

资料同化方法在空气污染数值预报中的应用研究

白晓平¹, 李红¹, 方栋¹, Francesca Costabile², 刘峰磊³

(1. 清华大学核能与新能源技术研究院, 北京 100084; 2. Institute for Atmospheric Pollution Italian National Research Council, Rome Italy; 3. 苏州环境监测中心站, 苏州 215004)

摘要: 基于第 5 代中尺度非静力气象模式 MM5 以及区域气溶胶和沉积模式 REMSAD 耦合的空气污染数值预报模型系统, 分别采用最优插值法和集合卡尔曼滤波法对南京 2002-08 ~ 2002-09 NO_x 和 SO_2 模型预报结果进行了资料同化试验, 结果表明, NO_x 和 SO_2 经最优插值法同化后偏差平均值的改进率分别为 34.20%、47.53%, 均方根误差的改进率分别为 31.95%、42.04%; NO_x 和 SO_2 经集合个数为 30 的集合卡尔曼滤波法同化后偏差平均值的改进率分别为 26.73%、60.75%, 均方根误差的改进率分别为 25.20%、55.16%; 说明最优插值法和集合卡尔曼滤波法都具有改善空气污染数值预报中污染物浓度初始场的作用. 进行了集合卡尔曼滤波法中集合个数为 61 时 2 种同化方法同化效果比较的试验, 结果表明, 随着集合卡尔曼滤波法集合个数的增加, NO_x 和 SO_2 的同化效果都较集合个数为 30 时有所改善, 并且, 集合卡尔曼滤波法对 NO_x 和 SO_2 模式预报结果的改善效果将好于最优插值法.

关键词: 资料同化; 空气污染; 数值预报; 最优插值法; 集合卡尔曼滤波

中图分类号: X169 文献标识码: A 文章编号: 0250-3301(2008)02-0283-07

Application Research of Data Assimilation in Air Pollution Numerical Prediction

BAI Xiao-ping¹, LI Hong¹, FANG Dong¹, Francesca Costabile², LIU Feng-lei³

(1. Institute of Nuclear and Energy Technology, Tsinghua University, Beijing 100084, China; 2. Institute for Atmospheric Pollution Italian National Research Council, Rome Italy; 3. Suzhou Environmental Monitoring Centre, Suzhou 215004, China)

Abstract: Based on an air pollution modeling system coupling with the non-hydrostatic fifth generation mesoscale meteorological model (MM5) and the regional modeling system for aerosols and deposition (REMSAD), the forecast results of NO_x and SO_2 in August and September 2002 in Nanjing were assimilated with the optimal interpolation method and the ensemble Kalman filter. The results show that the improvement rates of deviation mean value of NO_x and SO_2 after assimilated with the optimal interpolation method are 34.20% and 47.53%, and the improvement rates of root mean square errors are 31.95% and 42.04% respectively. It is also demonstrated that the improvement rates of deviation mean value of NO_x and SO_2 after assimilated with the ensemble Kalman filter with 30 ensemble members are 26.73% and 60.75%, and the improvement rates of root mean square errors are 25.20% and 55.16% respectively. So, the optimal interpolation method and the ensemble Kalman filter both can improve the quality of the initial state from the air pollution numerical prediction model. The comparative experiments on the assimilation performance with the optimal interpolation method and the ensemble Kalman filter with 61 ensemble members were performed, and the experiments demonstrate that the assimilation performance of the ensemble Kalman filter with 61 ensemble members were improved compared with 30 ensemble members, and with the increase of the ensemble members, the improvement to the initial state of NO_x and SO_2 with the ensemble Kalman filter will be better than the optimal interpolation method.

Key words: data assimilation; air pollution; numerical prediction; optimal interpolation method; ensemble Kalman filter

近 30 年来, 空气污染数值预报模式已经得到了很大的发展, 开发出了许多充分考虑不同预报尺度、多种污染物、多种过程、高时空分辨率的数值预报模式, 这些模式已经在科研领域得到了广泛的应用, 有些模式还实现了业务化的应用. 但是, 由于缺少可靠的污染实时排放数据, 而且预报区域下垫面环境复杂, 数值模式中所需要的边界条件和初始条件不是最优, 导致数值预报结果不够理想.

随着观测技术的不断发展, 已经可以获得大量连续的空气污染物观测数据, 如何充分、合理地利用这些观测数据来改进模式的浓度初始场、优化排放清单及模式参数等, 以提高空气污染数值预报的水

平, 这些就是资料同化可以解决的问题. 资料同化是 60 年代初随着气象领域数值计算和数值预报业务的发展而发展起来的^[1], 它能够将观测数据和模式动力学进行最优拟合, 从而形成一个相对更为真实的系统状态.

资料同化在空气污染预报中的应用研究, 国外起步较早, 始于 20 世纪 70 年代初. Desalu 等^[2]在 1974 年最先将 Kalman 滤波法应用于空气污染预报中, Fronza 等^[3]在 1979 年实现了 Kalman 滤波法对空

收稿日期: 2007-02-27; 修订日期: 2007-08-04

作者简介: 白晓平 (1976 ~), 女, 博士研究生, 主要研究方向为空气污染预报, E-mail: bxp03@mails.tsinghua.edu.cn

气污染的实时预报;针对 Kalman 滤波法计算量和计算需要内存都很大的问题,一些学者尝试了减秩平方根滤波法^[4]、集合卡尔曼滤波法(EnKF)^[5]等次优化的 Kalman 滤波算法.1990 年,Stauffer 等^[6]就开始了空气污染模型系统中松弛逼近法的应用和研究. Elbern 等^[7]在 1999 年首次将四维变分法成功地应用于欧拉化学传输模型中.在国内,关于空气污染预报的同化研究才刚刚起步,基本上一片空白.

资料同化经过几十年的发展,已经形成了十几种有效的同化方法,如顺序同化法、最优插值法(OI)、松弛逼近法、Kalman 滤波法和变分分析法等.其中,OI 法能够对各种观测资料进行处理,而且方法简单,计算量小,是当前业务化应用中使用最多的一种同化方法.目前国际上最为流行的资料同化方法是变分分析法和 EnKF 法,与变分分析法相比,EnKF 法避免了伴随模式的使用以及无法承受的大量计算,是当前资料同化领域研究的一个新的热点.本研究基于第 5 代中尺度非静力气象模式 MM5^[8]以及区域气溶胶和沉积模式 REMSAD^[9]耦合的空气污染数值预报模型系统,将 OI 法和 EnKF 法分别应用于南京空气污染物观测资料的同化中,探索资料同化方法在空气污染数值预报中的应用.

1 最优插值法(OI)

Eliassen^[10]在 1954 年首先提出了最优插值理论,Gandin^[11]在 1963 年采用 OI 法把不规则观测站点的温度内插到规则网格,实现了将 OI 法引入客观分析领域中.OI 法以线性最小平方估计理论为基础,考虑了观测和预报之间的一切线性相关以及观测要素固有的统计结构,适于对不同类型、不同时间次的观测资料进行同化处理.

1.1 基本公式

假定 $\mathbf{x}$ 是维数为 n 的模式状态向量, $\mathbf{y}$ 是由 m 个观测组成的向量, $\mathbf{x}^a$ 代表同化后的变量分析场, $\mathbf{x}^b$ 代表变量背景场, $\mathbf{x}^a$ 由下列公式进行计算:

$$\mathbf{x}^a = \mathbf{x}^b + \mathbf{K}(\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}^b) \quad (1)$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{P}\mathbf{H}^T(\mathbf{H}\mathbf{P}\mathbf{H}^T + \mathbf{R})^{-1} \quad (2)$$

其中, $\mathbf{K}$ 为权重矩阵, $\mathbf{K} \in \mathbf{R}^{n \times m}$; $\mathbf{P}$ 为背景误差协方差矩阵, $\mathbf{P} \in \mathbf{R}^{n \times n}$; $\mathbf{R}$ 为观测误差协方差矩阵, $\mathbf{R} \in \mathbf{R}^{m \times m}$; $\mathbf{H}$ 为插值算子,将背景场转换到观测位置, $\mathbf{H} \in \mathbf{R}^{m \times n}$;上标 T 、 -1 分别表示矩阵求转置、矩阵求逆.

1.2 误差协方差矩阵

背景误差协方差矩阵和观测误差协方差矩阵是

OI 法中 2 个比较重要的参数,目前还没有准确的计算方法,通常通过一些假设来简化计算.

背景误差协方差矩阵的对角元素采用 Fu 等^[12]提出的公式进行计算,即:

$$(\sigma_\epsilon)_j^2 \approx (\sigma_m)_j^2(1 - c_j)^2 \quad (3)$$

$$(\sigma_m)_j^2 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (z_{j,k} - \bar{z}_j)^2 \quad (4)$$

其中, j 为格点序号, N 为时域采样数, c_j 是随空间变化的参数, $z_{j,k} - \bar{z}_j$ 代表模式估值偏差.为简化计算,假定 c_j 为常数.Fu 等认为 c_j 的合理范围为: $0.5 \leq c_j \leq 1.5$,因此,试验中取 $(1 - c_j)^2 = 0.25$.

背景误差协方差矩阵的非对角元素,由高斯函数来表示空间相关结构,即:

$$B(i, j) = (\sigma_\epsilon)_i (\sigma_\epsilon)_j \exp\left(-\frac{\Delta x^2}{L_x^2} - \frac{\Delta y^2}{L_y^2}\right) \quad (5)$$

其中, i, j 为格点序号; $\Delta x, \Delta y$ 分别为 i, j 格点在水平面上东西和南北方向的距离; L_x 和 L_y 分别为东西和南北方向的水平相关尺度.

对于观测误差协方差矩阵,认为观测站点之间的观测误差是无关的,因此观测误差协方差矩阵为对角阵.

2 集合卡尔曼滤波法(EnKF)

EnKF 法最早由 Evensen^[13]在 1994 年提出,主要是为了解决 Kalman 滤波法和变分分析法在实际应用时背景误差协方差矩阵的估计和预报以及巨大的计算代价和数据储存代价的问题,是 Kalman 滤波法和集合预报的有机结合.1998 年,Burgers 等^[14]为了避免低估分析误差协方差,对 Evensen 提出的 EnKF 方法进行了增加扰动观测的改进.之后,EnKF 法不断得到发展,逐渐由理论走向实际应用.

EnKF 法是基于随机动力预测理论发展而来的,它通过采用马尔可夫蒙特卡罗方法求解科尔莫哥洛夫(Fokker-Planck)方程:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial (f_i \phi(\mathbf{x}))}{\partial \mathbf{x}_i} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 \phi(\mathbf{x}) (g(\mathbf{x}) \mathbf{Q} g(\mathbf{x})^T)_{i,j}}{\partial \mathbf{x}_i \partial \mathbf{x}_j} \end{aligned} \quad (6)$$

得到模式状态概率密度函数 $\phi(\mathbf{x})$ 随时间的演变,从而进行误差预报.其中, f_i 是对应第 i 个模式变量分量 $\mathbf{x}_i$ 的模式算子, $g(\mathbf{x}) \mathbf{Q} g(\mathbf{x})^T$ 是模式预报误差协方差矩阵.具体来讲,它将模式状态预报看成近似随机动态预报,用一个模式状态总体代表随机动态预报中的概率密度函数,通过向前积分模式状态集合

来计算不同时间的概率密度函数所对应的统计特性,如均值与误差协方差,因此,与预报模式状态相关的统计信息都可以从分析时间通过集合得到.

2.1 背景误差协方差矩阵的集合描述

假定 i 时刻含有集合成员数为 N_e 的预报集合 $\mathbf{x}^f, \mathbf{x}^f = (\mathbf{x}_1^f, \mathbf{x}_2^f, \cdots, \mathbf{x}_{N_e}^f) \in \mathbf{R}^{n \times N_e}$, 其中 n 为模式状态变量数. 集合平均记为 $\overline{\mathbf{x}^f} = \mathbf{x}^f \mathbf{1}_{N_e}, \mathbf{1}_{N_e} \in \mathbf{R}^{n \times N_e}$ 是各元素均为 $1/N_e$ 的矩阵. 预报集合扰动矩阵定义为 $\mathbf{x}'^f = \mathbf{x}^f - \overline{\mathbf{x}^f} = \mathbf{x}^f (\mathbf{I} - \mathbf{1}_{N_e})$, 因此, 集合背景误差协方差矩阵 $\mathbf{P}_e^f \in \mathbf{R}^{n \times N_e}$ 可以由下式得到.

$$\mathbf{P}_e^f = \frac{\mathbf{x}'^f (\mathbf{x}'^f)^T}{N_e - 1} \quad (7)$$

2.2 观测扰动

给定一组观测向量 $d \in \mathbf{R}^m, m$ 为观测个数; N_e 维扰动观测向量 $D = (d_1, d_2, \cdots, d_{N_e}) \in \mathbf{R}^{m \times N_e}$ 中第 j 个元素可表示为 $d_j = d + \varepsilon_j$, 且随机观测误差的均值为 0. 观测扰动矩阵定义为 $E = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_{N_e}) \in \mathbf{R}^{m \times N_e}$, 因此, 集合观测误差协方差矩阵 $\mathbf{R}_e \in \mathbf{R}^{m \times N_e}$ 可以由下式得到.

$$\mathbf{R}_e = \frac{E' (E')^T}{N_e - 1} \quad (8)$$

2.3 分析方程

利用背景误差协方差和观测, 根据如下分析方程可更新预报集合:

$$\mathbf{x}^a = \mathbf{x}^f + \mathbf{P}_e^f H^T (H \mathbf{P}_e^f H^T + \mathbf{R}_e)^{-1} (D - H \mathbf{x}^f) \quad (9)$$

式中, H 为观测转换矩阵. 在实际计算时, $\mathbf{P}_e^f H^T$ 和 $H \mathbf{P}_e^f H^T$ 按照下式进行独立计算:

$$\mathbf{P}_e^f H^T = \frac{1}{N_e - 1} \sum_{i=1}^{N_e} (\mathbf{x}_i^f - \overline{\mathbf{x}^f}) (H \mathbf{x}_i^f - \frac{1}{N_e} \sum_{i=1}^{N_e} H \mathbf{x}_i^f)^T \quad (10)$$

$$H \mathbf{P}_e^f H^T = \frac{1}{N_e - 1} \sum_{i=1}^{N_e} \left(H \mathbf{x}_i^f - \frac{1}{N_e} \sum_{i=1}^{N_e} H \mathbf{x}_i^f \right) \times \left(H \mathbf{x}_i^f - \frac{1}{N_e} \sum_{i=1}^{N_e} H \mathbf{x}_i^f \right)^T \quad (11)$$

3 模式

本研究采用的模式为基于中尺度气象模式 (MM5) 驱动的 REMSAD 空气污染数值预报模式系统 (如图 1), 该系统主要由 MM5V3.7 和 REMSADV7.06 这 2 部分组成. MM5 (The non-hydrostatic Fifth Generation Mesoscale Meteorological Model) 是由美国宾州大学和美国大气科学研究中心联合发布的第 5 代非静力中尺度气象模式, 主要进行研究区域气象场的模拟, 为空气污染预报模式提供逐时气象场.

REMSAD (Regional Modeling System for Aerosols and Deposition) 是由美国 EPA 资助、国际系统应用技术公司开发的空气污染物计算模式, 该模式是在 UAM-V 模式的基础上发展而来的, 以质量守恒方程为基础, 包含了多种物质的排放、传输、扩散、化学反应、干湿沉降等过程; 模式考虑了 48 种物质的 77 个化学反应和 11 个光解反应; 对于气相、液相化学反应过程, 用户可以根据需要选择 micro-CB-IV 机制或参数化方案; 模式的垂直坐标采用地形追随坐标, 水平网格采用双向嵌套技术.

试验选取南京市进行模型系统的应用研究, 模拟区域的中心为 $118.779\ 71^\circ\text{E}, 32.044\ 25^\circ\text{N}$. 其中, 气象模式 MM5 选取 3 重嵌套, 水平格距分别为: 9 km、3 km、1 km; 污染模式 REMSAD 不采用嵌套网格, 水平格距为 1 km, 模拟范围为 $55\ \text{km} \times 55\ \text{km}$, 垂直方向共有 12 层且不等距. 污染物最初浓度场为零值场, 取模式运行 24 h 的结果作为初始浓度场; 边界浓度取郊区背景值, 并且预报过程中边界浓度保持不变. 预报污染物质为 NO_x, SO_2 , 由模型系统计算出每天 24 h 逐时污染物格点浓度值.

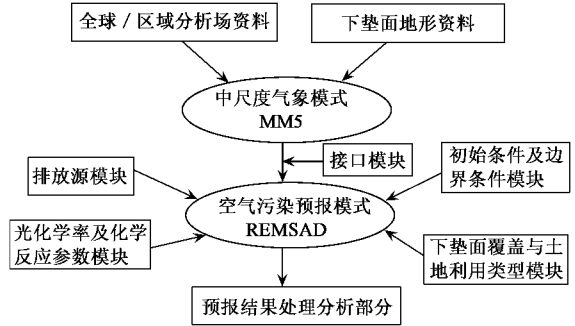


图 1 空气污染数值预报流程

Fig. 1 Air pollution numerical prediction chart

4 同化试验及结果分析

本研究采用 OI 和 EnKF 这 2 种方法来设计空气污染物观测资料的同化系统, 同化系统主要进行南京 NO_x, SO_2 浓度的近地面 (二维) 同化试验, 试验时段为 2002-08-01 ~ 2002-09-30, 每日取模式运行到 24:00 时的浓度场作为背景场进行同化试验. 试验选取南京 6 个观测站点中 1 号 ~ 5 号站点为同化点、6 号站点为检验点, 计算 2 种物质同化前后在检验点处的偏差及其平均值和均方根误差 (RMSE), 以检验 2 种同化方法改善空气污染数值预报中污染物浓度初始场的效果. 限于篇幅, 本研究只给出 9 月份污染

物浓度模拟值同化的结果.此外,在以下数值试验中,在估算观测误差协方差矩阵时,观测误差均取为观测值的 10%.

4.1 OI 法中水平相关尺度的确定

试验中假定东西和南北方向预报误差的水平相关尺度相等,即 $L_x = L_y$.由于试验模拟区域的范围为 55 km × 55 km,而且随着相关尺度的逐渐增大,说明观测对同化区域的影响范围也逐渐增大,因此水平相关尺度应小于 55 km.选取水平相关尺度分别为 10、20、30、40 和 50 km 进行同化试验,以确定 OI 法最佳水平相关尺度.图 2 为 OI 法取不同水平相关尺度时 NO_x 和 SO_2 模式预报结果经同化后在检验点处同化偏差的比较,图 3 为 OI 法取不同水平相关尺度时 NO_x 和 SO_2 模式预报结果经同化后在检验

点处同化偏差平均值和 RMSE 的比较.

由图 2 和图 3 可知: NO_x 模式预报结果经同化后,在检验点处的同化偏差以及偏差的平均值和 RMSE 均随着水平相关尺度的增大而减小,其中,同化偏差平均值由 0.052 mg/m³ 减小到 0.022 mg/m³,RMSE 由 0.055 mg/m³ 减小到 0.025 mg/m³. SO_2 模式预报结果经同化后,当 $L = 10$ km 时,同化效果最差,同化偏差的平均值为 0.045 mg/m³,RMSE 为 0.048 mg/m³;而在 L 为 30 km、40 km、50 km 时,同化效果比较接近,同化偏差平均值约为 0.023 mg/m³,RMSE 约为 0.028 mg/m³.考虑到 2 种物质在 L 为 30 km 和 40 km 时同化效果相差并不大,而且 L 为 40 km 和 50 km 相对于 $L = 30$ km 来讲,观测所能影响的同化区域偏大,因此,选取 $L_x = L_y = 30$ km.

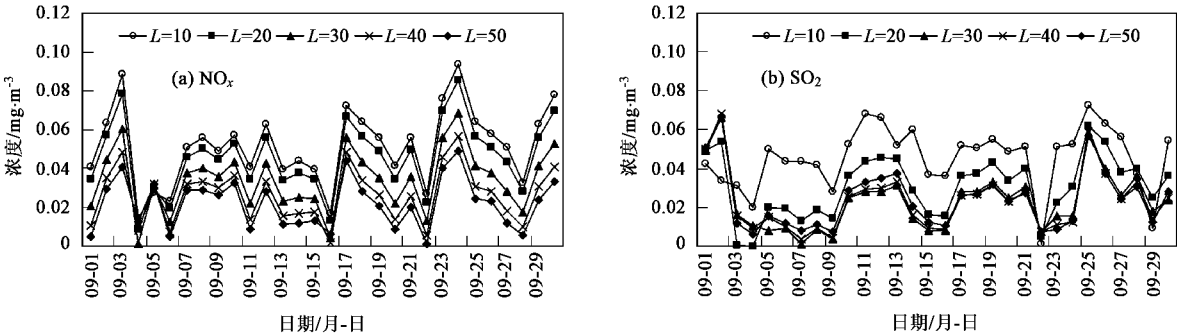


图 2 OI 法取不同水平相关尺度时 NO_x 和 SO_2 模式预报结果经同化后在检验点处的偏差
Fig.2 Deviation at the test station of NO_x and SO_2 after assimilated with OI (with different horizontal correlation scale)

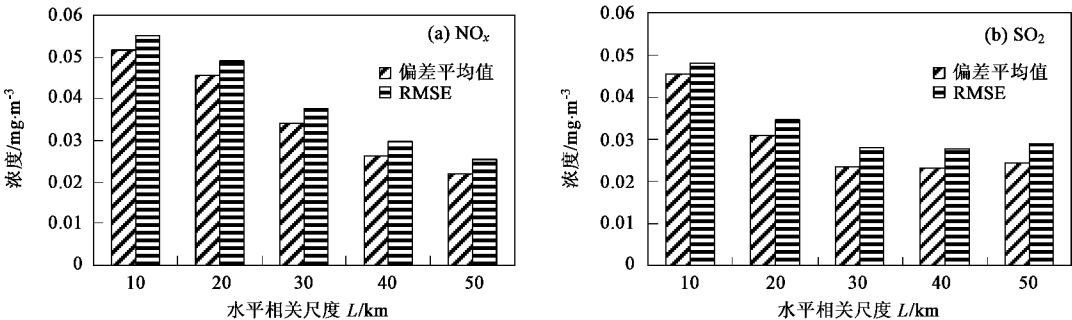


图 3 OI 法取不同水平相关尺度时经同化后在检验点处的偏差平均值及 RMSE
Fig.3 Deviation mean value and RMSE at the test station of NO_x and SO_2 after assimilated with OI (with different horizontal correlation scale)

4.2 OI 法和 EnKF 法 ($N_e = 30$) 同化效果的比较

定义同化前后偏差平均值的改进率为:

$$IR_{\text{average}} = \frac{\text{average(同化前)} - \text{average(同化后)}}{\text{average(同化前)}} \%$$

同化前后 RMSE 改进率为:

$$IR_{\text{RMSE}} = \frac{\text{RMSE(同化前)} - \text{RMSE(同化后)}}{\text{RMSE(同化前)}} \%$$

图 4 为 NO_x 模式预报结果分别经 OI 法和 EnKF 法同化后在检验点处同化前后的偏差及其平均值的比较,图 5 为 SO_2 模式预报结果分别经 OI 法及 EnKF 法同化后在检验点处同化前后的偏差及其平均值的比较,图 6 为 NO_x 和 SO_2 同化前后 RMSE 的比较.

由图 4~6 可知:经 OI 法和 EnKF 法同化后, NO_x 和 SO_2 的偏差平均值和 RMSE 均比同化前有了很大的改善,说明这 2 种同化方法都具有改善空气污染数值预报中污染物浓度初始场的作用. NO_x 经 OI 法和 EnKF 法同化后偏差平均值的改进率分别为 34.20 % 和 26.73%, NO_x 经 OI 法和 EnKF 法同化后 RMSE 的改进率分别为 31.95% 和 25.20%, 说明 OI 法对 NO_x 的同化效果优于 EnKF 法. SO_2 经 OI 法和 EnKF 法同化后偏差平均值的改进率分别为 47.53% 和 60.75%, SO_2 经 OI 法和 EnKF 法同化后 RMSE 的改进率分别为 42.04% 和 55.16%, 说明 EnKF 法对 SO_2 的同化效果优于 OI 法. 从以上对偏差平均值和 RMSE 改进率的比较分析来看, 同化方法对 SO_2 的同化效果明显优于 NO_x .

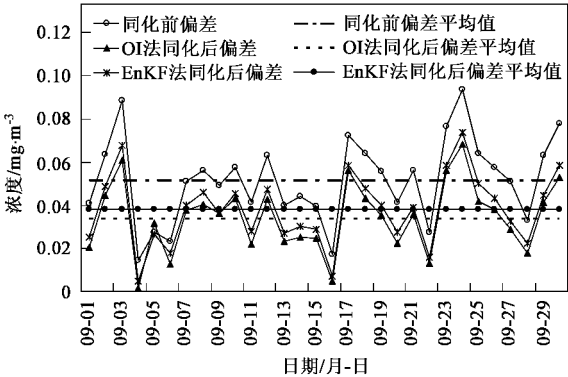


图 4 NO_x 模式预报结果经 OI 法及 EnKF 法同化后在检验点处同化前后的偏差及平均值

Fig.4 Deviation and deviation mean value at the test station of NO_x before and after assimilated with OI and EnKF

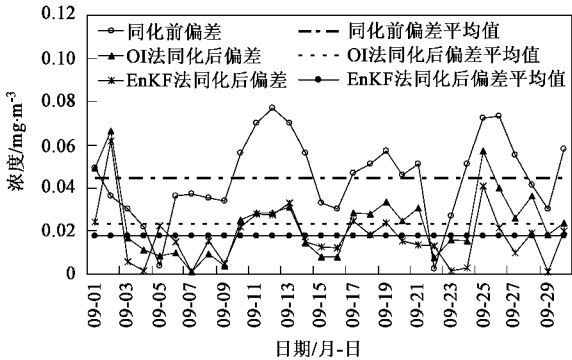


图 5 SO_2 模式预报结果经 OI 法及 EnKF 法同化后在检验点处同化前后的偏差及平均值

Fig.5 Deviation and deviation mean value at the test station of SO_2 before and after assimilated with OI and EnKF

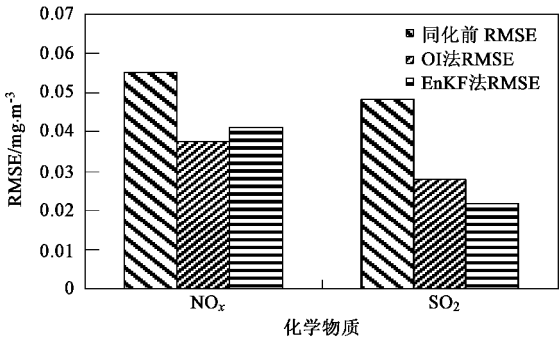


图 6 NO_x 和 SO_2 同化前后的 RMSE

Fig.6 RMSE of NO_x and SO_2 before and after assimilated with OI and EnKF

4.3 EnKF 法中集合大小对同化效果的影响

分别取 N_e 为 30 和 61 进行同化试验. 图 7 为 NO_x 模式预报结果经不同样本量的 EnKF 法同化后在检验点处的偏差及其平均值的比较, 图 8 为 SO_2 模式预报结果经不同样本量的 EnKF 法同化后在检验点处的偏差及其平均值的比较, 图 9 为 NO_x 和 SO_2 经不同样本量的 EnKF 法同化后的 RMSE 的比较.

由图 7~9 可知: 当 N_e 由 30 增加到 61 时, NO_x 的偏差平均值由 0.038 mg/m^3 减小到 0.029 mg/m^3 , RMSE 由 0.041 mg/m^3 减小到 0.038 mg/m^3 ; SO_2 的偏差平均值由 0.017 mg/m^3 减小到 0.013 mg/m^3 , RMSE 由 0.022 mg/m^3 减小到 0.019 mg/m^3 . 说明在其它参数不变的情况下, 随着 N_e 的增加, EnKF 法的同化效果逐渐得到改善.

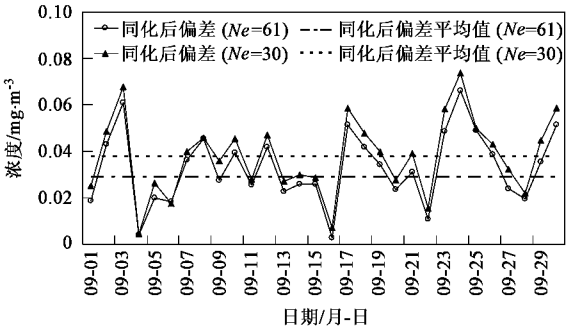


图 7 NO_x 模式预报结果经不同样本量的 EnKF 法同化后在检验点处的偏差及平均值

Fig.7 Deviation and deviation mean value of NO_x after assimilated with EnKF (with different ensemble members)

4.4 OI 法和 EnKF 法 ($N_e = 61$) 同化效果的比较

OI 法以一个恒定的经验公式描述背景误差协

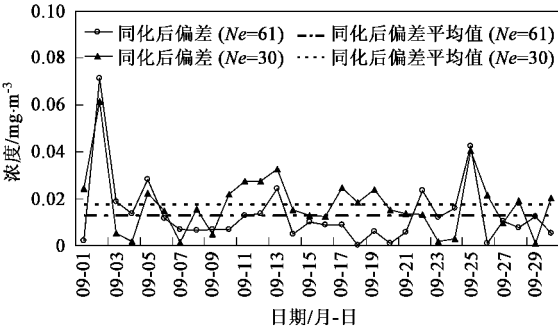


图 8 SO_2 模式预报结果经不同样本量的 EnKF 法同化后在检验点处的偏差及平均值

Fig.8 Deviation and deviation mean value of SO_2 after assimilated with EnKF (with different ensemble members)

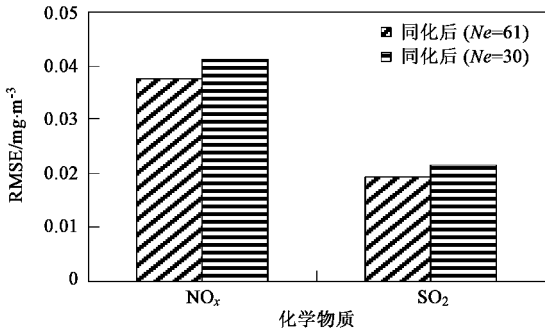


图 9 NO_x 和 SO_2 经不同样本量的 EnKF 法同化后的 RMSE

Fig.9 RMSE of NO_x and SO_2 after assimilated with EnKF (with different ensemble members)

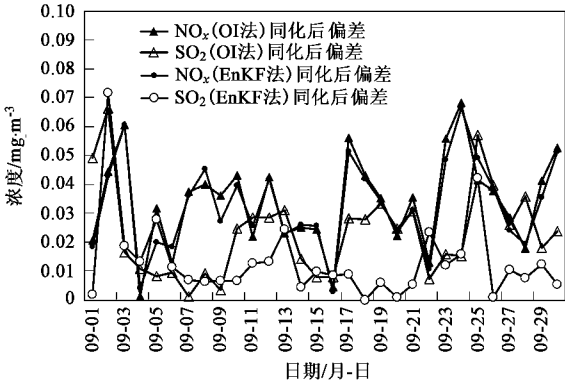


图 10 NO_x 和 SO_2 模式预报结果经 OI 及 EnKF ($Ne = 61$) 同化后在检验点处的偏差

Fig.10 Deviation at the test station of NO_x and SO_2 after assimilated with OI and EnKF ($Ne = 61$)

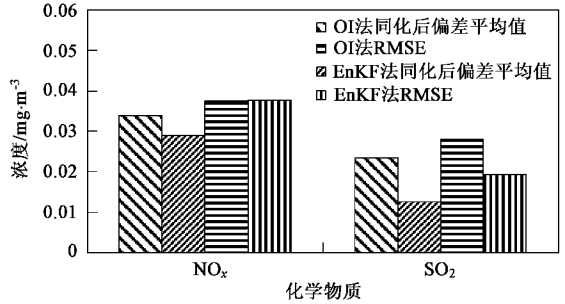


图 11 NO_x 和 SO_2 模式预报结果经 OI 及 EnKF ($Ne = 61$) 同化后在检验点处的偏差平均值及 RMSE

Fig.11 Deviation mean value and RMSE at the test station of NO_x and SO_2 after assimilated with OI and EnKF ($Ne = 61$)

方差,虽然可以有效地改善模式预报的效果,但从理论上来讲,恒定的背景误差协方差与实际的物理过程并不一致;EnKF 法用蒙特卡罗方法的马尔可夫随机链描述背景误差的流依赖特性,考虑了背景误差随时间的演化,理论上比 OI 法更优越.为了检验随着 Ne 的增加,EnKF 法的同化效果是否优于 OI 法,设计了 OI 法与 Ne 为 61 的 EnKF 法对 2 种化学物质同化效果的比较.图 10 为 NO_x 和 SO_2 模式预报结果经 OI 法及 EnKF 法 ($Ne = 61$) 同化后在检验点处的偏差的比较,图 11 为 NO_x 和 SO_2 模式预报结果经 OI 法及 EnKF 法 ($Ne = 61$) 同化后在检验点处的偏差平均值及 RMSE 的比较.

将图 10、图 11 与图 4~6 进行比较后可以得出,对于 NO_x ,当 EnKF 法中 Ne 为 30 时,OI 法的同化效果优于 EnKF 法;当 EnKF 法中 Ne 为 61 时,OI 法的同化效果与 EnKF 法基本相当.对于 SO_2 ,当 EnKF 法中 Ne 为 30 时,OI 法的同化效果差于 EnKF 法;当

EnKF 法中 Ne 为 61 时,OI 法的同化效果与 EnKF 法相差更大.可见推断,随着 EnKF 法 Ne 的增加,EnKF 法对 NO_x 浓度初始场的改善效果将会好于 OI 法,EnKF 法对 SO_2 浓度初始场的改善效果将会大大好于 OI 法.

5 讨论

一般来讲,数值预报模式总是存在误差的,模式误差对于预报集合的分析过程存在一定的影响,因此,模式误差协方差也应该是背景误差协方差的一部分.但是,在进行资料同化的应用研究中,由于模式误差的描述往往比较复杂,为简化计算,常常假定模式是完美的,不考虑模式误差,此时背景误差协方差近似等于模式预报误差协方差,因此,背景误差协方差被低估了.另外,背景误差协方差还会随着不同的季节、不同的模式分辨率等有所不同.所以,充分

考虑影响背景误差协方差的各因素、确定较为准确的背景误差协方差,从而改善同化效果是今后研究工作的一个内容.

在 EnKF 法应用中,集合个数是一个重要的参数.在空气污染预报中,集合个数与同化结果之间的关系如何,集合个数达到多少就可获得比较理想的同化结果,这些具体问题都需要通过同化试验反复比较进行确定.

此外,排放源清单的不准确性对于空气污染预报的结果也有很大影响,而通过资料同化方法对污染源进行反演,可以实现排放清单的优化.因此,选取合适的资料同化方法,开展污染源的 反演研究将是资料同化方法在空气污染预报中一个非常值得深入研究的方 向.

6 结 论

(1)NO_x 和 SO₂ 模式预报结果经 OI 法和 EnKF 法同化后所得到的分析值均比模式预报结果更接近实际观测值,说明 OI 法和 EnKF 法都具有改善空气污染数值预报中污染物浓度初始场的作用.

(2)OI 法中水平相关尺度反映了观测对同化区域的影响范围,该参数对于 OI 法同化效果具有一定的影响.因此,进行同化试验时,要根据同化区域以及同化效果确定合适的水平相关尺度.

(3)EnKF 法同化效果受集合个数的影响,随着集合个数的增加,NO_x 和 SO₂ 的同化偏差及偏差平均值和 RMSE 均逐渐减小,同化效果逐步得到改善.

(4)从 NO_x 和 SO₂ 的同化效果来看,当 EnKF 法中集合样本数较少时,OI 法的同化效果可能优于 EnKF 法的同化效果,这主要是因为当样本数较少时,EnKF 法背景误差协方差的质量就会相应降低,不能真实反映距离某一观测点较远处的协方差.

参考文献:

[1] 李冬,刘克修,韩桂军. 变分伴随数据同化方法在断面海温数值计算中的应用研究 [J].海洋通报, 2004, 23(4): 1-8.

[2] Desalu A A, Gould L A, Schweppe F C. Dynamic estimation of air pollution [J]. IEEE Transaction on Automatic Control, 1974, 19 (6):904-910.

[3] Fronza G, Spirito A, Tonielli A. Real-time forecast of air pollution episodes in the Venetian region, Part 2: the Kalman predictor [J]. Applied Mathematical Modelling, 1979, 3(6):409-415.

[4] Segers A J, Heemink A W, Verlaan M, et al. Large scale data assimilation based on RRSQRT-filters: application on atmospheric chemistry models [A]. In: Brebbia C A, et al. (Eds.). Proceedings Air Pollution IV [C]. Computational Mechanics Publications, Wessex Institute of Technology, 1998b.25-34.

[5] Van Loon M, Builtjes P J H, Segers A J. Data assimilation of ozone in the atmospheric transport chemistry model LOTOS [J]. Environmental Modelling & Software, 2000, 15 (6-7): 603-609.

[6] Stauffer D R, Seaman N L. Use of four-dimensional data assimilation in a limited-area mesoscale model. Part I: Experiments with synoptic-scale data [J]. Monthly Weather Review, 1990, 118 (6): 1250-1277.

[7] Elbern H, Schmidt H. A four-dimensional variational chemistry data assimilation scheme for Eulerian chemistry transport modeling [J]. Journal of Geophysical Research, 1999, 104 (D15): 18583-18598.

[8] PSU/NCAR. Mesoscale Modeling System Tutorial Class Notes and Users' Guide (MM5 Modeling System Version 3) [EB/OL]. <http://www.mmm.ucar.edu/mm5/documents/tutorial-v3-notes.html>, 2005.

[9] ICF consulting. User's Guide to the Regional Modeling System for Aerosols and Deposition (REMSAD) Version 7 [EB/OL]. <http://www.remsad.com>, 2006.

[10] Eliassen A. Provisional report on calculation of spatial covariance and autocorrelation of the pressure field [R]. Oslo: Institute of Weather and Climate Research, Academy of Science, 1954. Report No. 5.

[11] Gandin L S. Objective analysis of meteorological fields [M]. Leningrad: Hydrometeorological Publications, 1963.

[12] Fu W W, Zhou G Q, Wang H J. Ocean data assimilation with background error covariance derived from OGCM Outputs [J]. Advances in Atmospheric Sciences, 2004, 21 (2): 181-192.

[13] Evensen G. Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using Monte Carlo methods to forecast error statistics [J]. Journal of Geophysical Research, 1994b, 99(C5): 10143-10162.

[14] Burgers G, van Leeuwen P J, Evensen G. Analysis scheme in the ensemble Kalman filter [J]. Monthly Weather Review, 1998, 126 (6): 1719-1724.