多尺度空气质量模式系统及其验证 I. 模式系统介绍与气象要素模拟

张美根

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

摘 要 主要介绍一个多尺度空气质量模式系统及其在东亚地区的应用。这套模式系统充分考虑了天气系统与 中、小尺度气象过程对污染物的输送、扩散、转化和迁移过程的影响,区域与城市尺度之间大气污染物的相互影 响,以及污染物在大气中的气相与液相化学过程、非均相化学过程、气溶胶过程和干湿沉积过程对浓度分布的影 响,可用于区域与城市尺度对流层臭氧、大气气溶胶、能见度和其他空气污染物的预报和环境评价。模拟的气象 要素(风向、风速、温度和湿度)与 TRACE-P 和 ACE-Asia 期间三架飞机上获取的观测资料的比较结果表明,模 拟值与其相应的观测值具有非常好的一致性,它们的相关系数都超过了 0.96。 关键词 空气质量模式 臭氧 气溶胶 空气污染预报

文章编号 1006 - 9895(2005)05 - 0805 - 09 中图分类号 X16 文献标识码 A

A Multi-Scale Air Quality Modeling System and Its Evaluation I. Introduction to the Model System and Simulation of Meteorological Parameters

ZHANG Mei-Gen

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

Abstract A multi-scale air quality modeling system and its application to East Asia are introduced. This modeling system consisting of two major components, the Models-3 Community Multi-scale Air Quality modeling system (CMAQ) and the Regional Atmospheric Modeling System (RAMS), has the capability to take into account the influences of synoptic weather system and meso- and micro-scale meteorological processes upon transport, diffusion, transformation and deposition of atmospheric pollutants, the interactions of the pollutants in regional and urban scales, and the impacts of gaseous, aqueous and heteorogeneous chemistry, aerosol processes and deposition upon spatial-temporal concentration distributions of the pollutants, and can be used to forecast tropospheric ozone and aerosol concentrations, visibility and mixing ratios of other pollutants and assess air quality in regional and urban scales. In this application CMAQ is configured with the chemical mechanism of the Regional Acid Deposition Model version 2 (RADM2), including organic aerosol processes from direct emissions and production from long-chain alkanes, alkyl-substituted benzene, etc. To depict aerosol evolution processes in the atmosphere, the aerosol module, a major extension of the Regional Particulate Model (RPM), is included. In the module the particle size distribution is represented as the superposition of three lognormal sub-distributions, and the processes of coagulation, particle growth by the addition of new mass, particle formation, dry deposition, cloud processing, aerosol chemistry, etc.

收稿日期 2004-04-28, 2005-03-25 收修定稿

作者简介 张美根, 男, 1964年出生, 博士, 研究员, 主要从事大气环境方面的研究。E-mail: mgzhang@mail. iap. ac. cn

资助项目 中国科学院创新项目 KJCX2-SW-H08、中国科学院院长重点基金和中国科学院"引进国外杰出人才"计划"沙尘输送及其气候 环境影响的数值模拟"

are included. While regional three-dimensional meteorological fields including boundary-layer turbulence, cloud and precipitation necessary for CMAQ simulations are provided by RAMS instead of the default meteorological driver MM5.

With the modeling system, meteorological fields and three-dimensional distributions of trace gases and aerosols over East Asia during the period 22 April to 05 May 2001 are simulated. During the simulations, three dimensional meteorological fields for the RAMS inputs are obtained from the European Center for Medium-range Weather Forecast (ECMWF) $1^{\circ} \times 1^{\circ}$ reanalysis datasets, and they are available every six hours. For CMAQ, the anthropogenic emissions of nitrogen oxides, carbon monoxide, volatile organic compounds (VOCs) and sulfur dioxide are obtained from the emission inventory of $1^{\circ} \times 1^{\circ}$ specially prepared to support the projects of the Transport and Chemical Evolution over the Pacific (TRACE-P) and the Aerosol Characterization Experiment-Asia (ACE-Asia) and from the Emission Database for Global Atmospheric Research (EDGAR). In order to evaluate the model performance, model results including meteorological parameters (such as wind speed and direction, temperature and water vapor content) and concentrations of some trace gases and aerosols (such as ozone, OH radicals, carbon monoxide, nitrogen oxides, ethane, sulfate and nitrate aerosols) are compared with observations obtained from instruments on board three aircraft during the TRACE-P and the ACE-Asia field campaigns being conducted over a broad area covering northeastern Asia and the western Pacific in the springtime of 2001. In comparing the model results with the aircraft measurements, the model results are sampled along flight tracks and with a 1 hour temporal resolution. Comparison of the simulated meteorological parameters (such as wind speed and direction, temperature and specific humidity) with the observations shows that the modeled meteorology reproduces quantitatively most of the major observed features. For example, the correlation coefficients for wind speed and direction, temperature and specific humidity each exceed 0.96 for all TRACE-P and ACE-Asia observation points. Comparison results about trace gases and aerosols are analyzed in companion papers.

Key words air quality model, ozone, aerosol, air pollution forecast

1 引言

空气污染问题越来越受到人们的广泛关注,这 是因为它不仅引发很多疾病,而且严重破坏生态平 衡,对21世纪的可持续稳定发展构成巨大威胁。 目前,我国经济持续高速发展,能源与交通(特别 是城市汽车拥有量)规模的扩大、城市人口的膨胀、 大型工业开发区的发展使得我国的城市乃至区域范 围的大气污染日益严重。近年来,有关北京市大气 污染物的观测研究表明,尽管一些控制污染排放的 制度和措施得以采用和实施,北京市大气中二氧化 硫(SO₂)污染指标在下降,但由于机动车排放的氮 氧化物(NO_x)、碳氢化合物(HC)和可吸入颗粒物 (空气动力学等效直径小于 10 µm)等污染物在逐年 增加,使得以臭氧(O₃)为代表的光化学污染日趋严 重。为了预测大气污染变化趋势,防止环境灾害的 发生,同时为增强人民的环保意识,为环境的控 制、管理和决策部门提供及时、准确和全面的环境

质量信息,国家环境保护总局和中国气象局联合发 布了关于从2001年6月5日起在全国47个重点城 市进行空气污染预报的工作通知^①,并且将中国科 学院大气物理研究所于1998年研制的城市空气质 量预报模式系统^[1,2]作为首选预报模式系统在全国 推广应用。目前,该模式系统已成功地应用于天 津、沈阳、济南和广州等城市的空气质量预报^[3~5]。

考虑到上述空气污染预报模式系统^[2,3]中存在 的不足和大气化学与大气环境理论研究的需要, 2000年以后我们着手建立了一套新的空气质量模 式系统。在新的模式系统中吸收了一些当今大气化 学与大气环境领域的最新研究成果。与原来的模式 系统相比,新的模式系统具有以下三个重要特点: (1)利用套网格技术将区域与城市大气环境问题结 合起来加以研究,充分考虑了区域与城市尺度之间 天气系统和大气污染物的相互影响,并且实现了气 象模式与空气质量模式坐标系的一致,大大减少了 这两个模式之间因数据传输而引起的误差。(2)更 新了气象模式。在边界层结构的模拟方面作了很大的改进(如增加了植物冠层、地面雪盖等对边界层结构的影响)。此外,增加了对海盐气溶胶排放的诊断。(3)更新了空气质量模式,增加了污染物的物种,完善了对污染物物理和化学过程的处理,如增加了次生气溶胶(硫酸盐、硝酸盐、铵盐和有机碳)和工业排放的烟尘等,并考虑了气溶胶的生长、聚变和碰变及其液相与非均相化学过程。

这套模式系统建成后,先后对东亚地区的 O₃、 一氧化碳(CO)、SO₂等污染物的输送与演变过程进 行了多个个例模拟^[6~12]。为了全面验证这套模式系 统,在 2001 年春季 TRACE-P^[13] (the Transport and Chemical Evolution over the Pacific)和 ACE-Asia^[14] (the Aerosol Characterization Experiment-Asia)观测 期间获取的大量监测资料(如地面、飞机和舰船上采 集的气象资料和几十种污染物浓度资料)的基础上, 我们利用这套模式系统对 TRACE-P 和 ACE-Asia 观测期间东亚地区气象场和污染物浓度分布进行了 模拟,并将模拟结果与相应的观测资料进行了比 较。本文侧重介绍模式系统的构成和气象要素(如 风向、风速、温度和湿度)的模拟效果。

2 模式系统介绍

污染物在大气中的行为可分为输送、扩散、迁 移和转化四个过程。为了合理地描述大气污染物的 分布及其变化趋势,在空气质量模式系统中需要充 分考虑多尺度、高分辨率、多物种和多过程的特 点:(1)污染物浓度的时空分布受局地气象条件的 影响,如生物源的排放率与气温密切相关、云和降 水过程对臭氧和硫酸盐的形成有重要影响、大气污 染物的扩散能力受大气湍流控制等,而局地气象条 件取决于天气系统和中、小尺度天气过程(如主要 由地面非均匀性强迫产生的和由移行大尺度扰动不 稳定性强迫产生的中尺度系统)[15]的共同作用。此 外,我国经济的持续高速发展,能源与交通(特别 是城市汽车拥有量)规模的扩大、城市人口的膨胀 和大型工业开发区的发展使得一个城市或地区的空 气质量很难与周边地区的污染排放分离开来,如许 多研究表明,北京地区的大气污染状况不仅与该地 区的污染排放量有关,而且与天津、河北、山西等 地排放的外来污染物有关,所以城市与区域尺度之 间大气污染物的输送过程对于污染物的浓度分布具 有重要影响。(2)大气污染物、热量、水汽及其通量 的大部分来源于大气边界层下层。在大气边界层 内,这些量的垂直切变非常明显,呈多级值或多中 心分布,大气稳定度变化最激烈的区域也在大气边 界层下层。考虑到垂直方向污染物浓度分布的剧烈 变化和人群呼吸道高度等因素,模式系统必须有较 高的垂直分辨率。此外,当模拟区域为城市时,为 了反映功能区污染源结构和下垫面非均匀性的影 响,模式系统必须有较高的水平分辨率。一些污染 物,如光化学反应生成物的浓度具有很强的日变 化,为了反映这种日变化,模式系统必须有较高的 时间分辨率。(3)大气中污染物的物种很多, 气态 的有 NO_x 、 SO_2 、HC、 O_3 和 CO, 固态的有硫酸盐 (SO²⁻)、硝酸盐(NO⁻₃)、有机碳(OC)、黑碳(BC)、 扬尘和海盐粒子。这些物质在大气中相互作用,使 得描述一种污染物的浓度分布要涉及到许多其他污 染物及其复杂的化学过程,如 O₃的生成与 NO_x、 HC、CO、SO₂等 20 多种主要化学物质。(4)大气污 染物的输送与演变过程非常复杂,其内容涉及到污 染物在大气、土壤、水体和生物中及其界面上的物 理、化学和生态过程。如 SO2 被释放到大气中后, 一部分可以为云水或雨水吸收, 经液相化学过程转 化为 SO²⁻, 一部分可以经气相化学过程氧化为气 态硫酸(H_2SO_4);而后,一部分 H_2SO_4 为云水或雨 水吸收, 经液相化学过程转化为 SO₄²⁻, 一部分 H_2SO_4 经气粒转换形成 SO₄²⁻,还有一部分 H₂SO₄ 吸附于已经存在的气溶胶表面,经非均相化学过程 转化为 SO_4^{2-} 。大气中存在的 SO_2 、 $H_2 SO_4$ 和 SO_4^{2-} 可以被输送、扩散到其他地方,也可以被降水冲刷 到地面,也可以为土壤、水体和植被的吸附作用加 上自身的重力沉降和湍流影响而沉积到地面。

鉴于上述多尺度、高分辨率、多物种和多过程的特点,我们建立了一个具有套网格功能的空气质量模式系统,以反映多尺度天气过程对大气污染物的输送、扩散、迁移和转化过程的影响以及局地与周边地区大气污染物的相互影响。该模式系统主要由区域大气模拟系统(Regional Atmospheric Modeling System,简称 RAMS)^[16]和多尺度空气质量模拟系统(Community Multi-scale Air Quality modeling system,简称 CMAQ)^[17]两部分组成。RAMS采用地形追随坐标系[$\sigma_z = z_h(z - z_g)/(z_h - z_g)$,其中 z_e 和 z_h 为地形标高度和模式顶高度],对

天气过程和下垫面非均匀性对大气边界层结构的影响具有很好的模拟能力^[18],能够为 CMAQ 提供高分辨率的有关大气边界层结构的信息。RAMS 是一个比较完善的中尺度动力学模式,目前广泛应用于理论研究和业务天气预报中。

CMAQ是美国环境保护局最新一代空气质量 模式系统 Models-3 的核心部分, 吸收了许多当今 大气化学与大气环境领域内的最新研究成果,可用 于区域和城市尺度光化学烟雾、区域酸沉降、大气 颗粒物污染等大气污染问题的理论研究与业务预 报。本系统中的 CMAQ 是在 1999 年版本的基础上 发展起来的:更换了 CMAQ 的气象驱动模块, 增 加了海盐、黑碳、有机碳等原生气溶胶,并且完善 了物理化学过程分析模块。改进后的 CMAQ 与原 版本相比,新版本采用了不同投影体系,在垂首方 向上采用了高度 (σ_z) 坐标系以取代压力 (σ_b) 坐标 系。用 oz 代替 op 是考虑到高度坐标更适合于描述 污染物在大气边界层中的物理化学过程,在污染源 的处理过程中也更加方便。模式的开发与应用牵涉 了很多的大气边界层物理和大气动力学方面的知 识, CMAQ 能够应用于东亚地区并合理地模拟了 该地区气象要素、对流层臭氧等体现了研究者的创 新性贡献。改进后的模式系统首次用于研究东亚地 区对流层臭氧^[6]。

3 气象要素模拟

利用上述模式系统,对东亚地区 2001 年 2 月



图 1 模式系统中气象模式(外框部分)和化学输送模式(内框部 分)的模拟区域

Fig. 1 Model domains for RAMS (surrounded by the outer frame) and CMAQ (surrounded by the inside frame) used in this study

22日至5月5日之间的气象场和污染物浓度场进 行了模拟(模拟区域见图1)。图1中外框所包含的 区域为RAMS的模拟区域,内框所包含的区域为 CMAQ的模拟区域。这样选取模拟区域的目的是 为了减少气象模式的侧边界对污染物浓度分布的影 响和减少计算量。在水平方向RAMS和CMAQ网 格距均为80km,网格点数分别为100×90和78× 68。模式顶的高度约为23km,RAMS将之分为23 层,网格距在近地层较小(第1层厚度为150m,有 9层位于2km以下),而后随高度增加而加大(最 大值为1800m);CMAQ将其分为14层,其中最 下面的7层与RAMS的相同,以便详细探讨大气 边界层内的物理和化学过程。关于模式其他参数的 选取以及输入资料参阅文献[10]。

图 2~4 展示的是 TRACE-P 和 ACE-Asia 观 测期间三架飞机(DC-8、P-3B和C130)在模拟区域 观测到的风向、风速、温度和湿度及其相应的模拟 值随高度的变化。有关 2001 年 3~4 月间的气候特 征的分析参阅文献「13]。TRACE-P观测期间(2001 年2月底至4月初), DC-8和P-3B以香港、冲绳和 东京为基地,对南海、东海、黄海和西太平洋地区 的广大海域进行了 40 余次的强化观测,每次观测 时间都在8个小时以上,其中DC-8的飞行高度可 达 12 km。ACE-Asia 观测期间(2001 年 3 月底到 5 月初), C130 对黄海、东海、日本海以及日本列岛 及其附近海域进行了近 20 次观测,每次观测都持 续了8个多小时。由于飞机的观测频率较高(超过1 分钟1个值)、飞行速度很快,所以在比较模拟值与 飞机观测值时,我们取飞行过程中每5分钟的平均 值为基值(如经度、纬度、飞行高度、飞行时间、风速 和温度等),然后根据平均的经度、纬度、高度和时 间在模式输出结果中找出相应的计算值。

由图 2~4 可以看到,春季主导风为西风或偏 西风,特别是 2 km 以上高空更是如此。在 2 km 以 下由于地形非均匀性强迫和移行大尺度扰动等中、 小尺度系统的影响,风向具有很强的时空变化。在 同一高度,风速变化很大,特别是在对流层的中上 层,最大风速可达 80 m·s⁻¹。这可能与中纬度地 区西风急流有关。由这些图还可以看到,温度和水 汽比湿随高度减少,但由于对流过程和云的影响, 水汽比湿在 4~5 km 以下递减较慢。

比较模拟值与相应观测值可以发现,模式很好



图 2 飞机 DC-8 在第 6 次至第 17 次飞行过程中的观测值及其相应的模拟值: (a) 风向; (b) 风速; (c) 温度; (d) 湿度 Fig. 2 Vertical distributions of observed and simulated (a) wind direction (WD), (b) wind speed (WS), (c) temperature (Temp) and (d) specific humidity (QV) during the DC-8 flights 6 to 17



图 3 同图 2, 但为 P-3B 结果 Fig. 3 Same as in Fig. 2 but for P-3B



图 4 同图 2, 但为 C130 结果 Fig. 4 Same as in Fig. 2 but for C130



图 5 飞机 DC-8 于 2001 年 3 月 21 日飞行轨迹和飞行过程中的 观测值及其相应的模拟值:(a)水平飞行轨迹;(b)风向;(c) 风速;(d)温度;(e)湿度

Fig. 5 Horizontal flight track (a) and time series of observed and simulated wind direction (b), wind speed (c), temperature (d) and specific humidity (e) along the DC-8 flight track on 21 Mar 2001

地反映了观测到的风向、风速、温度和湿度的分布 特征,除模拟的温度值在8 km 以上稍微偏大之外, 模拟的风向、风速、温度和湿度与观测结果具有非常好的一致性,它们相关系数都大于 0.96,模拟值与观测值的平均比值接近于 1。由于 TRACE-P 和 ACE-Asia 观测时间先后持续了 2 个多月,观测区域覆盖了中国南海、东海、黄海、日本海和西太平洋等广大区域,因此,图 2~4 显示的观测与模拟结果的良好一致性可以表明,气象模式能够合理地描述模拟区域内局地气象条件和大气边界层结构的演变过程,可为研究大气污染物的输送和演变过程提供可靠的气象参数。

为了进一步展示气象模式模拟气象参数时空分 布的能力,在图 5 中给出了 DC-8 第 13 次飞行的路 径,观测的风向、风速、温度和湿度值及其相应的 模拟值。由图 5 可以看到,DC-8 约于 2001 年 3 月 20 日 2300 UTC 在东京附近的机场起飞后,先向西 南方向飞,接着折向西北,然后向北进入黄海海 域。在抵达 35°N 后折回并飞过日本九州、四国等 地返回原机场。在飞行过程中,飞机四次进入边界 层内进行观测,三次飞行高度超过 8 km,其观测到 的风向、风速、温度和湿度在时间和空间上变化很 大。从图 5 可以发现,模拟结果合理地反映了这些 时空变化。

4 小结

本文简要介绍了一个可用于区域与城市尺度对 流层臭氧、大气气溶胶、能见度和其他空气污染物 浓度预报的多尺度空气质量模式系统,并给出了这 套模式系统对气象要素模拟能力的检验结果。模拟 的风向、风速、温度和湿度与 TRACE-P 和 ACE-Asia 观测期间的飞机观测结果相比,模拟值与观测 值之间具有良好的一致性,其相关系数超过了 0.96,观测值与模拟值的平均比值接近于1。这种 良好的一致性说明模式系统对天气过程和下垫面非 均匀性对局地天气条件和大气边界层结构的影响具 有很好的模拟能力。由于本文所用观测资料都是在 西北太平洋海域上空获得的,所以模式系统对山区 或城市区域的环流特征和边界层结构的模拟能力还 需要进一步的检验。

参考文献 (References)

[1] 雷孝恩,张美根,韩志伟.大气污染数值预报基础与模式. 北京:气象出版社,1998.321 pp Lei Xiaoen, Zhang Meigen, Han Zhiwei. Bases and Models for Air Pollution Numerical Forecasting (in Chinese). Beijing: China Meteorological Press, 1998. 321pp

- 【2】张美根,韩志伟,雷孝恩.城市空气污染预报方法简述.气候与环境研究.2001,6(1):113~118
 Zhang Meigen, Han Zhiwei, Lei Xiaoen. Exposition of urban air pollution forecast methods. *Climatic Environ. Res.* (in Chinese), 2001, 6(1):113~118
- 【3】张美根,韩志伟,雷孝恩,等.天津市空气污染数值预报实验中的模式系统.气候与环境研究,1999,4(3):237~243
 Zhang Meigen, Han Zhiwei, Lei Xiaoen, et al. Modeling system applied to Tianjin air pollution forecasting experiment. *Climatic Environ. Res.* (in Chinese), 1999, 4(3):237~243
- [4] 韩志伟,张美根,雷孝恩,等.城市空气污染数值预报试验. 气候与环境研究,1999,4(3):283~290
 Han Zhiwei, Zhang Meigen, Lei Xiaoen, et al. Numerical prediction of air pollution in urban area. *Climatic Environ*. *Res.* (in Chinese), 1999, 4(3):283~290
- [5] 杜世勇,谭晓哲,田勇,等.济南市空气质量数值预报研究. 环境科学研究,2002,15(4):20~23
 Du Shiyong, Tan Xiaozhe, Tian Yong, et al. Numerical forecast on air quality in Jinan City. *Research of Environmental Sciences* (in Chinese), 2002, 15(4):20~23
- [6] Zhang Meigen, Uno I, Sugata S, et al. Numerical study of boundary layer ozone transport and photochemical production in East Asia in the wintertime. *Geophys. Res. Lett.*, 2002, 10.1029/2001GL014368
- Zhang Meigen, Uno I. Role of anthropogenic volatile organic compounds and nitrogen oxides as ozone precursors in the wintertime over East Asia. J. Ocean Univ. Qingdao, 2002, 1(1): 45~49
- [8] Zhang Meigen, Uno I, Carmichael G R, et al. Large-scale structure of trace gas and aerosol distributions over the western Pacific Ocean during TRACE-P. J. Geophys. Res., 2003, 108 (D21), 8820, doi:10.1029/2002JD002946

- [9] 张美根,韩志伟.TRACE-P期间硫酸盐、硝酸盐和铵盐气 溶胶的模拟研究.高原气象,2003,22(1):1~6 Zhang Meigen, Han Zhiwei. A numerical study on distributions of sulfate, nitrate and ammonia aerosols over East Asia during the TRACE-P campaign. *Plateau Meteorology* (in Chinese), 2003, 22(1): 1~6
- [10] 张美根, 徐永福, Uno I, 等.东亚地区春季二氧化硫的输送 与转化过程研究 I. 模式及其验证.大气科学, 2004, 28(3): 321~329
 Zhang Meigen, Xu Yongfu, Uno I, et al. A study of sulfur transport and transformation over East Asia during the springtime I. Model system and its verification. *Chinese J. Atmos. Sci.* (in Chinese), 2004, 28(3): 321~329
- [11] Zhang Meigen, Xu Yongfu, Uno I, et al. A numerical study of tropospheric ozone in the springtime in East Asia. Adv. Atmos. Sci., 2004, 21(2): 163~170
- [12] Zhang Meigen, Uno I, Yoshida Y, et al. Transport and transformation of sulfur compounds over East Asia during the TRACE-P and ACE-Asia Campaigns. Atmos. Environ., 2004, 38(40): 6947~6959
- [13] Jacob D J, Crawford J H, Kleb M M, et al. Transport and chemical evolution over the Pacific (TRACE-P) aircraft mission: Design, execution, and first results. J. Geophys. Res., 2003, 108(D20), 8781, doi:10.1029/2002JD003276
- [14] Huebert B J. Bates T, Russell P B, et al. An overview of ACE-Asia. Strategies for quantifying the relationships between Asian aerosols and their climatic impacts. J. Geophys. Res., 2003, 108(D23), 8633, doi:10.1029/2003JD003550
- [15] Pielke R A. Mesoscale Meteorological Modeling. Academic Press, 2002. 676pp
- Pielke R A, Cotton W R, Walko R L, et al. A comprehensive meteorological modeling system RAMS. *Meteor. Atmos. Phys.*, 1992, **49**: 69~91
- [17] Byun D W, Ching J K S. Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multi-Scale Air Quality (CMAQ) Modeling System. NERL, Research Triangle Park, NC., 1999