

DOI: 10.3969/j.issn.1673-6141.2023.01.006

Himawari-8 气溶胶变分同化对 PM_{2.5} 污染模拟的改进

孙二昌^{1,2}, 麻金继^{1,2*}, 吴文涵^{1,2}, 杨光^{1,2}, 郭金雨^{1,2}

(1 安徽师范大学地理与旅游学院, 安徽 芜湖 241002;

2 资源环境与地理信息工程安徽省工程技术研究中心, 安徽 芜湖 241002)

摘要: 利用地球静止轨道卫星 Himawari-8 气溶胶光学厚度 (AOD) 产品能够估算空间覆盖范围广、时间分辨率高的近地表 PM_{2.5} 浓度。基于三维变分同化系统将 AOD 估算得到的 PM_{2.5} 资料同化进入 WRF-Chem 大气化学模式中, 通过控制实验与同化实验的对比与分析, 探讨了 AOD 估算得到的 PM_{2.5} 资料同化对 PM_{2.5} 污染模拟的改进作用。实验结果表明: (1) AOD 估算得到的 PM_{2.5} 资料同化能够改进 PM_{2.5} 污染模拟效果; (2) PM_{2.5} 污染模拟改进效果存在时空差异。此外, 与其他研究中使用 AOD 观测算子直接同化 AOD 的方法相比, 该方法的操作更加简单。

关键词: WRF-Chem 模式; Himawari-8 气溶胶光学厚度; PM_{2.5}; 地理加权回归模型

中图分类号: TP79; P407

文献标识码: A

文章编号: 1673-6141(2023)01-059-014

Improvement of PM_{2.5} predictions via variational assimilation of Himawari-8 satellite AOD product

SUN Erchang^{1,2}, MA Jinji^{1,2*}, WU Wenhan^{1,2}, YANG Guang^{1,2}, GUO Jinyu^{1,2}

(1 College of Geography and Tourism, Anhui Normal University, Wuhu 241002, China;

2 Engineering Technology Research Center of Resources Environment and Geographic Information System of Anhui Province, Wuhu 241002, China)

Abstract: The aerosol optical depth (AOD) product of Himawari-8 satellite can be used to estimate PM_{2.5} concentration near the earth surface with wide spatial coverage and high temporal resolution. Based on the three-dimensional variational assimilation system, the PM_{2.5} data estimated by AOD are assimilated into the WRF-Chem atmospheric chemistry model. Then through the comparative analysis of control experiment and assimilation experiment, the improvement of PM_{2.5} pollution simulation by assimilation of PM_{2.5} data estimated by AOD is discussed. The results show that the assimilation of PM_{2.5} data estimated by AOD has a significant effect on the improvement of the background field, resulting in the significant

基金项目: 国家自然科学基金项目 (42271372)

作者简介: 孙二昌 (1995-), 安徽滁州人, 硕士研究生, 主要从事大气环境遥感与应用方面的研究。E-mail: sunerchang@ahnu.edu.cn

导师简介: 麻金继 (1975-), 安徽当涂人, 博士, 教授, 博士生导师, 主要从事遥感、GIS 及其基于 3S 技术的大气环境参量方面的研究。

E-mail: jinjima@ahnu.edu.cn

收稿日期: 2020-12-15; 修改日期: 2021-01-16

*通信作者。

improvement of $PM_{2.5}$ pollution prediction. And in other hand, the improvement of $PM_{2.5}$ pollution from AOD variational assimilation is different in time and space. In addition, compared with the other methods using AOD observation operators directly to assimilate AOD, this method has the advantage of easy operation.

Key words: WRF-Chem mode; Himawari-8 aerosol optical depth; $PM_{2.5}$; geographically weighted regression

0 引言

$PM_{2.5}$ 污染危害人体健康^[1]、降低大气能见度^[2]以及对气候变化^[3,4]有着重要影响。 $PM_{2.5}$ 污染的准确模拟不仅可以为公众提供及时的预报预警,而且能在大气污染防控中起到重要作用。

大气化学模式基于天气动力学与大气化学基础,能够重现大气污染物在三维空间中的反应与传输过程,是 $PM_{2.5}$ 数值模拟的重要手段^[5]。然而,由于 $PM_{2.5}$ 污染模拟的复杂性以及模式背景场(初始场)、污染排放源等的不确定性^[6-9], $PM_{2.5}$ 污染模拟存在着偏差,特别是重污染期间模拟偏差更大。资料同化是结合观测资料对模式背景场"真实"状态的一种估计方法,是改善大气污染物预报精度的重要途径^[10-12]。以往 $PM_{2.5}$ 污染模拟的同化资料多为地面观测资料或极轨卫星气溶胶光学厚度(AOD)资料。例如: Feng 等^[13]、Werner 等^[14]通过地面观测资料与中分辨率成像光谱仪(MODIS) AOD 资料的同化实验证明了观测资料同化可减少背景场气溶胶的不确定性,进而可改善 $PM_{2.5}$ 浓度的预报精度。

新一代地球静止轨道卫星 Himawari-8 发射于 2014 年 12 月 7 日,搭载了先进光学传感器 AHI (Advanced Himawari Imager),观测区域覆盖了我国大部分地区,与极轨卫星相比拥有更高的观测频次,为大气污染物模拟同化提供了更加丰富的观测资料^[15]。Zhang 等^[16]、韦海宁等^[17]、赵垒等^[18]使用 AERONET 站点观测数据对中国区域 Himawari-8 AOD 产品进行验证,结果表明 Himawari-8 AOD 产品在中国区域有较好的精度。Hong 等^[19]使用初始场优化同化方法评价了 Himawari-8 AOD 产品估算的近地面 $PM_{2.5}$ 资料同化对 $PM_{2.5}$ 污染预报的影响,结果表明由 AOD 估算得到的 $PM_{2.5}$ 资料同化能够改进 $PM_{2.5}$ 污染模拟的精度。地球静止轨道卫星 AOD 资料同化研究目前处于发展阶段^[20,21], AOD 资料的同化方法需要进一步探讨。

本文使用 Himawari-8 AOD 产品与气象再分析数据,基于地理加权回归模型(GWR)估算了近地表 $PM_{2.5}$ 浓度,利用 WRF-Chem 大气化学模式与 GSI 三维变分同化系统对 $PM_{2.5}$ 污染模拟进行同化实验,进一步探讨了高时间分辨率、高空间覆盖率的地球静止轨道卫星 AOD 资料在 $PM_{2.5}$ 污染模拟同化中的应用。本文研究成果能为卫星 AOD 资料同化相关应用提供技术支撑。

1 数据与方法

1.1 研究区域与数据

2019 年 12 月 7—10 日,华北中南部、黄淮、江淮北部、汾渭平原、江汉和四川盆地出现大范围 $PM_{2.5}$ 污染,其中河南、山东西部和河南南部均达到重污染程度。本研究基于 WRF-Chem 大气化学模式模拟了 7—10 日我国中东部地区 $PM_{2.5}$ 污染,模拟区域范围为 $100^{\circ} E \sim 130^{\circ} E$, $20^{\circ} N \sim 40^{\circ} N$ 。

地面观测 $PM_{2.5}$ 数据来自中国环境监测总站的全国城市空气质量实时发布系统。监测站连续自动监测

系统有严格的质控技术规范与日常运行维护要求, 数据质量可靠。Himawari-8 AOD 产品来自 Level 3 产品, 覆盖时间 12 月 7—10 日, 空间分辨率为 0.05°, 由 Level 2 产品经过严格的质量控制后合成。在使用观测数据前, 对数据进行了极值检查与异常值检查, 剔除了无效值与异常值。

1.2 PM_{2.5} 资料同化

基于地理回归加权模型 (GWR), 使用气象再分析场数据 [包括大气边界层高度 (PBLH)、大气相对湿度 (RH)、风场 (WINDS)] 与 Himawari-8 AOD 产品构建了近地面 PM_{2.5} 浓度估算模型^[22], 从而进行近地表 PM_{2.5} 浓度的估算。

PM_{2.5} 污染模拟通过 WRF-Chem 模式实现。WRF-Chem 模式考虑了大气污染物与气象双向反馈作用, 具有 "在线耦合" 的特点^[23]。其中, 气溶胶模块选用 GOCART^[24], 气溶胶组成包括未分类的细粒子气溶胶 P_{2.5}、硫酸盐 (Sulfate, 有效粒径为 0.242 μm)、黑碳气溶胶 (BC₁、BC₂, 有效粒径为 0.036 μm)、亲水性和疏水性有机质气溶胶 (OC₁、OC₂, 有效粒径为 0.087 μm) 以及五档不同粒径的沙尘气溶胶 (D₁: 0.2~2.0 μm; D₂: 2.0~3.6 μm; D₃: 3.6~6.0 μm; D₄: 6.0~12.0 μm; D₅: 12.0~20.0 μm) 与四档不同粒径的海盐气溶胶 (SS₁: 0.2~1.0 μm; SS₂: 1.0~3.0 μm; SS₃: 3.0~10.0 μm; SS₄: 10.0~20.0 μm)。PM_{2.5} 的浓度 $c_{PM_{2.5}}$ 为

$$c_{PM_{2.5}} = \rho_d [c_{P_{2.5}} + 1.375c_{Sulfate} + c_{BC_1} + c_{BC_2} + 1.8(c_{OC_1} + c_{OC_2}) + c_{D_1} + 0.286c_{D_2} + c_{SS_1} + 0.942c_{SS_2}], \quad (1)$$

式中 ρ_d 为干空气密度。

PM_{2.5} 观测资料 (包括由 AOD 估算的 PM_{2.5} 资料) 的同化使用 GSI 三维变分同化系统。三维变分同化方法可归结为求解函数极小值问题^[25], 代价函数 J 的一般形式为

$$J(X) = (X - X_b)^T B^{-1} (X - X_b) + (Y - HX)^T R^{-1} (Y - HX), \quad (2)$$

式中 X 表示分析场, X_b 表示背景场, B^{-1} 表示背景场误差协方差矩阵的逆, Y 表示观测数据, H 表示观测算子, R^{-1} 表示观测场误差协方差矩阵的逆。

在 GSI 同化系统中, 地面观测 PM_{2.5} 资料同化的观测算子见式 (1)。地面观测不包含 PM_{2.5} 污染的垂直廓线信息, 所以仅同化近地面污染物浓度。地面 PM_{2.5} 观测资料的观测误差由站点自身观测误差以及插值距离决定^[26], 计算公式为

$$\varepsilon_{obs} = \sqrt{(\varepsilon_m^2 + \varepsilon_{repr}^2)}, \quad (3)$$

$$\varepsilon_{repr} = \sqrt{\alpha \varepsilon_m \frac{\Delta x}{L_{repr}}}, \quad (4)$$

式中 ε_m 为仪器误差, α 为可调节参数, Δx 为模拟的网格分辨率, L_{repr} 为观测影响的半径。

在 GSI 三维变分同化系统中, PM_{2.5} 观测浓度上限一般设为 100 μg/m³, 考虑到此次污染过程 PM_{2.5} 观测浓度远大于此, 所以调整 PM_{2.5} 观测浓度上限至 400 μg/m³。

背景场误差通过使用国家气象中心 (NMC) 方法统计获得。首先模拟 2019 年 12 月 7—10 日每日 03:00 和 06:00 (UTC 时间) 的 48 h 预报和 24 h 预报, 然后使用 GEN_BE 程序^[27] 计算得到。NMC 方法^[28] 的计算公式为

$$B = \overline{(X_b - X_t)(X_b - X_t)^T} \approx \overline{(X^{48h} - X^{24h})(X^{48h} - X^{24h})^T}, \quad (5)$$

式中 X_b 为背景场, X_t 为真实场, X^{48h} 、 X^{24h} 分别为对同一时刻提前 48 h、24 h 预报。

1.3 实验设计

为探究地球静止轨道卫星 Himawari-8 AOD 产品估算的近地面 $PM_{2.5}$ 资料同化对 $PM_{2.5}$ 污染模拟的影响, 设计了四组 $PM_{2.5}$ 污染模拟实验 (参见表 1)。第一组实验为控制实验 (CONTROL), 用于观测资料同化效果的对照, 其余三组实验分别为 AOD 估算资料同化实验 (AODDA)、地面观测资料同化实验 (SITEDA)、同时同化地面观测资料与 AOD 估算资料实验 (BOTHDA)。在所有的实验中, WRF-Chem 模式的模拟区域与物理化学方案设置相同, 模拟时间为 2019 年 12 月 7—10 日。

表 1 同化实验方案

Table 1 Assimilation experiments scheme

Number	Experiment names	Assimilation windows (UTC)
1	Reference experiment (CONTROL)	None
2	$PM_{2.5}$ estimated by AOD data assimilation (AODDA)	2019-12-07(03:00, 06:00), 2019-12-08(03:00, 06:00), 2019-12-09
3	Ground station data assimilation (SITEDA)	(03:00, 06:00), 2019-12-10(03:00, 06:00)
4	Simultaneous assimilation of ground station and estimated $PM_{2.5}$ data (BOTHDA)	

在 $PM_{2.5}$ 污染模拟实验中, 相关参数设置为: 投影为 Lambert, 区域中心坐标为 (110° E, 32° S), 网格尺度为 $27\text{ km} \times 27\text{ km}$, 水平网格个数为 108 (东西方向) \times 98 (南北方向), 垂直网格个数为 40, 侧边界条件设置为理想大气成分。Spin-up 时间设置为前 5 天。化学参数: 化学机制为 RACM (Regional atmospheric chemistry mechanism) 方案, 光解作用方案为 TUV。物理参数: 微物理方案为 WMS5, 边界层方案为 YSU, 积云对流参数化方案为 Grell3D, 长波辐射方案为 RTTM, 短波辐射方案为 Goddard, 陆面过程方案为 Noah。污染物排放清单数据为中国多尺度排放清单模型 MEIC 排放清单数据 (<http://www.meicmodel.org/>)。气象资料为美国国家大气中心 (NCAR) 提供的时间分辨率为 6 h、空间分辨率为 $0.25^\circ \times 0.25^\circ$ 的全球天气再分析资料。

在资料同化实验中, 采用的是循环同化方法。同化时间窗口为 3 h。2019 年 12 月 7 日 03:00 同化后, 向后预报 3 h 作为 7 日 06:00 的同化背景场; 7 日 6 时同化后, 向后预报 20 h 做为 8 日 03:00 的同化背景场, 一直循环同化预报至 2019 年 12 月 10 日结束。

1.4 同化效果评价方法

为定量评价资料同化对 $PM_{2.5}$ 污染模拟的影响, 选取了绝对平均误差 (MAE, E_{MA})、均方根误差 (RMSE, E_{RMS}) 以及相关系数 r 三个指标用于同化效果的评价, 指标的计算公式分别为

$$E_{MA} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |P_i - O_i|, \quad (6)$$

$$E_{RMS} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (P_i - O_i)^2}, \quad (7)$$

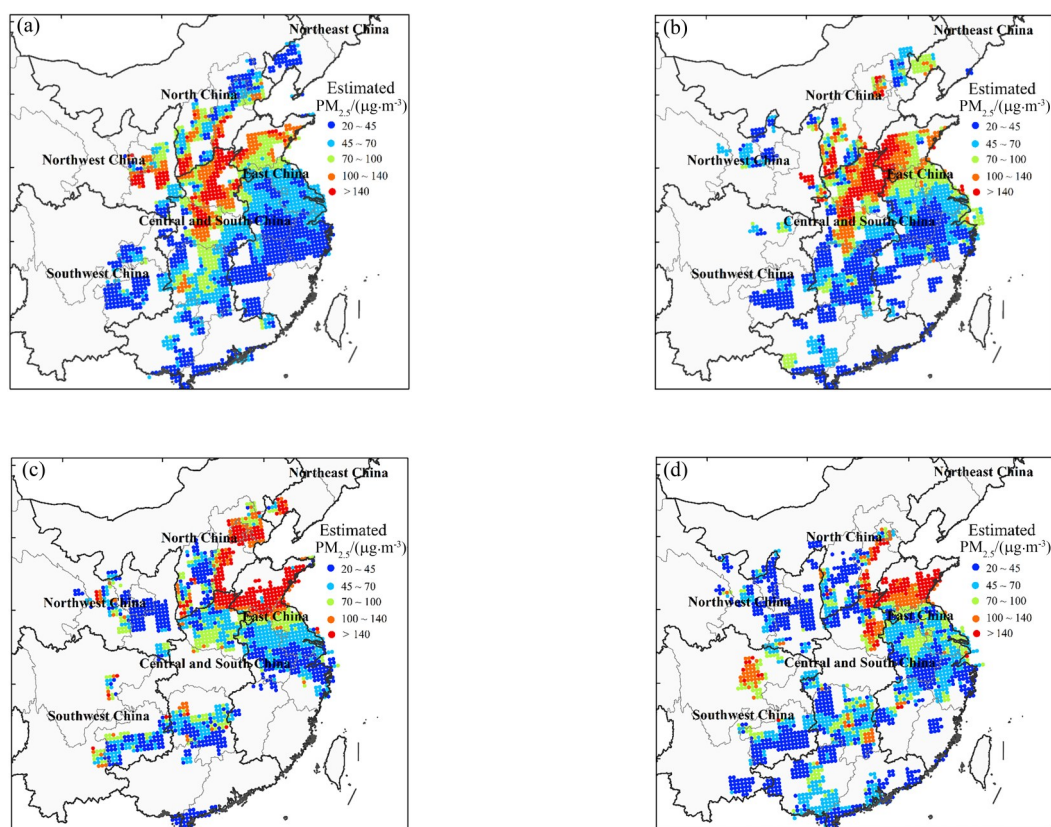
$$r = \frac{\sum_{i=1}^N (P_i - \bar{P})(O_i - \bar{O})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (P_i - \bar{P})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})^2}}, \quad (8)$$

式中 P_i 、 O_i 分别代表第 i 个站点模式模拟与站点观测的 PM_{2.5} 浓度, \bar{P} 、 \bar{O} 分别代表参与指标计算的模式模拟与地面观测的 PM_{2.5} 浓度均值。

2 结果与讨论

2.1 近地面 PM_{2.5} 估算结果

图 1 为 2019 年 12 月 7—10 日 Himawari-8 AOD 产品估算的近地表 PM_{2.5} 浓度空间分布情况。由图可知, AOD 估算的近地面 PM_{2.5} 具有空间覆盖范围广、聚集性高的特点, 可为 PM_{2.5} 模拟同化提供更为丰富的 PM_{2.5} 空间分布信息。从图 1 中各分图的比较中可以看出, 估算的 PM_{2.5} 浓度具有明显的时空差异, 7 日华北地区、华东地区北部、中南地区北部是本次污染中 PM_{2.5} 的高值区, 随着时间的推移, 8—10 日 PM_{2.5} 污染向北推移。这一现象与徐冉等^[29]的分析结果一致。为进一步证实 PM_{2.5} 浓度估算结果的可靠性, 将地面观测 PM_{2.5} 数据与估算结果进行比较。图 2 为 2019 年 12 月 7—10 日估算的近地面 PM_{2.5} 浓度与地面观测 PM_{2.5} 数据的比较结果。由图可知, 7—10 日估算的 PM_{2.5} 相关系数 r 均值为 0.85, MAE 与 RMSE 均值分别为 16.36 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 、27.07 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, 与同类研究的估算水平相当^[30], 表明估算结果是可靠的。



注: 此图基于国家自然资源部标准地图服务系统的标准地图 [审图号: GS(2020)4619 号] 绘制, 底图无修改

图 1 Himawari-8 AOD 产品估算的近地表 PM_{2.5} 浓度空间分布。(a) 12 月 7 日; (b) 12 月 8 日; (c) 12 月 9 日; (d) 12 月 10 日

Fig. 1 The spatial distribution of PM_{2.5} concentration near the surface estimated by Himawari-8 AOD. (a) December 7; (b) December 8; (c) December 9; (d) December 10

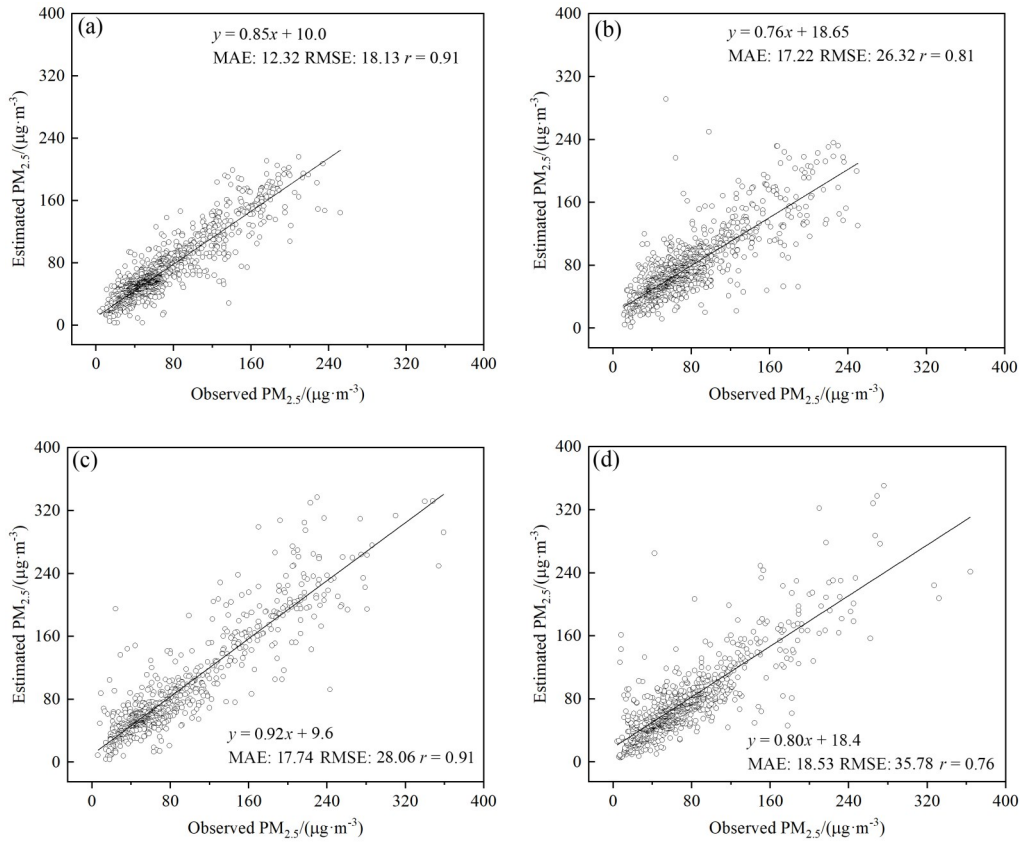


图2 Himawari-8 AOD产品估算的近地表PM_{2.5}浓度与地面观测PM_{2.5}浓度的比较。(a) 12月7日; (b) 12月8日; (c) 12月9日; (d) 12月10日

Fig. 2 Comparison of the near-surface PM_{2.5} concentration estimated by Himawari-8 AOD product and the surface-observed PM_{2.5} concentration. (a) December 7; (b) December 8; (c) December 9; (d) December 10

2.2 背景场PM_{2.5}的改进效果

为探究不同实验组资料同化对PM_{2.5}背景场的改进作用, 分别将实验组背景场PM_{2.5}浓度与地面观测PM_{2.5}浓度进行了对比。从图3(a)中可以看出, CONTROL实验中背景场PM_{2.5}浓度与地面观测PM_{2.5}浓度的线性回归方程为 $y = 0.38x + 41.12$, r 为0.43, MAE、RMSE分别为 $38.01 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 和 $55.61 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 。图3(b)中, AODDA实验中的背景场PM_{2.5}浓度与地面观测PM_{2.5}浓度的线性回归方程为 $y = 0.57x + 33.56$, r 为0.67, MAE、RMSE分别为 $27.79 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 、 $42.29 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 。AOD估算的PM_{2.5}资料同化后, r 较CONTROL实验提升了0.24, MAE、RMSE分别减少了 $10.22 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 和 $13.32 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 。图3(c)中, SITEDA实验背景场PM_{2.5}浓度与地面观测PM_{2.5}浓度的回归方程为 $y = 0.71x + 19.95$, r 为0.86, MAE、RMSE分别为 $17.36 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 、 $27.93 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 。图3(d)中, BOTHDA实验背景场PM_{2.5}浓度与地面观测PM_{2.5}浓度的回归方程为 $y = 0.71x + 20.80$, r 为0.87, MAE、RMSE分别为 $17.39 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 、 $27.17 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 。综上可知, SITEDA与BOTHDA实验对背景场PM_{2.5}浓度的改进效果相当, 好于AODDA实验的改进效果, 这可能与近地面PM_{2.5}的估算精度以及同化站点与验证站点的空间位置有关, 因为当估算的PM_{2.5}资料混入地面观测PM_{2.5}资料后, 同化结果的评价指标有了较大的改进。

表2统计了各组同化实验在不同时刻同化效果的评价指标。由表可知, AODDA实验中对背景场PM_{2.5}浓度MAE改进的均值为 $10 \mu\text{g}/\text{m}^3$, RMSE改进的均值为 $13 \mu\text{g}/\text{m}^3$, r 提升区间 $0.11 \sim 0.39$, 极大值出现在T₆时刻

(9日 06:00); SITEDA 实验中, MAE、RMSE 改进的均值分别为 21 μg/m³、27 μg/m³, r 改进区间为 0.29~0.53, 提升极大值也出现在 T₆ 时刻; BOTHDA 实验中出现了相同的现象。可以认为, 资料同化对背景场 PM_{2.5} 的改进效果存在时间上的差异, 随模拟时间增加改进效果呈增加趋势, T₆ 时刻为提升效果极大时刻。分析原因可能为: 在 7—10 日的这次 PM_{2.5} 污染中, 徐冉等^[29]指出自 7 日开始发展, 8 日凌晨西北地区东部以及中南地区北部等地的 PM_{2.5} 快速累积至重度污染, 并于 8—10 日发展成为全国性的大范围 PM_{2.5} 污染天气, 至 10 日中午前后, 受新一轮冷空气的影响, PM_{2.5} 污染开始消散。在这一污染发展过程中, PM_{2.5} 污染逐渐加重, PM_{2.5} 以及相关前体物质开始大范围累积, 在重污染条件下相关部门往往会对部分污染排放进行人为管控, 导致了排放清单数据的偏差, 致使 PM_{2.5} 模拟精度下降。这一点可从 CONTROL 实验的 MAE、RMSE 增加以及 r 指标减小的趋势看出。因此可认为, 在 PM_{2.5} 污染过程的不同发展阶段, 同化对背景场改进效果总体上表现为随模拟偏差的增大而增大。

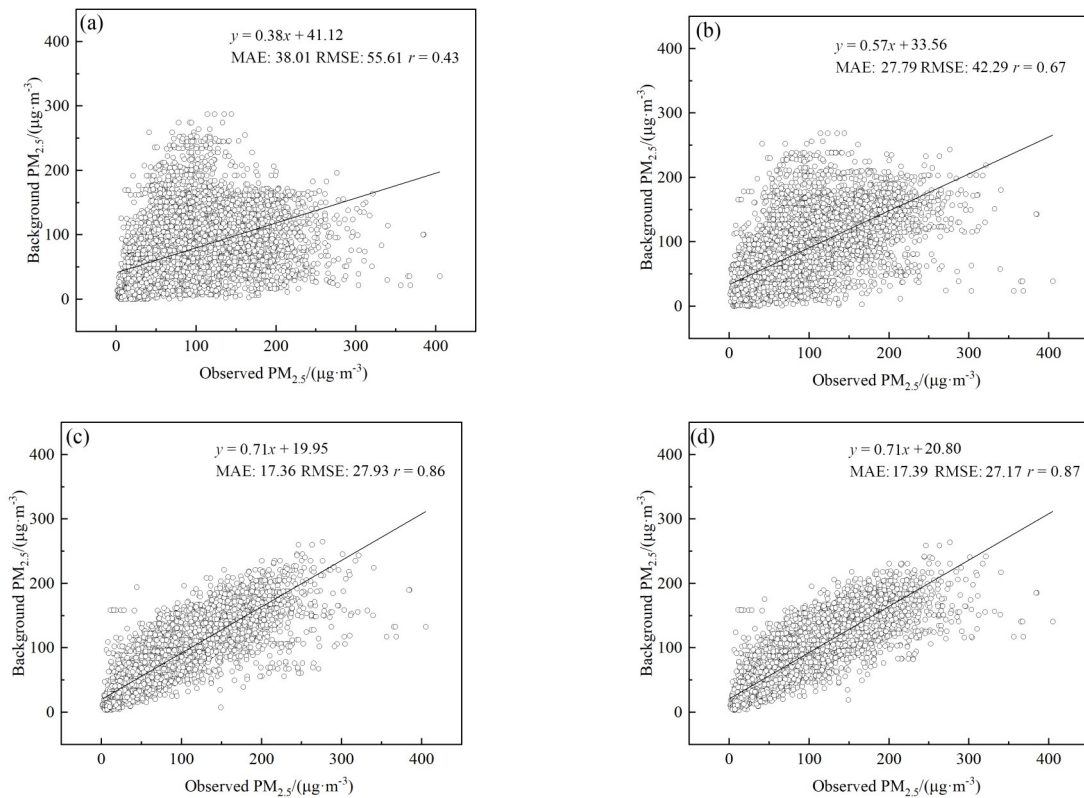


图 3 背景场 PM_{2.5} 浓度与地面观测 PM_{2.5} 浓度散点图。(a) CONTROL 实验; (b) AODDA 实验; (c) SITEDA 实验; (d) BOTHDA 实验

Fig. 3 Scatter plot of PM_{2.5} concentration in background field and PM_{2.5} concentration observed on the ground. (a) CONTROL experiment; (b) AODDA experiment; (c) SITEDA experiment; (d) BOTHDA experiment

2.3 预报场 PM_{2.5} 改进的空间差异

在各组 PM_{2.5} 污染模拟实验中, 每日 07:00 至次日 02:00, 即下一次同化时刻前为 PM_{2.5} 预报时段。为评价同化实验中预报场 PM_{2.5} 的改进效果, 将实验中 PM_{2.5} 模拟浓度与地面观测 PM_{2.5} 浓度进行逐站点比较。图 4 给出了对比实验中 PM_{2.5} 逐站点的 MAE、RMSE 以及 r 统计情况。依据图 4 (a)、(b), PM_{2.5} 浓度模拟结果的偏差存在空间差异。其中, 中南地区南部、华东地区中南部以及西北地区中部 PM_{2.5} 浓度模拟结果的 MAE、RMSE

表2 2019年12月7—10日背景场PM_{2.5}同化评价指标统计与评价指标统计差值Table 2 The difference between the PM_{2.5} assimilation inspection index and the verification index in the background field on December 7—10, 2019

Assimilation windows	CONTROL			AODDA			SITEDA			BOTHDA		
	MAE/ ($\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$)	RMSE/ ($\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$)	r	$\Delta\text{MAE}/$ ($\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$)	$\Delta\text{RMSE}/$ ($\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$)	Δr	$\Delta\text{MAE}/$ ($\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$)	$\Delta\text{RMSE}/$ ($\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$)	Δr	$\Delta\text{MAE}/$ ($\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$)	$\Delta\text{RMSE}/$ ($\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$)	Δr
T ₁	28.0	39.0	0.60	-5.4	-5.9	0.11	-14.4	-20.0	0.30	-14.1	-19.0	0.30
T ₂	26.4	38.5	0.64	-8.7	-12.5	0.2	-14.3	-20.5	0.29	-13.9	-20.0	0.29
T ₃	34.9	50.5	0.53	-7.1	-11.3	0.16	-17.1	-24.2	0.34	-17.1	-23.7	0.34
T ₄	35.1	51.3	0.49	-11.6	-15.8	0.26	-17.9	-21.1	0.34	-18.4	-24.5	0.38
T ₅	45.0	63.3	0.36	-10.3	-12.4	0.23	-24.5	-32.5	0.48	-24.5	-32.5	0.48
T ₆	46.2	64.5	0.37	-17.2	-22.4	0.39	-28.1	-35.7	0.53	-28.1	-37.2	0.54
T ₇	46.1	66.6	0.29	-10.2	-10.8	0.17	-26.1	-32.7	0.52	-25.1	-32.4	0.51
T ₈	42.8	63.8	0.32	-11.9	-16.2	0.27	-24.2	-32.7	0.53	-24.3	-34.1	0.54

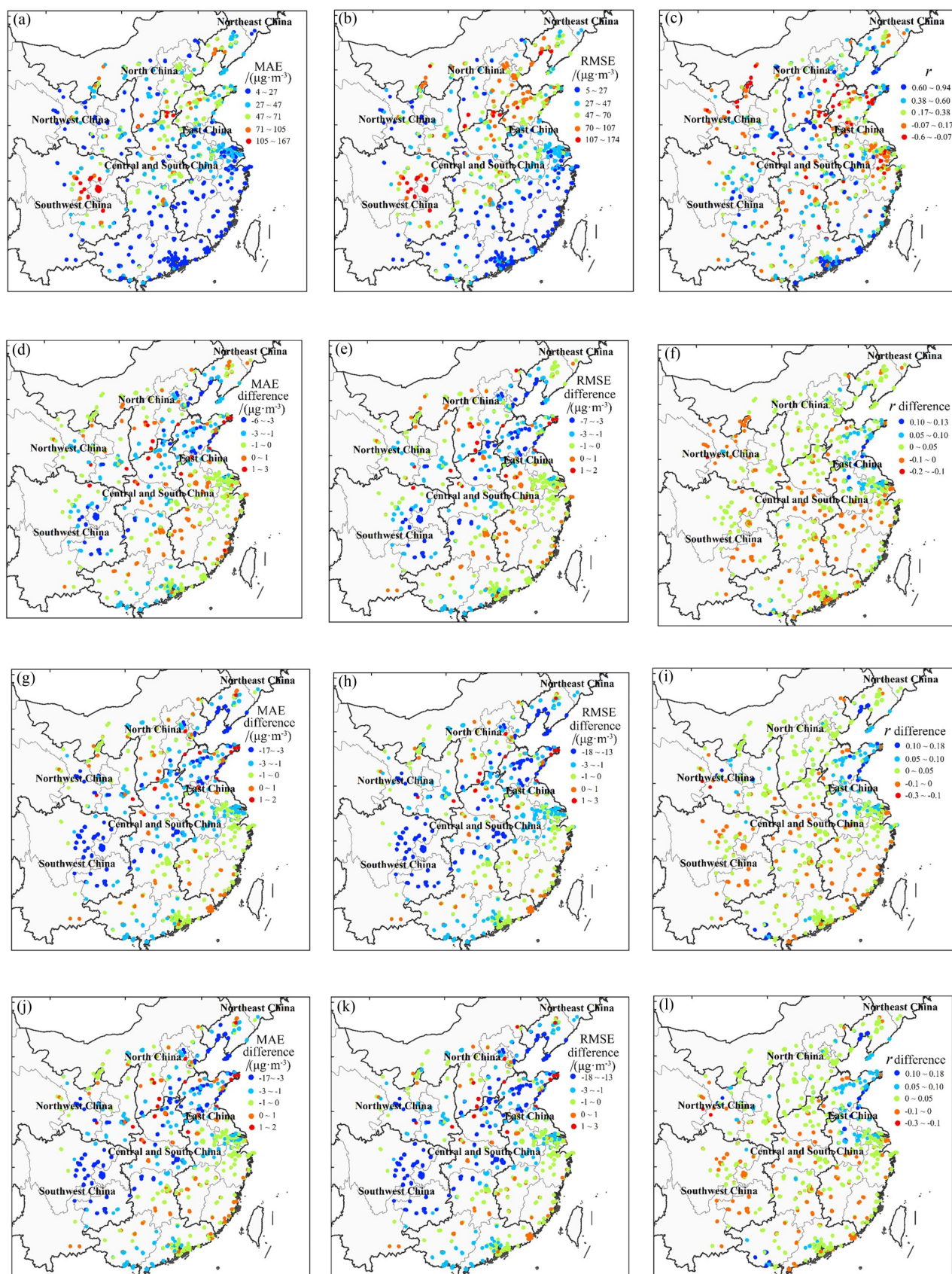
注: 同化时刻T₁—T₈分别代表UTC时间12月7—10日的每天03:00与06:00

相对较小, 偏差均小于 50 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, 对于偏差低值聚集区而言, 区域内部估计指标差异较小; 西南地区、中南地区北部以及华北地区模拟偏差较大且出现 "扎堆" 现象, MAE、RMSE 检验指标均在 70~170 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 范围; PM_{2.5} 模拟值与观测值 r 较好的站点主要出现在中南地区、西南地区以及西北地区东部, r 检验指标大于 0.6; 华东地区东北部以及西北地区中部的相关性较差。分析 CONTROL 实验中 PM_{2.5} 模拟偏差出现空间差异的原因, 可能与 PM_{2.5} 复杂的反应过程及前体污染物、污染排放源、气象条件等因素的不确定性有关。

以 CONTROL 实验中模拟偏差较大的西南地区、中南地区北部以及华东地区北部为例, 分析资料同化对 PM_{2.5} 预报的改进作用。从图 4 (d)、(e) 中可以发现, AOD 估算的 PM_{2.5} 资料同化对 PM_{2.5} 预报的偏差改进区间在 1~6 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 。通过比较图 4 (g)、(h) 与图 4 (j)、(k) 可以发现, SITEDA 与 BOTHDA 实验中 PM_{2.5} 偏差的改进效果相近。依据图 4 (j)、(k) 可以发现, 同时同化 AOD 估算的 PM_{2.5} 资料与地面观测的 PM_{2.5} 资料对 PM_{2.5} 的 MAE 与 RMSE 偏差改进区间分别为 1~17 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 和 1~18 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, RMSE 改进高于 3 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 的站点较 AODDA 实验中的数量增加了一倍左右。

综合比较图 4 (d)、(e)、(g)、(h)、(j)、(k) 可以得出, 同化实验在 CONTROL 实验中 PM_{2.5} 模拟偏差较大的地方对模拟偏差 MAE、RMSE 改进效果会更好。具体表现在, CONTROL 实验中 PM_{2.5} 浓度模拟偏差较大的西南地区、中南地区北部以及华北地区是同化改进效果最好的区域。同样地, 中南地区南部、华东地区中南部以及西北地区中部在 CONTROL 实验中 PM_{2.5} 模拟偏差 MAE、RMSE 相对较小, 同化对这些区域 PM_{2.5} 模拟偏差的改进效果也较弱。同化对 PM_{2.5} 预报的相关性改进在空间分布也呈现类似的特点。由图 4 (f)、(i)、(l) 可知, CONTROL 实验中华东地区东北部是 PM_{2.5} 模拟相关性较差的地区, 也是同化后 r 指标改进最好的地区。

将同化对 PM_{2.5} 污染模拟的改进效果与其他学者^[31]的研究结果进行了比较。在 RMSE、 r 指标上, 改进效果相近。但在西南地区, 其他学者同化结果表明 RMSE 改进的数值在 10~30 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 范围, 而在本研究中 BOTHDA 实验的提升区间在 4~17 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 。综上所述, 观测资料同化对 PM_{2.5} 预报场的改进作用积极, 三组同化实验改进的空间分布上较为接近。



注: 此图基于国家自然资源部标准地图服务系统的标准地图 [审图号: GS(2020)4619号] 绘制, 底图无修改

图4 MAE、RMSE、 r 指标空间分布。(a)–(c) CONTROL 实验; (d)–(f) AODDA 实验; (g)–(i) SITEDA 实验;
(j)–(l) BOTHDA 实验

Fig. 4 The spatial distribution of MAE, RMSE and r indicators. (a)–(c) CONTROL experiment; (d)–(f) AODDA experiment;
(g)–(i) SITEDA experiment; (j)–(l) BOTHDA experiment

2.4 预报场 $PM_{2.5}$ 改进的持续性

图5为同化实验预报改善效果的时序比较结果。其中横轴为预报时长, 0~20 h表示12月7日06:00同化后至第12月8日03:00同化前的预报时段, 20~40 h表示12月8日06:00同化后至12月9日03:00同化前的预报时长, 以此类推。从图5中各项评价指标曲线的变化趋势可以看出, 各组同化实验同化后的模拟偏差比参照实验的偏差更低, 相关性也有所提升, 改进时长可持续至两次同化间隔的20 h。通过比较AODDA、SITEDA以及BOTHDA曲线的变化可以发现, BOTHDA与SITEDA实验中对 $PM_{2.5}$ 预报的改进能够持续相对更长的时间。AODDA、SITEDA以及BOTHDA实验MAE改进的极大值分别为2.9、5.1、5.0 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, RMSE极大值分别为4.1、7.1、7.1 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 。从预报改进的均值来看, 三者的MAE分别为1、1.8、2.1 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, RMSE分别为1.5、2.7、3.1 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 。

从 $PM_{2.5}$ 预报的不同时段来看, 预报效果改进幅度随模拟时长的增加而增加, 12月9–10日同化改进效果要好于7–8日的改进。随着 $PM_{2.5}$ 模拟时长的增加, 预报模式积累的误差也随之增加, 表现为参照实验中的偏差指标曲线呈上升趋势, 相关性指标数值降低, 但同化改进效果却随着误差积累增加而增加。可以认为, 观测资料同化在 $PM_{2.5}$ 模拟偏差较大的时段对 $PM_{2.5}$ 预报的改进效果更好。

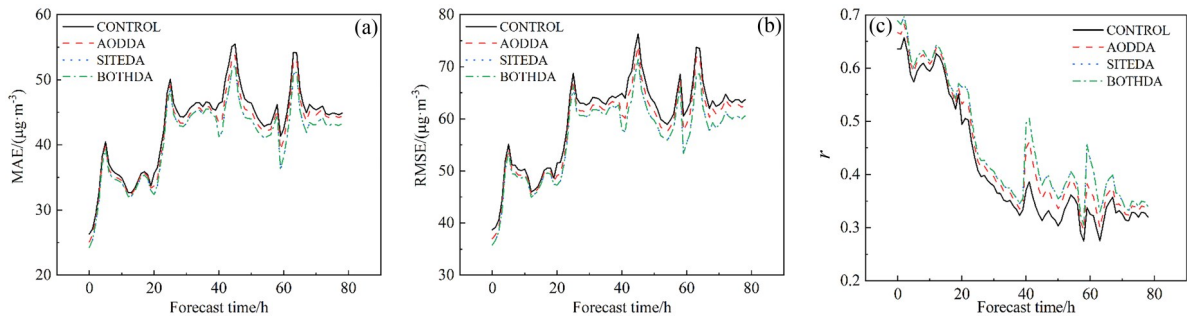


图5 同化实验预报改善效果的时序比较。(a) MAE; (b) RMSE; (c) r

Fig. 5 Time series comparison of assimilation experiment forecast improvement effect. (a) MAE; (b) RMSE; (c) r

2.5 同化对垂直方向 $PM_{2.5}$ 的影响

$PM_{2.5}$ 浓度不仅受到水平方向传输影响, 而且受到垂直方向上的影响。Jiang等^[32]指出, 垂直方向的传输是影响同化效果的重要因素。为探究近地面观测资料同化对垂直方向 $PM_{2.5}$ 浓度的影响, 对不同实验组垂直方向的 $PM_{2.5}$ 浓度进行了统计分析。图6(a)描述了参照实验中模拟的 $PM_{2.5}$ 垂直方向整层均值随时间变化情况, 横轴的含义与图5中的相同, 纵轴为垂直层高度。从图6(a)中可以看出, 整层 $PM_{2.5}$ 模拟均值在垂直方向随高度增加而减少, 模拟的 $PM_{2.5}$ 主要分布在高度1 km以下, 浓度均值在15~55 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, 高于1 km且小于3 km的 $PM_{2.5}$ 浓度均值在1~10 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, 高于3 km的 $PM_{2.5}$ 浓度均值小于1 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 。图6(b)、(c)、(d)分别为AODDA、SITEDA以及BOTHDA实验 $PM_{2.5}$ 模拟的垂直方向整层 $PM_{2.5}$ 均值与CONTROL实验的差值。从近地面 $PM_{2.5}$ 资料同化对垂直方向 $PM_{2.5}$ 浓度模拟结果的影响来看, 观测资料同化对模拟的近地面 $PM_{2.5}$ 浓度影

响最大, 在 5~7 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 范围; 对近地表至垂直高度 2 km 范围而言, 影响小于 2 $\mu\text{g}/\text{m}^3$; 高于 2 km 范围影响可以忽略不计。从同化对垂直方向模拟的 PM_{2.5} 浓度影响的程度来看, AODDA 与 BOTHDA 实验对 PM_{2.5} 垂直方向的影响范围要大于 SITEDA 站点资料同化。总结来看, 近地表 PM_{2.5} 观测资料的同化对不同垂直高度上的 PM_{2.5} 浓度的分布存在一定的影响, 不同垂直高度的 PM_{2.5} 存在相互影响, 同化不同垂直高度上的 PM_{2.5} 对近地表 PM_{2.5} 模拟改进是有益的。

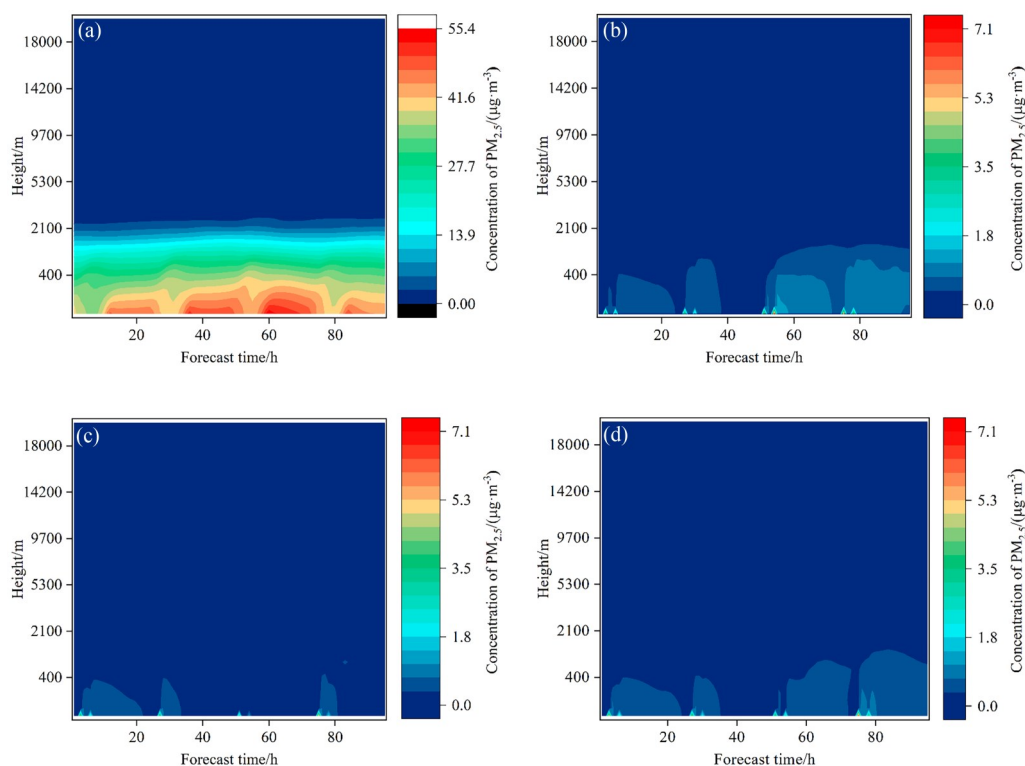


图 6 同化前后 PM_{2.5} 垂直方向整层均值的时序比较。(a) 参照实验; (b) 参照实验与 AODDA 的差值; (c) 参照实验与 SITEDA 差值; (d) 参照实验与 BOTHDA 差值

Fig. 6 Temporal series comparison of the vertical whole layer mean of PM_{2.5} before and after assimilation. (a) Reference experiment; (b) difference between reference experiment and AODA; (c) difference between reference experiment and SITEDA; (d) difference between reference experiment and BOTHDA

3 结 论

使用三维变分同化系统 (GSI) 同化了由 Himawari-8 AOD 产品估算的近地面 PM_{2.5} 资料, 设计控制实验与同化实验并结合地面观测 PM_{2.5} 数据对同化效果进行了评价。主要结论: 1) 估算的 PM_{2.5} 资料同化对 PM_{2.5} 污染模拟的改进作用明显, 对背景场 PM_{2.5} 的绝对平均误差 (MAE)、均方根误差 (RMSE) 分别改进了 10.22 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 、13.32 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, r 较 CONTROL 实验提升了 0.24; 对预报场 PM_{2.5} 的 MAE、RMSE 改进区间在 1~6 $\mu\text{g}/\text{m}^3$; 对预报场持续改进方面, MAE 与 RMSE 改进的极大值分别为 2.9 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 和 4.1 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, 改进均值分别为 1 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 和 1.5 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 。2) 资料同化对 PM_{2.5} 模拟改进效果存在时空差异, 在西南地区、中南地区北部以及华东地区北部等 CONTROL 实验中模拟效果表现较差的地区改进效果更加显著; 9—10 日模拟偏差较大的时段是改善效果

最明显的时段。较其他研究中使用AOD观测算子直接同化AOD资料的方法,同化AOD估算的 $PM_{2.5}$ 资料避免了AOD资料与硫酸盐、黑碳气溶胶、有机质气溶胶等 $PM_{2.5}$ 组成物质之间复杂的观测算子推演过程,使得AOD资料的同化变得简单可行。

研究还发现,影响同化AOD估算的 $PM_{2.5}$ 资料对 $PM_{2.5}$ 污染模拟改进效果的因素包括近地面的 $PM_{2.5}$ 的估算精度与 $PM_{2.5}$ 的垂直廓线信息。一方面可以使用深度学习、物理模型加深度学习的方式提高AOD对近地面 $PM_{2.5}$ 浓度的估算精度;另一方面可以同化 $PM_{2.5}$ 的垂直维信息,以改进 $PM_{2.5}$ 的模拟效果。

参考文献:

- [1] Xue T, Liu J, Zhang Q, *et al.* Rapid improvement of $PM_{2.5}$ pollution and associated health benefits in China during 2013–2017 [J]. *Science China Earth Sciences*, 2020, 04(50): 441-452.
薛涛, 刘俊, 张强, 等. 2013~2017年中国 $PM_{2.5}$ 污染的快速改善及其健康效益 [J]. 中国科学:地球科学, 2020, 04(50): 441-452.
- [2] Wang J K, Zhang H D, Gui H L, *et al.* Relationship between atmospheric visibility and $PM_{2.5}$ concentrations and distributions [J]. *Environmental Science*, 2019, 40(7): 2985-2993.
王继康, 张恒德, 桂海林, 等. 能见度与 $PM_{2.5}$ 浓度关系及其分布特征 [J]. 环境科学, 2019, 40(7): 2985-2993.
- [3] Rosenfeld D, Zhu Y N, Wang M H, *et al.* Aerosol-driven droplet concentrations dominate coverage and water of oceanic low-level clouds [J]. *Science*, 2019, 363(6427): eaav0566.
- [4] Li Z Q. Impact of aerosols on the weather, climate and environment of China: An overview [J]. *Transactions of Atmospheric Sciences*, 2020, 43(1): 76-92.
李占清. 气溶胶对中国天气、气候和环境的影响综述 [J]. 大气科学学报, 2020, 43(1): 76-92.
- [5] Xue W B, Wang J N, Yang J T, *et al.* Domestic and foreign research progress of air quality model [J]. *Environment and Sustainable Development*, 2013, 38(3): 14-20.
薛文博, 王金南, 杨金田, 等. 国内外空气质量模型研究进展 [J]. 环境与可持续发展, 2013, 38(3): 14-20.
- [6] Srivastava R, Bran S H. Impact of dynamical and microphysical schemes on black carbon prediction in a regional climate model over India [J]. *Environmental Science and Pollution Research*, 2018, 25(15): 14844-14855.
- [7] Gilliam R C, Hogrefe C, Godowitch J M, *et al.* Impact of inherent meteorology uncertainty on air quality model predictions [J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2015, 120(23): 12259-12280.
- [8] Derwent R G. Monte Carlo analyses of the uncertainties in the predictions from global tropospheric ozone models: Tropospheric burdens and seasonal cycles [J]. *Atmospheric Environment*, 2020, 231: 117545.
- [9] Hu Y W, Zang Z L, Ma X Y, *et al.* Research on the effects of assimilation meteorological observation data on aerosol concentration [J]. *China Environmental Science*, 2019, 39(2): 523-532.
胡译文, 臧增亮, 马晓燕, 等. 气象资料同化对 $PM_{2.5}$ 预报影响的模拟分析 [J]. 中国环境科学, 2019, 39(2): 523-532.
- [10] Bocquet M, Elbern H, Eskes H, *et al.* Data assimilation in atmospheric chemistry models: Current status and future prospects for coupled chemistry meteorology models [J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2015, 15(10): 5325-5358.
- [11] Zhu J, Tang X, Wang Z F, *et al.* A review of air quality data assimilation methods and their application [J]. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences*, 2018, 42(3): 607-620.
朱江, 唐晓, 王自发, 等. 大气污染资料同化与应用综述 [J]. 大气科学, 2018, 42(3): 607-620.

- [12] Li X, Liu F, Fang M. Harmonizing models and observations: Data assimilation in Earth system science[J]. *Science China Earth Sciences*, 2020, 50(9): 1185-1194
李新, 刘丰, 方苗. 模型与观测的和弦: 地球系统科学中的数据同化 [J]. 中国科学: 地球科学, 2020, 50(9): 1185-1194.
- [13] Feng S Z, Jiang F, Jiang Z. Impact of 3DVAR assimilation of surface PM_{2.5} observations on PM_{2.5} forecasts over China during wintertime [J]. *Atmospheric Environment*, 2018, 187: 34-49.
- [14] Werner M, Kryza M, Pagowski M. Assimilation of PM_{2.5} ground base observations to two chemical schemes in WRF-Chem—The results for the winter and summer period [J]. *Atmospheric Environment*, 2019, 200: 178-189.
- [15] Bessho K, Date K J, Hayashi M, et al. An introduction to Himawari-8/9—Japan's new-generation geostationary meteorological satellites [J]. *Journal of the Meteorological Society of Japan Ser II*, 2016, 94(2): 151-183.
- [16] Zhang T X, Zang L, Mao F Y, et al. Evaluation of Himawari-8/AHI, MERRA-2, and CAMS aerosol products over China [J]. *Remote Sensing*, 2020, 12(10): 1684.
- [17] Wei H N, Wang W Z, Xu F N, et al. Evaluation and application of the Himawari-8 aerosol products [J]. *Remote Sensing Technology and Application*, 2019, 34(5): 1005-1015.
韦海宁, 王维真, 徐菲楠, 等. Himawari-8 气溶胶产品的验证及应用 [J]. 遥感技术与应用, 2019, 34(5): 1005-1015.
- [18] Zhao L, Xin J Y, Yang L K, et al. Validation analysis of Himawari-8 aerosol optical depth products [J]. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences*, 2020, 44(3): 455-471.
赵垒, 辛金元, 杨磊库, 等. Himawari-8 气溶胶光学厚度产品的验证分析 [J]. 大气科学, 2020, 44(3): 455-471.
- [19] Hong J, Mao F, Min Q. Improved PM_{2.5} predictions of WRF-Chem via the integration of Himawari-8 satellite data and ground observations [J]. *Environmental Pollution*, 2020, 263: 114451.
- [20] Yumimoto K, Nagao T M, Kikuchi M, et al. Aerosol data assimilation using data from Himawari-8, a next-generation geostationary meteorological satellite [J]. *Geophysical Research Letters*, 2016, 43(11): 5886-5894.
- [21] Xia X L, Min J, Shen F, et al. Aerosol data assimilation using data from Fengyun-4A, a next-generation geostationary meteorological satellite [J]. *Atmospheric Environment*, 2020, 237: 117695.
- [22] Yao F, Wu J S, Li W F, et al. Estimating daily PM_{2.5} concentrations in Beijing using 750-m VIIRS IP AOD retrievals and a nested spatiotemporal statistical model [J]. *Remote Sensing*, 2019, 11(7): 841-860.
- [23] Grell G A, Peckham S E, Schmitz R, et al. Fully coupled "online" chemistry within the WRF model [J]. *Atmospheric Environment*, 2005, 39(37): 6957-6975.
- [24] Pagowski M, Grell G A, McKeen S A, et al. Three-dimensional variational data assimilation of ozone and fine particulate matter observations: Some results using the Weather Research and Forecasting-Chemistry model and Grid-point Statistical Interpolation [J]. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 2010, 136(653): 2013-2024.
- [25] Ma J W, Qin S X. Recent advances and development of data assimilation algorithms [J]. *Advances in Earth Science*, 2012, 27(7): 747-757.
马建文, 秦思娴. 数据同化算法研究现状综述 [J]. 地球科学进展, 2012, 27(7): 747-757.
- [26] Pagowski M, Liu Z, Grell G A, et al. Implementation of aerosol assimilation in gridpoint statistical interpolation (v. 3.2) and WRF-chem (v. 3.4.1) [J]. *Geoscientific Model Development*, 2014, 7(4): 1621-1627.
- [27] Descombes G, Auligné T, Vandenberghe F, et al. Generalized background error covariance matrix model (GEN_BE v2.0) [J]. *Geoscientific Model Development*, 2015, 8(3): 669-696.
- [28] Zang Z L, Hao Z L, Li Y, et al. Background error covariance with balance constraints for aerosol species and applications in variational data assimilation [J]. *Geoscientific Model Development*, 2016, 9(8): 2623-2638.
- [29] Xu R, Gui H L, Jiang Q, et al. Analysis of the December 2019 atmospheric circulation and weather [J]. *Meteorological Monthly*, 2020, 46(3): 441-448.
徐冉, 桂海林, 江琪, 等. 2019年12月大气环流和天气分析 [J]. 气象, 2020, 46(3): 441-448.

- [30] Liu L Y, Zhang Y J, Li Y S, *et al.* PM_{2.5} inversion using remote sensing data in Eastern China based on deep learning [J]. *Environmental Science*, 2020, 41(4): 1513-1519.
刘林钰, 张永军, 李彦胜, 等. 基于深度学习的华东地区PM_{2.5}浓度遥感反演 [J]. 环境科学, 2020, 41(4): 1513-1519.
- [31] Wang D, You W, Zang Z, *et al.* A three-dimensional variational data assimilation system for a size-resolved aerosol model: Implementation and application for particulate matter and gaseous pollutant forecasts across China [J]. *Scientia Sinica (Terrae)*, 2020, 50(9): 1302-1315.
汪代春, 尤伟, 臧增亮, 等. 气溶胶和气态污染物三维变分协同同化 [J]. 中国科学: 地球科学, 2020, 50(9): 1302-1315.
- [32] Jiang Z, Liu Z, Wang T, *et al.* Probing into the impact of 3DVAR assimilation of surface PM₁₀ observations over China using process analysis [J]. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, 2013, 118(12): 6738-6749.