

《深圳市环境空气质量预报预警技术规范》

编制说明

《深圳市环境空气质量预报预警技术规范》 标准编制组

二〇二〇年三月

项目名称：深圳市环境空气质量预报预警技术规范

项目统一编号：

承担单位：深圳市环境监测中心站

暨南大学

华南环境科学研究所

编制组主要成员：深圳市环境监测中心站

何龙 教授级高工

刘婵芳 高级工程师

何鹏飞 助理工程师

梁慧宇 助理工程师

暨南大学

王雪梅 教授

王伟文 副教授

常鸣 讲师

华南环境科学研究所

张毅强 副研究员

刘伟民 高级工程师

费蕾蕾 博士

汪云卿 助理工程师

刘斌 助理工程师

标准所技术管理负责人：

深圳市环境空气质量预报预警技术规范

编制说明

1 项目背景

1.1 任务来源

为加强国家环境保护工作的需要，2019 年中国环境监测总站发布了《关于征集 2020 年环境监测类标准制修订项目建议的通知》（总站科技字[2019]35 号）及深圳市市场和质量监督管理委员会发布了《深圳市市场和质量监督管理委员会关于开展 2019 年深圳市地方标准制修订计划项目征集工作的通知》（深市质[2019]50 号）；为规范现行的深圳市环境空气质量预报预警工作方案，建立科学客观的、适合本地的、可操作性强的深圳市空气质量预报预警地方标准，帮助环境管理部门规范全市空气质量预报流程进而及时制定有效的应急管理措施，提高社会公众对本地环境质量预报方法和信息发布机制的认识。2019 年由深圳市环境监测中心站牵头与暨南大学、华南环境科学研究所联合开展《深圳市环境空气质量预报预警技术规范》的编写工作。

1.2 工作过程

（1）成立标准编制小组

深圳市环境监测中心站、暨南大学与华南环境科学研究所接到标准修订任务后，于 2019 年 6 月成立了标准编制组，专门承担此项标准的研究修订工作。

（2）收集国内外相关资料

根据深圳市标准修订项目的相关要求，编制组于 2019 年 7 月底完成标准相关国内外文献案例和历史监测数据的收集整理工作，了解国内外相关空气质量预警预报的研究进展以及相关预警预报技术方法，为撰写该技术规范提供详实的资料调研和摸底工作。

（3）确定标准大纲

2019年9月20日深圳市环境监测中心站在该站108会商室召开编写组会议，讨论了标准大纲的内容编写细则，对主要修订内容中涉及的技术方法、空气质量预警预报工作流程及预报成效评估等方面进行了初步研究和探讨，通过构建近3年深圳市大气污染案例库，对典型污染案例的天气形势进行分型，确定关键污染物的预报预警的技术规范。

（4）完成征求意见稿及编制说明

2020年3月13日编制组将《深圳市环境空气质量预报预警技术规范》（初稿）及编制说明报深圳市监测中心站审核，并根据审核意见对标准及编制说明进行修改完善，2020年3月28日，在深圳市环境监测中心站邀请内部专家进行了评估，形成了《深圳市环境空气质量预报预警技术规范》（征求意见稿）及编制说明。

（5）公开征集意见

2020年4月9日，开始通过深圳市生态环境局深圳市生态环境网民意征集门户网对《深圳市环境空气质量预报预警技术规范（征求意见稿）》进行了公开征求意见；标准编制组将针对本标准收集的所有书面意见进行整理、讨论和分析，并在网上进行公开回复。

1.3 创新性说明

世界气象组织制定《生物气象和空气质量预报规范》（WMO/TD No.1184），定义了空气质量预报模型的分类、组成和数据。

1996年，美国EPA制定了《空气质量模型规范》（40 CFR Ch.1（7-1-99 Edition）），规定了推荐模型、模型适用条件、模型输入数据以及模型不确定性等。美国EPA通过每年召开工作组会议、和美国气象学会科研团队签订合作协议、吸纳技术和用户团队的新模型评论和其他研究团队的科研成果，保证空气质量预报标准规范的发展。

欧盟在欧洲空气公共信息II项目（Common Information on European AirII，简称CITEAIR II）（2008-2011年）支持下制定了《城市空气质量预报实践规范》，该项目目的是交换在区域空气质量保护和政策发展方面的良好经验，介绍了参与CITEAIR II项目的空气质量预报模式及其业务化运行方式，提出了三个不同复杂程度的预报系统，其主要成果是提出“CITEAIR”方法，可促进本地空气质量预报

系统在其他地区的业务化运行。

中国环境监测总站总结各地空气质量预报业务中的实践经验，在 2014 年编制了《环境空气质量预报预警方法技术指南》（第一版），并于 2017 年重新编制并发布了《环境空气质量预报预警方法技术指南》（第二版）。指南明确了数值模式预报是开展环境空气质量预报的一种重要技术手段，并对数值预报的输入数据要求、数值预报模式和输出数据及其分析方法进行详细的解释说明。

生态环境部 2019 年 6 月发布了《环境空气质量数值预报技术规范（征求意见稿）》，标准规定了环境空气质量数值预报模式基本要求、运算处理和成效评估方法等内容。该标准适用于我国环境空气质量预报业务部门，用于规范和指导业务化应用的环境空气质量数值预报模式，对其基本性能、组成和模拟效果等方面提出要求。

由上可见，发达国家的环境空气质量预报基本上考虑了数值预报在内的多种方法的融合，《环境空气质量数值预报技术规范（征求意见稿）》仅仅是对数值预报做出了相关规定。因此，《深圳市环境空气质量预报预警技术规范》考虑到统计预报和数值模拟预报等多种预报方法的融合，并结合深圳市实际情况对空气质量预报方法进行改进、本土化和业务化，在标准制定方面在全国是领先的，具有创新性，并向发达国家相关标准的制定工作看齐。

1.4 标准制订的必要性分析

1.4.1 环境空气质量预报规范化对深圳市环境空气持续改善具有重要意义

深圳是中国南部海滨城市，位于珠江口东岸、北回归线以南，陆域位置东经 $113^{\circ} 43' \sim 114^{\circ} 38'$ ，北纬 $22^{\circ} 24' \sim 22^{\circ} 52'$ ；东临大亚湾与惠州市相连，西濒珠江口伶仃洋与中山市、珠海市相望，南至深圳河与香港毗邻，北与东莞市、惠州市接壤。全市陆地总面积 1997.47 平方公里，全境地势东南高、西北低，大部分为丘陵地，间以平缓台地，西部沿海一带为滨海平原，属于海洋性气候。深圳共设 9 个市辖区（福田区、罗湖区、盐田区、南山区、宝安区、龙岗区、龙华区、坪山区、光明区）、1 个功能区（大鹏新区）和深汕特别合作区。

根据深圳市统计局初步核算，2019 年全市地区生产总值 26927.09 亿元，与“十二五”末 2015 年的 17502.99 亿元相比，增长了 64.1%。经济的快速发展，对环境空气质量的改善，提出新的更大挑战，对环境空气质量的精细化管控需求

更为紧迫。

深圳作为粤港澳大湾区的重点城市 and 社会主义先行示范区,是我国的先行先试地区,对环境空气质量的改善提出新的更高的目标。近年来在坚实的科技支撑基础上,通过持续大力度的防控治理,空气质量得到明显改善。深圳细颗粒物($\text{PM}_{2.5}$)浓度 2014 年在千万人超大城市中率先达标,深圳市 $\text{PM}_{2.5}$ 年均浓度下降到 34 微克/立方米,提前 3 年完成了国家《大气污染防治行动计划》中 $\text{PM}_{2.5}$ 的治理目标。且近四年波动下降,趋近国际先进水平,2020 年目标是达到世界卫生组织环境空气质量 II 阶段标准(25 微克/立方米),稳居全国 74 个重点城市前十位。尽管深圳市大气污染防治工作已取得显著成效,在国内大中型城市中较优,但对比国际先进都市,仍有一定的差距,存在着 $\text{PM}_{2.5}$ 年均浓度持续改善难度大、臭氧污染不降反升,且呈现区域蔓延趋势,臭氧和二次细颗粒物防治成为焦点。特别是臭氧污染具有区域传输特征、大气生成机理的复杂、前体物如挥发性有机物种类多样,对环境空气质量预报工作的规范化和精细化提出了更高的要求。因此,制订深圳市环境空气质量预报规范显得极为迫切和必要,为环境空气质量持续改善和污染防治精细化管控提供强有力的科学支撑。

1.4.2 环境空气质量预报规范化为大气污染防治工作提供重要技术支撑

环境空气质量预报是一项复杂的系统工程,是当今环境科学研究的热点与难题。通过各类预报方法与手段相结合,可对痕量气体、气溶胶等多种大气污染物在城市、区域、全球尺度下的不同类型污染过程进行预测研究,研究内容涉及气象、物理、化学等多个学科,包含宏观、微观多种过程,是当前城市及区域污染防治与治理的有效途径。

目前国际上空气质量预报的方法有两种,一种是以统计学方法为基础,利用现有数据,基于统计分析,研究大气环境的变化规律,建立大气污染浓度与气象参数间的统计预报模型,预测大气污染物浓度,称之为统计预报。常用的空气质量统计预报方法包括回归方程法、天气形势分类法、神经网络法、趋势外推法和决策树法等。统计预报方法具有相对简单易行的特点,适用于污染情况较为单一或污染规律性明显的城市。

另一种则是以大气动力学理论为基础,基于对大气物理和化学过程的理解,在给定的气象场、源排放以及初始和边界条件下,通过一套复杂的偏微分方程组描述大气污染物在空气中的各种物理化学过程(输送、扩散、转化、沉降等),

并利用计算机高速运算进行数值计算方法的求解,预报污染物浓度动态分布和变化趋势,提供高时空分辨率的污染物浓度分布。数值模式预报主要涉及高性能计算系统、空气质量模式、气象数值模式、源清单编制与动态更新机制、监测网络数据同化和综合分析工具等,是目前国内外主流的环境空气质量预报技术方法之一。在京津冀、长三角、珠三角等空气质量预报平台建设和业务发展过程中,以及在北京奥运会、上海世博会、广州亚运会、南京青奥会、北京 APEC、北京抗战胜利纪念日阅兵、杭州 G20 峰会、北京“一带一路”论坛等重大活动保障中,利用空气质量数值预报模式在城市尺度和区域尺度空气质量预报方面,积累了重要的业务研发和应用工作经验,为重污染过程预警应急、减排控制、区域大气污染防治协作等提供重要的技术支撑。

2013 年,《大气污染防治行动计划》提出明确要求,到 2015 年底,全国重点区域、省、自治区、直辖市、省会城市和计划单列市要建立辖区重污染天气监测预警体系。在此背景下,全国各地环境监测部门陆续开展空气质量预报能力建设。出于服务环境管理部门污染防治与管控目的,截止 2015 年底,全国共有 24 个省级、28 个城市级环境监测部门建设了空气质量数值预报模式系统。但是由于目前我国环境监测部门在进行空气质量数值预报模式系统建设中,缺乏基本的行业应用标准和基本的技术规范,所建的数值预报系统良莠不齐,组成和功能差异较大,并且模式本地化程度也各不相同,导致各地数值预报结果的准确率相差甚远,各地区和城市难以规范地开展环境空气质量业务预报和有效支撑环境管理和污染管控工作。

因此,非常有必要在全国环境监测系统的空气质量业务预报领域,对环境空气质量预报基本组成要求、尺度时效、效果评估等关键技术进行规定,从而为全国环境监测系统利用统计和数值预报技术开展例行空气质量业务预报提供最基本的标准,为各地开展环境空气质量预报系统建设提供最基础的要求。而根据深圳建设社会主义先行示范区和深圳在粤港澳大湾区中的城市定位,在生态环境领域需要建立与国际接轨并具有中国特色的全指标环境质量标准体系和污染物排放标准体系及其相应的技术规范。

2 国内外环境空气质量预报相关技术研究

2.1 国外数值预报相关技术研究

2.1.1 空气质量数值预报模式发展

空气质量数值预报模式从 20 世纪 60 年代以来,已经发展了三代空气质量模型系统。第一代以箱式模型、局地烟流扩散模型以及拉格朗日轨迹模式为代表。它们采用了高度参数化的线性机制描述大气物理化学过程,适用于化学浓度较低、大气较为稳定状态下的轨迹模拟,不适用于对流较强或地形复杂条件。

第二代空气质量模式通过加入较为复杂的气象模式和非线性反应机制,并将被模拟的区域分成许多三维网格单元。模式将模拟每个单元格大气层中的化学变化过程、云雾过程及起周边的其他单元格的大气状况。以欧拉网格模式为主的第二代空气质量模式广泛应用于光化学污染模拟、酸沉降等研究当中。

第三代空气质量模式是根据“一个大气”概念,通过将整个大气作为研究对象,设计了多模块集成、多尺度网格嵌套的三维欧拉模型,突破了传统模式针对单一物种或单相物种的模拟,考虑了实际大气中不同物种之间的相互转换和相互相应。主流的第三代空气质量模式包括 CMAQ(Community Multi-scale Air Quality Modeling System)、CAMx (Comprehensive air quality model with extensions)、WRF-Chem (Weather Research and Forecasting-Chemistry model)、NAQPMS(Nested Air Quality Prediction Modeling System)等。新一代空气质量预报系统,具有广泛的应用领域,对大气辐射、云微物理及陆面模式等多种物理过程都有不同的参数化方案,可以为化学模式提供大气流场。空气质量数值模式技术已经日趋成熟并广泛应用于空气质量预报、污染的形成机制分析以及环境政策评估等诸多领域。

2.1.2 气象模式进展

气象模式为空气质量预报模式提供温度、湿度、风速、气压、风向、降水、云、辐射等气象资料。目前气象模式当中应用最为广泛的是 Weather Research and Forecasting (WRF)模式。WRF 模式是为了满足大气研究和业务预报需要而设计的数值天气预报系统。WRF 作为完全可压缩非静力模式,不仅可以用于真实天气的个案模拟,也可用于其包含的模块组作为基本物理过程探讨的理论依据,适用于从米到千米范围内广泛的气象预报应用。

2.1.3 模式污染源清单处理模型发展

常见的源排放清单处理模型包括:美国北卡罗来纳微电子中心(Microelectronic Center of North Carolina,简称 MCNC)开发的 SMOKE 模型、

加拿大排放处理系统（Canadian Emission Processing System，简称 CEPS）、综合区域排放处理工具（Consolidated Community Emission Processing Tool，简称 CONCEPT）以及美国 EPA 开发的排放预处理系统（Emissions Preprocessor System，简称 EPS）、高山地球物理公司（Alpine Geophysics）开发的排放模拟系统（Emission Modeling System，简称 EMS）等。

SMOKE 模型应用最为广泛，该模型采用稀疏矩阵方法进行计算，为模式系统提供网格化的排放源。同时，其考虑了面源、点源及移动源三部分，针对不同类型排放源的空间分布属性、时间变化规律，设置不同时空分配曲线，更合理反应不同类型的时空特征。

2.1.4 大气化学资料同化技术发展

大气化学资料同化技术随着多种大气化学成分监测平台的建立得到了快速发展。同时，最优化插值、三维变分、四维变分等技术的引入，使得气溶胶数据也能够被同化到空气质量模式当中。随着人们对资料同化的理解不断加深，以经验型为主的同化方法开始成为主流。

2.1.5 国外模式评估研究进展

国外在模式评估方面研究较早，编撰了一些空气质量模式评估的相关技术规范以及一些定量评估模式预测的综述。这些成果主要提供一些统计性和业务性的评价，注重评价模式对污染物浓度最大值的模拟能力以及在时间、位置、气象条件等要素的准确性。

2.1.6 国外数值预报标准规范发展

国外制订了多个数值预报标准规范，其中最具代表性的为世界气象组织制定的《生物气象和空气质量预报规范》，它定义了空气质量预报模型的分类、组成和数据等。美国制定的《空气质量模型规范》规定了模型选择、模型适用条件、模型输入数据以及模型不确定性等。欧盟也制定了《城市空气质量预报实践规范》，目的是促进空气质量预报系统在其地区业务化运行。

2.2 国内环境空气质量数值预报技术方法研究

2.2.1 空气质量数值预报模式发展

国内空气质量模式也经历了三个阶段，其中构建的全球尺度、区域尺度及嵌套网格的第三代大气环境模式应用范围最为广泛，代表模式有嵌套网格空气质量预报模式系统（Nested Air Quality Prediction Modeling System，简称 NAQPMS）

区域大气环境模式系统（Regional Atmospheric Environment Modeling System，简称 RegAEMS）等。这些模式在源解析、气溶胶微观动力学模拟、多层嵌套等方面都进行了升级，应用范围更加广泛。

2.2.2 模式排放源清单处理研究进展

我国模式排放清单处理研究参考国外的研究思路，也开发了众多原清单。2003 年清华大学贺克斌、余学春等人以北京市为例，介绍了一种包括排放清单建立、环境空气质量模拟及区域环境影响评价分析等方法在内的城市大气污染物来源特征分析的技术方法，从而确定城市大气污染物的排放分布及浓度分布特征、地区排放贡献率及浓度贡献以及区域污染对城市环境空气质量影响等多方面特征，为城市大气污染的控制决策提供必要的理论支持。2005 年北京大学胡建林对珠江三角洲污染源清单的建立进行了研究，建立了一套规范的源排放估算方法和规范的估算流程，建立了区域排放清单所需的尽可能详尽的中国排放因子库和统计基础数据库。2012 年，北京市环境保护科学研究所的薛亦峰等人专门开展清单的不确定性分析，介绍了大气污染物排放清单建立、管理、质量保证和质量控制计划、清单的改善、不确定性分析方法。

近几年的污染源清单是基于技术信息和设备信息的高技术分辨率排放清单，通过空气质量模型应用于污染过程研究和控制决策研究。

2.2.3 气象模式进展

国内气象模式在借鉴国外研究成果的基础上，根据中国实际情况，对气象模式各个物理化学过程进行了评估和改进。张碧辉等揭示了不同参数化方案对 WRF 边界层气象要素模拟的影响。曾新民等对研究了 WRF 模式不同陆面方案对暴雨事件模拟的影响。

2.2.4 大气化学资料同化进展

大气污染资料同化主要应用之一就是将污染物观测数据同化到模式中，获得精度更高的污染物浓度场，为大气污染预报提供精度更高的初始条件。同化的观测数据主要包括卫星遥感、地基监测和雷达探测数据等。徐祥德等建立了变分函数模型，将卫星遥感和地面或探空观测信息进行融合，在沙尘暴大气要素场、北京周边地区气溶胶变分等研究中取得了客观订正的显著效果。白晓平等将最优插值和集合卡尔曼滤波应用于空气污染数值预报模式系统 REMSAD（Regional Modeling System for Aerosols and Deposition），对 NO_x 和 SO_2 资料进行同化。黄

思等比较了地面观测、模拟和同化再分析数据在 PM_{2.5} 污染回顾分析上的应用潜力和优缺点，并利用 PM_{2.5} 同化再分析数据对京津冀一次 PM_{2.5} 污染过程时空演变特征进行了回顾分析。

2.2.5 模式数值预报结果订正

随着数值模式预报技术的不断进步，预报效果明显提升，为了进一步提高预报准确率，国内各个气象台站陆续开展了数值模式预报产品的检验。张宁娜等对德国和欧洲中心数值模式在东北地区的降水预报产品进行检验，通过检验选取预报效果最优的数值模式，提高预报准确率。何金梅等利用误差滚动线性回归订正方法对中国气象局预报的 PM_{2.5}、PM₁₀、SO₂、NO₂、O₃ 和 CO 等污染物进行订正，结果表明订正后模式对 O₃ 的预报准确率提高了 1.1%~5.5%，对其他污染物的预报准确率可提高 8.7%~75%。

2.2.6 模式评估研究进展

随着国内多地建立了区域空气质量数值预报系统，也逐步尝试开展空气质量数值系统的评估工作。白永清等基于 WRF/Chem 大气化学模式建立了华中区域空气质量数值预报系统，对武汉冬季的 24h 预报结果进行了初步检验。刘琳等利用多种检验指标对华中区域空气质量数值预报系统的 6 种污染物和 AQI 指数的预报结果进行检验评估，在确保模拟效果的基础上，通过敏感性实验研究区域气溶胶对地面气象要素的影响。潘锦秀等利用一种适用于区域重污染空气过程评估方法，分析了 NAQPMS 模式系统对京津冀区域静稳型、风沙型和特殊型重污染天气过程的预报能力。

2.2.7 国内相关标准研究

最近几年国内逐步开始制定相关标准工作。气象部份最早开展数值天气预报业务，国家气象局制定了《关于规范全国数值天气预报业务布局的意见》，用以指导全国数值天气预报业务布局与分工。2014 年中国环境监测总站编制了《环境空气质量预报预警方法技术指南》（第一版），2017 年重新编制了《环境空气质量预报预警方法技术指南》（第二版）。2017 年 9 月，国家气象中心发布了数值天气预报产品检验规范》（GB/T 34303-2017），建立了数值天气预报产品检验规范。

2.3 国内外统计预报技术方法研究

2.3.1 统计预报模型概况

建立空气质量统计预报模型是目前国内普遍采用的对空气质量进行预报的方法之一。统计预报方法以污染物浓度观测资料和气象数据资料为基础，通过因子初选和相关性分析，找到跟空气质量相关的气象要素，具体可以应用多元线性回归分析、聚类回归分析、BP 神经网络分析或天气形势预测分析等统计方法。

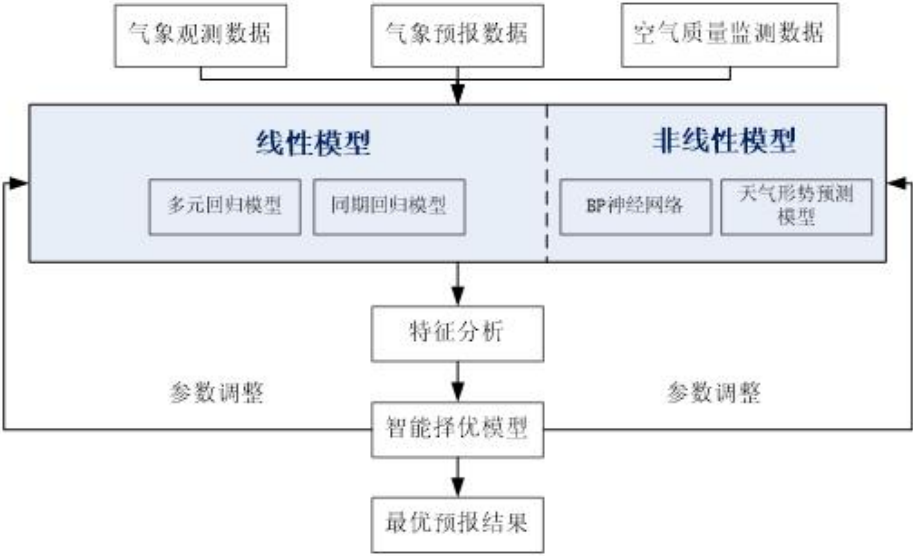


图 2.3-1 统计预报模型的建立

空气质量统计预报模型可以分为多元回归模型、BP 神经网络模型、天气形势预测模型等，模型的参数基于历史长期空气质量和气象观测数据进行统计分析确定。统计预报模型模型的输入参数为预报前一段时间的空气质量观测数据、预报前一段时间和预报当天的气象预报数据，得到预报当天的污染物浓度预测结果，并通过特征分析、智能择优等方式，对上述统计模型结果进行筛选并最终得到最优结果。

2.3.2 多元回归模型

2.3.2.1 原理

多元回归模型，即从气象条件和非气象条件中筛选出对大气污染物浓度变化具有显著影响的若干关键参数，通过统计分析得到多元线性回归方程，以此回归方程为依据进行外推计算，从而获得未来某项大气污染物浓度的预报结果。

由于污染物浓度的变化与多个气象或非气象参数有关，难以寻找与污染物浓度预报值线性关系显著的单个参数，所以通常选取之前连续几天的污染物浓度和当天气象条件（如气温、风向、风速、降雨量等）影响因素作为自变量，与目标日期的污染物浓度进行多元回归分析，将得到的回归的方程，作为多元回归预报

模型，用于未来污染物浓度的预测。

2.3.2.2 多元回归方程的建立

多元回归分析研究多个变量之间的线性或非线性关系。目前采取的是一个因变量对多个自变量的线性回归分析（即“一对多”回归分析）。

多元回归方程：

$$Y = \alpha_0 + \alpha_1 \times X_1 + \alpha_2 \times X_2 + \alpha_3 \times X_3 + \dots + \alpha_k \times X_k + \varepsilon \quad (1)$$

其中： α_0 、 α_1 、 $\alpha_2 \dots \alpha_k$ 为回归系数， ε 为随机误差并服从 $N(0, \sigma^2)$ 分布。

回归系数的计算：直接计算，无需迭代。

随机误差计算：

$$\sigma'^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y'_i - y_i)^2}{n - k - 1} \quad (2)$$

其中： $\sum_{i=1}^n (y'_i - y_i)^2$ 为模型的偏差平方和， y'_k 为根据回归系数计算得出的拟

合输出， y_k 为实际输出， n 为样本个数， k 为自变量个数。 σ' 作为 σ 的估计值，可用于作为预测值的浮动值。

2.3.2.3 多元回归模型的特点

根据回归系数的算法，该模型有以下特点：

样本个数的选取： $\geq k + 2$ ，即大于等于自变量个数 $k+1$ （常数项）+1（确保是超定方程组）。 $\geq k + 1$ ，能确保回归系数的唯一性，再+1 能确保是超定方程组（拟合出随机误差，即图中点到直线的偏离）。

容错性较差：由于回归系数的计算涉及矩阵求逆，故在单个自变量的数据序列中，不能有过多非常接近的值。否则，该自变量与常数项（数据序列全为 1）将存在严重的多重共线性（即二者相关性极大），导致模型的矩阵行列式接近 0，这时计算逆矩阵将出错，得到的预报模型准确率较差。

自变量的数据序列出现较多缺失值时，利用目前系统中的数据回补算法将会出现一部分回补数值非常接近。

若采取的是线性回归分析，所有变量应使用数值（或排序）来表示，并且这种数值（或排序）能够反映该变量的实际的数量大小。如风向作为自变量时，其角度大小只是作为标记，并不能反映风的强弱可以将其与风速进行正交分解，得到经向风速和纬向风速，再进行回归分析。

2.3.3 BP 神经网络模型

2.3.3.1 原理

BP 神经网络是一种单向传播的多层前向网络，其研究的是多个变量之间的线性或非线性关系，网络的第一层为输入层，最末一层为输出层，中间各层均为隐含层，如图 2.3-2 所示。

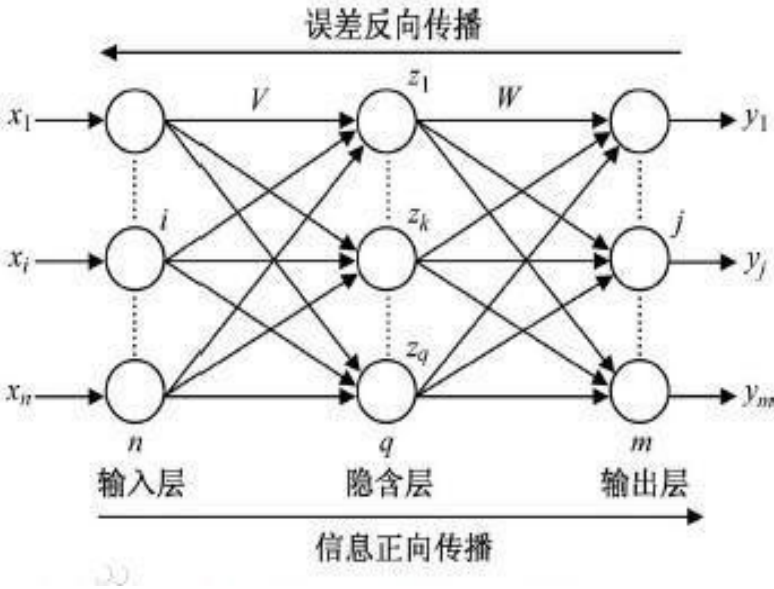


图 2.3-2 BP 神经网络模型

同层神经元节点间没有任何耦合，而相邻层的神经元之间使用连接权系数进行相互连接。输入信息依次从输入层向输出层传递，每一层的输出只影响下一层的输入。网络中每一层神经元的连接权值都可以通过学习来调整。当给定一个输入节点数为 N ，输出节点数为 M 的 BP 神经网络，输入信号由输入层到输出层传递，通过非线性函数的复合来完成从 N 维到 M 维的映射，该过程是向前传播的过程；如果实际输出信号存在误差，网络就转入误差反向传播过程，并根据误差的大小来调节各层神经元之间的连接权值。当误差达到可接受的范围时，网络的学习过程就此结束，如下图所示。

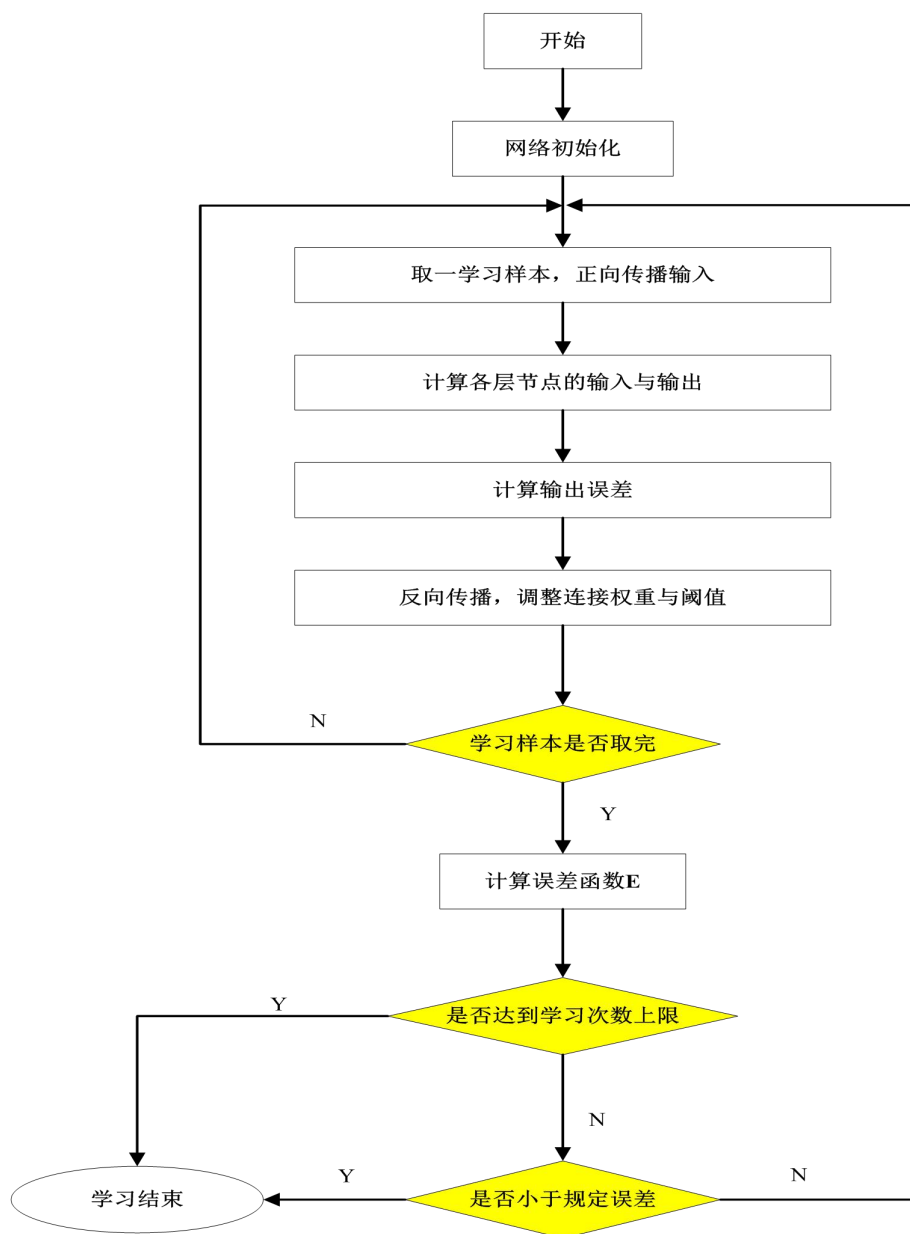


图 2.3-3 BP 神经网络基本原理

2.3.3.2 BP 神经网络模型的建立

如图 2.3-4，输入层信号（即 n 个自变量 x_1 、 x_2 …… x_n 的一条样本）经过线性累加器的处理（与网络权值 w_{1j} 、 w_{ij} …… w_{nj} 及阈值 b_j 进行运算， j 表示第 j 个神经元）输入到隐层的神经元，再经过该神经元中的激励函数 f 的线性或非线性变换产生输出信号 O_j 。下一个隐层把前一个隐层的输出作为输入，重复上述过程。最后，输出层把最后一个隐层的输出作为输入，进而产生最终的输出信号。

最终输出信号与期望输出（即样本的输出变量）之间的差值为误差信号。误差信号由输出端开始逐层反向传播，调节网络权值及阈值。通过权值及阈值的不

断修正使网络的输出更接近期望输出。

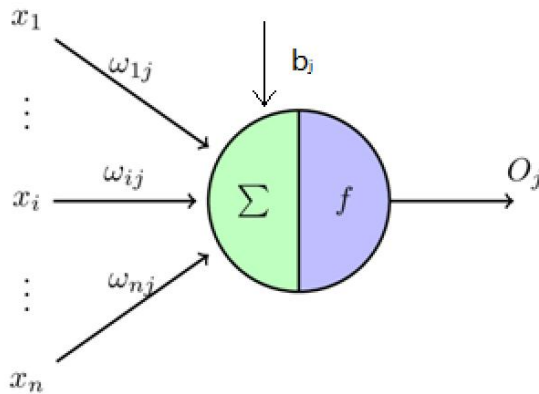


图 2.3-4 BP 神经网络模型

隐层的层数与每层所包含的神经元个数均可设定调整，以达到最佳的拟合效果。其设定的经验规则为：通常初步建议隐层层数为 1 层，神经元个数为 $\sqrt{n+m}+a$ ，其中 n 为输入节点数， m 为输出节点数， a 为常数，取 1-10。

网络系数（权值+阈值）个数的计算：假设输入层的输入信号维数为 n ，隐层层数为 k 层，隐层神经元个数为 q_k ，输出神经元个数为 m ，则网络系数个数为

$$N = (n + 1) * q_1 + (q_1 + 1) * q_2 + (q_2 + 1) * q_3 + \cdots + (q_{k-1} + 1) * q_k + (q_k + 1) * m$$

网络权值的算法：有梯度下降法、带动量的梯度下降法、拟牛顿法、LM 法、弹性 BP 算法等。目前系统采用的是 Aforge.Neuro 的带动量的梯度下降法。

2.3.3.3 BP 神经网络模型的特点

根据网络权值的算法，该模型有以下特点：

- （1）样本个数的选取：最好遵守与上述回归模型类似的规则进行选取，即 $\geq N + 1$ ，但不是强制性要求。
- （2）容错性较佳：不存在上述回归模型的多重共线性问题导致的系数计算错误（但输入变量间的相似性仍会导致系数的不稳定）；同时由于 s 型的激励函数使异常的输入样本得到抑制。

2.3.3.4 模型自动调优流程

单项污染物浓度预测过程主要包括：①输入；根据输入参数进行样本优化筛选；②根据筛选出的样本训练出 5 组 BP 神经网络模型；③测试所建立的 BP 神

神经网络模型；④输入参数输入到最优的 BP 神经网络模型，⑤输出预测结果；⑥预测精度分析。整个算法基本流程如下图所示。

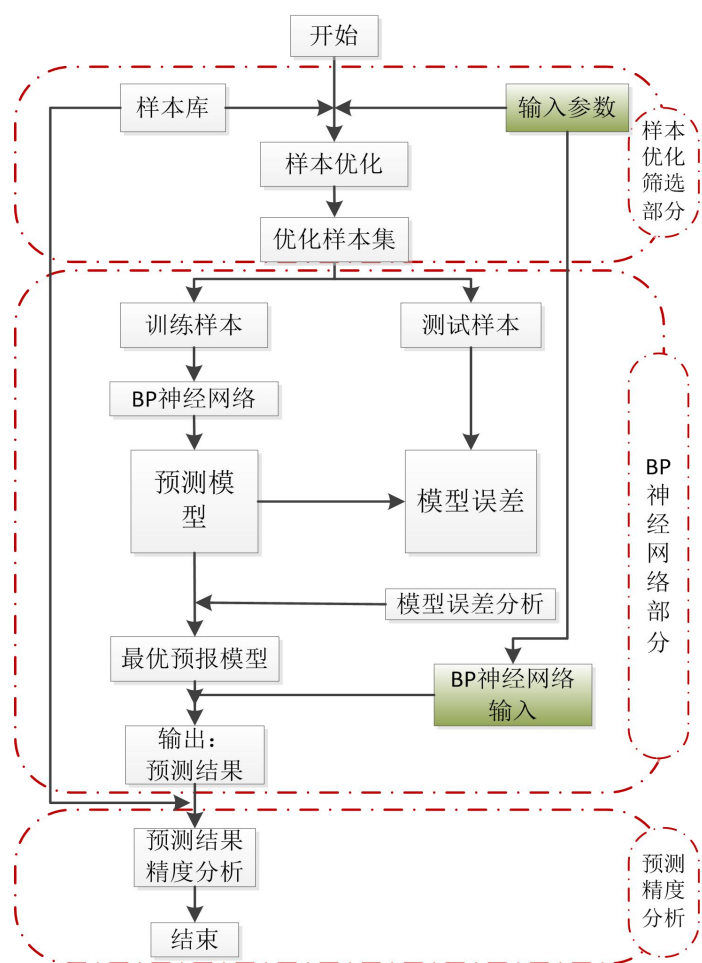


图 2.3-5 模型调优算法流程图

2.3.3.5 样本优化算法

(1) 样本库

样本库内容主要包括：历史污染物浓度监测数据和历史气象监测数据。

其中污染物参数主要包括：PM_{2.5}、PM₁₀、CO、SO₂、NO₂、O₃；

气象参数主要包括：气温、大气压、相对湿度、降雨量、风向、风速、W_x（风矢量坐标化）、W_y（风矢量坐标化）、大气稳定度。

(2) 输入参数

PM_{2.5}/PM₁₀ 输入参数（珠三角区域）

表 3.3-1 PM_{2.5}/PM₁₀ 输入参数（以珠三角区域为例）

数据	前两日污染物	前一日气象	预测日
----	--------	-------	-----

类型	浓度值	数据	(今日) 气象
预报时效			预报数据
24 小时预 报	PM _{2.5} /PM ₁₀ 前一日浓度;	降雨等级、大 气压、相对湿度、 大气稳定度	降 雨 等 级、W _x 、W _y
	PM _{2.5} /PM ₁₀ 前两日浓度		
48-168 小 时预报	PM _{2.5} /PM ₁₀ 前一日浓度;	降雨等级、大 气压、大气稳定度	降 雨 等 级、W _x 、W _y
	PM _{2.5} /PM ₁₀ 前两日浓度		

(3) 样本优化

样本优化部分，用于深度挖掘历史样本与预报日气象之间的关联规律，筛选出具有代表性的样本用以建立模型。

本算法的样本优化的方法：以气象相似为准则，以三层筛选为机制，通过建立的优化参数矩阵来筛选出与预测日气象相似度最高的样本数据。

a.样本优化原理

本研究的样本优化的方法：以气象相似为准则，以三层筛选为机制，通过建立的优化参数矩阵来筛选出与预测日气象相似度最高的样本数据。

用预报日当天的气象参数与前一日的气象参数作为一组数据，在历史数据库中找出相似的数据组合。

在第一层优化筛选中，针对样本的各单因子，采用阈值矩阵来剔除部分样本，得到初始优化样本子集；在第二层优化筛选中，加入权重矩阵，将多因子转换为单属性参考值，即总体气象相似度，同时剔除部分样本；在第三层优化筛选中，将剩余样本以总体气象相似度排序，按需求样本量，筛选出最优样本，形成三次优化样本子集。

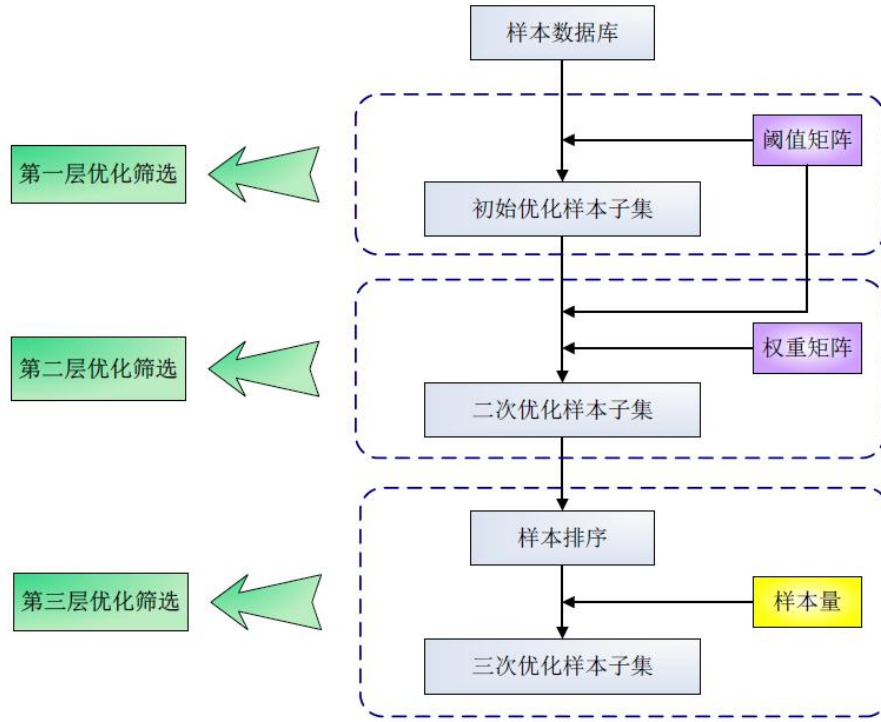


图 2.3-6 样本优化流程

第一层筛选：筛选出每一气象相似度均达到一定阈值范围内的样本。筛选出的样本须满足：

$$\Delta y_j \leq y_{j\ set} \quad (5)$$

$$\text{其中, } \Delta y_j = |y_{j\text{预}} - y_{j\text{样}}| \quad (6)$$

公式中， $y_{j\text{预}}$ 为预测日的气象因子值， $y_{j\text{样}}$ 为样本的气象因子值，样本与预测日各气象因子间的气象相似度为 Δy_j ， j 为气象因子标签， $y_{j\ set}$ 为各气象因子筛选的阈值，组成初始阈值矩阵 Y ，该矩阵中的阈值可根据样本需求量动态变化。

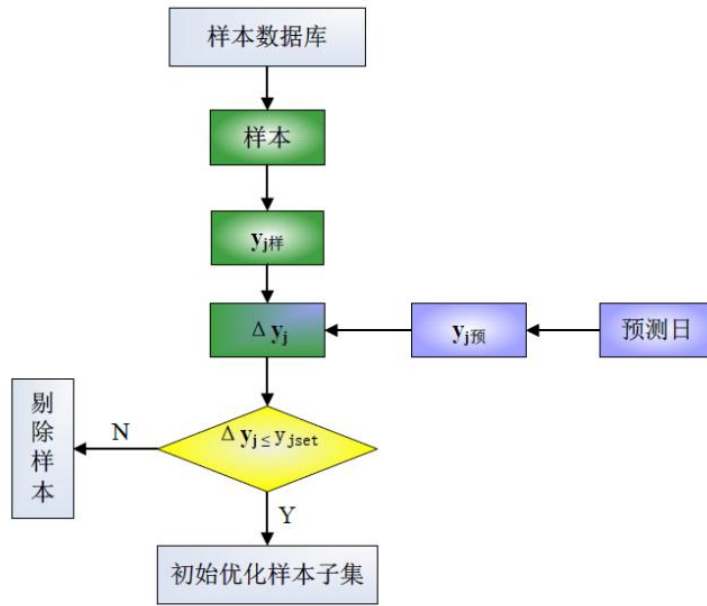


图 2.3-7 第一层优化筛选流程

第二层筛选：筛选出总体气象相似度达到一定阈值范围内的样本。筛选出的样本须满足：

$$S \leq S_{set} \quad (7)$$

$$\text{其中, } S = \sum_{j \leq M_{num}} (w_j \cdot \Delta y_j) \quad (8)$$

公式中， S 为总体气象相似度， S_{set} 为总体气象相似度筛选的阈值， w_j 为样本各气象因子的权重，组成权重矩阵 W ，反映该气象因素对污染物浓度影响程度， M_{num} 为气象因子的个数。

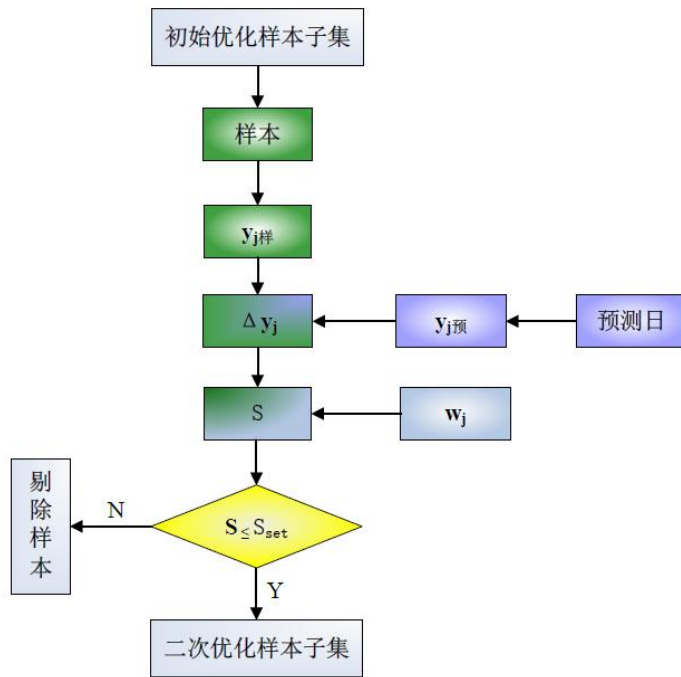


图 2.3-8 第二层优化筛选流程

第三层筛选：筛选出与预测日气象背景相似度最高的 n 条样本。筛选出的样本须满足：

$$Q_{\text{num}} \leq n \quad (9)$$

公式中， Q 为以总体气象相似度 S 排序的升序样本列， Q_{num} 为排序后的样本列中样本的序号， n 为需求的样本量。

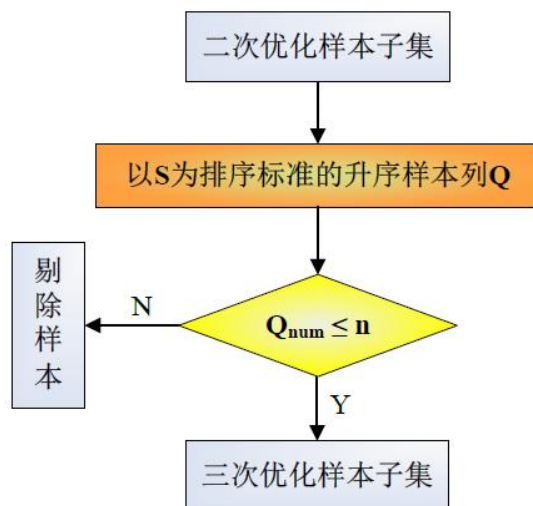


图 2.3-9 第三层优化筛选流程

b. 样本优化的参数设置

程序中 $\text{PM}_{2.5}$ 的参数设置（珠三角区域）：

表 2.3-2 程序中 PM_{2.5} 的参数设置（珠三角区域）

24 小时预报						48-168 小时预报					
权重			阈值			权重			阈值		
指 标	符 号		指 标	符 号		指 标	符 号		指 标	符 号	
W	w11	0.24	W	set11	6	W	w11_week	0.3	W	set11_week	6
T	w12	— —	T	set12	8	T	w12_week	— —	T	set12_week	8
RF	w13	0.12	RF	set13	2	RF	w13_week	0.15	RF	set13_week	2
Wp- 1	w21	— —	Wp- 1	set21	8	Wp- 1	w21_week	— —	Wp- 1	set21_week	8
Tp- 1	w22	— —	Tp- 1	set22	10	Tp- 1	w22_week	— —	Tp- 1	set22_week	10
RFp- 1	w23	0.08	RFp- 1	set23	2	RFp- 1	w23_week	0.1	RFp- 1	set23_week	2
APp- 1	w24	0.16	APp- 1	set24	10	APp- 1	w24_week	0.2	APp- 1	set24_week	10
RHp- 1	w25	0.2	RHp- 1	set25	10	ASp- 1	w25_week	0.25	ASp- 1	set25_week	2
ASp- 1	w26	0.2	ASp- 1	set26	2				总 体	setall_week	5
			总 体	setall	5						

W(今日风)、T(今日气温)、RF(今日降雨等级)、Wp-1(前一日风)、Tp-1(前一日气温)、RFp-1(前一日降雨等级)、APp-1(前一日大气压)、RHp-1(前一日相对湿度)、ASp-1(前一日大气稳定度)。

2.3.4 聚类回归模型

2.3.4.1 主要原理

聚类回归模型是指聚类分析+回归模型。聚类分析将样本划分至不同的分组，同一个分组中的对象有很大的相似性，而不同分组间的对象有很大的相异性。

在把样本应用至多元回归模型、BP 神经网络等模型之前，可通过聚类分析把样本划分至不同的分组，然后对计算预测值时的输入端进行归类判断，判断其属于哪个样本分组，取该分组应用至模型。

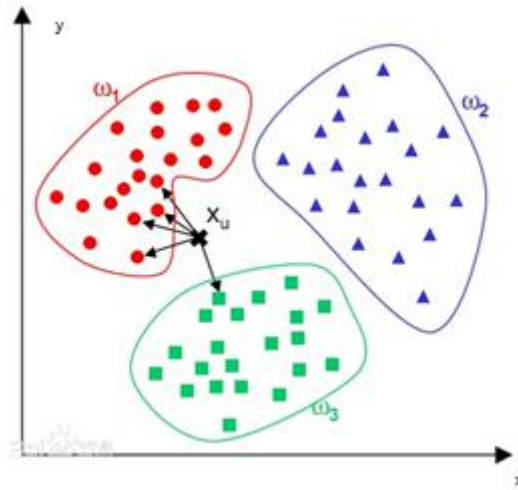


图 2.3-10 聚类回归模型

上图描述了聚类分析的一个实例，它把样本划分成 3 个分组。每个样本有两个属性（x、y），故可将其画在坐标轴上。

聚类分析算法：有 k 均值算法、系统（层次）聚类算法等。

若采用 k 均值算法或系统聚类算法，则分组的依据是距离，最常用的是欧式距离。例如，图中两点的欧式距离为：

$$d_{12} = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} \quad (4)$$

聚类过程中要计算的距离包括点到点的距离和点到分组的距离。而后者可以定义为点到分组中某一点的距离、点到分组中心的距离等。这里分组中心可以是组内所有点的平均值、最靠近中心的点等。

由于 k 均值算法不能保证每次均收敛至最佳极小值点，从而导致每次的聚类结果均不相同，所以目前系统采用的是系统聚类算法。

2.3.4.2 聚类回归模型的特点

根据聚类分析的算法，该模型有以下特点：聚类分析后的样本相似性更高。

2.3.5 天气形势统计模型

2.3.5.1 主要原理

在一定时期内，可将污染源排放视为“准定常量”，空气中污染物浓度变化主要由气象条件决定。然而，气象条件变化会随着天气形势的转变而转变，因此一

方面可以将天气形势依次分为若干种类型，统计各天气形势下污染物的平均浓度，另一方面可以根据不同污染水平，确定重污染发生的常见天气形势和轻污染发生的常见天气形势。统计各天气形势下污染物平均浓度的比值，该比值作为不同天气形势之间转变时污染物浓度的转换系数。天气形势统计模型以预报日期的前一天污染物实际浓度为基准，根据预报日期当天和前一天的天气形势，选取天气形势转变时对应的浓度转换系数，计算预报日期的空气质量预报结果。

2.3.5.2 天气形势案例库

根据多年的气象和空气质量观测数据库，通过分析高空及地面天气实况分析图、地面气象观测站数据，参考气象部门对天气系统的分析的方法，将天气形势划分为若干类，统计对不同天气类型下的污染物平均浓度，建立天气类型案例库。

表 2.3-3 天气形势案例库

日期	天气系统	SO ₂	CO	NO ₂	O ₃	PM ₁₀	PM _{2.5}
2013.1.1	锋前	12	23	43	54	54	23
2013.1.2	锋区强风	23	23	34	24	24	12
2013.1.3	脊内	12	34	23	32	43	23
2013.1.4	脊内回流	32	34	54	23	78	65
...	...	...	...	...	...	...	...

在上述案例库中，把连续两天的天气形势组合成一种情景，统计不同情景下PM_{2.5}、PM₁₀、SO₂等空气污染物的浓度和AQI等级的变化量或变化系数。

表 2.3-4 天气形势组合情景库

编号	类型	AQI（可选其他污染物）&日期
1	锋前-锋区强风	-3（2013.1.1），12（2013.2.2），20（2013.4.4）， 34（2013.7.8），23（2013.9.1）
2	锋区强风-脊内	0（2013.1.2）...（略）
3	脊内-脊内回流	31（2013.1.3）...（略）
...	...	...

预报时，利用前一天污染物的实际浓度和前一天的天气形势对预报当天的天气形势转变时对应的变化系数，得出预报当天的空气质量的预报结果。

2.3.6 统计模型的部署与集成

2.3.6.1 多模型智能择优机制

(1) 择优准则

择优准则包括四方面，模型拟合情况、模型的预测情况、马娄斯的 C_p 准则和信息准则。

准则 1：模型拟合情况

从拟合角度考虑，可以采用复相关系数与修正后的复相关系数来评价模型的拟合程度，即 R^2 达到最大。

与此等价的准则是：均方残差 MSE 达到最小，因为在复相关系数分子中均方残差 MSE 的系数为负值，故当均方残差 MSE 达到最小时，复相关系数达到最大。

准则 2：模型的预测情况

从预测的角度考虑，可以采用预测误差达到最小的准则。预测误差准则的基本思想是：对于给定的自变量和样本数据，对未来的空气质量和污染物浓度进行统计模型预测，得到若干种污染物浓度的预测值或一段时间内的污染物浓度预测值。当总的预测误差平方和最小时，选取该模型作为主要的统计预测模型。

其中，度量预测误差的常用指标有：平均误差、平均绝对差、均方差、标准差及平均绝对百分误差。这些指标越小说明预测的误差越小，即预测的精确度高，反之亦然。

准则 3：马娄斯的 C_p 准则

C_p 准则也是从预测的角度考虑。具体过程为：定义一个 C_p 统计量，其中 C_p 的分子为 SEE_p ，表示包含各个自变量的回归方程的残差平方和， C_p 的分母为 MEE_p ，表示基准统计模型的均方残差，另外还要考虑样本量以及自变量个数的影响。

C_p 准则要求选择 C_p 值小的统计模型。

准则 4：信息准则

信息准则包括两种：

(1) 赤池信息准则 (AIC)

这个准则由日本统计学家赤池提出，人们称它为 Akaike Information Criterion，简记为 AIC。AIC 准则考虑模型的对数似然函数的极大值，和模型自

变量的个数。若模型自变量的个数过多，容易产生过拟合的现象，并令程序的运行效率降低。于是 AIC 准则对增加更多的自变量施加了更加严厉的惩罚，在比较模型时，以 AIC 最低值的模型优先。

（2）施瓦茨信息准则（SIC）

SIC 施加的惩罚比 AIC 更严厉，SIC 值越低越好。这个准则由统计学家施瓦茨根据 AIC 准则提出改进，简记为 SIC 准则。SIC 准则在 AIC 准则的基础上，加入考虑模型的样本数，施加的惩罚比 AIC 更严厉，SIC 值越低越好。

2.3.6.2 智能择优的实现

根据预报业务需求，以月或周为统计时段，对比不同污染物的预报结果与监测数据，以判断每种污染物适用的统计预报模型。

系统通过每月或每周对每种污染物的统计预报模型的适用情况进行智能化考察。根据统计模型选择的准则，综合考虑准则运算的复杂性与运行效率以及准则结果的易表达、易理解性，最终选取准则 2“模型的预测情况”为首要评估基准，再辅以其它准则对统计模型进行的综合评定。在综合考虑预报精度、统计模型参数、模型数据的可获得性以及模型运行效率等方面的条件下，得出每种污染物的最优模型，并以此模型为该种污染物的默认模型，并应用于下一阶段的预报业务，运行一段时间后，再次考察各类模型，调整首选的默认模型。

3 标准制修订的原则、方法和技术路线

3.1 标准制订的基本原则

我国环境保护标准制修订管理办法规定了标准制修订工作遵循的基本原则：以科学发展观为指导，以实现经济、社会的可持续发展为目标，以国家环境保护相关法律、法规、规章、政策和规划为根据，通过制定和实施标准，促进环境效益、经济效益和社会效益的统一；有利于保护生活环境、生态环境和人体健康；有利于形成完整、协调的环境保护标准体系；有利于相关法律、法规和规范性文件的实施；与经济、技术发展水平和相关方的承受能力相适应，具有科学性和可实施性，促进环境质量改善；以科学研究成果和实践经验为依据，内容科学、合理、可行；根据深圳实际情况，可参照采用国内外相关标准、技术法规；制定过程和技术内容应公开、公平、公正。

本标准在制订过程中，主要依据以下三个基本原则：

（1）明确本标准的适用范围，以满足深圳市环境空气质量预报业务工作基本需求为出发点；

（2）本标准规定的内容针对业务化应用的环境空气质量统计预报和数值预报模式提出；

（3）本标准规定的模式基本要求和评估方法等具有可比性和普遍适用性，易于推广使用。

3.2 标准制订的方法

在标准制订的过程中，首先，充分调研国外发达国家、地区以及我国自主研发的空气质量数值预报先进技术，包括在空气质量数值预报模式、模式污染源清单、空气质量数值预报模式评估与应用等方面的相关文献和资料，作为本规范的基本技术基础。

其次，总结目前全国范围内开展的不同层级（国家、区域、省级、城市）的空气质量预报平台和全国业务预报体系建设的丰富经验，综合考虑深圳市业务预报今后发展的应用需求，以及深圳市环境管理部门对空气质量业务预报的管理和技术支持要求。

再次，开展本规范相关内容的研究和编制，包括定义环境空气质量统计预报和数值预报模式基本组成和要求，规范模式应用的基本形式，提出预报效果评估的方法等。

最后，编制完成符合中国国情，特别是深圳市情、具有科学性、先进性和可操作性的环境空气质量统计预报和数值预报技术规范，达到服务深圳市环境空气质量业务预报，为深圳市环境管理及环境空气质量改善提供基础技术支持的目标。

4 标准研究内容

4.1 适用范围

本标准适用于深圳市环境空气质量预报业务部门，对环境空气质量数值预报模式的基本要求，运算处理、评估方法等内容进行了规定。

4.2 规范性引用文件

本规范制订主要引用《环境空气质量标准》(GB 3095-2012)、《环境空气质量指数(AQI)技术规定》(HJ 633)、《环境空气质量数值预报技术规范》和《环境空气质量数值预报模式源清单技术指南(试行)》(中国环境监测总站预报字(2015)30号)等标准文件对各个方面进行技术规范。

4.3 术语和定义

本规范涉及5个关键术语并对其进行定义,即为统计预报模式、环境空气质量数值预报模式、环境空气质量数值预报、模式污染源清单和大气化学资料同化。

统计预报方法的基本原理是以统计学方法为基础,利用现有空气质量监测数据和气象资料,基于统计分析,研究不同气象条件下大气污染物浓度的变化规律,建立大气污染物浓度与气象参数间的统计预报模式,从而根据输入的气象预报资料来预测未来大气污染物浓度和环境空气质量水平。本定义主要参考了《环境空气质量预报预警方法技术指南》(第二版)中“统计预报方法”的定义。

环境空气质量数值预报模式是基于控制污染现象的基本物理和化学原理,用数学方程组描述大气污染现象,借助于大型计算机通过数值方法求解基本方程组,从而预测各种不同条件下的空气质量状况的系统。本定义主要参考了《大气环境化学》(第二版)中“空气质量预报模式”的定义。

环境空气质量数值预报是利用环境空气质量数值模式,对大气中的主要污染物浓度及时空变化进行形势预报,预测城市和区域环境空气质量状况和潜在污染过程,为群众的生活和生产活动提供指导和服务,为管理部门采取应对措施提供科学依据。本定义主要参考了《环境空气质量预报预警方法技术指南》(第一版)中“数值预报”的定义。

模式污染源清单是基于大气污染物源排放清单和源清单处理模式,结合人口和交通路网等地理信息数据,以及不同类型排放源的时间分配曲线,根据环境空气质量数值预报模式直接输入的时空分辨率、化学机制要求,处理获得的网格化源排放数据。本定义主要参考了《环境空气质量数值预报模式源清单技术指南(试行)》(总站预报字(2015)30号)的定义。

大气化学资料同化是基于最优估计理论,利用模式状态变量的时空演变规律和物理化学属性的持续约束,将多源大气化学成分观测信息不断融入到环境空气质量模式系统中,以更加精确地估计或预测未知变量,减小不确定性的方法。本

定义主要参考了《环境空气质量预报预警方法技术指南》（第一版）中“资料同化”的定义。

4.4 环境空气质量数值预报模式基本要求

建立数值预报模式应考虑空间尺度范围、空间分辨率、预报时长和预报输出时间间隔等基本要求。

4.4.1 空间尺度范围

空气质量预报模式应客观反映一定空间范围内的环境空气质量状况和变化规律，根据模式计算区域的覆盖范围分为全球尺度、大陆尺度、区域尺度和城市尺度。城市尺度范围应覆盖城市及周边区域，同样还需要根据环境空气质量预报需求进行确定。

4.4.2 空间分辨率

根据城市空间大小，以及环境空气质量预报需求，同时借鉴目前全国城市环境空气质量预报模式系统建设的实践，城市尺度的预报模式水平分辨率应设置在 1 公里~5 公里之间。城市群区域尺度预报水平分辨率通常为 10 公里~30 公里。

预报模式垂直层可根据实际预报需求进行确定，一般在边界层以内进行预报。边界层内分层设置需要考虑诸多因素，比如是否需要反应垂直气象或污染物垂直变化情况，是否考虑计算和展示的便利情况。

4.4.3 预报时长

根据生态环境部和各级环保部门开展空气质量预报的要求，为满足环境各部门实施大气污染管控和防治等应急措施，要求国家重点城市（包括直辖市、省会城市和计划单列市）开展未来 5 天城市 AQI 预报。目前在一些重点区域如长三角和珠三角城市区已开展未来 7 天的预报，京津冀及周边区域开展未来 10 天的预报。深圳市环境空气质量预报时长，应根据以上重点城市区域预报时长进行确定。

4.4.4 预报输出时间间隔

根据《环境空气质量标准》（GB 3095-2012）规定，及与环境空气质量监测和发布相匹配对空气质量数值预报模拟输出的时间间隔进行规定。

4.5 环境空气质量数值预报模式运算

4.5.1 模式污染源清单处理

污染源清单指的是在一定空间和时间范围内，与污染源排放污染物相关的各

种资料的集合，包括污染源自身的信息和污染物排放的信息。在原清单处理过程中，需要对源清单空间范围、源清单中排放源的类别、时间和空间分辨率等基本属性进行规定。

4.5.2 模式气象预报场前处理

本标准需要对空气质量预报模式的输入气象预报场涉及的基本属性进行规定，主要涉及到的有：起始时刻、时段范围、时间分辨率、区域网格坐标参数、边界层方案、辐射方案、陆面过程方案、云物理方案等。同时还要确定的是温度、风速、风向等气象要素。

4.5.3 初始边界条件设置

目前常用的空气质量数值预报模式都需要进行初始条件的设置。初始条件设置需要从已获得的模式输出或资料分析中进行提取，亦或是采用模式缺省值的方法获得初值。

4.5.4 大气化学传输运算

大气化学传输运算涉及的主要物理化学过程对模式预报结果的准确性至关重要，因此需要对其进行规定。

（1）平流过程是大气运动中重要的过程之一，指大气携带污染物传输，涉及水平和垂直平流过程。垂直风速太小对污染物垂直输送贡献小。水平风速在行星边界层中较大，是污染物水平输送的主要控制因素。

（2）扩散过程指大气中的污染物在湍流的混合作用下逐渐分散稀释的过程。主要受风向、风速、气流温度分布、大气稳定度等条件和地形条件的影响。

（3）干沉降是指大气气溶胶粒子和微量气体成分在没有降水时的沉降过程，是大气的一种自净能力。干沉降主要是由湍流扩散、重力沉降及分子扩散等作用引起。干沉降是污染物的重要汇过程，且在任何时候都能发生。

（4）湿沉降是指大气中的雨、雪等降水形式和其他形式的水汽凝结物对空气中污染物的清除过程。湿沉降过程可分为气体沉降和气溶胶沉降过程，是污染物的重要汇过程。不同模式采用的湿沉降计算公式不同，湿沉降参数化方案最常用的形式是：湿清除速率与被清除物质的浓度成比例。

（5）气相化学指大气中气体状态者之间发生的均相反应。排放到大气当中的各种气体污染物，在一定条件下会彼此之间发生化学反应，即为气相反应。

（6）气溶胶化学又称大气气溶胶化学或者大气颗粒物化学，主要用来研究

大气中气溶胶（颗粒物）的来源、形成、分布、运输、消除过程中的物理化学行为，化学组分的变化，存在状态特征，粒度谱的演变及其与大气现象的关系等。

（7）液相化学是指在大气中发生在云滴、雨滴等液态环境中的化学反应过程。发生液相反应的过程主要有降水反应、酸反应和氧化性降低反应等。

（8）多相反应又称为非均相反应，反应物多包涵两个或更多相的反应过程。在这种反应过程中，有的反应物始终为多相，有的反应物在反应过程中由单相转为多相或由多相转为单相。

于此同时，若的保障模式的预报效果，还需要考虑不同的地形特征、气象条件、污染排放特征和浓度变化规律，来设置不同的参数方案。因此对于特定的模拟区域，需要采用不同的物理化学参数方案组合，在对各季节典型时段空气质量进行模拟分析的基础上，最终确定最优物理化学过程关键参数方案组合。

4.5.5 预报产品输出

预报输出需要根据实际业务需求，制作相关预报产品。本标准规定了空气质量预报产品和气象条件预报产品的种类。主要参考了《环境空气质量标准》（GB 3095-2012）、《环境空气质量指数（AQI）技术规定（试行）》（HJ 633-2012）等。

4.6 环境空气质量数值预报模式效果评估

系统客观评价数值模式模拟结果是应用的前提条件，是进一步规范环境气候质量预报、不断提高预报质量和预报水平的重要依据。目前国内并未形成规范的评价体系。

本标准规定的评估方法适用于空气质量数值模式的业务预报性能检验，通过将预报结果和实际情况对比分析，评估各类预报参数和产品的准确率，指导深圳空气质量数值预报工作。

4.6.1 评估内容

（1）评估对象

评估对象选取是根据《环境空气质量标准》（GB 3095-2012）确定的常规污染物，如下：二氧化硫（SO₂）、二氧化氮（NO₂）、一氧化碳（CO）、颗粒物（粒径小于等于 10 微米，PM₁₀）、颗粒物（粒径小于等于 2.5 微米，PM_{2.5}）、臭氧（O₃）的日最大 1 小时平均和日最大 8 小时滑动平均，以及《环境空气质量指数（AQI）技术规定（试行）》（HJ 633-2012）中规定的空气质量指数（AQI）、AQI 级别和首要污染物等。

（2）评估类别

根据实际业务预报内容，评估内容分为空气质量指数预报评估、首要污染物浓度预报统计评估。选择的评估方法可以反映模式预报和观测间的预报差异，同时能够指示可能导致模拟误差的原因，以指导模式的后续改进。

空气质量指数预报评估通过统计 AQI 预报范围、空气质量指数预报级别、首要污染物预报准确率评估，综合评价数值模式对城市空气质量指数的预报效果。

（3）评估时效

根据目前空气质量数值预报模式的预报时效能力水平，分别对环境空气质量数值预报模式提前 24 小时、48 小时、72 小时预报结果进行评估。

（4）评估周期

预报评估以每日例行的空气质量预报为基础，考虑数据有效性要求，本标准仅规定开展季度和年度空气质量预报评估，进行月度评估时可参照执行。

（5）评估实况

本标准中与模式模拟结果进行对比的实况数据使用的是全国环境空气质量日报发布的城市环境空气质量日报 AQI 和各项污染物浓度数据。

（6）预报结果处理与计算

本标准中的预报结果处理方式和计算方法均参照 GB 3095 和 HJ 633 中的相关要求。

4.6.2 评估方法及适用性测算

（1）AQI 范围预报准确率评估

由于空气质量数值预报模式计算过程中，污染源排放清单、气象预报和边界条件等存在一定程度的不确定性，AQI 预报结果通常为范围预报。评估时段内 AQI 实况在 AQI 预报范围内，则记为准确。

本标准采用偏差百分比为 $\pm 25\%$ 区间进行计算。本方法体现了 AQI 预报范围随 AQI 数值等比例变化的原则，一定程度上解决了不同地区和不同污染状况下，评估方法无法统一的问题，并能有效规避 AQI 数值在区间临界点时可能出现的两侧区间预报评估结果矛盾的问题。

（2）AQI 级别预报准确率评估

将 AQI 预报范围对应得到 AQI 预报级别或级别范围，若 AQI 实况级别在 AQI 预报级别范围内，则认为 AQI 级别预报准确。

(3)) 首要污染物预报准确率评估

臭氧为深圳近些年来环境空气中主要的首要污染物,但由于首要污染物存在较明显的季节差异,对首要污染物的预报方法和难度也存在较大差异。因此本标准仅对首要污染物预报评估方法进行描述,为业务预报及评功提供指导性参考。

5 与开题报告的差异说明

无

6 标准实施建议

本标准以目前国内外主流的统计预报模式和数值预报模式研究发展为基础,结合国内环境监测领域开展环境空气质量业务预报的实践应用,以及深圳市空气质量预报预警工作的实际情况,规定了最基础的空气质量预报模式要求,其适用范围限定在深圳市环境监测领域的环境空气质量业务预报中。

7 参考文献

- [1] Bieser, J., A. Aulinger, V. Matthias, M. Quante and P. Builtjes (2011). SMOKE for Europe adaptation, modification and evaluation of a comprehensive emission model for Europe. *Geoscientific Model Development* 4(1): 47-68.
- [2] Chang, J. C., Hanna, S. R. (2004). Air quality model performance evaluation. *Meteorology and Atmospheric Physics*, 87(1), 167-196.
- [3] Cox, W. M. (1992). Protocol for determining the best performing model (No. PB-93-226082/XAB; EPA--454/R-92/025). Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC (United States). Technical Support Div..
- [4] Davis, C., B. Brown, and R. Bullock, 2006: Object-based verification of precipitation forecasts. Part I: Methods and application to mesoscale rain areas. *Mon. Wea. Rev.*, 134, 1772-1784.
- [5] Derwent, D., Fraser, A., Abbott, J., Jenkin, M., Willis, P., & Murrells, T. (2010). Evaluating the performance of air quality models. Report prepared for the UK Department for Environment, Food and Rural Affairs. Ebert, E.E., 2008: Fuzzy verification of high resolution gridded forecasts: A review and proposed framework. *Meteorol. Appl.*, 15, 51-64.
- [6] Li, M., Q. Zhang, J. Kurokawa, J. H. Woo, K. B. He, Z. F. Lu, T. Ohara, Y. Song, D. G. Streets, G. R. Carmichael, Y. F. Cheng, C. P. Hong, H. Huo, X. J. Jiang, S. C. Kang, F. Liu, H. Su and B. Zheng (2017). MIX: a mosaic Asian anthropogenic emission inventory under the international collaboration framework of the MICS-Asia and HTAP. *Atmospheric Chemistry And Physics* 17(2): 935-963.
- [7] Murphy, A. H. (1993). What is a good forecast? An essay on the nature of goodness in weather forecasting. *Weather and forecasting*, 8(2), 281-293.
- [8] Pagowski, M., G. A. Grell, S. A. McKeen, S. E. Peckham, and D. Devenyi(2010), 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, *Q. J.R. Meteorol. Soc.*, 136(653), 2013–2024,

doi:10.1002/qj.700.

- [9] Streets, D. G., T. C. Bond, G. R. Carmichael, S. D. Fernandes, Q. Fu, D. He, Z. Klimont, S. M. Nelson, N. Y. Tsai, M. Q. Wang, J. H. Woo and K. F. Yarber (2003). An inventory of gaseous and primary aerosol emissions in Asia in the year 2000. *Journal of Geophysical Research-Atmospheres* 108(D21).
- [10] Stockwell W R, Middleton P, Chang J S, et al. The second generation regional acid deposition model chemical mechanism for regional air quality modeling[J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 1990, 95(D10): 16343-16367.
- [11] Stockwell W R, Kirchner F, Kuhn M, et al. A new mechanism for regional atmospheric chemistry modeling[J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 1997, 102(D22): 25847-25879.
- [12] Torseth, K., W. Aas, K. Breivik, A. M. Fjaeraa, M. Fiebig, A. G. Hjellbrekke, C. L. Myhre, S. Solberg and K. E. Yttri (2012). Introduction to the European Monitoring and Evaluation Programme (EMEP) and observed atmospheric composition change during 1972-2009. *Atmospheric Chemistry And Physics* 12(12): 5447-5481.
- [13] Wang, S. S., J. Y. Zheng, F. Fu, S. S. Yin and L. J. Zhong (2011). Development of an emission processing system for the Pearl River Delta Regional air quality modeling using the SMOKE model: Methodology and evaluation. *Atmospheric Environment* 45(29): 5079-5089.
- [14] Yu, S., Eder, B., Dennis, R., Chu, S. H., & Schwartz, S. E. (2006). New unbiased symmetric metrics for evaluation of air quality models. *Atmospheric Science Letters*, 7(1), 26-34.
- [15] Yu, S., Mathur, R., Schere, K., Kang, D., Pleim, J., Young, J., ... & Rao, S. T. (2008). Evaluation of real - time PM_{2.5} forecasts and process analysis for PM_{2.5} formation over the eastern United States using the Eta - CMAQ forecast model during the 2004 ICARTT study. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 113(D6).
- [16] 白晓平, 李红, 方栋,等. 资料同化方法在空气污染数值预报中的应用研究[J]. *环境科学*, 2008, 29(2):283-289.
- [17] 白永清, 祁海霞, 刘琳,等. 华中区域环境气象数值预报系统及其初步应用[J]. *高原气象*, 2016, V35(6):1671-1682.
- [18] 曹国良, 张小曳, 龚山陵, 等.中国区域主要颗粒物及污染气体的排放源清单, *科学通报*, 2011,56 (3): 261-268.
- [19] 房小怡, 蒋维楣, 吴润等.城市空气质量数值预报模式系统及其应用[J]. *环境科学学报*, 2004(01):111-115.
- [20] 国家气象中心.《中期天气预报》(GB/T 27956-2011), 2011.
- [21] 国家气象中心.《数值天气预报产品检验规范》(GB/T 34303-2017), 2017.
- [22] 国家气象中心.《短期天气预报》(GB/T 21984-2017), 2017。
- [23] 何金梅, 刘抗, 王玉红,等. CUACE 模式在兰州城市空气质量预报中的检验订正[J]. *干旱气象*, 2017, 35(3):495-501.
- [24] 贺克斌, 余学春, 陆永琪, 郝吉明, 等. 城市大气污染物来源特征. *城市环境与城市生态* 2003,16(6): 269-271.
- [25] 环境保护部. 扬尘源颗粒物排放清单编制技术指南(试行). 2014.
- [26] 环境保护部. 生物质燃烧源大气污染物排放清单编制技术指南(试行). 2014.
- [27] 环境保护部. 大气细颗粒物一次源排放清单编制技术指南(试行). 2014。
- [28] 环境保护部. 大气挥发性有机物源排放清单编制技术指南(试行). 2014。
- [29] 环境保护部. 大气氨源排放清单编制技术指南(试行). 2014。

- [30] 环境保护部. 大气可吸入颗粒物一次源排放清单编制技术指南(试行). 2014。
- [31] 环境保护部. 道路机动车大气污染物排放清单编制技术指南(试行). 2014。
- [32] 环境保护部. 非道路移动源大气污染物排放清单编制技术指南(试行). 2014。
- [33] 胡建林. 珠江三角洲污染源排放清单研究[D]. 2005.
- [34] 黄成, 陈长虹, 李莉, 等. 长江三角洲地区人为源大气污染物排放特征研究. 环境科学学报, 2011, 31(9): 1858-1871.
- [35] 李杰, 杨文夷, 陈焕盛, 等. 东亚大气可吸入颗粒物时空分布的数值模拟研究[J]. 环境科学学报, 2014, 34(3): 548-557
- [36] 刘峻峰, 李金龙, 白郁华. 大气光化学烟雾反应机理比较(II)HO_x 和光化学氧化产物的比较[J]. 环境化学, 2001, 20(4):313-319.
- [37] 刘琳, 白永清, 林春泽, 等. 华中区域空气质量数值预报系统评估及气溶胶辐射效应的模拟研究[J]. 气象, 2018, 44(09):65-76.
- [38] 娄珊珊, 陈光舟, 邱学兴. WRF 不同参数化方案对安徽一次暴雨过程模拟的影响分析[J]. 气象科学, 2015, 35(03):370-378.
- [39] 潘锦秀, 朱彬, 晏平仲, 等. 京津冀区域重污染天气过程数值预报评估新方法[J]. 环境科学学报, 2016, 36(8): 2752-2760
- [40] 唐孝炎, 张远航和邵敏. 大气环境化学(第二版)[M]. 高等教育出版社. 2006.
- [41] 田贺忠, 郝吉明, 陆永琪, 等. 中国氮氧化物排放清单及分布特征. 中国环境科学, 2001, 21(6): 493-497.
- [42] 王茜, 伏晴艳, 王自发, 等. 集合数值预报系统在上海市空气质量预测预报中的应用研究[J]. 环境监控与预警, 2010, 02(4):1-6, 11.
- [43] 王自发, 谢付莹, 王喜全, 等. 嵌套网格空气质量预报模式系统的发展与应用. 大气科学, 2006, 30(5): 778-790.
- [44] 王自发, 吴其重, Alex Ghaguidi, 等. 北京空气质量多模式集成预报系统的建立及初步应用. 南京信息工程大学学报: 自然科学版, 2009, 1(9): 19-26
- [45] 王哲, 王自发, 李杰, 等. 气象-化学双向耦合模式(WRF—NAQPMS)研制及其在京津冀秋季重霾模拟中的应用[J]. 气候与环境研究, 2014, 19(2):153-163.
- [46] 王开燕, 邓涛, 邓雪娇, 等. 珠三角空气质量数值预报系统的检验与订正研究[J]. 环境科学与管理, 2017, 42(1):47-49.
- [47] 谢敏, 钟流举, 陈焕盛. CMAQ 模式及其修正预报在珠三角区域的应用检验[J]. 环境科学与技术, 2012, 35(2): 96-101.
- [48] 徐祥德. 城市大气环境观测工程技术与原理[M]. 2003.
- [49] 薛亦峰, 闫静, 钟连红, 等. PM_{2.5} 源解析方法及控制对策研究[C]. 中国环境科学学会 pm_{2.5} 监测及防治技术高级研讨会. 2012.
- [50] 杨文夷, 李杰, 陈焕盛等. 东亚边界层臭氧时空分布的数值模拟研究. 中国环境科学, 2014, 34(7):1633-1641
- [51] 曾新民, 吴志皇, 宋帅, 等. WRF 模式不同陆面方案对一次暴雨事件模拟的影响[J]. 地球物理学报, 2012, 55(1):16-28.
- [52] 张宁娜, 黄阁, 吴曼丽, 等. 2010 年国内外 3 种数值预报在东北地区的预报检验[J]. 气象与环境学报, 2012, 28(2):28-34.
- [53] 张强, Z. Klimont, D. Streets, 霍红, 贺克斌. 中国人为源颗粒物排放模型及 2001 年排放清单估算. 自然科学进展. 2006, 16(2): 223-231.
- [54] 张远航, 李金龙, 唐孝炎. 一个液相化学反应机理的建立和应用[J]. 环境科学学报, 1993, 13(4):460-472.

- [55] 张碧辉, 刘树华, 马雁军. MYJ 和 YSU 方案对 WRF 边界层气象要素模拟的影响[J]. 地球物理学报, 2012, 55(7):2239-2248.
- [56] 赵斌, 马建中. 天津市大气污染源排放清单的建立[J]. 环境科学学报, 2008(02):368-375.
- [57] 朱莉莉, 晏平仲, 王自发等. 江苏省级区域空气质量数值预报模式效果评估. 中国环境监测. 2015, 31(2):17-23.
- [58] 中国环境监测总站. 《环境空气质量标准》(GB3095-2012). 2012.
- [59] 中国环境监测总站. 《环境空气质量监测点位布设技术规范(试行)》(HJ664-2013). 2013.
- [60] 中国环境监测总站. 环境空气质量预报预警方法技术指南(第一版)[M]. 中国环境出版社. 2014.
- [61] 中国环境监测总站. 环境空气质量预报预警方法技术指南(第二版)[M]. 中国环境出版社. 2017.
- [62] 周晶, 易晓娟, 刘佳泓. 大气污染物排放清单研究现状[C]// 2014 中国环境科学学会学术年会.