

王哲, 王自发, 李杰, 等. 2014. 气象—化学双向耦合模式(WRF-NAQPMS)研制及其在京津冀秋季重霾模拟中的应用 [J]. 气候与环境研究, 19 (2): 153–163, doi: 10.3878/j.issn.1006-9585.2014.13231. Wang Zhe, Wang Zifa, Li Jie, et al. 2014. Development of a meteorology-chemistry two-way coupled numerical model (WRF-NAQPMS) and its application in a severe autumn haze simulation over the Beijing-Tianjin-Hebei area, China [J]. Climatic and Environmental Research (in Chinese), 19 (2): 153–163.

气象—化学双向耦合模式(WRF-NAQPMS)研制及其在京津冀秋季重霾模拟中的应用

王哲^{1,2} 王自发¹ 李杰¹ 郑海涛^{2,3} 晏平仲¹ 李健军⁴

1 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

2 中国科学院大学, 北京 100049

3 中国科学院合肥物质研究院安徽光学精密机械研究所, 合肥 230031

4 中国环境监测总站, 北京 100012

摘要 为解析大气污染物与气象的双向反馈机制及其对气象和环境的影响, 建立基于 Mie 散射理论的气溶胶—光学性质模块, 研制气象—化学双向耦合器, 以嵌套网格空气质量预报模式 NAQPMS (Nested Air Quality Prediction Modeling System) 为基础, 建立了 NAQPMS 和中尺度气象模式 WRF (Weather Research and Forecasting Model) 的双向耦合模式 (WRF-NAQPMS)。利用此模式数值模拟了 2013 年 9 月 27 日至 10 月 1 日的北京—天津—河北地区一次秋季严重灰霾过程。结果表明, 考虑气溶胶辐射反馈的双向耦合模式模拟的气象要素和细颗粒物 (PM2.5) 浓度与观测结果更为一致。灰霾期间, 气溶胶直接辐射效应显著改变了边界层气象要素, 北京—天津—河北地区地面接收的太阳短波辐射减少 25%, 2 m 高度的温度平均下降 1 °C, 湍流动能下降 20%, 10 m 高度的风速降低超过 0.2 m/s, 边界层高度下降 25%, 使得边界层大气更加静稳, 进而造成了重污染地区污染进一步加剧, 如石家庄近地面细颗粒物浓度增加可达 30%。分析表明灰霾与边界层气象要素之间存在一种正反馈机制, 采用该机制的双向耦合模式有利于准确模拟和预报灰霾污染过程。

关键词 气象—化学双向耦合 WRF-NAQPMS 灰霾 气溶胶直接辐射效应 大气边界层

文章编号 1006-9585 (2014) 02-0153-11

中图分类号 X16

文献标识码 A

doi: 10.3878/j.issn.1006-9585.2014.13231

Development of a Meteorology–Chemistry Two-Way Coupled Numerical Model (WRF–NAQPMS) and Its Application in a Severe Autumn Haze Simulation over the Beijing–Tianjin–Hebei Area, China

WANG Zhe^{1,2}, WANG Zifa¹, LI Jie¹, ZHENG Haitao^{2,3}, YAN Pingzhong¹, and LI Jianjun⁴

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

2 University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049

3 Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Hefei Institute of Physics Science, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031

4 China National Environmental Monitoring Center, Beijing 100012

Abstract An aerosol–optical module based on Mie scattering theory has been implemented in the Nested Air Quality Prediction Modeling System (NAQPMS), and a new coupler has been developed to deal with the interaction between the

收稿日期 2013-12-23 收到, 2014-02-10 收到修定稿

资助项目 中国科学院战略性先导科技专项 XDB05030200, 国家自然科学基金项目 41275138

作者简介 王哲, 男, 1987 年出生, 博士研究生, 主要从事大气环境研究。E-mail: wangzhe@mail.iap.ac.cn

mesoscale meteorology model WRF (Weather Research and Forecasting Model) and NAQPMS. The one-way off-line and two-way coupled WRF-NAQPMS models are compared to simulate the severe haze in the Beijing-Tianjin-Hebei area from 27 September to 1 October 2013. The results show that the simulated meteorological elements and PM2.5 concentrations from the two-way coupled model with the aerosol direct radiation effect are more consistent with observations. During the haze period, the boundary layer meteorological elements change significantly because of the aerosol direct radiation effect over the Beijing-Tianjin-Hebei area: Incoming solar radiation is reduced by 25%, the 2-m temperature decreases by 1 °C, the turbulent kinetic energy is reduced by 25%, the 10-m wind speed decreases by up to 0.2 m/s, and the planetary boundary layer (PBL) height is reduced by 25%. These changes make the atmospheric boundary layer more stable and further exacerbate air pollution over the areas where it is already severe, for example, the PM2.5 concentration increases by up to 30% over Shijiazhuang City. The analysis indicates that there is a positive feedback mechanism between haze and boundary layer meteorology, and the two-way coupled model incorporating this feedback is helpful for accurate simulation and forecasting of haze pollution processes.

Keywords Two-way coupling of meteorology and chemistry, WRF-NAQPMS, Haze, Aerosol direct radiation effect, Atmospheric boundary layer

1 引言

近 30 年来,伴随城市化和工业化快速发展,我国大气环境污染日益区域化和复合化,以灰霾为代表的大气复合污染在我国中东部特别是北京—天津—河北地区日益严重,引起了民众、学者和政府部门的高度关注。作为揭示空气污染问题的重要工具,空气质量数值模式已广泛应用于污染形成、输送等方面的研究(An et al., 2007; Wu et al., 2011; Li et al., 2013)。多模式模拟对比研究表明,欧洲观测的颗粒物浓度越高时,模式对一次和二次污染物的低估也越严重,模拟效果越差(Stern et al., 2008)。该现象在中国地区空气质量模拟中也普遍存在,影响了空气质量模式在重污染预警和管理决策中的可用性。Stern et al. (2008)指出,模式对边界层参数的描述不准确是模式误差的重要来源,而灰霾对边界层气象的影响是其研究中没有考虑的关键过程。

灰霾影响边界层气象过程主要是由于气溶胶的直接辐射效应,气溶胶对太阳短波辐射的散射和吸收作用使得到达近地面的短波辐射减少,地表温度和近地面气温下降,而边界层高层的大气由于气溶胶吸收短波辐射而增温,二者的共同作用使得边界层大气稳定度增加,抑制了湍流的产生以及动量的下传,进而使得边界层高度下降和近地面风速减小,造成污染物的进一步累积(Zhang et al., 2010; Quan et al., 2013)。灰霾越重时,此种反馈机制越强,然而广泛使用的离线空气质量模式无法再现这一过程,因此模式模拟结果与观测值的偏差越大。

为了克服离线模式的不足,NOAA 等机构联合开发了完全耦合的 WRF-Chem [Weather Research

and Forecasting (WRF) model coupled with Chemistry] 模式,美国环保局(US EPA)也实现了其空气质量模式 CMAQ (Community Multi-scale Air Quality) 与 WRF 模式的双向耦合。Zhang et al. (2010) 利用 WRF-Chem 模式研究表明考虑气溶胶反馈后中国大陆地区 1 月和 7 月边界层高度下降可达 23% 和 24%,近地面气温和风速都有所下降,使得边界层更加稳定,有利于污染物的进一步累积。Wong et al. (2012) 利用双向耦合的 WRF-CMAQ 模式对 2008 年 6 月美国加利福尼亚一次野火造成的颗粒物污染事件进行了模拟,研究表明考虑辐射反馈后模式减小了对 2 m 高度温度的模拟误差,改善了模式对细颗粒物(PM2.5)的模拟效果。目前针对我国地区特别是北京—天津—河北地区重灰霾与边界层气象要素反馈机制的研究还相对较少,而北京—天津—河北地区地形复杂,秋冬季极易出现静稳天气,造成区域性的严重灰霾过程。

本文以中国科学院大气物理研究所自主研发的嵌套网格空气质量预报模式系统(Nested Air Quality Prediction Modeling System, NAQPMS)为基础,发展一个考虑气溶胶直接辐射反馈的气象—化学双向耦合数值模快,研制双向耦合器,建立双向耦合的 WRF-NAQPMS 模式,用之模拟分析 2013 年秋季北京—天津—河北地区一次典型区域灰霾过程,探讨灰霾—边界层反馈机制及其对边界层气象要素和细颗粒物浓度的影响。

2 研究方法

2.1 双向耦合 WRF-NAQPMS 模式设计

嵌套网格空气质量预报模式系统(NAQPMS)

由中国科学院大气物理研究所自主研发, 包括平流、扩散、干、湿沉降等主要的物理过程模块、气相化学模块(CBMZ, Zaveri and Peters, 1999)、液相化学模块(RADM2)、非均相化学模块(Li et al., 2012)、气溶胶热力学平衡模块(ISORROPIA, Nenes et al., 1998)、二次有机气溶胶模块, 已广泛用于沙尘、酸雨、臭氧和颗粒物污染等发生发展机理和输送沉降过程研究, 以及城市空气质量的预报预测(Wang et al., 2001, 2002, 2006; 王自发等, 2006; Li et al., 2011, 2013; Wu et al., 2011)。NAQPMS模式具有大气化学资料同化和污染源反演模块(Tang et al., 2011), 可以有效减小模式对大气化学成分的模拟误差。

NAQPMS模式由WRF等气象模式为其提供风向、风速、气温、湿度和降水等气象驱动场。WRF模式是NCEP、NCAR等机构联合开发的新一代中尺度气象模式, 被广泛用于模拟水平分辨率 $1\sim30\text{ km}$ 的天气现象, 同时也可用于大涡模拟尺度(水平分辨率 $\leq 100\text{ m}$)和全球尺度(Skamarock et al., 2008)。本文中WRF模式采用2013年4月发布的WRF-ARW V3.5版本。

图1a给出单向离线WRF-NAQPMS模式的运行流程: 首先需要运行WRF模式, WRF运行结束后输出整个模拟时段的气象数据, 时间分辨率为每小时输出1次, 然后利用空间插值程序Metdriver将WRF输出的数据转换为NAQPMS的网格空间, 再运行NAQPMS模式。可见离线模式无法考虑气溶胶对气象过程的反馈作用。

为反映气溶胶的辐射反馈效应, 本文研制了一个耦合器(Coupler), 通过时空插值和计算时间控制等待, 完成两个模式间的数据传递实现WRF和NAQPMS模式的双向耦合。NAQPMS模式采用与WRF模式相同的水平网格, 水平方向不需进行空间插值。垂直方向上WRF模式采用地形跟随质量坐标系, 分为28层, 而NAQPMS模式采用地形跟随

坐标系, 分为20层, 耦合器需要完成垂直插值。耦合器包括两个部分: 气象驱动模块(Metdriver)和反馈模块(feedback)。气象驱动模块基于WRF研发组提供的ARWpost程序, 其作用是将WRF模拟的风场 u 、 v 分量、温度、湿度、气压、降水和辐射等31个气象要素场插值到NAQPMS模式垂直层上, 并将数据传递给NAQPMS模式以驱动其进行数值积分。反馈模块的作用是将NAQPMS的气溶胶—光学模块输出的消光系数、单次散射反照率和对称度因子等光学参数插值到WRF模式垂直层上, 并传递给WRF模式的Goddard短波辐射模块。双向耦合的WRF-NAQPMS模式运行时WRF模式和NAQPMS模式同时进行时间积分, 积分过程中进行气象数据和气溶胶光学性质数据的相互交换(见图1b)。

离线的NAQPMS模式中采用基于经验统计的IMPROVE方程计算气溶胶的光学性质(Li et al., 2011), 然而IMPROVE方法不能给出不同波长的气溶胶光学参数以供短波辐射模块计算气溶胶辐射强迫。为考虑气溶胶的辐射效应, 本文在NAQPMS中发展了以Mie散射理论为基础的气溶胶化学—光学性质模块(AOM, Barnard et al., 2010)。气溶胶化学—光学模块AOM基于NAQPMS计算的硫酸盐、硝酸盐、铵盐、有机物、黑炭、沙尘、海盐和人为排放的其它一次颗粒物等8种气溶胶化学组分, 考虑不同组分的密度、负折射指数和吸湿因子等物理性质, 结合观测的颗粒物粒径谱分布特征, 计算得出特定波长的气溶胶消光系数、单次散射反照率和对称度因子等光学特征参数。不同气溶胶化学组分的密度和负折射指数等参考Barnard et al. (2010)取值。气溶胶吸湿增长采用Petters and Kreidenweis (2007)提出的单参数化方案。

气溶胶采用不分模态或档的总体方案, 而AOM模块计算气溶胶光学性质时需已知气溶胶的粒径分布, 因此本文中颗粒物粒径谱采用对数正态

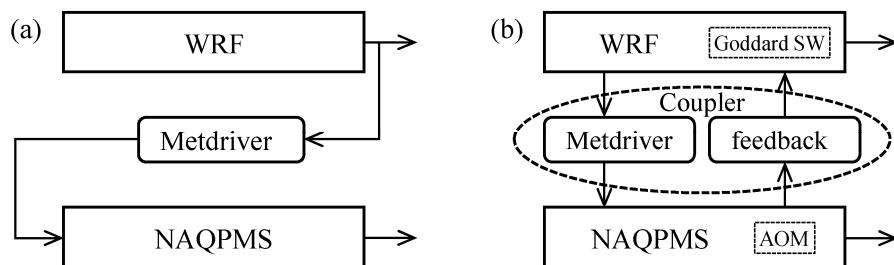


图1 (a) 单向离线WRF-NAQPMS模式和(b) 双向耦合WRF-NAQPMS模式流程图

Fig. 1 Flow charts of (a) one-way off-line WRF-NAQPMS model and (b) two-way coupled WRF-NAQPMS model

分布假设 (Seinfeld and Pandis, 1998):

$$\frac{dN}{d \log D_p} = \sum_{i=1}^n \frac{N_{t,i}}{\sqrt{2\pi} \log \sigma_i} \exp \left[-\frac{(\log D_p - \log \bar{D}_{p_i})^2}{2(\log \sigma_i)^2} \right], \quad (1)$$

其中, 下标 $i=1, 2, 3, 4$ 分别代表核模、爱根模、积聚模和粗模; D_p 为颗粒物粒径; dN 为单位体积 (1 cm^3) 空气中, 粒径在 $\log D_p$ 到 $(\log D_p + d \log D_p)$ 范围内的粒子数浓度; $N_{t,i}$ 、 \bar{D}_{p_i} 和 σ_i 分别为各模态的颗粒物总数浓度、几何平均粒径和标准偏差。上述参数的选取参考了 Wu et al. (2008) 在北京城区秋季观测的颗粒物数浓度和体积浓度谱分布及其拟合结果 (具体取值见表 1)。

表 1 对数正态分布参数

Table 1 Parameters of lognormal distribution

i	$N_{t,i}$	\bar{D}_{p_i}	σ_i
1	5800	20	1.9
2	11900	52	1.9
3	8500	146	1.8
4	13	800	1.9

2.2 观测数据与污染过程选取

本文采用的数据包括: 北京、天津和石家庄的气温、风速、相对湿度和能见度等气象要素 (<http://www.wunderground.com/history/2013-10-18/>), 北京—天津—河北地区 13 个城市各监测点的细颗粒物监测数据 (<http://113.108.142.147:20035/emcpublish/2013-10-08/>), 以及中国科学院大气物理研究所铁塔分部的短波辐射观测。基于上述观测资料, 图 2 给出了 2013 年 9 月 23 日至 10 月 2 日, 北京的能见度和短波辐射以及北京—天津—河北地区空气污染变化情况。结合地面天气图 (略) 可知, 9 月 23~25 日, 北京—天津—河北地区位于强蒙古高压的前部, 盛行偏北风, 且风力较大, 能见度和空气质量较好。26 日开始随着高压东移, 能见度和空气质量逐渐变差。9 月 27 日至 10 月 1 日, 北京—天津—河北地区主要受高压后部和华北低压槽控制, 风速较小, 以偏南风为主, 北京市能见度基本都在 10 km 以下, 同时北京—天津—河北地区出现以细颗粒物为首要污染物的空气污染事件, 13 个城市中每天都有 9 个以上城市空气质量达到污染 (细颗粒物浓度 $> 75 \mu\text{g}/\text{m}^3$), 其中达到重度污染 (细颗粒物浓度 $> 150 \mu\text{g}/\text{m}^3$) 的城市每天都在 5 个以上, 污染严重的石家庄、邢台等城市细颗粒物小时浓度超过

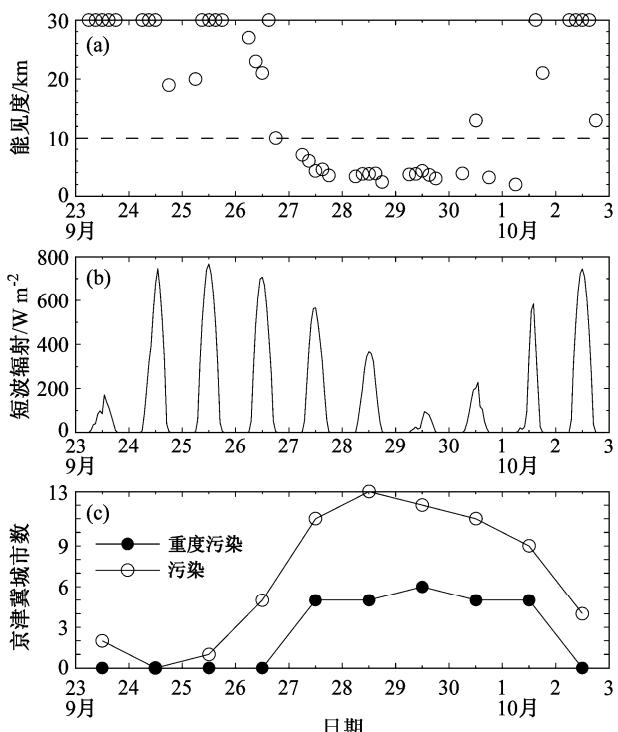


图 2 2013 年 9 月 23 日至 10 月 2 日北京 (a) 能见度和 (b) 短波辐射以及 (c) 北京—天津—河北地区污染和重度污染城市数

Fig. 2 (a) Visibility and (b) shortwave radiation in Beijing and (c) number of cities polluted and severely polluted over the Beijing-Tianjin-Hebei area during 23 Sep–2 Oct 2013

$300 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 。因此此次低能见度事件是一次典型的区域性灰霾污染过程, 具有污染重、持续时间长、影响范围大等特点。直至 10 月 2 日, 随一个弱高压自蒙古东移, 北京—天津—河北地区能见度和空气质量都有所好转。此外, 从 9 月 26~28 日, 随着污染的加剧和能见度的降低, 北京日最大短波辐射由 708 W/m^2 下降至 366 W/m^2 , 降幅达 48%, 结合卫星云图(略)和天气记录可知, 这 3 天中北京地区无云, 可判断短波辐射的下降是由于灰霾造成的。而 9 月 29 日和 30 日, 短波辐射受到云和灰霾的共同影响, 日最大短波辐射分别下降到 95 W/m^2 和 228 W/m^2 。上述分析表明灰霾天气不仅造成了能见度的显著降低, 对短波辐射也产生了显著影响, 进而可引起大气热力场和动力场的改变, 只有采用气象—化学双向耦合的数值模式才能准确描述这一反馈过程及其影响。

2.3 模式设置和参数选取

针对此典型灰霾污染过程的模式数值模拟采用 3 层嵌套, 分辨率分别为 45 km 、 15 km 和 5 km , 范围分别为东亚、东北亚和北京—天津—河北地区, 模拟时段为 9 月 20 日至 10 月 3 日。WRF 模式

的初边值条件由 NCEP FNL 资料提供, 其空间分辨率为 1° (纬度) $\times 1^{\circ}$ (经度), 时间分辨率为 6 h 一次。WRF 模式边界层参数化采用 MYJ 方案, 陆面过程采用 NOAH 方案, 云微物理过程采用 Lin 方案, 积云对流参数化采用 Grell 3D 方案, 长波辐射采用 RRTM 方案, 短波辐射采用 Goddard 方案。NAQPMS 模式排放源采用亚洲区域排放清单 (Regional Emission inventory in ASIA, REAS) 2.1 版本。为研究气溶胶辐射反馈对气象要素及大气污染模拟的影响, 分别利用不考虑气溶胶辐射反馈的离线 NAQPMS 系统和考虑气溶胶辐射反馈的双向嵌套 WRF-NAQPMS 模式对这一灰霾过程进行模拟, 分别记为 WO 试验和 W 试验。通过对比分析 WO 试验和 W 试验模拟结果的差异, 可以量化气溶胶辐射反馈对边界层气象要素和细颗粒物浓度的影响。由于模拟时间较长(15 d), 气象模式不能直接连续预报, 若采用分段模拟, 又会不断引入气象初始场的影响; 因此本文中对风场 u 、 v 分量进行分析逼近 (Analysis nudging), 分析场为 FNL 资料, 而气温、相对湿度等其它要素未采用分析逼近以更好地分析气溶胶辐射反馈对热力场的影响。采用分析逼近后, 由于 WRF 模式预报场都向 FNL 分析场逼近, 可能使得 WO 试验和 W 试验风场差异变小, 削弱反馈机制的作用, 其影响有待进一步研究。

3 结果与分析

3.1 模拟结果与观测的比较

表 2 和表 3 给出了离线 NAQPMS 和 WRF-

NAQPMS 模式模拟的北京—天津—河北地区短波辐射、气温、风速、相对湿度等气象要素和细颗粒物与观测值的对比情况。由表 2 和表 3 可以看出, 离线和在线 WRF-NAQPMS 模式对气象要素和细颗粒物浓度都具有较好的模拟能力。风速、相对湿度和温度的模拟值与观测值相比, 归一化平均偏差都在 10% 以内, 相关系数都在 0.6 以上, 为空气质量模式提供了较好的气象驱动场, 细颗粒物模拟值与观测值的相关系数也在 0.6 以上。但离线模式模拟的北京短波辐射显著偏高, 归一化平均偏差达 35.4%, 而模拟的细颗粒物浓度偏低, 归一化平均偏差为 -14.6%。考虑辐射反馈后, 离线模式模拟的短波辐射明显改善, 归一化平均偏差下降到 16.7%, 均方根误差由 102.7 W/m^2 下降到 63.4 W/m^2 , 相关系数也由 0.94 提高到 0.97。短波辐射下降后, 其它气象要素也有所改善, 2 m 高度温度的归一化平均偏差也由 9.1% 下降到 5.6%; 2 m 高度的相对湿度有所增加, 归一化平均偏差由 -8.4% 增加至 -5.1%, 相关系数由 0.82 提高到 0.83; 10 m 高度风速的相关系数由 0.67 提高到 0.69。由于气象要素模拟的改善, 在线模式对细颗粒物浓度的模拟也有所提高, 平均值由偏低 14.6% 改善为偏低 1.2%, 相关系数由 0.67 提高到 0.68。

3.2 气溶胶辐射反馈对细颗粒物浓度的影响

离线和双向耦合的 WRF-NAQPMS 均能较好地模拟出各个城市细颗粒物浓度的变化趋势(图 3 所示), 但考虑辐射反馈后, 灰霾期间(9月 27 日至 10 月 1 日), 北京—天津—河北地区南部城市细颗粒物日均浓度有所增加与观测值更为接近, 特别是模拟

表 2 离线模式统计参数

Table 2 Statistics of off-line model

	数据数目	观测平均值	模拟平均值	归一化平均偏差	均方根误差	相关系数
短波辐射	241	127.8 W/m^2	173.0 W/m^2	35.4%	102.7 W/m^2	0.94
2 m 高度的温度	699	17.4°C	19.0°C	9.1%	2.7°C	0.87
10 m 高度的风速	699	2.3 m/s	2.3 m/s	-1.5%	1.2 m/s	0.67
2 m 高度的相对湿度	699	66.4%	60.8%	-8.4%	14.6%	0.82
细颗粒物浓度	1156	$148.4 \mu\text{g/m}^3$	$126.8 \mu\text{g/m}^3$	-14.6%	$71.2 \mu\text{g/m}^3$	0.67

表 3 在线模式统计参数

Table 3 Statistics of on-line model

	数据数目	观测平均值	模拟平均值	归一化平均偏差	均方根误差	相关系数
短波辐射	241	127.8 W/m^2	149.1 W/m^2	16.7%	63.4 W/m^2	0.97
2 m 高度的温度	699	17.4°C	18.4°C	5.6%	2.4°C	0.87
10 m 高度的风速	699	2.3 m/s	2.2 m/s	-5.8%	1.2 m/s	0.69
2 m 高度的相对湿度	699	66.4%	63.0%	-5.1%	13.9%	0.83
细颗粒物浓度	1156	$148.4 \mu\text{g/m}^3$	$146.6 \mu\text{g/m}^3$	-1.2%	$70.7 \mu\text{g/m}^3$	0.68

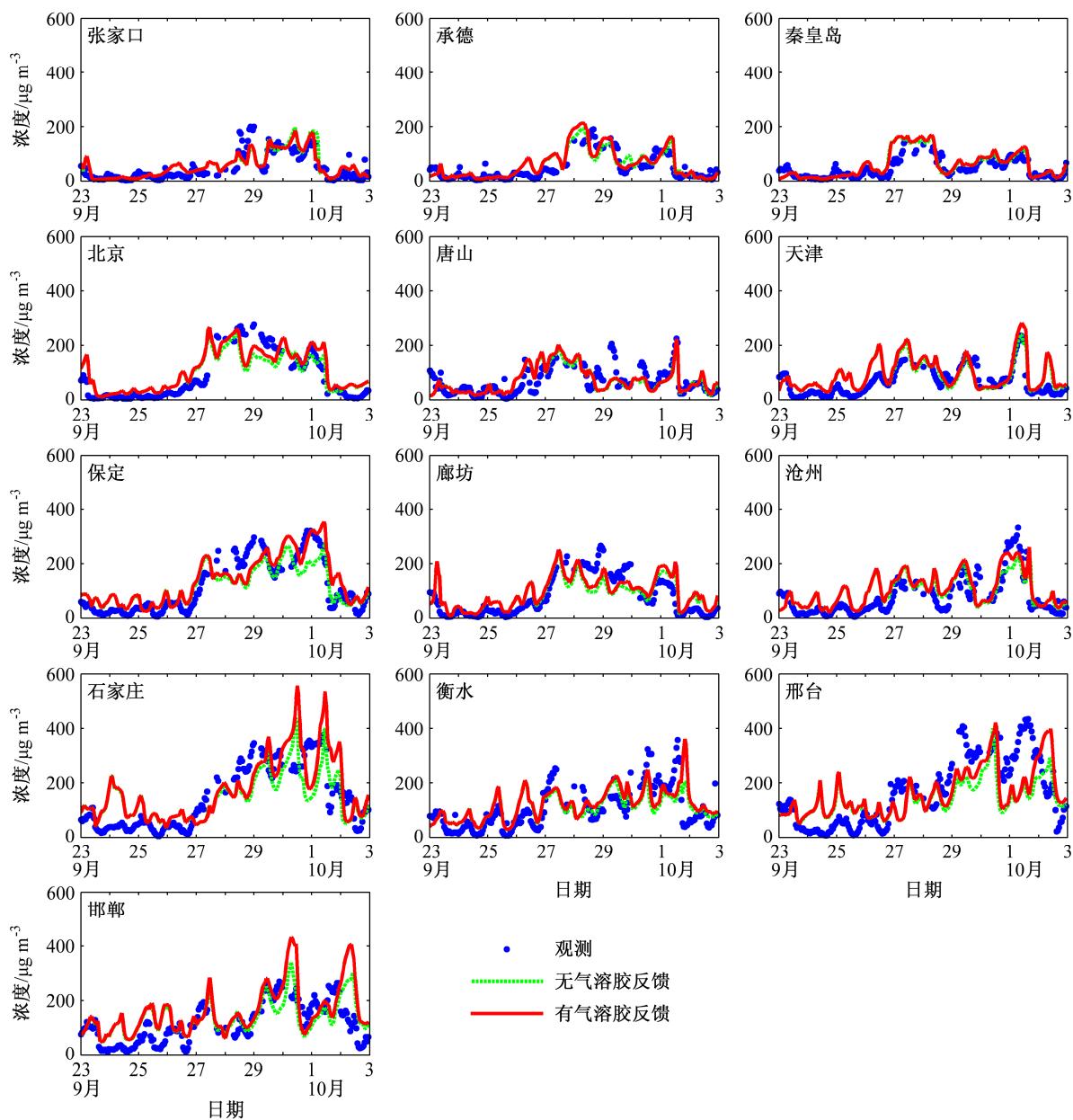


图 3 2013 年 9 月 23 日至 10 月 2 日北京—天津—河北地区 13 城市细颗粒物小时浓度观测值与无气溶胶反馈和有气溶胶反馈模拟值比较

Fig. 3 Comparisons of hourly PM_{2.5} concentration observations and model simulation without (green dash line) and with (red solid line) aerosol direct feedback over 13 cities in the Beijing—Tianjin—Hebei area during 23 Sep—2 Oct 2013

值偏低较为显著的邢台、石家庄等城市浓度增加明显，细颗粒物日均浓度增加可达 $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 以上；而非灰霾期间（9月 23~26 日），各城市细颗粒物日均浓度变化都很小，小于 $10 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ，变化幅度小于 6%。图 4 为北京—天津—河北地区所有城市模拟与观测细颗粒物的散点图，可以看出，考虑气溶胶辐射反馈后，模拟值显著增加，拟合直线斜率由 0.75 增加为 0.89，同时相关系数 R^2 由 0.24 增加至 0.35，表明考虑辐射反馈后模拟值变化趋势与观测值更

为一致。

由图 5a 和图 5b 可以看出北京—天津—河北地区呈西北—东南向的“喇叭口”地形，污染（细颗粒物浓度 $> 75 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ）主要发生在地形高度 200 m 以下的北京—天津—河北南部地区，重污染（细颗粒物浓度 $> 150 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ）主要发生在接近山区的地带，这由于风场在山前辐合造成污染物累积。对比图 5a 和图 5b 还可以看出考虑气溶胶辐射反馈后，重污染地区的范围有明显增加，并且模拟的平均细

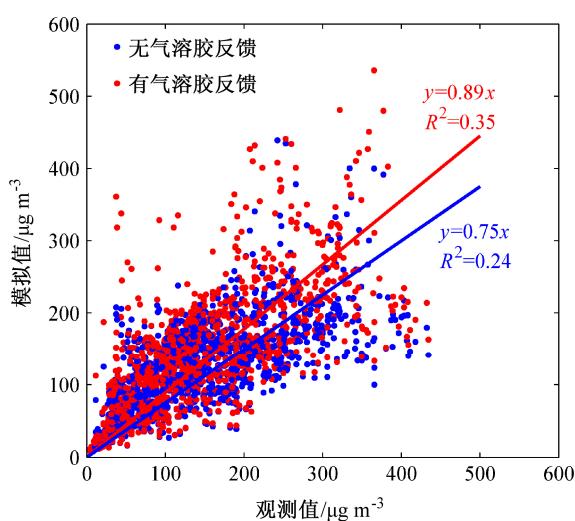


图 4 2013 年 9 月 23 日至 10 月 2 日北京—天津—河北地区 13 城市细颗粒物小时浓度观测与无气溶胶反馈和有气溶胶反馈模拟值散点图

Fig. 4 Scatter plots of hourly observed and simulated PM_{2.5} concentration without and with aerosol direct feedback over 13 cities in the Beijing–Tianjin–Hebei area during 23 Sep–2 Oct 2013

颗粒物浓度与观测值更为接近, 特别是污染较重的石家庄、邢台、邯郸、保定、衡水和北京等城市。考虑辐射反馈后污染较重的地区平均细颗粒物浓度增加在 10 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 以上, 相对变化超过 10%。污染最严重的石家庄地区细颗粒物浓度增加最显著, 最大达到 60 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 以上, 相对增加量超过 30%。而河北北部污染相对较轻的张家口、承德和秦皇岛等城市变化较小。

3.3 气溶胶辐射反馈影响细颗粒物浓度的机制分析

由图 3 和图 5 可知, 气溶胶辐射反馈对细颗粒物浓度时空分布模拟有重要影响, 对辐射反馈影响细颗粒物浓度的机制做进一步分析。气溶胶辐射效应直接影响地面接收的太阳短波辐射, 进而造成地表温度和近地面气温下降。图 6 给出了离线和双向耦合 WRF-NAQPMS 模拟的太阳短波辐射和 2 m 高度温度的水平分布, 由图可见, 考虑气溶胶辐射反馈后, 地面接收到的太阳短波辐射下降明显, 模拟期间北京—天津—河北南部地区短波辐射下降在 40 W/m^2 以上, 石家庄、保定、北京和天津等城市相对下降比例可达 25%。由于地面接收的太阳短波辐射减少, 造成地表温度下降, 进而使得北京—天津—河北南部地区灰霾期间平均 2 m 高度温度下降超过 1 °C。

温度变化可通过化学反应影响细颗粒物浓度, 但对细颗粒物浓度影响更重要的是平流输送和湍

流扩散能力。由图 6 可以看到, 地形高度 200 m 等值线东南侧, 即地形“喇叭口”处, 存在明显的低风速和低湍流动能 (Turbulent Kinetic Energy, TKE) 带状区域, 较差的输送和扩散条件是造成靠近山区的石家庄、保定和北京等城市污染严重的原因, 解释了图 5 中细颗粒物浓度的水平分布特征。由图 6a 和图 6b 可以看出考虑辐射反馈后, 石家庄、保定地区风速有所减小。对比图 6c 和图 6d 可以看出, 考虑辐射反馈后, 北京—天津—河北南部地区湍流显著减弱, TKE 下降在 20% 以上。湍流动能的产生包括动力作用和热力作用, 湍流动能的减少主要是由于近地面气温下降、热力湍流减弱以及近地面风速下降而引起的。“喇叭口”地形附近风速减小和湍流减弱, 造成细颗粒物等大气污染物进一步累积。

湍流运动的减弱也不利于源于地表的微量气体——水汽的扩散, 而温度的降低导致相对湿度增加, 因此图 7a 和图 7b 给出了不考虑和考虑辐射反馈时, WRF 模式对相对湿度的模拟, 可以看出考虑辐射反馈后, 灰霾期间北京—天津—河北南部地区平均相对湿度增加超过 3%, 最大达到 5% 以上。相对湿度增加有利于颗粒物的非均相反应和吸湿增长, 加剧了灰霾天气。湍流强度是影响污染物扩散的直接因素, 而大气边界层高度 (Planetary Boundary Layer Height, PBLH) 是湍流强度决定的、衡量边界层内污染物扩散条件的一个重要参数。由图 7c 和图 7d 可以看出, 考虑辐射反馈后, 北京—天津—河北南部地区灰霾期间平均边界层高度下降在 100 m 以上, 相对下降比例超过 25%。边界层高度的下降使得污染物难以扩散到更高层大气中, 进而在近地面累积。

通过上述分析可知, 气溶胶辐射反馈使得此次灰霾期间北京—天津—河北南部地区地面接收到的平均太阳短波辐射下降 40 W/m^2 以上 (>25%), 2 m 高度的温度下降超过 1 °C, 风速有所降低, 湍流动能下降超过 20%, 边界层高度下降在 100 m 以上 (>25%), 相对湿度增加可达 5%, 而风速降低、湍流减弱、边界层高度下降和相对湿度增加进一步导致细颗粒物的累积, 即存在一种正反馈机制。

4 结论与讨论

本文在嵌套网格空气质量模式 NAQPMS 中引入了基于 Mie 散射理论的气溶胶—光学性质模块,

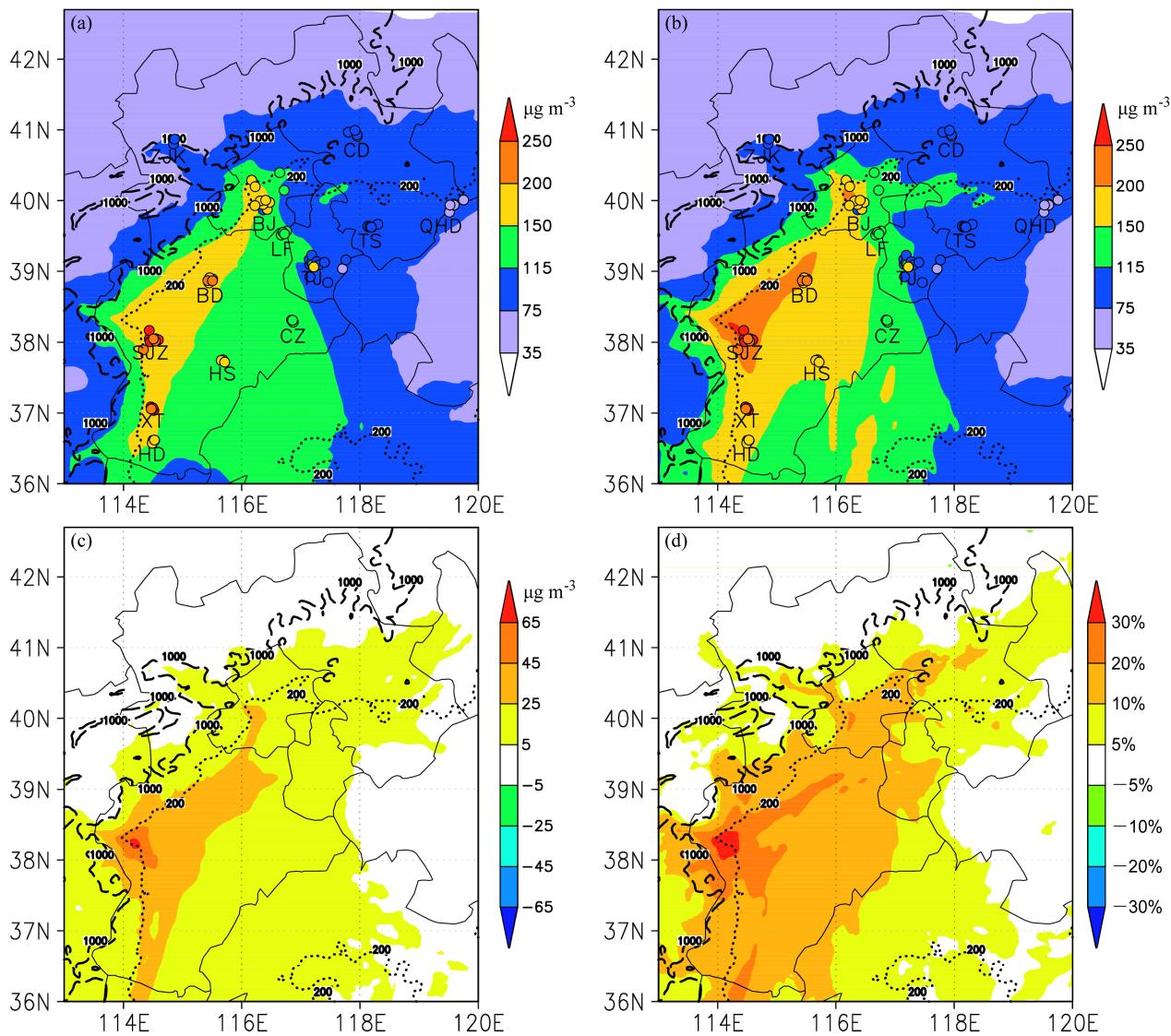


图 5 2013 年 9 月 27 日至 10 月 1 日平均细颗粒物浓度: (a) 无气溶胶反馈和 (b) 有气溶胶反馈模拟值 (填色圆点为观测值), (c)、(d) 分别为 (b) 相对于 (a) 的绝对差异和相对差异 (虚线为 200 m 和 1000 m 等高线)

Fig. 5 Mean PM_{2.5} concentration during 27 Sep–1 Oct 2013: Simulation (a) without and (b) with aerosol direct feedback (shaded points represent observations), (c) the absolute difference and (d) relative difference between (b) and (a) (dashed lines are contours of 200-m and 1000-m height)

并利用耦合器实现了 NAQPMS 和中尺度气象模式 WRF 的双向耦合。分别利用离线和双向耦合 WRF-NAQPMS 模式对 2013 年 9 月 27 日至 10 月 1 日的北京—天津—河北地区一次严重灰霾过程进行了数值模拟。主要结论有: 1) 考虑气溶胶辐射反馈的双向耦合模式模拟的气象要素和细颗粒物 (PM_{2.5}) 浓度更接近观测结果。2) 此次灰霾期间, 气溶胶直接辐射效应显著改变了边界层气象要素, 北京—天津—河北地区地面接收的太阳短波辐射减少 25%, 2 m 高度的温度下降 1 °C, 湍流动能下

降 20%, 10 m 高度的风速降低超过 0.2 m/s, 边界层高度下降 25%, 使边界层大气更加静稳, 进而造成了重污染地区污染进一步加剧, 如石家庄近地面细颗粒物浓度增加可达 30%。分析表明重霾期间细颗粒物灰霾与边界层气象要素之间存在一种正反馈机制, 采用考虑该机制的双向耦合模式有利于准确模拟和预报灰霾污染过程。

本文利用双向耦合 WRF-NAQPMS 模式仅针对北京—天津—河北地区一次灰霾过程进行了初步的模拟研究, 今后还需结合详细的气溶胶化学组

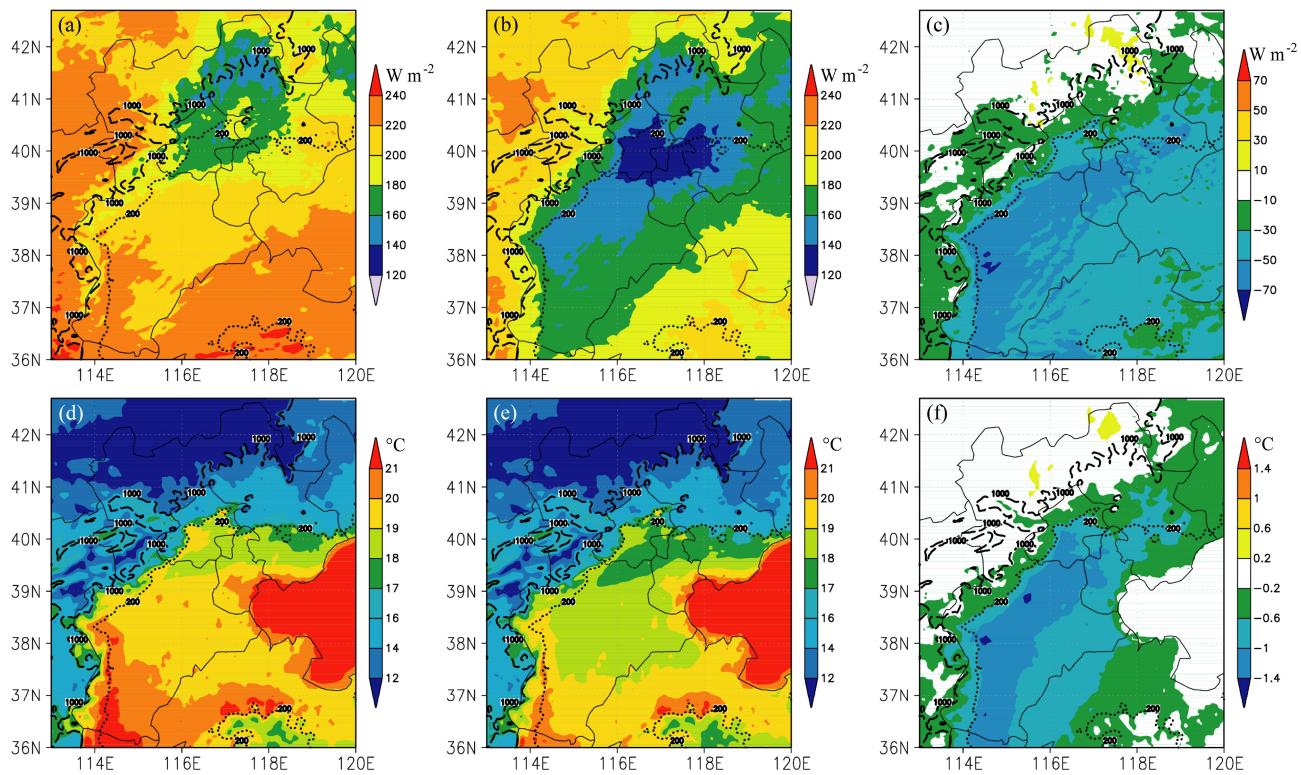


图 6 2013 年 9 月 27 日至 10 月 1 日无气溶胶反馈 (左列) 和有气溶胶反馈 (中列) 及其差值 (右列) 的平均 (a、b、c) 太阳短波辐射和 (d、e、f) 2 m 高度的温度

Fig. 6 Mean (a, b, c) shortwave radiation and (d, e, f) 2-m temperature without (left panel) and with (middle panel) aerosol direct feedback and the difference (right panel) during 27 Sep–1 Oct 2013

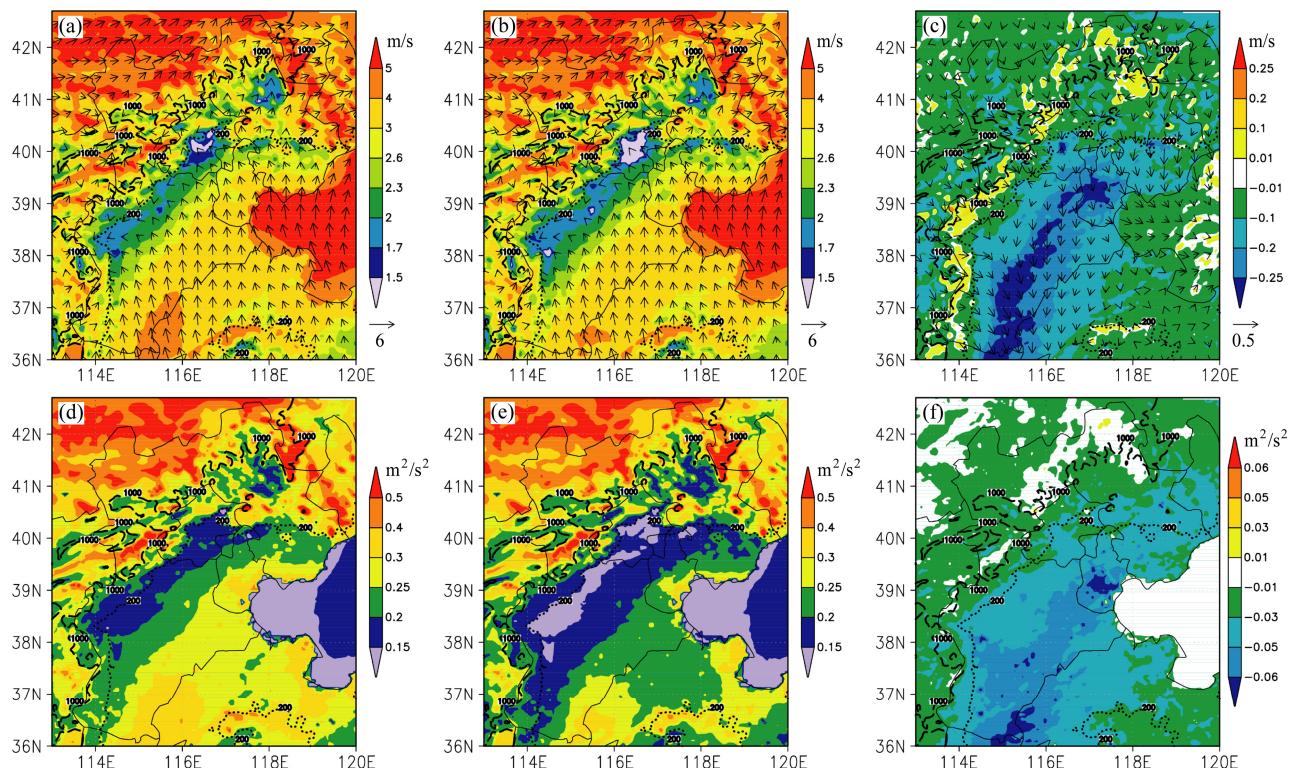


图 7 同图 6, 但为平均 10 m 高度的风速和湍流动能

Fig. 7 Same as Fig. 6, but for mean 10-m wind speed and Turbulent Kinetic Energy (TKE)

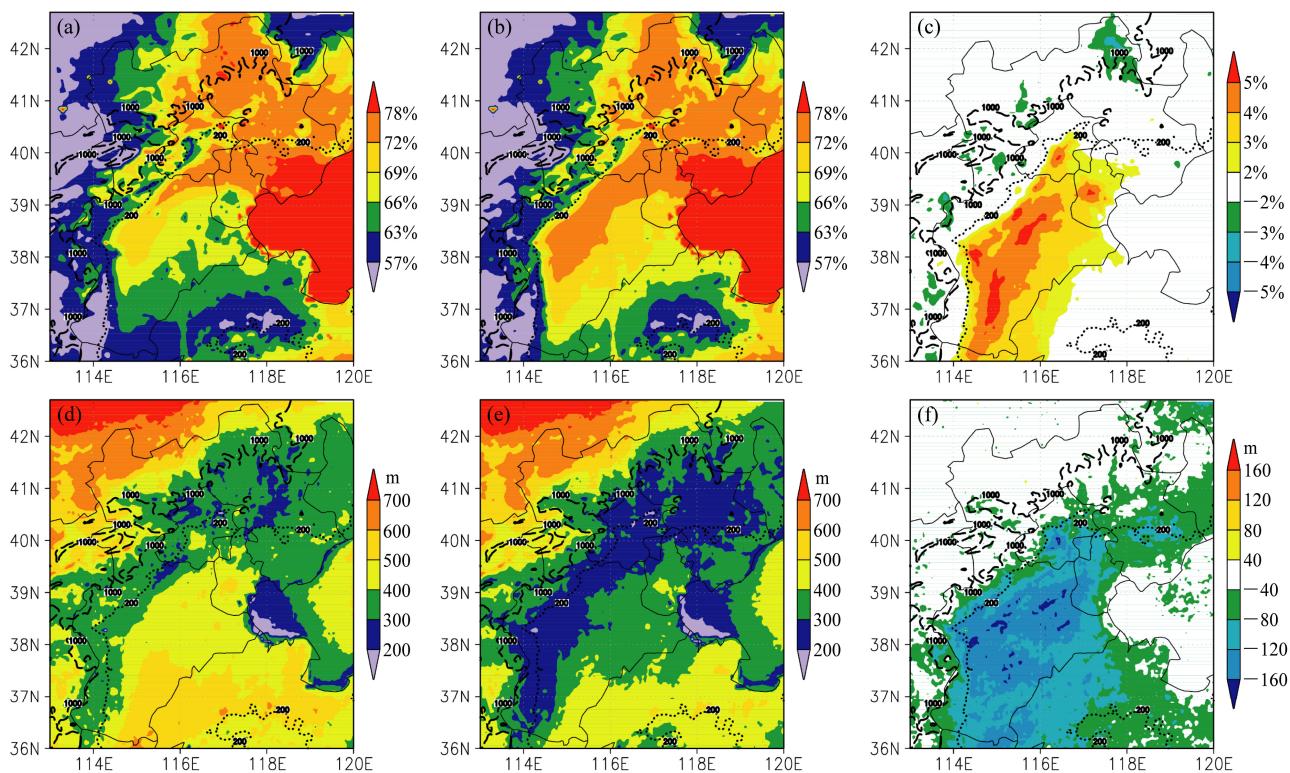


图 8 同图 6, 但为平均相对湿度和边界层高度

Fig. 8 Same as Fig. 6, but for mean relative humidity and Planetary Boundary Layer Height (PBLH)

分、粒径谱以及辐射、湍流和边界层观测资料等对模式光学性质和边界层参数模拟进行全面的评估，并深入研究和量化气溶胶辐射反馈机制中各个过程的作用。

参考文献 (References)

- An X, Zhu T, Wang Z, et al. 2007. A modeling analysis of a heavy air pollution episode occurred in Beijing [J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 7 (12): 3103–3114.
- Barnard J C, Fast J D, Paredes-Miranda G, et al. 2010. Evaluation of the WRF-Chem “Aerosol Chemical to Aerosol Optical Properties” module using data from the MILAGRO campaign [J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 10 (15): 7325–7340.
- Li J, Wang Z, Wang X, et al. 2011. Impacts of aerosols on summertime tropospheric photolysis frequencies and photochemistry over central eastern China [J]. Atmos. Environ., 45 (10): 1817–1829.
- Li J, Wang Z, Zhuang G, et al. 2012. Mixing of Asian mineral dust with anthropogenic pollutants over East Asia: A model case study of a super-duststorm in March 2010 [J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 12 (16): 7591–7607.
- Li J, Wang Z F, Huang H L, et al. 2013. Assessing the effects of trans-boundary aerosol transport between various city clusters on regional haze episodes in spring over East China [J]. Tellus B, 65, doi: 10.3402/tellusb.v65i0.20052.
- Nenes A, Pandis S N, Pilinis C. 1998. ISORROPIA: A new thermodynamic equilibrium model for multiphase multicomponent inorganic aerosols [J]. Aquatic Geochemistry, 4 (1): 123–152.
- Petters M D, Kreidenweis S M. 2007. A single parameter representation of hygroscopic growth and cloud condensation nucleus activity [J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 7 (8): 1961–1971.
- Quan J N, Gao Y, Zhang Q, et al. 2013. Evolution of planetary boundary layer under different weather conditions, and its impact on aerosol concentrations [J]. Particuology, 11 (1): 34–40.
- Seinfeld J H, Pandis S N. 1998. Atmospheric Chemistry and Physics [M]. New York: John Wiley and Sons, Inc.
- Skamarock W C, Klemp J B, Dudhia J, et al. 2008. A description of the Advanced Research WRF version 3 [R]. National Center for Atmospheric Research Tech. Note, NCAR/TN-475+STR, 113pp.
- Stern R, Builtjes P, Schaap M, et al. 2008. A model inter-comparison study focussing on episodes with elevated PM10 concentrations [J]. Atmos. Environ., 42 (19): 4567–4588.
- Tang X, Zhu J, Wang Z F, et al. 2011. Improvement of ozone forecast over Beijing based on ensemble Kalman filter with simultaneous adjustment of initial conditions and emissions [J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 11 (24): 12901–12916.
- Wang Z F, Maeda T, Hayashi M, et al. 2001. A nested air quality prediction modeling system for urban and regional scales: Application for high-ozone episode in Taiwan [J]. Water, Air, and Soil Pollution, 130 (1–4): 391–396.
- Wang Z F, Akimoto H, Uno I. 2002. Neutralization of soil aerosol and its

- impact on the distribution of acid rain over East Asia: Observations and model results [J]. *J. Geophys. Res.*, 107 (D19): ACH 6-1-ACH 6-12.
- Wang Z F, Li J, Wang X Q, et al. 2006. Modeling of regional high ozone episode observed at two mountain sites (Mt. Tai and Huang) in East China [J]. *Journal of Atmospheric Chemistry*, 55 (3): 253–272.
- 王自发, 谢付莹, 王喜全, 等. 2006. 嵌套网格空气质量预报模式系统的发展与应用 [J]. *大气科学*, 30 (5): 778–790. Wang Zifa, Xie Fuying.
- Wang Xiquan, et al. 2006. Development and application of nested air quality prediction modeling system [J]. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences (in Chinese)*, 30 (5): 778–790, doi: 10.3878/j.issn. 1006-9895. 2006.05.07.
- Wong D C, Pleim J, Mathur R, et al. 2012. WRF-CMAQ two-way coupled system with aerosol feedback: Software development and preliminary results [J]. *Geoscientific Model Development*, 5 (2): 299–312, doi: 10.5194/gmd-5-299-2012.
- Wu Q Z, Wang Z F, Gbaguidi A, et al. 2011. A numerical study of contributions to air pollution in Beijing during CAREBeijing–2006 [J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 11 (12): 5997–6011.
- Wu Z J, Hu M, Lin P, et al. 2008. Particle number size distribution in the urban atmosphere of Beijing, China [J]. *Atmos. Environ.*, 42 (34): 7967–7980.
- Zaveri R A, Peters L K. 1999. A new lumped structure photochemical mechanism for large-scale applications [J]. *J. Geophys. Res.*, 104 (D23): 30387–30415.
- Zhang Y, Wen X Y, Jang C J. 2010. Simulating chemistry–aerosol–cloud–radiation–climate feedbacks over the continental U.S. using the online-coupled Weather Research Forecasting Model with chemistry (WRF/Chem) [J]. *Atmos. Environ.*, 44 (29): 3568–3582.