

北京空气质量多模式集成预报系统的建立及初步应用

王自发¹ 吴其重^{1,2} Alex GBAGUIDI¹ 晏平仲^{1,2} 张伟^{1,2} 王威^{1,2} 唐晓^{1,2}

摘要

介绍了北京空气质量多模式集成预报系统(EMS-Beijing). 系统中区域空气质量模式包括中国科学院大气物理所自主开发的嵌套网格空气质量模式系统(NAQPMS)模式、美国环保署(EPA)开发的 Models-3/CMAQ 模式及美国 Environ 公司开发的 CAMx 模式等,均使用 SMOKE 排放模型统一处理大气污染排放清单. 此系统各模式采用统一的模拟区域和网格分辨率,采用中尺度气象模式 MM5 提供统一的气象场,并采用算术平均、权重集成等方法集成各空气质量模式结果,并投入北京空气质量业务预报,有效支持了北京奥运会空气质量数值预报. 业务预报结果表明:1) 采用 SMOKE 处理的奥运排放清单较接近实际,2008 年 8 月各空气质量模式可吸入颗粒物(PM10)日均值预报结果相对偏差为 -3% ~ 17%,与观测数据相关系数在 0.7 以上;2) 在排放清单较接近实际的情况下,PM10 日均值多模式算术平均优于单个空气质量模式;3) 分析 2008 年 4—11 月业务预报表明,采用权重集成方法预报的 PM10 日均值优于算术平均方法,达 61%. 总体上,权重集成方法优于算术平均结果.

关键词

空气质量;多模式;集成;PM10

中图分类号 X16

文献标志码 A

收稿日期 2009-04-20

作者简介

王自发,男,博士,研究员,博导,研究方向为大气化学、大气气溶胶、大气环境数值模式设计、污染物输送及其气候环境影响.

zifawang@mail.iap.ac.cn

1 中国科学院 大气物理所,北京,100029

2 中国科学院 研究生院,北京,100049

0 引言

Introduction

自 2001 年申奥成功以来,北京市的空气质量越来越引起人们的重视. 北京市政府为改善首都大气环境采取了一系列控制大气污染的措施,自 1998 年以来完成了 14 个阶段大气环境治理工作,北京在经济发展的同时,持续减少大气污染物排放,逐步改善了北京市空气质量^[1]. 空气质量的数值预报日益获得重视,北京也逐步加强了预报污染预报体系建设,1999 年起初步建立了以嵌套网格空气质量模式(NAQPMS)为核心的空气质量预报业务系统. 奥运前通过一系列重大项目的实施,建立了空气质量多模式集成预报业务系统,为奥运空气质量保障及预报预警服务^[2].

区域空气质量模式在研究大气污染演变规律、空气质量预报预警及大气污染控制管理决策等方面发挥着越来越重要的作用. 前人采用数值模式的方法对北京空气污染来源,尤其是周边地区对北京空气质量影响等方面进行了大量的模拟研究,如 Streets 等^[3]采用 CMAQ 模式预估北京 2008 年奥运期间空气质量及其所面临的挑战,指出在特定南风条件下,河北将会对北京贡献 50% ~ 70% 的 PM_{2.5} 及 20% ~ 30% 的臭氧. 而 Chen 等^[4]采用 MM5-CMAQ 模式研究认为 1 月周边地区对北京定陵 PM₁₀ 的贡献可达到 90%,对奥体中心贡献接近 75%,而对车公庄接近 50%. 而同样采用 MM5-CMAQ 系统,即使在 2005 年 4 月 3—7 日高污染事件中,An 等^[5]认为周边平均贡献仅为 39%,其中西北部贡献最大,贡献 53%. 王自发等^[2]认为 8 月北京 PM₁₀ 浓度贡献主要是本地排放引起的. 王雪松等^[6]采用 CAMx 模式研究 2000 年北京夏季 PM₁₀ 时空分布特征的结果表明,PM₁₀ 的空间分布与源排放关系密切,石景山工业区及其下风区域、北京城区及其下风向海淀区是 PM₁₀ 浓度高值区域;北京城近郊区硫酸盐和硝酸盐二次气溶胶占 PM₁₀ 总质量浓度的 50% 以上. 王自发等^[7]结合 CAREBeijing 大型综合观测数据采用 NAQPMS 模式源解析方法,研究了北京夏季 O₃ 特征及周边地区对北京 O₃ 贡献,认为天津、廊坊、保定是北京 O₃ 浓度重要的外来源. 总之,这些研究成果之间存在一定的差别,但由于研究过程中采用不同的空气质量模式,网格区域设置、气象驱动场、排放清单及其处理过程都不相同,模式模拟结果可比性相对较差. 这对模式预报提出了较高的要求,采用多模式集合预报是可

以弥补这些差别的有效方法。

以往空气质量模式的模式比较计划,由于气象、排放处理不同,而使其对模式性能的对比分析难以有效说明问题^[8]。拟建立的空气质量多模式集合预报系统中需要采用统一气象场(模式)、排放源处理过程,尽可能减少由于气象、排放前处理过程对模式模拟效果影响,使之能客观评价各空气质量模式模拟效果,以集合择优选取模式结果,获得最优集成预报结果。

本文主要介绍所建立的北京空气质量多模式集成预报系统,包括模式系统框架及基本组成部分,并分析所采用的集合平均、权重预报等简单集成方案的集合预报对比结果。

1 多模式集成预报系统介绍

Description of multi-model ensemble forecast system

空气质量多模式集合预报研究是大气环境模式发展的重要方向。世界各地研究机构初步开展了多模式集成系统方面的研究。如法国大气环境教育和研究中心开发 Polyphemus 模式系统^[9],侧重于模式内不同模块、物理化学参数选取的集合集成。北京空气质量多模式集合预报系统(EMS-Beijing)的设计框架见图1,主要侧重于不同空气质量模式的集成。其中区域空气质量模式包括中国科学院大气物理所自主开发的 NAQPMS 模式^[10-11],美国环保署(EPA)的 Models-3/CMAQ 模式^[12-13]及美国 Environ 公司的 CAMx 模式^[14];系统采用统一的模式区域设置,使用统一污染排放清单及排放处理过程(SMOKE^[15-16]),并由统一气象模式(MM5^[17])产生统一气象驱动,以减小由于气象、排放处理的不一致引起模式性能差异,可更客观评价不同空气质量模式模拟效果优异,并以此为基础发展合理的多模式集成预报方案,如算术集合平均、权重集成方法等。

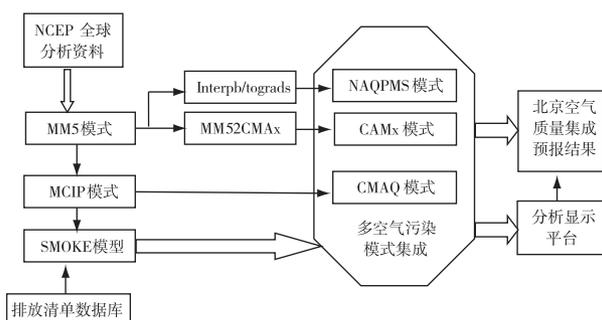


图1 北京空气质量多模式系统框架

Fig. 1 The framework of EMS-Beijing

1.1 模式模拟区域设置

为便于模式比较与集成,对 EMS-Beijing 多模式预报系统的区域网格进行了统一设置,以减小模式区域设置不同而引起的差异。针对北京污染的特殊情况,嵌套模拟区域设置依据中国地区(D1)→华北地区(D2)→京津冀地区(D3)→北京市(D4)4个层次进行。设定的多重网格区域如图2示:最大模拟区域覆盖东亚,模式水平网格距 $81\text{ km} \times 81\text{ km}$,考虑东亚区域背景对北京空气质量的影响,并为第2层网格嵌套层提供边界条件;第2层嵌套层覆盖整个华北区域,包括北京、天津、河北、山西、山东等省市,考虑整个华北区域对北京空气质量的影响,尤其是华北大点源,如大电厂排放远距离输送对北京及周边地区空气质量影响,水平网格距 $27\text{ km} \times 27\text{ km}$;第3层嵌套层覆盖北京、天津及河北省大部分地区,考虑北京邻近地市对北京空气质量的影响,网格距 9 km ;第4层嵌套层覆盖北京全市,包括北京市区及郊区县,网

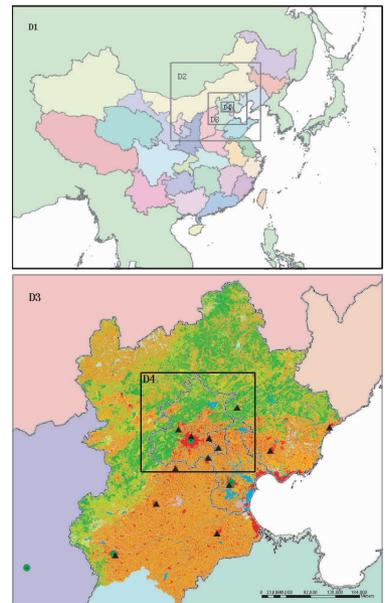


图2 北京空气质量多模式集合预报系统(EMS-Beijing)

的四重嵌套网格区域设置(上图框表明了4个区域,依次为D1/D2/D3/D4;下图为第3区域,黑框为D4区域,图中黑三角标识为奥运期间中科院大气物理所北京及周边大气污染监测网站点)

Fig. 2 Four nested domain setup of EMS-Beijing (The four model domains are showed in the left, followed by D1/D2/D3/D4. The right covers the D3 domain with the black frame for D4, while the black triangle logos stand for air pollution monitoring network sites in Beijing and its surrounding areas, set up by Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences)

格距 3 km, 细致考察北京本地排放影响. 垂直分层为 13 层, 采用地形追随坐标系, 最低层约为 40 m.

1.2 气象场模拟及其设置

空气质量模式的气象驱动场采用美国大气研究中心和宾州大学 (NCAR/PSU) 共同开发的第 5 代中尺度气象模式 (MM5)^[17]. 采用美国大气海洋局 (NOAA) 的数值天气预报中心 (NWP) GFS 数据集 AVN 分析资料作为初始及边界条件, 以每日世界时 12 时 (北京时 20 时) 为起始预报时间, 其中第 1 区域 D1 预报 96 h, 第 2 层第 4 区域预报 72 h; 采用双向嵌套设置 (图 1), 垂直采用 sigma 坐标, 分为 23 层. 依据敏感性测试结果^[2,18], 认为更新土地利用下垫面对郊区转城区站点有一定改善作用, 采用更新的 2004 年基准年的土地利用下垫面; 物理参数化方案选用 Grell 积云参数化方案、简单冰相显式微物理方案、云辐射方案、MRF 行星边界层物理参数方案、5 层土壤温度模式. 为提高整个模式系统时效性, 在 IBM 刀片高性能计算平台上 (平台性能参见王自发等^[2]) 采用 InfinitBand 模式的 Mvapich 软件包进行消息通讯并行, 预报完成只需 1 h.

1.3 排放清单及其处理过程

SMOKE 模型是由美国 MCNC 环境模式中心开发研究的一套高效运算的排放源的处理模型, 通过世行项目支持把相关参数中国化之后可以直接为空气质量模式预报及模拟提供专业的排放源前处理^[15-16]. 本文采用 SMOKE 排放源处理模型处理北京及周边排放清单, 直接为多模式系统提供网格化的排放源. 考虑了面源、点源及机动车源 3 部分, 暂时没有考虑生物源排放. 面源空间分布综合考虑人口、道路密度、下垫面等排放源空间分布属性; 点源排放根据位置、气象因素等定出 3 维空间分布; 机动车排放采用 SMOKE 耦合的在线机动车模型 Mobile 6 考虑气象因子对机动车排放因子的影响; 同时针对不同排放源的时间变化规律, 设置不同时间分配曲线, 更合理地反映不同类型排放的时空特征.

北京空气质量多模式系统排放清单包括 3 个主要部分^[2,19]: 区域源采用 Streets 等^[20] 的 TRACE_P 排放清单, 通过个人通讯获得空间分辨率 6 分 (约 10 km) 清单, 基准年为 2000 年, 采用面源方式处理, 电厂类采用 Street 等^[3] INTEX-B 排放清单, 基准年 2006 年, 空间分辨率 0.5° (约 50 km), 以点源方式放置 SMOKE 模型中; 华北电厂清单由北京市环保局及中国环境科学研究院联合提供, 包括北京市及周

边 5 省市, 包括天津市、河北省、山西省、内蒙古自治区及山东省, 排放清单年份更新至 2008 年, 以大点源形式放置模式中; 北京及周边地市本地排放清单, 包括有北京和天津详细工业、锅炉等点源排放清单, 包含机动车在内的面源排放清单以及河北省重点工业排放点源, 分别由北京环保局、清华大学、中国环境科学研究院及北京工业大学多家单位提供, 其中北京本地排放清单更新至 2008 年 6 月. 奥运期间考虑污染源控制措施, 削减控制排放清单. 北京机动车源采用 SMOKE 耦合的 Mobile 模型计算排放因子, 7 月 20 日, 对排放清单采取机动车“单双号”控制策略, 9 月 20 日后恢复常态^[2,19]. 图 3 为 SMOKE 模型输出的北京及周边 PM10 排放分布.

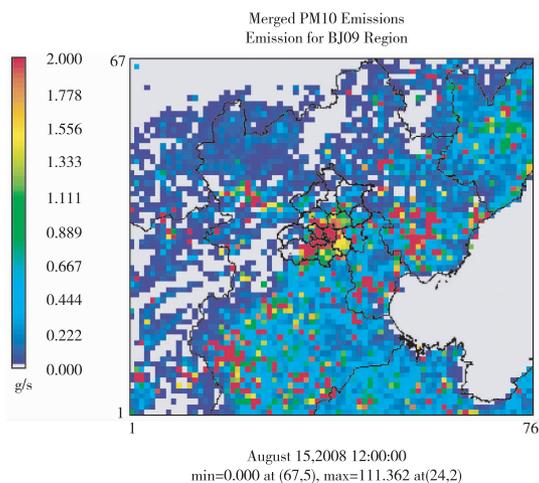


图 3 SMOKE 模型输出的北京及周边 PM10 排放分布
Fig. 3 The distribution of PM10 emissions in Beijing and its surrounding areas (D3) output from SMOKE model

1.4 空气质量模式

空气质量模式是空气质量模拟预报的核心, 其通过气象场、排放源、初始和边界条件及其他信息的输入, 数值求解污染物在大气中的物理、化学等过程, 获得污染物在一定时空范围内的浓度分布特征^[21].

多模式系统中各空气质量模式采用嵌套的方式实现从区域尺度到城市尺度的模拟, 而最外层边界条件目前采用清洁边界条件, 未来会采用全球化学输送模式的实时结果. 初始浓度的不准确在空气质量模式模拟初期会带来显著的误差, 但此误差的影响将随模拟时间增长而消失, 污染浓度的数值解主要受排放源和边界浓度条件支配^[22]. 因此, 多模式预报系统中, 同时为保障整个预报系统连续性, 减小 spin up 时间, 考虑客观条件, 采用前一日 24 h 预报

结果为当日污染物模式预报提供初始浓度。

污染物连续性方程是各空气质量模式计算基本方程,各模式都采用地形追随坐标^[11-12,14]。平流输送 NAQMS 模式中采用高精度正定质量守恒差分格式 Walcek 方案^[23],该方案是 Bott 通量法^[24]的修订简化版,保证化学物种的浓度正定和质量守恒,减少计算伪扩散问题^[25];CMAQ 和 CAMx 模式^[12,14]选用可保障有限区域通量守恒的 Bott 方案^[24]。3 模式垂直湍流扩散系数计算都采用文献^[26]的方法。NAQMS 和 CAMx 模式采用 Wesely^[27]发展的阻力模型计算主要气体的干沉降,针对气溶胶,增加考虑其重力沉降过程;CMAQ 模式则采用同样依据 Wesely^[27]发展的 RADM 干沉降模型结合辅助 Pleim-Xiu 陆面模型计算干沉降^[28]。湿沉降过程,NAQMS 模式主要处理云下(1 600 m 下)的洗脱过程,尤其是雨水对污染物的冲刷作用^[11,25];CAMx 模式考虑痕量气体与冷凝水混合、水滴吸收增长、水滴内可能的液相化学反应、降水及其过程中水滴周围气体扩散并入等过程^[14];CMAQ 模式湿沉降算法是在 RADM 模式^[29]基础上发展而来^[12]。气相化学,NAQMS 模式选用可适用于几个场景模拟的 CBM-Z 机制^[30],CMAQ 模式和 CAMx 模式则采用 CB4 机制^[31]。3 种模式液相化学机制都是基于 RADM 酸沉降模型^[29,32]发展而来的,以考虑硫酸盐、硝酸盐相关物种酸沉降过程为主,详尽考虑云模式和以硫化学为主的液相化学及其湿清除机制,CMAQ 模式考虑积聚态气溶胶转化形成云凝结核等过程^[12,33]。气溶胶过程,NAQMS 模式考虑气溶胶核化、碰并、蒸发、沉降等微物理过程,并将粒子分九档,每档又分为可溶、不可溶及二者混合 3 类,主要特色考虑沙尘气溶胶^[10,34];CAMx 模式中加入目前有关有机物形成 2 次颗粒物的研究成果,采用并加强 Mechanism 4 方案,考虑硫酸盐、硝酸盐及铵盐 3 项平衡反应、VOC 反应生成高分子量有机碳及元素碳,考虑气溶胶的生成、平流、扩散、雨刷、沉降及云雨洗涤等过程,同时也计算包括凝聚、消散等过程的不同粒径气溶胶转化^[14,35];而 CMAQ 气溶胶过程^[33]考虑不同模态粒径气溶胶相互转化、核化、液相反应生成云凝结核等过程。

1.5 各空气质量模式模拟PM10的结果对比

以 PM10 为例分析对比 3 模式预报效果差异,图 4~图 6 分别为多模式实时预报系统 2008 年 8 月 NAQMS 模式、CMAQ 模式及 CAMx 模式模拟的北京及周边地区(D3 区域)PM10 水平分布。对比可知:

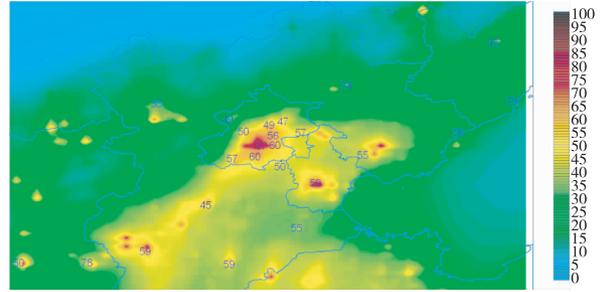


图 4 NAQMS 模式模拟 2008 年 8 月北京及其周边 PM10 分布态势(填色部分为 NAQMS 模拟值(折算为 API),数字为站点观测值)

Fig. 4 The distribution of PM10 concentration in Beijing and its surrounding areas in August 2008 output from NAQMS model (The shaded areas are NAQMS simulated, converted to API, and the numbers represent API observed)

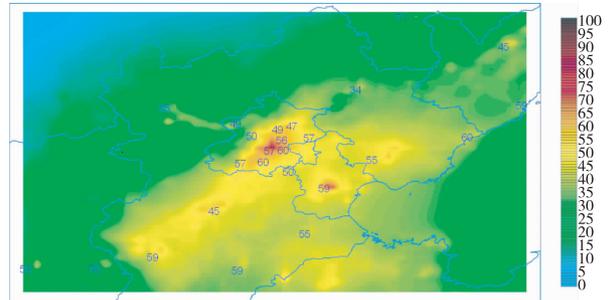


图 5 CMAQ 模式模拟 2008 年 8 月北京及其周边 PM10 分布态势

Fig. 5 The distribution of PM10 concentration in Beijing and its surrounding areas in August 2008 output from CMAQ simulation

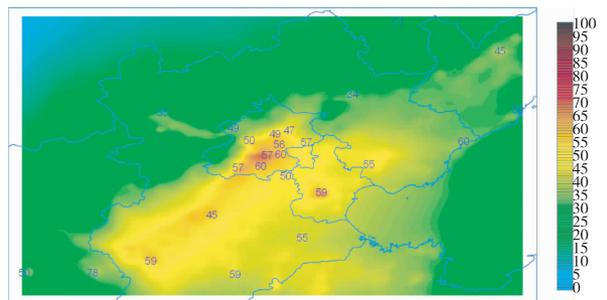


图 6 CAMx 模式模拟 2008 年 8 月北京及其周边 PM10 分布态势

Fig. 6 The distribution of PM10 concentration in Beijing and its surrounding areas in August 2008 output from CAMx simulation

1)各空气质量模式 PM10 模拟结果水平分布相似,PM10 高值中心区域与排放源分布(图 3)的高值区比较对应,反应出在较长时间尺度内(月均和年均尺度),排放源对空气质量模式模拟 PM10 水平空间分布取决定性影响;2)各空气质量模式由于所采用气溶胶相关的物理参数化等方案不同,模拟的 2008 年 8 月月平均 PM10 结果也有一定的差别,相比而言,NAQPMS 模式模拟的 PM10 高值中心浓度更接近观测,而污染扩散范围较小,而 CAMx 模式模拟结果则显得更加平滑,污染扩散范围更大,而 CMAQ 介于两者之间;3)2008 年北京国控站点平均的各模式预报和观测的 PM10 日均浓度时间序列对比(图 7)表明,各空气质量模式预报 PM10 日均浓度,存在较大的一致性,气象因素是污染物日际间变化的主因.4)通过模拟实测对比表明,各空气质量模式在不同站点模拟效果各有优劣.这也是多模式集成系统建立的意义所在,通过长期的比对分析获知不同区域、不同地区各空气质量模式模拟效果差异,取长补短可获得最优空气质量预报结果;同时,通过更多观测站点、更长时间序列对比,最终可吸收其他模式优点,改进自主研发的 NAQPMS 模式,提高我国空气质量数值预报水平.

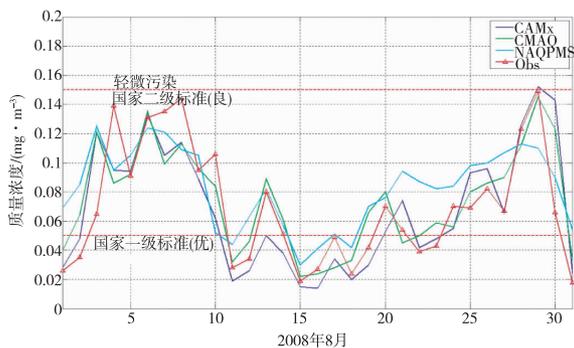


图 7 多模式 PM10 日均值后报曲线及其对比验证

Fig. 7 Contrast between observation and multi-model hindcast simulation curves of PM10 daily concentration

2 多模式预报结果集成

Ensemble results of multi-model forecasts

2.1 算术平均集成

不同的空气质量模式采用不同的物理化学参数化方案、数值计算方法及嵌套技术等数值求解方法,在无先验结果的情况下,无法评定各空气质量模式孰优孰劣,各预报成员地位等同,以算术平均获得新的预报成员期望值 F_{ave} :

$$F_{ave} = \frac{1}{m} \sum_{model=1}^m F_{model} \quad (1)$$

多模式系统中,以 F_{NAQPMS} 、 F_{CMAQ} 、 F_{CAMx} 分别代表 NAQPMS 模式、CMAQ 模式及 CAMx 模式预报结果,以算术平均方式获得新的预报成员 F_{ave} :

$$F_{ave} = (F_{NAQPMS} + F_{CMAQ} + F_{CAMx})/3. \quad (2)$$

本论文针对 2008 年 8 月 PM10 日均浓度预报分析研究算术平均对 PM10 日均预报效果.图 7 及表 1 为考虑奥运赛事期间额外减排等措施的国控站平均 PM10 日均值后报模拟—实测对比结果,结果表明:1)在 MM5 模式较好地模拟出天气过程的基础上,各空气质量子模式都较好地预报出污染积累过程,相关系数稳定在 0.7 以上;2)排放水平与实际情况接近,各空气质量模式相对偏差 $-0.002 \sim 0.013 \text{ mg/m}^3$,偏差百分比 $-3\% \sim 17\%$;3)3 种模式算术平均结果略优于单模式结果,表征模式性能水平的平均绝对误差(MAGE)和均方根误差(RMSE)都略小于最优单模式结果,与此同时,3 种模式算术平均 PM10 日均浓度与观测相关系数 0.826,略大于最优模式与观测相关系数(CMAQ, 0.824),说明在排放水平较接近实际情景的条件下,多模式算术平均预报结果略优于单模式.

表 1 北京多模式系统各模式结果与算术平均集成结果模拟效果统计参数

Table 1 Model performance statistical parameters between each model simulation and their arithmetic average

统计参数	CAMx	CMAQ	NAQPMS	平均	观测
平均值/($\text{mg} \cdot \text{m}^{-3}$)	0.068	0.074	0.083	0.075	0.070
模式偏差 MB/($\text{mg} \cdot \text{m}^{-3}$)	-0.002	0.004	0.013	0.005	-
MAGE/($\text{mg} \cdot \text{m}^{-3}$)	0.017	0.017	0.026	0.005	-
均方差 RMSE/($\text{mg} \cdot \text{m}^{-3}$)	0.024	0.023	0.031	0.023	-
相关系数 R	0.817	0.824	0.715	0.826	-

2.2 权重集成

算术平均集成结果中各空气质量模式预报成员地位等同,不考虑空气质量模式孰优孰劣,是在无任何先验条件下不得不采取的错死后,而本节所讨论权重集成则是在有一定模式性能评估的基础上,考虑不同空气质量模式预报结果权重的集成.

$$F_{weightA} = \sum_{model=1}^m (W_{model} \times F_{model}). \quad (3)$$

其中权重因子 W_{model} 满足:

$$\sum_{model=1}^m W_{model} = 1. \quad (4)$$

当 $W_1 = W_2 = \dots = W_m$ 时,即各预报成员拥有同样权重,则权重集成 F_{weightA} 退化为算术平均 F_{ave} . 若以前一日预报结果为先验,考虑前一日各模式预报结果模拟效果,模拟效果越好,预报与观测值越小,则给予越高权重值. 本文设计以前一日模式预报值与观测值绝对偏差倒数 $\frac{1}{|F_{\text{model}} - \text{Obs}|}$ 为权重,同时根据(4)式权重和为1,构造第 i 日预报权重因子为

$$W_{\text{model},i} = \frac{\frac{1}{|F_{\text{model},i-1} - \text{Obs}_{i-1}|}}{\sum_{\text{model}=1}^m \frac{1}{|F_{\text{model},i-1} - \text{Obs}_{i-1}|}}, \quad (5)$$

则有

$$F_{\text{weight},i} = \sum_{\text{model}=1}^m \frac{\frac{1}{|F_{\text{model},i-1} - \text{Obs}_{i-1}|} \times F_{\text{model},i}}{\sum_{\text{model}=1}^m \frac{1}{|F_{\text{model},i-1} - \text{Obs}_{i-1}|}}. \quad (6)$$

式(6)右边分子、分母同乘以

$$\prod_{\text{model}=1}^m |F_{\text{model},i-1} - \text{Obs}_{i-1}|,$$

得到

$$F_{\text{weight},i} = \frac{\sum_{\text{model}=1}^m \frac{\prod_{\text{model}=1}^m |F_{\text{model},i-1} - \text{Obs}_{i-1}|}{|F_{\text{model},i-1} - \text{Obs}_{i-1}|} \times F_{\text{model},i}}{\sum_{\text{model}=1}^m \frac{\prod_{\text{model}=1}^m |F_{\text{model},i-1} - \text{Obs}_{i-1}|}{|F_{\text{model},i-1} - \text{Obs}_{i-1}|}}. \quad (7)$$

$$F_{\text{weight},i} = \frac{\sum_{\text{model}=1}^m \prod_{j=1, j \neq \text{model}}^m |F_{j,i-1} - \text{Obs}_{i-1}| \times F_{\text{model},i}}{\sum_{\text{model}=1}^m \prod_{j=1, j \neq \text{model}}^m |F_{j,i-1} - \text{Obs}_{i-1}|}. \quad (8)$$

本文以 NAQPMS、CMAQ 及 CAMx 模式为成员建立多模式集成系统, F_{NAQPMS} 、 F_{CMAQ} 、 F_{CAMx} 分别代表 NAQPMS 模式、CMAQ 模式及 CAMx 模式预报结果. 以第 $i-1$ 日预报结果为先验,以第 $i-1$ 日模式模拟与观测值绝对偏差倒数为权重,根据(8)式,则第 i 日预报 $F_{\text{weight},i}$ 为

$$F_{\text{weight},i} = (E_{\text{CMAQ},i-1} \times E_{\text{CAMx},i-1} \times F_{\text{NAQPMS},i} + E_{\text{CAMx},i-1} \times E_{\text{NAQPMS},i-1} \times F_{\text{CMAQ},i} + E_{\text{NAQPMS},i-1} \times E_{\text{CMAQ},i-1} \times F_{\text{CAMx},i}) / (E_{\text{CMAQ},i-1} \times E_{\text{CAMx},i-1} + E_{\text{CAMx},i-1} \times E_{\text{NAQPMS},i-1} + E_{\text{NAQPMS},i-1} \times E_{\text{CMAQ},i-1}). \quad (9)$$

其中, E_{NAQPMS} 、 E_{CMAQ} 、 E_{CAMx} 分别表征模式模拟与观测

值绝对偏差,则有

$$\begin{aligned} E_{\text{NAQPMS},i-1} &= |F_{\text{NAQPMS},i-1} - \text{Obs}_{i-1}|, \\ E_{\text{CMAQ},i-1} &= |F_{\text{CMAQ},i-1} - \text{Obs}_{i-1}|, \\ E_{\text{CAMx},i-1} &= |F_{\text{CAMx},i-1} - \text{Obs}_{i-1}|. \end{aligned} \quad (10)$$

以北京环境监测中心业务运行的 EMS-Beijing 系统预报的 PM10 日均值为例,比较算术平均集成与权重集成效果,以集成预报结果与观测值绝对偏差为指标评价其效果优劣,当权重集成预报结果 $F_{\text{weight},i}$ 与观测值绝对偏差小于算术平均 $F_{\text{ave},i}$ 与观测值绝对偏差,即认为“权重优于算术平均”.

对比研究 2008 年 4—11 月 PM10 预报结果,如表 2 所示. 总体上,权重集成算法略优于算术平均,4 月及 7—11 月,权重集成较优天数比例保持在 55% 以上,8 个月份权重集成优于算术平均天数平均达 61%. 进一步分析表明,权重集成方法在天气形势改变、空气质量浓度曲线出现“拐点”的时候,此时各空气质量模拟效果变化较大,权重集成效果反而略逊于算术平均.

表 2 权重集成与算术平均集成 PM10 预报日均值效果对比
Table 2 Comparison of the forecasting performance of PM10 daily concentration between the weight integration and the arithmetic average

月份	月份 总天数/d	权重优于算术 平均天数/d	权重优于算术 平均百分比/%	备注
4	30	19	63	
5	31	15	48	权重较优天数略 小于 50%
6	30	14	47	
7	31	19	61	
8	31	19	61	
9	30	23	77	权重较优天数大 于 50%
10	31	17	55	
11	30	23	77	
合计	244	149	61	

3 结论

Conclusion

本文初步介绍了北京空气质量多模式系统主要框架及其初步应用. 多模式系统以 NAQPMS 模式、CMAQ 模式及 CAMx 模式为核心空气质量模式,采用统一的模式网格、统一的排放源、统一的气象场. 从所采取物理化学机制、基本组成部分、计算特征及数据结构等多方面简要对比了 NAQPMS、CMAQ 和 CAMx 模式的差异.

所采用的排放清单及其处理过程与实际情况较为接近,针对奥运控制的8月,各空气质量模式都很好模拟出PM₁₀变化特征,相对偏差-0.002~0.013 mg/m³,偏差百分比-3%~17%,相关系数稳定在0.7以上。

EMS-Beijing多模式系统建立为空气质量多模式集合集成提供了坚实基础。本文尝试以算术平均集成、权重集成等方式集成多模式预报结果,分析表明:1)在排放清单较接近实际排放的情况下,表征模式性能水平的平均绝对误差(MAGE)和均方根误差(RMSE)都略小于最优单模式结果,与此同时,3模式算术平均PM₁₀日均浓度与观测相关系数0.826,略大于最优模式与观测相关系数(CMAQ, 0.824),多模式算术平均预报结果略优于单模式。2)考虑前一日各模式模拟效果,以前一日模式预报值与观测值绝对偏差倒数为权重获得的权重集成PM₁₀日均值预报结果总体上优于算术平均预报结果,4-11月权重集成优于算术平均天数平均增加61%。

所建立的多模式系统由于采用了统一气象场及排放源处理,既可以进行模式比较,也可以替提供准确高效的空气质量多模式预报结果。EMS-Beijing已经在北京市环境保护监测中心实现业务化。未来需要通过大气化学资料同化以及多模式集合预报技术的开发进一步提升模拟预报水平。

参考文献

References

[1] 北京市环保局.北京市人民政府关于本市阶段控制大气污染措施系列公告[EB/OL]. [2009-05-29]. <http://www.bjepb.gov.cn/bjhb/publish/portal0/tab151/module639/page2.htm>
Official website of Beijing Municipal Environmental Protection Bureau. Series notices on air pollution control measures of the Beijing Municipal People's Government, 2009

[2] 王自发,吴其重,谢付莹,等.区域空气质量模拟、预测及情景分析研究—技术报告[R].北京:中国科学院大气物理研究所,2009
WANG Zifa, WU Qizhong, XIE Fuying, et al. Technological Report: Simulation, Prediction and Scenarios Analytical Study of Regional Air Quality[R]. Beijing: Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy Sciences, 2009

[3] Streets D G, F J S, J Jang Carey, et al. Air quality during the 2008 Beijing Olympic Games[J]. Atmospheric Environment, 2007, 41: 480-492

[4] Chen DS, Cheng SY, Li JB, et al. Application of LIDAR technique and MM5-CMAQ modeling approach for the assessment of winter PM₁₀ air pollution: A case study in Beijing, China[J]. Water Air and Soil Pollution, 2007, 181(1-4): 409-427

[5] An X, T Z, Z W, et al. A modeling analysis of a heavy air pollution episode occurring in Beijing[J]. Atmos. Chem Phys., 2007, 7: 3103-3114

[6] 王雪松,李金龙.北京地区夏季PM₁₀污染的数值模拟研究

[J]. 北京大学学报:自然科学版, 2003, 39(3): 419-427
WANG Xuesong, LI Jinlong. A numerical simulation study of PM₁₀ pollution in Beijing during summer time[J]. Acta Scientiarum Naturalium Universitatis Pekinensis, 2003, 39(3): 419-427

[7] 王自发,李丽娜,吴其重,等.区域输送对北京夏季臭氧浓度影响的数值模拟研究[J].自然杂志,2008,30(4):194-198
WANG Zifa, LI Lina, WU Qizhong, et al. Study on numerical simulation of the effect of regional transport on the ozone sphere over Beijing in summer[J]. Chinese Journal of Nature, 2008, 30(4): 194-198

[8] Carmichael G R, Sakurai T, Streets D, et al. MICS-Asia II: The model intercomparison study for Asia Phase II methodology and overview of findings[J]. Atmospheric Environment, 2008, 42(15): 3468-3490

[9] Mallet V, Quelo D, Sportisse B, et al. Technical Note: The air quality modeling system Polyphemus[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2007, 7(20): 5479-5487

[10] 王自发,谢付莹,王喜全,等.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,2006,30(5):778-790
WANG Zifa, XIE Fuying, WANG Xiquan, et al. Development and application of nested air quality prediction modeling system[J]. Chinese Journal of Atmospheric Sciences, 2006, 30(5): 778-790

[11] 王自发,黄美元,何东阳,等.关于我国和东亚酸性物质输送的输送研究 I: 三维欧拉污染物输送实用模式[J].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[J]. Chinese Journal of Atmospheric Sciences, 1997, 21(3): 366-378

[12] Byun D W, Ching J K S. Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multi-scale Air Quality (CMAQ) Modeling System [R]. EPA/600/R-99/030, US EPA National Exposure Research Laboratory, Research Triangle Park, NC. 1999

[13] Dennis R L, Byun D W, Novak J H, et al. The next generation of integrated air quality modeling: EPA's Models-3[J]. Atmospheric Environment, 1996, 30(12): 1925-1938

[14] ENVIRON. User's Guide to the Comprehensive Air Quality Modeling System with Extensions (CAMx), Version 4.4 [R]. 2002: 10, 16, 29, 38-40, 30, 44

[15] Houyoux M R, Vukovich J M. Updates to the Sparse Matrix Operator Kernel Emissions (SMOKE) Modeling System and Integration with Models-3 [C]. The Emission Inventory: Regional Strategies for the Future, Oct 26-28, Raleigh, North Carolina, Environmental Programs MCNC - North Carolina Supercomputing Center, 3021 Cornwallis Road, Research Triangle Park, NC 27709-2889. 1999

[16] MCNC. Sparse Matrix Operator Kernel Emissions (SMOKE) Modeling System, 2004

[17] Grell GA, Dudhia J, Stauffer DR. A description of the Fifth-Generation Penn State/NCAR Mesoscale Model (MM5) [R]. Natl. Cent. for Atmos. Res. Natl. Cent. for Atmos. Res., Boulder, Colo., Tech. Note NCAR/TN-398 + STR. 1994

[18] 高媛媛,何金海,王自发.城市化进程对北京区域气象场的影响模拟[J].气候与环境学报,2007,23:58-64
GAO Yuanyuan, HE Jinhai, WANG Zifa. Simulation for impact of urbanization on meteorological conditions in Beijing area[J]. Journal of Meteorological and Environment, 2007, 23(3): 58-64

[19] 北京市环境保护局,北京市环境监测中心,中国科学院大气物理研究所,等.“北京市空气质量集成预报系统研究”研究报告[R]. D0605001040521,北京,2009
Beijing Municipal Environmental Protection Bureau, Beijing Municipal Environmental Monitoring Center, Chinese Academy of Sciences Institute of Atmospheric Physics, et al. Research Report: Study on Beijing Air Quality Ensemble Forecasting System[R].

- D0605001040521, Beijing, 2009
- [20] Streets D G, T C B, Carmichael G R, et al. An inventory of gaseous and primary aerosol emission in Asia in the year 2000 [J]. *J Geophys Res*, 2003, 108 (D21); doi: 10.1029/2002JD003093
- [21] 唐孝炎, 张远航, 绍敏. 大气环境化学 [M]. 北京: 高等教育出版社, 2006
TANG Xiaoyan, ZHANG Yuanhang, SHAO Min. *Atmospheric Environmental Chemistry* [M]. Beijing: Higher Education Press, 2006
- [22] Seinfeld J H, Pandis S N. *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change* [M]. New York, JOHN WILEY & SONS, INC. 1998
- [23] Walcek C J, Aleksic N M. A simple but accurate mass conservative, peak-preserving, mixing ratio bounded advection algorithm with Fortran code [J]. *Atmospheric Environment*, 1998, 32 (22): 3863-3880
- [24] Bott A. Monotone Flux Limitation in the Area-preserving Flux-form Advection Algorithm [J]. *Monthly Weather Review*, 1992, 120: 2592-2602
- [25] 高超. 东亚大气酸碱物质输送及氨中和作用研究 [D]. 北京: 中国科学院大气物理研究所, 2008
GAO Cao. Study on the atmospheric transport of acid-base material and the role of ammonia over East Asia [D]. Beijing: Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences Graduate School of Chinese Academy of Sciences, 2008
- [26] Byun D W, Dennis R. Design artifacts in Eulerian air-quality models—evaluation of the effects of layer thickness and vertical profile correction on surface ozone concentrations [J]. *Atmospheric Environment*, 1995, 29 (1): 105-126
- [27] Wesely M L. Parameterization of surface resistances to gaseous dry deposition in regional-scale numerical models [J]. *Atmospheric Environment*, 1989, 23 (6): 1293-1304
- [28] Schere K. The U S EPA community multiscale air quality (CMAQ) modeling system-overview [C] // *Atmospheric Sciences Modeling Division, NOAA -Air Resources Laboratory, Research Triangle Park, NC. 2003*
- [29] Chang J S, Brost. A three-dimensional eulerian acid deposition model: physical concepts and formulation [J]. *J Geophys Res*, 1987, 92: 14681-14700
- [30] Zaveri R A, Peters L K. A new lumped structure photochemical mechanism for large-scale applications [J]. *J Geophys Res*, 1999, 103 (30): 30387-30415
- [31] Gery M W, Whitten G Z, Killus JP, et al. A photochemical kinetics mechanism for urban and regional scale computer modeling [J]. *J Geophys Res-Atmospheres*, 1989, 94 (D10): 12925-12956
- [32] Walcek C J, Taylor G R. A theoretical method for computing vertical distributions of acidity and sulfate production within cumulus clouds [J]. *J Atmos Sci*, 1986, 43: 339-355
- [33] Binkowski F S, Roselle S J. Models-3 community multiscale air quality (CMAQ) model aerosol component - 1. Model description [J]. *Journal of Geophysical Research-Atmospheres*, 108 (D6), 2003; doi: 10.1029/2001JD001409
- [34] 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 [D]. 北京: 北京师范大学化学学院大气环境研究中心, 2006
ZHAO Xiujian. Study on the long-distance transport and mixed of dust aerosols over East Asia and its settlement over ocean [D]. Beijing: Beijing Normal University Chemical Research Center Institute of Atmospheric Environment, 2006
- [35] 邱永铨. CAMx 模式简介 [Z]. 台湾, 2005
KUANG Yongquan. Model CAMx Description [Z]. Taiwan, 2005

Ensemble air quality multi-model forecast system for Beijing (EMS-Beijing): Model description and preliminary application

WANG Zifa¹ WU Qizhong^{1,2} Alex GBAGUIDI¹

YAN Pinzhong^{1,2} ZHANG Wei^{1,2} WANG Wei^{1,2} TANG Xiao^{1,2}

1 LAPC/NZC, Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029

2 Graduate School, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049

Abstract The ensemble air quality multi-model forecast system for Beijing (EMS-Beijing) is introduced in this paper. It includes the IAP/CAS nested air quality prediction modeling system (NAQPMS), the US/EPA community multiscale air quality (CMAQ) modeling system and the US Environ company's three dimensional comprehensive air quality model with extensions (CAMx). The system uses the unified meteorological field and emissions inventory provided respectively by the fifth-generation NCAR/Penn state meso-scale model (MM5) and the sparse matrix operator kernel emissions (SMOKE). All the models adopt the same nested domains, with the same grid size and resolution. The EMS-Beijing has been used for Beijing daily air quality routine real-time forecast since March 2008, especially, successfully supporting the air quality forecast for the 2008 Beijing Olympic Games. Various ensemble methods such as arithmetic mean and weight integration methods are compared and the results indicate that: 1) the emission inventory in August 2008 (Olympic Games) processed by SMOKE is close to the actual, with the model bias (MB) of each air quality model being $-3\% \sim 17\%$ for August 2008; 2) the arithmetic mean ensemble method has better performance than any other single model in forecasting daily PM10 concentration; 3) according to the daily PM10 concentration results during April-November 2008, the weight mean integration method is better than the arithmetic mean method, with performance increase of 61%.

Key words air quality; multi-model; ensemble forecast; PM10