

王自发, 庞成明, 朱江, 等. 大气环境数值模拟研究新进展. 大气科学, 2008, 32 (4): 987~995

Wang Zifa, Pang Chengming, Zhu Jiang, et al. IAP Progress in atmospheric environment modeling research. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences* (in Chinese), 2008, 32 (4): 987~995

大气环境数值模拟研究新进展

王自发¹ 庞成明^{1, 2} 朱江¹ 安俊岭¹ 韩志伟¹ 廖宏¹

¹ 中国科学院大气物理研究所大气边界层物理与大气化学国家重点实验室, 北京 100029

² 中国科学院研究生院, 北京 100049

摘要 近五年来, 中国科学院大气物理研究所(简称大气所)在大气环境数值模拟方面取得了丰硕的成果, 通过自主发展和引进, 建立了完备的多尺度、多成分的大气环境数值模式, 包括全球大气化学输送模式、区域和城市空气质量预报模式。大气所利用这些模式研究各种空间尺度上污染物浓度时空分布以及污染物的输送和演变, 研究了多种污染过程的成因和污染变化规律, 在污染物输送、低对流层臭氧高污染、区域及城市污染等方面取得了很多成果, 并对区域或城市空气质量进行业务化实时预报。大气所还拓展了我国大气环境模拟研究的新领域: 大气化学资料同化、污染模式集合预报、污染源反演新方法。初步建立了空气质量模式的资料同化系统(分别基于最优插值技术和集合卡曼滤波技术)和多模式集合预报体系, 提高了模式预报水平; 在污染源反演新方法方面进行了初步的探索。结合我国目前仍然面临着的大气环境问题, 对今后大气环境数值模式的发展方向进行了展望。

关键词 大气环境 数值模拟 空气质量模式

文章编号 1006-9895(2008)04-0987-09

中图分类号 X16

文献标识码 A

IAP Progress in Atmospheric Environment Modeling Research

WANG Zifa¹, PANG Chengming^{1, 2}, ZHU Jiang¹, AN Junling¹,
HAN Zhiwei¹, and LIAO Hong¹

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

² Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049

Abstract This paper provides a comprehensive, critical review of the most important research progress in atmospheric environment modeling research in the Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences (IAP/CAS) during recent five years. Multi-scale, mixed compositions atmospheric environment models have been independently developed or introduced, which include the global atmospheric chemical transport model, the regional and urban air quality model. Distribution, transportation and evolution of pollutants at different spatial scales are explored with these models. Understandings of natural and anthropogenic pollutants' transport, surface high ozone episode, and regional or urban pollution are improved. The real-time forecast model system for air quality is developed and used in a region or cities. It is firstly concerned in China that atmospheric chemical assimilation, chemical transport model ensemble forecast, ensemble estimation method for inverting modeling of pollution emissions. Data assimilation systems for nested air quality prediction model based on the optimal interpolation approach and Ensemble

收稿日期 2008-03-14, 2008-03-17 收修定稿

资助项目 中国科学院重要方向性项目 KZCX2-YW-205

作者简介 王自发, 男, 1972 年出生, 研究员, 研究方向: 大气输送及模式发展。E-mail: zifawang@mail.iap.ac.cn

Kalman Filter (EnKF), respectively, and a multi-model ensemble forecast system are developed, improving the forecast skill. Some new ensemble estimation methods for inverting modeling of pollution emissions are introduced.

A prospect is given about numerical simulation of atmospheric environment.

Key words atmospheric environment, numerical simulation, air quality model

1 引言

日益变暖的全球气候及频繁的极端天气和环境事件已成为人类社会生存发展的重要议题之一,正确评估人类活动对大气系统的扰动是当前科学界面临的难题和热点。国际上已开始对此议题进行广泛的研究,发现大气痕量成分不仅在全球大气变化中扮演重要角色,而且是目前研究不确定性的主要来源之一(IPCC, 2007)。

评估人类活动对大气痕量成分的影响,其关键在于定量了解不同物理化学过程在大气环境中的相对重要性。大气环境数值模式可以通过综合物理、化学和数学等学科的最新进展,再现不同过程在大气中的作用,因此与现场观测、实验室模拟成为当前大气环境研究的主要手段。同时大气环境数值模式还具有全球及区域尺度大气痕量成分的源汇评估、历史过程再现和将来场景预测等其他手段不具备的优点,受到了大气环境研究领域的格外重视,也得到了广泛的发展。

为了提高科学研究水平和满足国家需求,中国科学院大气物理研究所(简称大气所)与国内外紧密协作,针对全球大气环境,特别是我国自主开发及引进了一系列不同尺度的化学输送模式(包括全球大气化学输送模式、多尺度区域及城市空气质量预报模式、酸雨数值模拟和沙尘预报模式),对我国人为活动的影响进行了科学的评估,也为我国的大气污染控制政策提供了必要的支持。胡平等^[1]对于大气所大气环境方面的科研工作作了系统的回顾,本文主要对大气所近五年来大气环境数值模拟工作进行总结,并对未来的发展方向提出建议。

2 空气质量多尺度数值模式系统

近五年来,在自主研制和改进国外先进模式的基础上,大气所从过去以区域模式为主发展到目前初步建立全球-区域-城市等多尺度的大气环境模拟系统,其研究物种从单一成分发展到多成分的同时模拟,研究手段从单一模式发展到多模式集合同

化。利用该模拟系统,大气所对各种尺度污染物浓度时空变化以及污染物的输送、演变规律进行了系统的研究,同时也积极开展区域和城市空气质量的预报研究。

2.1 多种模式体系的建立

大气所研制全球模式历经二维到三维的发展历程。大气所建立了一个全球二维纬向平均化学模式^[2],模式包括 34 种大气成分和 104 个化学反应,其结果与观测结果具有较好的一致性。为了更好地描述大气痕量成分的分布结构,揭示其输送机制和通道,大气所近年来自主建立三维全球环境大气输送模式(Global Environmental Atmospheric Transport Model, 简称 GEATM)^[3],其水平分辨率为 $1^\circ \times 1^\circ$,垂直方向 20 层,采用地形追随坐标系,考虑了地面源排放、平流与扩散、化学转化以及干沉降、湿清除等过程。罗淦等^[3]利用 GEATM 模式对 2004 年全球污染物进行长期模拟,分析二氧化硫、硫酸盐、黑碳、沙尘气溶胶的浓度分布和输送态势,并与观测进行了比较,在中国和欧洲,二氧化硫日平均浓度模拟和观测的相关系数较高;模拟的沙尘气溶胶总体柱浓度分布状况与卫星观测输出的气溶胶光学厚度具有很好的一致性,体现了气溶胶粒子的输送态势和分布特征,这些都表明该模式对于大气化学成分分布状况具有较强的模拟能力。在自主研发的基础上,大气所还引进国外先进全球环境模式 MOZART^[4~6]和 GEOS-CHEM^[7],并对其在东亚的模拟能力进行系统的评估。全球模式在大气所的建立,不仅可以为区域模式提供边界条件,同时也可以为评估欧洲地区的污染排放物对亚洲的输送影响提供支持。

近年来,我国大气环境呈复合型 and 区域型的污染趋势,发展多成分同时模拟的区域和城市大气环境模式成为研究的热点。大气所在过去单一物种的区域模式(例如硫输送模式)基础上,成功研制多成分大气环境数值模式,包括嵌套网格空气质量预报模式系统(NAQPMS, Nested Air Quality Prediction Modeling System)^[8]。该模式可以同时用于

研究不同尺度(区域、城市)、不同成分的污染问题,并可利用系统中的单向和双向嵌套功能研究和探讨不同尺度污染间的相互作用,被广泛应用在区域臭氧和气溶胶污染以及污染物长距离输送等方面。Han 等^[9]研制了区域尺度欧拉型模式 TCTM (Tropospheric Chemical Transport Model), 模式包含主要的物理、化学和生态过程,如平流、扩散、化学反应、云和降水、干沉积、源排放等,被应用于生态源排放对臭氧和过氧乙酰硝酸脂的影响等研究。RAQM (Regional Air Quality Model) 是一个三维区域空气质量欧拉模式^[10],能够模拟多种大气污染物的输送和演变。在火山爆发对 SO_2 和 SO_4^{2-} 影响的研究中,RAQM 展示了较好的能力。为了吸收国外研究结果,大气所引进美国国家环保署(EPA)的区域多尺度空气质量模型 Models-3/CMAQ,并对其进行改进,使之适合中国及周边地区的情况,建立了一个多尺度空气质量模式系统 RAMS-CMAQ^[11~23]。

2.2 基于模式系统的科研应用

基于全球-区域-城市多尺度多物种模式系统,大气所对东亚,特别是我国,酸沉降进行了广泛的演究。利用 RAQM 模式,An 等^[13]发现火山排放使得临近地区下风方边界层 SO_2 和 SO_4^{2-} 浓度分别增加了 300% 和 150%,总硫沉降每月也增加 300%。Han 等^[10]的研究证实东亚冬季酸雨依然分布广泛($\text{pH} < 4.5$,中国西南部、长江三角洲部分地区、黄海和朝鲜平原),中国大部分地区仍然是硫酸型酸雨,但中国东部和西太平洋边缘区为硝酸/硫酸混合型酸雨。利用 RAMS-CMAQ, Zhang 等^[20]对 2001 年春季东亚地区含硫物的产生和输送过程进行模拟, SO_2 和 SO_4^{2-} 浓度具有显著的时空变化,由于化学转化和输送过程相互影响, SO_2 和 SO_4^{2-} 的变化形式不同。模拟研究 ANO_3 气溶胶时空分布的季节特征,结果表明边界层内硝酸盐气溶胶的浓度具有明显的季节性差异,通常冬、春和秋季硝酸盐浓度高,而夏季浓度低,这种季节变化在中国和日本最强,并且受降水和温度变化的影响很大^[22]。

多尺度多物种模拟系统也被用于我国区域和城市尺度光化学污染的研究。Wang 等^[24]利用 NAQPMS 模式系统对 2004 年 5 月 23~24 日发生于中国东部地区的一次高臭氧事件进行模拟研究,

并利用泰山和黄山的观测数据进行验证。结果发现,模式系统成功地模拟出了这次事件。利用敏感性试验发现,来自长江三角洲的污染物的水平输送对这次高臭氧事件起到十分重要的作用,对泰山和黄山的贡献率达到了 20%~50%。Li 等^[25]利用 NAQPMS 模式模拟并结合观测,研究东亚对流层臭氧的季节变化,模式能很好地再现中国高山站臭氧有两个峰值(5~7 月和 9~10 月)的规律,并给出光化学产生率和输送在不同高山站臭氧的贡献,6 月泰山和华山的高臭氧都是受光化学产生率控制,而黄山高臭氧受光化学产生率和输送的控制。利用 NAQPMS 模式模拟分析台湾西南部高浓度臭氧事件的形成,分析了不同地区对高臭氧事件的贡献^[26]。Zhang 等^[12]研究 2001 年 3 月 17~24 日 CO 、 O_3 、 SO_4^{2-} 向西太平洋的输送,模拟表明在源区边界层内,超过 50% CO 以及将近 40% O_3 来自生物质燃烧,而在西太平洋低自由大气(2~6 km)中,生物质燃烧对 CO 和 O_3 的最大贡献也分别达到了 40% 和 30%。Han 等^[9]利用 2001 年 8 月中国东部的高臭氧事件检验 TCTM 模式对臭氧模拟的能力,并通过敏感性试验得出 NO_x 和 VOC 对臭氧产生过程不同的促进能力。

多尺度多物种模拟系统被用于气溶胶的模拟研究。Han^[27]采用 RAQM 模式成功再现了东亚地区亚洲流出中污染物的化学输送,利用输送过程解释了下风向西太平洋观测点污染物浓度的变化。Streets 等^[28]利用 CMAQ 模拟研究北京夏季细粒子和臭氧的外来贡献率,发现外来源对北京 $\text{PM}_{2.5}$ 的贡献达到 34%。东亚地区 2001 年春季硫酸盐、硝酸盐和铵盐气溶胶的模拟结果显示,东亚地区的人类活动不仅使源区气溶胶浓度显著增加,而且使近海无源广大海域的污染加重^[17]。Zhao 等^[29]利用 NAQPMS 模式,结合沙尘气溶胶的观测资料对 2002 年 3 月 20 日北京特大沙尘暴中两个 TSP 峰值进行分析,成功模拟了两次峰值期间的沙尘与北京局地的人为污染物发生的不同混合现象,第一个峰值期间,高空输送的沙尘到达北京并沉降,在近地表与人为污染物发生混合,而第二个峰值期间,低空沙尘气团到达北京,稀释了人为污染物,沙尘与人为污染物发生混合。

3 空气质量预报新技术

大气环境数值模式不仅能用于污染机制等科学

问题的研究,还必须能应用于空气质量预报等实际的业务工作,实际应用才是数值模式发展的最终目的。大气所通过发展集合预报和化学资料同化等新手段,提高预报准确度,在空气预报进行初步的探索。

3.1 污染模式集合预报

集合预报是提高预报水平的一个有效手段。以多个空气质量模式为基础,建立集合预报模式系统,通过对多个模式结果的集合,能够有效地提高空气质量预报的准确度。大气所负责“十一五”863计划重大项目“重点城市群大气复合污染综合防治技术与集成示范”的“区域大气复合污染的模拟、预测技术及应用”课题中集合预报技术和资料同化技术研发工作。此课题将以珠江三角洲城市群区域大气复合污染示范平台建设为核心研究目标,重点突破大气化学资料的同化技术、大气污染数值模拟共性技术以及区域复合污染集成预报技术等关键技术问题,研发区域空气质量研究的新方法与新手段,建立多尺度、多污染物的区域综合空气质量集成预报模式系统。通过充分的模型验证和各种模型比较,建立科学家、管理者和公众认可的具有约

束力的空气质量模拟系统和预报规范,实现区域空气质量的实时预测预报,为实施城市群大气复合污染调控提供技术支持。

大气所 Wang 等^[30]首次在污染物沉降模拟中应用了多模式权重平均集合技术,硫酸盐、硝酸盐和铵盐湿沉降多模式的集合结果与 EANET 中 37 个站点的观测存在显著的相关性,效果好于任何单个模式(图 1)。

围绕奥运空气质量预报需求,研发了多种集成预报技术手段,建立以双向嵌套模式 NAQPMS、国际著名的 MODEL3/CMAQ 模式、CAMx 模式为基础的空气质量多模式集成预报系统,实现了从东亚、华北、京津冀、北京全域的空气质量实时数值预报,以提高空气质量预报准确率,为北京绿色奥运服务。图 2 为初步建立的 NAQPMS-CMAQ-CAMx 空气质量集合预报系统的预报结果,初步实施多模式集合预报,可用于北京奥运空气质量的预报服务。与空气污染指数对比发现,集合预报从总体上改善了污染预报的准确度。

3.2 大气化学资料同化

大气化学资料同化方法研究始于 20 世纪 90 年

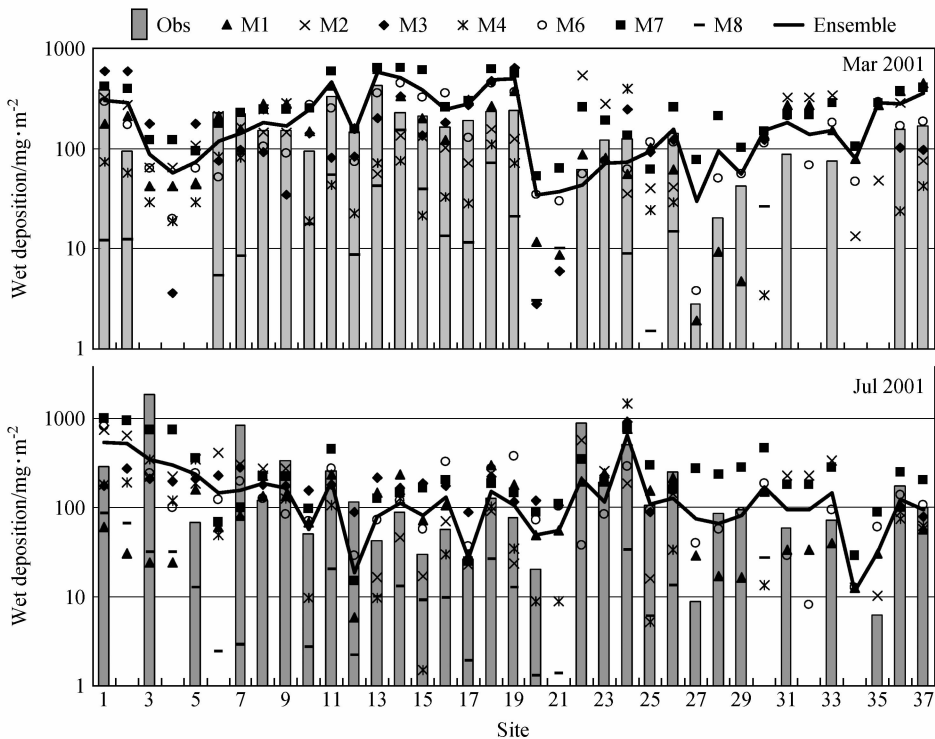


图 1 东亚地区硫酸盐湿沉降 8 个模式模拟结果、集合结果与观测值的对比(改自文献[30])。M1~M8 为 8 个模式结果

Fig. 1 Comparison among wet deposition of sulfate forecasted by eight single models, multi-model ensemble mean, and observation over East Asia (revised from reference [30]). M1 - M8: results of eight models

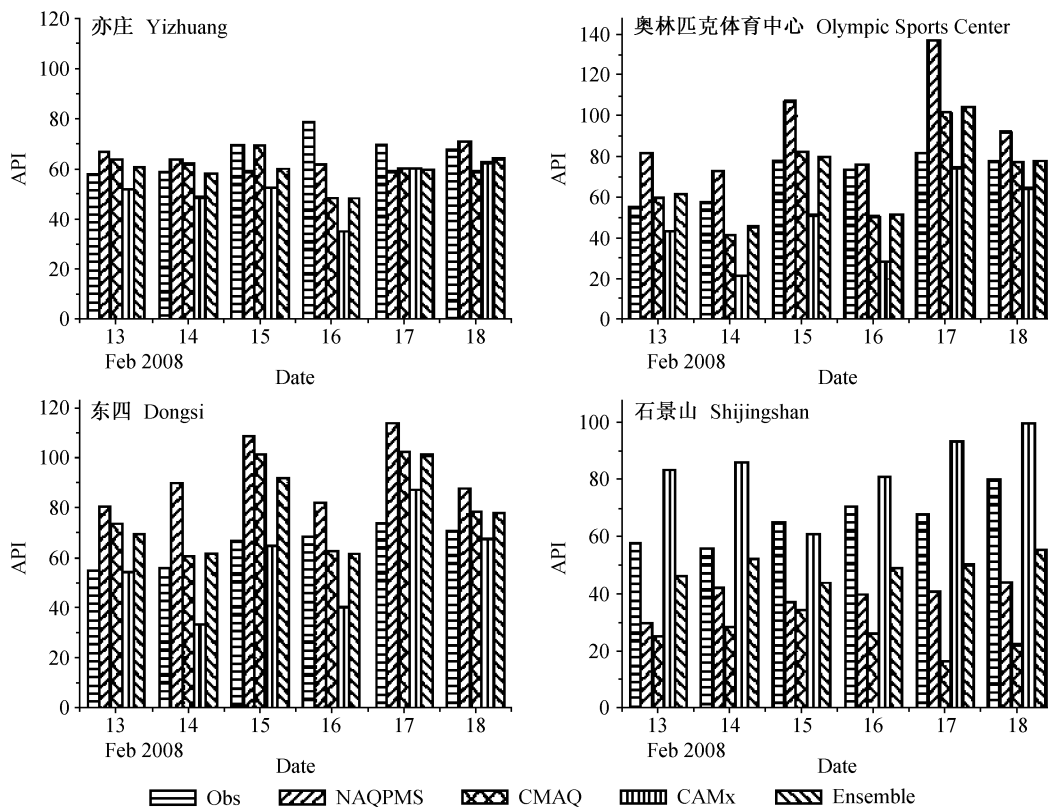


图 2 北京市集合预报系统 (NAQPMS-CMAQ-CMAx) 预报、单模式预报站点空气污染指数 (API) 和观测计算 API 对比
Fig. 2 Comparison among Air Pollution Indexes (APIs) predicted by NAQPMS, CMAQ, CAMx single models and the multi-model ensemble forecast system, and calculated from observation in Beijing

代，建立大气化学模式的资料同化系统，同化观测信息，最优化模式预报结果是大气化学模式发展的一个重要方向。目前，国际上开展大气化学资料同化研究的主要有美国、德国、荷兰、法国和欧洲中期天气预报中心等国家和组织，国际流行的同化方法主要是四维变分同化 (4DVAR) 和集合卡尔曼滤波 (EnKF)，而国内在大气化学资料同化方面还研究较少，只有大气所进行了这方面的初步研究。

大气所发展了基于最优插值技术的同化系统^[31]，并初步应用到上海。利用最优插值方法对 PM₁₀、SO₂ 和 NO₂ 进行连续 20 天的同化试验结果表明，同化偏差的平均值均小于 20 μg/m³，比未同化偏差平均值至少减少了 50%。采用此法利用上海市常规观测站观测数据对臭氧进行逐时同化，同化后的分析场作为下个时刻模式积分的初始场向前预报。取两个未经同化的独立观测站点的观测数据作检验，结果表明同化后的分析场比同化前更接近实际观测，观测数据能有效地修正模式预报结果，

从而为模式提供与实际更加接近的初始场。Lin 等^[32]为 NAQPMS 模式的早期版本——区域沙尘输送模式发展了一个集合卡尔曼滤波 (EnKF) 资料同化系统，利用 EnKF 方法同化地表沙尘浓度观测资料，改进模式的初始场，提高了预报水平 (图 3)。此外，还指出在沙尘等污染物输送模式的同化过程中订正模式误差的重要性。Lin 等^[33]将模式不确定性考虑到 EnKF 同化系统中并订正模式的主要偏差，同化系统更进一步提高了沙尘的预报水平。

3.3 污染源反演新方法

污染物排放源的准确度是影响空气质量模拟和预报准确率的关键因子。由于大气污染物的排放源种类繁多，涉及多个行业、多个领域，如工业排放、农业活动排放、人类生活排放、生态系统排放等，要想调查得到一个完全、准确的排放源清单非常困难，而污染源反演方法可以根据反演有效地提高排放源的准确性。大气所以对污染源反演新方法进行了

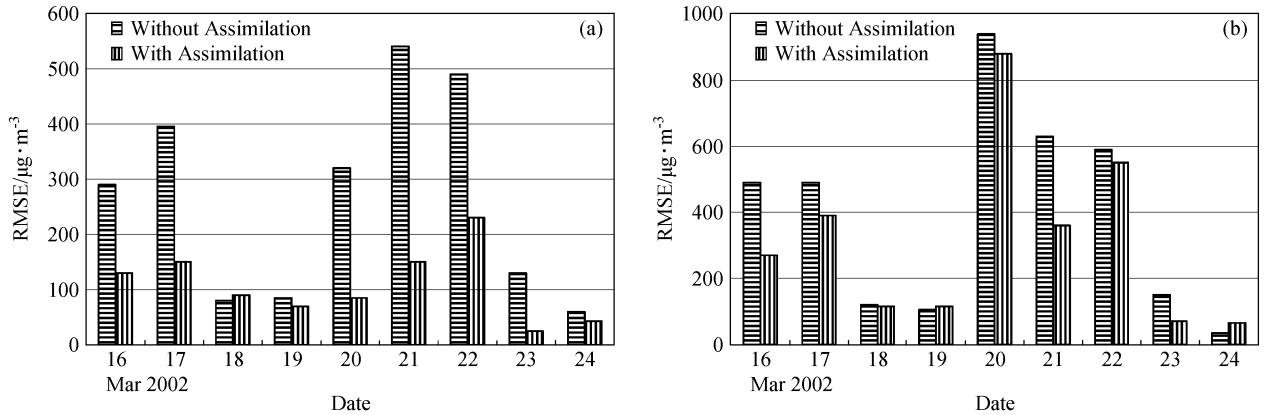


图3 同化前后模式预报和观测值的均方根误差对比: (a)初始场; (b)预报场(改自文献[32])

Fig. 3 Comparison of RMS (the root mean square) error between observed and predicted concentrations without assimilation and with EnKF assimilation analysis (revised from reference [32]): (a) Initial field; (b) forecast field

探索。

朱江等^[34]将资料同化中的集合平滑、集合卡尔曼平滑(EnKS)和集合卡尔曼滤波(EnKF)应用在污染源反演问题中。试验结果表明在观测间隔小和观测误差小的情况下,集合卡尔曼滤波和集合卡尔曼平滑都可以有效地反演出随时间变化的污染源排放。当观测误差增大时,集合卡尔曼滤波和集合卡尔曼平滑的反演效果都有一定降低,但是反演误差的增加少于观测误差的增加。当观测时间间隔较大时,EnKF仅能对有观测时的污染源排放进行较好的反演,而EnKS依然可以较好地反演出污染源排放。

3.4 空气质量预报的业务应用

NAQPMS作为大气所具有自主知识产权的空气质量模式系统,从区域到城市尺度的双向嵌套模拟能力,并行化模块设计,使其在环保局业务部门中得到了广泛的认可,国内多家单位将其投入到业务运行中。目前,已有北京、上海、深圳、郑州、沈阳、台湾等地区的环保部门利用该模式进行业务预报。徐文帅^[35]对预报效果进行了对比分析,结果表明该系统长时间运行稳定,模式结果与观测值吻合较好。

2006年NAQPMS模式被选中参加为保障北京2008年奥运会而设立的“北京与周边地区大气污染物输送、转化及北京市空气质量目标研究”项目,在该项目中负责研究周边地区大气污染物排放对北京的影响,提出北京周边污染控制的重点地区和重点污染源,并分析预计出台的各类空气质量保

障措施的控制效果;为北京市和北京周边地区制订合理的奥运空气质量保障方案提供科学依据。

2007年,NAQPMS、CMAQ和CAMx共同组成北京市环保局的“北京奥运会空气质量集合预报系统”。NAQPMS将在奥运会期间作为唯一由我国自主研发的模式系统参与奥运会的空气质量保障任务。目前该集合预报系统已经完成了安装调试工作,初步实施了多模式集合预报。

4 国际模式比较计划

大气所在空气质量模式方面取得了很大的成绩,但模式不确定性依然存在,不同模式采用的物理、化学过程和参数化方案不尽相同,数值算法也各异,使得在模拟同一事件时模拟结果也会有区别。为了比较不同模式各个模块的优劣,吸收其他模式的经验,更好地发展适用于我国和东亚地区的模式系统,大气所积极地发起或参与了一些国际大气化学模式比较计划。

大气所与日本九州大学共同发起沙尘模式比较计划(DMIP),把应用于东亚地区的约12个沙尘模式中的数学处理及其物理、化学等过程进行综合比较,以期发展出更好的沙尘数值预报系统。参加比较的沙尘模式来自不同的国家和地区,对相同的典型沙尘暴个例进行模拟,系统地比较各类模式系统的框架构成,评估各个模式对沙尘发生、输送和沉降过程的模拟性能,并分析模拟结果存在差异的可能原因。研究表明,参加比较的模式使用不同的沙尘排放方案、水平和垂直分辨率、数值方法

和气象模式, 这造成了模拟结果的巨大差异。在对 2002 年春季的两个强沙尘暴过程的模拟结果中, 每个模式模拟的最大浓度值会相差 2~4 倍之多, 而模拟的沙尘排放通量和主要源区也有很大的差异, 这说明每个模式对于沙尘源区的认识还有着很大的不确定性。在北京和长崎两个点的模拟所得的沙尘垂直浓度分布也有着明显的差异。这些结果表明目前对于东亚地区沙尘暴的发生、输送和清除过程的模拟有较大的不确定性, 还需要进一步改进东亚地区的沙尘模式^[36]。

大气所和 IIASA (奥地利)、ADORC (日本)、CGRER (美国) 等单位联合发起第二期东亚大气化学输送模式比较计划 (MICS-Asia II) 以进行东亚污染物输送模式的比较, 该计划主要致力于东亚地区含硫物、含氮物、臭氧和气溶胶的输送和沉降的比较^[37]。东亚酸沉降观测网 (EANET) 资料用来验证模式的效果。在这项计划中, 8 个酸雨输送和沉降模式提交了时段为 2001 年 3 月、7 月、12 月和 2002 年 3 月的模拟结果。Han 等^[38]通过对 MICS-Asia II 中 8 个区域化学输送模式相互比较以及与大量观测资料的对比, 评估模式对臭氧和相关物种的模拟能力以及不同模式之间性能的区别和相似, 结果表明所有模式对 SO₂ 都有很好的模拟能力, 对 O₃ 的模拟能力则随区域和季节有很大区别, 对 NO_x 的模拟能力较差, 几乎所有模式都趋向于低估 NO_x。在模拟区域的南部 (中国南部和一些东南亚国家的北部) 各模式之间差别最大。Wang 等^[30]集中比较了 MICS-Asia II 中 8 个模式的化学沉降和 EANET 观测, 发现各个模式能总体再现硫酸盐、硝酸盐和铵盐湿沉降的分布特征, 但绝对值和观测值有差距, 并且各模式结果间也存在较大区别, 这主要是各模式之间化学过程、沉降参数化以及模拟的降水不同造成的。

5 结论和展望

中国科学院大气物理研究所近五年来在大气环境数值模拟方面取得丰硕的成果, 在前期研究的基础上, 通过自主发展和引进, 建立了完备的多尺度、多成分大气环境数值模式, 包括全球大气化学输送模式、区域和城市空气质量预报模式。大气所利用这些模式研究各种空间尺度上污染物空间分布和时间变化, 研究污染物的输送和演变、多种污染

过程的成因和污染变化规律, 在污染物 (沙尘、人为排放) 输送、低对流层臭氧高污染、区域及城市污染等方面取得了很多成果, 并对区域或城市空气质量进行业务化实时预报。大气所还拓展了我国大气环境模拟研究的新领域: 大气化学资料同化、污染模式集合预报、污染源反演新方法等, 初步建立了空气质量模式的资料同化系统 (分别基于最优插值技术和集合卡曼滤波技术) 和多模式结合预报体系, 提高了模式预报水平, 在污染源反演新方法方面进行了初步的探索。

我国目前仍然面临着大气环境问题的挑战, 如部分城市大气环境污染加剧, 温室气体和气溶胶颗粒物排放居高不下, 城市污染从煤烟型向城市群区域复合污染转变, 污染治理和污染调控更加困难, 区域大气污染的全球输送也造成了我国在环境外交问题上的压力。此类挑战促使我们必须进一步发展大气环境数值模式, 首先, 要建立全球-区域-城市各尺度之间双向嵌套的大气环境模式系统, 从而能够研究各种空间尺度的各类大气污染 (沙尘暴、光化学污染、区域复合污染、城市悬浮颗粒物、酸雨等) 的变化规律以及各种尺度之间的相互作用, 并能实现全球、区域、城市的化学天气预报; 其次, 要深入研究大气化学四维资料同化技术和多模式集合预报技术, 国际模式比较计划表明目前还没有模式能完全模拟所有大气物理、化学过程, 各种模式对不同地域、不同天气过程、不同污染过程的预报效果都有所不同, 资料同化和多模式集合预报技术是提高模式预报水平的有效手段; 此外, 污染物排放源的不确定对空气质量预报具有很大的影响, 利用资料同化技术和集合卡尔曼滤波技术对污染源进行反演也是大气环境模式发展的一个重要方向; 最后, 气溶胶混合过程显著地改变气溶胶的性质, 从而造成气溶胶气候效应评估的极大不确定性, 今后必须在大气环境模式中详细加入气溶胶微物理过程、非均相反应过程等对气溶胶混合的影响, 模拟气溶胶混合比的区域特征, 才能准确地模拟气溶胶的真正状态, 有利于提高大气成分变化的环境气候效应的评估。

参考文献 (References)

- [1] 胡非, 洪钟祥, 雷孝恩. 大气边界层和大气环境研究进展. 大气科学, 2003, 27 (4): 712~728

- Hu Fei, Hong Zhongxiang, Lei Xiaoen. Recent progress of atmospheric boundary layer physics and atmospheric environment research in IAP. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences* (in Chinese), 2003, **27** (4): 712~728
- [2] 张仁健, 王明星, 曾庆存. 全球二维大气化学模式和大气化学成分数值模拟. *气候与环境研究*, 2002, **7** (1): 30~41
Zhang Renjian, Wang Mingxing, Zeng Qingcun. Global two-dimensional chemistry model and simulation of atmospheric chemical composition. *Climatic and Environmental Research* (in Chinese), 2002, **7** (1): 30~41
- [3] 罗滢, 王自发. 全球环境大气输送模式(GEATM)的建立及其验证. *大气科学*, 2006, **30** (3): 504~518
Luo Gan, Wang Zifa. A global environmental atmospheric transport model (GEATM): Model description and validation. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences* (in Chinese), 2006, **30** (3): 504~518
- [4] 葛萃, 蔡菊珍, 张美根. 东亚地区对流层 O₃ 和 CO 模拟. *中国科学院研究生院学报*. 2007, **24** (5): 549~555
Ge Cui, Cai Juzhen, Zhang Meigen. Numerical study of tropospheric ozone and carbon monoxide in East Asia. *Journal of the Graduate School of the Chinese Academy of Sciences* (in Chinese), 2007, **24** (5): 549~555
- [5] 刘茜霞, 王斌, 张美根. MOZART-2 对欧洲地区对流层臭氧的模拟研究. *中国科学院研究生院学报*, 2006, **23** (2): 221~230
Liu Qianxia, Wang Bin, Zhang Meigen. A simulation study of tropospheric ozone over Europe with MOZART-2. *Journal of the Graduate School of the Chinese Academy of Sciences* (in Chinese), 2006, **23** (2): 221~230
- [6] Liu Q, Zhang M, Wang B. Simulation of Tropospheric Ozone with MOZART-2: An evaluation study over East Asia. *Advances in Atmospheric Sciences*, 2005, **22** (4): 585~594
- [7] Liao H, Henze D K, Seinfeld J H, et al. Biogenic secondary organic aerosol over the United States: Comparison of climatological simulations with observations. *J. Geophys. Res.*, 2007, **112**, D06201, doi: 10.1029/2006JD007813
- [8] Wang Z F, Maeda T, Hayashi M, et al. A nested air quality prediction modeling system for urban and regional scales: Application for high-ozone episode in Taiwan. *Water, Air, and Soil Pollution*, 2001, **130**: 391~396
- [9] Han Z, Ueda H, Matsuda K. Model study of the impact of biogenic emission on regional ozone and the effectiveness of emission reduction scenarios over eastern China. *Tellus* (B), 2005, **57** (1): 12~27
- [10] Han Z, Ueda H, Sakurai T. Model study on acidifying wet deposition in East Asia during wintertime. *Atmospheric Environment*, 2006, **40** (13): 2360~2373
- [11] 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 distribution of sulfate, nitrate and ammonium aerosols over East Asia during the TRACE-P campaign. *Plateau Meteorology* (in Chinese), 2003, **22** (1): 1~6
- [12] Zhang M, Uno I, Carmichael G R, et al. Large-scale structure of trace gas and aerosol distributions over the western Pacific Ocean during the Transport and Chemical Evolution Over the Pacific (TRACE-P) experiment. *J. Geophys. Res.*, 2003, **108**: 8820, doi: 10.1029/2002JD002946
- [13] An J, Ueda H, Matsuda K, et al. Simulated impacts of SO₂ emissions from the Miyake volcano on concentration and deposition of sulfur oxides in September and October of 2000. *Atmospheric Environment*, 2003, **37** (22): 3039~3046
- [14] Zhang M, Uno I, Yoshida Y, et al. Transport and transformation of sulfur compounds over East Asia during the TRACE-P and ACE-Asia campaigns. *Atmospheric Environment*, 2004, **38** (40): 6947~6959
- [15] Zhang M, Xu Y, Uno I, et al. A numerical study of tropospheric ozone in the springtime in East Asia. *Advances in Atmospheric Sciences*, 2004, **21** (2): 163~170
- [16] 张美根, 徐永福, Uno Itsushi, 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 Itsushi, et al. A study of sulfur transport and transformation over East Asia in the springtime. I. Model system and its verification. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences* (in Chinese), 2004, **28** (3): 321~329
- [17] 张美根. 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. *大气科学*, 2005, **29** (5): 805~813
Zhang Meigen. A multi-scale air quality modeling system and its evaluation. I. Introduction to the model system and simulation of meteorological parameters. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences* (in Chinese), 2005, **29** (5): 805~813
- [18] 张美根. 多尺度空气质量模式系统及其验证 II. 东亚地区对流层臭氧及其前体物模拟. *大气科学*. 2005, **29** (6): 926~936
Zhang Meigen. A multi-scale air quality modeling system and its evaluation. II. Simulation of tropospheric ozone and its precursors in East Asia. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences* (in Chinese), 2005, **29** (6): 926~936
- [19] Zhang M, Uno I, Zhang R, et al. Evaluation of the Models-3 Community Multi-scale Air Quality (CMAQ) modeling system with observations obtained during the TRACE-P experiment: Comparison of ozone and its related species. *Atmospheric Environment*, 2006, **40** (26): 4874~4882
- [20] Zhang M, Pu Y, Zhang R, et al. Simulation of sulfur transport and transformation in East Asia with a comprehensive chemical transport model. *Environmental Modelling & Software*, 2006, **21** (6): 812~820
- [21] Zhang M, Akimoto H, Uno I. A three-dimensional simula-

- tion of HO_x concentrations over East Asia during TRACE-P. *Journal of Atmospheric Chemistry*, 2006, **54** (3): 233~254
- [22] Zhang M, Han Z, Zhu L. Simulation of atmospheric aerosols in East Asia using modeling system RAMS-CMAQ: Model evaluation. *China Particuology*, 2007, **5** (5): 321~327
- [23] Zhang M, Gao L, Ge C, et al. Simulation of nitrate aerosol concentrations over East Asia with the model system RAMS-CMAQ. *Tellus (B)*, 2007, **59** (3): 372~380
- [24] Wang Z, Li J, Wang X, et al. Modeling of regional high ozone episode observed at two mountain sites (Mt. Tai and Huang) in East China. *Journal of Atmospheric Chemistry*, 2006, **55** (3): 253~272
- [25] Li J, Wang Z, Akimoto H, et al. Modeling study of ozone seasonal cycle in lower troposphere over East Asia. *J. Geophys. Res.*, 2007, **112** (D22S25), doi: 10.1029/2006JD008209
- [26] Lin C Y, Wang Z, Chou C C K, et al. A numerical study of an autumn high ozone episode over southwestern Taiwan. *Atmospheric Environment*, 2007, **41** (17): 3684~3701
- [27] Han Z. A regional air quality model: Evaluation and simulation of O₃ and relevant gaseous species in East Asia during spring 2001. *Environmental Modelling & Software*, 2007, **22** (9): 1328~1336
- [28] Streets D G, Fu J S, Jang C J, et al. Air quality during the 2008 Beijing Olympic Games. *Atmospheric Environment*, 2007, **41** (3): 480~492
- [29] Zhao X, Wang Z, Zhuang G, et al. Model study on the transport and mixing of dust aerosols and pollutants during an Asian dust storm in March 2002. *Terr. Atmos. Ocean. Sci.*, 2007, **18** (3): 437~457
- [30] Wang Z, Xie F, Sakurai T, et al. MICS-Asia II: Model inter-comparison and evaluation of acid deposition. *Atmospheric Environment*, 2008, doi: 10.1016/j.atmosenv.2007.12.071
- [31] 崔应杰, 王自发, 朱江, 等. 空气质量数值模式预报中资料同化的初步研究. *气候与环境研究*. 2006, **11** (5): 616~626
- Cui Yingjie, Wang Zifa, Zhu Jiang, et al. A preliminary study on data assimilation for numerical air quality model prediction. *Climatic and Environmental Research* (in Chinese), 2006, **11** (5): 616~626
- [32] Lin C, Wang Z, Zhu J. A data assimilation method of the ensemble Kalman filter for use in severe dust storm forecasts over China. *Atmos. Chem. Phys. Discuss*, 2007, **7** (6): 17511~17536
- [33] Lin C Y, Zhu J, Wang Z F. Model bias correction for dust storm forecast using ensemble Kalman filter. *J. Geophys. Res.*, 2008, in press
- [34] 朱江, 汪萍. 集合卡尔曼平滑和集合卡尔曼滤波在污染源反演中的应用. *大气科学*, 2006, **30** (5): 871~882
Zhu Jiang, Wang Ping. Ensemble Kalman smoother and ensemble Kalman filter approaches to the joint air quality state and emission estimation problem. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences* (in Chinese), 2006, **30** (5): 871~882
- [35] 徐文帅. 上海市空气质量状况及重空气污染事件数值模拟研究. 中山大学大气科学系硕士学位论文. 2005
Xu Wenshuai. Research on the status of air quality and numerical simulation study on the air pollution episodes in Shanghai. M. S. thesis (in Chinese). Department of Atmosphere Science, Sun Yat-Sen University, 2005
- [36] Uno I, Wang Z, Chiba M, et al. Dust model intercomparison (DMIP) study over Asia: Overview. *J. Geophys. Res.*, 2006, **111**: D12213, doi: 10.1029/2005JD006575
- [37] 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. *Atmospheric Environment*, 2007, doi: 10.1016/j.atmosenv.2007.04.007
- [38] Han Z, Sakurai T, Uedab H, et al. MICS-Asia II: Model intercomparison and evaluation of ozone and relevant species. *Atmospheric Environment*, 2007, doi: 10.1016/j.atmosenv.2007.07.031