WRF四维同化数据在空气质量法规模型CALPUFF的应用研究*

杨景朝[1] 伯 鑫[2] 田 军[3] 王 刚[4] 李时蓓[2] 王 琰[2]

(1. 四川省气象灾害防御技术中心,成都 610072; 2. 环境保护部 环境工程评估中心,北京 100012;
3. 南京大学 环境规划设计研究院股份公司,南京 210093; 4. 三捷环境工程咨询(杭州)有限公司,杭州 310012)

摘要: 利用内蒙古正蓝旗地区气象观测数据和牛顿张弛逼近四维同化方法,通过WRF、CALPUFF的模拟,在此基础上结合气象要素、污染物浓度等实测数据,对比了同化前后模拟结果与观测结果的相符性。结果表明:在加入同化方案后,WRF模拟的各气象要素相关系数(R)、吻合指数等指标均有所提高,CALPUFF的模拟结果也更接近于观测值。说明该同化方法可有效提高气象要素模拟的准确性,有助于改善CALPUFF模拟效果,可应用于我国大气环境影响评价工作。

关键词: WRF; CALPUFF; 四维同化; 数值模拟

DOI: 10.13205/j.hjgc.201807033

APPLICATION OF FOUR-DIMENSION DATA ASSIMILATION METHODS IN CALPUFF

YANG Jing-chao[1], BO Xin[2], TIAN Jun[3], WANG Gang[4], LI Shi-bei[2], WANG Yan[2]

(1. Sichuan Meteorological Disasters Prevention Technology Center, Chengdu 610072, China;
2. The Appraisal Center for Environment and Engineering, Ministry of Environmental Protection, Beijing 100012, China;
3. Academy of Environmental Planning and Design, Co., Ltd, Nanjing University, Nanjing 210093, China;
4. Trinity Consultants, Hangzhou 310012, China)

Abstract: The paper adopted meteorological observation data of Zhenglanqi in Inner Mongolia region, and processed by nudging four-dimension data assimilation method by WRF and CALPUFF simulation. Compared with observation data, assimilation scheme could significantly improve the WRF simulation results, such as correlation coefficient (R) and match index of various meteorological elements and pollutant concentration. And CALPUFF simulation results were relatively closer to the observations. The assimilation method could effectively improve the accuracy of the meteorological elements simulation and CALPUFF simulation effect and be further used in environmental impact assessment.

Keywords: WRF; CALPUFF; four-dimension data assimilation; numerical simulation

0 引 言

环境影响评价是对规划和建设项目实施后可能造成的环境影响进行的核心工作[1],而大气污染预测则是环评工作中重要的环节。CALPUFF是我国HJ 2.2—2008《环境影响评价技术导则 大气环境》推荐的空气质量法规预测模式,该模式采用三维非稳态拉格朗日扩散理论,在大气环评、大气规划等领域得到了广泛应用[2]。CALPUFF模式包括CALMET气象模块、CALPUFF扩散模块以及一系列前/后处理模块。CALMET是CALPUFF模式的气象处理模块,其可读入地面气象观测数据、探空气象观测数据、中尺度气象模式预测数据等[3-6]。CALMET输出结果CALMET.DAT为CALPUFF烟团扩散模式提供三维网格区域气象场,污染物的传输、扩散、沉降等物理和化学过程均通过该气象场进行驱动计算。因此区域气象场的科学性和准确性对提高CALPUFF的模拟效

* 国家环保公益性行业科研专项(201309062);清华大学环境学院重点学术机构2015年度开放基金课题;国家环保公益性行业科研专项(201509010)。

收稿日期: 2017-10-27

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

果至关重要。

目前，国内外针对区域气象场模拟以及 CALPUFF 应用等领域的研究主要集中在气象预报、区域大气污染模拟等方面，有关同化方法对 CALPUFF 模拟影响方面的研究较少[7-17]。本研究在调研 2008—2015 年环保部审批的环境影响评价报告书后发现，国内大部分环评单位在开展 CALPUFF 大气污染模拟时，仅采用地面、探空数据作为原始输入气象场。而我国目前的地面气象观测站，特别是高空气象观测站分布较为稀疏，一般建设项目周边能获取的观测数据非常有限，所以数据的代表性受到一定的影响。特别是在一些地形较为复杂的区域，仅采用观测数据难以反映区域的实际气象特征，从而影响大气污染物的预测结果；另一方面，部分项目在研究过程中使用了 WRF 等中尺度气象模拟数据，但未采用四维同化方法对气象场进行空间修正。因此，开展 WRF 同化方法在 CALPUFF 模拟的应用研究，可以弥补当前环评工作中气象资料代表性较差的问题，有利于规范我国空气法规模型标准化应用，还可为大气环境规划、大气环境影响评价、大气环境管理工作提供基础数据支持。

本研究以内蒙古正蓝旗地区为例，结合地面气象数据、土地利用数据、地形数据等，建立 WRF 四维同化系统，利用 CALPUFF 模拟当地电厂对 SO_2 的浓度贡献，并与空气质量实际监测数据进行对比，从而评估 WRF 四维同化系统对 CALPUFF 模拟结果的改善情况。

1 资料与方法

1.1 研究资料概况

研究区域为内蒙古正蓝旗地区，该地区地势平坦，当地夏季主要 SO_2 污染源为上都电厂，其他干扰源较少。本研究收集了 2013 年 8 月上都电厂污染源在线监测数据、12 个空气质量监测点 SO_2 环境浓度数据(图 1)、6 个地面气象站(正蓝旗站、那日图站、五一种畜场站、乌日图站、宝绍岱苏木站、赛音胡都嘎苏木站) 2013 年全年逐时数据(图 2)。

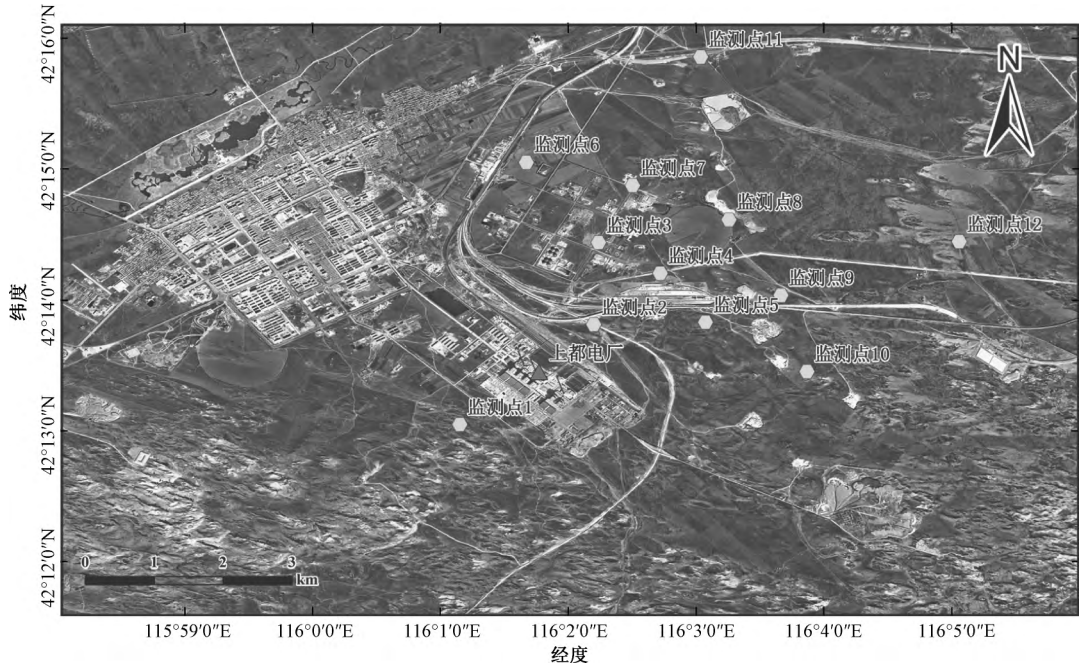


图 1 上都电厂及周围 12 个空气质量监测点分布

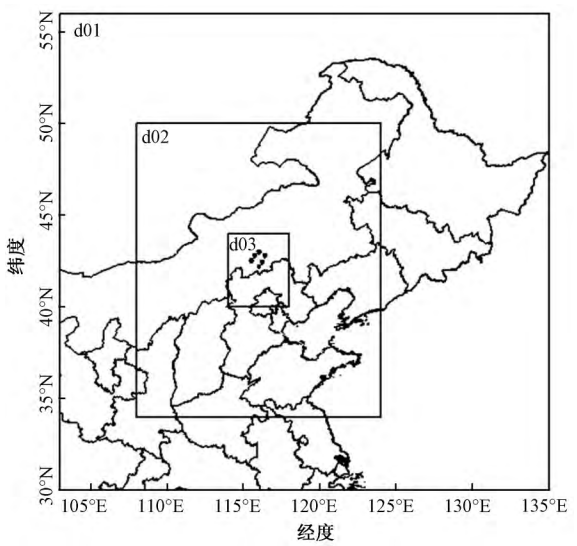
Fig. 1 Distribution of the power plant and air quality monitoring sites

1.2 WRF 四维同化参数设置

本文采用的中尺度气象模型 WRF 是美国国家大气研究中心(NCAR)、美国太平洋西北国家实验室(PNNL)、美国国家海洋及大气管理局(NOAA)等共同发展的新一代中尺度数值模式[18]，该模式输出结果可为 CALPUFF 等空气质量模型提供大气流场。

采用 WRF 版本为 WRFV3.6.1，模拟区域中心位置为 42.23°N，116°E，投影为 Lambert，网格为 3 层双向嵌套(水平分辨率为 36，12，4 km，垂直方向为 26 层)，最内层为正蓝旗地区，时间步长 6 h，微物理方案采用 WSM6[19]，积云对流方案采用 Grell-3[20](表 1)。同化方案以 2013 年全年水平分辨率为 1° × 1° 的

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net



注: 黑色圆点为气象观测站位置。

图 2　WRF 模式三重模拟区域

Fig. 2　Nested domains of WRF

NCEP 全球再分析资料为基础,采用牛顿张弛逼近(nudging)四维同化方法,该方法是在模式预热阶段,在模拟值与观测值的差值之间存在 1 个与其成比例、相协调的强迫项,在模式运行进程中,该项会使模拟值逐步逼近观测值,并使各变量保持动力平衡,拥有计算量和存储空间小等优点[21-25],主要用于长期气象场模拟。

表 1　WRF 模式参数设置

Table 1　Parameter settings of WRF

微物理	长波辐射	短波辐射	陆面过程	积云对流	边界层	近地层
WSM6	RRTM	Dudhia	Noah	Grell-3	ACM2	Monin-Obukhov

为了评估同化方案效果,本研究在确保基本参数相同的前提下,开展了同化以及未同化 2 个对比试验。

1.3　CALPUFF 参数设置

本文选用的 CALPUFF 版本为 6.42。CALMET 气象模块采用的 90 m 分辨率地形高度资料来自美国地质勘探局(USGS),30 m 分辨率土地利用类型数据来自环境保护部环境工程评估中心“环境影响评价基础数据库建设”课题成果[26],中尺度气象场数据来自 WRF 四维同化数据,用于运行 CALMET 模式生成三维逐时气象场。CALMET 模式中垂直方向包含 10 层,顶层高度分别为 20,40,80,160,320,640,1 200,2 000,3 000,4 000 m。水平网格分辨率为 100 m,东西向 100 个格点,南北向 100 个格点。

CALPUFF 扩散模块中输入上都电厂烟囱坐标、烟囱高度、烟囱内径等信息,SO_2 排放参数考虑污染源排放量、温度、流速的小时变化,计算时间步长设置 1 h,完成了 2013 年 8 月 11—25 日上都电厂对周边 12 个空气质量监测点小时浓度贡献模拟。

1.4　模拟效果评估方法

利用统计学方法(相关系数、平均偏差等)对同化及未同化方案模拟气象场效果进行对比分析。由于正蓝旗站地面气象要素(气温、风速、总云量)较完备,使用该站地面常规观测资料对两种方案模拟结果进行检验。

1.4.1　WRF 模拟效果评估

气温、风速、云量等气象要素是空气法规模型的重要输入参数。本研究参考国内外同类工作的评估方法[27-28],针对 2 m 高度气温和 10 m 高度风速等地面气象要素进行检验分析,具体所用统计量公式如下:

$$R = \frac{\sum_{i}^{N}(O_i - \overline{O})(P_i - \overline{P})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{N}(O_i - \overline{O})^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{N}(P_i - \overline{P})^2}} \quad (1)$$

$$\mathrm{MB} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\phi_i \quad (2)$$

$$\mathrm{MAE} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}|\phi_i| \quad (3)$$

$$\mathrm{EMSE} = \left[\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(\phi_i)^2\right]^{1/2} \quad (4)$$

$$\mathrm{IA} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N}(\phi_i)^2}{\sum_{i}^{N}(|P_i - \overline{O}| + |O_i - \overline{O}|)^2} \quad (5)$$

式中: R 为相关系数(反映模拟序列和观测序列之间的线性相关程度); MB 为平均偏差(反映模拟序列和观测序列之间的偏差情况); MAE 为平均绝对误差(反映模拟序列和观测序列之间偏差的实际情况); RMSE 为均方根误差(反映模拟序列和观测序列之间偏差的平均); IA 为模拟值与观测值的吻合指数(反映模拟序列和观测序列之间的趋势吻合程度); P_i、O_i 分别表示第 i 个气象要素模拟值和观测值; $\overline{P}$、$\overline{O}$ 则分别表示全部模拟值和观测值的平均值; N 为时间样本总数; ϕ_i 表示第 i 个模拟值和观测值之间的差值。上述统计量中,MB、MAE、RMSE 越接近于 0,R 和 IA 越接近于 1,则说明模拟效果越好。

1.4.2　CALPUFF 模拟效果评估[29]

本文采用平均百分比偏差(FB)、高端值比值(RHC)等方法验证 CALPUFF 模拟值与实际监测值

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

吻合效果。

FB 计算如下:

$$FB = \frac{2(\overline{C_{mod}} - \overline{C_{obs}})}{C_{mod} + C_{obs}} \quad (6)$$

式中: $\overline{C_{mod}}$ 为 CALPUFF 模拟浓度平均值; $\overline{C_{obs}}$ 为监测浓度平均值。FB 取值越靠近 0,说明 CALPUFF 预测值与实际观测值越接近。

RHC 计算如下:

$$RHC = C(n) + (\overline{C} - C(n)) \ln\left(\frac{3n-1}{2}\right) \quad (7)$$

式中: $C(n)$ 为排序后第 n 个最大浓度值; $\overline{C}$ 为前 $n-1$ 个最大浓度值的平均值。采用 CALPUFF 模拟值与实测值的 RHC 之比(RHC_R) 来反映预测的合理性,n 取值为 11,则 $\overline{C}$ 是前 10 个最大浓度值的平均值。RHC_R 比值越接近 1,表明 CALPUFF 模拟高端值和实际观测值越相符。FB 方法中 $\overline{C_{mod}}$ 和 $\overline{C_{obs}}$ 的取值要求与 RHC 相联系,为前 11 个高端值的平均值。

2 结果分析

2.1 气象要素模拟效果分析

表 2 为正蓝旗站全年地面气象要素实测值与模拟值统计结果。可以看出: 同化方案模拟正蓝旗全年气象要素的相关系数 R、吻合指数 IA 总体较未同化方案接近于 1,平均偏差 MB、平均绝对误差 MAE、均方根误差 RMSE 总体较未同化方案接近于 0,同化方案全年气象要素统计结果总体上优于未同化方案。

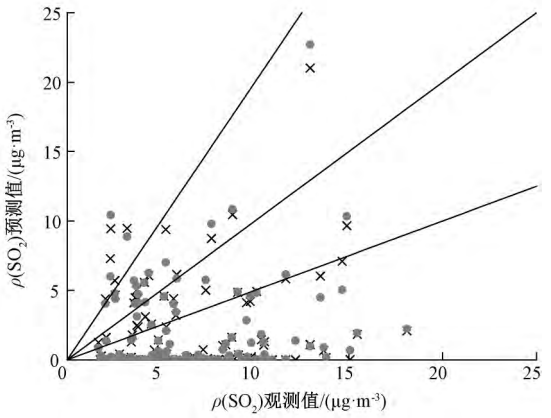
表 2 同化与未同化结果统计指标对比

Table 2 Comparison between assimilated and unassimilated model results

统计参量	总云量		10 m 风速/(m·s^{-1})		2 m 气温/℃	
	同化	未同化	同化	未同化	同化	未同化
R	0.55	0.54	0.57	0.52	0.98	0.98
IA	0.75	0.75	0.72	0.68	0.98	0.98
MB	-0.66	-0.68	0.91	-1.14	-1.16	-1.16
MAE	2.68	2.74	1.64	1.84	2.50	2.52
RMSE	4.14	4.21	2.17	2.48	3.71	3.74
样本数	1 095	1 095	8 734	8 734	8 734	8 734

2.2 污染物模拟效果分析

CALPUFF 模拟 SO_2 污染物同化方案与未同化方案的 FB 值分别为 0.44、0.47,RHC_R 值分别为 1.51、1.63,同化方案的 FB 值和 RHC_R 值更接近 0 和 1。图 3 给出了同化前后 SO_2 模拟日均值与监测值对比情况,总体来看,同化后模拟结果落在 2 倍误差线内的占比相对较多,并且中轴线附近的点多于未同化方案,表明同化方案 SO_2 日均浓度的模拟结果优于未同化方案。



× 未同化方案; • 同化方案。

图 3 同化前后 SO_2 模拟日均值与监测值对比

Fig. 3 Scatter plot of assimilated and unassimilated model result with observation data

3 结论与讨论

本研究建立了牛顿张弛逼近四维同化方法,并将其应用于内蒙古正蓝旗地区气象场模拟中。结合上都电厂在线监测数据、现场监测数据等,开展了 WRF 四维同化方法在 CALPUFF 的应用研究,为我国大气环境影响评价提供了新的技术方法。

内蒙古正蓝旗案例结果表明,四维同化方法可有效提高风速、云量等气象要素模拟的准确性。

CALPUFF 污染物同化方案与未同化方案的 FB 值分别为 0.44、0.47,RHC_R 值分别为 1.51、1.63,同化方案的 FB 值和 RHC_R 值更接近 0 和 1。表明该同化方法的应用,有助于 CALPUFF 模拟效果的改善。

从本次模拟结果来看: WRF 四维同化方法总体改善了正蓝旗地区气象场模拟效果,提高了 CALPUFF 在该地区模拟的准确度。考虑到我国地形及下垫面分类较为复杂,因此下一步需开展 WRF 四维同化方法在全国范围的应用研究,进一步分析不同地形、不同下垫面条件下,四维同化方法对 CALPUFF 模拟效果的影响情况。

参考文献

[1] 王华东,姚应山. 区域环境影响评价有关问题的探讨 [J]. 中国环境科学,1991,11(5):392-395.

[2] 国家环境保护部. HJ2.2—2008 环境影响评价技术导则: 大气环境 [S]. 北京: 中国环境科学出版社,2008.

[3] Scire J S, Strimaitis D G, Yamartino R J. A User's Guide for the CALMET Dispersion Model (Version 5) [M]. Concord, MA: Earth Tech, 2000: 1-79.

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

[4] 伯鑫，丁峰，徐鹤，等. 大气扩散 CALPUFF 模型技术综述[J]. 环境监测管理与技术，2009，21(3)：9-13.

[5] 王颖，隆霄，余晔，等. 复杂地形上气象场对空气质量数值模拟结果影响的研究[J]. 大气科学，2013，37(1)：14-22.

[6] 冯琨，苑魁魁，王锋，等. 空气污染物远程传输对海岛型城市污染的影响[J]. 中国环境科学，2014，34(6)：1410-1419.

[7] 程真，陈长虹，黄成，等. 长三角区域城市间一次污染跨界影响[J]. 环境科学学报，2011，31(4)：686-694.

[8] Yao R，Xu X，Xin C，et al. A tracer experiment study to evaluate the CALPUFF real time application in a near-field complex terrain setting [J]. Atmospheric Environment，2011，45(39)：7525-7532.

[9] Indumati S，Oza R B，Mayya Y S，et al. Dispersion of pollutants over land-water-land interface：Study using CALPUFF model [J]. Atmospheric Environment，2009，43(2)：473-478.

[10] 伯鑫，王刚，温柔，等. 京津冀地区火电企业的大气污染影响[J]. 中国环境科学，2015，35(2)：364-373.

[11] Lee H D，Yoo J W，Kang M K，et al. Evaluation of concentrations and source contribution of PM_{10} and SO_2 emitted from industrial complexes in Ulsan，Korea：Interfacing of the WRF-CALPUFF modeling tools [J]. Atmospheric Pollution Research，2014，5(4)：664-676.

[12] 段旭，王曼，陈新梅，等. 中尺度 WRF 数值模式系统本地化业务试验[J]. 气象，2011，37(1)：39-47.

[13] 文小航，廖小罕，袁文平，等. 中国东北半干旱区能量水分循环的同化模拟[J]. 中国科学：地球科学，2014，44(12)：2768-2784.

[14] 靳璐滨，臧增亮，潘晓滨，等. $PM_{2.5}$和$PM_{2.5\sim10}$资料同化及在南京青奥会期间的应用试验[J]. 中国环境科学，2016，36(2)：331-341.

[15] 韩素芹，冯银厂，边海，等. 天津大气污染物日变化特征的 WRF-Chem 数值模拟[J]. 中国环境科学，2008，28(9)：828-832.

[16] 程兴宏，徐祥德，丁国安，等. MM5/WRF 气象场模拟差异对 CMAQ 空气质量预报效果的影响[J]. 环境科学研究，2009，22(12)：1411-1419.

[17] 杨鹏，朱彬，高晋徽，等. 一次以南京为中心的夏季 $PM_{2.5}$ 污染岛污染事件的数值模拟[J]. 中国环境科学，2016，36(2)：321-330.

[18] 朱格利，林万涛，曹艳华. 用 WRF 模式中不同云微物理参数化方案对华南一次暴雨过程的数值模拟和性能分析[J]. 大气科学，2014，38(3)：513-523.

[19] 林磊. 华北地区积层混合云降水数值模拟和人工增雨概念模型研究[D]. 北京：中国气象科学研究院，2011.

[20] 张龙，张镭，王颖，等. 基于 WRF 不同边界层方案的黄土高原丘陵冬季地面气象要素日变化模拟分析[J]. 干旱气象，2012，30(2)：158-168.

[21] 蒋伊蓉，朱蓉，朱克云，等. 京津冀地区重污染天气过程的污染气象条件数值模拟研究[J]. 环境科学学报，2015，35(9)：2681-2692.

[22] 张飞民，王澄海. 利用 WRF-3DVAR 同化常规观测资料对近地层风速预报的改进试验[J]. 高原气象，2014，33(3)：675-685.

[23] 王延东，周筠珺，王喜阳，等. 闪电资料在中尺度 WRF 模式中同化方法的研究[J]. 热带气象学报，2014，30(2)：281-292.

[24] Chen F，Yang X，Zhu W. WRF simulations of urban heat island under hot-weather synoptic conditions：The case study of Hangzhou City，China [J]. Atmospheric Research，2014，138：364-377.

[25] 伯鑫，王刚，田军，等. AERMOD 模型地表参数标准化集成系统研究[J]. 中国环境科学，2015，35(9)：2570-2575.

[26] 李耀孙，石春娥，杨军，等. 我国东部地区冬季模式边界层探空效果评估[J]. 高原气象，2012，31(6)：1690-1703.

[27] Otte T L. The impact of nudging in the meteorological model for retrospective air quality simulations. Part I：Evaluation against national observation networks [J]. Journal of Applied Meteorology and Climatology，2008，47(7)：1853-1867.

[28] 杨景朝，马振峰，伯鑫，等. 地面气象观测资料在空气法规模型的标准化研究[J]. 中国环境科学，2015，35(10)：2950-2957.

第一作者：杨景朝(1988－)，男，助理工程师，硕士研究生，主要从事环境气象研究工作。1010793055@qq.com

通信作者：伯鑫(1983－)，男，高工，主要研究方向为排放清单以及大气污染模拟。boxinet@gmail.com

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net