

城市区域大气质量数值预报方法的研究进展

吴增茂 盛立芳 刘烽

(青岛海洋大学海洋环境学院, 青岛 266003)

摘要 文章着重介绍了城市区域大气质量动力数值预报方法的研究进展, 分析讨论了数值预报系统中的大气物理-边界层动力学-大气化学变化机制相耦合的结构特点以及预报系统存在的不确定性因素。

关键词 城市区域大气质量 数值模式预报 不确定性 物理-化学机制耦合

引言

自本世纪 50 年代以来, 随着全球性的工业快速增长, 人类社会经济活动对大气环境造成的损害日益加剧, 人们生活和工作在有害于人类身心健康的环境中, 且对社会发展造成很不利的影响。随着现代科学技术的进

步, 人们对大气环境和其他环境问题的普遍关注, 使得大气化学和大气环境分析研究以及大气质量的预测和预报研究得到了快速发展。近年来, 中国各级政府对大气环境问题非常重视, 许多城市陆续开始发布每周的大气质量公报, 一些大城市还将开展大气质量的数值预报。为此很有必要对国外在该领域的

研究发展进程与现状进行分析研究。

大气污染预测预报方法研究,其任务是研究大气混合物的扩散规律及其时空分布特点,客观评价区域性空气污染变化状况和趋势,并研究和提出为保证达标所必须采取的措施。在城市中,不利天气条件下使得有害混合物浓度加大,这就要求采取临时削减排放量和降低有害物排放的措施。因此大气质量管理和控制排放量是与空气质量预报紧密联系的。对于空气污染预报,主要的兴趣在于城市和工业中心区域性的短期(多半是一昼夜)的预报,特别是预报在短时间内近地面层大气中有害混合物浓度急剧增大的可能性^[1]。近年来,关于大气污染物长距离输送的模式研究发展也比较快,但本文并未涉及这方面内容。

空气质量预报的发展可以简略地概括为:本世纪60年代初,开始出现的区域尺度空气污染潜势预报,主要预报可能导致空气污染的特殊天气形势和气象状况^[2];自60年代末逐渐开展空气污染浓度的统计方法预报;几乎与统计预报方法同时出现了空气污染浓度预报的半经验数值模型,如基于质量守恒定律的箱模型以及基于湍流扩散统计理论的高斯模型、萨顿模型^[1~3];自70年代后期迅速发展起来的基于大气物理-化学过程耦合的动力学数值模型^[4,5]。随着大气化学分析研究技术及计算机技术的快速发展,该方法日渐成为大气污染预报的主要手段。以下将该方法简称为动力数值模型方法,这是本文分析讨论的主要对象。

1 大气质量预报的动力数值模型方法的研究进展

在70年代后期至80年代产生的数值法解大气湍流扩散方程(K-理论)的数值模型,如 Rao 和 Cteven(1983)研制的不利气象条件下空气污染模型,奠定了利用动力模型法计算混合物浓度场的基础^[1]。为了排除某些不确定性因子和误差的影响以及因受计算能

力的限制,在当时的实际预报应用中,是将 Kalman 滤波等统计方法及高斯模型同动力学模型结合起来使用。美国许多组织制定了许多空气污染数值预报的业务化方案,美国环境保护局 EPA(Environmental Protection Agency)支持发展和考察评价了一批动力数值模型。其中最为引人注意的是“区域氧化物模型”(Regional Oxide Model)和第一代“区域酸性物沉降模型”(Regional Acid Deposition Model, RADM)^[4,5]。这期间,在前苏联及西欧国家也进行了一系列大气污染事件的数值模拟分析以及大气质量数值预报模型研究。由于受计算机资源限制,这些模型都是比较简单的,所包含的化学成分及反应过程都比较少。

大气污染动力数值模型系统,是大气中的气相和气溶胶化学同边界层大气物理学及大气动力学过程的相互作用耦合在一起的动力学数值积分系统。其构成特征是将描述化学变化的化学机制同三维的中尺度大气模型衔接。随着科学技术及研究的发展,其复杂性迅速增加。经过近十年的研究工作,到了90年代初,发展了用于大气质量预报的第二代模型 RADM2。同它的前身 RADM1 一样,由于预报出的臭氧、亚硫酸盐、硝酸和过氧化氢浓度是 NO_x 及非甲烷类碳氢化合物浓度的复杂函数,因而使模型成为高度非线性。然而, RADM2 在化学机制方面的重要改进,使得其中包括的气相物质的种类及其化学反应过程更复杂更趋真实。其结果是 RADM2 模型系统能够对更广泛多变的环境条件进行污染物预测和预报分析。然而初期的 RADM2 大气质量模型仍是以气态物质浓度预测为研究对象的。

大气中气溶胶的化学及物理学过程的数值模型研究明显地滞后于气态物质研究。自80年代后期开始的若干年的研究中还限于气溶胶移动轨迹的动力学研究。直到90年代中后期才建立起了能比较完善地描述气溶胶化学与物理变化过程的大气质量模式系

统^[6~8]。除沉降过程外,该系统中还包括了气溶胶的成核作用、混凝、凝结、溶解、蒸发、(位势)均衡及液相化学等过程。现代大气质量模式系统的基本功能组成结构及相互作用关系如图 1 所示。

目前美国环保局(EPA)正在建设一种具有综合功能的大气质量模式系统,取名为 model-3。该系统主要满足管理分析者及科学家的需要,将充分利用高性能计算与通讯(High Performance Computing and Communication, HPCC)计划提供的技术与工具。EPA 发展这种高级大气质量模式系统的目标是:(1)为大气环境质量管理部提供有效的决策支持系统;(2)为大气质量数值模型发展以及数值模型预报系统发展提供体制保证^[4]。该系统拟定的主要功能模块构成包括:(1)化学过程-输送过程耦合作用的计算理论模型;(2)气象学要素场的计算模型;(3)各类污染源排放强度计算处理地理编码模型与投影系统;(4)空气质量保证与控制(QA/QC)

系统^[4]。可以看出:EPA 的第三代模型系统是要将大气质量预报同大气质量保证和污染控制的决策支持体系紧密地联系在一起,是理想的大气质量预警管理系统。

2 大气质量预报模式的不确定性分析

空气质量预报研究发展到今天,出现的大气质量预报模型数量不少,包括高斯烟羽模型及其各种补充形式,若干个三维的数值动力模型,还包括许许多多的相似性模型和统计学模型。然而,各种模型中都存在着预报的不确定性。Fox(1984)、Smith(1984)和 Irwin 等(1987)概述了预报模型的不确定成分,从而开始了大气质量模型评价的新纪元^[9]。他们提出了一些评估这种不确定性的方法,并且指出,不论模型的科学性怎么好,由于资料输入误差以及随机过程,模型预报中总是存在着不确定性。

大气质量预报模式的不确定性可归纳为如下几方面来源:1)资料误差。包括仪器自身

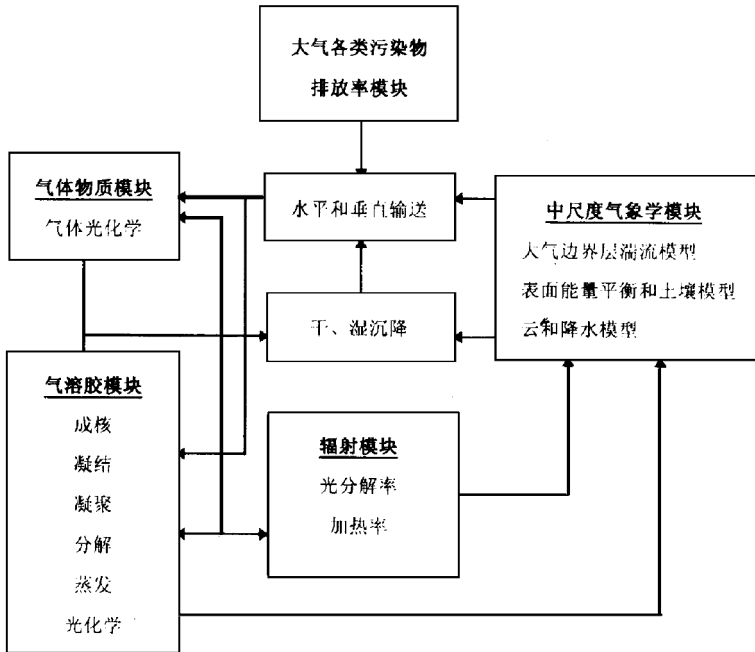


图 1 区域性大气质量数值预报系统功能组成结构示意图^[6]

误差,以及仪器安排位置的不良代表性影响。2)大气过程的内在随机性。在大气运动变化过程中,湍流作用会使得即使在中尺度平坦区域内不同点上测得的平均风速、风向自然地产生随机的变异性。有研究表明,风速的这种变异性约为 1 m/s。对其他重要参数如风向、温度、湍流能量,以及污染物浓度等都需要作出变异性估计。这种不确定性代表了模式结果离散性的下限,并且可用于估计预报结果的置信区间。3)数值模式的随机性。首先是模型预报结果同实测结果含意上有着内在的固有差异。三维数值模型预报表示由格点边长所围成体元的整体平均值,然而观测值表示的是在单点上的一次观测现实。因此,从严格的可比性讲,应该在一个体元范围内完成大量的类似实验,并且还应对结果进行平均^[10,11]。另一方面,动力学模型及化学机制模型同真实大气间总会存在着某种程度上的差异或不完备,这也必然会造成预报结果同真实大气间的偏差。4)污染源排放强度及源参数的不确定性。国外有人统计了一周里每天的车流量以及城区大气污染物浓度的差异。事实上,除排放源本身的不稳定性发生变化外,各种类型污染源的排放强度还会不同程度地随着天气变化及人们活动的变更而产生变化,这些变化有很强的随机性,是各类污染源的固有特性。污染源排放强度的随机变化必然会大大地增加大气质量预报难度和预报结果的离散性。

由于大气质量预报模型实际上就是中尺度气象学模型同大气化学机制耦合在一起,而且主要是风、温场分布变化及大气湍流场特征决定着污染物的传输。因此,近年来分析研究中尺度气象场的不确定性对于大气质量模式预报影响的工作十分活跃,既有定性的分析又有大量的定量研究^[11,12]。还有一些研究着重分析了物质化学演变或化学方程参数的不确定性与影响,以及污染物浓度扰动的分析^[13,14]。不难理解,模型总的不确定性是由各类资料输入误差,湍流运动内在随机性

及模型物理、化学机制误差联合作用的结果。

3 预报模型的评估方法

如前所述,大气质量预报模型是由中尺度大气动力学模型与化学机制模型联合组成。对于中尺度风矢量场等气象要素场预报质量的检验最早受到重视。Mosteller 和 Tukey (1977)就曾提出,将“直觉”应用于模式输出结果图表的判断分析中,即所谓“look and see”去确定它们看上去是否正确。因为人类眼睛是空间信息的非常有效的汇集器。Kessler 等(1988)就成功地使用了这种方法进行风矢量场的分析^[11]。

统计学评估方法已在各类预报模型中应用,往往有比较通用的软件包可提供使用,用于计算无因次模型机能的量度。如:部分偏差(FB)、几何平均偏差(MG)、归一化均方误差(NMSE)、几何平均方差(VG)、相关系数(R)以及估计二倍范围内的资料部分(FAC2)。它们分别定义为:

$$FB = (\bar{X}_o - \bar{X}_p) / [0.5(\bar{X}_o + \bar{X}_p)] \quad (1)$$

$$MG = \exp(\ln \bar{X}_o - \ln \bar{X}_p) \quad (2)$$

$$NMSE = \overline{(X_o - X_p)^2} / (\bar{X}_o \bar{X}_p) \quad (3)$$

$$VG = \exp[\overline{(\ln X_o - \ln X_p)^2}] \quad (4)$$

$$R = \overline{(X_o - \bar{X}_o)(X_p - \bar{X}_p)} / \sigma_{XP} \sigma_{XO} \quad (5)$$

$$FAC2 = \text{资料部分} (\text{当 } 0.5 \leq X_p / X_o \leq 2) \quad (6)$$

这里 X_o 为观测值, X_p 为对应的预报值,其他符号为统计学中常见符号^[11]。许多研究实践证明:如果只来自单一站位的资料进行大气质量模式评估试验那是十分危险的。同一模式对某一站点高报 40%,而在附近的另一点却低报 40%,这是毫不奇怪的。

由于测量的污染物浓度中包含着自然发生的湍流引起的不确定性的影响,因此应依照大气质量模式预报对感兴趣的时段进行平均,那么污染物浓度随机分布的方差可用下式来近似估计。

$$\sigma_i^2(T) = 2\bar{C}^2(T_i/T) \{1 - (T_i/T) [1 - \exp(-T/T_i)]\} \quad (7)$$

方程(7)中, T 为平均时间, T_i 为模式积分时间步长^[10]。从上式不难发现, $\sigma_c^2(T)$ 随平均时段增加而减少, 而随积分时间步长增大而增加。数值模型预报的只是整体平均值 \bar{C} 。

4 结语

从上述分析中得知大气质量数值预报是以大气物理、边界层大气动力学及大气化学理论相结合为其理论基础的。该数值预报系统是以中小尺度大气动力学模型、污染源排放率分析模型、大气中化学物质(包括气相与气溶胶物质)的化学反应模型以及各类污染物的干、湿沉降模型为基本部分组成的。然而, 中小尺度大气动力学模型还必须以天气尺度数值预报产品为依托。所以可以说, 大气质量数值预报是一个多学科交叉、多尺度动力学过程嵌套和相互作用的复杂科学问题。由于各类观测资料误差, 以及边界层大气的内在随机性、数值模型的内在随机性以及各类污染源信息的不确定性都会增加预报结果的离散性。城市区域大气质量可预报性问题的研究有待深入。

大气质量数值预报发展的目标是: ①更加全面地、准确地给出区域性, 特别是城市区域的大气质量预测; ②为大气环境管理部门提供有效决策支持系统。我们国家在这一领域的研究虽然发展比较晚, 但是近年来中国对环境研究的高度重视和大气环境监测与研究水平的迅速提高, 为中国在这一领域的研究发展注入了强大的动力。我们是发展中国家, 在发展空气质量预报研究方面也应更加重视运用最新科技成果, 实现科学技术发展上的跨越。中国在污染气象潜势预报及大气污染统计预报方面有较好的基础, 当前应该以发展第二代数值模型为主要目标, 加快城市区域大气质量数值预报模型的研究发展, 并努力创造条件积极稳妥地向第三代模型延伸。

参考文献

- 1 M E БерЛЯНД. 申亿铭译. 大气污染预报与控制. 北京: 气象出版社, 1991
- 2 王润鹿等. 实用污染气象学. 北京: 气象出版社, 1981
- 3 Nieuwstadt F T M and H Vandop (ed). Atmospheric turbulence and air pollution modelling. D Reidel publishing company, 1981
- 4 Dennis R L et al. The next generation of integrated air quality modelling; EPA's model-3. Atmospheric Environment, 1996, 30(12): 1925—1938
- 5 Stockwell W R et al. The second generation regional acid deposition model chemical mechanism for regional air quality modelling. J Geop Res, 1990, 95 (D10): 16343—16367
- 6 Jacobson M Z et al. Development and application of a new air pollution modeling system. Part I: gas-phase simulation. Atmospheric Environment, 1996, 30(12): 1939—1963
- 7 Jacobson M Z. Development and application of a new air pollution modeling system. Part II: aerosol module structure and design. Atmospheric Environment, 1996, 31(2): 131—144
- 8 Jacobson M Z. Development and application of a new air pollution modeling system. Part III: aerosol-phase simulation. Atmospheric Environment, 1996, 31(4): 587—608
- 9 Hanna S R. Uncertainties in air quality model predictions. Boundary-Layer Meteo, 1993, 62(1): 3—20
- 10 Hanna S R. Uncertainties in hazardous gas dispersion models. preprints of Sixth Joint Conference on Applications of Air Pollution Meteorology. Jan. 30—Feb. 3, 1989, Calif. AMS
- 11 Hanna S R. Mesoscale meteorological model evaluation techniques with emphasis on needs of air quality models. in: Mesoscale Modeling of the Atmosphere edited by Pielke R A and R P pearce. 1994, 25, No. 47, AMS, 47—60
- 12 Sistla G et al. Effect of uncertainties in meteorological input on urban airshed model predictions and ozone control strategies. Atmospheric Environment, 1996, 30(12): 2011—2025
- 13 Gaiger E K et al. Uncertainty of the long-term suspension factor. Atmospheric Environment, 1997, 31(11): 1647—1656
- 14 Sawford B L. Recent developments in the Lagrangian stochastic theory of turbulent dispersion. Boundary-Layer Meteo, 1993, 62: 191—215