

Simulation Study on Air Quality Emission Reduction in the 7th China International Import Expo

Xiaoyi Zhang

Shanghai Diting Information Technology Co.Ltd., Shanghai, 200333, China

Abstract

In order to ensure stable air quality during the China International Import Expo, the WRF-CMAQ numerical model is constructed on supercomputing servers and operated operationally, and adopts high-resolution grids and the SAPRC07 chemical mechanism to dynamically simulate the air quality forecasts for the next five days during the Fair period. We compare the baseline scenario, the agreed emission reduction scenario and the measured data from ground-level air quality stations in a refined way, and use statistical index validation combined with model uncertainty analysis to systematically evaluate the improvement of environmental factors brought by the actual emission reduction measures. In this paper, a variety of statistical indexes, such as mean deviation and root mean square error, are used to comprehensively verify the model performance and ensure the reliability and accuracy of the simulation results.

Keywords

numerical modeling; protocol emission reduction scenarios; Expo safeguard

第七届中国国际进口博览会空气质量减排模拟研究

张小意

上海地听信息科技有限公司, 中国 · 上海 200333

摘 要

为保障上海市进博会期间的空气质量稳定达标,在超算服务器上搭建WRF-CMAQ数值模型并业务化运行,采用高分辨率网格和SAPRC07化学机制,动态模拟进博会保障期间未来五天空气质量预报情况。精细化对比基准情景、协议减排情景与地面空气质量站实测数据,采用统计指数验证结合模型不确定性分析,系统评价实际减排措施带来的环境因子改善情况。本文采用多种评价统计指标,如平均偏差、均方根误差等,全面验证模型性能,确保模拟结果的可靠性和准确性。

关键词

数值模型; 协议减排情景; 进博会保障

1 引言

为了给重大活动空气质量保障提供全链条技术支撑,动态耦合气象场与排放清单数据,通过每日驱动数值模型对采取政企协议减排措施后大气污染因子进行模拟,精准量化协议减排措施对 $\text{PM}_{2.5}$ 、 O_3 等关键污染物的削峰效应,协助决策人员及时调整及优化政策,确保减排措施兼具科学精准性与执行可行性。

2 研究方法

本文使用气象模型 WRF 和空气质量传输模型 CMAQ 模型来输出上海市各站点的气象条件和污染因子浓度,通过精细化配置模型计算域、物理参数化方案,引入动态减排比例控制文件,量化评价减排情景对环境因子的影响。模型

驱动过程充分融合了排放清单及边界条件,确保模拟结果的可靠性与时效性^[1]。

2.1 WRF 模型

WRF 是由美国国家环境预测中心 NCEP 与美国国家大气研究中心 NCAR 等机构共同开发的中尺度模型,具有两套动力核心(ARW 与 NMM)、一套数据同化系统(WRFDA)以及一个支持并行计算和扩展的软件架构,可用于几十米到数千公里空间尺度的气象研究,目前已在全世界范围内得到广泛应用,本次使用 ARW 核心架构的 WRF,版本为 3.9.1^[2],WPS 主要用来定义模拟区域及网格,将外部数据源获得的如土地利用类型、土壤数据、地势高低等地面非动态数据,融合嵌入到模拟域,采用插值技术,WRF 主程序需要的数据由气象水平插值到 WRF 模拟域网格中得到。本问使用 WRF 模拟输出为 CMAQ 模型中污染物的物理化学过程提供合理的气象场条件^[1]。

【作者简介】张小意(1991-),女;籍贯:浙江;学历:本科、学士;研究方向:地理信息系统。

2.2 CMAQ 模型

CMAQ 是由美国环保局 US-EPA 开发的用于环境空气质量研究的第三代大气化学传输模型,主要用于模拟环境中主要污染因子在不同时空尺度的分布、传输和干湿沉降过程。WRF-CMAQ 模式这几年来被广泛的应用于大气污染研究中,成为当下使用场景较多的新一代空气质量模型之一,本文采用的 CMAQ 版本为 5.3.2^[3]。CMAQ 本身包含初边条件模块 (ICON 和 BCON)、化学传输模块 (CCTM)。

2.3 减排文件控制

CMAQ 模型的 CCTM 化学传输模块中提供了对排放清单和区域设置排放比例的文件 EmissCtrl_*.nml,包括对区域、排放源、污染物、排放系数比例等设置。在 EmissCtrl_*.nml 文件对 NO_x、VOCs、PM、SO₂、CO 等污染物设置不同的减排系数,生成不同日期的排放量控制文件,对应同日期基准排放清单供模型调用。

本次减排行动覆盖电厂、工艺过程、石化、水泥、钢铁、工业溶剂使用、老旧柴油车、废弃物处置等 23 个关键人为源,减排区域涉及上海市本地、北部周边区域、南部周边区域、江苏省传输通道、安徽省传输通道、京津冀和其他等七大板块区域,选择依据其对上海空气质量的模拟影响及排放贡献率,确保措施有效精准^[3]。

2.4 模式系统性能评估方法

本文利用多种检验指标综合评估污染物模拟的准确度,指标总体包含标准平均偏差、平均偏差、均方根误差、一致性指数和相关系数。这些指标从不同角度量化模型性能,其中 MB 标明模型预测值和实测值的平均偏离情况, NMB 通过标准化处理便于不同污染物间的比较, RMSE 衡量预测值与观测值的总体偏差, R 揭示两者线性的相关程度, IOA 评估预报与实测的一致性。MB 和 NMB 侧重偏差分析,帮助识别模型的系统性误差; RMSE 综合反映误差幅度,评估预报值的总体准确度; IOA 衡量预报与观测的吻合度,揭示预报情况的可靠程度; R 反映两者的变化趋势一致性,判断预测结果的趋势跟踪能力。通过多维度指标评估,可全面诊断模型的优势与不足,为改进模拟系统提供科学依据。

$$\begin{aligned} MB &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (M_i - O_i) \\ NMB &= 100\% \times \frac{\sum_{i=1}^N (M_i - O_i)}{\sum_{i=1}^N O_i} \\ RMSE &= \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (M_i - O_i)^2}{N}} \\ IOA &= 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (|M_i - \bar{O}| + |O_i - \bar{O}|)^2}{\sum_{i=1}^N (M_i - \bar{M}) \times (O_i - \bar{O})} \\ R &= \frac{\sum_{i=1}^N (M_i - \bar{M}) \times (O_i - \bar{O})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (M_i - \bar{M})^2 \sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})^2}} \end{aligned}$$

式中, N 是参与验证的 PM_{2.5} 或 O₃ 预测结果值与实际结果的对应的数量, M_i 和 O_i 为 i 时刻因子浓度的模型预测结果和对应实际结果, 和为 N 个 PM_{2.5} 浓度或 O₃ 浓度的

模拟结果值和实际结果的平均值,本次采用小时数据参与检验。

3 模型配置

3.1 区域设置

WRF 和空气质量模型的投影方式均采用兰伯特投影,参考纬度为 30°N 和 60°N,中心经度和纬度分别为 118°E 和 32°N。WRF 采用三层嵌套模拟,网格分辨率分别为 36×36、12×12 和 4×4km,模拟网格数分别为 199×139、166×211、205×235。CMAQ 同样使用三层 (D01, D02 和 D03) 嵌套模拟长三角区域,网格分辨率与 WRF 相同, D01、D02 和 D03 分别覆盖整个中国、中国东部和长三角区域,网格数为 196×136、159×204 和 198×228。

3.2 参数设置

WRF 中尺度气象模式输入全球 GFS 获取初始场信息,数据间隔时间为 6 小时。WRF 模型的参数化方案的过程和配置方案详见表 1。

表 1 WRF 模型的参数化方案

物理过程	方案设置
微物理参数化方案	新 Thompson 方案
长波辐射方案	RRTMG 方案
长波辐射方案	RRTMG 方案
近地面层方案	修正的 MM5 方案
陆面过程方案	Noah 陆面方案
边界层参数化方案	YSU 边界层方案
积云对流参数化方案	Tiedtke 方案

CMAQ 模式使用 SAPRC07 化学机制,机制包含 214 个物种和 723 个反应,特别强化了甲苯 (TOL) 和二甲苯 (XYL) 等芳香烃的二次有机气溶胶 (SOA) 生成路径,这对 PM_{2.5} 模拟至关重要。第一层的边界条件场以模型默认设置输出的结果作为输入,第一层和第二层模拟的污染物浓度分别作为第二层和第三层的边界场输入文件。减排第一天使用前一天的基准情景模拟结果作为初始条件输入,之后均为前一天的减排模拟结果作为初始条件输入。

3.3 减排设置

将全国范围内的城市划分为七个区域,包括上海市本地、北部周边区域 (苏州市、南通市、无锡市、常州市)、南部周边区域 (宁波市、嘉兴市、舟山市、湖州市)、江苏省传输通道 (扬州市、镇江市、泰州市、宿迁市、连云港、徐州市、淮安市和盐城)、安徽省传输通道 (蚌埠市、阜阳市、滁州市、淮南市、淮北市、宿州市和亳州市)、京津冀 (京津冀 2+26 城市) 和其他。

4 模拟结果

对上海市 2024 年 10 月 25 日 -11 月 10 日的预报结果进行数学统计指标计算, PM_{2.5} 的相关性 (R) 和其他指标 (MB、NMB、RMSE) 相对 O₃ 更好。按照预设比例对 PM_{2.5} 的前

体物 SO_2 、 NO_x 、PM 和 VOCs 减排可使其浓度从 $11.3\mu\text{g}/\text{m}^3$ 降低至 $11\mu\text{g}/\text{m}^3$, 降幅为 2.7%, 而减少 O_3 前体物 NO_x 和 VOCs 的排放不但不能降低 O_3 浓度, 还会使其略微升高 ($0.7\mu\text{g}/\text{m}^3$)。

4.1 模拟结果校验

在上海市选择 19 个国控监测站点, 包括杨浦四漂站点、青浦徐泾站点、浦东川沙站点、松江图书馆站点等, 对 CMAQ 的 24 小时模拟预报浓度进行验证。根据验证结果, CMAQ 模型模拟结果比较符合 2024 年 10 月 25 日 -11 月 10 日上海市 $\text{PM}_{2.5}$ 和 O_3 浓度的时序变化趋势, 二者的相关性系数 (R) 分别为 0.85 和 0.54。相较而言 $\text{PM}_{2.5}$ 的整体模拟效果更好, 但存在一定的低估, NMB 为 -28.93%, MB、RMSE 分别为 -5.22 和 $10.97\mu\text{g}/\text{m}^3$ 。 O_3 的模拟浓度一定程度上的高于实际情况 (NMB 为 57.45%)。总体来说, CMAQ 模型可以较好的污染因子浓度, 可结合人工研判做进一步分析。

4.2 $\text{PM}_{2.5}$ 改善情况

2024 年 10 月 31 日 -11 月 10 日的上海市实测数据、协议减排、未减排浓度的小时变化见图 1。该期间内前体物减排变化导致 $\text{PM}_{2.5}$ 小时浓度的变化范围为 $0\sim 1.88\mu\text{g}/\text{m}^3$, 在 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度高值时 (11 月 3 日 -4 日) 的小时浓度降低最多, 11 月 4 日 7 时降幅最大为 5.3%。其余时刻 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度相对低, 在污染因子浓度较低的情况下, 减排效果不明显。结合日变化趋势, $\text{PM}_{2.5}$ 的日降低幅度为 $0.1\sim 0.8\mu\text{g}/\text{m}^3$, 降低幅度为 0.8~4.2%, 3 日和 4 日的削减效果最好, 超过 $0.7\mu\text{g}/\text{m}^3$, 而 10 日的降低幅度最大, 达到 4.2%。

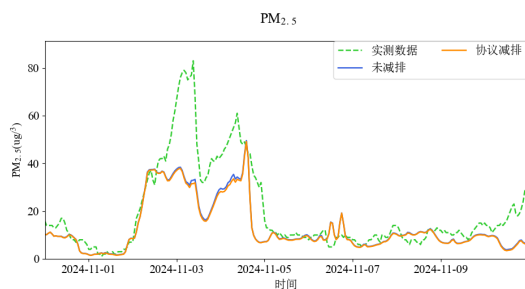


图 1 减排情景下 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度小时时间序列

4.3 O_3 改善情况

在此次保障期间, 控制臭氧前体物 VOCs 和氮氧化物排放的情景下, 臭氧浓度没有降低, 且有一定的升高。在 11 月 4 日 6 时 O_3 浓度反弹最多, 达 $3.6\mu\text{g}/\text{m}^3$, 增幅达到 3.7%, 可能是上海市臭氧在 VOCs 控制区, 减排氮氧化物会导致臭氧浓度的升高。结合日变化趋势, O_3 的日升高浓度为 $0.3\sim 1.6\mu\text{g}/\text{m}^3$, 升高幅度为 0.2~1.3%。整体上 O_3 的反弹幅度不大, 3 日和 4 日的反弹幅度相对较高 (1.2% 和 1.3%), 反弹浓度在 $1.5\mu\text{g}/\text{m}^3$ 左右。

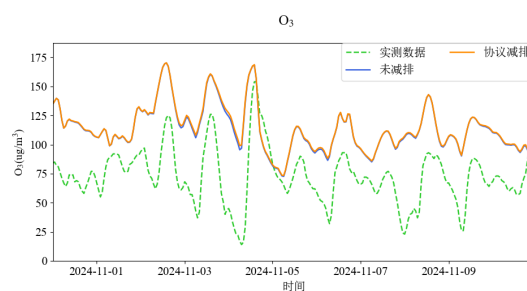


图 2 减排情景下 O_3 浓度小时时间序列

5 总结

针对 2024 年进博会期间实施的减排策略, 模拟预报结果显示, 根据此套减排情景进行的模拟预报结果显示, 对上海部分源类及周边地区的 NO_x 、VOCs、 SO_2 和 PM 排放源进行控制, 可使上海市 $\text{PM}_{2.5}$ 平均浓度从 13.3 降低至 $13\mu\text{g}/\text{m}^3$, 平均降低 2.7%。但因未考虑 VOCs/ NO_x 阈值效应, 该减排方案对 O_3 浓度控制效果有限, 尤其是在强光照、高温条件下, O_3 生成机制复杂, O_3 浓度反而可能出现反弹。因此协同颗粒物和臭氧浓度削减的减排情景尚需进一步研究和探讨, 以更科学地优化空气质量保障方案。

参考文献

- [1] 王茜, 黄蕊珠, 肖宇. 长三角区域空气质量数值预报系统及其在重大活动保障中的应用[J]. 中国环境监测, 2020, 36(02): 15-21.
- [2] 戴海夏, 安静宇, 黄成, 等. 长江三角洲区域大气 $\text{PM}_{2.5}$ 和臭氧污染协同控制路径[J]. 科学通报, 2022, 67(18): 2100-2112.
- [3] 卢怡, 赵雪芬, 赵瑜. 不同模式版本对长三角区域大气污染物模拟结果对比评估[J]. 环境监控与预警, 2020, 12(3): 5-14.