

嵌套网格空气质量预报模式系统的发展与应用

王自发¹ 谢付莹^{1, 4} 王喜全¹ 安俊岭² 朱江³

1 中国科学院大气物理研究所竺可桢-南森国际研究中心, 北京 100029

2 中国科学院大气物理研究所大气边界层物理和大气化学国家重点实验室, 北京 100029

3 中国科学院大气物理研究所国际气候与环境科学中心, 北京 100029

4 中国科学院研究生院, 北京 100049

摘 要 主要综述中国科学院大气物理研究所自主开发的嵌套网格空气质量预报模式系统 (NAQPMS, Nested Air Quality Prediction Modeling System) 的历史发展与应用情况。模式发展伊始为欧拉污染物输送实用模型, 利用其研究东亚硫氧化物的跨国输送问题, 得出中国对于周边国家的输送量不大的结论; 在系统中嵌入适合东亚的起沙机制模块, 用来模拟沙尘发生、输送及沉降等过程, 估算亚洲大陆沙尘气溶胶对海洋地区的输送与沉降通量, 为研究海洋生物地球化学循环提供基础数据; 利用该系统研究沙尘及其土壤粒子对酸雨的中和作用, 发现沙尘输送对东亚酸雨的分布影响很大; 发展城市尺度高分辨率气象和空气质量预报技术, 使模式水平分辨率达到 500 m, 并应用于台北高浓度臭氧和 PM₁₀ 的模拟; 研究和集成区域及城市尺度大气污染预报理论和模拟技术, 研制成目前的嵌套网格空气质量预报模式系统, 以探讨不同尺度各种污染 (如沙尘暴、城市光化学烟雾、酸雨、高浓度悬浮颗粒物等) 的变化规律。在模式系统中初步建立资料同化模块, 开展大气化学成分及沙尘输送模拟的资料同化研究。系统已经在北京、上海、深圳、郑州等城市环境监测中心实施空气质量的实时预报。未来, 系统将集成到全球环境大气输送模式 (GEATM), 以实现从城市群到全球具有双向耦合功能的模式系统。

关键词 空气质量模式 嵌套网格 大气环境 资料同化 输送

文章编号 1006-9895 (2006) 05-0778-13

中图分类号 X16

文献标识码 A

Development and Application of Nested Air Quality Prediction Modeling System

WANG Zi-Fa¹, XIE Fu-Ying^{1,4}, WANG Xi-Quan¹, AN Jun-Ling², and ZHU Jiang³

1 Nansen-Zhu International Research Center, Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029

2 The State Key Laboratory of Atmospheric Boundary Layer Physics and Atmospheric Chemistry, Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029

3 International Center for Climate and Environment Science, Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029

4 Graduate University of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049

Abstract Development and application of Nested Air Quality Prediction Modeling System (NAQPMS), which is independently developed by IAP/CAS, have been introduced in this paper. At first, the system is developed as a practical 3-D Eulerian transport model for pollutants to evaluate transboundary transport of sulfur dioxides and sulfate in East Asia. The simulations indicate that limited sulfur from China is transported to neighboring countries. A defla-

收稿日期 2006-05-23, 2006-06-13 收修定稿

资助项目 国家自然科学基金资助项目 40305018, 国家重点基础研究发展规划项目 2005CB422205

作者简介 王自发, 男, 1972 年出生, 研究员, 主要从事沙尘输送数值预报、区域及城市尺度大气污染的研究。

万方数据
E-mail: wawang@mail.iap.ac.cn

tion module is designed and applied to East Asia, which is embedded in the system. On the basis of the deflation module, dust transport numerical prediction is carried out. The system is used to simulate the process of emission, transport and deposition of dust. The fluxes for transport and deposition of dust from Asian mainland to ocean are also calculated and provide basic data for researching halobios geochemistry cycles. Using the model system for regional scale, the influence of dust transport on distribution of acid rain in East Asia is calculated. High resolution meteorology and air quality prediction techniques are developed in the system for urban scale with a horizontal resolution of 500 m, which is applied to simulating high-concentration ozone and PM₁₀ in Taipei. At present, NAQPMS is designed based on integration of prediction theories and simulation methods for regional and urban scales, and the system can study many air pollution problems for various scales, including dust storm, acid rain, high-concentration suspended particulate and photochemical smog. An elementary assimilation module on atmospheric chemical element and dust has also been built in the system. Currently, the model system has been used to forecast the real-time air quality of a region or city, e. g., Beijing, Shanghai, Shenzhen and Zhengzhou. In future, the model system will be coupled into the Global Environment Atmosphere Transport Model (GEATM), to implement the bidirectional coupling system from cities to global scales.

Key words air quality model, nested grid, atmospheric environment, assimilation, transport

1 引言

空气质量预报是一项复杂的系统工程，是当今环境科学研究的热点与难题。通过各类预报方法与手段相结合，可对痕量气体、气溶胶等多种大气污染物在城市-区域-全球尺度下的不同类型污染过程进行模拟预测研究，研究内容涉及气象、物理、化学等多个学科，包含宏观、微观多种过程，成为当前城市及区域污染调控与治理的有效途径。

目前国际上空气质量预报的方法有两种，一种是以统计学方法为基础，利用现有数据，基于统计分析，研究大气环境的变化规律，建立大气污染浓度与气象参数间的统计预报模型，来预测大气污染物浓度，称之为统计预报；另一种则是以大气动力学理论为基础，基于对大气物理和化学过程的理解，建立大气污染浓度在空气中的输送扩散数值模型，借助计算机来预报大气污染物浓度在空气中的动态分布，称之为数值预报。数值模式包括了以流体质点为核心的拉格朗日模式和以空间点为主体的欧拉模式。当前应用较广的拉格朗日模式主要有 NOAA-ARL 开发的 Hysplit 模式^[1]和二维 EMEP 模式^[2]，但是由于这类数值模式假设气团在输送过程中不与外界环境发生交换，主要考虑化学和扩散过程，使其在复杂地形和对流条件下难以适用，因此造成了很大的局限性。相较拉格朗日模式而言，欧拉模式的发展和更为广泛。近年来，欧拉模式特别是三维网格模式的发展取得了令人瞩目的成

就，涌现出了一大批出色的城市、区域和全球尺度的数值模式：如城市尺度的 UAM-V^[3]、NJU-CAQPS^[4]，区域尺度的 CAMx^[5]、EURAD 以及 MAQSIP 等，以及全球尺度的 MOZART、GEOS-CHEM 等。这些模型在科研领域得到了广泛应用，极大地促进了人们对于痕量气体、气溶胶微物理化学过程的认识和理解。

空气质量模式的发展并非一蹴而就，而是不断地进步和发展的。以美国 EPA 为代表，从 1970 年到现在，已经资助开发了三代空气质量模型。这其中包括第一代空气质量模型——拉格朗日轨迹模型，第二代空气质量模型——欧拉网格模型以及最新推出的第三代空气质量模型——区域多尺度空气质量模型 Models-3/CMAQ^[6]。由于模式的设计理念与考虑的参数不同，各代使用于模拟控制策略的空气质量模式也各有其特点：在应用上，第一代模式仅适用于模拟无化学活性污染物的扩散及简易的有一定化学活性的轨迹模拟；而第二代模式主要针对光化反应的气态污染物或固态污染物。美国环保局近来极力推动第三代空气质量模式，通称为 Models-3，该类模式吸收一个大的观念，拟将所有的大气问题均考虑进模式之中，可以有效地进行较为全面的空气质量控制策略的评估。目前比较著名的空气质量模式有：EURAD 模式、ADOM 模式、RADM 模式、UAM 模式、STEM 模式及当前美国 EPA 发展的 MODEL3/CMAQ 模式系统等，这些模式各有特色，各有其优缺点。前三种主要用

于酸雨问题的研究,而后几种用于大气光化学和气溶胶二次污染的模拟。虽然各模式的动力框架结构不一,但所采取的化学反应机理主要是 CBM-IV、RADM II、以及 SAPRC 等。其他相关模块都是在一系列外场观测实验的基础上发展起来的,并通过当地大量的实践检验,具有良好模拟效果。目前,大部分空气质量模型和气象模式均是离线的(即用气象模式获得的气象场驱动大气化学模式),无法反映大气化学成分的变化对天气过程的反馈(主要通过影响辐射过程)。因此一个在线的、全耦合的包括多尺度、多过程的模式系统是当前国际上大气污染模式向区域空气质量实时预报发展的趋势。

我国的空气质量预报起步较晚,基础研究基本处于被动跟踪状态。国内主要空气质量模式的发展也经历了三个阶段,并根据其应用于环境决策和环境研究的目标、污染物的排放特征和污染物在大气中的相互作用、形成和转化的特点,对模式的参数和功能作修订和改进,形成了具有适应区域特点的各种尺度多模型体系。第一代模型主要是高斯烟流模型,国内第二代模式有城市尺度的空气质量预报模式(如中国科学院大气物理研究所 HRDM^[7])及区域尺度污染物欧拉输送模式(如中国科学院大气物理研究所 RAQM^[8]、南京大学区域酸沉降模式 RegADM^[9]等)。目前国内模式发展也进入第三代,以一个大气的概念,建构了从全球尺度、区域尺度及套网格的大气环境模式系列,有南京大学的区域大气环境模式系统(RegAEMS)、中国科学院大气物理研究所的嵌套网格空气质量预报系统(NAQPMS^[10])、中国科学院大气物理研究所全球环境大气输送模式(GEATM^[11])等。

中国科学院大气物理研究所研制的“嵌套网格空气质量预报模式系统(NAQPMS)”充分借鉴吸收了国际上先进的天气预报模式、空气污染数值预报模式等的优点,并体现了中国各区域、城市的地理、地形环境、污染源的排放等特点。此系统在计算机技术上采用高性能并行集群的结构,低成本地实现了大容量高速度的计算,从而解决了预报时效问题;在研制过程中考虑了自然源对城市空气质量的影响,设计了东亚地区起沙机制的模型;并采用城市空气质量自动监测系统的实际监测资料进行计算结果的同化。该模式系统被广泛地运用于多尺度污染问题的研究,它不但可以研究区域尺度的空气

污染问题(如沙尘输送、酸雨、污染物的跨国输送等),还可以研究城市尺度的空气质量等问题的发生机理及其变化规律,以及不同尺度之间的相互影响过程。NAQPMS 模式成功实现了在线的、全耦合的包括多尺度多过程的数值模拟,模式可同时计算出多个区域的结果,在各个时步对各计算区域边界进行数据交换,从而实现模式多区域的双向嵌套。同时,模式系统的并行计算和理化过程的模块化则有效地保证了 NAQPMS 模式的在线实时模拟。

2 NAQPMS 模式系统框架与结构

2.1 模式系统框架

图 1 为 NAQPMS 模式系统的主要框架结构。

嵌套网格空气质量预报模式系统(NAQPMS)由四个子系统组成,分别为基础数据系统、中尺度天气预报系统、空气污染预报系统和预报结果分析系统。各子系统的功能介绍如下:

(1) 基础数据子系统 此系统是是整个空气污染数值预报系统的基础,它包括下垫面资料(USGS)、污染源资料(WYGE)、气象资料(NCEP)和实时监测污染物的监测资料(JCGE)四个部分。为模式系统提供预报的初始场和边界场以及对预报结果进行验证的观测数据。

(2) 中尺度天气预报系统 第五代中尺度天气预报模式(MM5)进行气象场的模拟,为空气质量预报子系统提供逐时的气象场。

(3) 空气质量预报子系统 (NAQPM) 空气质量预报子系统(NAQPM)为整个模式系统的核心,主要处理污染物之排放,平流输送,扩散,干、湿沉降和气相、液相及非均相反应等物理与化学过程。其空间结构为三维欧拉输送模式,垂直坐标采用地形追随坐标。水平结构为多重嵌套网格,采用单向、双向嵌套技术,分辨率为 3~81 km,垂直不等距分为 20 层。其中考虑的主要污染物包括 SO₂、NO_x、C_mH_n、O₃、CO、NH₃、PM10、PM2.5 等。

(4) 预报结果分析系统 此模块主要是对模式的输出结果进行转化,使用 GrADS、Vis5D 等图形处理软件以及 Dreamweaver、Javascript、HTML 等网页制作软件将模式的输出结果进行可视化并进行网络发布,使得公众更为直观清晰地了解污染物的变化情况。

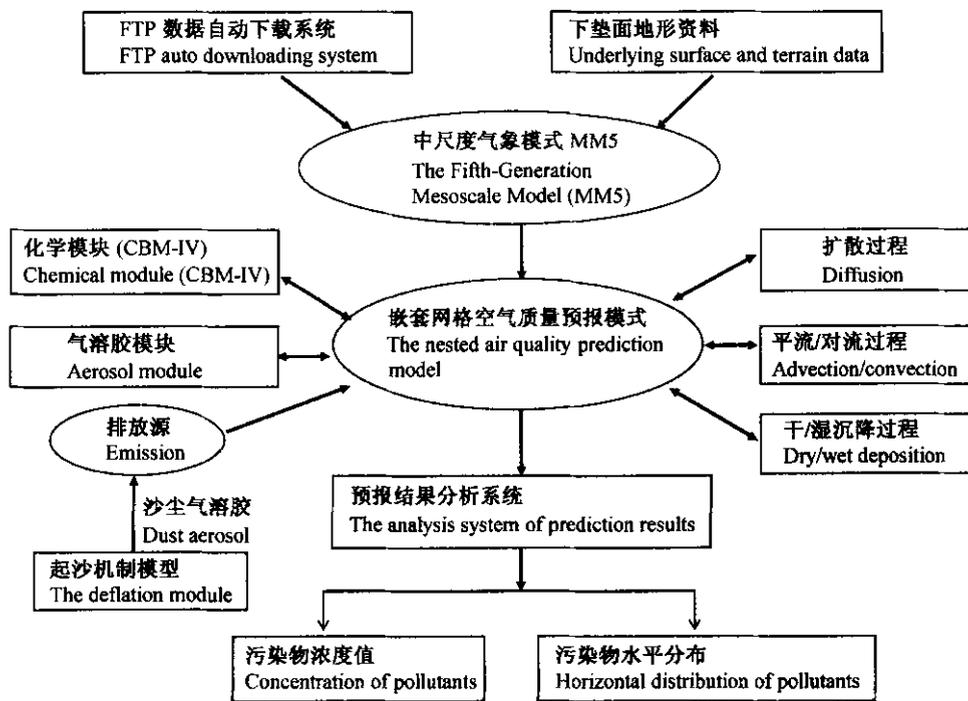


图1 嵌套网格空气质量预报模式系统 (NAQPMS) 的主要架构

Fig. 1 Main frame of the nested air quality prediction modeling system

2.2 物理化学过程

模式对物理、化学过程的处理均采用较为成熟、科学的方案。主要过程的处理方案如下：

(1) 平流输送与扩散过程 平流输送过程采用高精度正定质量守恒差分格式方案计算。扩散过程采用改进的 MM5 输出的扩散系数进行处理。

(2) 干沉降过程 此过程处理的关键是如何计算干沉降速率。NAQPMS 模式系统根据不同条件下的测量结果采用经验参数化的方法模拟干沉降速度，其大小随大气稳定性、植被、风场等因素而变化。

(3) 湿清除过程 湿清除主要是处理云下 (1600 m) 的洗脱过程。由于我国近地层大气无论污染气体还是气溶胶的浓度都较高，因而雨滴的冲刷过程对污染物浓度的影响很大。把雨水冲刷过程定义为

$$W_{\text{ash}} = W_a C_i,$$

其中， W_{ash} 为冲刷量， C_i 为污染物浓度， W_a 为冲刷系数，与雨强、雨滴谱分布及各种污染物的浓度有关及气溶胶的粒子谱及化学成分有关。

(4) 气相化学过程 气相化学模块是 NAQPMS 模式中最重要的组成部分之一，模式采用的气相化学机制为改进后的 CB-IV 碳键反应机

制^[12]，并根据最新的动力学数据更新了其中的化学反应速率，同时加入了更为详细的 SO_x 化学反应机制^[13]。

(5) 液相化学过程 为充分利用 MM5 所能提供的云水资料，采用改进的 RADM2 的液相化学反应机制，考虑了污染物的云雨吸收、溶解、电离等液相反应，并包括次网格的垂直再分布，冲刷等过程。

(6) 气溶胶物理化学过程 主要指气溶胶微物理过程，包括核化、碰并、蒸发、沉降等。把气溶胶分为九档，每档又分类为可溶的、不可溶的以及二者的混合三类。其中考虑了许多空气质量模式中所没有考虑到的沙尘气溶胶，使本模式系统具有了预报沙尘长距离输送的能力。

(7) 起沙机制及自然源的引入 模式发展者^[14]在比较国内外相关起沙机制模型的基础上，结合中国北方大量气象台站的有关起沙过程的观测资料，提出了一个适合我国北方的起沙机制模型，并将该模型耦合到 NAQPMS 模式之中，通过与实际观测结果的比较验证，表明 NAQPMS 能够很好地模拟出沙尘的起沙、输送等过程。这对提高经常遭受沙尘入侵城市的 TSP 和 PM_{10} 预报效果非常

重要,特别是春季沙尘暴频发期间对自然沙尘的考虑就显得更为重要。这也是 NAQPMS 模式系统的一大特色。

3 NAQPMS 模式系统发展史与应用

嵌套网格空气质量预报模式系统 (NAQPMS) 是由中国科学院大气物理研究所自主开发研制的。该模式系统经历了近 20 年的发展,是通过集成自主开发的一系列城市、区域尺度空气质量模式发展而成的。该模式不但可以研究区域尺度的空气污染问题,同时可以研究城市尺度的空气质量等问题的发生机理及其变化规律,此外还可以研究不同尺度之间的相互影响过程。该模式是研究污染物排放量、气象条件、化学转化和干湿清除之间相互作用的重要工具,可以为环境决策部分提供科学的污染排放控制对策。NAQPMS 模式系统已经广泛应用于硫氧化物跨国输送,沙尘起沙、输送和沉降模拟,酸雨对环境的影响研究,臭氧模拟,以及城市、区域等尺度上的空气质量模拟研究,并成功实现了业务上的广泛应用。

3.1 模式系统发展应用史

3.1.1 三维欧拉污染物长距离输送模式

为研究东亚污染物跨国输送问题,设计了三维欧拉型污染物长距离输送实用模型^[15],此模型可以计算长时间的污染物远距离输送态势;利用此模型计算东亚硫氧化物的跨国输送问题,结果表明我国对周边国家的污染物输送量不大,有力地反驳了日本认为其大气污染物主要来自于中国的论调,为国家的环境外交提供了科学依据。

对上述模型进行改进,采用更符合实际的物理化学模块,并在模式中采用分裂查表算法处理气相化学过程,得到了能够计算大区域、长时期(季节或年)内 SO_x 输送的模式系统^[16]。灵敏性试验表明改进后的模式具有较高的分辨率和灵敏度。该模式具有较好的可信度,模拟结果与实测资料相符合,能方便地计算长时间(月、季、年)的污染物沉降及远距离输送态势。王自发等^[17]利用硫氧化物输送三维欧拉实用模式,计算和分析了我国和东亚地区二氧化硫、硫酸盐粒子的空间分布和季节变化特征,给出了年平均硫化物大气含量分布,并讨论了四种典型下垫面(城市、山区和林区、平原和沙漠以及海洋)条件下硫氧化物浓度的垂直分布。结

果表明近地层硫化物浓度分布与排放源的分布基本一致,高值区主要位于山东半岛、华北部分地区和四川盆地,另外还有一些独立的小范围高值中心。地面浓度冬季大,夏季小。高空硫酸盐粒子高值中心少且平滑。年平均硫酸盐大气含量高值区主要集中在江淮流域并向海上延伸。王自发等^[18]在 1998 年利用东亚硫氧化物输送模拟预测了未来 15 年内东亚各地区的硫氧化物沉降量、相互输送量的变化趋势及其对土壤的影响,并预言东亚各地区的硫化物沉降量和输送量将日益增多,形势相当严峻。

3.1.2 黄沙输送模式

在比较国内外起沙机制模型的基础上,结合中国北方大量气象台站起沙过程的观测资料,黄美元等^[14]在 1998 年设计了一个适合研究我国北方黄沙输送模拟与预报的起沙机制模型。采用该起沙模型,通过对黄沙输送过程中的干沉降过程、降水清除过程的参数化处理,并考虑黄沙的分谱机理及可能的微物理过程,建立了适合东亚地区的分谱的黄沙输送模式^[19]。该沙尘模式给出了三个判断起沙的判据:天气系统判据、风场判据和下垫面湿度状况。大大提高了起沙过程的模拟准确性,通过与历史实测资料的对比,表明模式可以较好地模拟黄沙的输送过程。

基于东亚地区分谱黄沙输送模式,初步建立了沙尘(暴)数值预报系统,该系统可用于沙尘的发生、输送及沉降的短期数值预报,目前已经在一些气象和环保业务部门进行试预报测试^[20]。

3.1.3 城市尺度模式

在城市尺度方面,发展了水平分辨率达 500 m、集气象与污染输送的城市大气污染输送模式^[21],利用该模式模拟台北地区高浓度臭氧和 PM_{10} 的浓度,通过与观测资料的对比,发现模式可以较好地模拟污染物浓度的时间和空间结构。

由于机动车尾气污染以及光化学污染在我国的一些大城市(如北京、上海、广州)愈显突出,又发展了实用性的区域氮氧化物(NO_x)和臭氧的污染预报模式^[22]。

3.1.4 嵌套网格空气质量预报模式系统

综合上述区域模式和城市模式的优点,开发了基于中尺度气象预报模式(MM5)的嵌套网格空气质量预报模式系统^[10](NAQPMS, Nested Air

Quality Prediction Modeling System)。该模式可以同时用于研究不同尺度(区域、城市)的污染问题,并可利用系统中的单向和双向嵌套功能研究和探讨不同尺度污染间的相互作用。该系统已经被应用于很多城市的污染问题研究,徐文帅等^[23]利用 NAQPMS 四重嵌套方案,成功地模拟了上海市 2002 年 3 月 22 日和 2004 年 11 月的高污染过程,均取得了良好的模拟效果。周慧等^[24]利用该模式对西安的重污染过程进行模拟,并初步分析了西安高污染的成因。Zhao 等^[25]利用 NAQPMS 模式,结合沙尘气溶胶的观测资料对 2002 年 3 月 20 日北京特大沙尘暴中两个 TSP 峰值进行分析,发现两次峰值期间的沙尘来源于相对“清洁”和“污染”的两个不同地区,通过不同的高度到达北京,并与沿途以及北京局地的人为污染物发生了不同的混合。赵秀娟等^[26]使用该模式系统对 2001 年整个春季东亚沙尘气溶胶起沙、输送及其对海洋的沉降量进行了全面的研究。发现该模式能够较好地模拟出沙尘起沙的时间和地点,能够反映沙尘气溶胶在输送过程中的时空分布特征,给出了东亚沙尘气溶胶输送的主要路径和通道及其在东亚不同海域的沉降通量的分布特征。估算了亚洲大陆沙尘气溶胶对海洋地区的输送与沉降通量,通过和日本诸多测站常年观测的沉降资料对比,模式估算的量级合理,这些沙尘给海洋生态系统提供了铁等丰富的营养物质并促进海洋生产力,为研究海洋生物地球化学循环提供了基础数据。Uematsu 等^[27]也利用此模式计算了沙尘对西北太平洋地区的输送量。

利用 NAQPMS 对鄂尔多斯地区 9 月空气质量状况进行了数值模拟,通过与气象观测资料和污染观测资料的对比,发现该模式系统具有较强的模拟能力。分析 9 月份鄂尔多斯地区的气象形势、污染状况、输送通量、出流状况以及该地区点源的贡献等内容,发现模式能够很好地反映鄂尔多斯地区各类污染物分布和输送态势^①。

利用 NAQPMS 采用四层嵌套技术模拟了 2004 年辽宁和青岛两个示范区一年的气象场和典型季节的空气质量状况。研究结果表明大部分地区

的 PM₁₀ 和 SO₂ 冬季比夏季高一倍左右,主要集中在长江、东部沿海地区以及东北地区。在辽宁省主要以几大工业城市为高值中心,冬季城市高值中心比夏季明显,SO₂ 的这种特征比 PM₁₀ 表现更为明显^②。

该模式还被用来研究海陆风过程的演变情况^[28, 29],并取得了较好的效果。该模式还被应用于对飞机观测资料结果的模拟工作中^[30, 31],模拟二氧化硫和氮氧化物的分布和输送情况。

NAQPMS 模式系统也被较多地应用于臭氧模拟中。Lin 等^[32]利用该模式对台湾地区的臭氧进行了模拟研究,模拟结果均表明,该模式系统对臭氧具有较强的模拟能力。Wang 等^[33]利用 NAQPMS 模式系统对 2004 年 5 月 23~24 日发生于中国东部地区的一次高臭氧事件进行模拟研究,并利用泰山和黄山的观测数据进行验证。结果发现,模式系统成功地模拟出了这次事件(图 2)。利用敏感性试验发现,来自长江三角洲的污染物的水平输送对这次高臭氧事件起到十分重要的作用,对泰山和黄山的贡献率达到了 20%~50%(图 3)。

京都大学的研究人员在该模式的基础上发展了可溶性颗粒物输送、沉降与转化模式系统,并用该系统研究了强火山 Miyakejima 爆发对周边地区空气质量的影响^[34]。

在 NAQPMS 基础上发展了区域空气质量预报模式系统,该模式系统包括了硫氧化物、氮氧化物、臭氧、沙尘等物种,并直接耦合气相和液相化学过程。Wang 等^[35]利用该模式系统研究了土壤粒子对酸雨的中和作用及其对东亚酸雨分布的影响。模式能够很好地模拟东亚地区降水 PH 值的地理分布情况。模拟结果表明沙尘粒子对东北亚地区的降水具有中和作用,会使得中国北方和韩国年平均降水的 pH 值增加 0.8~2.5,而对日本和中国南方的降水的中和作用则比较弱。沙尘粒子对降水的中和作用随季节变化,春季的影响最明显,会导致日本降水的 pH 值增加 0.1~0.4,韩国增加 0.5~1.5,中国北方增加 2 以上。

3.2 业务上的应用

空气污染预报是一项复杂的系统工程,也是当

① 鄂尔多斯市空气质量及其传输状况模拟计算. 中期报告, 2006

② 嵌套网格空气质量预报模式示范研究. 国家“十五”科技攻关项目(2003BA614A)子课题“区域大气污染物总量控制技术与示范研究”结题报告, 2006

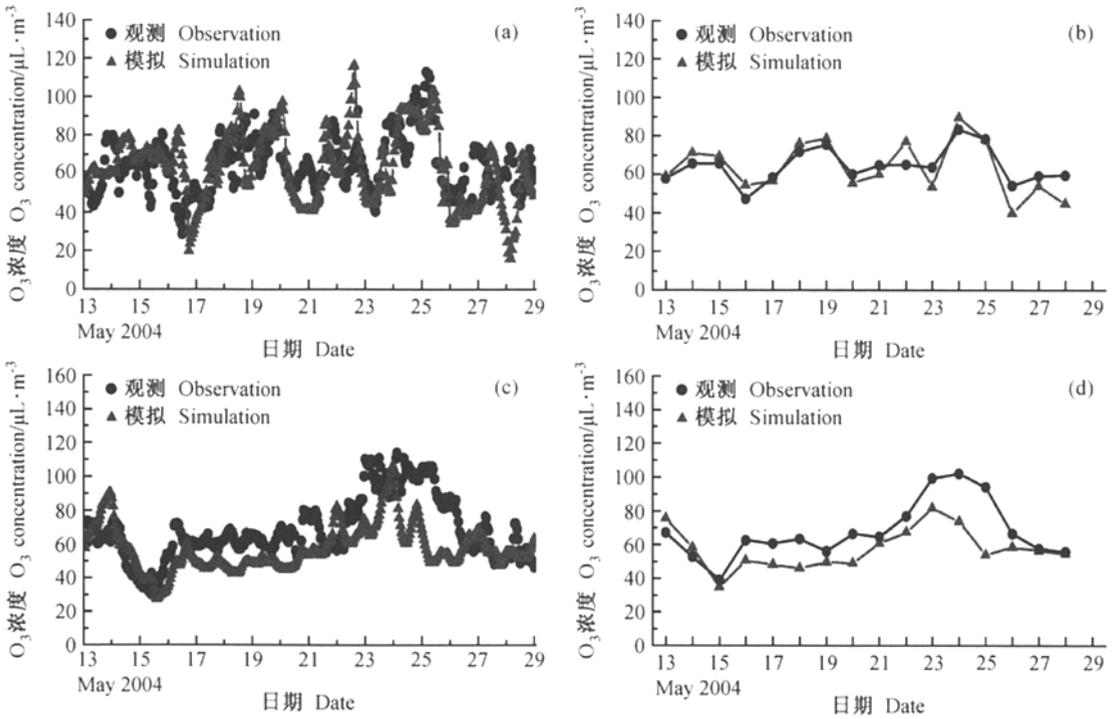


图2 泰山 (a, b) 和黄山 (c, d) 观测值和模拟值的比较: (a, c) 小时平均值; (b, d) 日平均值
 Fig. 2 Measured and computed concentrations of ozone at Taishan Mountain (a, b) and Huangshan Mountain (c, d): (a, c) Hourly mean O₃; (b, d) daily mean O₃

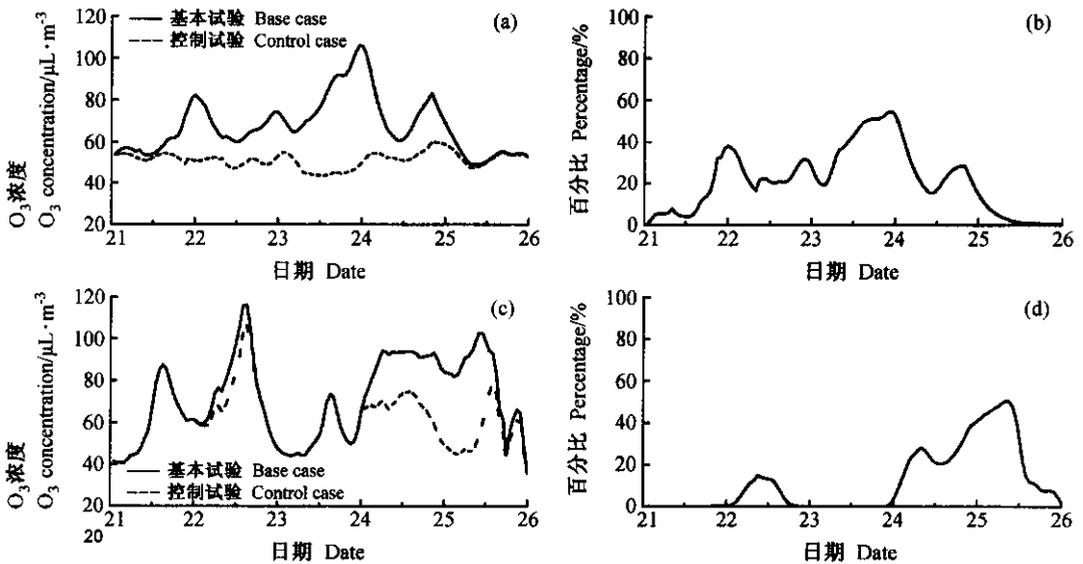


图3 2004年5月21~26日长江三角洲对黄山 (a, b) 和泰山 (c, d) 臭氧浓度的贡献: (a, c) 基本试验和控制试验时的臭氧浓度; (b, d): 长江三角洲的贡献率 (%). 基本试验和控制试验分别代表包括和去除长江三角洲污染物的情景设置
 Fig. 3 (a, c) The time series of simulated O₃ concentration during 21 - 26 May 2004 in base case (including all emissions), control case (without the Yangtze River Delta emission) at Huangshan Mountain (a) and Taishan Mountain (c); (b, d) the contribution percentage (%) of the Yangtze River Delta to Huangshan Mountain (b) and Taishan Mountain (d) for the same period

今环境科学研究的热点和难题。气象条件的改变在很大程度上影响着大气污染物的传输和浓度的时空分布, 因此可以根据气象因子来作出空气污染预

报。国内朱蓉等^[36]利用平流扩散方程开发出CAPPS系统, 并在国内12个省市气象部门得到应用。由于该类模式在化学以及污染源等方面的局限

性，使其集中应用于无化学活性污染物的扩散和简单的有一定化学活性的轨迹模拟。中国科学院大气物理研究所自主开发了由 α 中尺度、 β 中尺度气象模式和浓度预报模式组成的城市空气污染数值预报模式系统，该系统应用于济南等城市，具有较好的预报性能^[37]。NAQPMS 系统不仅能够预报城市尺度的空气质量，还可以研究区域尺度的空气污染问题，并且实现了双向嵌套，这样可以充分考虑沙尘、酸性污染物等的输送对城市尺度空气质量的影响。

目前，NAQPMS 已经实现了模式系统的并行化和业务化，得到了广泛的认可，并且投入到业务运行中。目前，该模式已经在全国多个省市地区投入业务运行，取得了较好的效果。这些地区分别为北京、上海、深圳、郑州及台湾等。郑州市环保部门从 2001 年已开始采用此模式系统来进行业务预报。目前，上海市、北京市、深圳市环境监测中心已采用此模式系统进行业务数值预报，相关的设

置、软硬件初步调试已完成，相关的效果测试均在进展之中。

该模式系统还连续三年为台湾春季沙尘密集观测计划提供了实时预报结果，台湾大学及中央研究院环境变迁研究中心也采用此系统研究台湾的高污染（臭氧和悬浮颗粒物）的形成和产生机制，并为台湾南部的观测实验提供预报结果。上海的模式系统应用已经取得了很好的成绩，并且实现了网络化管理和查询。从上海不同时段 SO₂ 和 PM₁₀（图 4、5）的模拟与观测结果对比来看，模式结果与观测值之间存在很好的对应关系，这说明该系统在上海的运行效果很好^[23]。

4 参与模式比较计划

NAQPMS 模式系统的开发及使用者积极地发起并参与了很多国际模式比较计划。参加模式比较计划的目的是比较不同模式各个模块的优劣，吸收

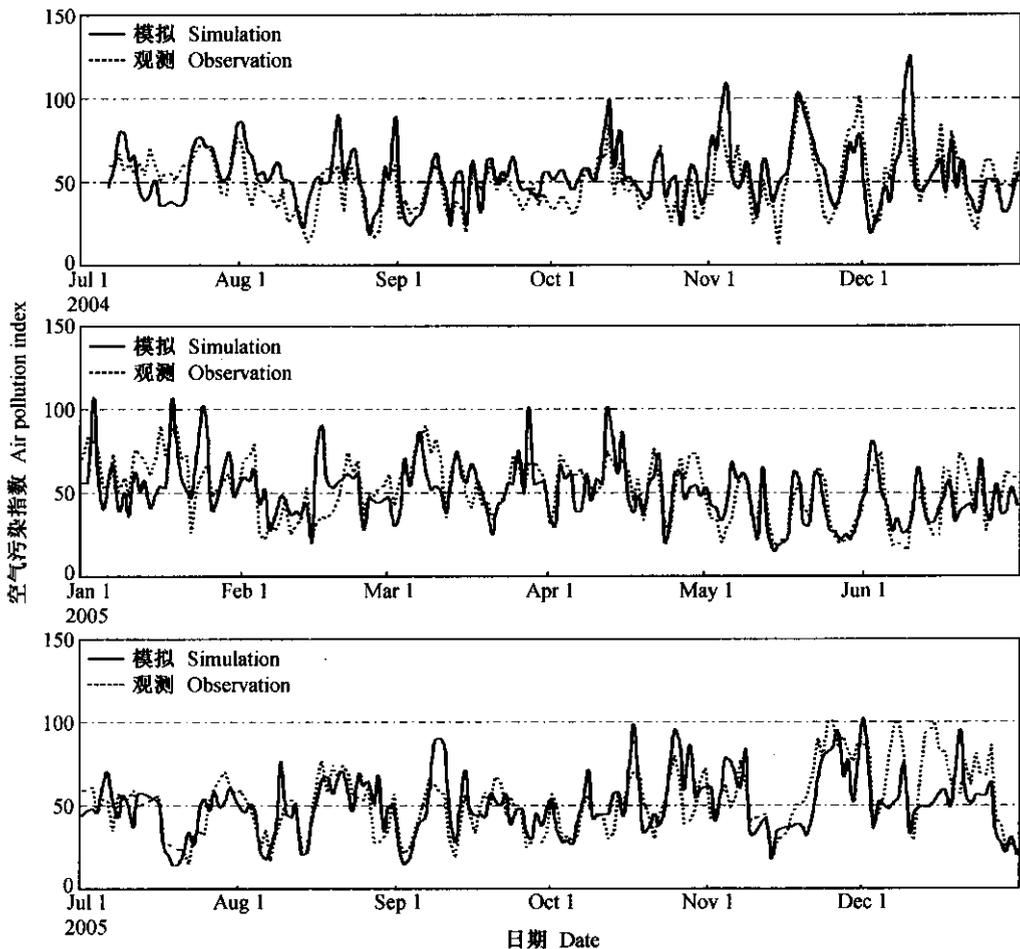


图 4 上海不同时段内模拟与观测的 SO₂ 对比

万方数据

Fig. 4 Comparison of SO₂ between simulation and observation in Shanghai during various periods

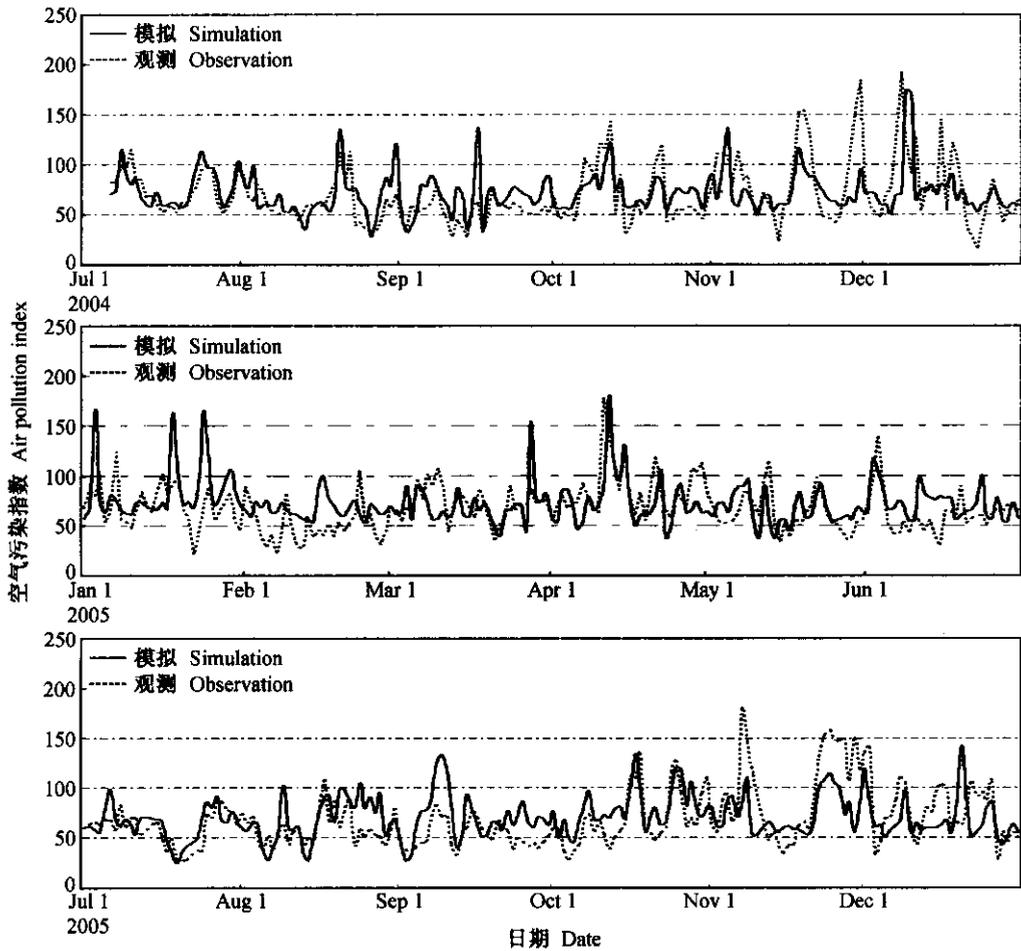


图5 上海站不同时段内模拟与观测的PM₁₀对比

Fig. 5 Comparison of PM₁₀ between simulation and observation in Shanghai during various periods

其他模式的经验,对现有模式进行改进,以便更好地发展适用于我国和东亚地区的模式系统。

参加了中国、日本和韩国联合主持的东北亚污染物跨国界长距离输送国际计划(Long-Range Transboundary Air Pollutants in Northeast Asia,简称LTP Project)^[22, 38]。该计划始于2002年,主要是利用现有的排放源资料,运用数值模式模拟不同年份、不同季节的各类污染物输送问题,旨在弄清东北亚(中国、朝鲜和日本等地)污染物长距离跨界输送的基本情况。

中国科学院大气物理研究所王自发研究员和日本九州大学Uno教授共同发起了沙尘模式比较计划(DMIP),把应用于东亚地区的约12个沙尘模式中的数学处理及其物理、化学等过程进行综合比较,以期集成出更优秀的沙尘数值预报系统(见<http://ncc.mep.gov.cn/DMIP/index.htm>)。参加比

较的沙尘模式来自不同的国家和地区,这些模式对相同的典型沙尘暴个例进行模拟,系统地比较各类模式系统的框架构成,评估各个模式对沙尘发生、输送和沉降过程的模拟性能,并分析模拟结果存在差异的可能原因,在此基础上对模式系统进行改进,发展适合于东亚地区的新的沙尘模式系统。研究表明,参加比较的模式使用了不同的沙尘排放方案、水平和垂直分辨率、数值方法和气象模式,这造成了模拟结果的巨大差异。在对2002年春季的两个强沙尘暴过程的模拟结果中,可以清楚地看到其间的差异。大多数模式模拟的沙尘浓度基本与PM观测结果一致。模式可以较好地模拟出沙尘爆发和消亡的时间。然而,模式结果在数量上的差异是非常大的,每个模式模拟的最大浓度值会相差2~4倍之多。而模拟的沙尘排放通量和主要源区也有很大的差异,这在塔克拉玛干沙漠和蒙古尤

为显著，这说明每个模式对于沙尘源区的认识还有着很大的不确定性。在北京和长崎两个点的模拟所得的沙尘垂直浓度分布也有着明显的差异。这些结果表明目前对于东亚地区沙尘暴的发生、输送和清除过程的模拟有着较大的不确定性，还需要进一步改进东亚地区的沙尘模式^[39]。

第二期东亚大气化学输送模式比较计划 (MICS-Asia phase II) 为 IIASA (奥地利)、ADORC (日本)、IAP (中国)、CGRER (美国) 等单位发起的关于东亚污染物输送模式的比较计划，主要侧重于氮氧化物、臭氧、PM₁₀ 等的比较。此计划的深入开展必将促进相关模式的发展及其应用 (见 <http://www.adorc.gr.jp/adorc/mics.html>)。东亚酸沉降观测网 (EANET) 资料^[40] 用来验证模式的效果。在这项计划中，8 个酸雨输送和沉降模式提交了模拟结果，模拟的时间分别为 2001 年 3 月、7 月、12 月以及 2002 年 3 月。比较的物种主要包括 SO₂、HNO₃、NH₃、O₃、SO₄²⁻、NO₃⁻ 和 NH₄⁺ 等。模拟的结果与 EANET 资料进行了对比分析，以此来验证各个模式对东亚地区化学输送的模拟能力。比较了各个模式模拟的气象场、垂直分布、地表浓度的变化、输送以及沉降的模拟结果，研究结果表明所有的模式对垂直分布和成分变化的模拟结果比较合理。模式大体上可以抓住主要的输送和沉降区域，但是数值上有着比较大的差异。这与模式中所用的化学机理、气象场、沉降机制以及一些参数的选择等有着直接的联系^[41~43]。

5 同化系统

观测和模式模拟在当前大气化学的研究中扮演着重要的角色。随着遥感技术的应用，观测技术已经从少量传统的常规观测发展到大量的非常规观测，如卫星遥感。如何利用观测信息，从而使模式预报结果最优化是大气化学模式发展的一个重要方向。将三度空间和不同时间层上的观测和模式的信息结合起来的一种客观方法就是四维资料同化。在数值预报中它主要是为模式提供较优的初始场和再分析资料集。

四维资料同化技术较早被应用于气象和海洋的研究，大气化学中资料同化方法研究始于 20 世纪 90 年代。目前，国际上开展大气化学资料同化研究的主要有美国、德国、荷兰、法国和欧洲中期天

气预报中心等国家和组织。国际上流行的同化方法主要是四维变分同化 (4DVAR) 和集合卡尔曼滤波 (EnKF)。有趣的是，大多数研究都是针对平流层卫星观测资料的同化及分析。这是因为卫星观测覆盖全球，使得卫星观测资料对化学成分全球分布研究有很大的吸引力。在国内，区域及城市空气质量模式系统的研究正处于起步阶段，中国科学院大气物理研究所、中国气象局开发了各自的城市空气质量模式系统，但是在城市空气质量模式系统中对大气化学物种的同化研究几乎是一片空白。

发展了基于最优插值技术^[44] 的同化系统，并初步应用到上海。利用最优插值方法对 PM₁₀、SO₂ 和 NO₂ 进行连续 20 天的同化试验结果表明，无论是 PM₁₀、SO₂ 还是 NO₂，同化偏差的平均值均小于 20 μg/m³，比未同化偏差平均值至少减少了 50%。同化偏差小于未同化偏差天数都在 16 天以上。采用此法利用上海市常规观测站观测数据对臭氧进行逐时同化，同化后的分析场作为下个时刻模式积分的初始场向前预报。取两个未经同化的独立观测站点的观测数据作检验 (图 6)。结果表明同化后的分析场比同化前更接近实际观测，观测数据能有效地修正模式预报结果。

6 结语与展望

目前正面临着大气环境的新挑战：全国大气污染形势严峻，温室气体和气溶胶颗粒物排放居高不下，使得我国面临着全球最严峻、最复杂的环境问题，尤其区域污染的全球化，造成了国家在气候和环境外交问题上的空前压力。与此同时，随着城市大气环境污染加剧，城市群区域复合污染显现，环境健康问题日益突出。这些挑战决定模式以后的发展方向。一方面，必须加深理论研究，尤其是加强影响我国大气环境重要大气成分变化的关键物理和化学过程的基础理论和方法研究的开展，以此获得具有中国特色的关键物理、化学过程的认识，为大气环境模式的建立提供坚实的理论基础。另一方面则是建立多尺度多过程的大气环境模式系统，实现全球-区域-城市的双向嵌套模式系统框架，以便开展从区域到全球尺度的各类大气污染 (沙尘暴、光化学污染、城市悬浮颗粒物、酸雨等) 的变化规律及其与天气系统相互作用的研究，从而实现全球、区域和各个城市空气质量实时预报，计算硫、氮沉

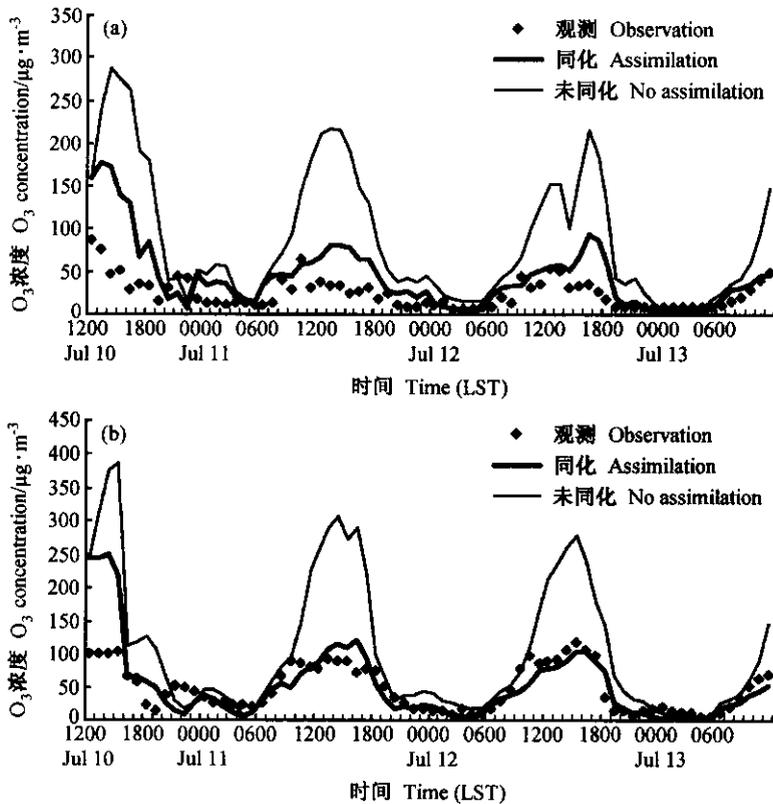


图6 两个独立检验观测点上未同化与同化后模式模拟结果的对比

Fig. 6 Comparison between no assimilation modeling result and assimilation modeling result at two absolute test observation sites

降, 提供海洋沙尘通量的输入, 有助于海洋生态研究的深入, 从而合理评估大气污染对全球生态系统的影响。目前, 中国科学院大气物理研究所已经开发了全球环境大气输送模式 (GEATM) [11], 该模式包括气溶胶模块和化学模块等部分, 化学模式能够模拟 32 种化学物质的全球分布, 研究表明该模式能够很好地模拟沙尘、硫酸盐以及黑炭等物种的全球变化。此外, 该模式还需要更多地集成遥感、观测等资料, 进一步加强模式的合理性。未来将以此模式为基础, 发展大气环境四维同化技术及集合预报技术, 设计反映中国特殊排放和源汇过程的新一代大气环境模式系统, 为阐明、制定排放源控制对策和城区规划提供一个科学实用的模式工具。另外, 由于污染排放源的不确定性对大气化学模式预报结果具有重大影响, 故利用资料同化技术对排放源进行反演将是未来大气化学资料同化研究的热点之一。

参考文献 (References)

[1] Draxler R K, Hess G D. An overview of the Hysplit_4 mod-

eling system for trajectories, dispersion and deposition. *Aust. Meteor. Mag.*, 1998, **47**: 295~308

- [2] Barrett K. Dry deposition in the EMEP NO_x model: the over-sea parameterization. EMEP/MSC-w note 3/94. Norwegian Meteorological Institute, Oslo, 1994
- [3] Sistla G, Civerolo K, Hao W, et al. An evaluation of the UAM-V predicted concentrations of carbon monoxide and reactive nitrogen compounds over the eastern United States during summer 1995. *J. Air Waste Manag. Assoc.*, 2002, **52** (11): 1324~1332
- [4] 房小怡, 蒋维楣, 吴涧, 等. 城市空气质量数值预报模式系统及其应用. *环境科学学报*, 2004, **24** (1): 111~115
Fang Xiaoyi, Jiang Weimei, Wu Jian, et al. Study on the development of numerical model system to predict urban air quality. *Acta Scientiae Circumstantiae* (in Chinese), 2004, **24** (1): 111~115
- [5] ENVIRON International Corporation. User's Guide Comprehensive Air Quality Model with Extensions (CAMx) Version 3.00. Novato, California, 2000, December (www.camx.com)
- [6] Zhang M G, Uno I, Carmichael G R, et al. Large-scale structure of trace gas and aerosol distributions over the western Pacific Ocean during the Transport and Chemical Evolution Over the Pacific (TRACE-P) experiment. *J. Geophys.*

- Res., 2003, **108** (D21): 8820, doi:10.1029/2002JD002946
- [7] 雷孝恩, 张美根, 韩志伟, 等. 大气污染数值预报基础和模式. 北京: 气象出版社, 1998. 321pp
Lei Xiaoen, Zhang Meigen, Han Zhiwei, et al. *Bases and Models for Air Pollution Numerical Forecasting* (in Chinese). Beijing: China Meteorological Press, 1998. 321pp
- [8] An J L, Ueda H, Matsuda K, et al. Simulated impacts of SO₂ emissions from the Miyake volcano on concentration and deposition of sulfur oxides in September and October of 2000. *Atmospheric Environment*, 2003, **37**: 3039~3046
- [9] 王体健, 李宗恺, 南方. 区域酸性沉降的数值研究 I. 模式. 大气科学, 1996, **20** (5): 606~614
Wang Tijian, Li Zongkai, Nan Fang. Numerical modeling of regional acid deposition. Part I: Model. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences (Scientia Atmospherica Sinica)* (in Chinese), 1996, **20** (5): 606~614
- [10] Wang Z F, Maeda T, Hayashi M, et al. A nested air quality prediction modeling system for urban and regional scales; application for high-ozone episode in Taiwan. *Water, Air, and Soil Pollution*, 2001, **130**: 391~396
- [11] 罗淦, 王自发. 全球环境大气输送模式 (GEATM) 的建立及其验证. 大气科学, 2006, **30** (3): 504~518
Luo Gan, Wang Zifa. A global environmental atmospheric transport model: Model description and validation. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences* (in Chinese), 2006, **30** (3): 504~518
- [12] Luecken D J, Tonnesen G S, Sickles J E. Differences in NO_y speciation predicted by three photochemical mechanisms. *Atmospheric Environment*, 1999, **33**: 1073~1084
- [13] Wang, Z F, Huang M, He D, et al. Sulfur distribution and transport studies in East Asia using Eulerian model. *Advances in Atmospheric Sciences*, 1996, **13**: 399~409
- [14] 黄美元, 王自发. 东亚地区黄沙长距离输送模式设计. 大气科学, 1998, **22** (4): 625~637
Huang Meiyuan, Wang Zifa. A model for long-range transport of yellow-sand in East Asia. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences (Scientia Atmospherica Sinica)* (in Chinese), 1998, **22** (4): 625~637
- [15] 黄美元, 王自发, 何东阳, 等. 我国冬夏季硫污染物沉降与跨地区输送模拟研究. 科学通报, 1996, **41** (11): 1013~1016
Huang Meiyuan, Wang Zifa, He Dongyang, et al. Modeling studies on sulfur deposition and transport among different areas in China in summer and winter. *Chinese Science Bulletin* (in Chinese), 1996, **41** (11): 1013~1016
- [16] 王自发, 黄美元, 何东阳, 等. 关于我国和东亚酸性物质的输送研究 I. 三维欧拉污染物输送实用模式. 大气科学, 1997, **21** (3): 367~378
Wang Zifa, Huang Meiyuan, He Dongyang, et al. Studies on transport of acid substance in China and East Asia. Part I. 3-D Eulerian transport model for pollutants. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences (Scientia Atmospherica Sinica)* (in Chinese), 1997, **21** (3): 367~378
- [17] 王自发, 黄美元, 高会旺, 等. 关于我国和东亚酸性物质的输送研究 II. 硫化物浓度空间分布特征及季节变化. 大气科学, 1998, **22** (5): 693~700
Wang Zifa, Huang Meiyuan, Gao Huiwang, et al. Studies on transport of acid substance in China and East Asia. Part II: Spatial distribution of sulfur and its seasonal variation. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences (Scientia Atmospherica Sinica)* (in Chinese), 1998, **22** (5): 693~700
- [18] 王自发, 安俊岭, 高会旺, 等. 未来东亚地区硫化物沉降及输送的预测. 气候与环境研究, 1998, **3** (2): 134~141
Wang Zifa, An Junling, Gao Huiwang, et al. Estimation of sulfur deposition and transport in China and East Asia in future. *Climatic and Environmental Research* (in Chinese), 1998, **3**(2): 134~141
- [19] Wang Z F, Ueda H, Huang M Y. A deflation module for use in modeling long-range transport of yellow sand over East Asia. *J. Geophys. Res.*, 2000, **105**: 26947~26959
- [20] Chen J P, Wang Z F, Young C Y, et al. Simulations of Asian yellow dust incursion over Taiwan for the spring of 2002 and 2003. *Terrestrial, Atmospheric and Oceanic Sciences, TAO*, 2004, **15** (5): 949~981
- [21] Wang Z F, Sha W, Ueda H. Numerical modeling of pollutant transport and chemistry during a high-ozone event in Northern Taiwan. *Tellus*, 2000, **52B** (5): 1189~1205
- [22] An J, Huang M, Wang Z, et al. Numerical regional air quality forecast tests over the Mainland of China. *Water, Air and Soil Pollution*, 2001, **130**: 1781~1786
- [23] 徐文帅. 上海市空气质量状况及重空气污染事件数值模拟研究. 中山大学大气科学系硕士学位论文. 2005
Xu Wenshuai. Research on the status of air quality and numerical simulation study on the air pollution episodes in Shanghai. M. S. thesis (in Chinese), the department of atmosphere science, Sun Yat-Sen University. 2005
- [24] 周慧, 王自发, 安俊岭, 等. 城市空气污染持续维持机制研究 I. 2002 年西安市空气污染持续维持过程分析及其气象成因. 气候与环境研究, 2005, **10** (1): 124~131
Zhou Hui, Wang Zifa, An Junling, et al. The mechanism of urban air pollution persistence. Part I: The analysis of air pollution persistence and its relate meteorology in Xi'an in 2002. *Climatic and Environmental Research* (in Chinese), 2005, **10** (1): 124~131
- [25] Zhao X J, Wang Z F, Zhuang G S, et al. Model study on the transport and mixing of mineral dust with pollution aerosol during Asian dust storm in March 2002. *Terrestrial Atmospheric and Oceanic Sciences*, 2006, in press
- [26] 赵秀娟. 东亚沙尘气溶胶长距离输送、混合及其海洋沉降量研究. 北京师范大学化学学院大气环境研究中心博士学位论

- 文, 2006
- Zhao Xiujuan. Study of the long range transport, mixing and oceanic deposition of the dust aerosol in East Asia. Ph. D. dissertation (in Chinese). Center for atmospheric environmental study, department of chemistry, Beijing Normal University. 2006
- [27] Uematsu M, Wang Z, Uno I. Atmospheric input of mineral dust to the western North Pacific region based on direct measurements and a regional chemical transport model. *Geophys. Res. Lett.*, 2003, **30** (6): 1342, doi:10.1029/2002GL016645
- [28] Ogawa S, Sha W, Iwasaki T, et al. A numerical study on the interaction of a sea-breeze front with convective cells in the daytime boundary layer. *Journal of the Meteorological Society of Japan*, 2003, **81** (4): 635~651
- [29] Sha W, Ogawa S, Iwasaki T, et al. A numerical study on the nocturnal frontogenesis of the sea-breeze front. *Journal of the Meteorological Society of Japan*, 2004, **82** (2): 817~823
- [30] Wang W, Hatakeyama S, Wang Z, et al. Intensive aircraft-based measurements of air pollutants over the eastern coast of China in spring 2002 (I) — The distribution of sulfur dioxide and transport flux. *Water, Air and Soil Pollution*, 2006, in press
- [31] Chen J H, Wang Z, Hatakeyama S, et al. Intensive aircraft-based measurements of air pollutants over the eastern coast of China in spring 2002 (II) — The NO_x distributions and ozone modeling studies. *Water, Air and Soil Pollution*, 2006, in press
- [32] Lin C Y, Wang Z, Chou C, et al. A numerical study of autumn high ozone episodes over southwestern Taiwan. *J. Geophys. Res.*, 2006, in press
- [33] Wang Z F, Li J, Wang X, et al. Modeling of regional high ozone episode observed at two mountain sites (Mt. Tai and Huang) in East China. *Journal of Atmospheric Chemistry*, 2006, in press
- [34] Kajino M, Ueda H, Satsumabayashi H, et al. Impacts of the eruption of Miyakejima Volcano on air quality over far east Asia. *J. Geophys. Res.*, 2004, **109** (D21): 204, doi:10.1029/2004JD004762
- [35] Wang Z F, Akimoto H, Uno I. Neutralization of soil aerosol and its impact on the distribution of acid rain over East Asia; observations and model results. *J. Geophys. Res.*, 2002, **107** (D19): 4389, doi:10.1029/2001JD001040
- [36] 朱蓉, 徐大海, 孟燕君, 等. 城市空气污染数值预报系统 CAPPs 及其应用. *应用气象学报*, 2001, **12**(3): 267~278
Zhu Rong, Xu Dahai, Meng Yanjun, et al. City air pollution numerical prediction system and its application. *Quarterly Journal of Applied Meteorology* (in Chinese), 2001, **12** (3): 267~278
- [37] 韩志伟, 杜世勇, 雷孝恩, 等. 城市空气污染数值预报模式系统及其应用. *中国环境科学*, 2002, **22** (3): 202~206
Han Zhiwei, Du Shiyong, Lei Xiaoen, et al. Numerical model system of urban air pollution prediction and its application. *China Environmental Science* (in Chinese), 2002, **22** (3): 202~206
- [38] An J L, Ueda H, Wang Z F, et al. Simulations of monthly mean nitrate concentrations in precipitation over East Asia. *Atmospheric Environment*, 2002, **36** (26): 4159~4171
- [39] Uno I, Wang Z, Chiba M, et al. Dust Model Intercomparison (DMIP) study over Asia—Overview. *J. Geophys. Res.*, 2006, **111**: D12213, doi: 10.1029/2005JD006575
- [40] 叶小峰, 王自发, 安俊岭, 等. 东亚地区降水离子成分时空分布及其特征分析. *气候与环境研究*, 2005, **10** (1): 115~123
Ye Xiaofeng, Wang Zifa, An Junling, et al. Analysis of the spatial-temporal distribution and ion features of components of precipitation in East Asia. *Climatic and Environmental Research* (in Chinese), 2005, **10** (1): 115~123
- [41] Wang Z F, Xie F, Sakurai T, et al. Model inter-comparison and evaluation of acid deposition in MICS-Asia Phase II study. *Atmospheric Environment*, 2006, Submitted
- [42] Han Z W, Sakurai T, Ueda H, et al. Model intercomparison and evaluation of ozone and relevant Species -MICS-Asia Phase II study. *Atmospheric Environment*, 2006, submitted
- [43] Carmichael G R. MICS-Asia II overview paper. *Atmospheric Environment*, 2006, submitted
- [44] 崔应杰, 王自发, 朱江, 等. 空气质量数值模式预报中资料同化的初步研究. *气候与环境研究*, 2006, (待刊)
Cui Yingjie, Wang Zifa, Zhu Jiang, et al. A preliminary study on data assimilation for numerical air quality model prediction. *Climatic and Environmental Research* (in Chinese), 2006, in press