中国科学: 地球科学 2015 年 第 45 卷 第 3 期: 335 ~ 350
www.scichina.com earth.scichina.com
《中国科学》杂志社
SCIENCE CHINA PRESS

论 文

夏季青藏高原及其周边地区卫星 MLS 水汽、臭氧产品的探空检验分析

颜晓露[①②], 郑向东[①*], 周秀骥[①], Holger VÖMEL[③], 宋建洋[①], 李蔚[①], 马永红[④], 张勇[④]

① 中国气象科学研究院, 北京 100081;
② 中国科学院大学地球科学学院, 北京 100049;
③ Meteorological Observatory Lindenberg, Deutscher Wetterdienst, Lindenberg 15848, Germany;
④ 西藏自治区气象局, 拉萨 850000
* 联系人, E-mail: zhengxd@cams.cma.gov.cn

收稿日期: 2014-06-14; 接受日期: 2014-10-15; 网络版发表日期: 2015-02-11
国家自然科学基金项目(批准号: 40875014, 40830102)、公益性(气象)行业专项(编号: GYHY201106023)和中国气象科学研究院科技创新团队项目(编号: 2011Z003)资助

摘要 根据 Aura 卫星微波临边探测(MLS)2.2, 3.3 版水汽和臭氧廓线, 采用线性内插方法, 将夏季在青藏高原(西藏的那曲和拉萨)及其周边地区(云南腾冲)通过冷冻霜点仪(CFH)和电化学反应池型(ECC)探空仪分别测得的水汽和臭氧数据插值到与卫星产品规定的气压高度进行比较分析, 以检验 MLS 水汽和臭氧廓线产品. 结果表明: MLS 2.2 和 3.3 版水汽相对误差在 100 hPa 的对流层顶附近分别为(9.8±46.0)%(*n*=18), (23.0±45.8)%(*n*=17); 在小于并包含 82.5 hPa 在内的下平流层则分别为(–2.2±15.7)%(*n*=74), (0.3±14.9)%(*n*=75); 而在对流层 316~121 hPa 高度则分别为(21.5±90.6)%(*n*=104), (6.0±83.4)%(*n*=99). 相应 MLS 2.2, 3.3 版臭氧的误差分别为: (–3.5±54.4)%(*n*=27), (–8.7±41.6)%(*n*=38)(100 hPa); (–11.7±16.3)%(*n*=135), (15.6±24.2)%(*n*=305)(下平流层); (18.0±79.1)%(*n*=47), (34.2±76.6)%(*n*=160)(对流层上层). MLS 水汽和臭氧的误差垂直分布在对流层上层-平流层低层振荡和离散分布明显, 部分误差可能由于此高度层水汽和臭氧浓度梯度大和比较用线性插值探空数据引起. “臭氧低谷”期间, 拉萨地区 70 hPa 高度以下 MLS 卫星臭氧浓度误差明显增加; 腾冲、那曲与拉萨三地的 MLS 臭氧误差的垂直分布特征较一致. 卫星产品与探空测值的初步关系表明, MLS 廓线的灵敏度与水汽和臭氧在大气中垂直分布有密切联系, 3.3 版水汽产品的灵敏度在 82.5 hPa 以上高度略有提高, 臭氧产品灵敏度没有明显变化. 文中还讨论了导致 MLS 水汽和臭氧廓线产品误差的可能因素.

关键词
MLS 廓线产品
探空观测
水汽
臭氧
青藏高原

中文引用格式: 颜晓露, 郑向东, 周秀骥, 等. 2015. 夏季青藏高原及其周边地区卫星 MLS 水汽、臭氧产品的探空检验分析. 中国科学: 地球科学, 45: 335–350
英文引用格式: Yan X L, Zheng X D, Zhou X J, et al. 2015. Validation of Aura Microwave Limb Sounder water vapor and ozone profiles over the Tibetan Plateau and its adjacent region during boreal summer. Science China: Earth Sciences, 58: 589–603, doi: 10.1007/s11430-014-5014-1

在对流层上层以上的水汽浓度虽然远低于对流层下层, 但其通过大气辐射和化学过程的反馈对全球气候变化有重要影响(Solomon 等, 2010), 但在此高度的水汽很难用常规气象探空精确探测, 基于露点仪原理的冷冻霜点仪(Cryogenic Frost point Hygrometer, CFH)是目前探测的有效手段(Vömel 等, 2007a). 30 年来全球唯一的露点仪探空观测站点——美国 Boulder 的观测表明(Hurst 等, 2011): 在对流层上层和平流层低层水汽浓度总体呈现增加趋势, 这种趋势与多颗卫星长期观测结果较一致. 但这不能完全用大气层中增加的 CH_4 氧化效应来解释.

臭氧是主要集中在平流层包括离地面约 10~50 km 高度的一种重要痕量气体. 臭氧吸收太阳紫外辐射加热平流层的同时也保护了地表生态免遭 UV 辐射的伤害. 臭氧与水汽反应产生的 OH 自由基是大气化学过程中一种重要的成分, 几乎参与所有的大气化学反应. 探空观测臭氧垂直分布技术已很成熟, 基于电化学反应池型(Electrochemical Concentration Cell, ECC) 原理的臭氧探空仪已被广泛应用(Komhyr 等, 1995).

Aura 卫星上的微波临边探测(Microwave Limb Sounder, MLS)是卫星遥感大气垂直分布最有代表性的技术之一. 它能够测量多种大气化学成分和气象要素(如温度、气压等)从上对流层到中间层的垂直分布, 是卫星遥感大气垂直分布的主流产品. MLS 通过探测上层大气不同化学成分在毫米和亚毫米波段辐射来实现测量. 20 世纪 70 年代中期美国空气推进实验室开始研究这一技术, 并应用到卫星大气探测上, 已有代表性是高层大气研究(UARS)卫星 MLS 产品(Waters 等, 1999). 2004 年美国发射了装备 MLS 探测器的 Aura 卫星, 分别利用 190 和 240 GHz 探测水汽和臭氧, 提供了自 2004 年 8 月以来全球对流层上层到中间层的水汽和臭氧垂直分布(Waters 等, 2006). Aura-MLS 廓线产品也不断更新, 1.5, 2.2 和 3.3 版已公开(Livesey 等, 2011). MLS 臭氧廓线已用于气象资料的同化并显示出较好的效果(Feng 等, 2008).

卫星遥感产品需要验证, 验证的手段包括卫星产品之间的相互比较分析(Froidevaux 等, 2006; Liu 等, 2010), 或通过探空、飞机观测来检验(Vömel 等, 2007b; Jiang 等, 2007). 关于 Aura-MLS 产品的验证工作已有较多结果: 如 Froidevaux 等(2006)比较了其他卫星产品或球载遥感数据, 注意到 MLS 水汽和臭氧(1.5 版)在平流层的精度大致在 10%以内; 而 Vömel 等(2007b)采用探空资料的比对分析注意到, MLS 1.5 和 2.2 版的水汽在 68 hPa 高度以上的误差在(2.3±11.8)%以内, 而 100 hPa 处误差在(6.4±22)%以内; 2.2 版水汽产品精度和灵敏度在对流层虽有明显改进, 但测值及敏感度仍比 CFH 低. Jiang 等(2007)的验证表明 MLS 2.2 版臭氧产品在 150~3 hPa 的高度与臭氧探空结果较一致, 全球平均误差在 8%以内, 而在中高纬度地区的 215 hPa 以上对流层高度的值则比探空高 20%左右. 目前仅有关于 1.5 版 MLS 臭氧垂直廓线产品的验证在我国北京地区开展过(Bian 等, 2007), 但关于 2.2 和 3.3 版 MLS 水汽、臭氧廓线产品的验证在我国青藏高原地区还是一片空白.

青藏高原是全球中低纬度最具有特点的区域. 夏季青藏高原被认为是一个热源: 强烈的对流层向上输送使得亚洲季风区上对流层下平流层的臭氧、水汽有着显著的区域特点(Pan 等, 2014). 如臭氧总量的“低谷”现象(周秀骥等, 1995)或对流层的“水塔”效应(Xu 等, 2008). 基于 UARS 卫星的 HALOE 探测器观测资料对高原地区上空的水汽(毕云等, 2008)和臭氧(陈月娟和施春华, 2005)长期变化趋势也进行了深入研究, 指出了夏季高原地区这两种大气组分显著的区域特点. 综合模式的计算并与卫星观测产品的比较分析则进一步提出: 由于地形原因而引起深厚的强对流使得水汽、CO 污染物在高原上空形成一个快速通道(Fu 等, 2006), 且与亚洲夏季季风区连成一片对平流层有着重要影响(Randel 等, 2010).

尽管 MLS 的水汽和臭氧垂直分布产品已进行了验证, 但在青藏高原地区开展验证比较还是很有必要, 这是因为卫星垂直分布的产品在反演计算过程中所依赖的初始廓线(如温度、水汽、臭氧和气溶胶)在高原地区与同纬度其他地区还是有些不同, 特别是在夏季. 臭氧探空观测也注意到拉萨与同纬度其他地区的臭氧还是有显著差别(郑向东等, 2000). 这里本文根据在青藏高原及其周边地区探空水汽和臭氧垂直分布数据, 对 Aura 卫星的 MLS 水汽和臭氧廓线产品进行比较分析, 以让读者了解卫星水汽、臭氧廓线产品在夏季高原地区精度状况, 为卫星数据的应用提供参考.

1 探空观测与卫星数据概况

1.1 探空观测数据

气象探空气球同时携带 CFH, ECC 分别完成水

汽和臭氧垂直分布的测量并以常规气象探空仪为平台将数据发回地面. 以露(霜)点温度为原理的CFH探空仪, 温度不确定度小于 0.5 K, 转换成水汽混合比的不确定度在下对流层约为 4%, 从对流层顶到平流层中层约为 10%(Vömel 等, 2007a). 气球飞行中由于气降落伞或者进气管表面释放空气可能导致 CFH 水汽测量受到污染, 影响测量不确定度, 尤其在穿过厚云后.

ECC 是根据臭氧与碘化钾溶液之间电化学反应产生的电流来确定臭氧浓度的(Komhyr 等, 1995), JOSIE 比对实验给出其测量不确定度为 3%~5%, 到 30 km 其测量不确定度为 5%~10% (Smit 等, 2007). 水汽和臭氧垂直有效分辨率是由各自仪器的响应时间及气球升速来定, CFH 在平流层响应时间大致在十至数十秒; ECC 臭氧探空响应时间大致在 20 s~1 min, 当气球升速为 5~7 m s^{-1} 时, 水汽和臭氧的垂直分辨率分别在 50~200 m 和 100~400 m, 远高于 MLS 卫星产品的垂直分辨率.

本文涉及探空数据由三个地点观测得到, 各实验站点及相关观测信息见表 1. 表中给出每个地点探空观测的次数, 与探空匹配的 MLS 卫星资料选自离探空地点最近且观测时刻也最接近的廓线资料. 腾冲的 CFH 观测已在相关文献(颜晓露等, 2012)中介绍. MLS 产品的水平分辨率比较低, 由于产品主要是在对流层上层以上高度, 臭氧和水汽的水平分布变化应比大气低层小, 且考虑到探空观测资料有限, 因此有些MLS廓线与探空观测的空间和时间间隔较大. 本文选择 MLS 廓线离探空的空间距离在 1000 km 以内, 时间间隔在 12 h 内. 这种空间与时间的分辨率虽然粗, 但对比较分析结果影响不大, 因为已有的比对工作给出MLS的时间-空间间隔的选取对比较结果的影响不是很明显(Vömel 等, 2007b), 而本文也注意到时间-空间间隔对探空与卫星之间的比较结果影响不会很大(具体请见本文第 3 部分分析). 另外, 由于 MLS 数据的垂直分辨率远低于探空观测数据, 因此, 本文对探空数据进行拉格朗日线性插值处理, 降低其垂直分辨率来匹配 MLS 数据分辨率. 关于 MLS 与探空数据比对, 推荐的比较好的方法是采用 MLS 分别反演臭氧和水汽垂直分布的平均核函数和前向平滑函数来降低探空数据垂直分辨率. 但是应用平均核函数是相对量大的工作, 且 Livesey 曾推荐用户对探空数据插值来进行 MLS 数据的验证工作也可以接受(Livesey 等, 2011). 在水汽比对方面, Berthet 等(2013)利用最小二乘法降低球载 ELHYSA 霜点仪所测的水汽探空数据的垂直分辨率, 并与MLS 3.3 版的水汽数据进行比较发现 MLS 3.3 版水汽数据的平均误差在 30~80 hPa 为(2.80±0.96)%. 而在臭氧比对方面, Jiang 等(2007)发现用最小二乘法和平均核函数方法降低臭氧探空数据垂直分辨率给出的结果差别不大, 且 MLS 与探空数据比对结果对两种方法的选取不敏感.

1.2 MLS 产品

Aura-MLS 目前发布全球水汽和臭氧垂直廓线数据包括了 2.2(2007 年 4 月发布)和 3.3(2011 年 1 月发布)两个版本的产品. 3.3 版数据由于明显改进了反演技术, 体现在不同高度上数据的垂直分辨率有所提高(Livesey 等, 2011). 2.2 版水汽的垂直分辨率在 316 hPa 是 1.5 km, 至 147 hPa 增加到 3.3~3.5 km, 向上到 4.6 hPa 一直维持在~3.5 km; 水平分辨率在 4.6 hPa 以下为 185~320 km. 3.3 版水汽的垂直分辨率在 316~0.22 hPa 为 2.0~3.7 km; 水平分辨率在 4.6 hPa 以下为 210~360 km. 对于水汽, 数据分辨率差别主要是在 22 hPa 以上, 而 22 hPa 以下两版数据差别小于 10%. 3.3 版本在反演算法上采用基于吸收腔体测量技术而确定的水汽带宽比 2.2 版的要窄 4%, 消除了 31~26 hPa 2.2 版数据的锯齿形误差. 本文所用到 MLS 水汽廓线主要在 22 hPa 以下, 因为在此高度以上的探空观测数据较少.

2.2 版臭氧的垂直分辨率在 215~0.22 hPa 为~3 km;

表 1 探空观测实验时间、地点与卫星过境的次数

实验地点	纬度(N)	经度(E)	海拔(m)	观测时段	卫星匹配次数
云南腾冲	25.00°	98.50°	1656	2010 年 8 月	10
西藏那曲	31.29°	92.04°	4500	2011 年 8 月	2
西藏拉萨	29.66°	91.14°	3650	2012 年 5~7 月	8(水汽), 27(臭氧)

水平分辨率为 200~400 km. 3.3 版臭氧的垂直分辨率在 261~0.22 hPa 为~2.5 km; 水平分辨率在平流层以下为 300~450 km. 3.3 版本提高了在上对流层和下平流层高度数据的垂直分辨率. 但是云可能使得 3.3 版臭氧浓度在上对流层高度离散度增加、数据的垂直分布在热带地区更容易出现振荡现象. 在 215~100 hPa 的低纬度地区 3.3 版臭氧平均值比 2.2 版高 10 ppbv (Livesey 等, 2011). 本文在具体 MLS 数据的取舍上, 严格遵照参考文献(Livesey 等, 2011)要求筛选, 状态值(status value)、质量值(quality)和估测精度值(estimated precision)符合要求的数据.

2 结果分析

2.1 水汽浓度比较个例及总体状况

图 1 给出 2011 年 8 月 4 日 15 时在那曲地区 CFH 与 MLS 观测比较个例, MLS 过境那曲上空时, 气球已到达 330 hPa, 卫星过境轨道离气球的水平距离为 118 km, 本文首先给出此个例的比较结果. 从图 1(a)可以看出, 100 hPa 以下的水汽浓度变化幅度很大, 而在平流层水汽浓度则基本平稳. 图 1(b)是 MLS 水汽与探空测量数据的相对误差, 相对误差定义如式(1), 单位为%.

$$\delta_q = 100 \times \frac{q_{\mathrm{MLS}} - q_{\mathrm{CFH}}}{q_{\mathrm{CFH}}}, \tag{1}$$

式中, q_{MLS} 代表 MLS 在某一气压层上观测到的水汽混合比, q_{CFH} 代表 CFH 观测值在降低垂直分辨率后与 MLS 在同一气压层上的值.

从图 1 可以看出, MLS 2.2 和 3.3 版的水汽浓度与探空资料的比较结果在整个高度上较一致. MLS 水汽浓度在 100~38 hPa 偏湿, 在 31 hPa 以上高度偏干; 同样偏干还在对流层范围, 但 178 和 316 hPa 除外. 2.2 版和 3.3 版 MLS 在 38 hPa 以上平流层分别比 CFH 偏干约 19.4%和 22.6%; 在 100~38 hPa 偏湿, 误差分别在 44.5%和 40.5%以内; 100 hPa 的对流层顶附近则分别偏湿 26.0%和 22.8%, 100 hPa 以下误差振荡明显.

图 2 给出了所有探空与 MLS 水汽产品在高原地区三个地点的比较结果. 通过 MLS 2.2 版(图 2(a))和 MLS 3.3 版(图 2(b))与 CFH 测值比较的平均结果可以看出, 两版数据的平均相对误差在 146~38 hPa 上基本一致: MLS 2.2 和 3.3 版水汽在 100 hPa 分别比 CFH 偏湿(9.8±46.0)%和(23.0±45.8)%, 而 100 hPa 以上相对误差则很快减小, 但在 38 hPa 以上明显偏干, 而在此高度下则是明显偏湿. 100 hPa 以下, MLS 数据误差明显增大, 2.2 和 3.3 版的平均相对误差分别在(46.2±106.4)%和(33.6±147.9)%以内, 两版本产品的一致性

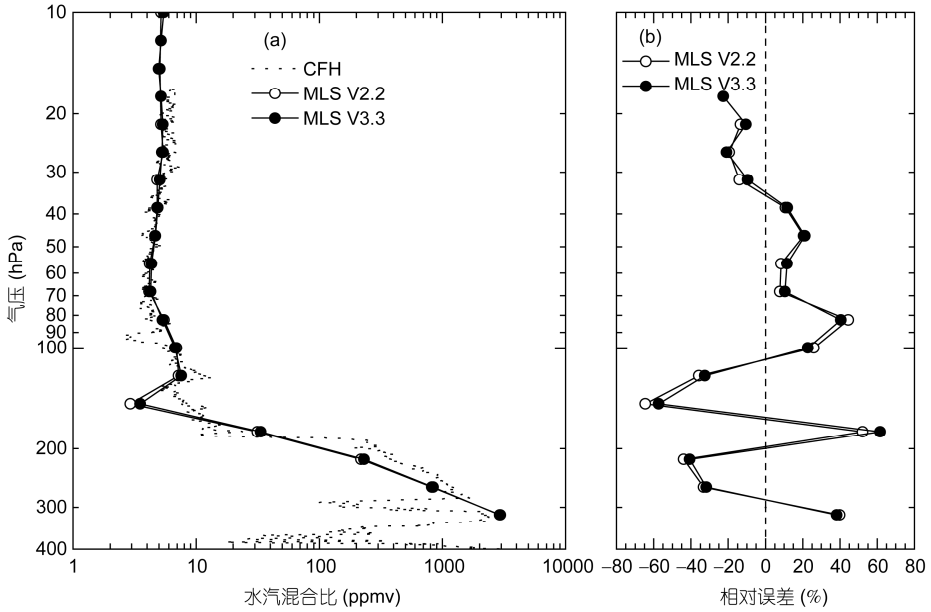

图 1 CFH 探空观测水汽廓线和 MLS 在西藏那曲地区观测的个例比较(a)和 MLS 水汽浓度相对误差 δq(b)

观测时间: 2011 年 8 月 4 日

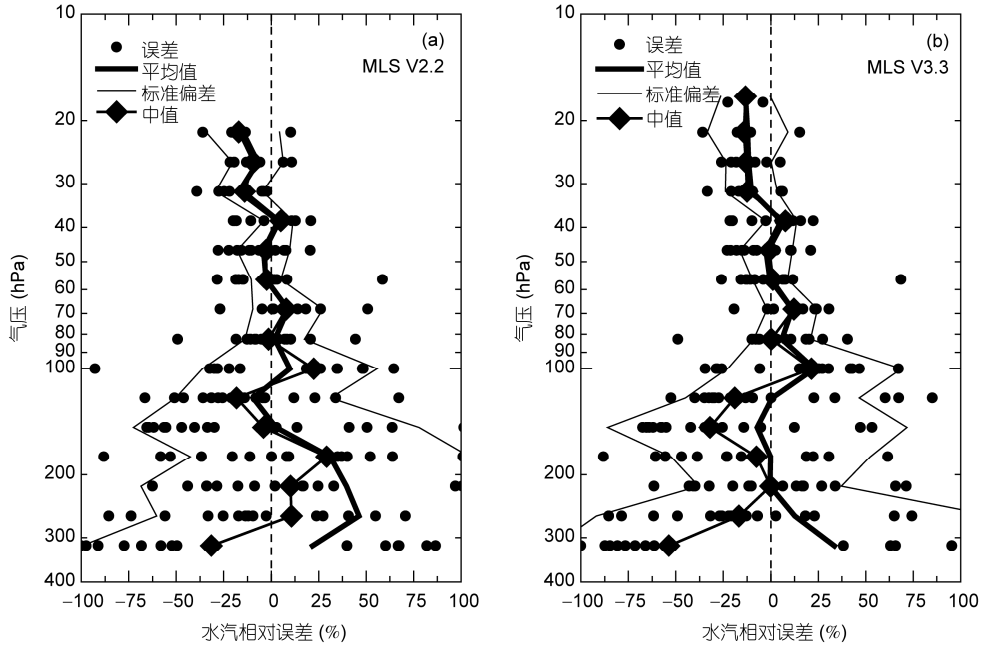

图 2　MLS 2.2 版(a)和 3.3 版(b)水汽廓线与 CFH 比较的相对误差δ_q 垂直分布的统计结果

也较差, 相对误差的平均值、中值和标准偏差随着高度降低而增大. 直观上看, 3.3 版本水汽产品改善的地方是其相对误差随高度变化的振荡幅度已有些降低.

2.2　臭氧浓度比较个例及总体状况

相对应水汽, 在这一节给出臭氧垂直分布的比较情况. 图 3 给出与图 1 对应的那曲地区臭氧探空与 MLS 产品的比较个例. 图中相对误差的定义与式(1)类似, 分别用δ_O, O_{ECC}和 O_{MLS}代表式(1)中的δ_q, q_{CFH}和 q_{MLS}, O_{MLS}代表 MLS 在具体气压层上观测到的臭氧混合比, O_{ECC}表示 ECC 观测值降低垂直分辨率后与 MLS 在同一气压层上的值.

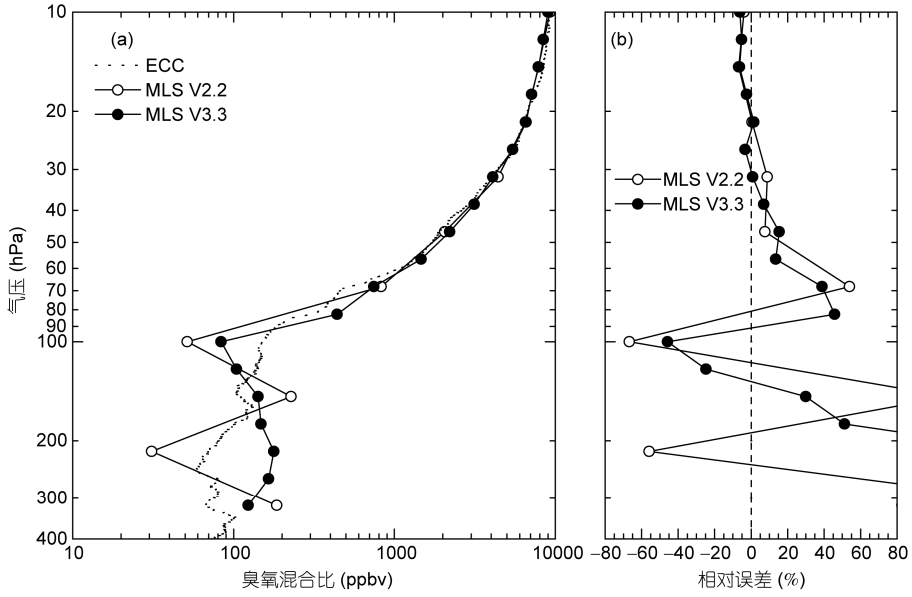

图 3　臭氧探空廓线与 MLS 的比较(a)和 MLS 臭氧浓度相对误差δ_O(b)图

从图 3(a)可以看出, 在 100 hPa 以上, 2.2 和 3.3 版臭氧垂直分布与 ECC 探空观测比较一致. 100 hPa 以下, 尽管MLS 误差明显, 但MLS 3.3 版臭氧振荡明显降低了. 反映了 MLS 3.3 臭氧产品稳定性在 UT-LS 有了明显提升, 但 100 hPa 以下 MLS 臭氧误差还是比较大, 且没有规律性. 从图 3(b)还可以看出, 从 68 hPa (2.2 版)、82 hPa (3.3 版)到平流层 21 hPa 的高度, 两版本的 MLS 臭氧皆高于探空测值(偏高误差分别在 53.9%和 45.7%以内). 平流层 17 hPa 以上高度 MLS 两个版本臭氧均比探空值偏低, 平均误差在 6.8%以内.

图 4 给出了所有探空与 MLS 臭氧产品的比较结果. 通过 MLS 2.2 版(图 4(a))和 MLS 3.3 版(图 4(b))与 ECC 的测值比较可以看出, 2.2 和 3.3 版臭氧在 68 hPa 及其以上高度一致地高于探空值. 在 100 hPa 处, 2.2 和 3.3 版产品均接近探测值, 但离散度很大. 在 100 hPa 以下, 2.2 版相对误差变化很大, 而 3.3 版臭氧产品则普遍地高于探空值. 2.2 版臭氧相对误差平均值和中值垂直分布比较一致, 但标准偏差较小; 3.3 版臭氧在 100 hPa 以下出现较大离散度. 这一点与 MLS 水汽廓线误差特点类似, 反映了 MLS 产品在 UT-LS 高度的局限性, 也可能还反映了夏季高原地区温度、水汽、云或臭氧的平均垂直分布与同纬度地区的差异对 MLS 反演产品准确度的影响.

2.3 各站点水汽廓线的比较

图 5 给出腾冲和拉萨两地卫星 MLS 水汽产品与 CFH 探空的详细比较. 从腾冲地区 MLS 2.2 版(图 5(a))、3.3 版(图 5(b))的比较可以看出, 两版产品的平均相对误差垂直分布变化在 82 hPa 及其以上高度较一致: 其中 56~21 hPa 皆比探空值低. 而在 100 hPa 以下, 两版产品相对误差较大: 121~100 hPa, MLS 2.2 版值偏低, 但 3.3 版值偏高; 215 hPa 高度以下, 3.3 版水汽浓度更接近 CFH 测值. 与腾冲地区不同的是: 在拉萨地区 MLS 两版本水汽廓线的相对误差垂直分布则显示出较好的一致性(图 5(c), (d)). 3.3 版产品准确度在 215 与 82 hPa 之间略有提高. 而在 261 hPa 及其以下高度 3.3 版水汽也比 2.2 版接近探空观测结果.

腾冲地区 MLS 两版水汽廓线的相对误差垂直分布在对流层不一致, 这与拉萨地区两版 MLS 水汽数据相对误差垂直分布呈现的一致性是不同的, 这种差别原因还不是很清楚. 一个可能的原因是文中选用比较方法的影响, 没有考虑 MLS 平均核函数的作用可能给比较结果带来一定误差. 从图 5 可以看出腾冲地区在对流层上层的 MLS 水汽的相对误差绝对值比拉萨地区要小, 很可能与腾冲地区在这个高度范围的水汽浓度的高值所提供的卫星遥感信号源强度强有关, 因为腾冲位于青藏高原水汽输送的上游地区,

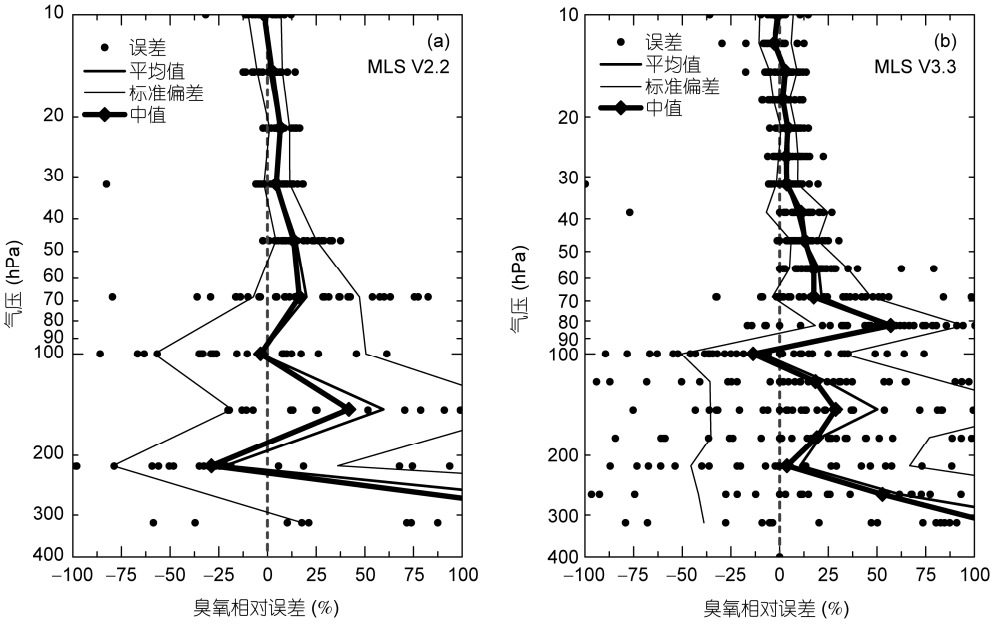

图 4 MLS 2.2 版(a)和 3.3 版(b)臭氧廓线与 ECC 比较的相对误差δq 垂直分布的统计结果

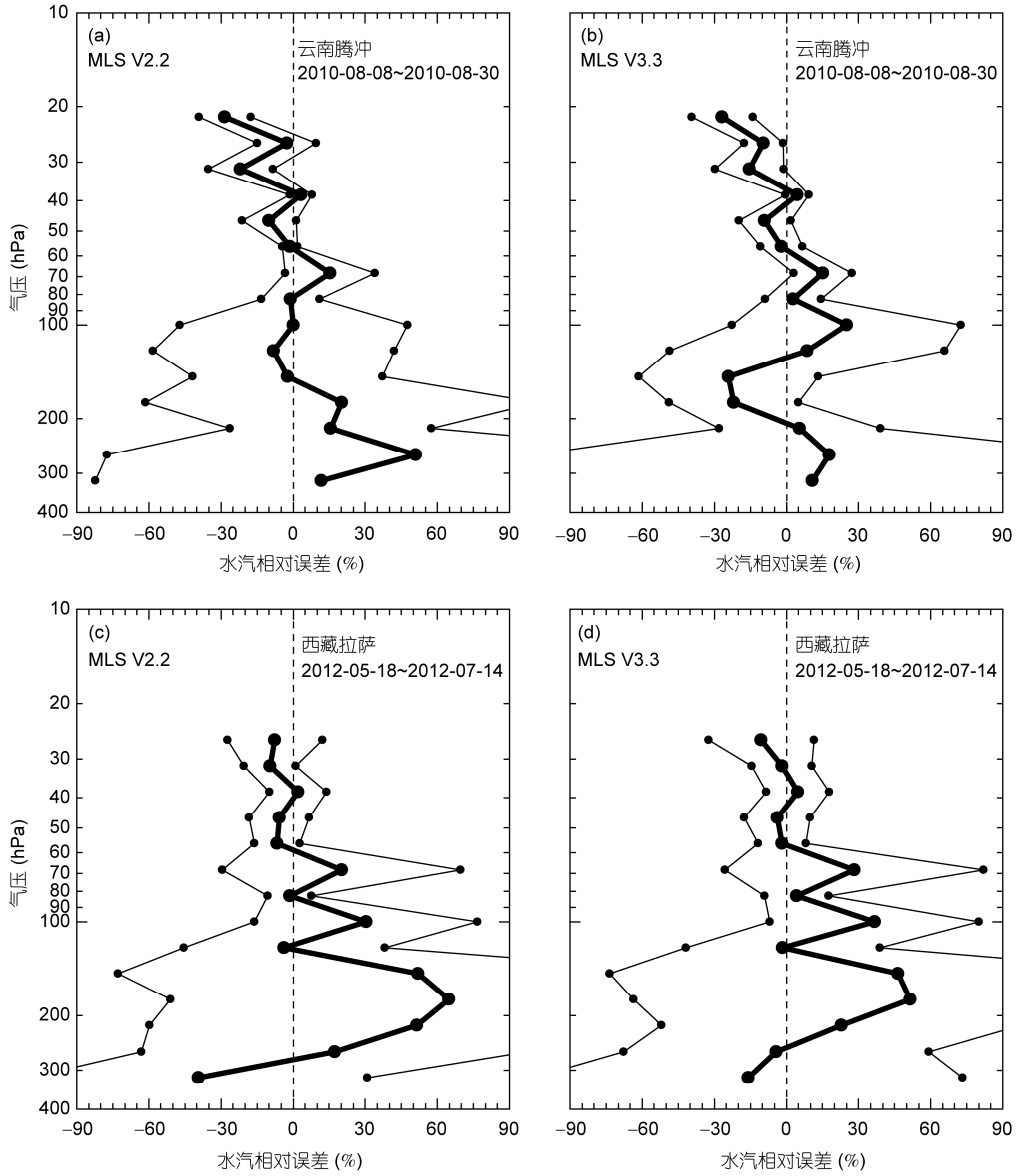

图 5　MLS 2.2 和 3.3 版水汽廓线与 CFH 探空观测比较的相对误差垂直分布

粗点线是平均误差值, 两边的细点线是平均误差±标准偏差值

对流层水汽浓度比拉萨地区大.

2.4　各站点臭氧廓线的比较

图 6 给出腾冲地区 2.2 版(图 6(a))和 3.3 版(图 6(b))臭氧廓线产品与 ECC 测值平均比较情况. 总体而言, MLS 臭氧浓度明显高于 ECC 探空观测结果, 特别是 200~100 hPa 的对流层中上部. MLS 两版臭氧产品的相对误差垂直分布较一致, 在 68 hPa 高度以上的平流层, 平均相对误差分别在(9.4±18.1)%和(14.9±11.1)%以内. 随着高度降低 MLS 两版臭氧的相对误差变化较大, 反映了 MLS 臭氧产品在对流层的中、上层仍有较大的误差.

由于亚洲夏季季风建立后青藏高原出现区域性的“臭氧低谷”(周秀骥等, 1995)特征, 本文对拉萨地区的 MLS 臭氧与 ECC 探空观测比较分为“臭氧低谷”与非“臭氧低谷”两个时段, 其判断的依据是根据当地的天气预报和气象观测记录所推断的季风建立时间. 2012 年季风出现大约在 6 月中旬, 本文是以 6 月

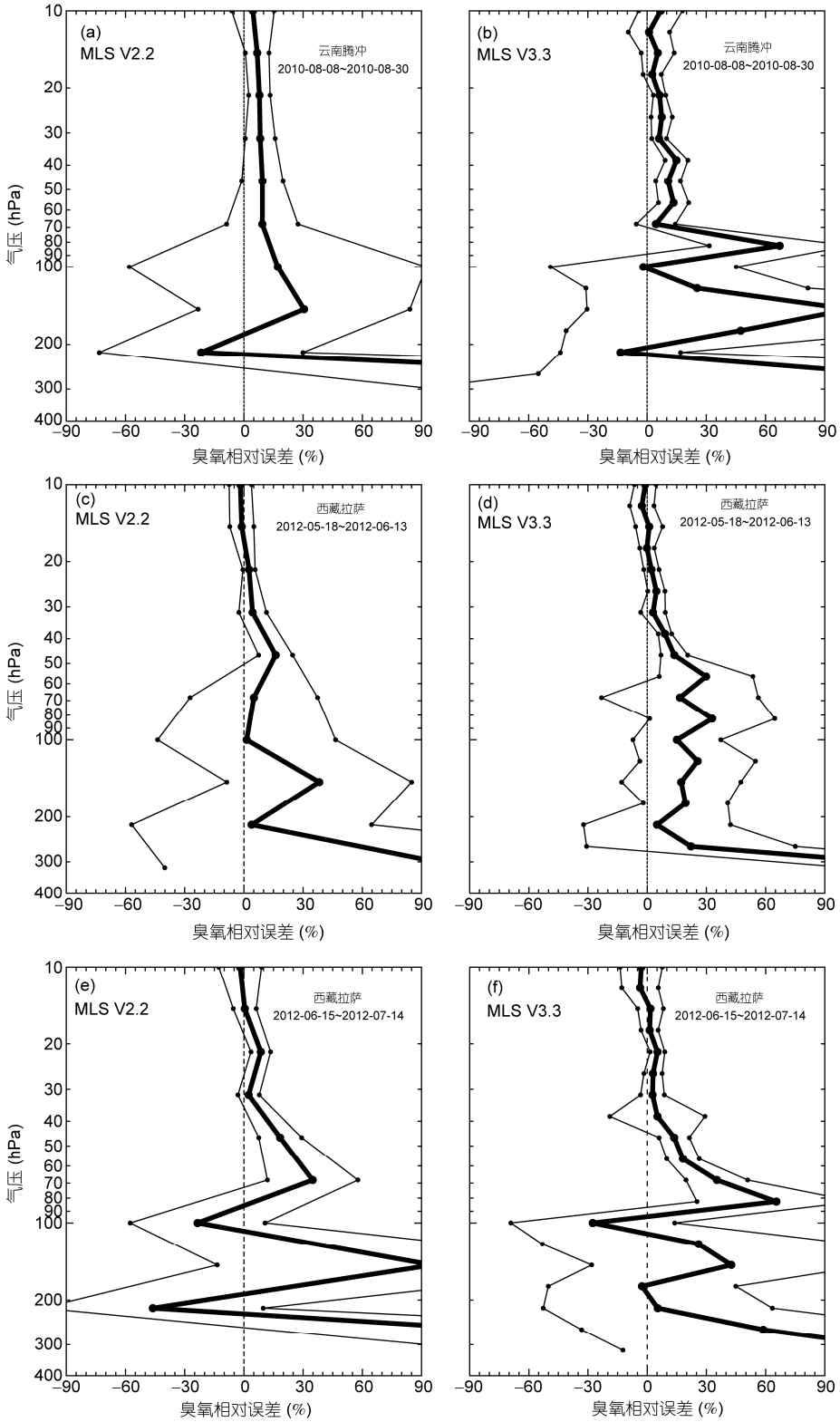

图 6　MLS 2.2 和 3.3 版臭氧廓线与 ECC 探空观测比较的相对误差垂直分布

粗点线是平均误差值, 两边的细点线是平均误差±标准偏差

13 号为界, 其依据是在此日之前对流层中、上层以极度干燥为主要特征, 而此后季风气候建立, 水汽输送明显地进入高原上空.

夏季季风建立前, 从拉萨地区 MLS 2.2 版(图 6(c))和 MLS 3.3 版(图 6(d))与 ECC 的比较可以看出, 两版产品的平均相对误差在 46 hPa 高度以上较一致, 值分别在(17.8±9.2)%和(15.4±7.7)%以内. 此高度以下, 两版 MLS 臭氧均比探空值高. 两版产品在对流层各气压层上的平均误差相差不大. 季风建立前, 拉萨地区两版 MLS 臭氧产品与探空值的差别远没有腾冲地区大.

图 6(e)和(f)则分别对应"臭氧低谷"建立后拉萨地区的比较情况. 与非"臭氧低谷"期间相比的共同之处是: 两版 MLS 臭氧浓度在平流层基本上高于探空值且相对误差较小, 2.2 和 3.3 版的平均误差值在 46~10 hPa 高度分别在(18.4±10.8)%和(13.7±24.1)%以内; 而 68 hPa 处相对误差超过 30%. 100 hPa 以下 MLS 臭氧产品相对误差较大. 3.3 版结果比 2.2 版好虽然振荡也很明显.

从腾冲、那曲(图 3)和拉萨地区臭氧比较结果发现, 夏季季风建立后, 三地卫星产品与探空比较平均相对误差的廓线形状较为相似, 这在一定的程度上反映了 MLS 臭氧产品在夏季高原地区存在整体误差: 在平流层略有偏高. 青藏高原"臭氧低谷"期间, MLS 臭氧在 100~40 hPa 高度误差较季风前明显偏大.

2.5 不同高度 MLS 产品与探空测值相互关系的分析

前面给出总的及单站点平均比较结果是沿着 MLS 水汽(或臭氧)浓度的相对误差垂直分布来开展的, 得到了可预期的定性结论: MLS 产品与探空值的相对误差是随着高度的上升而下降的. MLS 产品在平流层的相对误差较小与平流层的水汽、臭氧的变化幅度相对于对流层明显要低是有联系的, 而较高的臭氧浓度和少云有利于 MLS 平流层臭氧的反演. 假定探空测的结果代表了大气中的水汽或臭氧的真值, 但实际上探空结果存在测量误差. 对于 CFH 水汽测量来说, 高空污染可能引起 10%左右的不确定度(Vömel 等, 2007a). 本文中我们认为平流层的 CFH 结果存在少许的污染. 对于 ECC 臭氧测量结果, 泵效系数的不确定(Smit 等, 2007)和溶液对背景电流的影响(Thornton 和 Niazy, 1982)可能导致臭氧测量误差. 很难真正去除仪器的这些误差, 但他们能部分解释前面误差. 本节通过 MLS 产品与探空数据简单的统计分析来了解 MLS 产品的特征.

2.5.1 MLS 水汽产品

Vömel 等(2007b)对各气压层上 MLS 水汽与探空结果采用简单的线性拟合回归分析:

$$q_{i,\mathrm{MLS}} = \alpha + \beta \cdot q_{i,\mathrm{CFH}} + \eta_i, \tag{2}$$

式中, i 表示不同气压高度层, β为斜率, α为截距, η_i 是残差. a, β大小由 MLS 和探空测量的系统和随机不确定度决定. 这里忽略 CFH 的系统误差, 以 CFH 数据为真值并假设随机误差在整个平流层水汽测量中是一致的, 那么斜率β表示了 MLS 水汽浓度随真值变化的系数, 这个系数的物理意义是MLS水汽产品的灵敏度, 它反映对实际水汽浓度变化的简单的线性响应. 理想情况下, 若 MLS 水汽浓度与 CFH 完全一致, 斜率β和截距α应该分别为 1 和 0. 截距α在一定程度上反映了 MLS 的系统绝对误差. 因此, 斜率β和截距α是可以反映出 MLS 廓线产品的一些误差特征.

图 7 反映了三个不同气压高度上 MLS 水汽产品与 CFH 测值之间的简单线性拟合结果. 直观地可以看出在 100 hPa 的对流层顶附近, 两组测值的线性关系最差, 而在对流层或平流层则关系比较好. 表 2 给出的是各气压层上β和α的值. 2.2 版 MLS 斜率β的取值范围在 0.28~1.00 平均值为 0.60±0.22, 而 3.3 版则在 0.20~0.92 平均值为 0.54±0.25. 3.3 相对于 2.2, 其灵敏度在高原地区并没有显著地提高. 这里的 β 值大多低于 Vömel 等(2007b)给出的结果. 而α值虽随着气压的降低而显著下降, 但其与真值(所有探空观测的平均值 $\overline{q}_{\mathrm{CFH}}$)的比率变化则基本上与$\beta$值变化相反.

从表 2 可以推测, MLS 水汽产品的灵敏度是和具体气压层的空白值与大气中水汽的浓度垂直分布有联系的. 通常情况下, 对流层顶以下的卫星产品准确度比稳定的平流层要低, 但表 2 中 MLS 灵敏度在对流层还是比对流层顶附近 100 hPa 要高. 与 2.1 部分的结果一致, MLS 水汽数据产品在对流层顶高度附近的误差是很大的. 平流层低层情况略有些不同: 尽管水汽浓度比较低, 但由于平流层稳定, 同时受到干扰(如云)比较小, MLS 水汽产品的灵敏度明显偏高, 截距α也比较低. MLS 水汽产品在 56.2 和 38.3 hPa 存在较大的误差.

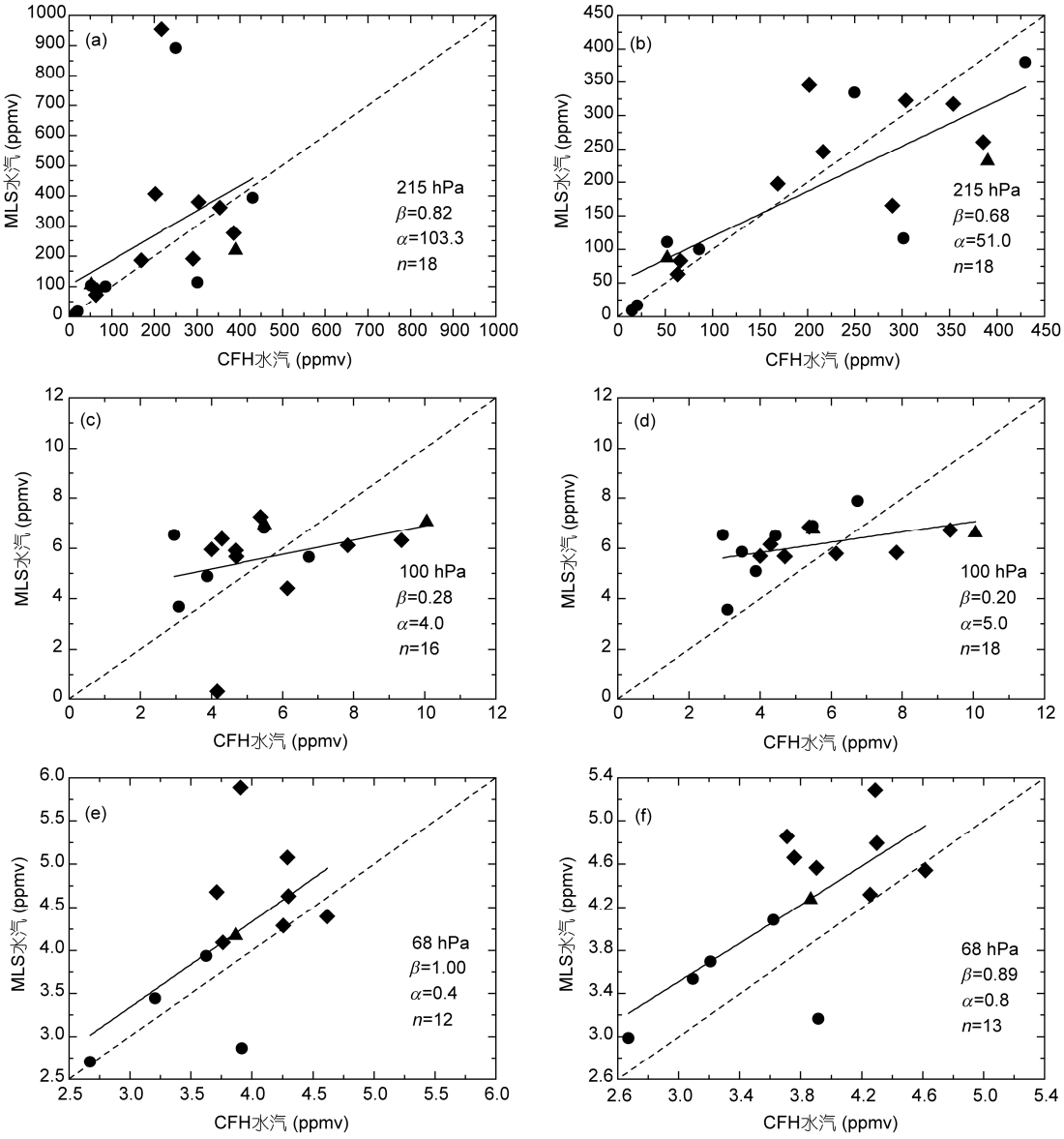

图 7　2.2 版((a), (c), (e))与 3.3 版((b), (d), (f))MLS 与 CFH 在各气压层上的相关性

斜率β和截距α由数据的线性拟合给出. ◆代表腾冲地区, ▲代表那曲地区, ●代表拉萨地区

在对流层, 斜率和截距的变化还应与真实水汽浓度离散度较大有关. 例如, 在 177.8 hPa, 数据线性拟合主要受腾冲地区混合比大于 100 ppmv 的三个数据影响, 卫星显现出干偏差. 这里截距α=24.3 ppmv, 斜率β=0.41. 剔除这三个水气混合比大于 100 ppmv 的值后, α=10.9 ppmv, β=0.75, MLS 灵敏度和本底值均有明显的改善. 从这里也看出, 对流层水汽浓度较大幅度的变化在一定程度上会影响了 MLS 水汽产品的灵敏度.

为便于比较, 表 2 列出了 Vömel 等(2007b)中关于 2.2 版 MLS 与 CFH 水汽比较的拟合系数β. 注意到本文中几乎所有(68.1 hPa 除外)β值都比参考值低. 一个重要的原因是在某一层上 MLS 对于水汽变化不是以简单的线性方式响应, 文中以线性方法降低 CFH 的垂直分辨率. 146~100 hPa 水汽在水平和垂直方向较大的梯度是此高度层β低值的另一个重要原因. 82.5 hPa 高度以上 3.3 版水汽β值略有增加, 这说明 3.3 版水汽的灵敏度有轻微提高.

表 2　CFH 与 MLS 测量水汽间的线性拟合系数 [a)]

气压(hPa)	V2.2			V3.3			$\bar{q}_{\mathrm{CFH}}$ (ppmv)	样本数
	斜率β	截距α (ppmv)	$\alpha/\bar{q}_{\mathrm{CFH}}$ (%)	斜率β	截距α (ppmv)	$\alpha/\alpha/\bar{q}_{CFH}$ (%)		
316.2	0.56(0.86)	784.9	55	0.63	824.8	58	1416.4	18
261.0	0.58(1.08)	231.1	36	0.53	207.1	32	628	18
215.4	0.82(0.62)	103.3	50	0.68	51.0	25	202.6	18
177.8	0.68(0.65)	22.0	34	0.41	24.3	37	64.2	17
146.8	0.40(0.72)	9.6	42	0.17	10.8	47	22.6	17
121.2	0.35(0.70)	5.3	48	0.29	7.0	64	10.9	19
100.0	0.28(0.91)	4.0	75	0.14	5.6	105	5.3	18
82.5	0.62(0.86)	1.9	39	0.66	1.9	39	4.9	15
68.1	1.00(0.87)	0.4	10	0.89	0.8	21	3.8	13
56.2	0.43(0.93)	2.1	52	0.62	1.5	38	4.0	9
46.4	0.91(0.61)	0.2	4	0.92	0.3	7	4.2	10
38.3	0.60(0.45)	1.9	43	0.55	2.2	50	4.4	8

a) 斜率β后面括号内值引自 Vömel 等(2007b)中的表 3

2.5.2　MLS 臭氧产品

参考对 MLS 水汽产品的灵敏度分析, 本节给出 MLS 臭氧产品的分析. 图 8 给出了在一些具有代表性的气压层上 MLS 和 ECC 臭氧观测比较结果. 从图 8 可以看出, 在对流层上层 215 hPa, 卫星产品与 ECC 测值的线性关系并不是很明显, 100 hPa 高度线性关系略有改善, 而在 46 hPa 的平流层高度线性关系较好.

表 3 分别给出了各气压层上线性拟合系数. 2.2、3.3 版斜率β的取值范围分别在 0.30~1.18 和 0.26~1.01, 其平均值分别为 0.58±0.29 和 0.56±0.21. 100 hPa 及其以下高度, 3.3 版臭氧产品灵敏度比 2.2 有些提高. 对流层斜率β较小说明了 MLS 臭氧产品的灵敏度在此高度区较低, 也就是说, MLS 臭氧产品在反映出对流层臭氧的变化上还有着很大的不确定度. 同样在这个高度范围α值比较低, 但因为对流层平均臭氧浓度也很低, $\alpha/\bar{O}_{\mathrm{ECC}}$ 比值在 3.3 版本的产品上比较高反映了 MLS 遥感产品在对流层较大误差的事实. 另外对流层臭氧浓度变化大和其他因素(如云)也可能会增加 MLS 臭氧数据在对流层的不确定度.

在 38.3 hPa 高度以下的平流层, MLS 臭氧产品的灵敏度有明显的提高; 46.4 hPa (大约在 21 km 附近)和 38.3 hPa (大约在 22 km 附近)基本上比较靠近了臭氧分压最大值的高度, 所以它们的灵敏度最高. 从表 3 还可以看出, 3.3 版臭氧产品虽然增加了垂直分辨率, 但是数据的灵敏度并没有明显增加(与水汽的情况一样). 截距α值随高度的增加而增加可能与臭氧的体积混合比浓度随高度而增加有密切联系, 同时$\alpha/\bar{O}_{\mathrm{ECC}}$ 比值也随高度的增加而下降, 这与卫星遥感大气产品误差一般随着高度的增加而下降是较一致的. 从这个角度来看, MLS 3.3 臭氧的产品的确较 2.2 有明显地改进, 但在对流层的振荡也很明显.

3　MLS 水汽和臭氧廓线产品相对误差可能因素的分析

相对在其他地点的观测验证结果, 本文分析的 MLS 2.2 和 3.3 版本产品廓线相对误差还是比较大的, 在全球范围内水汽和臭氧(1.5 版)在平流层的精度大致在 10%以内(Froidevaux 等, 2006). 造成这种结果是可以预计的: 因为夏季青藏高原及其周边地区的大气水汽、臭氧的垂直分布与同纬度其他地区相比的确存在显著性的区域特点(Gettelman 等, 2004). 而本文用于比对的样本数还是偏少(特别是水汽的比对), 这样统计平滑的效果不是很明显, 得到的结论具有一定的代表性. 但这些结论是否具有普适性还有待于更长时间资料的进一步验证. 此外, 以下因素可能影响到比对结果.

3.1　卫星与探空观测站点时、空差异的影响

本文已注意到由于探空资料有限, 同时也由于 MLS 卫星产品时间-空间分辨率的局限性, 有些 MLS

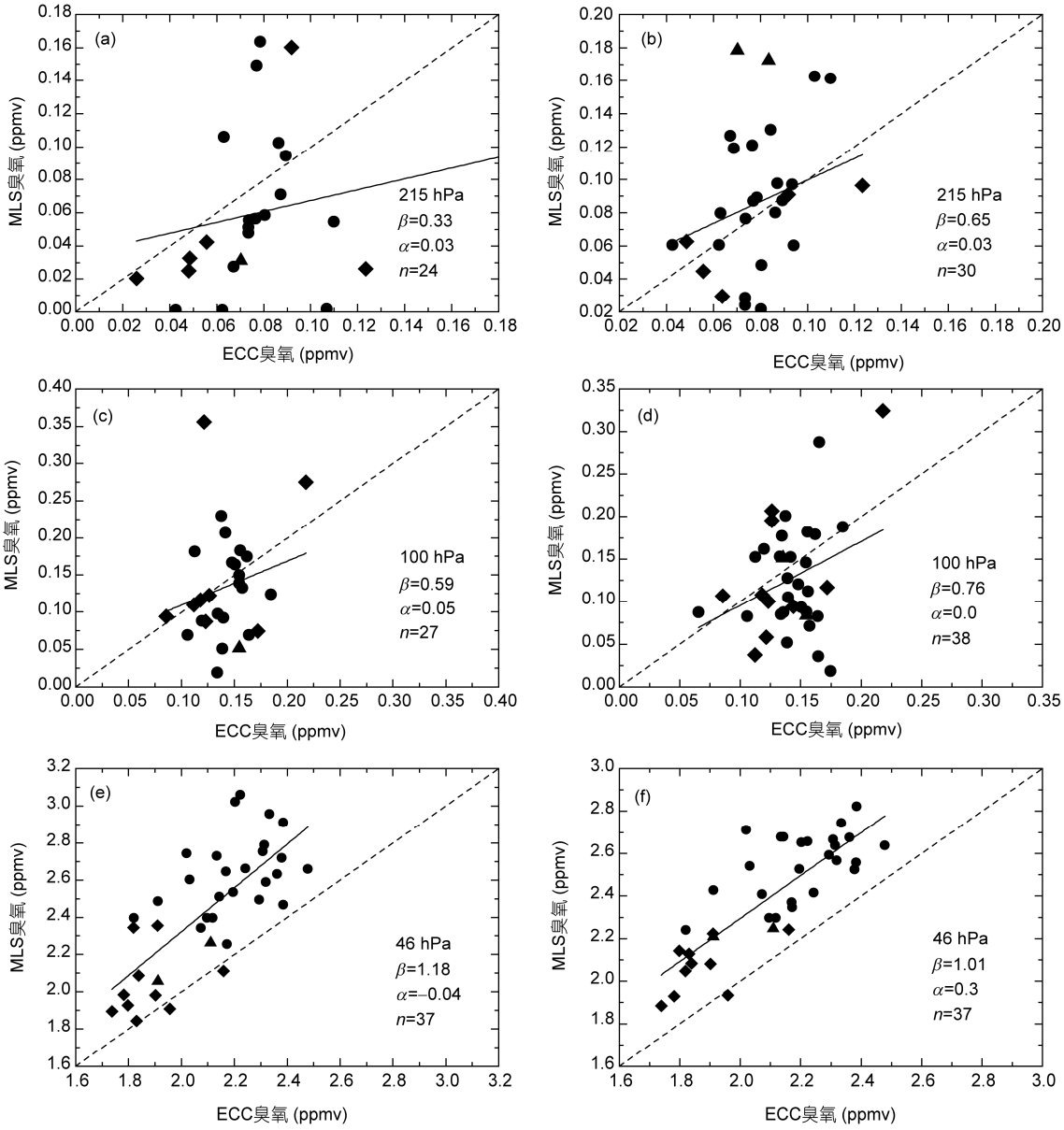

图 8　2.2 版((a), (c), (e))和 3.3 版((b), (d), (f))MLS 与 ECC 在各气压层上的相关性

斜率β和截距α由数据的线性拟合给出. ◆代表腾冲地区, ▲代表那曲地区, ●代表拉萨地区

廓线与探空廓线的空间和时间间隔较大. 时空间隔不同可能影响探空与卫星之间的比较结果, 但这主要应在对流层顶及其以下高度. 为此, 本文比较了不同探测地点 MLS 卫星水汽和臭氧廓线在各个气压层上的相对误差与时、空间隔差异的关系, 图 9 给出 3.3 版 MLS 产品与探空相对误差与时、空间隔的关系(2.2 版误差分析结果与 3.3 版较一致, 图略). 从图 9 已注意 MLS 水汽或臭氧廓线与探空的相对误差随时空间隔的差异均不具备明显的统计特征, 即使在 215 hPa 这样较低的高度. 卫星过境与探空观测的时、空间隔差异对比对结果的影响不是很大.

3.2　垂直初始廓线差异的影响

MLS 水汽或臭氧廓线的反演是依据“最优估测”规则而得到的(Livesey 等, 2006). 因此, 初始廓线的准确与否在 MLS 反演产品中起着重要的作用. 但 Aura-

表 3　ECC 与 MLS 测量臭氧间的线性拟合系数

气压 (hPa)	V2.2			V3.3			$\overline{O}_{ECC}$ (ppmv)	样本数
	斜率β	截距α (ppmv)	$\alpha/\overline{O}_{ECC}$ (%)	斜率β	截距α (ppmv)	$\alpha/\overline{O}_{ECC}$ (%)		
261.0				0.26	0.09	117	0.0768	31
215.4	0.33	0.03	38	0.65	0.03	38	0.0797	30
177.8				0.40	0.06	71	0.0848	31
146.8	0.30	0.10	114	0.43	0.08	91	0.0875	36
121.2				0.59	0.07	62	0.1134	33
100.0	0.60	0.05	35	0.76	0.02	14	0.1412	38
82.5				0.68	0.19	84	0.2273	37
68.1	0.65	0.29	52	0.58	0.33	60	0.5531	34
56.2				0.65	0.67	52	1.2874	37
46.4	1.18	–0.04	–2	1.01	0.27	13	2.1318	37
38.3				0.80	0.94	31	2.9928	34
31.6	0.49	2.28	56	0.47	2.30	56	4.0782	34
26.1				0.33	3.73	72	5.2068	31
21.5	0.50	3.53	56	0.33	4.50	71	6.3012	30
17.7				0.40	4.46	61	7.3308	30

MLS 产品反演中的初始廓线来自业务运行的再分析数据资料(如 GAMO: NASA's Global and Modeling Assimilation Office 或 NCEP 的数据资料), 而不是纬度或月均分布垂直廓线(Ahmad 等, 2006). 水汽和臭氧初始廓线在青藏高原地区与探空平均观测的曲线还是有很大的区别. 图 10 分别给出了 MLS 3.3 版水汽和臭氧产品的初始廓线与探空平均的观测结果(MLS 2.2 版与探空比较结果与此相似, 图略), 从图可以看出, 在 80 hPa 以下的高度, MLS 水汽初始廓线基本低于探空观测的平均结果, 而臭氧浓度的初始廓线却相反, 这种明显的差异是否会给 MLS 水汽或臭氧廓线产品带来一定的误差需要进一步的研究. 然而实际的考虑温度和臭氧初始廓线随季节(或月)和纬度的变化的确能提高卫星臭氧总量和廓线产品的精度(McPeters 等, 2007).

3.3　比较方法差异的影响

虽然类似的简单线性方法被用于 MLS 廓线产品的验证工作中(Berthet 等, 2013; Jiang 等, 2007), 我们需要强调本文采用简单线性内插将高分辨率的探空数据降低到 MLS 产品规定的气压高度层上进行比较结果不是很理想, 尤其在水汽和臭氧水平和垂直梯度较大的上对流层. 这种比较我们假设了卫星产品所在的高度与其他高度上的数据是没有联系的. 实际上, 根据反演的原理, 卫星在具体某个高度的浓度值包含了不同气压高度层的权重贡献(Livesey 等, 2006), 这个拟合过程比线性平均更复杂. 对流层顶附近 MLS 水汽和臭氧廓线之间的联系在廓线的权重中体现, 它们可能会影响到水汽或臭氧的灵敏度的值. 基于 MLS 廓线产品权重函数来处理高垂直分辨率的探空廓线数据进行比较(Vömel 等, 2007b), 可以进一步有效地降低 MLS 卫星产品误差, 这个比较我们将进一步地开展分析.

4　结论

以探空资料为参考, 对青藏高原及其邻近地区夏季 Aura-MLS 卫星臭氧和水汽产品的检验可以得出以下几点结论:

(1) MLS 2.2 和 3.3 版的水汽产品在对流层顶 100 hPa 附近及对流层上层呈现统计性的偏湿现象, 而在 100 hPa 以上的平流层略偏干. 误差在对流层顶附近平均分别为(9.8±46.0)%(n=18)和(23.0±45.8)%(n=17); 平流层则为(–2.2±15.7)%(n=74)和(0.3±14.9)%(n=75); 而对流层则为(21.5±90.6)%(n=104)和(6.0±83.4)%(n=99). 这说明平流层 MLS 与 CFH 水汽误差在仪器不确定

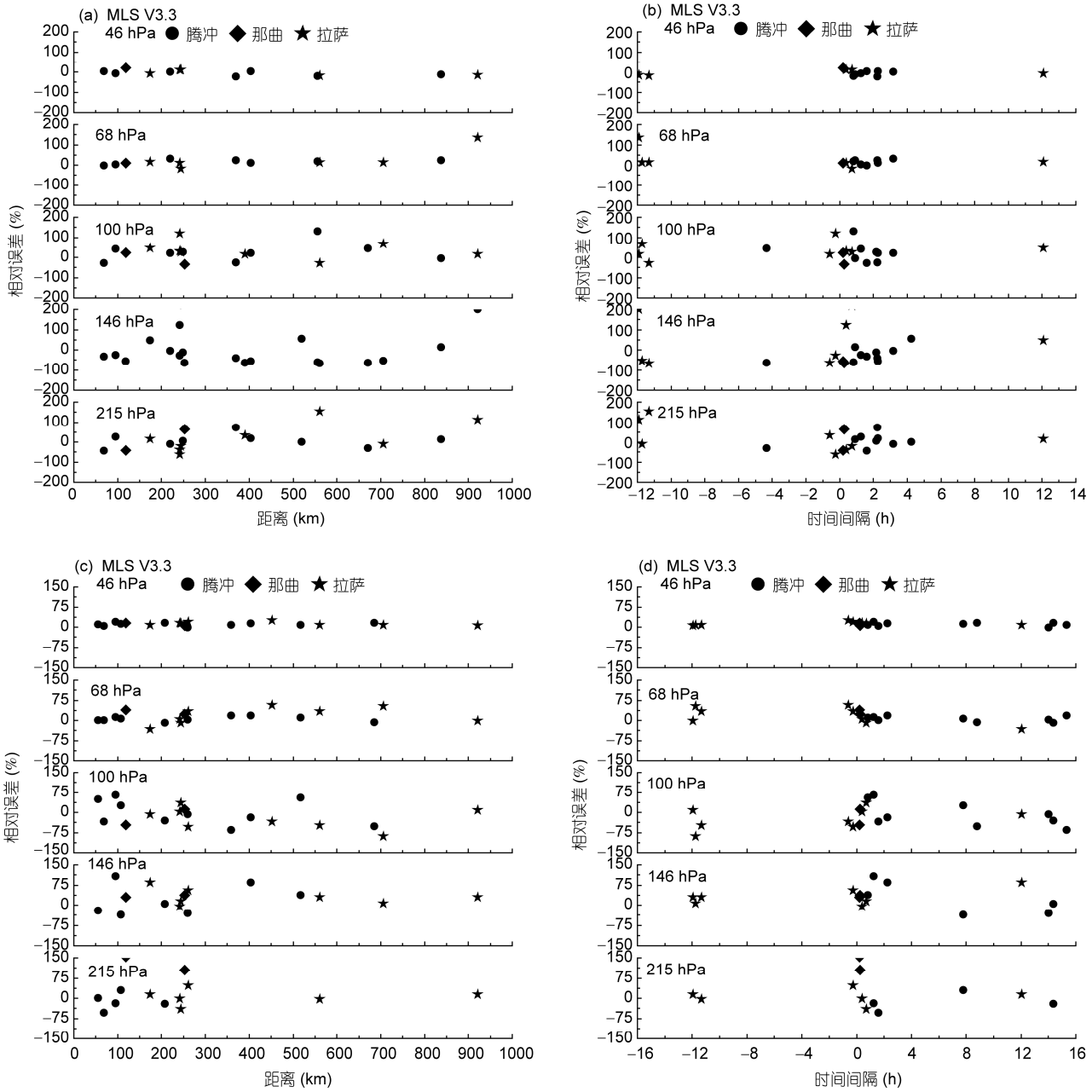

图 9　MLS 3.3 版与探空观测的相对误差随两种仪器测量空间((a), (c))和时间((b), (d))间隔的变化图

(a), (b) 代表水汽, (c), (d) 代表臭氧

度内, 对流层 MLS 水汽有显著的湿偏差. MLS 水汽误差及离散度在平流层皆较小, 在对流层上层较大.

(2) MLS 2.2版和3.3版臭氧产品的误差在100 hPa附近平均分别为(−3.5±54.4)%(n=27), (−8.7±41.6)%(n=38); 平流层为(11.7±16.3)%(n=135), (15.6±24.2)%(n=305); 对流层上层则分别为(18.0±79.1)%(n=47), (34.2±76.6)%(n=160). 200 hPa 以上 MLS 臭氧基本上高于探空测值. 腾冲、拉萨及那曲的 MLS 臭氧误差的垂直分布较一致, MLS 臭氧产品夏季在高原地区可能存在整体误差. 但青藏高原“臭氧低谷”期间, 拉萨地区 70 hPa 高度以下 MLS 臭氧浓度明显高于探空测值.

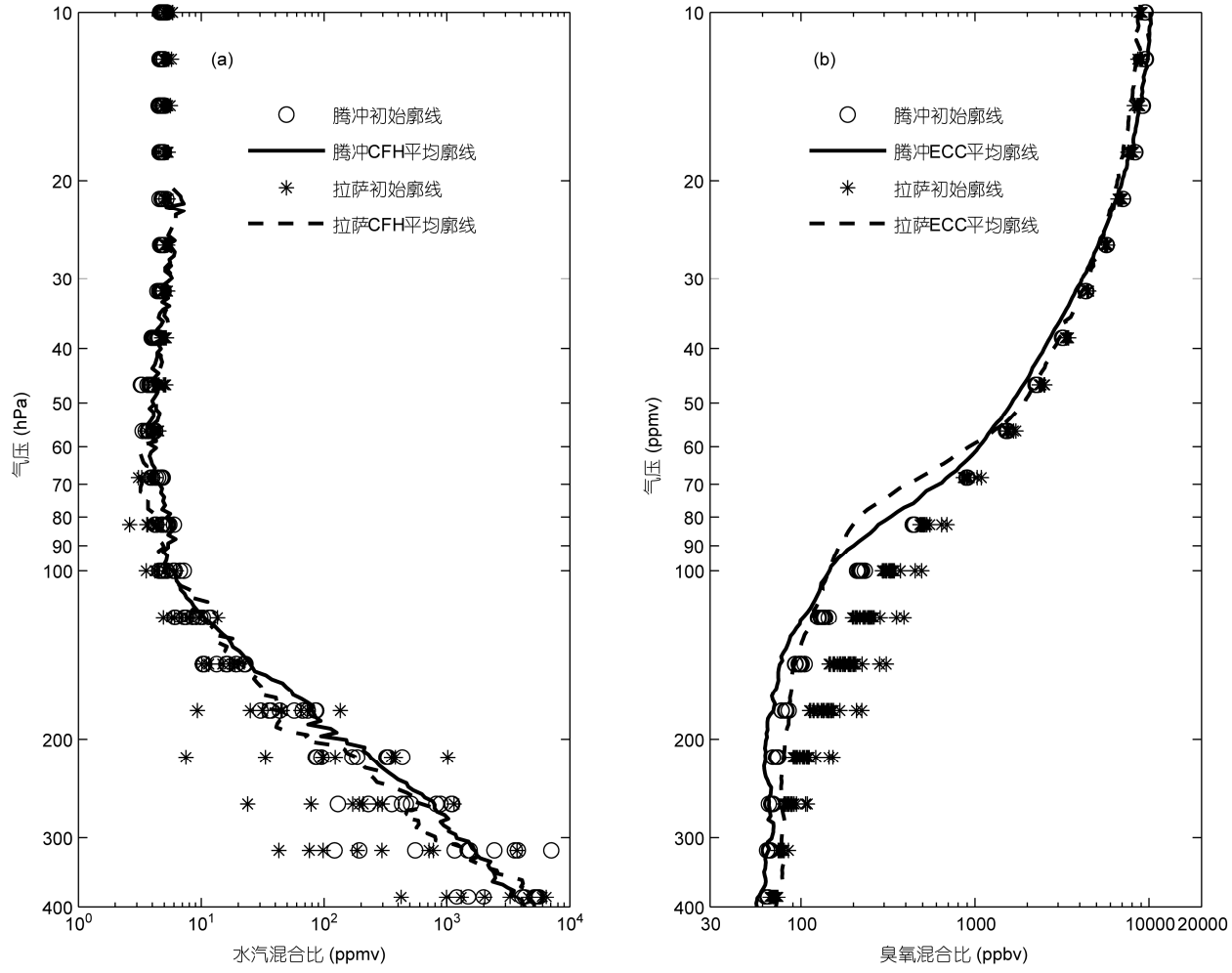

图 10　腾冲和拉萨地区探空观测的平均扩廓线及 MLS 3.3 版初始廓线的比较

(a) 水汽平均廓线; (b) 臭氧平均廓线

(3) MLS 3.3 版产品虽然提高了臭氧和水汽的垂直分辨率, 但其产品灵敏度(相对于探空测值的变化)并没有提高. 2.2 版和 3.3 版水汽的精度比探空平均分别低 40%和 46%, 而臭氧的精度则比探空平均分别低 42%和 44%. 水汽、臭氧在大气中垂直分布对 MLS 产品的灵敏度有一定影响. 水汽浓度在对流层低层高值和平流层较小的变化幅度使得 MLS 水汽在这两个高度的灵敏度明显地高于对流层顶附近; 而 MLS 臭氧产品的灵敏度则在平流层是最高的.

(4) MLS 水汽或臭氧廓线的误差与探空和卫星过境期间的时、空间隔差异的相关性不明显. MLS 反演过程中的水汽、臭氧等初始廓线与实际测量平均结果的明显差异是否会对 MLS 廓线产品的精度有一定的影响需要进一步研究.

致谢　本观测工作得到云南省腾冲县气象局、西藏自治区那曲气象局以及拉萨市气象局的支持. 在云南腾冲的观测还得到了云南大学王卫国教授及昆明观象台帮助, 马金参加了云南腾冲观测.

参考文献

毕云, 陈月娟, 周任君,等. 2008. 青藏高原上空 H_2O 和 CH_4 的分布和变化趋势分析. 高原气象, 27: 249–258

陈月娟, 施春华. 2005. 从 HALOE 资料看青藏高原上空 HCl 分布及其与 O_3 的关系. 高原气象, 24: 1–8
颜晓露, 郑向东, 李蔚, 等. 2012. 两种探空仪观测湿度垂直分布及其应用比较. 应用气象学报, 23: 433–440
郑向东, 汤洁, 周秀骥, 等. 2000. 拉萨地区 1998 年夏季臭氧总量及垂直廓线的观测研究. 应用气象学报, 11: 173–179
周秀骥, 罗超, 李维亮, 等. 1995. 中国地区臭氧总量变化与青藏高原低值中心. 科学通报, 40: 1396–1398
Ahmad S P, Waters J W, Johnson J E, et al. 2006. Atmospheric composition data products from the EOS Aura MLS. Eighth Conference on Atmospheric Chemistry, P1.8
Berthet G, Renard J B, Ghysels M, et al. 2013. Balloon-borne observations of mid-latitude stratospheric water vapour: Comparisons with HALOE and MLS satellite data. J Atmos Chem 70: 197–219
Bian J, Gettelman A, Chen H, et al. 2007. Validation of satellite ozone profile retrievals using Beijing ozonesonde data. J Geophys Res, 112: D06305, doi: 10.1029/2006JD007502
Feng L, Brugge R, Hólm E V, et al. 2008. Four-dimensional variational assimilation of ozone profiles from the Microwave Limb Sounder on the Aura satellite. J Geophys Res, 113, doi: 10.1029/2007JD009121
Froidevaux L, Livesey N J, Read W G, et al. 2006. Early validation analyses of atmospheric profiles from EOS MLS on the Aura satellite. IEEE Trans Geosci Remote Sensing, 44: 1106–1121
Fu R, Hu Y, Wright J S, et al. 2006. Short circuit of water vapor and polluted air to the global stratosphere by convective transport over the Tibetan Plateau. Proc Natl Acad Sci USA, 103: 5664–5669
Gettelman A, Kinnison D E, Dunkerton T J, et al. 2004. Impact of monsoon circulations on the upper troposphere and low stratosphere. J Geophys Res, 109: D22101, doi: 10.1029/2004JD004878
Hurst D F, Oltmans S J, Vömel H, et al. 2011. Stratospheric water vapor trends over Boulder, Colorado: Analysis of the 30 year Boulder record. J Geophys Res, 116, doi: 10.1029/2010JD015065
Jiang Y B, Froidevaux L, Lambert A, et al. 2007. Validation of Aura Microwave Limb Sounder ozone by ozonesonde and lidar measurements. J Geophys Res, 112, doi: 10.1029/2007JD008776
Komhyr W D, Barnes R A, Brothers G B, et al. 1995. Electrochemical concentration cell ozonesonde performance evaluation during STOIC 1989. J Geophys Res, 100: 9231–9244
Liu X, Bhartia P K, Chance K, et al. 2010. Validation of Ozone Monitoring Instrument (OMI) ozone profiles and stratospheric ozone columns with Microwave Limb Sounder(MLS) measurements. Atmos Chem Phys, 10: 2539–2549
Livesey N J, Read W G, Froidevaux L, et al. 2011. Version 3.3 Level 2 data quality and description document. JPL D-33509
Livesey N J, Snyder W V, Read W G, et al. 2006. Retrieval algorithms for the EOS Microwave Limb Sounder (MLS). IEEE Trans Geosci Remote Sensing, 44: 1144–1155
McPeters R D, Labow G J, Logan J A. 2007. Ozone climatological profiles for satellite retrieval algorithms. J Geophys Res, 112, doi: 10.1029/2005JD006823
Randel W J, Park M, Emmons L, et al. 2010. Asian monsoon transport of pollution to the stratosphere. Science, 328: 611–613
Pan L L, Paulik L C, Honomichl S B, et al. 2014. Identification of the tropical tropopause transition layer using the ozone-water vapor relationship. J Geophys Res, doi: 10.1002/2013JD020558
Smit H G J, Straeter W, Johnson B J, et al. 2007. Assessment of the performance of ECC-ozonesondes under quasi-flight conditions in the environmental simulation chamber: Insights from the Juelich Ozone Sonde Intercomparison Experiment (JOSIE). J Geophys Res, 112: D19306, doi:10.1029/2006JD007308
Solomon S, Rosenlof K H, Portmann R W, et al. 2010. Contributions of stratospheric water vapor to decadal changes in the rate of global warming. Science, 327: 1219–1223
Thornton D C, Niazy N, 1982. Sources of background current in the ECC-ozonesonde: Implication for total ozone measurements. J Geophys Res, 87: 8943–8950.
Vömel H, David D E, Smith K. 2007a. Accuracy of tropospheric and stratospheric water vapor measurements by the cryogenic frost point hygrometer: Instrumental details and observations. J Geophys Res, 112, doi: 10.1029/2006JD007224
Vömel H, Barnes J E, Forno R, et al. 2007b. Validation of Aura Microwave Limb Sounder water vapor by balloon-borne Cryogenic Frost point Hygrometer measurements. J Geophys Res, 112, doi: 10.1029/2007JD008698
Waters J W, Read W G, Froidevaux L, et al. 1999. The UARS and EOS Microwave Limb Sounder (MLS) experiments. J Atmos Sci, 56: 194–217
Waters J W, Froidevaux L, Harwood R S, et al. 2006. The Earth Observing System Microwave Limb Sounder (EOS MLS) on the Aura satellite. IEEE Trans Geosci Remote Sensing, 44: 1075–1092
Xu X, Lu C, Shi X, et al. 2008. World water tower: An atmospheric perspective. Geophys Res Lett, 35, doi: 10.1029/ 2008GL03586