

引用格式:ZHANG Xinyuan, LI Xiaoying, CHENG Tianhai, *et al.* Review of NO₂ retrieval of satellite-borne hyperspectral sensors and accuracy assessment of tropospheric NO₂ Column Density Products[J]. Remote Sensing Technology and Application, 2023, 38(5): 1148-1158. [张新苑, 李小英, 程天海, 等. 星载NO₂探测发展及对流层柱浓度产品精度分析[J]. 遥感技术与应用, 2023, 38(5): 1148-1158.]

DOI: 10.11873/j.issn.1004-0323.2023.5.1148

星载NO₂探测发展及对流层柱浓度产品精度分析

张新苑^{1,2,3}, 李小英¹, 程天海¹, 刘双慧^{1,2,4}, 郭宇航^{1,2,3}

(1. 中国科学院空天信息创新研究院, 北京 100094;

2. 中国科学院大学, 北京 100049;

3. 中国科学院大学资源与环境学院, 北京 100049;

4. 中国科学院大学电子电气与通信工程学院, 北京 100049)

摘要:NO₂作为大气中重要的痕量气体之一,是衡量大气污染状况的重要风向标。与传统地基观测相比,星载传感器能够提供大范围、长时间序列的观测资料,利用遥感卫星数据反演获取对流层NO₂浓度已成为近些年研究的热点之一。首先介绍了国内外星载紫外高光谱传感器的发展。然后从原理方面对国际上通用的对流层NO₂垂直柱浓度反演算法进行阐述。之后介绍了各官方对流层NO₂柱浓度产品的反演流程及产品精度,并比较了各产品DOAS算法的区别。可见,由于传感器所获取数据的时间、空间、光谱分辨率越来越高,NO₂柱浓度产品的反演模型及算法的选择更加合理,因此NO₂产品精度也更高。

关键词:NO₂; 星载高光谱传感器; 柱浓度; 反演算法

中图分类号:P407 **文献标志码:**A **文章编号:**1004-0323(2023)05-1148-11

1 引言

当前人类活动、工业排放和土地类型的改变使得大气中痕量气体含量升高^[1]。氮氧化物(NO_x=NO+NO₂)是光化学形成臭氧的前体物^[2],是地球大气中最重要的痕量气体之一^[3]。平流层中,它是破坏臭氧的催化剂,对流层中,氮氧化物和挥发性有机化合物是形成臭氧的重要成分。由于生命周期只有几天甚至几个小时,所以主要集中在对流层底部。除此之外,NO₂还会与羟基自由基(OH)反应生成硝酸(HNO₃),产生酸雨,从而对环境产生破坏、直接影响公众健康,并且在局地辐射强迫中起着重要作用^[4-5]。NO₂的来源主要有两种,自然源和人为源。在全球尺度上,人为源与自然源贡献程度大致相等,但在空间分布上,自然源分布更为均匀,

人为源多集聚在局部区域。人为源可分为3类:化石燃料燃烧、森林火灾和土壤排放^[6],其中燃烧过程是最主要的贡献者。化石燃料和生物质等的燃烧,严重影响了局部区域的空气质量,并且对全球的对流层环境造成严重破坏^[7]。NO₂的浓度及化学特性是衡量人为大气污染的一个重要风向标^[8]。因此,充分了解NO₂分布及其变化对大气环境研究和空气质量控制等方面具有指导意义。

传统的地基监测能够获得实时准确的数据,然而由于监测站点的限制、污染物空间分布不均等特点,无法提供大范围、长时间连续的资料,很难从点信息获取其空间特性。而卫星自上而下的长序列观测能够有效解决这一问题^[9]。与地基监测不同,星载遥感观测在经过垂直探测灵敏度校正后可探

收稿日期:2022-07-06;修订日期:2022-10-09

基金项目:国家自然科学基金项目(41571345),国家重点研发项目(2018YFB050490303)。

作者简介:张新苑(1999—),女,陕西渭南人,硕士研究生,主要从事定量遥感应用研究。Email: zhangxinyuan20@mails.ucas.edu.cn

通讯作者:李小英(1975—),女,福建漳州人,博士,副研究员,主要从事大气成分反演算法研究。Email: Lixy01@radi.ac.cn

测得到对流层以上的柱总量^[10]。污染严重的地区,对流层NO₂浓度可占NO₂柱总量的90%^[11]。因此利用遥感卫星数据反演获取对流层NO₂浓度已成为近些年研究的热点之一。

NO₂在330~700 nm范围内有很强的带状吸收光谱,且最大值出现在400~450 nm范围内,因此该范围常用于NO₂的反演^[12]。NO₂反演使用DOAS算法进行光谱拟合,获得大气整层斜柱浓度;然后估算获得平流层NO₂斜柱浓度,从而获得对流层NO₂斜柱浓度;最后计算获得AMF,将对流层斜柱浓度转换为垂直柱浓度。Chen等^[13]详细地介绍了NO₂反演算法,并且对NO₂反演误差分析、验证和未来NO₂传感器的发展进行了讨论,较为全面地总结了国内外NO₂反演方面的相关研究,但并未对NO₂产品进行系统梳理。并且近十几年来国内外陆续发射了一系列可用于探测NO₂的传感器,因此,有必要对星载NO₂探测仪器、反演算法及相关产品现状进行重新梳理。

2 NO₂天底探测器发展

2.1 GOME

GOME(Global Ozone Monitoring Experiment)搭载于欧空局(European Space Agency, ESA)发射的ERS-2(European Space Agency-2)卫星上,于1995年4月21日发射,2003年停止运行。该仪器通过测量太阳后向散射来实现全球范围内大气痕量气体柱总量的测量^[14]。它的主要任务是监测O₃以及在平流层、对流层中具有重要影响的痕量气体的全球分布情况,如NO₂、SO₂、OCIO和BrO等。GOME波长范围为240~790 nm,覆盖紫外、可见光、近红外波段。该仪器的光谱分辨率为0.2~0.4 nm,空间分辨率为40 km²×40 km²到40 km²×320 km²不等。由于使用最大扫描宽度(960 km),GOME可在赤道3天内(43个轨道)实现对全球范围内的扫描。数据产品分为5个等级,可满足不同用户的需求。

GOME将差分光学吸收光谱技术(Differential Optical Absorption Spectroscopy, DOAS)作为主要的测量技术,在探测痕量气体方面具有极大潜力。观测方式为天底观测,有4个不同的光谱通道,其中通道2(290~405 nm)和通道3(400~605 nm)可用于探测NO₂。由于NO₂在330~700 nm区间有很强的带状吸收光谱,且最大值位于400~450 nm区间,

因此基于GOME利用DOAS技术探测NO₂是十分理想的。目前GOME可获得NO₂柱浓度产品的空间分辨率为40 km²×320 km²。因此,GOME的NO₂产品被定义为一个中等准确度的产品^[14]。

2.2 SCIAMACHY

由德国、荷兰和比利时联合研制的SCIAMACHY(Scanning Imaging Absorption Spectrometer for Atmospheric Chartography)载荷于2002年2月28日搭载于ENVISAT卫星发射成功,在轨运行至2012年4月8日。光谱范围为240~2380 nm,光谱分辨率为0.2~1.5 nm,空间分辨率为30 km²×60 km²,大约6天便可覆盖全球。相较于GOME,SCIAMACHY使用了天底、临边相结合的观测模式,可同时获得痕量气体的柱浓度和廓线等数据^[15]。

SCIAMACHY可通过观测425~450 nm范围内太阳后向散射来反演对流层中NO₂浓度^[15]。Lamsal等利用SCIAMACHY对流层NO₂柱浓度数据,并结合全球化学输送模型(GEOS-Chem)估算了NO_x排放的变化以及2006年自下而上的人为排放量^[16]。

2.3 OMI

OMI(Ozone Monitoring Instrument)搭载于卫星Aura,于2004年7月15日发射升空,该仪器由荷兰和芬兰航空局制造,可测量紫外可见光范围内(270~500 nm)的直射、后向散射太阳光,以高光谱分辨率在紫外/可见/近红外(UV/VIS/NIR)范围内测量完整光谱,这使得同时从大气中反演几种痕量气体成为可能^[17]。OMI有3个光谱通道:UV1(270~310 nm)、UV2(310~365 nm)、VIS(365~500 nm)^[18],能够提供对流层中O₃、NO₂、SO₂、HCHO等痕量气体的柱浓度数据^[19]。其中用来反演NO₂柱浓度的波长范围为425~450 nm^[20]。

OMI通过大视场角(114°)能够获得更大范围、更高空间分辨率(13 km²×24 km²)的空间信息,可实现每日全球覆盖,弥补了GOME、SCIAMACHY只能获取NO₂月平均或年平均数据的缺陷^[17]。除此之外,还可以用于计算云分数、云顶高度、气溶胶光学厚度和单次散射反照率等一系列参数^[21]。

2.4 GOME-2

作为GOME-1的增强版^[22],搭载在Metop-A卫星上的传感器GOME-2于2006年10月发射升空。除此之外,GOME-2还搭载在Metop-B和

表 1 星载紫外传感器主要参数

Table 1 Principal parameters of NO₂ column data products of the space-borne UV sensors

传感器/卫星	发射时间	光谱范围	光谱分辨率	空间分辨率
GOME/ ERS-2	1995 年 4 月	240~790 nm	0.2~0.4 nm	40 km ² ×320 km ²
SCIAMACHY/ Envisat	2002 年 3 月	240~2380 nm	0.22~1.48 nm	30 km ² ×60 km ²
OMI/ Aura	2004 年 7 月	270~500 nm	0.63 nm	13 km ² ×24 km ²
GOME-2/Metop-A	2006 年 10 月	240~790 nm(主通道) 300~800 nm(偏振通道)	0.24~0.53 nm	80 km ² ×40 km ² (主通道)
TROPOMI/Sentinel-5p	2017 年 10 月	270~550 nm 675~775 nm 2 305~2 385 nm	0.2~0.4 nm	3.5 km ² ×7 km ² (2019 年 8 月 6 日前) 3.5 km ² ×5.5 km ² (2019 年 8 月 6 日后)
EMI/ Gaofen-5	2018 年 5 月	240~710 nm	0.3~0.5 nm	13 km ² ×48 km ²
EMI-II/ Gaofen-5(02)	2021 年 9 月	240~710 nm	0.3~0.6 nm	13 km ² ×24 km ²

Metop-C 卫星上,分别于 2013 年 4 月 24 日、2018 年 11 月 6 日进入预定轨道。METOP 系列卫星属于太阳同步轨道卫星,运行高度为 820 km^[23]。

GOME-2 包括 4 个主要的光谱通道和 2 个偏振通道,光谱仪是一个四通道紫外/可见光栅光谱仪,以天底模式进行观测,波长范围为 240~790 nm,光谱分辨率为 0.2~0.4 nm,空间分辨率为 40 km²×80 km²^[24]。GOME-2 具有两个观测模式:地球观测模式和校准模式,能够测量地球的后向散射辐射和太阳辐照度,可在紫外-可见光波段对大气痕量气体柱浓度进行全球范围内的监测,如 NO₂、BrO、OCLO、HCHO 和 SO₂等^[23]。

2.5 TROPOMI

TROPOMI 是哨兵五号(Sentinel-5 Precursor, S5P)上唯一有效的载荷,承担着每日提供全球范围痕量气体、气溶胶浓度的任务。该仪器具有 4 个独立的光谱仪,探测波段包括紫外、可见光、近红外和短波红外,在大气层顶部探测地球反射和辐射的太阳光,可对 O₃、NO₂、CO、SO₂、CH₄、HCHO 和气溶胶等成分进行观测,并且能够获得这些痕量气体的柱总量和垂直廓线信息^[25]。

TROPOMI 包含 4 台光谱仪器,3 台覆盖紫外-近红外(270~500 nm 和 675~755 nm)范围,一台用于短波红外范围内的探测^[26]。官方所提供的 NO₂ 产品反演算法是基于 QA4ECV 和 DOMINO/TEMIS 算法的一种改进^[27]。TROPOMI NO₂ 产品具有更高的时间、空间分辨率^[28]。为了验证 TROPOMI 数据的有效性,基于地基 Pandora 光谱仪建立了 Pandonia 全球网络,该仪器可在紫外-可见光(280~525 nm)范围探测太阳直射光,并利用 DOAS 方法提供 NO₂ 柱总量^[29]。

2.6 大气痕量气体差分吸收光谱仪

2018 年 5 月 9 日,高分系列卫星高分五号(GF-5 卫星)成功发射,轨道高度为 708.45 km,大气痕量气体差分吸收光谱仪(Environment Monitoring Instrument, EMI)是我国第一个星载紫外-可见光谱仪,旨在测量全球范围内平流层、对流层大气痕量气体的空间分布状况^[30]。

作为同类型仪器,EMI 继承了 OMI、TROPOMI 等仪器的特性,空间分辨率略高于 OMI,次于 TROPOMI,三者的 LTAN(local solar time at the ascending node)相近,因此 OMI、TROPOMI 产品是评价 EMI 精度最理想的数据^[31]。EMI 拥有两个紫外波段 UV1(240~315 nm)、UV2(311~403 nm)和两个可见光波段 VIS1(401~550 nm)、VIS2(545~710 nm),光谱分辨率为 0.3~0.5 nm,空间分辨率为 13 km²×48 km²^[32]。国内学者已经证实了 EMI 在轨数据对对流层 NO₂ 柱浓度的探测能力^[31],但遗憾的是,高分五号卫星已于 2020 年失联。

EMI-II 搭载在高分 5(02)星上,于 2021 年 9 月 7 日在太原卫星发射中心发射成功并顺利运行。作为 EMI 的升级版,在保留原有部分设置的同时,EMI-II 主要的改进是望远镜的反射镜,使用离轴高次非球面系统来代替离轴球面镜系统,从而实现更高的空间分辨率,空间分辨率可达到 13 km²×24 km²。除此之外,EMI-II 的双向散射分布函数(Bidirectional Scattering Distribution Function, BSDF)发射前已在地面确定,是重要的辐射定标参数^[33]。目前,高分 5(02)星还在试运行阶段。

3 对流层 NO₂ 柱浓度反演算法

对流层 NO₂ 柱浓度反演算法主要包括 3 个部分: NO₂ 整层斜柱浓度、对流层 NO₂ 斜柱浓度和对

流层NO₂垂直柱浓度的计算。

3.1 NO₂整层斜柱浓度算法

目前基于反射光谱的NO₂柱浓度反演算法主要有经典DOAS算法和改进DOAS算法。

3.1.1 经典DOAS算法

差分光谱吸收法(DOAS)由Perner和Platt^[34]提出,是目前测量大气痕量气体最常用的光谱学方法之一。他们利用该算法,反演出了痕量气体NO₂、O₃和HCHO的含量,从而证明了该算法的可行性。

Beer-Lambert定律是DOAS算法的基础,根据Beer-Lambert定律,一束波长为 λ ,强度为 I_i 的辐射光在穿过厚度为 ds 介质后变为 $I_i + dI_i$,辐射光因与介质相互作用而削弱,满足公式(1):

$$dI_i = -\sigma(\lambda, T) \rho I_i ds \quad (1)$$

其中: ρ 为物质密度, $\sigma(\lambda, T)$ 为对辐射波长 λ 的消光截面。假设介质消光截面均一不变,对公式(1)在传播路径上进行积分,即可得到Beer-Lambert定律:

$$I_i(s) = I_i e^{-\sigma(\lambda, T) \int_0^s \rho ds} \quad (2)$$

则光学厚度 可以表示为:

$$\tau = -\ln \frac{I_i(s)}{I_i(0)} = \sigma(\lambda, T) \int_0^s \rho ds \quad (3)$$

其中: $\int_0^s \rho ds$ 为大气成分在特定光路上的浓度,也就是气体的斜柱浓度,通常用SCD表示。在紫外-可见光波段,忽略辐射传播中的散射和发射增强作用,则公式(3)可表示为:

$$\begin{aligned} \tau &= -\ln \frac{I_i(s)}{I_i(0)} \\ &= \sum_i \sigma_i(\lambda, T) \text{SCD}_i(\lambda) + \sigma_{\text{ray}}(\lambda, T) \text{SCD}_i(\lambda) + \\ &\quad \sigma_{\text{mie}}(\lambda) \text{SCD}_{\text{mie}}(\lambda) \end{aligned} \quad (4)$$

其中: σ 为各大气成分的吸收截面,SCD为其各种成分的斜柱浓度。

DOAS算法最核心的原理为:通过多项式拟合,将光谱中随波长变化慢的部分去除掉,只剩下随波长变化快的部分,这部分被称为差分吸收光谱,对这一部分使用Beer-Lambert定律,从而计算出目标气体的斜柱浓度。而由于气溶胶、其它气体吸收等造成的光谱变化在结构上呈现一个光滑、平缓的特征,也可以很好地去除掉,原理如图1所示。

图1中(a)表示强度为 I 的光谱分离过程,(b)表示吸收截面 σ 的分离过程, I_0 和 σ 被分为窄带部分(D' 和 σ')和宽带部分(I'_0 和 σ_b),可用公式(5)加以

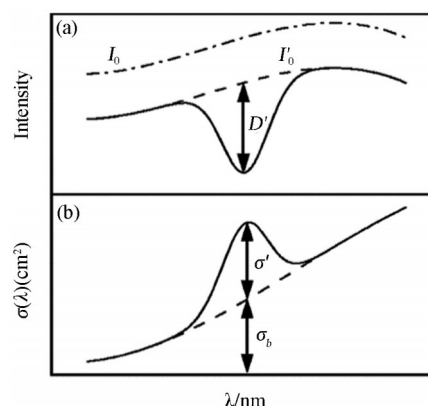


图1 DOAS算法原理示意图(a、b分别表示光谱和吸收截面分离过程)^[6]

Fig.1 Principle of DOAS

详细描述:

$$\sigma(\lambda) = \sigma_{j0}(\lambda) + \sigma'_j(\lambda) \quad (5)$$

其中: $\sigma_{j0}(\lambda)$ 表示随波长变化缓慢的部分,主要由瑞利散射、米氏散射等引起; $\sigma'_j(\lambda)$ 表示随波长变化剧烈的部分,主要由目标气体吸收所引起。将公式(5)代入公式(4)中可得到差分吸收光谱公式(6),对该公式进行最小二乘法拟合,便可以得到NO₂斜柱浓度。

$$\tau = \sum_i \sigma_i(\lambda, T) \text{SCD}_i(\lambda) + F(\lambda) \quad (6)$$

其中: $F(\lambda)$ 是低阶多项式,也就是光谱中随波长变化慢的部分。

由于卫星观测到的太阳光十分复杂,包含:经地表反射的透射光、多次反射和散射的天空光等,传统DOAS算法已不适用,需要建立基于卫星反射光谱的DOAS算法。但仍可用公式(6)来进行光谱分离和拟合,处理后的差分光谱包含由入射太阳光、地表反射光和多次散射所产生的气体吸收结构^[35]。实际应用中,为了能够确定各种痕量气体的浓度,通常在多个波长处进行测量。这一方法的使用,不仅能够解决仪器光学特性随时间变化而造成的误差问题,而且能够有效地提高DOAS算法的灵敏度。除此之外,DOAS光谱拟合过程中,不确定性会受到许多因素的影响,例如:仪器系统噪声、夫琅禾费线、依赖温度的吸收截面、原因不明的光谱结构、辐射传输路径的长度和吸收截面精度等。其中, Ring效应主要是由Raman散射引起的,夫琅禾费线在观测光谱中占主要部分,对Ring效应进行处理可以有效地去除夫琅禾费结构的影响,从而提高NO₂的反演精度^[36]。

3.1.2 改进 DOAS 算法

BOAS (the basic optical differential spectroscopy) 是一种改进的 DOAS 算法, 该算法由 3 个研究机构 (IFE/IUP Bremen、Dalhousie/SAO 和 BIRA/IASB) 联合开发^[37]。在不进行高通滤波平滑处理的前提下, BOAS 算法在反演窗口内直接拟合后向散射光谱确定 NO₂ 斜柱浓度^[38-39]。在经典的 DOAS 基础上, 该算法主要在光谱拟合部分进行了改进, 如公式 (7) 所示:

$$I(\lambda) = \left[(aI_0 + \sum_i \alpha_i X_i) e^{-\sum_j \alpha_j X_j} + \sum_k \alpha_k X_k \right] \sum_n \alpha_n X_n + \sum_m \alpha_m X_m \quad (7)$$

其中: I_0 是太阳辐照度; a 是 I_0 的因子; $\alpha_i X_i$ 为痕量气体的贡献项, 包括 Ring 效应和欠采样校正, $\alpha_j X_j$ 为痕量气体的贡献项, 也就是要求的斜柱浓度, $\alpha_k X_k$ 代表共模校正, $\alpha_n X_n$ 和 $\alpha_m X_m$ 表示缩放和平移多项式。

相较于 DOAS 算法, BOAS 算法使用太平洋地区经度在 165°W 附近, 纬度在 30°S~30°N 的大气层顶辐亮度数据替代太阳辐照度数据, 大大提高了反演的精度。目前, BOAS 方法已被应用到 NO₂、HCHO 等成分的柱总量反演中^[40]。

3.2 对流层 NO₂ 斜柱浓度算法

对流层 NO₂ 斜柱浓度通过将平流层 NO₂ 斜柱浓度从大气整层斜柱浓度中减去获得, 可用公式 (8) 表示:

$$N_s^{trop} = N_s - N_s^{strat} \quad (8)$$

其中: N_s^{trop} 指对流层内 NO₂ 斜柱浓度, N_s 指大气整层斜柱浓度, N_s^{strat} 为平流层 NO₂ 斜柱浓度, 可通过参考扇区法、天底-临边观测法、大气化学模式等方法获得^[11, 25, 35-37]。

参考扇区法十分依赖于平流层柱在垂直方向上的均匀性^[41]。在污染源很小的情况下, 对流层中 NO₂ 柱浓度的贡献很小, 可获得较为准确的平流层 NO₂ 浓度^[11]。该方法简单易操作, 但存在系统性偏差: (1) 参考区域对流层背景值较低但不为 0, 会导致计算出的对流层柱浓度偏低; (2) 在低纬度、靠近涡旋等地区, 垂直方向均匀性的假设不成立^[42]。天底-临边观测法 (Limb-Nadir Matching, LNM) 利用天底观测获得总柱浓度和临边观测获得平流层浓度对平流层进行校正, 但该方法对仪器要求较高, 具有一定限制性^[43]。此外, 可使用大气化学模式模拟平流层 NO₂ 柱浓度, 如: TM5-MP CTM^[44]、3d-

CTM SLIMCAT^[10] 等。该方法在缺乏平流层 NO₂ 信息的情况下具有很大优势, 并且能够清楚地解释平流层内的动力学过程^[25]。

3.3 对流层 NO₂ 垂直柱浓度算法

大气质量因子 (Air Mass Factor, AMF) 可将对流层斜柱浓度转化为垂直柱浓度, 可通过公式 (9) 来表示:

$$AMF = \frac{SCD}{VCD} \quad (9)$$

其中: SCD 为光谱反演所获得的气体斜柱浓度; VCD 为垂直柱浓度。目前计算 AMF 的方法有两种: 基于观测几何的经验公式和辐射传输模型^[45]。

在不考虑大气散射等一系列大气作用的条件下, 可以基于几何关系来进行估算:

$$AMF \approx AMF_G = \cos^{-1} \theta_s + \cos^{-1} \theta_v \quad (10)$$

其中: AMF_G 表示基于几何关系的大气质量因子, θ_s 表示太阳天顶角, θ_v 表示卫星天顶角, 该方法适用于对精度要求不高的研究当中。此外, 可使用辐射传输模型计算 AMF, 例如: SCIATRAN、DAK (KNMI Doubling-Adding)、LIDORT (Linearized Discrete Ordinate Radiative Transfer) 等。该方法不仅考虑了光学几何、地表反射率、云和气溶胶等因素, 还考虑了痕量气体空间上的垂直分布情况^[45]。

4 主要星载仪器对流层 NO₂ 柱浓度产品反演及精度介绍

卫星遥感探测对流层 NO₂ 柱浓度反演很大程度上依赖于模型和模型参数的选择^[37]。目前可供使用的 NO₂ 产品较多, 各机构分别根据传感器的特点, 生产出精度较高、可供用户使用的 NO₂ 产品。国际上主流的紫外星载探测仪的对流层 NO₂ 柱浓度产品均采用 DOAS 算法进行光谱拟合获得 NO₂ 斜柱浓度, 部分传感器的对流层 NO₂ 柱浓度产品 DOAS 反演参数设置如表 2 所示。

4.1 GOME 对流层 NO₂ 产品

GOME 的 NO₂ 产品 (TM4NO2A) 由 KNMI 和 BIRA/IASB 合作提供, 目前已更新至第 2.3v, 可提供产品的时间序列为 1996 年 4 月 1 日~2003 年 6 月 30 日。该产品采用 426.3~451.3 nm 波段范围进行反演, 考虑了 O₃、O₂~O₂ 和 H₂O 等干扰气体, 然后使用 TM4 化学传输模型模拟获得平流层斜柱浓度, 最后使用 DAK 辐射传输模型计算 AMF。经验证, 在 NO₂ 污染较严重地区, GOME NO₂ 产品值普遍偏高; NO₂ 浓度较低的区域, GOME NO₂ 普遍低于地

基观测的值,不确定性达35%~60%^[37,46]。为解决各平台传感器使用寿命有限、跨平台数据处理困难等问题,降低由过境时间、不同仪器、信噪比等带来的差异,更好地保证数据的质量和完整性。QA4ECV (Assurance for Essential Climate Variables)项目对不同传感器进行统一反演,旨在生产一个完整、可追溯的NO₂柱浓度数据集。QA4ECV NO₂产品目前已更新至1.1版本,计划使用GOME、SCIAMACHY、OMI、GOME-2等仪器一级数据作为输入,仍选择DOAS算法进行光谱拟合。GOME QA4ECV NO₂ v1.1产品采用425~450 nm进行反演,选择TM5-MP数据同化模型来估计平流层NO₂,使用DAK3.0计算AMF,可提供1995~2003年范围内的对流层NO₂柱浓度数据^[28,47]。

4.2 SCIAMACHY 对流层NO₂产品

SCIAMACHY目前提供的对流层NO₂垂直柱浓度产品有五种,分别由IFE/IUP Bremen、KNMI/BIRA、Dalhousie/SAO、MPI Mainz/IUP Heidelberg和QA4ECV这五个研究机构提供。IFE/IUP Bremen提供的NO₂产品最新版本为3.0版。在425~450 nm处进行光谱拟合,考虑O₄、H₂O等干扰气体,3.0之前的数据产品使用参考区域法去除平流层的影响,最后使用SCIATRAN模型计算AMF完成对流层NO₂垂直柱浓度的计算^[48]。3.0版本与早期相比,平流层NO₂模拟选择使用SCIAMACHY临边

探测所获得的NO₂廓线,这一步大大提升了对流层NO₂斜柱浓度的精度^[49]。KNMI/BIRA提供的TM4NO2A产品目前已更新至2.3版本,通过在426.3~451.3 nm波段范围内使用DOAS算法模拟获得NO₂斜柱浓度,考虑了O₃、H₂O_{vap}、O₂-O₂、H₂O_{liq}等干扰气体。之后通过全球化学传输模型TM4计算并去除平流层斜柱浓度。经MAX-DOAS数据验证,在污染相对均匀的地区,TM4NO2A产品误差为-19%~9%^[50]。Dalhousie/SAO的NO₂产品使用SAO算法在429~452 nm直接拟合光谱确定NO₂整层斜柱浓度,通过假设太平洋地区的NO₂主要集中在平流层来获得平流层NO₂柱浓度并将其剔除,计算AMF得到对流层NO₂垂直柱浓度,该产品与地面站点监测结果呈高度线性相关关系,误差小于10%^[51]。MPI Mainz/IUP Heidelberg的NO₂反演算法在425~450 nm范围内进行光谱拟合,基于MOZART NO₂廓线计算的AMF得到对流层垂直柱浓度,该对流层NO₂产品比MAX-DOAS测量值高2~3倍^[52]。SCIAMACHY QA4ECV NO₂ v1.1算法参数设置与GOME相似,可提供2002~2012年内的数据^[28]。

4.3 OMI 对流层NO₂产品

目前可提供的OMI NO₂产品为:NASA标准产品OMNO2^[53]、KNMI/BIRA提供的DOMINO (Dutch OMI NO₂)^[27]和OMI QA4ECV NO₂,均使用

表2 对流层NO₂浓度产品DOAS反演参数设置

Table 2 Main settings of the DOAS retrieval of tropospheric NO₂ vertical column data products

仪器	产品版本	波段范围/nm	干扰痕量气体	伪吸收体	拟合方式	多项式次数	对流层NO ₂ 产品误差估计
GOME	TM4NO2A v2.3	426.3~451.3	O ₃ 、H ₂ O _{vap} 、O ₂ -O ₂ 、H ₂ O _{liq}	Ring	线性	3	35%~60%
	QA4ECV NO2 v1.1	425~465	O ₃ 、H ₂ O _{vap} 、O ₂ -O ₂ 、H ₂ O _{liq}	Ring	线性	4	/
SCIAMACHY	IFE/IUP Bremen 3.0	425~450	O ₄ 、H ₂ O _{vap}	Ring	线性	4	28%
	TM4NO2A v2.3	426.5~451.3	O ₃ 、H ₂ O _{vap} 、O ₂ -O ₂ 、H ₂ O _{liq}	Ring	线性	2	-19%~9%
	MPI Mainz/IUP Heidelberg	425~450	O ₃ 、O ₂ -O ₂ 、H ₂ O _{vap}	Ring	线性	3	/
	QA4ECV NO2 v1.1	425~465	O ₃ 、H ₂ O _{vap} 、O ₂ -O ₂ 、H ₂ O _{liq}	Ring	线性	4	/
OMI	OMINO ₂ v4.0	402~465	O ₃ 、CHOCHO、H ₂ O _{vap} 、O ₂ -O ₂ 、H ₂ O _{liq}	Ring	非线性	2	20%~30%
	DOMINO v3.0	405~465	O ₃ 、H ₂ O _{vap} 、O ₂ -O ₂ 、H ₂ O _{liq}	Ring	非线性	5	-24%~4%
	QA4ECV NO2 v1.1	405~465	O ₃ 、H ₂ O _{vap} 、O ₂ -O ₂ 、H ₂ O _{liq}	Ring	线性	4	-1~-4 Pmolec.cm ⁻²
GOME-2	IFE/IUP Bremen 4.2	425~497	O ₃ 、H ₂ O _{vap} 、O ₂ -O ₂ 、H ₂ O _{liq}	Ring	线性	3	<2×10 ¹⁴ molec.cm ⁻²
	TM4NO2A v2.3	425~450	O ₃ 、H ₂ O _{vap} 、O ₂ -O ₂	Ring	线性	3	-13%~15%
	O3MSAF lv2	425~450	O ₃ 、H ₂ O _{vap} 、O ₂ -O ₂	Ring	线性	3	30%
	QA4ECV NO2 v1.1	405~465	O ₃ 、H ₂ O _{vap} 、O ₂ -O ₂ 、H ₂ O _{liq}	Ring	线性	4	35%~45%
TROPOMI	/	405~465	O ₃ 、H ₂ O _{vap} 、O ₂ -O ₂ 、H ₂ O _{liq}	Ring	非线性	5	19%~33%
EMI	/	420~470	O ₃ 、H ₂ O _{vap} 、O ₂ -O ₂ 、H ₂ O _{liq}	Ring	非线性	5	-30%

DOAS算法进行光谱拟合获得NO₂斜柱浓度。这些产品虽出自同一传感器,但在复杂地形和低污染地区差异很大。OMNO₂产品可提供平流层、对流层和大气整层NO₂垂直柱浓度。由于该算法平流层NO₂季节性变化的假设,使得该产品存在明显的季节模式,夏季值偏高,冬季值偏低^[54]。目前最新的版本为OMNO₂ v4.0,相比之前的版本改进了AMF和VCD等方面的计算。并且使用了一种改进DOAS算法,该算法优化了OMI的可见光光谱通道,在402~465 nm范围内对NO₂进行光谱拟合,大大减少了NO₂斜柱浓度高估的问题(降低了10%~35%),使结果更加接近独立观测所获得的NO₂斜柱浓度^[55]。平流层-对流层分离算法使用模拟的大气廓线,由模型驱动获得对流层NO₂斜柱浓度。该版本数据质量估计NO₂斜柱的拟合误差为0.3~1×10⁻¹⁵ molec/cm²^[56]。DOMINO是一种后处理数据集,可提供对流层、平流层和大气整层NO₂柱浓度等一系列数据。DOMINO目前已更新至第三版(v3.0),该版本产品通过对405~465 nm内光谱进行拟合,使用TM4化学传输模型获得平流层分量,并且在算法上提高了AMF的计算精度,将AMF系数精度提高了20%~30%,使得产品能够更好地描述大气底层的辐射传输过程,反演出的对流层NO₂柱浓度较之前版本减少了10%~20%^[27]。经验证,在污染条件均匀的地区,DOMINO产品的误差为-24%~4%^[50]。OMI QA4ECV NO₂ v1.1选用405~465 nm进行光谱拟合,可提供2004年至今的数据,相对于MAX-DOAS数据存在负偏差(-1~-4 Pmolec/cm²),在污染严重地区对流层NO₂垂直柱浓度不确定性为35%~45%^[28,57-58]。

4.4 GOME-2对流层NO₂产品

GOME-2 NO₂产品由IFE/IUP Bremen、KNMI/BIRA和O3MSAF三个研究机构提供。IFE/IUP Bremen提供的对流层NO₂柱浓度产品更新至第4.2版,该版本在425~497 nm波段拟合光谱,使用Bremen 3D CTM进行平流层校正,通过SCI-ATRAN计算对流层AMF进而完成对流层NO₂垂直柱浓度的计算,该产品与SCIAMACHY产品相关性可达0.91,二者差异小于2×10¹⁴ molec/cm²^[59-60]。KNMI/BIRA提供的TM4NO2A产品目前更新至2.3版本,该产品对425~450 nm处的光谱进行拟合。经验证,TM4NO2A产品的数据偏差为-13%~15%^[50]。O3MSAF lv2产品拟合425~450 nm内光

谱得到NO₂柱总量,通过估计平流层浓度将其剔除,并基于MOZART-2化学模式计算AMF得到对流层NO₂垂直柱浓度,该产品与地面MAX-DOAS数据相关性可达0.92^[61-62]。GOME-2 QA4ECV NO₂ v1.1同样选择405~465 nm范围内的光谱进行拟合,可提供2007年至今的数据。该产品精度较高,在污染严重地区对流层NO₂垂直柱浓度不确定性为35%~45%,为量化研究全球范围内氮氧化物排放、沉积和变化趋势提供可信数据^[28,58]。

4.5 TROPOM对流层NO₂产品

TROPOMI提供了丰富的NO₂产品,包括平流层NO₂斜柱浓度、对流层NO₂斜柱浓度、NO₂垂直柱浓度和大气整层NO₂柱浓度等,该产品更新至2.2.0版本,并于2021年7月1日开始运行^[63]。TROPOMI的光谱拟合方式与DOMINO算法参数设置相似,选择405~465 nm波段进行光谱拟合,不同的是,选择TM5-MP CTM数据同化方式获得平流层NO₂斜柱浓度。该方法能够很好地解释平流层中的化学和动力学,有利于在对流层NO₂贡献很小的偏远地区的反演,使得所生产的NO₂系列产品精度得以提高^[44]。然而经验证,该产品普遍存在低估的情况:在污染较轻的地区,负偏差为23%~37%;在污染严重地区,负偏差可达51%^[64]。

4.6 EMI对流层NO₂产品

目前,虽然国内没有公开发布EMI对流层NO₂官方产品,但已有些相关算法研究。根据研究报告,EMI的对流层NO₂柱浓度反演过程中为避免VIS1(401~550 nm)通道边缘处的低信噪比区域,一般选择在420~470 nm范围内拟合光谱,使用参考扇区法计算获得平流层NO₂并将其从整层NO₂柱总量中剔除,通过VLIDORT v2.7计算AMF得到对流层NO₂垂直柱浓度。与MAX-DOAS数据相比,EMI低估了对流层NO₂垂直柱浓度,偏差约为30%^[30,36,65]。

5 结论与讨论

NO₂对环境污染、气候变化、人类健康等方面有着重要作用,因此利用遥感卫星数据反演获取对流层NO₂浓度是很有必要的。目前主要采用紫外、可见光波段通过天底观测模式对其进行探测。本文分别对国内外可用于探测NO₂的传感器(GOME、SCIAMACHY、OMI、GOME-2、TROPOMI、EMI、EMI-II等)在仪器参数、目标、应用等方面进行介

绍。GOME、SCIAMACHY 可提供数据的精度有限,OMI虽分辨率中等,但已有足够的数据存储,可支持长时间范围内的研究,TROPOMI可提供迄今为止最高空间分辨率的数据,但数据时间序列不长。EMI、EMI-II作为国内发射的传感器,精度有待提高。国际上反演对流层NO₂柱浓度主要分为NO₂整层斜柱浓度、对流层NO₂斜柱浓度和对流层NO₂垂直柱浓度的计算。本文对整个反演流程进行介绍,DOAS及其衍生算法被广泛应用于NO₂柱总量拟合中,精度较高,但易受到吸收截面、光谱结构等方面因素的影响。此外,AMF的精度在很大程度上影响着反演结果的准确程度,需加以重视。之后本文对现有星载仪器对流层NO₂垂直柱浓度产品的反演算法进行简要介绍,并列举出所用DOAS反演算法的参数设置,对各产品精度进行评价、比较,各产品在各地均存在不同程度的高估、低估现象,且与该区域NO₂的污染程度有关。因此在选择数据时要根据具体的研究区、研究期来进行挑选。TROPOMI产品是目前空间分辨率最高的NO₂产品,能够更为细致地刻画NO₂污染状况。

仪器整体上向着高时间、高空间、高光谱分辨率的趋势发展。此外,受云、气溶胶等影响,秋冬季节NO₂遥感影像质量大幅降低,尤其是中国南方地形复杂、云层覆盖严重的区域,影像缺失严重。进一步提高大气遥感探测能力与改进NO₂的反演算法,仍是今后大气遥感的研究重点。无论是卫星的发射、传感器的改进,或是算法的精进,都是为了能够获取可用于研究的时空分辨率较高的产品,产品的应用方面是最终的落脚点,如何获得较高精度的NO₂浓度,如何通过遥感产品分析污染物的时空变化,对污染严重的地区进行一定程度上的管控,进而改善人类的生存环境是今后应当重点关注的问题。

参考文献(References):

- [1] ZHANG Xingying, ZHOU Minqiang, WANG Weihe, *et al.* Progress of global satellite remote sensing of atmospheric compositions and its applications[J]. Science & Technology Review, 2015, 33(17): 13-22.[张兴赢, 周敏强, 王维和, 等. 全球卫星大气成分遥感探测应用进展及其展望[J]. 科技导报, 2015, 33(17): 13-22.]
- [2] SILLMAN S, LOGAN J A, WOFSY S C. The Sensitivity of ozone to nitrogen-oxides and hydrocarbons in regional ozone episodes[J]. Journal of Geophysical Research-Atmospheres, 1990, 95(D2): 1837-1851. DOI: 10.1029/JD095iD02p01837
- [3] WAYNE R P. Chemistry of Atmospheres, 2nd edition[M]. United States: N. p., 1993. Web.
- [4] SOLOMON S, PORTMANN R W, SANDERS R W, *et al.* On the role of nitrogen dioxide in the absorption of solar radiation[J]. Journal of Geophysical Research-Atmospheres, 1999, 104(D10): 12047-12058. DOI: 10.1029/1999JD900035
- [5] KANG Y, CHOI H, IM J, *et al.* Estimation of surface-level NO₂ and O₃ concentrations using TROPOMI data and machine learning over East Asia[J]. Environmental Pollution, 2021, 288: 117711. DOI: 10.1016/j.envpol.2021.117711
- [6] PLATT U, STUTZ J. Differential Optical Absorption Spectroscopy (DOAS)—Principles and Applications[M]. Berlin, German: Springer. 2008.
- [7] VOLZ A, KLEY D. Evaluation of the Montsouris series of ozone measurements made in the nineteenth century[J]. Nature, 1988, 332(6161): 240-242. DOI: 10.1038/332240a0
- [8] ZHANG Xingying, ZHANG Peng, ZHANG Yan, *et al.* The trend, seasonal cycle, and sources of tropospheric NO₂ over China during 1997~2006 based on satellite measurement[J]. Science in China Series D, 2007, 37(10): 1409-1416.[张兴赢, 张鹏, 张艳, 等. 近10a中国对流层NO₂的变化趋势、时空分布特征及其来源解析[J]. 中国科学(D辑: 地球科学), 2007, 37(10): 1409-1416.]
- [9] ZHANG D Y, ZHOU Y Y, ZHENG L, *et al.* The spatial distribution characteristics and ground-level estimation of NO₂ and SO₂ over Huaihe River Basin and Shanghai based on satellite observations[C]// Remote Sensing and Modeling of Ecosystems for Sustainability XV. International Society for Optics and Photonics, p.107670L. DOI: 10.1117/12.2318933
- [10] RICHTER A, BURROWS J P, NUSS H, *et al.* Increase in tropospheric nitrogen dioxide over China observed from space[J]. Nature, 2005, 437(7055): 129-132. DOI: 10.1038/nature04092
- [11] VAN GEFFEN J, BOERSMA K F, VAN ROOZENDAEL M, *et al.* Improved spectral fitting of nitrogen dioxide from OMI in the 405-465 nm window[J]. Atmospheric Measurement Techniques, 2015, 8(4): 1685-1699. DOI: 10.5194/amt-8-1685-2015
- [12] GUYENNE T D, READINGS C. GOME: Global Ozone Monitoring Experiment. Interim Science Report[R]. 1993.
- [13] CHEN Liangfu, HAN Dong, TAO Jinhua, *et al.* Overview of tropospheric NO₂ vertical column density retrieval from space measurement[J]. Journal of Remote Sensing, 2009, 13(3): 343-354.[陈良富, 韩冬, 陶金花, 等. 对流层NO₂柱浓度卫星遥感反演综述(英文)[J]. 遥感学报, 2009, 13(3): 343-354.]
- [14] BURROWS J P, WEBER M, BUCHWITZ M, *et al.* The Global Ozone Monitoring Experiment(GOME): Mission concept and first scientific results[J]. Journal of the Atmospheric Sciences, 1999, 56(2): 151-175. DOI: 10.1175/1520-0469(1999)056<0151:TGOMEG>2.0.CO;2
- [15] BOVENSMANN H, BURROWS J P, BUCHWITZ M, *et al.*

- al.* SCIAMACHY: Mission objectives and measurement modes [J]. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 1999, 56 (2): 127-150. DOI: 10.1175/1520-0469(1999)056<0127: SMOAMM>2.0.CO;2
- [16] LAMSAL L N, MARTIN R V, PADMANABHAN A, *et al.* Application of satellite observations for timely updates to global anthropogenic NO_x emission inventories[J]. *Geophysical Research Letters*, 2011, 38. DOI: 10.1029/2010GL046476
- [17] LEVELT P F, VAN DEN OORD G H J, DOBBER M R, *et al.* The ozone monitoring instrument [J]. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 2006, 44 (5): 1093-1101. DOI: 10.1109/TGRS.2006.872333
- [18] BOERSMA K F, ESKES H J, VEEFKIND J P, *et al.* Near-real time retrieval of tropospheric NO₂ from OMI [J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2007, 7 (8): 2103-2118. DOI: 10.5194/acp-7-2103-2007
- [19] LAMSAL L N, KROTKOV N A, VASILKOV A, *et al.* Ozone Monitoring Instrument (OMI) Aura nitrogen dioxide standard product version 4.0 with improved surface and cloud treatments[J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2021, 14(1): 455-479. DOI: 10.5194/amt-14-455-2021
- [20] LEVELT P F, HILSEN RATH E, LEPPELMEIER G W, *et al.* Science objectives of the ozone monitoring instrument [J]. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 2006, 44(5): 1199-1208. DOI: 10.1109/TGRS.2006.872336
- [21] ACARRETA J R, DE HAAN J F, STAMMES P. Cloud pressure retrieval using the O-2-O-2 absorption band at 477 nm [J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2004, 109(D5). DOI: 10.1029/2003JD003915
- [22] BURROWS J P, RICHTER A, DEHN A, *et al.* Atmospheric remote-sensing reference data from GOME - 2. Temperature-dependent absorption cross sections of O-3 in the 231-794 nm range [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 1999, 61 (4): 509-517. DOI: 10.1016/S0022-4073(98)00037-5
- [23] MUNRO R, LANG R, KLAES D, *et al.* The GOME-2 instrument on the Metop series of satellites: Instrument design, calibration, and level 1 data processing - An overview [J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2016, 9 (3): 1279-1301. DOI: 10.5194/amt-9-1279-2016
- [24] CALLIES J, CORPACCIOLI E, EISINGER M, *et al.* GOME-2 - Metop's second-generation sensor for operational ozone monitoring [J]. *Esa Bulletin-European Space Agency*, 2000(102): 28-36.
- [25] BABIC L, BRAAK R, DIERSEN W, *et al.* Algorithm theoretical basis document for the TROPOMI L01b data processor [Z]. CI-6480-ATBD. July 2019.
- [26] GRIFFIN D, ZHAO X Y, MCLINDEN C A, *et al.* High-resolution mapping of nitrogen dioxide with TROPOMI: First results and validation over the Canadian oil sands [J]. *Geophysical Research Letters*, 2019, 46 (2): 1049-1060. DOI: 10.1029/2018GL081095
- [27] BOERSMA K F, ESKES H J, DIRKSEN R J, *et al.* An improved tropospheric NO₂ column retrieval algorithm for the ozone monitoring instrument [J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2011, 4(9): 1905-1928. DOI: 10.5194/amt-4-1905-2011
- [28] BOERSMA K F, ESKES H J, RICHTER A, *et al.* Improving algorithms and uncertainty estimates for satellite NO₂ retrievals: results from the quality assurance for the essential climate variables (QA4ECV) project [J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2018, 11(12): 6651-6678. DOI: 10.5194/amt-11-6651-2018
- [29] HERMAN J, CEDE A, SPINEI E, *et al.* NO₂ column amounts from ground-based Pandora and MFDOAS spectrometers using the direct-sun DOAS technique: Intercomparisons and application to OMI validation [J]. *Journal of Geophysical Research-Atmospheres*, 2009, 114 (D13). DOI: 10.1029/2009JD011848
- [30] ZHANG C X, LIU C, WANG Y, *et al.* Preflight evaluation of the performance of the Chinese Environmental Trace Gas Monitoring Instrument (EMI) by spectral analyses of Nitrogen Dioxide [J]. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 2018, 56 (6): 3323-3332. DOI: 10.1109/TGRS.2018.2798038
- [31] CHENG L X, TAO J H, VALKS P, *et al.* NO₂ retrieval from the Environmental Trace Gases Monitoring Instrument (EMI): Preliminary results and intercomparison with OMI and TROPOMI [J]. *Remote Sensing*, 2019, 11(24). DOI: 10.3390/rs11243017
- [32] ZHAO M J, SI F Q, ZHOU H J, *et al.* Preflight calibration of the Chinese Environmental Trace Gases Monitoring Instrument (EMI) [J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2018, 11(9): 5403-5419. DOI: 10.5194/amt-11-5403-2018
- [33] ZHAO M J, SI F Q, ZHOU H J, *et al.* Pre-Launch radiometric characterization of EMI-2 on the GaoFen-5 series of satellites [J]. *Remote Sensing*, 2021, 13(14). DOI: 10.3390/rs13142843
- [34] PLATT U, PERNER D, PATZ H W. Simultaneous measurement of atmospheric CH₂O, O₃, and NO₂ by differential optical-absorption [J]. *Journal of Geophysical Research-Oceans*, 1979, 84 (NC10): 6329-6335. DOI: 10.1029/JC084iC10p06329
- [35] QI Jin. Retrieval of nitrogen dioxide total column over China from SCIAMACHY/ENVISAT data [D]. Beijing: Chinese Academy Of Meteorological Sciences, 2007. [齐瑾. 利用 SCIAMACHY/ENVISAT 资料开展中国区域 NO₂ 反演研究 [D]. 北京: 中国气象科学研究院, 2007.]
- [36] YANG Dongshang. Research and application of NO₂ retrieval algorithm for environmental trace gases monitoring instrument [D]. Beijing: University of Science and Technology of China, 2021. [杨东上. 星载大气痕量气体差分吸收光谱仪 NO₂ 反演算法研究及应用 [D]. 北京: 中国科学技术大学, 2021.]

- [37] VAN NOIJE T P C, ESKES H J, DENTENER F J, *et al.* Multi-model ensemble simulations of tropospheric NO₂ compared with GOME retrievals for the year 2000[J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2006, 6: 2943–2979. DOI: 10.5194/acp-6-2943-2006
- [38] CHANCE K. Analysis of BrO measurements from the global ozone monitoring experiment[J]. *Geophysical Research Letters*, 1998, 25(17): 3335–3338. DOI: 10.1029/98GL52359
- [39] MARTIN R V, JACOB D J, CHANCE K, *et al.* Global inventory of nitrogen oxide emissions constrained by space-based observations of NO₂ columns[J]. *Journal of Geophysical Research-Atmospheres*, 2003, 108(D17). DOI: 10.1029/2003JD003453
- [40] ABAD G G, LIU X, CHANCE K, *et al.* Updated Smithsonian Astrophysical Observatory Ozone Monitoring Instrument (SAO OMI) formaldehyde retrieval[J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2015, 8(1): 19–32. DOI: 10.5194/amt-8-19-2015
- [41] RICHTER A, EYRING V, BURROWS J P, *et al.* Satellite measurements of NO₂ from international shipping emissions[J]. *Geophysical Research Letters*, 2004, 31(23). DOI: 10.1029/2004GL020822
- [42] BIRLE S, HORMANN C, JOCKEL P, *et al.* The STRatospheric Estimation Algorithm from Mainz (STREAM): Estimating stratospheric NO₂ from nadir-viewing satellites by weighted convolution[J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2016, 9(7): 2753–2779. DOI: 10.5194/amt-9-2753-2016
- [43] SIORIS C E, KUROSU T P, MARTIN R V, *et al.* Stratospheric and tropospheric NO₂ observed by SCIAMACHY: first results[J]. *Advances in Space Research*, 2004, 34(4): 780–785. DOI: 10.1016/j.asr.2003.08.066
- [44] VAN GEFFEN J. H. G. M., ESKES H J, BOERSMA, *et al.* TROPOMI ATBD of the total and tropospheric NO₂ data products[R]. DLR document, 2021.
- [45] BUCSELA E J, CELARIER E A, WENIG M O, *et al.* Algorithm for NO₂ vertical column retrieval from the ozone monitoring instrument[J]. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 2006, 44(5): 1245–1258. DOI: 10.1109/TGRS.2005.863715
- [46] SCHAUB D, BOERSMA K F, KAISER J W, *et al.* Comparison of GOME tropospheric NO₂ columns with NO₂ profiles deduced from ground-based in situ measurements[J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2006, 6(11): 3211–3229. DOI: 10.5194/acp-6-3211-2006
- [47] MULLER J P, KHARBOUCHE S, NADINE GOBRON, *et al.* Recommendations (scientific) on best practices for retrievals for Land and Atmosphere ECVs.[Z]. April 2016.
- [48] RICHTER A. Algorithm Description SCIAMACHY NO₂ Tropospheric Columns[Z]. Changed Last: March 2006.
- [49] HILBOLL A, RICHTER A, ROZANOV A, *et al.* Improvements to the retrieval of tropospheric NO₂ from satellite – stratospheric correction using SCIAMACHY limb/nadir matching and comparison to Oslo CTM2 simulations[J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2013, 6(3): 565–584. DOI: 10.5194/amt-6-565-2013
- [50] IRIE H, BOERSMA K F, KANAYA Y, *et al.* Quantitative bias estimates for tropospheric NO₂ columns retrieved from SCIAMACHY, OMI, and GOME-2 using a common standard for East Asia[J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2012, 5(10): 2403–2411. DOI: 10.5194/amt-5-2403-2012
- [51] MARTIN R V, SIORIS C E, CHANCE K, *et al.* Evaluation of space-based constraints on global nitrogen oxide emissions with regional aircraft measurements over and downwind of eastern North America[J]. *Journal of Geophysical Research-Atmospheres*, 2006, 111(D15). DOI: 10.1029/2005JD006680
- [52] PETERS E, WITTROCK F, GROSSMANN K, *et al.* Formaldehyde and nitrogen dioxide over the remote western Pacific Ocean: SCIAMACHY and GOME-2 validation using ship-based MAX-DOAS observations[J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2012, 12(22): 11179–11197. DOI: 10.5194/acp-12-11179-2012
- [53] BUCSELA E J, KROTKOV N A, CELARIER E A, *et al.* A new stratospheric and tropospheric NO₂ retrieval algorithm for nadir-viewing satellite instruments: Applications to OMI[J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2013, 6(10): 2607–2626. DOI: 10.5194/amt-6-2607-2013
- [54] HERRON-THORPE F L, LAMB B K, MOUNT G H, *et al.* Evaluation of a regional air quality forecast model for tropospheric NO₂ columns using the OMI/Aura satellite tropospheric NO₂ product[J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2010, 10(18): 8839–8854. DOI: 10.5194/acp-10-8839-2010
- [55] MARCHENKO S, KROTKOV N A, LAMSAL L N, *et al.* Revising the slant column density retrieval of nitrogen dioxide observed by the Ozone Monitoring Instrument[J]. *Journal of Geophysical Research-Atmospheres*, 2015, 120(11): 5670–5692. DOI: 10.1002/2014JD022913
- [56] KROTKOV N A, LAMSAL D S V M L N, SWARTZ W H. OMNO₂ README Document Data Product Version 4.0[Z]. 2019.
- [57] COMPERNOLLE S, VERHOELST T, PINARDI G, *et al.* Validation of Aura-OMI QA4ECV NO₂ climate data records with ground-based DOAS networks: the role of measurement and comparison uncertainties[J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2020, 20(13): 8017–8045. DOI: 10.5194/acp-20-8017-2020
- [58] PINARDI G, VAN ROOZENDAEL M, HENDRICK F, *et al.* Validation of tropospheric NO₂ column measurements of GOME-2A and OMI using MAX-DOAS and direct sun network observations[J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2020, 13(11): 6141–6174. DOI: 10.5194/amt-13-6141-2020
- [59] RICHTER A, BEGOIN M, HILBOLL A, *et al.* An im-

- proved NO₂ retrieval for the GOME-2 satellite instrument[J]. Atmospheric Measurement Techniques, 2011, 4 (6) : 1147-1159. DOI:10.5194/amt-4-1147-2011
- [60] HILBOLL A, RICHTER A. Gridded vertical tropospheric NO₂ columns from GOME-2/MetOp-A[Z]. Dec 2014.
- [61] HASSINEN S, BALIS D, BAUER H, *et al.* Overview of the O3M SAF GOME-2 operational atmospheric composition and UV radiation data products and data availability[J]. Atmospheric Measurement Techniques, 2016, 9 (2) : 383-407. DOI:10.5194/amt-9-383-2016
- [62] VALKS P, PINARDI G, RICHTER A, *et al.* Operational total and tropospheric NO₂ column retrieval for GOME-2[J]. Atmospheric Measurement Techniques, 2011, 4 (7) : 1491-1514. DOI:10.5194/amt-4-1491-2011
- [63] VAN GEFFEN J, ESKES H, COMPERNOLLE S, *et al.* Sentinel-5P TROPOMI NO₂ retrieval: Impact of version v2.2 improvements and comparisons with OMI and ground-based data[J]. Atmospheric Measurement Techniques, 2022, 15(7): 2037-2060. DOI:10.5194/amt-15-2037-2022
- [64] VERHOELST T, COMPERNOLLE S, PINARDI G, *et al.* Ground-based validation of the Copernicus Sentinel-5P TROPOMI NO₂ measurements with the NDACC ZSL-DOAS, MAX-DOAS and Pandonia global networks[J]. Atmospheric Measurement Techniques, 2021, 14(1): 481-510. DOI:10.5194/amt-14-481-2021
- [65] ZHANG C X, LIU C, CHAN K L, *et al.* First observation of tropospheric nitrogen dioxide from the Environmental Trace Gases Monitoring Instrument onboard the GaoFen-5 satellite [J]. Light-Science & Applications, 2020, 9 (1). DOI: 10.1038/s41377-020-0306-z

Review of NO₂ Retrieval of Satellite-borne Hyperspectral Sensors and Accuracy Assessment of Tropospheric NO₂ Column Density Products

ZHANG Xinyuan^{1,2,3}, LI Xiaoying¹, CHENG Tianhai¹, LIU Shuanghui^{1,2,4},
GUO Yuhang^{1,2,3}

(1.Aerospace Information Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100094, China;

2.University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China;

3.College of Resources and Environment, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100094, China;

4.School of Electronic, Electrical and Communication Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100094, China)

Abstract: As one of the important trace gases in the atmosphere, nitrogen dioxide (NO₂) is an important weather vane to measure the state of air pollution and have been associated with human health. Compared with traditional ground-based observations, space-borne sensors can provide large-scale and long-term observational data, overcoming the limitations of the number and location of observation sites. This paper reviewed the development of the space-borne hyper-spectral sensors at home and abroad, the retrieval algorithms of tropospheric NO₂ vertical column density, and also discussed the accuracy of the tropospheric NO₂ products. With the development of technology, the resolution of the time, space and spectral are getting higher and the selection of the retrieval model and algorithm of the NO₂ column density product are getting more reasonable, so the NO₂ products are more accurate.

Key words: NO₂; Satellite-borne ultraviolet hyperspectral sensor; Column density; Retrieval algorithm