

刘寅. 2014. FY-3A 气象卫星臭氧总量数据的质量控制方案及其在台风 Tembin (2012) 和 Isaac (2012) 中的应用 [J]. 大气科学, 38 (6): 1066–1078, doi: 10.3878/j.issn.1006-9895.1403.13224. Liu Yin. 2014. Quality control of FY-3A total column ozone and its application in typhoons Tembin (2012) and Isaac (2012) [J]. Chinese Journal of Atmospheric Sciences (in Chinese), 38 (6): 1066–1078.

FY-3A 气象卫星臭氧总量数据的质量控制方案及其在台风 Tembin (2012) 和 Isaac (2012) 中的应用

刘寅^{1,2}

1 南京信息工程大学资料同化研究与应用中心, 南京 210044

2 南京信息工程大学气象灾害省部共建教育部重点实验室, 南京 210044

摘 要 我国第二代极轨气象卫星“风云三号”A 星 (FY-3A) 上搭载的紫外臭氧总量探测仪 (Total Ozone Unit, TOU) 每天可以提供一次覆盖全球的臭氧总量观测。为了在数值预报中应用 TOU 的臭氧资料, 从资料同化角度发展了一套质量控制方案。首先基于臭氧总量和平均位势涡度的高相关性建立了逐日动态更新的臭氧线性回归预报模型, 然后使用双权重算法对臭氧资料进行质量控制。将该质量控制方案应用于台风 Tembin (2012) 和 Isaac (2012) 个例, 试验结果说明该方案可以体现出臭氧总量和平均位势涡度之间相关关系的逐日变化, 识别出的离群资料百分比随时间变化较稳定, 可以保留原始资料的主体信息, 并且显著降低了原始资料的标准差。同时, 质量控制后的臭氧数据与统计拟合量更加一致, 观测减拟合的概率密度函数分布形式也更接近高斯分布, 有利于后续的资料同化。

关键词 紫外臭氧总量探测仪 臭氧总量 质量控制 资料同化

文章编号 1006-9895(2014)06-1066-13

中图分类号 P413

文献标识码 A

doi:10.3878/j.issn.1006-9895.1403.13224

Quality Control of FY-3A Total Column Ozone and Its Application in Typhoons Tembin (2012) and Isaac (2012)

LIU Yin^{1,2}

1 Center for Data Assimilation Research and Applications, Nanjing University of Information Science & Technology, Nanjing 210044

2 Key Laboratory of Meteorological Disaster of Ministry of Education, Nanjing University of Information Science & Technology, Nanjing 210044

Abstract The Total Ozone Unit (TOU) on board the second-generation polar orbiting meteorological satellite of China, Fengyun-3A (FY-3A), provides once-daily global total ozone observations. To apply the TOU ozone data in numerical weather prediction, a quality control scheme is developed, viewed from the assimilation point. In the first step, a daily updated linear regression model, which links the total column ozone to the mean potential vorticity (MPV), is established. Following this step, the biweight algorithm is applied to remove the outliers. Numerical results implementing the proposed quality control scheme in typhoon Tembin (2012) and Isaac (2012) reflect daily variations of correlation between total ozone and MPV. The total percentage of outliers identified by this scheme is highly stable with the change of time, and the main information of ozone data is maintained whereas the standard deviation is reduced significantly. In addition, the ozone data after quality control are more consistent with the statistical fitting variable. The distribution of the

收稿日期 2013-07-23, 2014-03-11 收修定稿

资助项目 公益性行业 (气象) 科研专项 GYHY201406008, 国家重点基础研究发展计划 (973 计划) 项目 2010CB951600, 江苏省普通高校研究生科研创新计划项目 CXZZ13_0506、CXZZ12_0488, 江苏高校优势学科建设工程资助项目 PAPP

作者简介 刘寅, 男, 1986 年出生, 博士研究生, 主要从事卫星臭氧资料的质量控制与同化研究。E-mail: liuyin200421@163.com

observed-minus-fitting Probability Density Function becomes nearly Gaussian, which is conducive to data assimilation.

Keywords TOU, Total ozone, Quality control, Data assimilation

1 引言

臭氧是一种大气微量气体,它不仅对人类和地表生物的生存有重要影响,同时还是影响对流层—平流层大气动力、热力、辐射、化学等过程的重要成分之一。臭氧浓度的变化与天气尺度的波动密切相关,它的变化往往反映了天气气候系统的异常,所以臭氧是天气气候系统重要的示踪气体(郭世昌等,2007)。早期关于臭氧的研究都是基于有限探空气球测量的臭氧数据, Normand (1953) 和 Ohring and Muench (1960) 首先发现地面观测站点 100 hPa 等压面上的臭氧浓度变化与温度、位势高度和经向风分量的变化具有较高的相关性。随后, Shapiro et al. (1982) 和 Davis et al. (1999) 指出对流层顶附近的臭氧浓度包含了天气尺度和中尺度的显著特征信息,高层的槽脊强弱与臭氧总含量具有很强的相关性。王庚辰等(2006)发现北京地区臭氧浓度发生突变的层次始终处于对流层顶下方约 0.9 km 高度处,对流层顶高度对上对流层和下平流层区域内大气臭氧含量有重要影响。由于臭氧探空测量仪缺乏时空连续性,使得近年来的卫星观测仪器有了更多的应用前景。Zou and Wu (2005) 利用美国的臭氧观测光谱仪 (Total Ozone Mapping Spectrometer, TOMS) 卫星臭氧资料分析了台风^①和臭氧分布的关系,发现臭氧低值中心与台风中心有较好的对应关系。Tian et al. (2007) 利用 26 年的卫星监测臭氧资料,发现臭氧的季节内变化东太平洋比较明显,并研究了副热带的臭氧异常与赤道附近热带大气季节内振荡 (Madden-Julian Oscillation, MJO) 的关系。Jiang et al. (2008) 利用主分量分析方法对多年卫星臭氧资料进行分析,发现北半球中纬度臭氧的年际变化与热带明显不同,证实中纬度臭氧的年际变化与大气环流密切相关。郭栋等(2012)结合 TOMS 等多种臭氧资料,对经向、纬向和垂直方向的臭氧输送进行分析,明确了南亚高压对青藏高原臭氧谷的具体动力作用。

其中,臭氧与位势涡度的关系得到了国外学者的较多关注。Danielsen (1968) 首先发现,对流层

顶附近的臭氧浓度与对流层的位势涡度在小尺度范围内的分布形式较为一致,两者具有很好的相关性。随后 Vaughan and Price (1991) 的研究则表明,随着时间和纬度的变化,这种相关性在大尺度范围内仍然比较稳定。Allaart et al. (1993) 和 Folkins and Appenzeller (1996) 分析了臭氧总量和平均位势涡度的关系,并指出两者之间存在相关性,在冬季和春季尤其明显。Davis et al. (1999) 基于臭氧总量与平均位势涡度的高相关性,成功地从 TOMS 卫星臭氧资料中反演出了中纬度风场,实现了臭氧资料的定量应用。臭氧总量与平均位势涡度的密切关系使臭氧资料在数值模式中的应用成为可能。Jang et al. (2003) 利用臭氧总量与平均位势涡度的高相关性建立了观测算子,首次将 TOMS 臭氧资料同化到冬季风暴中,结果表明在常规资料同化基础上加入臭氧资料可以改善中纬度风暴的路径和强度预报。Zou and Wu (2005) 指出在受热带天气影响为主的台风中,利用 TOMS 臭氧总量资料可以有效改进台风的中高层位势涡度分布形式,卫星臭氧资料在台风初始化和资料同化中有着巨大的潜力。Wu and Zou (2008) 随后将臭氧数据按 >293 DU 和 <293 DU 进行分组,建立了一个双区域线性观测算子并在台风预报系统中同化 TOMS 臭氧资料,发现同化臭氧资料可以调整引导气流,从而显著提高了台风路径预测的准确性。

另一方面,我国“风云三号”A 星 (FY-3A) 上搭载的我国第一台紫外臭氧总量探测仪 (Total Ozone Unit, TOU) 精度较高,其臭氧观测资料毫不逊色于国际同类卫星臭氧总量产品,可以成功实现对全球臭氧总量分布的连续监测(王咏梅等,2009;王维和等,2010;刘年庆等,2011;王维和等,2011)。可以预见,我国 FY-3A TOU 臭氧资料也可以在数值天气预报尤其是台风预报中发挥重要作用。然而,正如同其他常规和非常规气象观测资料,臭氧资料在进入数值模式之前必须经过严格的质量控制。Jang et al. (2003) 在冬季风暴中同化 TOMS 臭氧资料时并未对臭氧资料进行质量控制,这会导致偏差较大的资料对臭氧总量和平均位势涡度的线性回归模型精度产生较大影响,从而会影响到同化后初始场的准确性。Zou and Wu (2005)

^① 在北半球,东太平洋和大西洋海域上生成的风力达到 12 级的热带气旋称之为飓风,而西太平洋海域则称之为台风,本文中将两者统称为台风。

和 Wu and Zou (2008) 将研究时段内的所有臭氧资料按数值大小分为两组, 得到分组的线性回归模型, 再去除掉大于 1.4 倍标准差的臭氧资料, 最后对保留的资料重新统计拟合, 得到研究时段内的分组线性回归模型。这样的方法虽然可以提高线性回归模型的精度, 但是在整个研究时段内线性回归模型的系数始终无变化, 不能体现出臭氧总量和平均位势涡度之间相关关系的逐日变化。因此, 在同化卫星臭氧资料之前, 发展一套合理有效的质量控制方案是十分必要的。该方案既要能够剔除观测误差较大的臭氧资料, 又要保留包含逐日变化信息的臭氧资料, 同时还要将观测算子无法模拟好的资料或者模式分辨率无法分辨的小尺度变化资料去除。本文以 FY-3A TOU 臭氧资料为例, 尝试利用双权重算法发展出一套针对臭氧资料同化的质量控制方案, 并在台风个例中检验该质量控制方案的有效性, 以期为我国风云系列卫星臭氧资料的数值应用提供有益借鉴。

2 个例概况

图 1 是本文所选取的 2012 年台风个例 Tembin 和 Isaac 的移动路径图。台风 Tembin 由 2012 年 8 月 18 日至 19 日在太平洋上形成的第 15 号热带低压发展而来, 较高的海温、低空风切变和有利的环流背景使其快速发展, 至 8 月 20 日已经成为强台风。联合台风警报中心 (Joint Typhoon Warning Center, JTWC) 的记录表明, Tembin 在 8 月 19 日 06:00 (协调世界时, 下同) 至 8 月 20 日 06:00 的 24 小时内迅速增强, 最大风速 (1 分钟平均风速) 由 64.8 km h^{-1} 上升至 175.9 km h^{-1} , 风眼半径达到

了 37 km 。8 月 21 日, Tembin 的最大风速已达到 213 km h^{-1} , 附近高压脊的作用使其向西移动, 同时由于热带对流层上部槽的影响, 其强度开始减弱。借助着处于南高东侧和东亚大槽前的优势, Tembin 在 8 月 23 日获得了再一次增强的机会, 美国国家海洋和大气管理局 (National Oceanic and Atmospheric Administration, NOAA) 提供的卫星图像上 Tembin 出现了更加清晰的风眼。当日的 19:00, Tembin 在台湾屏东县牡丹乡附近登陆, 并持续向西南偏西方向移动。Tembin 到达台湾海峡后, 与热带气旋布拉万产生藤原效应, 从而绕回巴士海峡后沿台湾东部海面北上。直至 8 月 28 日, Tembin 经过台湾恒春东南面海域, 强度降为热带风暴。Tembin 于 8 月 30 日在韩国全罗南道南部沿海登陆, 登陆时中心附近最大风力有 9 级, 中心最低气压为 990 hPa 。

Isaac 在 2012 年 8 月 21 日 06:00 只是位于大西洋背风群岛东部的热带低压, 形成后 12 小时内迅速发展为热带风暴。深厚的副热带高压脊使 Isaac 在随后的两天内快速向西移动, 风暴的中心于 8 月 22 日 18:00 至 8 月 23 日 00:00 迅速穿越了背风群岛和加勒比海东部。NOAA 的卫星观测资料显示在 8 月 25 日 06:00 登陆海地南海岸之前, Isaac 的内核得到了充分的发展并形成了风眼, 最大风速达到了 110 km h^{-1} 。随后 Isaac 迅速穿过狭窄的海地西南半岛, 在古巴再次登陆。进入佛罗里达海峡后, Isaac 给佛罗里达南部带来了范围宽广的雨带, 但是中层大气的干空气使其无法迅速增强。Isaac 抵达墨西哥湾后逐渐增强并于 8 月 28 日升级为一级台风, 当天在密西西比河河口处登陆时, 最大风速达到 130

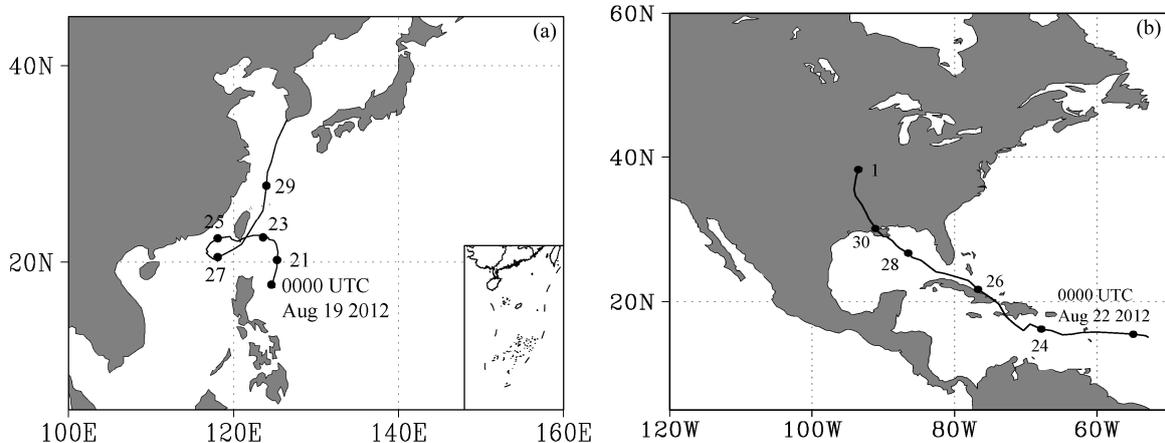


图 1 台风 (a) Tembin 和 (b) Isaac 的移动路径

Fig. 1 Observed tracks of typhoons (a) Tembin and (b) Isaac

km h⁻¹。Isaac 维持此强度直至 8 月 29 日 17:00, 随后减弱为热带风暴。随后的几天, Isaac 继续北移并减弱为热带低压, 直至 9 月 1 日天气过程结束。

基于 Tembin 和 Isaac 的移动路径, 本文试验中 Tembin 的研究区域选取为 (5°N~45°N, 100°E~160°E), 研究时间为 2012 年 8 月 19 日 00:00 至 8 月 30 日 00:00。Isaac 的研究区域选取为 (5°N~60°N, 120°W~50°W), 研究时间为 2012 年 8 月 21 日 00:00 至 9 月 1 日 00:00。

3 数据简介

FY-3A 是我国第二代极轨气象卫星, 轨道高度和倾角分别为 831 km 和 98.81°, 搭载了包括 TOU 在内的 11 种仪器, 可以对大气温度、湿度、臭氧总量、臭氧垂直廓线、地表特征参数和空间粒子等进行观测 (杨军等, 2009)。TOU 是一台采用固定光栅、狭缝阵列式 Ebert-Fastie 单光栅光谱仪系统的分光辐射探测仪, 每天可获得一幅全球臭氧总量图像。TOU 在卫星轨道平面的垂直方向对地扫描, 扫描范围为 ±54°, 瞬间视场角约为 3.6°, 星下点的地面分辨率约为 52.6 km, 含有对地观测、辐射定标、波长检测三种工作模式 (王维和等, 2010)。

TOU 的数据反演算法是基于波长对算法, 首先从臭氧的赫金斯吸收带中选择 6 个波长 (表 1) 来测量后向散射和太阳辐照度, 然后找出对臭氧吸收有较大差异的 2 个通道, 最后根据臭氧在这两个波长上的后向散射强度差与臭氧总量的密切关系来反演大气臭氧总量。TOU 的反演算法与 TOMS 第 7 版本基本一致, 但是略有区别。最主要的不同点是 TOU 采用不同的通道组合来计算不同的纬度带的臭氧总量初估值, 再分别订正辐射定标的影响, 从而计算出臭氧总量的精确值 (江芳等, 2012)。与国际同类卫星臭氧总量产品及地面观测结果的对比分析表明, TOU 的臭氧观测数据相对均方根偏差在大多数情况下均小于 5%, 优于产品设计指标 (王维和等, 2010)。FY-3A TOU 可以监测到北极地区臭氧低值事件发生发展的全过程 (刘年庆等, 2011), 其数据产品具有较高的可信度, 是相关诊断分析的重要依据 (王维和等, 2011)。TOU 的标准臭氧产品可以从国家卫星气象中心风云卫星遥感数据服务网 (<http://fy3.satellite.cma.gov.cn/portalsite/default.aspx>) 下载, 产品中提供了数据质

量标记, 主要是识别出由于不良的观测输入数据和反演算法本身的限制所造成的无效或者低质量的臭氧反演值。本文所发展的质量控制方案使用通过数据质量标记的轨道产品。

表 1 FY-3A TOU 通道性能参数

Table 1 Channel characteristics of the Fengyun-3A (FY-3A) TOU

通道	带宽/nm	中心波长/nm
1	1.0~1.3	308.68±0.15
2	1.0~1.3	312.59±0.15
3	1.0~1.3	317.61±0.15
4	1.0~1.3	322.40±0.15
5	1.0~1.3	331.31±0.15
6	1.0~1.3	360.11±0.25

4 质量控制方案

目前的资料同化系统中大多采用阈值检查对观测资料进行质量控制, 即剔除掉 $|y^o - y^b| > k\sigma$ (y 是观测资料种类, y^o 是实际观测值, y^b 是背景场模拟值, k 是常数, σ 是标准差) 的那些资料。然而, 偏差较大的离群值会对资料样本的平均值和标准差产生很大影响, 从而会影响到离群资料的识别。为了减小这种影响, 可以采用双权重算法, 通过计算 $O-B$ (y^o 记为 O , y^b 记为 B) 的双权重平均值和双权重标准差来识别离群资料 (Lanzante, 1996; Zou and Zeng, 2006; Carrier et al., 2007)。

首先计算每一个资料点 i ($i=1, 2, 3, \dots$) 的权重函数 w_i :

$$w_i = \frac{(y^o - y^b)_i - M}{c \times M_{AD}}, \quad (1)$$

式中, M 是 $(y^o - y^b)_i$ 的中位数, M_{AD} 是绝对偏差中位数 (即 $|(y^o - y^b)_i - M|$ 的中位数), c 是常数, 本文中 c 取为 7.5。如果 $|w_i| > 1.0$, 取 $w_i = 1.0$ 。随后, 计算双权重平均值 $y^o - y^{b\text{bw}}$ 和双权重标准差 $\sigma^{\text{bw}}(y^o - y^b)$:

$$y^o - y^{b\text{bw}} = M + \frac{\sum_{i=1}^n [(y^o - y^b)_i - M](1 - w_i^2)^2}{\sum_{i=1}^n (1 - w_i^2)^2}, \quad (2)$$

$$\sigma^{\text{bw}}(y^o - y^b) = \frac{\left\{ n \sum_{i=1}^n [(y^o - y^b)_i - M]^2 (1 - w_i^2)^4 \right\}^{0.5}}{\left| \sum_{i=1}^n (1 - w_i^2)(1 - 5w_i^2) \right|}. \quad (3)$$

最后，离群资料可以通过计算每个资料点的 Z 值来确定：

$$Z_i = \frac{(y^o - y^b)_i - \overline{(y^o - y^b)^{bw}}}{\sigma^{bw}(y^o - y^b)} \geq Z_{qc}, \quad (4)$$

其中， Z_{qc} 是设置的临界值，用来筛选离群资料。Qin et al. (2010)、Xu et al. (2013) 和 Li and Zou (2013) 的研究表明利用双权重算法和再分析背景场资料可以有效识别出常规气象要素中的离群值。由于臭氧总量 (Ω) 与模式变量之间并没有直接的联系，因此应用双权重算法时需要通过经验统计关系来建立两者的联系。

Jang et al. (2003) 利用 MM5 (The Fifth-Generation NCAR/Penn State Mesoscale Model) 模式模拟了一次美国的冬季风暴，并在高纬度、中纬度和低纬度地区分别分析了三种不同分辨率的平均位势涡度 (Mean Potential Vorticity, MPV) \bar{q} 与 TOMS 臭氧总量的相关性，发现在不同分辨率的结果中两者在中纬度始终高度相关，相关系数高达 0.7~0.8，由此归纳出如下关系式：

$$\Omega = \alpha \times \bar{q} + \beta, \quad (5)$$

式 (5) 中的 α 和 β 是常数。 \bar{q} 可以通过下式计算：

$$\bar{q} = \frac{1}{p_1 - p_2} \int_{p_1}^{p_2} \frac{1}{\rho} \eta \cdot \nabla \theta dp, \quad (6)$$

其中， $p_1=400$ hPa， $p_2=50$ hPa， ρ 是大气的密度， η 是绝对涡度， θ 是位温。 \bar{q} 的单位是 PVU ($1 \text{ PVU} = 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ K kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$)。同时，Jang et al. (2003) 研究了平均位势涡度和臭氧总量相关性的逐日变化，指出两者的高相关性在整个风暴期间都存在，

只是在风暴的强盛期会略有下降。随后，Zou and Wu (2005) 和 Wu and Zou (2008) 研究了一次台风个例中平均位势涡度和臭氧总量的相关性，在对台风期间研究区域内的所有数据进行统计后，发现两者的相关系数高达 0.818，而式 (5) 的关系在台风演化的不同阶段都比较稳定。但是，Zou and Wu (2005) 和 Wu and Zou (2008) 也指出这种高相关性在台风的强盛期会受到影响，可以将所有的臭氧数据按 >293 DU 和 <293 DU 进行分组统计拟合，效果更好。Wang et al. (2012) 的研究则表明，在不同的台风个例中应用式 (5) 时， α 和 β 存在不同程度的逐日变化。为了进一步检验式 (5) 的关系在台风中的适用性，本文选取了 6 个台风个例 (表 2)，分别计算并得到台风期间 FY-3A TOU 臭氧数据与平均位势涡度的相关系数逐日变化曲线 (图 2)。其中，式 (6) 计算所需的气象参数可以从 $1^\circ \times 1^\circ$ 的 NCEP FNL 数据中获得。因为 FY-3A 在每天的 00:00 (12:00) 的 ± 3 小时时间窗口经过研究区域，所以分别选择 00:00 和 12:00 的 FNL 数据来计算平均位势涡度。另外，由于 FNL 数据与 TOU 臭氧总量产品的空间分辨率并不一致，因此本文利用 Cressman 方法将计算得到的平均位势涡度插值到臭氧数据点所在位置后再计算相关系数。从图 2 中可以看出，6 个台风个例中臭氧总量与平均位势涡度的相关系数虽然存在逐日变化，但是基本可以达到 0.7 左右，经检验两者之间存在显著的相关关系。另外，6 个台风个例中臭氧总量与平均位势涡度的空间分布图 (图略) 也表明两者有较好的对应关系。

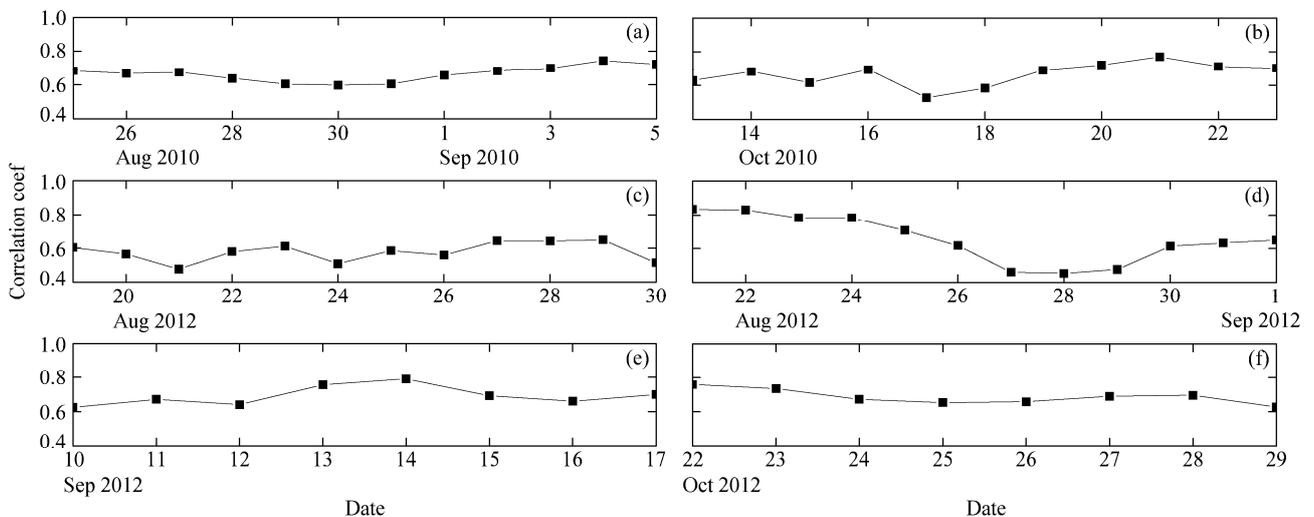


图 2 选取的 6 个台风中臭氧总量和平均位势涡度的相关系数逐日变化: (a) Earl; (b) Megi; (c) Tembin; (d) Isaac; (e) Sanba; (f) Sandy
Fig. 2 Daily variations of correlation between total ozone and MPV for the six selected typhoons: (a) Earl; (b) Megi; (c) Tembin; (d) Isaac; (e) Sanba; (f) Sandy

6 个台风个例的残差分析则表明, 残差点比较均匀地落在残差图的水平带状区域中, 相关指数 R^2 均超过 0.87, 这说明在台风中用式 (5) 来描述臭氧总量与平均位势涡度的关系是合适的。要在台风数值预报中实现臭氧信息的定量应用, 关键就是要精确刻画臭氧观测量和模式变量之间的变化关系。因此, 为了尽可能准确的描述台风演化的不同阶段中臭氧总量与平均位势涡度的关系, 本文使用式 (5) 来建立两者的关系, 随后使用逐日动态更新的方法来拟合 α 和 β 。

表 2 选取的 6 个台风的名称、时间、区域和强度分类
 Table 2 Names, time periods, horizontal domains, and Saffir-Simpson scale categories of the six selected typhoons

台风名称	时间	区域	强度分类
Earl	2010 年 8 月 25 日~9 月 5 日	5°N~60°N, 90°W~20°W	4
Megi	2010 年 10 月 13 日~10 月 23 日	5°N~45°N, 100°E~160°E	5
Tembin	2012 年 8 月 19 日~8 月 30 日	5°N~45°N, 100°E~160°E	4
Isaac	2012 年 8 月 21 日~9 月 1 日	5°N~60°N, 120°W~50°W	1
Sanba	2012 年 9 月 10 日~9 月 17 日	5°N~45°N, 100°E~160°E	5
Sandy	2012 年 10 月 22 日~10 月 29 日	5°N~45°N, 90°W~20°W	2

基于双权重算法和臭氧总量的线性回归模型, 本文的质量控制方案如下: (1) 利用线性回归模型对前 6 天的臭氧总量和平均位势涡度进行拟合获得 α 和 β ; (2) 结合当天的平均位势涡度, 计算出当天的臭氧总量模拟值 (Ω^b); (3) 使用双权重算法进行质量控制, 得到当天通过质量控制的臭氧数据; (4) 使用当天通过质量控制的臭氧资料, 并对后一天的臭氧资料应用步骤 (1) 至 (3); (5) 不断重复步骤 (4) 直至研究时间结束。另外, 本文个例的研究时间第一天的 α 和 β 由之前 6 天小于 3 倍 σ^{bw} 的资料统计得到。

5 数值结果

5.1 Z_{qc} 的选取

应用双权重算法对 FY-3A TOU 臭氧数据进行质量控制的关键点是如何选取合适的 Z_{qc} 。为了确定较为合适的 Z_{qc} 值, 针对两个个例设计了三组 ($Z_{qc}=1.0$, $Z_{qc}=1.5$, $Z_{qc}=2.0$) 质量控制试验。 Z_{qc} 值的选取主要从质量控制方案对 $O-B$ 的平均误差和标准差的影响和离群资料占总观测资料的数量百分比这两方面进行考虑。图 3 是三组试验 $O-B$ 的平均误差、标准差和离群资料百分比的逐

日变化曲线。可以发现, 在两个个例中 Z_{qc} 取不同的值时, 对于平均误差的改进较为一致, 对标准差的改进十分明显。 Z_{qc} 取 1.0 时, 标准差可以从 10 减小到 5 左右。 Z_{qc} 分别取 1.5 和 2.0 时, 标准差逐渐增大, 但是总体上都要低于原始数据的标准差。三组试验的离群资料的百分比表明, Z_{qc} 越小则识别出的离群资料越多, 当 Z_{qc} 取 2.0 时, 离群资料的百分比大约为 5%, 而当 Z_{qc} 取 1.0 时, 离群资料的百分比则达到了 30%。同时还可以发现, 使用双权重算法时取不同的 Z_{qc} , 识别出的离群资料百分比随日期变化都十分平稳, 这说明该方法剔除异常资料的效果较理想。根据经验一般去除 10% 左右的离群资料比较合理, Z_{qc} 取为 1.5 时, 可以保证离群资料百分比稳定在 12% 左右, 同时标准差较 $Z_{qc}=1.0$ 时只是略有增加, 可以达到质量控制的预期效果。综上所述, 本文的研究中 Z_{qc} 取为 1.5。

5.2 臭氧线性回归预报模型的评估

臭氧线性回归预报模型是将观测臭氧与模式变量联系起来的纽带, 其性能的优劣直接影响到质量控制结果。图 4 描述了 Tembin 和 Isaac 中臭氧线性回归模型斜率 α 和截距 β 的逐日变化。台风 Tembin 个例中, 统计得到的 α 在 2012 年 8 月 19 日至 8 月 30 日这段时间内变化比较平缓, 基本稳定在 6 左右, β 随时间的变化也较小, 说明在该个例中臭氧总量与平均位势涡度的相关关系随时间的变化比较稳定。而在台风 Isaac 中, α 和 β 随时间变化幅度较大, 表明有必要对臭氧总量与平均位势涡度的相关关系进行每日统计。综上所述, 两个台风个例中的 α 和 β 有较大差别, 应该分别建立逐日动态更新的臭氧线性回归模型, 以求准确描述臭氧总量和平均位势涡度的关系。

图 5 是 Tembin (2012 年 8 月 23 日 00:00) 和 Isaac (2012 年 8 月 29 日 12:00) 的臭氧总量与平均位势涡度散点图, 实线是拟合的线性回归预报方程, 两条虚线之间的数据表示通过 $Z_{qc}=1.5$ 的双权重算法。结果表明, 两个个例中拟合的线性回归预报方程都可以较好地描述臭氧总量与平均位势涡度的关系, 而基于线性回归模型的双权重算法在去除离群值的同时保留了臭氧数据的主体信息, 可以达到较好的质量控制效果。

5.3 质量控制前后的数据空间分布特征

质量控制前 TOU 观测的臭氧总量空间分布图

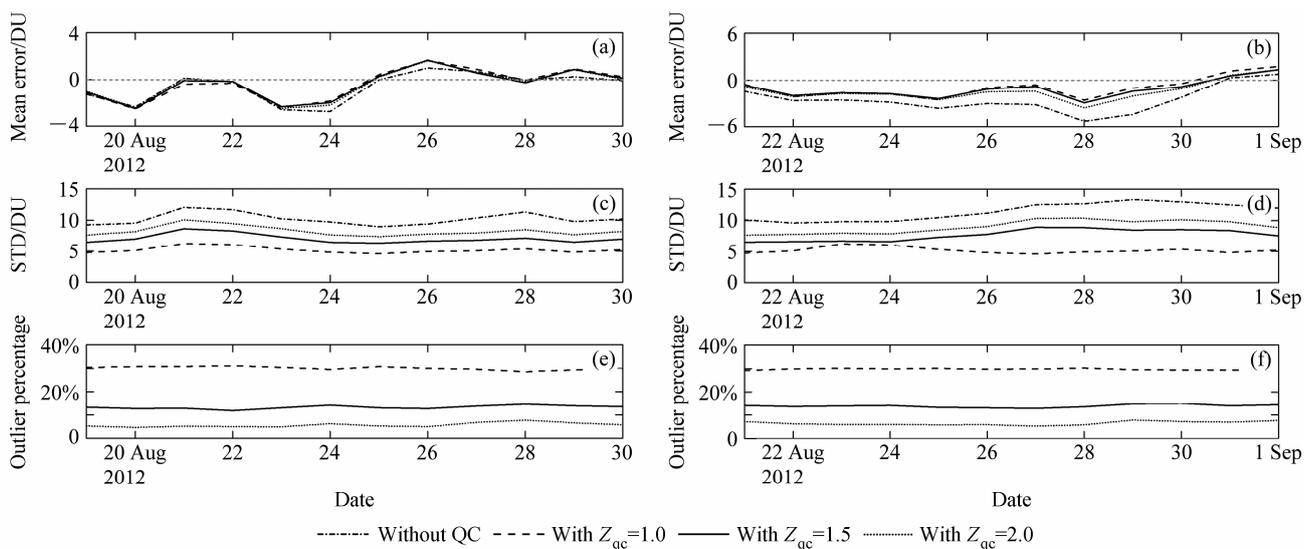


图3 Tembin (左列) 和 Isaac (右列) 个例中, 无质量控制和 Z_{qc} 取 1.0、1.5 和 2.0 时 $O-B$ 的平均误差、标准差和离群资料百分比的逐日变化
Fig. 3 Daily variations of mean errors, standard deviations, and outlier percentages of $O-B$ without quality control (QC), with $Z_{qc}=1.0$, $Z_{qc}=1.5$, and $Z_{qc}=2.0$ for Tembin (left) and Isaac (right)

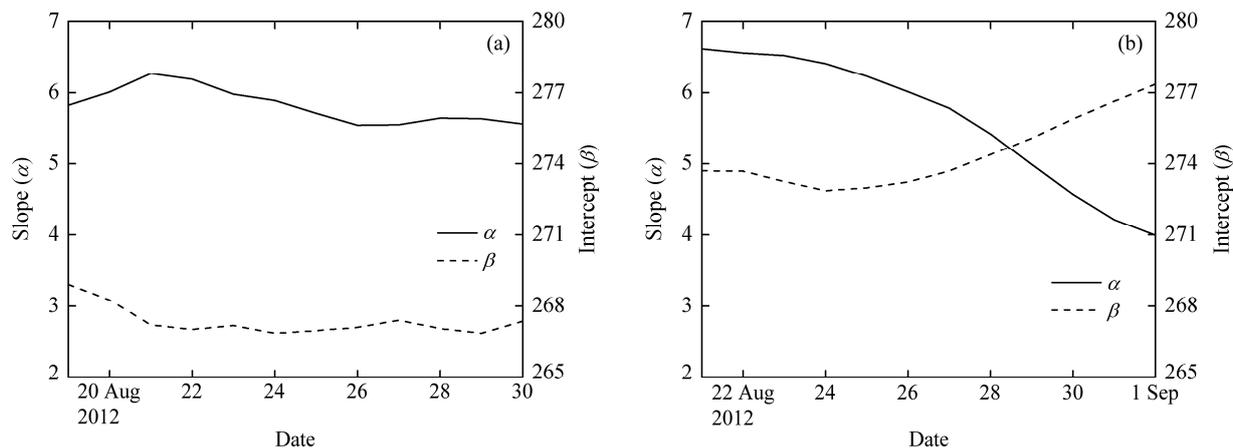


图4 (a) Tembin (2012年8月19~30日) 和 (b) Isaac (2012年8月21日至9月1日) 臭氧线性回归模型中 α 和 β 的逐日变化
Fig. 4 Daily variations of ozone linear regression coefficients α and β for (a) Tembin on 19-30 Aug 2012 and (b) Isaac from 21 Aug to 1 Sep 2012

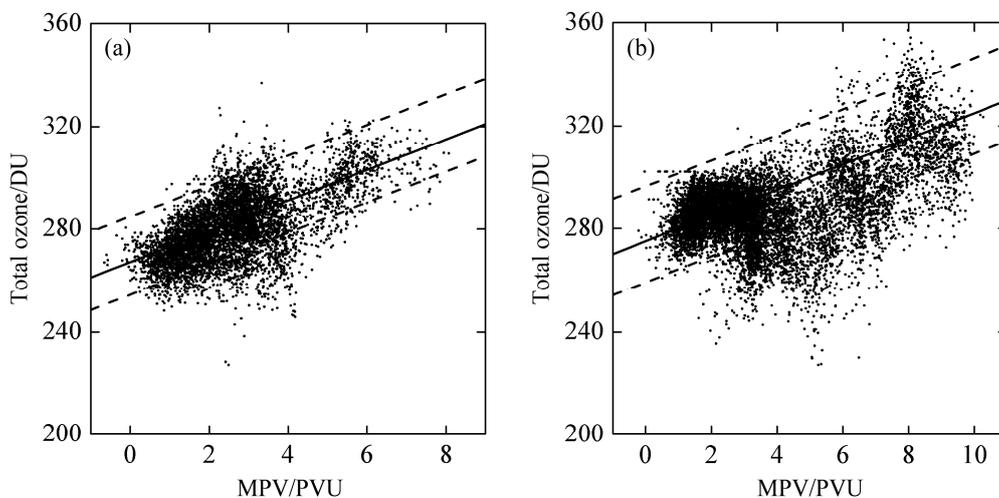


图5 (a) Tembin (2012年8月23日00:00) 和 (b) Isaac (2012年8月29日12:00) 的臭氧总量与平均位势厚度散点图 (虚线代表 $Z_{qc}=1.5$, 实线代表线性回归预报模型)
Fig. 5 Scatterplots of total ozone and MPV for (a) Tembin (at 0000 UTC 23 Aug 2012) and for (b) Isaac (at 1200 UTC 29 Aug 2012). $Z_{qc}=1.5$ is indicated by dashed lines and the linear regression model is represented by solid line

(图 6) 表明, 在 Tembin 和 Isaac 中, 臭氧总量的大值区与平均位势涡度的大值区对应关系较好, 而

在台风中心附近都存在较为明显的臭氧总量低值区域。两个个例 $O-B$ 差值的空间分布图则说明在

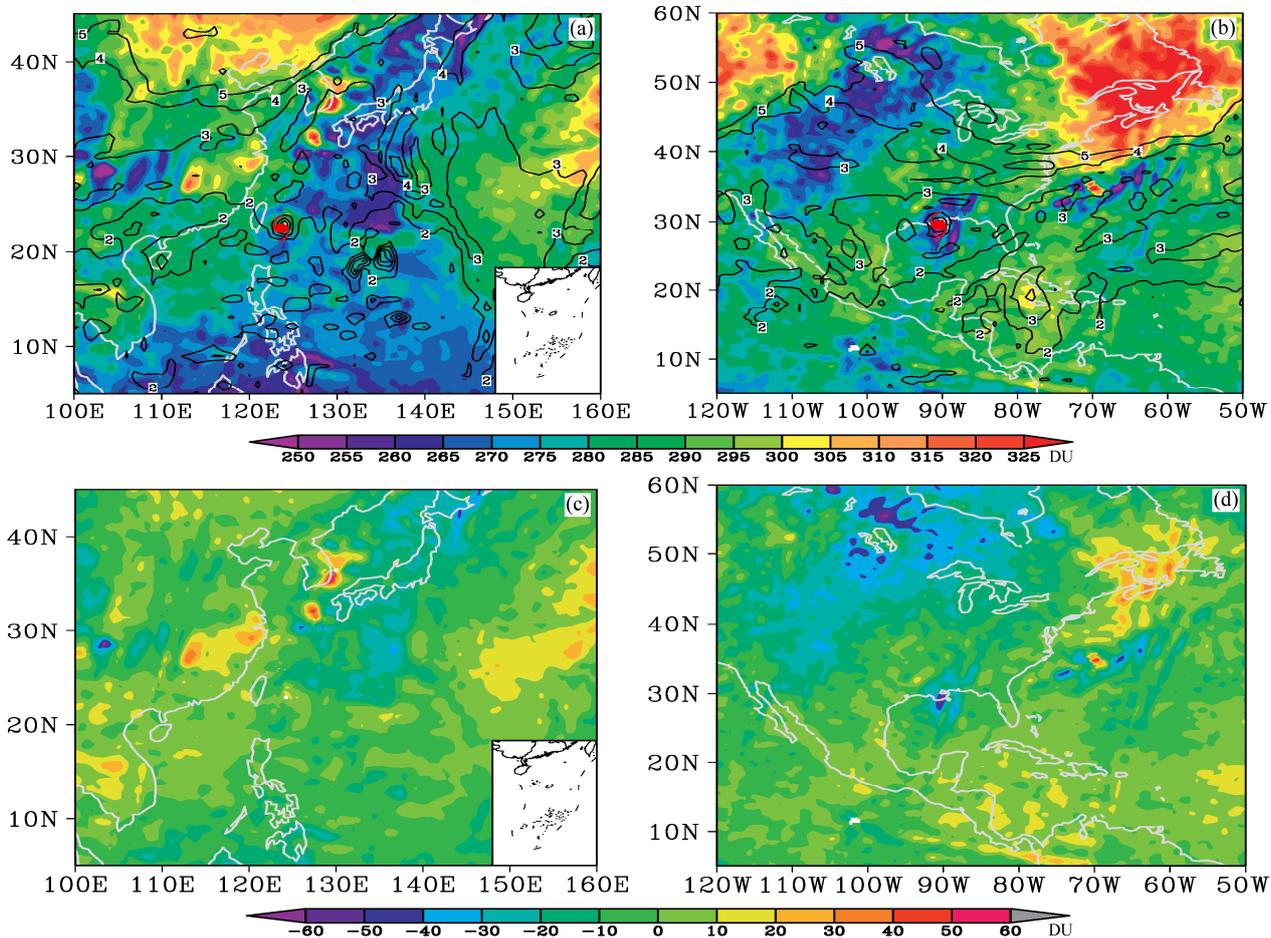


图 6 Tembin (2012 年 8 月 23 日 00:00, 左列) 和 Isaac (2012 年 8 月 29 日 12:00, 右列) 质量控制前 (a, b) 臭氧总量观测值与 (c, d) $O-B$ 的空间分布。红色台风符号代表台风的中心位置, 黑色实线是平均位势涡度的等值线 (单位: PVU)

Fig. 6 Spatial distribution of (a, b) total ozone and (c, d) $O-B$ before QC for Tembin (left) at 0000 UTC 23 Aug 2012 and Isaac (right) at 1200 UTC 29 Aug 2012. Red typhoon symbol represents the typhoon center, and black contour represents the MPV (unit: PVU)

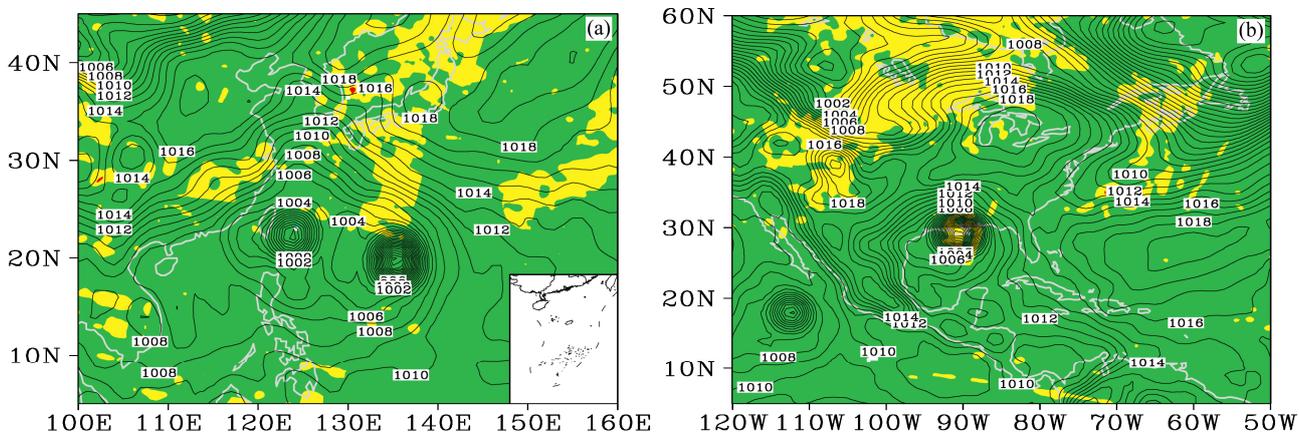


图 7 (a) Tembin (2012 年 8 月 23 日 00:00) 和 (b) Isaac (2012 年 8 月 29 日 12:00) 质量控制后离群值 (黄色点) 的空间分布 (黑色实线代表海平面气压, 单位: hPa)

Fig. 7 Spatial distribution of outliers removed by the QC scheme (yellow shading) for (a) Tembin at 0000 UTC 23 Aug 2012 and (b) Isaac at 1200 UTC 29 Aug 2012 (black contour represents sea level pressure, unit: hPa)

研究区域内观测臭氧与模拟臭氧的差值主要集中在 $-10\sim 10$ DU, 只在少数区域存在较大的正负偏差, 这也体现了臭氧线性回归模型较好的模拟能力。

经过质量控制后, Tembin 和 Isaac 中观测臭氧与模拟臭氧有较大差异的资料点(图 7)被识别出来。与图 5 对比, 可以发现识别出的离群资料主要属于负偏差, 叠加上海平面气压以后, 可以看出两个个例中大部分的离群值都集中在低压槽附近, 这可能是由于实际观测臭氧与海平面气压的位相差不同造成的。

Wang et al. (2012) 指出 AIRS (Atmospheric Infrared Sounder) 的业务质量控制方案会异常剔除台风中心附近的大量臭氧资料, 这将对基于臭氧资料同化的台风涡旋初始化和台风强度、路径预报产生不利影响。为了检验本文针对 FY-3A TOU 臭氧资料的质量控制方案是否存在上述问题, 选取质量控制后 Tembin 和 Isaac 初始、成熟和消亡阶段的臭氧总量数据, 并对其空间分布(图 8)进行分析。Tembin 和 Isaac 两个个例的结果都表明, 在台风不同的发展阶段, 通过质量控制的臭氧数据可以较好的覆盖研究区域, 并未出现某一区域大量数据被异常剔除的现象。另外, 随着 Tembin 和 Isaac 的移动, 位于台风中心及附近风速大值区的大部分臭氧资料得以保留, 这意味着反映台风演化过程的大部分臭氧资料仍可以被使用。因此, 通过质量控制的臭氧数据不但可以提供环境场信息, 而且包含了台风不同演变阶段的信息, 有利于后续的资料同化。

5.4 质量控制后的数据总体特征

上述的质量控制方案可以保持稳定的离群资料百分比, 同时可以有效降低臭氧数据的标准差(图 3)。为了进一步考察质量控制后的数据稳定性, 对 Tembin 和 Isaac 个例中质量控制前后的数据量以及剔除的数据量进行统计, 得到其研究时段内的逐日变化曲线(图 9)。质量控制前, 两个个例的臭氧数据量随时间变化都较稳定, 质量控制方案剔除的资料量正如上文所分析, 逐日变化非常稳定。因此, 通过质量控制的臭氧数据量随时间变化也较稳定, 这说明本文的质量控制方案可以保障最终进入同化系统的观测资料的稳定性。图 10 对质量控制前后 Tembin 和 Isaac 两个个例中臭氧总量和平均位势涡度的相关系数逐日变化进行分析。结果表

明, 经过质量控制, 两个个例中的相关系数均明显提高到 0.8 左右, 并且随着日期变化始终高于质量控制前的相关系数, 这意味着通过质量控制的臭氧总量数据与统计拟合量更加一致, 可以更好的被模式“吸收”。值得注意的是, Tembin 个例中相关系数在 8 月 23 日、8 月 24 日和 8 月 26 日出现明显的下降, 这与 JTWC 所报告的台风强度增强的日期相吻合, 而 Isaac 个例中相关系数出现明显下降的日期也与台风强度增强的日期一致。这说明台风或者台风的强度会直接影响到臭氧总量和平均位势涡度的相关系数, 其中的原因还需要进一步研究。

资料同化中, 通常假定模式误差和观测误差满足高斯分布, 则可通过实际资料计算得到 $O-B$ 的概率密度函数应该呈高斯分布, 离群值会使其偏离高斯分布, 从而影响资料同化结果, 使分析场的精度降低。对 Tembin 和 Isaac 研究时间段内的所有臭氧总量资料的 $O-B$ 进行统计, 可以得到 $O-B$ 的概率密度函数(图 11)。两个个例的试验结果都表明, 原始资料 $O-B$ 的概率密度函数都偏离高斯分布, 尤其是台风 Isaac, 质量控制前其 $O-B$ 的概率密度函数表现为左偏态的统计特征。而经过质量控制, 资料的概率密度函数更加接近高斯分布, 位于原始概率密度函数末尾处的离群资料被有效的去除了, 这说明本文的质量控制方案可以达到预期的效果。另外, 质量控制后臭氧总量资料的 $O-B$ 基本处于 -20 DU ~ 20 DU 范围内, 该数值可为下一步资料同化需要的观测误差方差提供参考。

6 结论

为了进一步在数值预报中应用 FY-3A TOU 臭氧数据, 本文建立了逐日动态更新的臭氧线性回归预报模型, 并利用双权重算法对 FY-3A TOU 臭氧数据进行质量控制, 最后对该质量控制方案在两个台风个例中的表现进行了考察。结论如下:

(1) 臭氧总量和平均位势涡度之间存在高相关性, 但是不同台风个例的臭氧线性回归模型中斜率 α 和截距 β 有较大差别, 应该分别统计建立逐日动态更新的线性回归模型。

(2) 使用双权重算法去除的离群资料百分比较稳定, 进一步的分析发现这些离群资料主要位于低压槽附近。通过质量控制的资料保留了原始资料的主体信息, 并且显著降低了原始资料的标准差。

(3) 通过质量控制的臭氧资料数据量随时间变

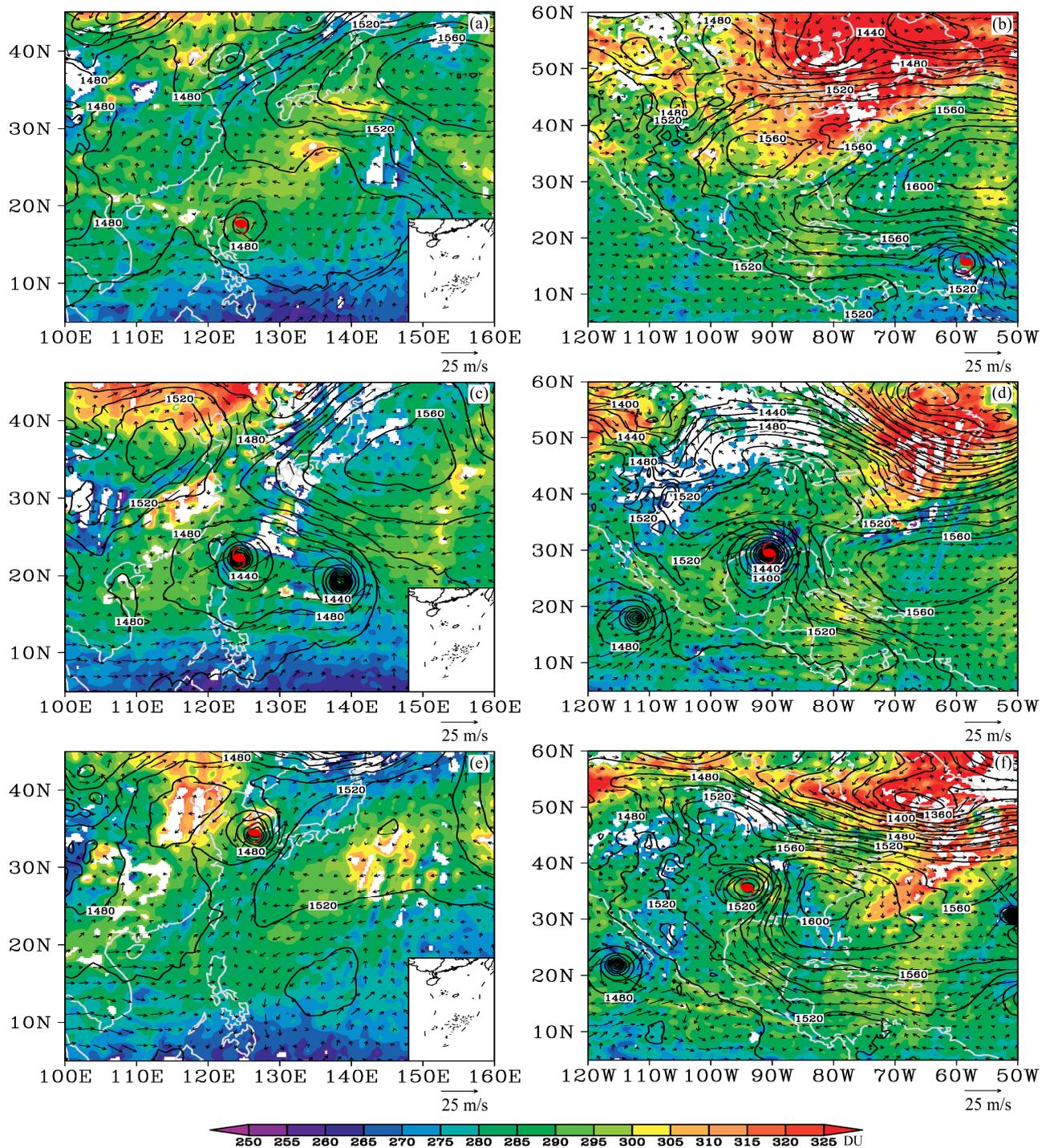


图8 质量控制后 Tembin (左列) 和 Isaac (右列) (a, b) 初始、(c, d) 成熟和 (e, f) 消亡阶段的臭氧总量数据空间分布: (a) 2012年8月19日00:00; (c) 2012年8月22日00:00; (e) 2012年8月30日00:00; (b) 2012年8月22日12:00; (d) 2012年8月29日12:00; (f) 2012年8月31日12:00。红色台风符号代表台风的中心位置; 黑色实线是850 hPa位势高度的等值线, 单位: gpm; 箭头代表850 hPa水平风场

Fig. 8 Spatial distribution of total ozone data after QC in the (a, b) initial, (c, d) mature, and (e, f) decaying stages of Tembin (left) and Isaac (right): (a) 0000 UTC 19 Aug 2012; (c) 0000 UTC 22 Aug 2012; (e) 0000 UTC 30 Aug 2012; (b) 1200 UTC 22 Aug 2012; (d) 1200 UTC 29 Aug 2012; (f) 1200 UTC 31 Aug 2012. Red typhoon symbol represents the typhoon center; black contour indicates geopotential height at 850 hPa, unit: gpm; arrow represents horizontal wind field at 850 hPa

化较稳定, 臭氧总量与平均位势涡度之间的相关系数明显提高, $O-B$ 的概率密度函数分布形式也得

到了较好的调整, 更加接近高斯分布, 有利于下一步的资料同化。

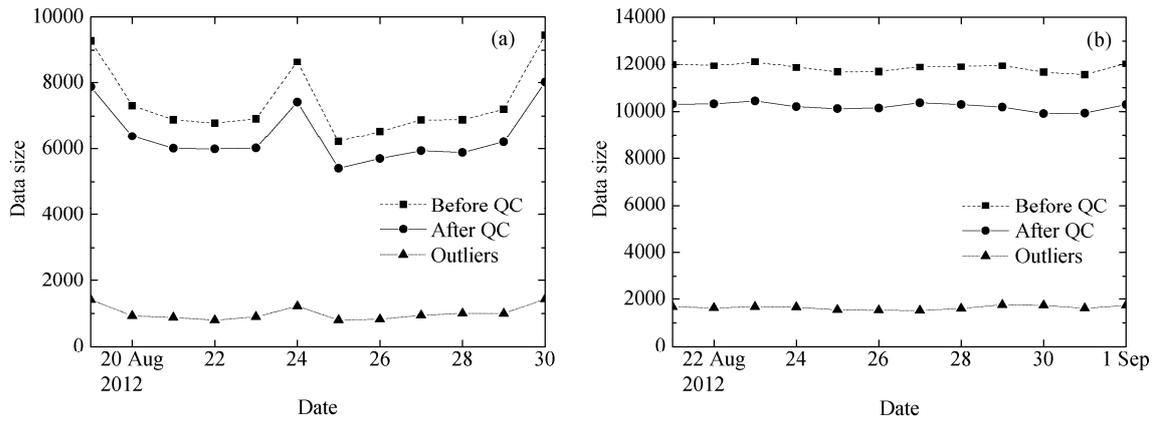


图9 (a) Tembin (2012年8月19~30日)和(b) Isaac (2012年8月21日至9月1日)质量控制前、质量控制后和剔除的数据量的逐日变化

Fig. 9 Daily variations of data size before QC, after QC, and removed for (a) Tembin during 19–30 Aug 2012 and (b) Isaac from 21 Aug to 1 Sep 2012

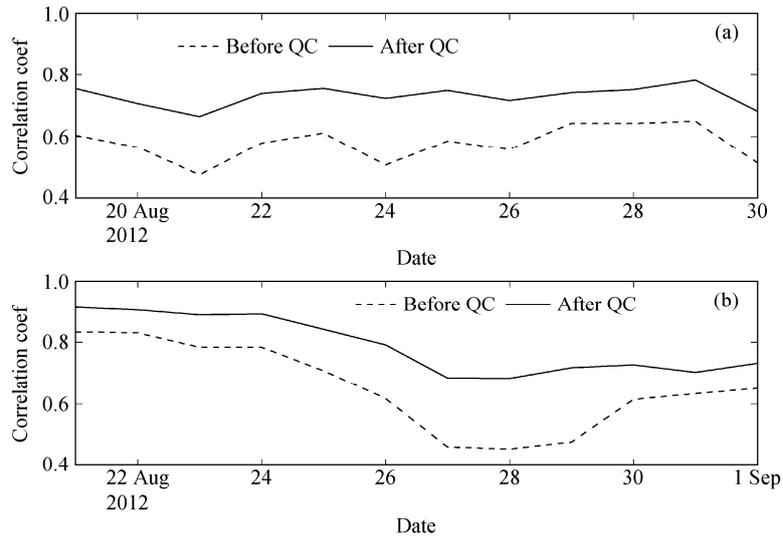


图10 质量控制前后(a) Tembin (2012年8月19~30日)和(b) Isaac (2012年8月21日至9月1日)臭氧总量和平均位势涡度的相关系数逐日变化

Fig. 10 Daily variations of correlation between total ozone and MPV before and after QC for (a) Tembin during 19–30 Aug 2012 and (b) Isaac from 21 Aug to 1 Sep 2012

本文的质量控制方案在两个台风个例中均取得了较理想的效果，为 FY-3A TOU 臭氧资料的数值应用奠定了基础。Jang et al. (2003) 和 Wu and Zou (2008) 的研究表明，卫星臭氧资料较常规资料包含更丰富的高层环境场信息，基于臭氧总量和平均位势涡度之间的高相关性对臭氧资料进行四维变分同化，可以明显影响引导气流，从而改善了台风涡旋初始化和台风路径、强度预报。目前，我国已初步形成了功能齐备的台风业务技术体系，但是在台风数值预报方面与国外相比仍有差距，那么能否在已有基础上利用 FY-3A TOU 臭氧资料来加

强我国的台风涡旋初始化技术和资料同化应用，这将是后续研究工作的重点。值得注意的是，已有的研究中都是同化单一时次的臭氧资料，同化的影响随着时间的推移而逐渐减弱，能否通过同化多时次的臭氧资料取得更好的效果呢？本文所发展的质量控制方案又给多时次臭氧资料的同化工作带来一定的启发，那就是应该动态更新观测算子，才能在模式中更好地“吸收”臭氧资料，同时本文的方案完全适用于多时次臭氧资料的质量控制。另外，这些通过质量控制的臭氧资料是否可以应用到暴雨、强对流等灾害性天气的数值预报中，也是值得

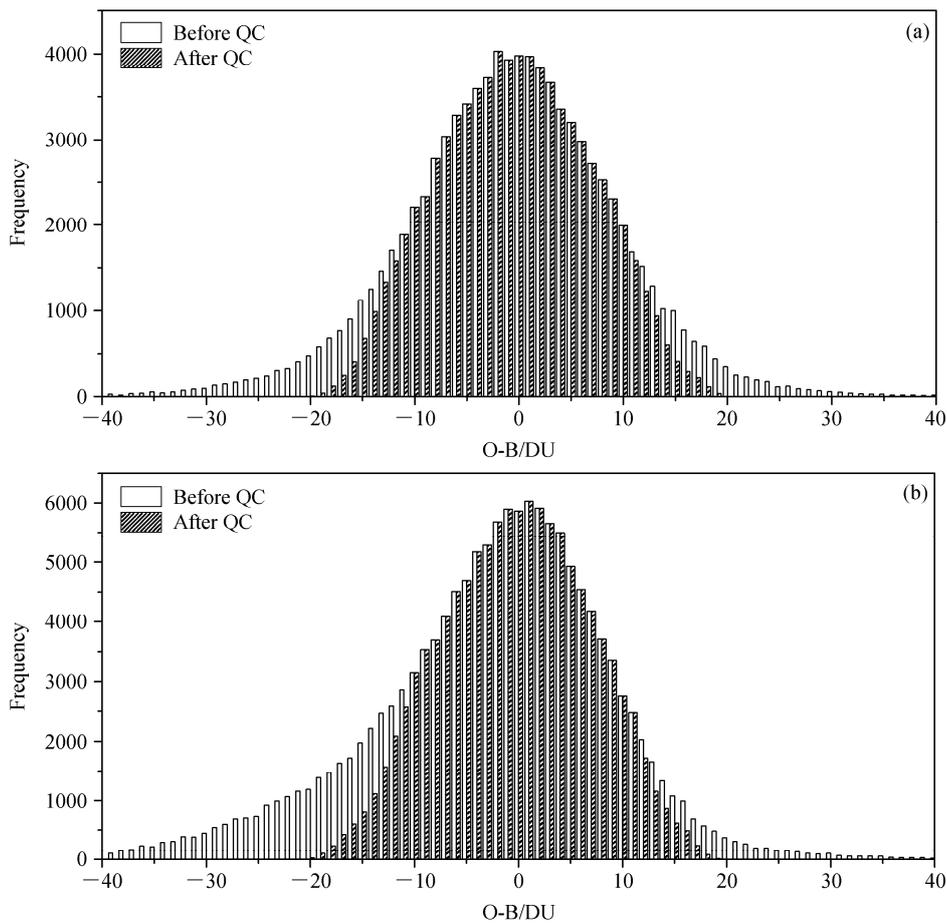


图 11 质量控制前后 (a) Tembin (2012 年 8 月 19~30 日) 和 (b) Isaac (2012 年 8 月 21 日至 9 月 1 日) 臭氧总量资料 $O-B$ 的概率密度函数
 Fig. 11 Probability density function of total ozone $O-B$ before and after QC for (a) Tembin during 19–30 Aug 2012 and (b) Isaac from 21 Aug to 1 Sep 2012

关注的问题。

致谢 感谢两位审稿专家提出的宝贵意见, 同时感谢邹晓蕾教授对本文的指导。

参考文献 (References)

- Allaart M A F, Kelder H, Heijboer L C. 1993. On the relation between ozone and potential vorticity [J]. *Geophys. Res. Lett.*, 20 (9): 811–814.
- Carrier M, Zou X, Lapenta M. 2007. Identifying cloud-uncontaminated AIRS spectra from cloudy FOV based on cloud-top pressure and weighting functions [J]. *Mon. Wea. Rev.*, 135: 2278–2294.
- Danielsen E F. 1968. Stratospheric–tropospheric exchange based on radio-activity, ozone, and potential vorticity [J]. *J. Atmos. Sci.*, 25: 673–688.
- Davis C, Low N S, Shapiro M A, et al. 1999. Direct retrieval of wind from Total Ozone Mapping Spectrometer (TOMS) data: Examples from FASTEX [J]. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 125: 3375–3391.
- Folkens I, Appenzeller C. 1996. Ozone and potential vorticity at the subtropical tropopause break [J]. *J. Geophys. Res.*, 101 (D13): 18787–18792.
- 郭栋, 周秀骥, 刘煜, 等. 2012. 南亚高压对青藏高原臭氧谷的动力作用 [J]. *气象学报*, 70 (6): 1302–1311. Guo Dong, Zhou Xiuji, Liu Yu, et al. 2012. The dynamic effects of the South Asian high on the ozone valley over the Tibetan Plateau [J]. *Acta Meteorologica Sinica (in Chinese)*, 70 (6): 1302–1311.
- 郭世昌, 常有礼, 张利娜. 2007. 北半球中纬度地区大气臭氧的年际和年代际变化研究 [J]. *大气科学*, 31 (3): 418–424. Guo Shichang, Chang Youli, Zhang Li'na. 2007. Research on the interannual and interdecadal variations of the atmospheric ozone in the middle latitude region of the Northern Hemisphere [J]. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences (in Chinese)*, 31 (3): 418–424.
- Jang K-I, Zou X, De Pondeca M S F V, et al. 2003. Incorporating TOMS ozone measurements into the prediction of the Washington, D. C., winter storm during 24–25 January 2000 [J]. *J. Appl. Meteor.*, 42: 797–812.
- 江芳, 王维和, 王咏梅, 等. 2012. FY-3 气象卫星紫外臭氧总量探测仪辐射亮度在轨定标与反演结果分析. *地球物理学报*, 55 (3): 760–767. Jiang Fang, Wang Weihe, Wang Yongmei, et al. 2012. Calibration in-orbit and retrieval result study of FY-3 Total Ozone Unit (TOU) [J]. *Chinese Journal of Geophysics (in Chinese)*, 55 (3): 760–767.
- Jiang X, Steven P, Charles D, et al. 2008. Interannual variability and trends of extratropical ozone. Part I: Northern Hemisphere [J]. *J. Atmos. Sci.*, 65:

- 3013–3029.
- Lanzante J R. 1996. Resistant, robust and nonparametric techniques for the analysis of climate data: Theory and examples, including applications to historical radiosonde station data [J]. *Int. J. Climatol.*, 16: 1197–1226.
- Li J, Zou X. 2013. A quality control procedure for FY-3A MWTS measurements with emphasis on cloud detection using VIRR cloud fraction [J]. *J. Atmos. Oceanic Technol.*, 30: 1704–1715.
- 刘年庆, 黄富祥, 王维和. 2011. 2011年春季北极地区臭氧低值事件的卫星遥感监测 [J]. *科学通报*, 56 (27): 2315–2318. Liu Nianqing, Huang Fuxiang, Wang Weihe. 2011. Monitoring of the 2011 spring low ozone events in the Arctic region [J]. *Chinese Science Bulletin (in Chinese)*, 56 (27): 2315–2318.
- Normand C. 1953. Atmospheric ozone and the upper-air conditions [J]. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 79: 39–50.
- Ohring G, Muench H S. 1960. Relationships between ozone and meteorological parameters in the lower stratosphere [J]. *J. Atmos. Sci.*, 17: 195–206.
- Qin Z, Zou X, Li G, et al. 2010. Quality control of surface station temperature data with non-Gaussian observation minus background distributions [J]. *J. Geophys. Res.*, 115: D16312, doi: 10.1029/2009JD013695.
- Shapiro M A, Krueger A J, Kennedy P J. 1982. Nowcasting the position and intensity of jet streams using a satellite-borne total ozone mapping spectrometer [M]// *Nowcasting*. San Diego: Academic Press, 137–145.
- Tian B, Yung Y L, Waliser D E, et al. 2007. Intraseasonal variations of the tropical total ozone and their connection to the Madden-Julian oscillation [J]. *Geophys. Res. Lett.*, 34: L08704, doi: 10.1029/2007GL029451.
- Vaughan G, Price J D. 1991. On the relationship between total ozone and meteorology [J]. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 117: 1281–1298.
- 王庚辰, 孔琴心, 陈洪滨. 2006. 北京地区对流层顶变化及其对上对流层/下平流层区域臭氧变化的影响 [J]. *大气科学*, 30 (4): 587–595. Wang Gengchen, Kong Qinxin, Chen Hongbin. 2006. Variation of the tropopause height and its influence on ozone variation in upper troposphere/lower stratosphere over Beijing [J]. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences (in Chinese)*, 30 (4): 587–595.
- 王维和, 张兴赢, 安兴琴, 等. 2010. 风云三号气象卫星全球臭氧总量反演和真实性检验结果分析 [J]. *科学通报*, 55 (17): 1726–1733. Wang Weihe, Zhang Xingying, An Xingqin, et al. 2010. Analysis for retrieval and validation results of FY-3 total ozone unit (TOU) [J]. *Chinese Science Bulletin (in Chinese)*, 55 (17): 1726–1733.
- 王维和, 张艳, 李晓静, 等. 2011. 2011年春季北极臭氧异常低值监测和特征分析 [J]. *极地研究*, 23 (4): 310–317. Wang Weihe, Zhang Yan, Li Xiaojing, et al. 2011. Monitoring results and analysis of anomalously low ozone in the 2011 Arctic spring [J]. *Chinese Journal of Polar Research (in Chinese)*, 23 (4): 310–317.
- 王咏梅, 王英鉴, 王维和, 等. 2009. FY-3 卫星紫外臭氧总量探测仪 [J]. *科学通报*, 54 (23): 3778–3783. Wang Yongmei, Wang Yingjian, Wang Weihe, et al. 2009. FY-3 satellite ultraviolet total ozone unit [J]. *Chinese Science Bulletin (in Chinese)*, 54 (23): 3778–3783.
- Wang H, Zou X, Li G. 2012. An improved quality control for AIRS total column ozone observations within and around hurricanes [J]. *J. Atmos. Oceanic Technol.*, 29: 417–432.
- Wu Y, Zou X. 2008. Numerical test of a simple approach for using TOMS total ozone data in hurricane environment [J]. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 134: 1397–1408.
- Xu Z, Wang Y, Fan G. 2013. A two-stage quality control method for 2-m temperature observations using biweight means and a progressive EOF analysis [J]. *Mon. Wea. Rev.*, 141: 798–808.
- 杨军, 董超华, 卢乃锰, 等. 2009. 中国新一代极轨气象卫星——风云三号 [J]. *气象学报*, 67 (4): 501–509. Yang Jun, Dong Chaohua, Lu Naimeng, et al. 2009. FY-3A: the new generation polar-orbiting meteorological satellite of China [J]. *Acta Meteorologica Sinica (in Chinese)*, 67 (4): 501–509.
- Zou X, Wu Y. 2005. On the relationship between Total Ozone Mapping Spectrometer (TOMS) ozone and hurricanes [J]. *J. Geophys. Res.*, 110: D06109, doi: 10.1029/2004JD005019.
- Zou X, Zeng Z. 2006. A quality control procedure for GPS radio occultation data [J]. *J. Geophys. Res.*, 111: D02112, doi: 10.1029/2005JD005846.