吸收特征波段的观测进行反演, 例如 477nm 附近的  $\text{O}_2\text{-O}_2$  波段 (Acarreta 等, 2004; Wang W 等, 2024) 和 760nm 处的  $\text{O}_2\text{A}$  吸收带 (Wang 等, 2008;

Loyola等, 2018).

由于OMS-N不覆盖 $O_2A$ 波段, 其云参数完全依赖于 $O_2-O_2$ 波段的直接拟合方法进行反演(Rao等, 2022). 图2比较了两颗卫星在同一天获取的云占比分布, 可以看出二者的空间分布趋势整体一致, 局部差异主要来自过境时间不同(OMS-N为上午10:00, TROPOMI为下午1:30). 例如, 热带地区(如亚马孙)的对流云层多在午后发展, 因此TROPOMI反演的云占比通常高于OMS-N. 在存在云污染的情况下, 大气质量因子的计

算采用独立像元近似(Independent Pixel Approximation, IPA)方法, 即将每个像元的辐射量建模为由晴空和全云两种情形的辐射按云占比加权组合而成.

### 3.3 先验信息优化

在DOAS类算法中, 反演精度高度依赖于先验信息的质量, 尤其是地表特性和臭氧廓线. 输入参数中的微小不确定性可能会在反演过程中累积放大, 进而影响反演结果的可靠性. 因此, 为提升反演精度, 需对

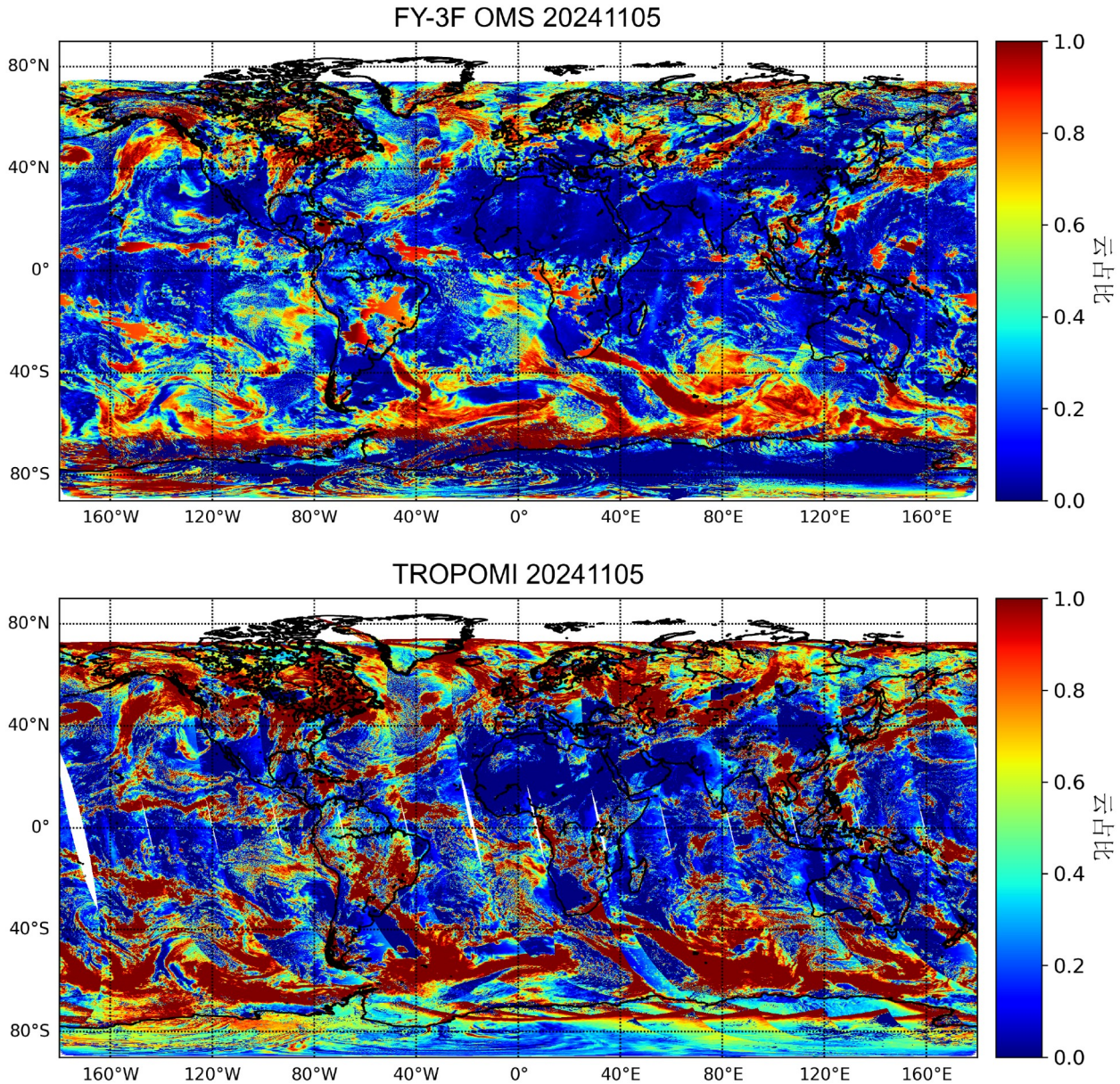


图 2 2024年11月5日OMS-N与TROPOMI反演的云占比分布图

先验参数进行优化, 使其更真实地反映实际观测条件, 尽量减小系统性偏差。

针对地表特性, 本文引入了我们此前开发的、基于TROPOMI的几何依赖型朗伯等效反射率(Lambertian-Equivalent Reflectance, LER)反演算法(Xu等, 2017; Loyola等, 2020)。该方法可直接利用DOAS拟合输出(见公式(1))中的多项式项( $p(\lambda)$ )、目标气体斜柱浓度( $N_{s,g}$ )以及卫星观测几何参数( $\theta$ ), 提取地表反射率信息。该地表参数通过一个神经网络获得, 该网络使用与AMF计算一致的辐射传输模拟结果进行训练。最终得到的LER产品具有视角依赖性, 空间连续、无缺口, 可有效刻画晴空条件下的地表反射特性。该方法考虑了BRDF效应所引起的视角依赖性, 尤其在雪/冰区域显著降低了误差, 并确保了与痕量气体反演模型的一致性。

OMS-N的LER结果通过与基于TROPOMI一级数据反演的地表LER产品开展了对比验证。最新版TROPOMI LER产品区分了无雪/冰与有雪/冰两种地表类型的网格(Tilstra等, 2024), 并被用于TROPOMI官方二级产品的处理流程中, 为臭氧廓线、NO<sub>2</sub>总量和对流层柱浓度、FRESCO云参数及气溶胶层高等提供输入支持。图3对比了OMS-N与TROPOMI在1月和7月的月平均地表LER产品。两者时间与空间分辨率不同: TROPOMI基于5年观测, 网格分辨率为0.125°, 而OMS-N为1年, 分辨率为0.1°。在不同地表类型下, 两组数据整体一致性较好, 但在高纬度雪冰区域差异略大。1月份北半球雪冰区, OMS-N LER与TROPOMI的一致性更好; 7月份无雪/冰区域中, 两者表现出更为均匀的匹配。

在高纬度高反照率区域, SZA大导致入射光减弱、反射信号降低, 从而使反演误差更明显。此外, 雪冰地表表现出强烈的非朗伯行为, 也是误差来源之一。气溶胶特性差异、谱段覆盖范围以及观测时间等因素, 也可能对LER反演结果产生影响, 有必要进一步定量评估气溶胶对地表反照率反演的影响。

先验臭氧廓线也对总量反演精度具有显著影响。图4展示了不同SZA下, 臭氧廓线形状对TOC反演误差的影响。在晴空条件下, 小SZA时误差通常低于0.5%, 而在大SZA时误差可达5%左右。若存在云污染, 误差将进一步增加, 特别是在小SZA条件下, 可达到约1%。即使先验臭氧廓线完全准确, 云层的存在仍可能引入

额外不确定性, 这是由于辐射传输计算变得更加复杂, 以及云特性对观测辐射的影响。因此, 在大SZA或存在云污染时, 准确的臭氧廓线表征尤为重要。为了从天底观测的卫星数据中估算臭氧廓线形状, 本文采用一种结合全物理辐射传输模拟与机器学习的高效方法(Xu等, 2017)。具体地, 采用两阶段神经网络: 第一阶段利用压缩后的观测向量与模型参数(如太阳和观测几何)对廓线进行分类; 第二阶段在每次迭代中, 根据估算的TOC对廓线进行缩放。这种方法确保用于AMF计算的臭氧廓线由卫星实际观测光谱反演, 可准确反映真实观测条件。

### 3.4 条带校正方法

早期的高光谱仪器, 如SCIAMACHY和GOME-2, 通常采用扫描式光学系统, 其工作方式是通过扫描镜将不同地面像元的辐射引导进入同一个入射狭缝, 并由一维探测器接收。而新一代高光谱仪器(如OMS-N和TROPOMI)则采用成像式设计: 飞行方向垂直方向上的不同地面像元辐射被投射至光谱仪不同区域, 并由二维探测器上的不同行接收。由于这种设计, 不同地面像元对应的仪器参数(例如狭缝函数和波长定标)会随位置发生变化。尽管对每一探测行进行了单独的狭缝函数优化与定标, 但仍存在不可避免的不确定性, 可能对反演结果造成影响, 表现为臭氧总量在跨行方向上的系统性条带误差。为减小条带影响, 可在(晴空条件)热带太平洋区域按日估算条带幅度, 并以此进行校正。具体而言, 条带幅度定义为OMS-N斜柱浓度与参考斜柱浓度之差。该差值在纬度±30°范围内和7日时间窗口内取平均, 并据此从原始斜柱中减去平均条带幅度, 完成系统性条带误差的订正。

## 4 TOC验证参考产品

### 4.1 卫星观测的TOC产品

MetOp-B卫星搭载的GOME-2B仪器于2012年9月发射, 运行在太阳同步极轨道上, 赤道下降节点过境时间为当地上午09:30。GOME-2B在前向扫描模式下的名义空间分辨率为沿轨向40km、跨轨向80km, 刈幅宽度约为1920km(Munro等, 2016)。本研究采用由EU-METSAT臭氧与大气化学监测卫星应用业务分中心(O3M-SAF)提供的GOME-2B TOC数据, 用于交叉验

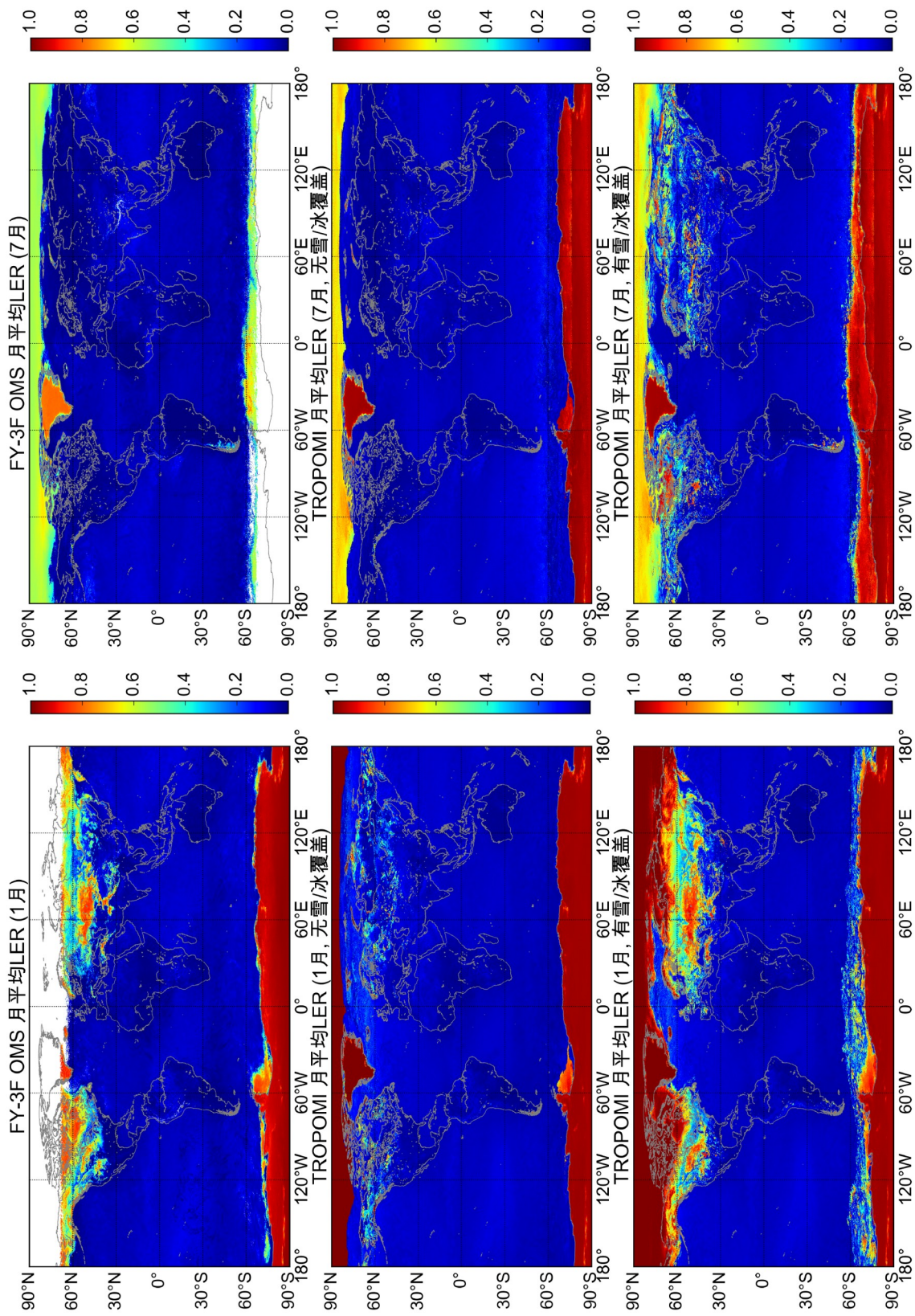


图 3 OMS-N与TROPOMI观测反演的1月(左图)和7月(右图)地表LER分布, TROPOMI的LER产品分别绘制了无雪/冰和有雪/冰两种情形

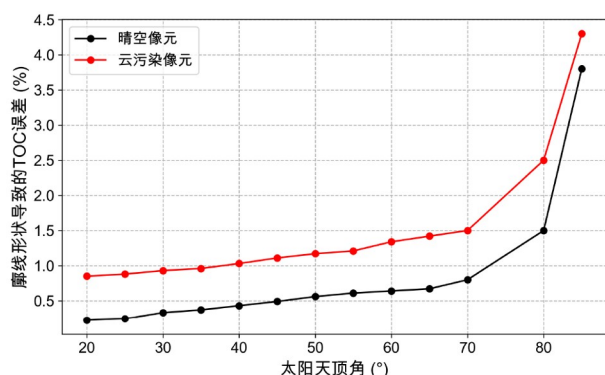


图4 在晴空与云污染条件下, 臭氧廓线形状导致的TOC反演误差随太阳天顶角变化的估算结果

证. 关于GOME-2B TOC产品的反演与验证方法, 可参考Loyola等(2011)和Hao等(2014). 其SCD反演基于325~335nm波段, 使用218K和243K条件下的臭氧吸收截面, 以及NO<sub>2</sub>吸收截面进行光谱拟合, 以提升在不同大气条件下的反演准确性. GOME-2B的AMF计算在325.5nm参考波长处, 通过线性离散纵向辐射传输模型(Linearized Discrete Ordinate Radiative Transfer, LIDORT)迭代求解(Spurr, 2006, 2008), 从而实现了对大气光程的精确表征. 已有研究表明, GOME-2B反演的TOC值普遍比Dobson分光光度计高约2.0%±1.0%, 比Brewer分光光度计偏高约1.0%±0.8%, 该差异主要源自仪器特性与反演算法差异.

TROPOMI是搭载于哥白尼计划哨兵5先导(Sentinel-5 Precursor, S5P)卫星上的唯一载荷, 卫星于2017年10月发射, 设计寿命为7年(Veeffkind等, 2012). TROPOMI运行于824km高的太阳同步轨道上, 赤道过境时间为当地下午13:30, 可实现每日全球臭氧观测, 地面像元分辨率为3.5km×5.5km(2019年8月6日前为3.5km×7km), 扫描幅宽为2600km. 本研究使用TROPOMI离线(OFFL)TOC产品, 该产品基于直接拟合算法生成, 通过最小化模拟太阳归一化辐亮度与实测辐亮度在325~335nm波段间的差异进行反演. 该算法除TOC外, 同时反演场景反照率、有效温度、Ring效应干扰项及波长漂移, 具备在高SZA、大光学厚度等极端地球物理条件下的反演优势(Lerot等, 2014). 相较传统的DOAS方法, 该算法物理一致性更强, 适用于复杂观测条件下的TOC反演(Garane等, 2019).

需注意的是, TROPOMI与OMS-N间的过境时间

差异可能引入因TOC的昼变特征导致的误差. 因此, 本文仅采用质量控制值大于0.5(qa\_value>0.5)的TROPOMI数据. 文献报道显示, TROPOMI TOC与地基观测结果的平均偏差在0~1.5%, 标准差在2.5%~4.5%(Garane等, 2019).

## 4.2 地基TOC观测数据

OMS-N TOC产品的地面验证依赖于Dobson和Brewer紫外分光光度计的直射太阳观测数据, 以及天顶散射光差分吸收光谱仪(Zenith Scattered Light Differential Optical Absorption Spectroscopy, ZSL-DOAS)的天顶散射光观测结果. 维护良好的Brewer光栅型分光光度计测量误差可控制在1%以内(Kerr, 2010; Zhao等, 2021), Dobson分光光度计在2006年后的精度也显著提高, 测量不确定度不超过3%(Van Roozendael等, 1998). 根据Hendrick等(2011)的研究, SAOZ(Système d'Analyse par Observation Zénitale)提供的ZSL-DOAS观测数据的总不确定度控制在6%以内. 本研究所用的日均TOC地基观测数据来源于世界臭氧和紫外辐射数据中心(World Ozone Ultraviolet Radiation Data Center, WOUDC).

图5显示了用于OMS-N TOC产品验证的地基观测站分布情况. 具体台站信息见表1. 站点在地理空间上的广泛分布确保了OMS-N TOC反演结果在不同气候与大气环境条件下的可靠验证.

## 5 结果与讨论

### 5.1 误差特征分析

本节通过敏感性分析方法, 系统探讨TOC反演中的主要误差来源, 定量评估各因素对反演精度的影响. 分析涵盖仪器因素(如观测噪声与定标稳定性)以及大气条件(如气溶胶与云干扰等), 以识别对反演不确定性贡献最大的因素, 为仪器定标优化与反演算法改进提供依据.

表2列出了敏感性分析结果, 包括主要误差源的影响评估. OMS-N TOC反演中, 随机误差主要由一级数据SNR的影响. 在中等SZA的典型观测条件下, 误差通常较小, 低于1%. 然而, 在高SZA(大于75°)观测条件下, 太阳辐照显著减弱, 信号水平降低, 测量噪声对反演结果的影响显著增强. 该问题在冬季极区尤为明显, 复杂

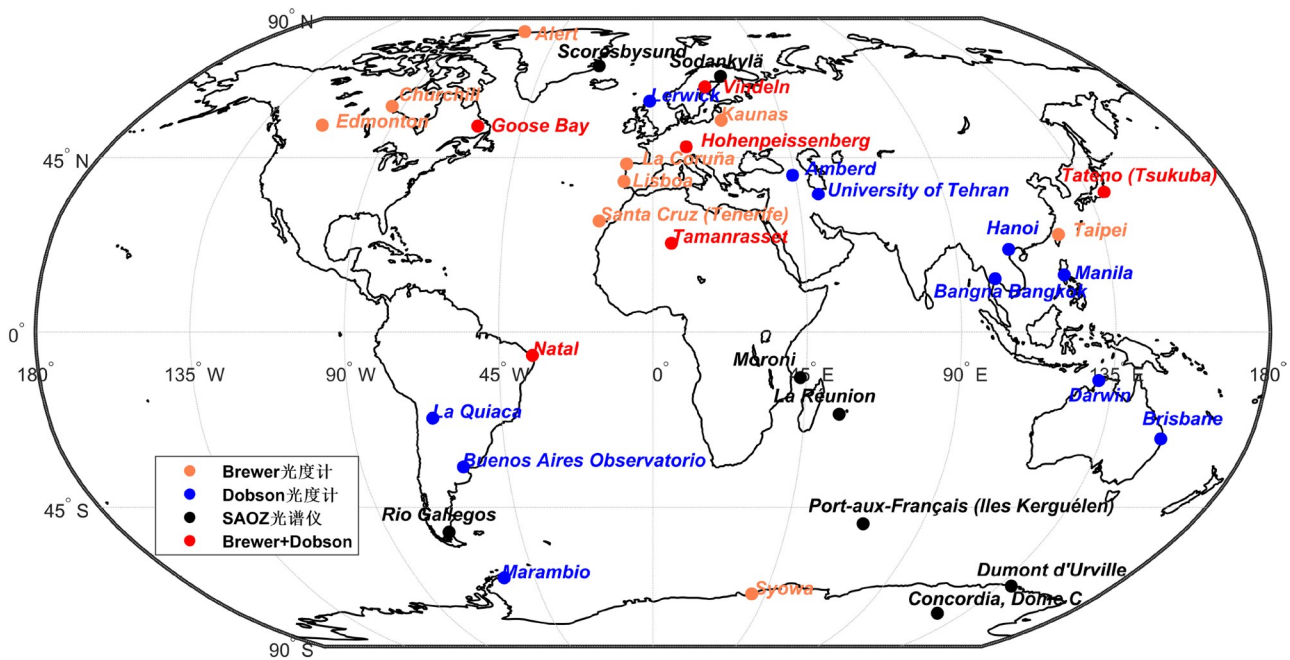


图 5 OMS-N TOC反演结果的地基验证站点地理分布

光照条件进一步加剧了随机误差。

如前所述, OMS-N的系统误差主要包括辐射定标不确定性、先验臭氧廓线选择、臭氧吸收截面误差以及有效反照率确定误差。在总体误差预算中, 需注意部分误差源之间具有相关性, 例如云占比误差会影响反演得到的云高精度。鉴于当前阶段难以量化OMS-N仪器性能, 一级数据的定标误差暂未纳入本分析, 若一级数据满足设计指标, 该类误差预计较小。

来自其他微量气体, 如一氧化溴(BrO)和二氧化硫(SO<sub>2</sub>), 引起的误差在一般条件下可忽略, 仅在强火山活动引发SO<sub>2</sub>急剧升高时需考虑。在气溶胶负荷较重区域(如沙漠或生物质燃烧区域), 我们分别在最低层假设吸收型气溶胶(生物质燃烧)和散射型气溶胶(扬尘), 其光学厚度( $\tau_{\text{aer}}$ )设为3.0, 开展了敏感性测试。结果显示, 气溶胶引起的前向模型误差通常低于1%。尽管反演中未显式考虑气溶胶, 但DOAS拟合中所用多项式项在一定程度上可补偿其影响。然而, 在固定地表反照率(即未反演)的条件下, 污染情景下TOC反演误差可达4%(Lerot等, 2014; Orfanos-Chequela等, 2021)。

云参数的不确定性也是TOC反演误差来源之一。敏感性测试表明, 在云占比的不确定度为0.05时, 对

TOC反演结果的影响较小, 误差通常低于0.5%; 相比之下, 云顶高度的不确定性可能导致更大的偏差, 当云顶高度的不确定度为1km时, TOC反演误差可达1.5%。

敏感性分析结果表明, 尽管OMS-N TOC反演具有较强的稳健性, 但通过优化部分参数, 特别是那些受大气散射和定标漂移影响的参数, 可进一步提升反演精度。上述结果强调了持续开展仪器定标和模型优化工作的重要性, 以在多样化观测条件下尽可能降低残余误差。

## 5.2 与地面观测数据的比较

为评估OMS-N TOC反演结果的精度, 本研究选取表1所列的33个地基观测站点开展对比验证。图6展示了其中6个具有代表性的站点的验证结果, 涵盖南北半球不同地理和气候条件下的低、中、高纬度区域。其余站点的验证结果详见补充材料, 其中大多数站点的相关系数超过0.9。同时, 将TROPOMI TOC产品(OFFL)作为参考, 进行了交叉验证。

如图6所示, OMS-N TOC反演结果与地基观测数据保持优秀的一致性, 6个站点相关系数均超过0.95。这表明, OMS-N具备在多样环境条件下准确刻画臭氧

表 1 用于全球地面观测验证的站点信息

| 编号     | 名称                                 | 纬度      | 经度       | 类型     | 观测时段              |
|--------|------------------------------------|---------|----------|--------|-------------------|
| stn401 | Santa Cruz (Tenerife)              | 28.47°N | 16.25°W  | Brewer | 2023年10月至2024年9月  |
| stn405 | La Coruña                          | 43.33°N | 8.47°W   | Brewer | 2023年10月至2024年9月  |
| stn082 | Lisboa                             | 38.78°N | 9.13°W   | Brewer | 2023年10月至2024年9月  |
| stn077 | Churchill                          | 58.74°N | 94.07°W  | Brewer | 2023年10月至2023年12月 |
| stn095 | Taipei                             | 25.02°N | 121.48°E | Brewer | 2023年10月至2024年8月  |
| stn101 | Syowa                              | 69.00°S | 39.58°E  | Brewer | 2023年10月至2024年7月  |
| stn021 | Edmonton                           | 53.55°N | 114.11°W | Brewer | 2023年10月至2023年12月 |
| stn312 | Kaunas                             | 54.88°N | 23.84°E  | Brewer | 2023年10月至2024年9月  |
| stn410 | Amberd                             | 40.38°N | 44.25°E  | Dobson | 2023年10月至2024年8月  |
| stn043 | Lerwick                            | 60.13°N | 1.18°W   | Dobson | 2023年10月至2024年8月  |
| stn091 | Buenos Aires Observatorio          | 34.59°S | 58.48°W  | Dobson | 2023年10月至2024年9月  |
| stn330 | Hanoi                              | 21.20°N | 105.80°E | Dobson | 2023年10月至2024年8月  |
| stn084 | Darwin                             | 12.42°S | 130.88°E | Dobson | 2023年10月至2024年8月  |
| stn027 | Brisbane                           | 27.42°S | 153.08°E | Dobson | 2023年10月至2024年8月  |
| stn218 | Manila                             | 14.65°N | 121.05°E | Dobson | 2024年2月至2024年8月   |
| stn233 | Marambio                           | 64.24°S | 56.62°W  | Dobson | 2023年10月至2024年9月  |
| stn464 | University of Tehran               | 35.44°N | 51.23°E  | Dobson | 2023年10月至2024年9月  |
| stn216 | Bangna Bangkok                     | 13.67°N | 100.62°E | Dobson | 2023年10月至2024年8月  |
| stn513 | La Quiaca                          | 22.10°S | 65.60°W  | Dobson | 2023年10月至2024年9月  |
| stn539 | Moroni                             | 11.71°S | 43.25°E  | SAOZ   | 2023年10月至2024年9月  |
| stn406 | Scoresbysund                       | 70.48°N | 21.95°W  | SAOZ   | 2023年10月至2024年7月  |
| stn028 | Dumont d'Urville                   | 66.66°S | 140.00°E | SAOZ   | 2023年10月至2024年8月  |
| stn062 | Port-aux-Français (Iles Kerguelén) | 49.35°S | 70.28°E  | SAOZ   | 2023年10月至2024年8月  |
| stn492 | Concordia, Dôme C                  | 75.10°S | 123.30°E | SAOZ   | 2023年10月至2024年8月  |
| stn436 | La Réunion                         | 21.08°S | 55.38°E  | SAOZ   | 2023年10月至2024年8月  |
| stn262 | Sodankylä                          | 67.36°N | 26.63°E  | SAOZ   | 2023年10月至2024年8月  |
| stn493 | Rio Gallegos                       | 51.60°S | 69.32°W  | SAOZ   | 2023年10月至2024年8月  |
| stn002 | Tamanrasset                        | 22.78°N | 5.52°E   | Brewer | 2023年10月至2024年7月  |
|        |                                    |         |          | Dobson | 2023年10月至2024年9月  |
| stn219 | Natal                              | 6.00°S  | 35.20°W  | Brewer | 2024年7月至2024年9月   |
|        |                                    |         |          | Dobson | 2023年10月至2024年9月  |
| stn099 | Hohenpeissenberg                   | 47.80°N | 11.01°E  | Brewer | 2023年10月至2024年9月  |
|        |                                    |         |          | Dobson | 2023年10月至2024年9月  |
| stn284 | Vindeln                            | 64.23°N | 19.77°E  | Brewer | 2023年10月至2024年9月  |
|        |                                    |         |          | Dobson | 2023年10月至2024年8月  |
| stn076 | Goose Bay                          | 53.31°N | 60.36°W  | Brewer | 2023年10月至2023年12月 |
|        |                                    |         |          | Dobson | 2023年10月至2024年8月  |
| stn014 | Tateno (Tsukuba)                   | 36.05°N | 140.13°E | Brewer | 2023年10月至2024年7月  |
|        |                                    |         |          | Dobson | 2023年10月至2024年7月  |

表 2 TOC反演误差估算<sup>a)</sup>

| 误差来源   | 不确定度                    | 反演误差    |         |
|--------|-------------------------|---------|---------|
|        |                         | SZA<75° | SZA≥75° |
| 观测噪声   | SNR                     | < 1.0%  | <2.0%   |
| 臭氧廓线形状 | 10%                     | <1.5%   | <4.0%   |
| 吸收截面   | /                       | <2.0%   | <2.0%   |
| 地表反照率  | 50%                     | <0.5%   | <0.5%   |
| 气溶胶干扰  | $\tau_{\text{aer}}=3.0$ | <1.0%   | <1.0%   |
| 云占比    | 0.05                    | <0.5%   | <0.5%   |
| 云高     | 1km                     | <1.5%   | <1.5%   |

a) 此表仅考虑主要误差来源

时空变化的能力，尽管不同站点的验证时间范围存在差异。需要指出的是，受OMS-N当前在轨运行时间较短的限制，本次验证样本中极低TOC值(例如低于100DU)的情况相对较少。随着卫星任务的持续推进，数据量的增加将有助于更全面地评估反演精度与仪器性能。整体来看，由于TROPOMI具备更高的业务成熟度，并在其OFFL产品中采用了直接拟合算法，其TOC产品与地面观测数据的一致性略优于OMS-N。已有研究指出，两者在吸收截面和地表反照率处理方面的差异，亦可解释TOC反演结果存在的偏差(Garane等, 2018, 2019)。

OMS-N与TROPOMI结果的可比性，以及其与地基观测数据之间的高度相关性，初步验证了OMS-N TOC反演产品的可靠性。该结果体现了OMS-N在大气成分大尺度观测方面的潜力，并为后续的算法优化和定标工作奠定了坚实基础。

5.3 与TROPOMI和GOME-2B的比较

图7给出了OMS-N、TROPOMI和GOME-2B反演的全球TOC月平均分布。三颗卫星载荷在不同纬度带和季节均呈现出一致的空间分布特征。然而，在2023年10月的南半球极区，TROPOMI和GOME-2B反演结果中出现了部分缺测数据。此外，在2024年7月的南半球高纬地区，OMS-N与TROPOMI之间存在轻微差异。

表3给出了三颗卫星载荷之间TOC产品差异的统计分析结果，分别列出了OMS-N与TROPOMI、OMS-N与GOME-2B的平均偏差和标准差。2023年10月，OMS-N与TROPOMI之间表现出显著的纬度依赖性差异(见网络版附图S1和S2)。在北半球，二者的差异随纬

度升高而增大，整个北半球的平均偏差为-1.93%，而纬度高于60°时最大偏差接近-10%。在南半球，平均偏差为-2.00%，但高纬度地区(纬度<-60°)出现了明显的负偏差，且南半球的变幅显著大于北半球，尤其在高纬区域。这些差异可能源于反演算法差异及OMS-N一级数据在极区未解决的定标不确定性。

OMS-N与GOME-2B的差异(见图S3和S4)同样呈现出类似的纬度依赖性，但相比OMS-N与TROPOMI差异更大。以2023年10月为例，北半球的偏差标准差由OMS-N与TROPOMI的1.90%增至OMS-N与GOME-2B的2.90%，这一更大的标准差在两个半球及其他月份的对比中均持续存在。造成这种较大变幅的原因可能是GOME-2B的空间分辨率较低，而OMS-N与TROPOMI空间分辨率更高，可在0.25°网格尺度上实现更有效的空间平均。在2023年10月南半球出现的极端臭氧亏损事件中，OMS-N与GOME-2B的偏差可达50%。这种显著差异主要源于GOME-2B无法解析精细尺度的臭氧变化，而OMS-N与TROPOMI因具备更高的空间分辨率能够更好地捕捉此类变化。定标不确定性也可能是TOC产品差异的原因之一。在TROPOMI与GOME-2B的对比中(见图S5和S6)也发现了类似的偏差分布，这提示在极区解读GOME-2B TOC产品时应谨慎，尤其是在极端臭氧亏损事件期间，高纬地区臭氧浓度的快速波动可能进一步加剧这些差异。

除全球月均TOC对比分析外，本研究还评估了OMS-N在2024年南半球春季(8月至10月)观测南极臭氧洞动态的能力。由图8可见，OMS-N在臭氧洞中心记录到最低的TOC值(9月低于100DU)，其次为TROPOMI，GOME-2B的TOC值略高。尽管存在这些微小差异，三台卫星传感器均能够较好地刻画臭氧洞的空间结构和时间演变，在纬向及涡旋边缘的臭氧梯度上表现出一致的分布特征。这些区域性观测结果表明，OMS-N数据能够有效解析精细尺度的臭氧消耗特征，这对于研究快速变化的南极平流层气候—化学相互作用具有重要意义。

5.4 在轨稳定性与定标问题

尽管OMS-N TOC反演结果结果在当前运行条件下表现良好，但仪器在轨性能及一级数据质量的长期稳定性仍有待进一步评估。微小的定标不确定性，尤其是在Huggins波段(325~335nm)，在极端观测几何条

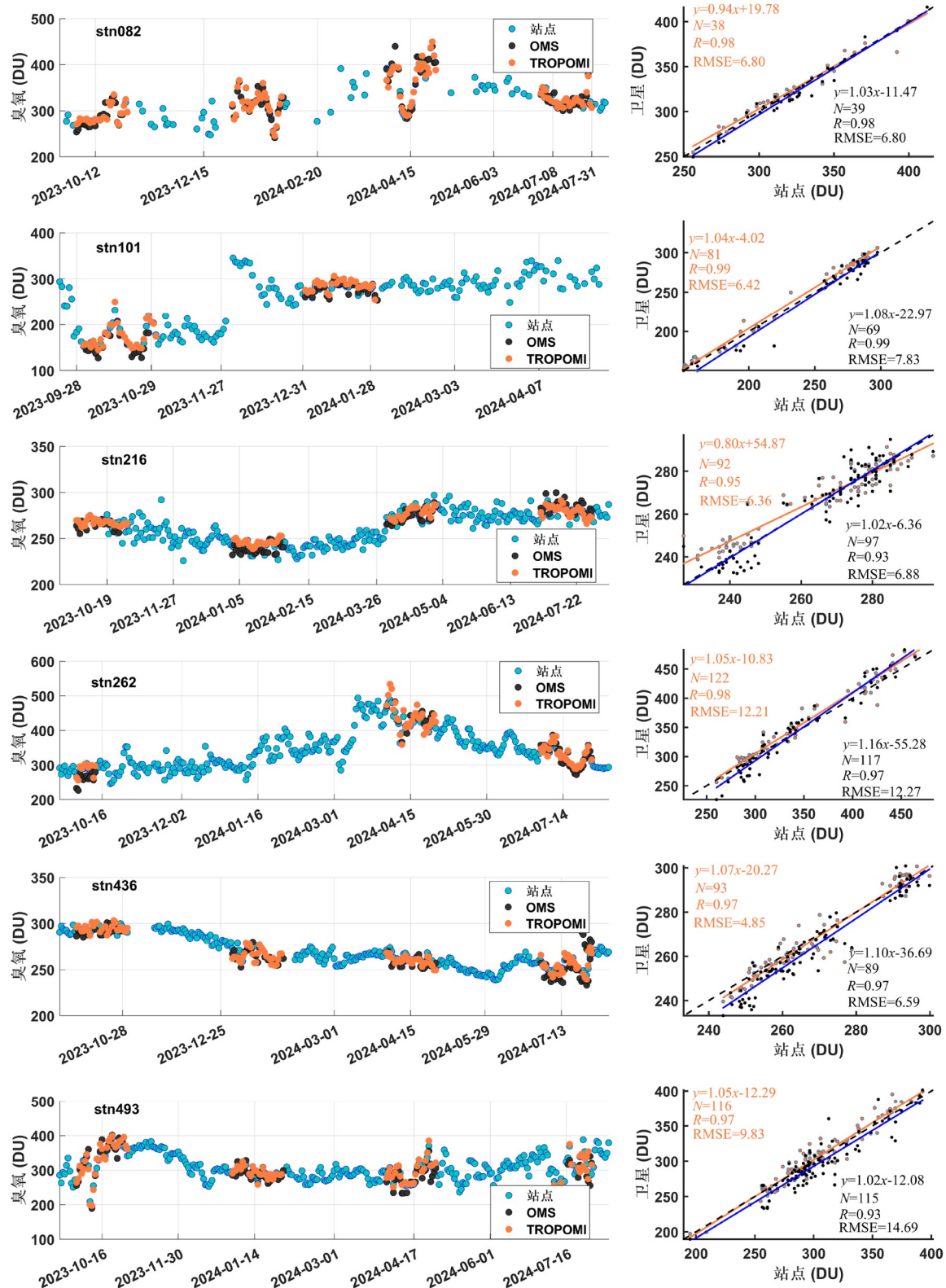


图 6 OMS-N与TROPOMI的TOC反演结果与地基观测数据的对比分析

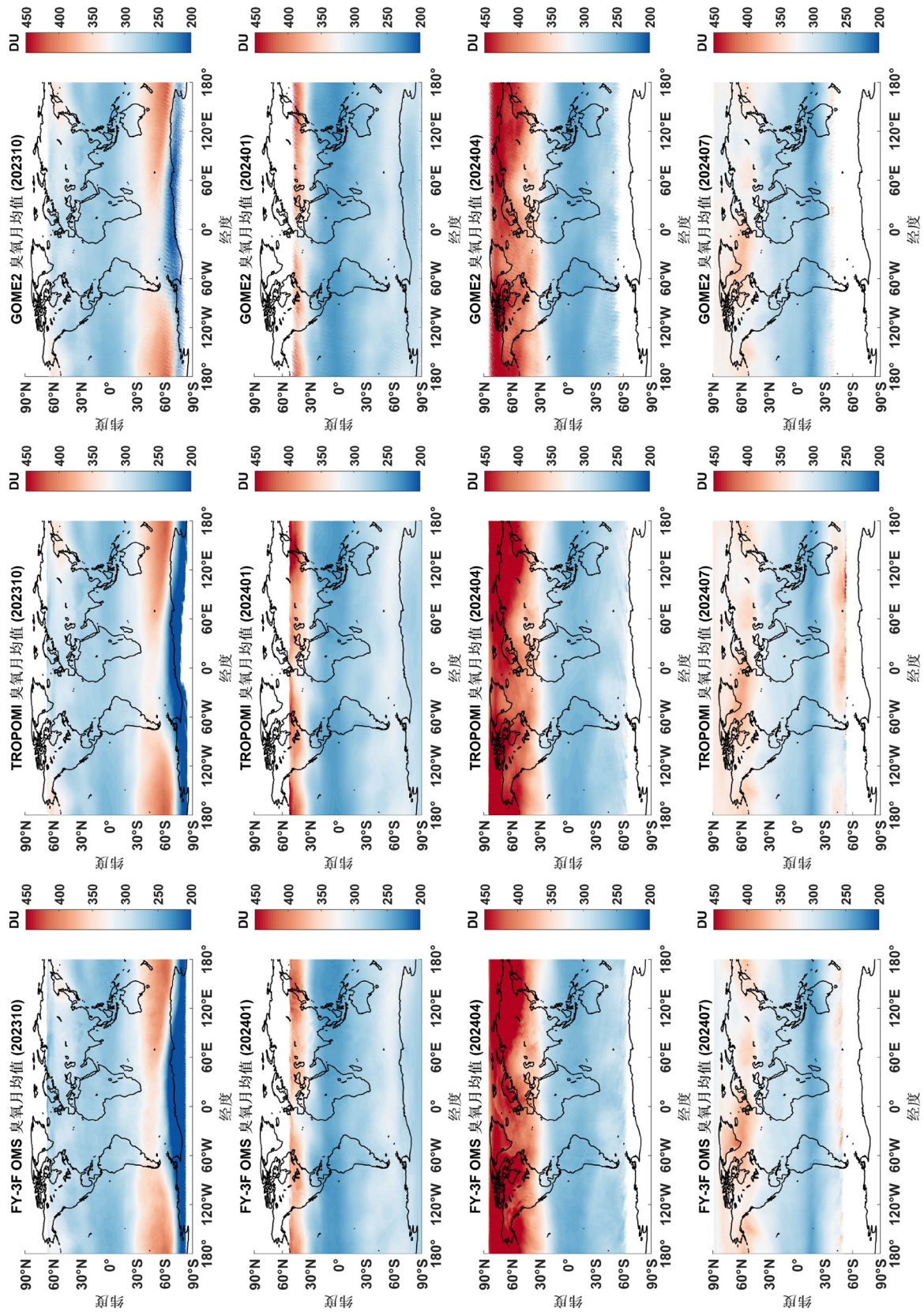


图 7 由OMS-N、TROPOMI和GOME-2B反演的全球TOC月平均分布, 分别对应2023年10月、2024年1月、2024年4月和2024年7月的比较结果

表 3 根据第5.3节讨论的OMS-N TOC产品与对比卫星产品之间的差异统计分析结果

| OMS-N    | TROPOMI |       |        |       | GOME-2B |       |       |       |
|----------|---------|-------|--------|-------|---------|-------|-------|-------|
|          | 北半球     |       | 南半球    |       | 北半球     |       | 南半球   |       |
|          | 偏差      | 标准差   | 偏差     | 标准差   | 偏差      | 标准差   | 偏差    | 标准差   |
| 2023年10月 | -1.93%  | 1.90% | -2.00% | 4.21% | -0.97%  | 2.90% | 0.12% | 6.50% |
| 2024年1月  | -1.65%  | 2.11% | -0.70% | 1.62% | -0.15%  | 3.31% | 1.80% | 2.75% |
| 2024年4月  | 1.15%   | 2.45% | -1.19% | 2.18% | 3.99%   | 4.08% | 1.70% | 3.32% |
| 2024年7月  | -0.21%  | 2.16% | -1.86% | 2.58% | 2.79%   | 2.98% | 0.46% | 3.19% |

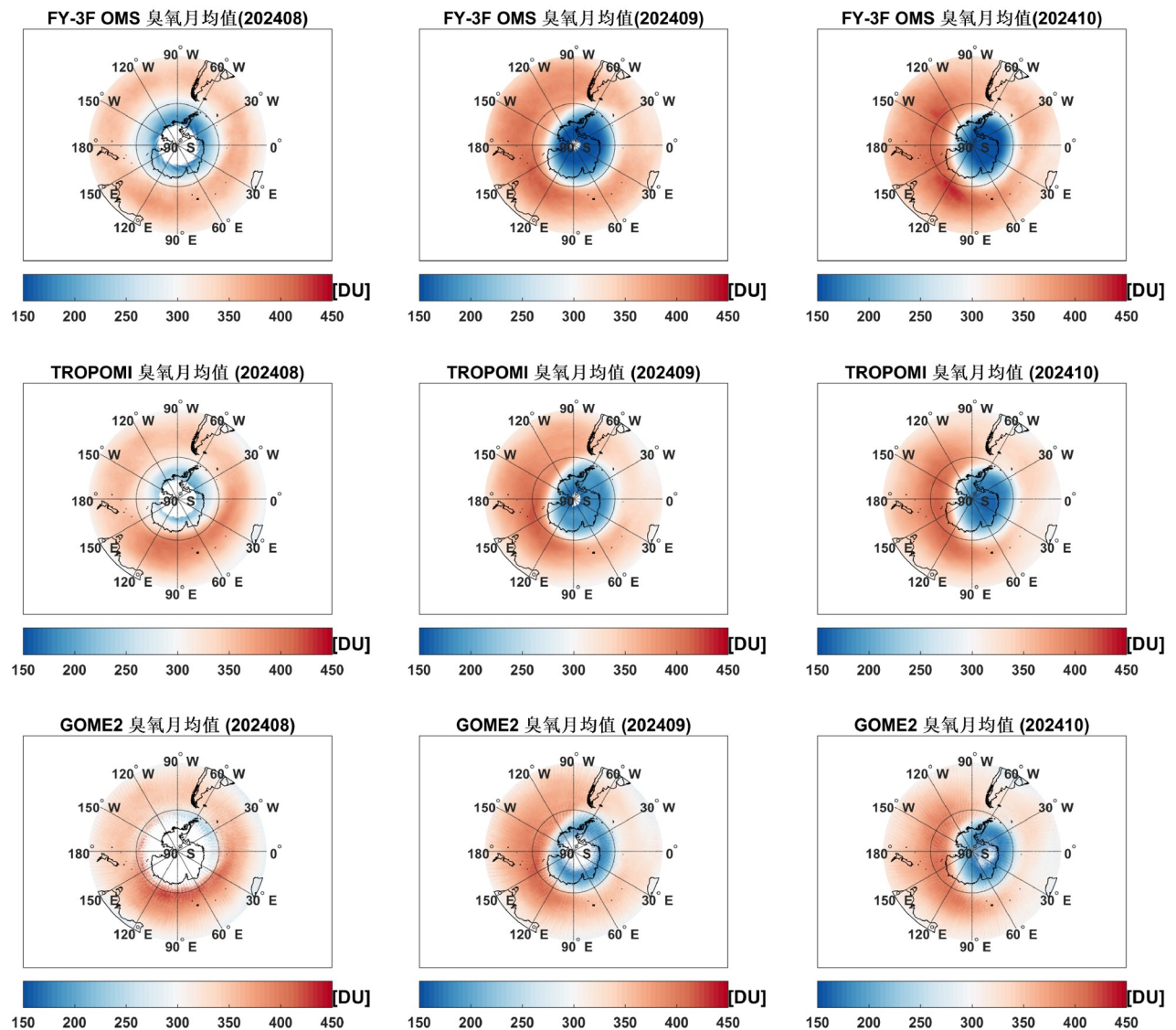


图 8 OMS-N、TROPOMI和GOME-2B观测的南极极区TOC分布, 对比分别对应2024年8月、9月和10月

件下(如极地冬季的高SAZ)可能引入系统性偏差。

TOC反演对定标稳定性的敏感性在极端观测几何

条件下尤为显著, 此时仪器SNR下降会放大幅射定标的不确定性。传感器间的对比结果也表明, 高纬度区

域的差异更可能反映出一级数据中尚未解决的定标问题,而非反演算法本身的局限性.未来工作应重点通过利用稳定的地球观测目标改进辐射定标,并与TROPOMI等高光谱基准产品进行跨传感器数据一致性校正.

## 6 结论

本研究展示了中国风云三号F星搭载的先进紫外-可见高光谱仪(OMS-N)的臭氧总量(TOC)最新反演结果,并通过多平台比对对其精度进行了全面评估.为克服传统DOAS方法的局限,本研究的反演算法在多个方面进行了改进,以提升物理一致性和反演精度.尤其是在DOAS拟合过程中同步反演有效地表反照率,以反映实时的地表变化;先验臭氧廓线形状通过辐射传输机理和机器学习技术直接从OMS-N光谱中获取,确保光谱自治性并减少基于气候场的偏差.

验证结果表明,OMS-N TOC反演结果质量较高,适用于全球大气监测.与WOUDC地基观测比对显示,大多数站点的相关系数超过0.9,凸显了OMS-N及其反演算法的有效性.与TROPOMI和GOME-2B的卫星间比对结果显示,OMS-N能够捕捉一致的空间分布和季节变化.高纬度地区在南半球臭氧消耗事件期间存在轻微差异,这些差异可能源于反演算法差异以及当前版本OMS-N一级数据中的定标不确定性.值得注意的是,OMS-N较高的空间分辨率使其在刻画大气臭氧结构方面优于分辨率较低的GOME-2B.

根据验证结果,OMS-N二级TOC产品满足产品需求中设定的与国际基准卫星产品相比平均偏差不超过5%的指标.然而,由于OMS-N在轨运行时间尚短,目前尚无法评估其长期稳定性.虽然OMS-N已为大气监测提供了有价值的数据,但进一步提升一级数据质量对于发挥仪器潜力仍至关重要.未来应在定标和反演流程上持续优化,并结合多样化数据集开展长期验证,以确保OMS-N二级产品的稳健性和长期可靠性.随着OMS-N光谱数据的不断积累,反演算法和数据处理技术的进步预计将为深入理解大气动力学及未来气候变化作出重要贡献.

**致谢** 感谢欧空局哥白尼计划提供的TROPOMI数据,AC SAF项目提供的GOME-2 TOC数据,以及WOUDC提

供的地基TOC观测数据,以上数据的使用均遵循各数据提供机构的数据共享政策.

**补充材料** 本文的补充材料见网络版<http://earthcn.sci-china.com>.补充材料为作者提供的原始数据,作者对其学术质量和内容负责.

## 参考文献

- 陈林,徐娜,王劲松,商建,寿亦萱,李博,徐榕炘,武胜利,王新,郑伟,贾树泽. 2025. 风云卫星:从观测到定量应用. *遥感学报*, 29: 1462–1479
- 迟雨蕾,赵传峰. 2023. 臭氧卫星遥感反演进展及挑战. *光学学报*, 43: 1899905
- 王咏梅,王英鉴,王维和,张仲谋,吕建工,付利平,江芳,陈济,王继红,管凤君,黄富,张兴赢. 2009. FY-3 卫星紫外臭氧总量探测仪. *科学通报*, 54: 3778–3783
- 赵冉,张成歆,苏文静,叶进,李紫薇,刘诚. 2025. 基于国产卫星紫外可见光谱仪的大气水汽总量观测. *中国科学: 地球科学*, 55: 1006–1027
- Acarreta J R, De Haan J F, Stammes P. 2004. Cloud pressure retrieval using the O<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> absorption band at 477 nm. *J Geophys Res*, 109: 2003JD003915
- Archibald A T, Neu J L, Elshorbany Y F, Cooper O R, Young P J, Akiyoshi H, Cox R A, Coyle M, Derwent R G, Deushi M, Finco A, Frost G J, Galbally I E, Gerosa G, Granier C, Griffiths P T, Hossaini R, Hu L, Jöckel P, Josse B, Lin M Y, Mertens M, Morgenstern O, Naja M, Naik V, Oltmans S, Plummer D A, Revell L E, Saiz-Lopez A, Saxena P, Shin Y M, Shahid I, Shallcross D, Tilmes S, Trickl T, Wallington T J, Wang T, Worden H M, Zeng G. 2020. Tropospheric ozone assessment report. *Elementa-Sci Anthropocene*, 8: 034
- Bak J, Liu X, Kim J H, Haffner D P, Chance K, Yang K, Sun K. 2017. Characterization and correction of OMPS nadir mapper measurements for ozone profile retrievals. *Atmos Meas Tech*, 10: 4373–4388
- Barnes P W, Williamson C E, Lucas R M, Robinson S A, Madronich S, Paul N D, Bornman J F, Bais A F, Sulzberger B, Wilson S R, Andrady A L, McKenzie R L, Neale P J, Austin A T, Bernhard G H, Solomon K R, Neale R E, Young P J, Norval M, Rhodes L E, Hylander S, Rose K C, Longstreth J, Aucamp P J, Ballaré C L, Cory R M, Flint S D, de Gruijl F R, Häder D P, Heikkilä A M, Jansen M A K, Pandey K K, Robson T M, Sinclair C A, Wängberg S Å, Worrest R C, Yazar S, Young A R, Zepp R G. 2019. Ozone depletion, ultraviolet radiation, climate change and prospects for a sustainable future. *Nat Sustain*, 2: 569–579
- Bass A M, Paur R J. 1985. The Ultraviolet Cross-Sections of Ozone: I.

- The Measurements. In: Zerefos C S, Ghazi A, eds. Atmospheric Ozone, Dordrecht: Springer Netherlands. 606–610
- Bhartia P K, McPeters R D, Flynn L E, Taylor S, Kramarova N A, Frith S, Fisher B, DeLand M. 2013. Solar Backscatter UV (SBUV) total ozone and profile algorithm. *Atmos Meas Tech*, 6: 2533–2548
- Bogumil K, Orphal J, Homann T, Voigt S, Spietz P, Fleischmann O C, Vogel A, Hartmann M, Kromminga H, Bovensmann H, Frerick J, Burrows J P. 2003. Measurements of molecular absorption spectra with the SCIAMACHY pre-flight model: Instrument characterization and reference data for atmospheric remote-sensing in the 230–2380 nm region. *J PhotoChem PhotoBiol A-Chem*, 157: 167–184
- Bovensmann H, Burrows J P, Buchwitz M, Frerick J, Noël S, Rozanov V V, Chance K V, Goede A P H. 1999. SCIAMACHY: Mission objectives and measurement modes. *J Atmos Sci*, 56: 127–150
- Brion J, Chakir A, Charbonnier J, Daumont D, Parisse C, Malicet J. 1998. Absorption spectra measurements for the ozone molecule in the 350–830 nm region. *J Atmos Chem*, 30: 291–299
- Burrows J P, Weber M, Buchwitz M, Rozanov V, Ladstätter-Weißmayer A, Richter A, DeBeek R, Hoogen R, Bramstedt K, Eichmann K U, Eisinger M, Perner D. 1999. The Global Ozone Monitoring Experiment (GOME): Mission concept and first scientific results. *J Atmos Sci*, 56: 151–175
- Chan K L, Xu J, Slijkhuis S, Valks P, Loyola D. 2022. TROPospheric Monitoring Instrument observations of total column water vapour: Algorithm and validation. *Sci Total Environ*, 821: 153232
- Daumont D, Brion J, Charbonnier J, Malicet J. 1992. Ozone UV spectroscopy I: Absorption cross-sections at room temperature. *J Atmos Chem*, 15: 145–155
- Di Noia A, Sellitto P, Del Frate F, de Laat J. 2013. Global tropospheric ozone column retrievals from OMI data by means of neural networks. *Atmos Meas Tech*, 6: 895–915
- Doicu A, Trautmann T, Schreier F. 2010. Numerical Regularization for Atmospheric Inverse Problems. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. 426
- Garane K, Lerot C, Coldewey-Egbers M, Verhoelst T, Koukouli M E, Zyrichidou I, Balis D S, Danckaert T, Goutail F, Granville J, Hubert D, Keppens A, Lambert J C, Loyola D, Pommereau J P, Van Roozendaal M, Zehner C. 2018. Quality assessment of the Ozone\_cci Climate Research Data Package (release 2017)—Part 1: Ground-based validation of total ozone column data products. *Atmos Meas Tech*, 11: 1385–1402
- Garane K, Koukouli M E, Verhoelst T, Lerot C, Heue K P, Fioletov V, Balis D, Bais A, Bazureau A, Dehn A, Goutail F, Granville J, Griffin D, Hubert D, Keppens A, Lambert J C, Loyola D, McLinden C, Pazmino A, Pommereau J P, Redondas A, Romahn F, Valks P, Van Roozendaal M, Xu J, Zehner C, Zerefos C, Zimmer W. 2019. TROPOMI/S5P total ozone column data: Global ground-based validation and consistency with other satellite missions. *Atmos Meas Tech*, 12: 5263–5287
- Gorshelev V, Serdyuchenko A, Weber M, Chehade W, Burrows J P. 2014. High spectral resolution ozone absorption cross-sections—Part 1: Measurements, data analysis and comparison with previous measurements around 293 K. *Atmos Meas Tech*, 7: 609–624
- Gottwald M, Bovensmann H. 2011. SCIAMACHY—Exploring the Changing Earth’s Atmosphere. Dordrecht : Springer Netherlands
- Hao N, Koukouli M E, Inness A, Valks P, Loyola D G, Zimmer W, Balis D S, Zyrichidou I, Van Roozendaal M, Lerot C, Spurr R J D. 2014. GOME-2 total ozone columns from MetOp-a/MetOp-B and assimilation in the MACC system. *Atmos Meas Tech*, 7: 2937–2951
- Hassler B, Petropavlovskikh I, Staehelin J, August T, Bhartia P K, Clerbaux C, Degenstein D, Mazière M D, Dinelli B M, Dudhia A, Dufour G, Frith S M, Froidevaux L, Godin-Beekmann S, Granville J, Harris N R P, Hoppel K, Hubert D, Kasai Y, Kurylo M J, Kyrölä E, Lambert J C, Levelt P F, McElroy C T, McPeters R D, Munro R, Nakajima H, Parrish A, Raspollini P, Remsberg E E, Rosenlof K H, Rozanov A, Sano T, Sasano Y, Shiotani M, Smit H G J, Stiller G, Tamminen J, Tarasick D W, Urban J, van der A R J, Veefkind J P, Vigouroux C, von Clarmann T, von Savigny C, Walker K A, Weber M, Wild J, Zawodny J M. 2014. Past changes in the vertical distribution of ozone—Part 1: Measurement techniques, uncertainties and availability. *Atmos Meas Tech*, 7: 1395–1427
- Heath D F, Krueger A J, Roeder H A, Henderson B D. 1975. The Solar Backscatter UltraViolet and Total Ozone Mapping Spectrometer (SBUV/TOMS) for NIMBUS G. *Opt Eng*, 14
- Hendrick F, Pommereau J P, Goutail F, Evans R D, Ionov D, Pazmino A, Kyrö E, Held G, Eriksen P, Dorokhov V, Gil M, Van Roozendaal M. 2011. NDACC/SAOZ UV-visible total ozone measurements: Improved retrieval and comparison with correlative ground-based and satellite observations. *Atmos Chem Phys*, 11: 5975–5995
- Heue K P, Loyola D, Romahn F, Zimmer W, Chabrilat S, Errera Q, Ziemke J, Kramarova N. 2022. Tropospheric ozone retrieval by a combination of TROPOMI/S5P measurements with BASCOE assimilated data. *Atmos Meas Tech*, 15: 5563–5579
- Hubert D, Heue K P, Lambert J C, Verhoelst T, Allaart M, Compennolle S, Cullis P D, Dehn A, Félix C, Johnson B J, Keppens A, Kollonige D E, Lerot C, Loyola D, Maata M, Mitro S, Mohamad M, Piters A, Romahn F, Selkirk H B, da Silva F R, Stauffer R M, Thompson A M, Veefkind J P, Vömel H, Witte J C, Zehner C. 2021. TROPOMI tropospheric ozone column data: Geophysical assessment and comparison to ozonesondes, GOME-2B and OMI. *Atmos Meas Tech*, 14: 7405–7433
- Inness A, Flemming J, Heue K P, Lerot C, Loyola D, Ribas R, Valks P,

- van Roozendaal M, Xu J, Zimmer W. 2019. Monitoring and assimilation tests with TROPOMI data in the CAMS system: Near-real-time total column ozone. *Atmos Chem Phys*, 19: 3939–3962
- Jaross G, Krueger A, Cebula R P, Seftor C, Hartmann U, Haring R, Burchfield D. 1995. Calibration and postlaunch performance of the Meteor 3/TOMS instrument. *J Geophys Res*, 100: 2985–2995
- Jaross G, Bhartia P K, Chen G, Kowitt M, Haken M, Chen Z, Xu P, Warner J, Kelly T. 2014. OMPS Limb Profiler instrument performance assessment. *J Geophys Res-Atmos*, 119: 4399–4412
- Keppens A, Di Pedé S, Hubert D, Lambert J C, Veefkind P, Sneep M, De Haan J, ter Linden M, Leblanc T, Compennolle S, Verhoelst T, Granville J, Nath O, Fjæraa A M, Boyd I, Niemeijer S, Van Malderen R, Smit H G J, Duflot V, Godin-Beekmann S, Johnson B J, Steinbrecht W, Tarasick D W, Kollonige D E, Stauffer R M, Thompson A M, Dehn A, Zehner C. 2024. 5 years of Sentinel-5P TROPOMI operational ozone profiling and geophysical validation using ozonesonde and lidar ground-based networks. *Atmos Meas Tech*, 17: 3969–3993
- Kerr J B. 2010. The Brewer Spectrophotometer. UV Radiation in Global Climate Change, Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. 160–191
- Kim J, Jeong U, Ahn M H, Kim J H, Park R J, Lee H, Song C H, Choi Y S, Lee K H, Yoo J M, Jeong M J, Park S K, Lee K M, Song C K, Kim S W, Kim Y J, Kim S W, Kim M, Go S, Liu X, Chance K, Chan Miller C, Al-Saadi J, Veihelmann B, Bhartia P K, Torres O, Abad G G, Haffner D P, Ko D H, Lee S H, Woo J H, Chong H, Park S S, Nicks D, Choi W J, Moon K J, Cho A, Yoon J, Kim S, Hong H, Lee K, Lee H, Lee S, Choi M, Veefkind P, Levelt P F, Edwards D P, Kang M, Eo M, Bak J, Baek K, Kwon H A, Yang J, Park J, Han K M, Kim B R, Shin H W, Choi H, Lee E, Chong J, Cha Y, Koo J H, Irie H, Hayashida S, Kasai Y, Kanaya Y, Liu C, Lin J, Crawford J H, Carmichael G R, Newchurch M J, Lefer B L, Herman J R, Swap R J, Lau A K H, Kurosu T P, Jaross G, Ahlers B, Dobber M, McElroy C T, Choi Y. 2020. New era of air quality monitoring from space: Geostationary Environment Monitoring Spectrometer (GEMS). *Bull Amer Meteorol Soc*, 101: E1–E22
- Lerot C, Van Roozendaal M, Spurr R, Loyola D, Coldewey-Egbers M, Kochenova S, van Gent J, Koukouli M, Balis D, Lambert J, Granville J, Zehner C. 2014. Homogenized total ozone data records from the European sensors GOME/ERS-2, SCIAMACHY/Envisat, and GOME-2/MetOp-A. *J Geophys Res-Atmos*, 119: 1639–1662
- Levelt P F, van den Oord G H J, Dobber M R, Malkki A, Huib Visser A, Johan de Vries A, Stammes P, Lundell J O V, Saari H. 2006. The Ozone Monitoring Instrument. *IEEE Trans Geosci Remote Sens*, 44: 1093–1101
- Levelt P F, Joiner J, Tamminen J, Veefkind J P, Bhartia P K, Stein Zweers D C, Duncan B N, Streets D G, Eskes H, van der A R, McLinden C, Fioletov V, Carn S, de Laat J, DeLand M, Marchenko S, McPeters R, Ziemke J, Fu D, Liu X, Pickering K, Apituley A, González Abad G, Arola A, Boersma F, Chan Miller C, Chance K, de Graaf M, Hakkarainen J, Hassinen S, Ialongo I, Kleipool Q, Krotkov N, Li C, Lamsal L, Newman P, Nowlan C, Suleiman R, Tilstra L G, Torres O, Wang H, Wargan K. 2018. The Ozone Monitoring Instrument: Overview of 14 years in space. *Atmos Chem Phys*, 18: 5699–5745
- Li C, Joiner J, Liu F, Krotkov N A, Fioletov V, McLinden C. 2022. A new machine-learning-based analysis for improving satellite-retrieved atmospheric composition data: OMI SO<sub>2</sub> as an example. *Atmos Meas Tech*, 15: 5497–5514
- Liu S, Valks P, Pinardi G, Xu J, Chan K L, Argyrouli A, Lutz R, Beirle S, Khorsandi E, Baier F, Huijnen V, Bais A, Donner S, Dörner S, Gratsea M, Hendrick F, Karagkiozidis D, Lange K, PETERS A J M, Remmers J, Richter A, Van Roozendaal M, Wagner T, Wenig M, Loyola D G. 2021. An improved TROPOMI tropospheric NO<sub>2</sub> research product over Europe. *Atmos Meas Tech*, 14: 7297–7327
- Loyola D G, Koukouli M E, Valks P, Balis D S, Hao N, Van Roozendaal M, Spurr R J D, Zimmer W, Kiemle S, Lerot C, Lambert J C. 2011. The GOME-2 total column ozone product: Retrieval algorithm and ground-based validation. *J Geophys Res*, 116: D07302
- Loyola D G, Gimeno García S, Lutz R, Argyrouli A, Romahn F, Spurr R J D, Pedernana M, Doicu A, Molina García V, Schüssler O. 2018. The operational cloud retrieval algorithms from TROPOMI on board Sentinel-5 Precursor. *Atmos Meas Tech*, 11: 409–427
- Loyola D G, Xu J, Heue K P, Zimmer W. 2020. Applying FP\_ILM to the retrieval of Geometry-dependent Effective Lambertian Equivalent Reflectivity (GE\_LER) daily maps from UVN satellite measurements. *Atmos Meas Tech*, 13: 985–999
- Maahn M, Turner D D, Löhnert U, Posselt D J, Ebell K, Mace G G, Comstock J M. 2020. Optimal estimation retrievals and their uncertainties: What every atmospheric scientist should know. *Bull Amer Meteorol Soc*, 101: E1512–E1523
- Malicet J, Daumont D, Charbonnier J, Parisse C, Chakir A, Brion J. 1995. Ozone UV spectroscopy. II. Absorption cross-sections and temperature dependence. *J Atmos Chem*, 21: 263–273
- Mao J, Wang Y, Shi E, Hu X, Wang Q, Wang J. 2024. Pre-launch multi-energy radiance calibration of the OMS-N. *Remote Sens*, 16: 119
- Marshak A, Davis A, Cahalan R F, Wiscombe W. 1998. Nonlocal independent pixel approximation: Direct and inverse problems. *IEEE Trans Geosci Remote Sens*, 36: 192–205
- Mettig N, Weber M, Rozanov A, Arosio C, Burrows J P, Veefkind P, Thompson A M, Querel R, Leblanc T, Godin-Beekmann S, Kivi R,

- Tully M B. 2021. Ozone profile retrieval from nadir TROPOMI measurements in the UV range. *Atmos Meas Tech*, 14: 6057–6082
- Munro R, Lang R, Klaes D, Poli G, Retscher C, Lindstrot R, Huckle R, Lacan A, Grzegorski M, Holdak A, Kokhanovsky A, Livschitz J, Eisinger M. 2016. The GOME-2 instrument on the Metop series of satellites: Instrument design, calibration, and level 1 data processing—An overview. *Atmos Meas Tech*, 9: 1279–1301
- Orfanoz-Chequelaef A, Rozanov A, Weber M, Arosio C, Ladstätter-Weißmayer A, Burrows J P. 2021. Total ozone column from Ozone Mapping and Profiler Suite Nadir Mapper (OMPS-NM) measurements using the broadband weighting function fitting approach (WFFA). *Atmos Meas Tech*, 14: 5771–5789
- Orphal J, Staehelin J, Tamminen J, Braathen G, De Backer M R, Bais A, Balis D, Barbe A, Bhartia P K, Birk M, Burkholder J B, Chance K, von Clarmann T, Cox A, Degenstein D, Evans R, Flaud J M, Flittner D, Godin-Beekmann S, Gorshelev V, Gratien A, Hare E, Janssen C, Kyrölä E, McElroy T, McPeters R, Pastel M, Petersen M, Petropavlovskikh I, Picquet-Varraut B, Pitts M, Labow G, Rotger-Languereau M, Leblanc T, Lerot C, Liu X, Moussay P, Redondas A, Van Roozendaal M, Sander S P, Schneider M, Serdyuchenko A, Veefkind P, Viallon J, Viatte C, Wagner G, Weber M, Wielgosz R I, Zehner C. 2016. Absorption cross-sections of ozone in the ultraviolet and visible spectral regions: Status report 2015. *J Mol Spectr*, 327: 105–121
- Platt U, Stutz J. 2008. Differential Optical Absorption Spectroscopy: Principles and Applications. Berlin: Springer. 597
- Qian Y, Luo Y, Zhou H, Yang T, Xi L, Si F. 2023. First retrieval of total ozone columns from EMI-2 using the DOAS method. *Remote Sens*, 15: 1665
- Rao L, Xu J, Efremenko D S, Loyola D G, Doicu A. 2022. Hyperspectral satellite remote sensing of aerosol parameters: Sensitivity analysis and application to TROPOMI/S5P. *Front Environ Sci*, 9: 770662
- Rodgers C D. 2000. Inverse Methods for Atmospheric Sounding: Theory and Practice. Singapore: World Scientific. 256
- Seftor C J, Jaross G, Kowitt M, Haken M, Li J, Flynn L E. 2014. Postlaunch performance of the Suomi National Polar-orbiting Partnership Ozone Mapping and Profiler Suite (OMPS) nadir sensors. *J Geophys Res-Atmos*, 119: 4413–4428
- Seo S, Richter A, Blechschmidt A M, Bougoudis I, Burrows J P. 2019. First high-resolution BrO column retrievals from TROPOMI. *Atmos Meas Tech*, 12: 2913–2932
- Serdyuchenko A, Gorshelev V, Weber M, Chehade W, Burrows J P. 2014. High spectral resolution ozone absorption cross-sections—Part 2: Temperature dependence. *Atmos Meas Tech*, 7: 625–636
- Spurr R J D. 2006. VLIDORT: A linearized pseudo-spherical vector discrete ordinate radiative transfer code for forward model and retrieval studies in multilayer multiple scattering media. *J Quant Spectrosc Ra*, 102: 316–342
- Spurr R. 2008. LIDORT and VLIDORT: Linearized Pseudo-spherical Scalar and Vector Discrete Ordinate Radiative Transfer Models for Use in Remote Sensing Retrieval Problems. Light Scattering Reviews 3, Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. 229–275
- Theys N, De Smedt I, Yu H, Danckaert T, van Gent J, Hörmann C, Wagner T, Hedelt P, Bauer H, Romahn F, Pedernana M, Loyola D, Van Roozendaal M. 2017. Sulfur dioxide retrievals from TROPOMI onboard Sentinel-5 Precursor: Algorithm theoretical basis. *Atmos Meas Tech*, 10: 119–153
- Tilstra L G, de Graaf M, Trees V J H, Litvinov P, Dubovik O, Stammes P. 2024. A directional surface reflectance climatology determined from TROPOMI observations. *Atmos Meas Tech*, 17: 2235–2256
- Van Roozendaal M, Peeters P, Roscoe H K, De Backer H, Jones A E, Bartlett L, Vaughan G, Goutail F, Pommereau J P, Kyro E, Wahlstrom C, Braathen G, Simon P C. 1998. Validation of ground-based visible measurements of total ozone by comparison with dobson and brewer spectrophotometers. *J Atmos Chem*, 29: 55–83
- Veefkind J P, de Haan J F, Brinksma E J, Kroon M, Levelt P F. 2006. Total ozone from the Ozone Monitoring Instrument (OMI) using the DOAS technique. *IEEE Trans Geosci Remote Sens*, 44: 1239–1244
- Veefkind J P, Aben I, McMullan K, Förster H, de Vries J, Otter G, Claas J, Eskes H J, de Haan J F, Kleipool Q, van Wee M, Hasekamp O, Hoogeveen R, Landgraf J, Snel R, Tol P, Ingmann P, Voors R, Kruizinga B, Vink R, Visser H, Levelt P F. 2012. TROPOMI on the ESA Sentinel-5 Precursor: A GMES mission for global observations of the atmospheric composition for climate, air quality and ozone layer applications. *Remote Sens Environ*, 120: 70–83
- Wang P, Stammes P, van der A R, Pinardi G, van Roozendaal M. 2008. FRESKO+: An improved O<sub>2</sub> A-band cloud retrieval algorithm for tropospheric trace gas retrievals. *Atmos Chem Phys*, 8: 6565–6576
- Wang Q, Wang Y, Xu N, Mao J, Sun L, Shi E, Hu X, Chen L, Yang Z, Si F, Liu J, Zhang P. 2024. Preflight spectral calibration of the Ozone Monitoring Suite-Nadir on FengYun 3F satellite. *Remote Sens*, 16: 1538
- Wang W, Letu H, Shang H, Xu J, Yan H, Gao L, Yu C, Gu J, Tao J, Xu N, Chen L, Chen L. 2024. A novel physics-based Cloud Retrieval Algorithm based on Neural Networks (CRANN) from hyperspectral measurements in the O<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> band. *Remote Sens Environ*, 311: 114267
- Weber M, Gorshelev V, Serdyuchenko A. 2016. Uncertainty budgets of major ozone absorption cross sections used in UV remote sensing applications. *Atmos Meas Tech*, 9: 4459–4470

- Wu K, Xu Z, Luo Y, Li Q, Yu K, Si F. 2024. Retrieval and comparison of multi-satellite polar ozone data from the EMI series instruments. *Remote Sens*, 16: 3619
- Xia Y, Hu Y, Huang Y, Bian J, Zhao C. 2021a. Stratospheric ozone loss-induced cloud effects lead to less surface ultraviolet radiation over the Siberian Arctic in spring. *Environ Res Lett*, 16: 084057
- Xia Y, Hu Y, Huang Y, Zhao C, Xie F, Yang Y. 2021b. Significant contribution of severe ozone loss to the Siberian-Arctic surface warming in spring 2020. *Geophys Res Lett*, 48: e2021GL092509
- Xia Y, Hu Y, Huang Y, Bian J, Zhao C, Lin J, Xie F, Zhou C. 2023. Stratospheric ozone loss enhances summer precipitation over the southern slope of the Tibetan Plateau. *Geophys Res Lett*, 50: e2023GL103742
- Xu J, Schreier F, Doicu A, Trautmann T. 2016. Assessment of Tikhonov-type regularization methods for solving atmospheric inverse problems. *J Quant Spectrosc Ra*, 184: 274–286
- Xu J, Schussler O, Rodriguez D G L, Romahn F, Doicu A. 2017. A novel ozone profile shape retrieval using full-physics inverse learning machine (FP-ILM). *IEEE J Sel Top Appl Earth Observations Remote Sens*, 10: 5442–5457
- Xu J, Rao L, Schreier F, Efremenko D S, Doicu A, Trautmann T. 2020. Insight into construction of Tikhonov-type regularization for atmospheric retrievals. *Atmosphere*, 11: 1052
- Xu J, Zhang Z, Rao L, Wang Y, Letu H, Shi C, Tana G, Wang W, Zhu S, Liu S, Shi E, Wang Y, Chen L, Dong X, Shi J. 2024. Remote sensing of tropospheric ozone from space: Progress and challenges. *J Remote Sens*, 4: 0178
- Yang Z, Lu N, Shi J, Zhang P, Dong C, Yang J. 2012. Overview of FY-3 payload and ground application system. *IEEE Trans Geosci Remote Sens*, 50: 4846–4853
- Zhang P, Lu Q, Hu X, Gu S, Yang L, Min M, Chen L, Xu N, Sun L, Bai W, Ma G, Xian D. 2019. Latest progress of the Chinese meteorological satellite program and core data processing technologies. *Adv Atmos Sci*, 36: 1027–1045
- Zhang X, Zhang Y, Lu X, Bai L, Chen L, Tao J, Wang Z, Zhu L. 2021. Estimation of lower-stratosphere-to-troposphere ozone profile using Long Short-Term Memory (LSTM). *Remote Sens*, 13: 1374
- Zhao X, Fioletov V, Brohart M, Savastiouk V, Abboud I, Ogyu A, Davies J, Sit R, Lee S C, Cede A, Tiefengraber M, Müller M, Griffin D, McLinden C. 2021. The world Brewer reference triad—Updated performance assessment and new double triad. *Atmos Meas Tech*, 14: 2261–2283
- Zhu S, Xu J, Yu C, Wang Y, Zeng Q, Wang H, Shi J. 2022a. Learning surface ozone from satellite columns (LESO): A regional daily estimation framework for surface ozone monitoring in China. *IEEE Trans Geosci Remote Sens*, 60: 1–11
- Zhu S, Xu J, Zeng J, Yu C, Wang Y, Yan H. 2022b. Satellite-derived estimates of surface ozone by LESO: Extended application and performance evaluation. *Int J Appl Earth Observation GeoInf*, 113: 103008
- Zong M, Song T, Zhang Y, Feng Y, Fan S. 2024. A deep forest algorithm based on TROPOMI satellite data to estimate near-ground ozone concentration. *Atmosphere*, 15: 1020
- Zoogman P, Liu X, Suleiman R M, Pennington W F, Flittner D E, Al-Saadi J A, Hilton B B, Nicks D K, Newchurch M J, Carr J L, Janz S J, Andraschko M R, Arola A, Baker B D, Canova B P, Chan Miller C, Cohen R C, Davis J E, Dussault M E, Edwards D P, Fishman J, Ghulam A, González Abad G, Grutter M, Herman J R, Houck J, Jacob D J, Joiner J, Kerridge B J, Kim J, Krotkov N A, Lamsal L, Li C, Lindfors A, Martin R V, McElroy C T, McLinden C, Natraj V, Neil D O, Nowlan C R, OSullivan E J, Palmer P I, Pierce R B, Pippin M R, Saiz-Lopez A, Spurr R J D, Szykman J J, Torres O, Veefkind J P, Veihelmann B, Wang H, Wang J, Chance K. 2017. Tropospheric emissions: Monitoring of pollution (TEMPO). *J Quant Spectrosc Ra*, 186: 17–39

(责任编辑: 车慧正)