罗才桂,樊 晋,刘梦璇,等.大落差山地边界层方案的订正及臭氧模拟 [J]. 中国环境科学, 2025,45(10):5357-5366.
Luo C G, Fan J, Liu M X, et al. Modification of the boundary layer scheme in complex terrain and evaluation of ozone simulation [J]. China Environmental Science, 2025,45(10):5357-5366.

大落差山地边界层方案的订正及臭氧模拟

罗才桂[1,2],樊 晋[1,2,3*],刘梦璇[1,2],颜廷昱[4],苏有琦[1,2],李茂善[1,2],张小玲[1,2] (1.成都信息工程大学大气科学学院,四川 成都 610225；2.成都平原城市气象与环境四川省野外科学观测研究站,四川 成都 610225；3.成都信息工程大学云南自然灾害防御技术研发中心,云南 昆明 650000；4.成都信息工程大学电子工程学院,四川 成都 610225)

摘要：通过在大落差山地开展边界层湍流脉动量观测,基于观测数据对一阶非局地边界层方案进行本地适用性订正,并评估订正后对臭氧的模拟性能.结果表明: 订正方案显著缓解了区域地面臭氧浓度的低估问题,将模拟偏差由−5.14×10^{-9} 降低至−2.32×10^{-9},其中臭氧平流与化学过程为改善的主要驱动因素.通过修改 YSU (Yonsei University)边界层方案中的最小湍流扩散系数,不同下垫面高空臭氧浓度呈现出平流与垂直混合过程的相反贡献特征,揭示了大落差山地与毗邻平原在不同高度层臭氧输送机制的显著差异.研究成果为复杂地形区域边界层参数化优化与臭氧模拟精度提升提供了理论依据与方法支撑.

关键词：边界层参数化方案；臭氧模拟；WRF-Chem；最小湍流扩散系数
中图分类号：X511 **文献标识码**：A **文章编号**：1000-6923(2025)10-5357-10

Modification of the boundary layer scheme in complex terrain and evaluation of ozone simulation. LUO Cai-gui[1,2], FAN Jin[1,2,3*], LIU Meng-xuan[1,2], YAN Ting-yu[4], SU You-qi[1,2], LI Mao-shan[1,2], ZHANG Xiao-ling[1,2] (1.School of Atmospheric Sciences, Chengdu University of Information Technology, Chengdu 610225, China；2.Chengdu Plain Urban Meteorology and Environment Observation and Research Station of Sichuan Province, Chengdu 610225, China；3.Yunnan R&D Institute of Natural Disaster on Chengdu University of Information Technology, Kunming 650000, China；4.College of Electronic Engineering, Chengdu University of Information Technology, Chengdu 610225, China). *China Environmental Science*, 2025,45(10)：5357~5366

Abstract：The complex topographical conditions from the eastern Tibetan Plateau to the Chengdu Plain pose significant challenges for traditional boundary layer parameterization schemes, which in turn affects the accuracy of regional air quality models. To better understand these challenges, boundary layer turbulence flux observations were conducted in mountainous regions with substantial elevation variations. Based on these observations, a first-order nonlocal boundary layer scheme was refined for better applicability to local conditions, and its impact on ozone (O_3) simulations was assessed. The results show that the modified scheme improved WRF-Chem's simulation of O_3 advection and chemical processes, reducing the surface O_3 concentration bias from −5.14 ×10^{-9} to −2.32×10^{-9}, demonstrating improved model performance. Moreover, differences in O_3 advection and vertical mixing highlighted distinct transport mechanisms between the mountainous region and the adjacent plains, emphasizing the influence of complex terrain on regional air quality.

Key words：Yonsei University Scheme (YSU)；ozone；WRF-Chem；*K*zmin

青藏高原东缘至成都平原过渡带地形为典型大落差山地,垂直落差逾 2000m 的陡峭地形导致地表热力与动力过程呈现剧烈非均匀性,深刻影响大气边界层结构与污染物传输机制[1-5].作为地表与自由大气间物质能量交换的界面,大气边界层高度、湍流强度与稳定度的时空演变直接调控污染物的垂直混合与传输路径[6].然而,现有主流边界层参数化方案多基于平坦或缓坡地形的观测数据构建,对大落差山地湍流、热力层结及多尺度环流等特征的模拟存在系统性偏差[7],导致区域空气质量模式对 O_3 等二次污染物的浓度场与传输通量估算显著失真.已有研究表明,该过渡带夏季 O_3 峰值浓度的模式模拟误差普遍超过 20%,严重制约山地型城市群污染防控决策的科学性[8].

一阶非局地闭合方案 YSU(Yonsei University)

收稿日期：2025-02-25
基金项目：国家自然科学基金资助项目(42105167);四川省留学回国人员科技活动项目(川人社函 703);成都市科技项目(2023-YF09-00013-SN);四川省自然科学基金资助项目(2025ZNSFSC0332);国家重点研发计划项目(2023YFC3709301)
* 责任作者, 副教授, fanjin@cuit.edu.cn

在 K 理论基础上显式表征边界层顶夹卷过程,可更精准刻画边界层高度的动态演变[9],在污染物垂直扩散模拟中展现出优势[10-11].如在沈阳冬季案例中,YSU 方案因模拟的边界层顶夹卷和边界层内混合作用较强,有利于污染物垂直扩散[12].然而,在京津冀地区的研究发现,YSU 方案的使用对 O_3 浓度的模拟存在低估,且呈现显著昼夜不对称性[13].对 YSU 方案的敏感性试验表明,通过订正湍流扩散系数阈值,可改善 O_3 模拟偏差,同时提升边界层热力结构的重构精度,为提升 YSU 方案的模拟性能提供了思路[14-15].

尽管 YSU 方案的改进潜力已被初步验证,但其在大落差山地的适用性仍面临关键瓶颈:首先,该区域高分辨率湍流脉动观测数据匮乏,难以支撑 YSU 方案的本地化订正;其次,地形强迫下边界层内 O_3 的传输扩散响应机制尚未量化.本文通过布设三维超声风速仪与气象要素垂直梯度观测网络,获取青藏高原东缘大落差山地边界层湍流多参数数据集,据此订正 YSU 方案中湍流扩散系数阈值,并耦合 WRF-Chem(大气研究与预报-化学模式)大气化学模式,评估区域 O_3 模拟性能的提升效果.不仅为大落差山地边界层参数化提供普适性方法,更为成渝城市群 O_3 污染联防联控提供技术支撑.

1 数据与方法

1.1 研究区域概况

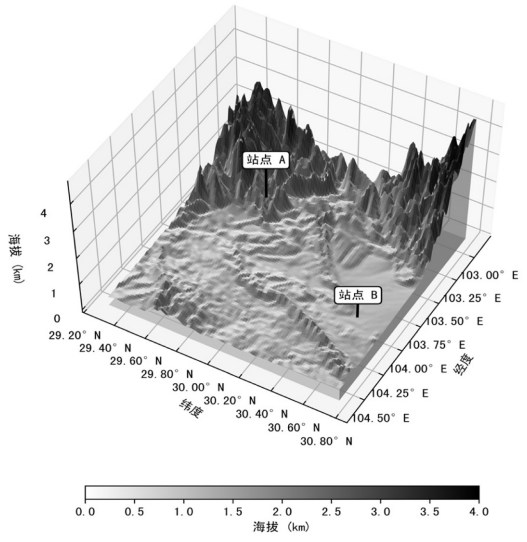


图 1 研究区地形示意

Fig.1 Topographic map of the study area

站点 A:四峨山站大气环境气象观测塔;站点 B:成都信息工程大学大气环境气象观测站,下同

青藏高原东缘至成都平原过渡带地势陡峭,该大落差地形显著影响区域大气边界层结构和污染物传输分布[16].研究区内布设两处气象观测站点(图 1):1)四峨山站(29.66°N,103.46°E;海拔 970m)位于四川省乐山市沙湾区葫芦镇四峨山村,属成都平原城市气象与环境四川省野外科学观测研究站.站点依托 60m 大气环境气象观测塔,配备三层涡动相关观测系统,重点观测大落差地形下的边界层湍流特征;2)成都平原站(30.58°N, 103.99°E;海拔 486m)位于成都信息工程大学航空港校区,同属成都平原城市气象与环境四川省野外科学观测研究站,代表成都平原典型气象环境.两站空间跨度达 120km,形成地形梯度观测对比.

1.2 数据来源

大落差地形边界层涡动相关数据来自于四峨山站大气环境气象观测塔 20、38、56m 处布设的三维超声风速仪 CSAT3A 和红外气体分析仪 EC150,观测频率 10Hz,观测要素为脉动风速、声学虚温、CO_2 和水汽密度,时段选取为 2022 年 8 月 11~15 日.微气象梯度观测位于观测塔 2、10、16、18、20、22、25、30、56 和 58m 处,共 10 层,观测要素为气温、气压、风速风向、相对湿度.O_3 浓度同时段观测数据来自于成都信息工程大学大气环境气象观测站的 Thermo 49i O_3 分析仪,采样头高度距地表 5m,同时观测 2m 气温.为确保观测数据的准确可靠,基于“3σ 准则”进行数据完整性检验与异常值剔除,并通过人工核验修正仪器漂移误差,最终构建时空连续的高质量观测数据集,有效数据率>98%.

O_3 模拟选用 WRF-Chem v4.0,驱动数据使用美国国家环境预报中心发布的 FNL 再分析资料,时空分辨率为 6h 0.25°×0.25°,采用三层嵌套网格,区域如图 2 所示;模拟所需人为排放数据来自于多尺度排放清单(MEIC),分辨率为 0.1°×0.1°,涵盖 SO_2、NO_x、VOCs、$PM_{2.5}$ 和 PM_{10} 等主要污染物,并涉及电力、工业、交通和居民等行业排放[17-18];所需生物源排放采用 MEGAN 2.0 模型制作[19].模式配置和数据使用见表 1.

1.3 一阶非局地边界层方案介绍

选取的一阶非局地大气边界层方案为 YSU 方案[31],是一种基于 MRF(Medium Range Forecast)方案改进的 K 理论方案[32].该方案不仅考虑非局地混

合作用,还引入边界层顶的夹卷过程,以提高边界层模拟的精度(式 1).

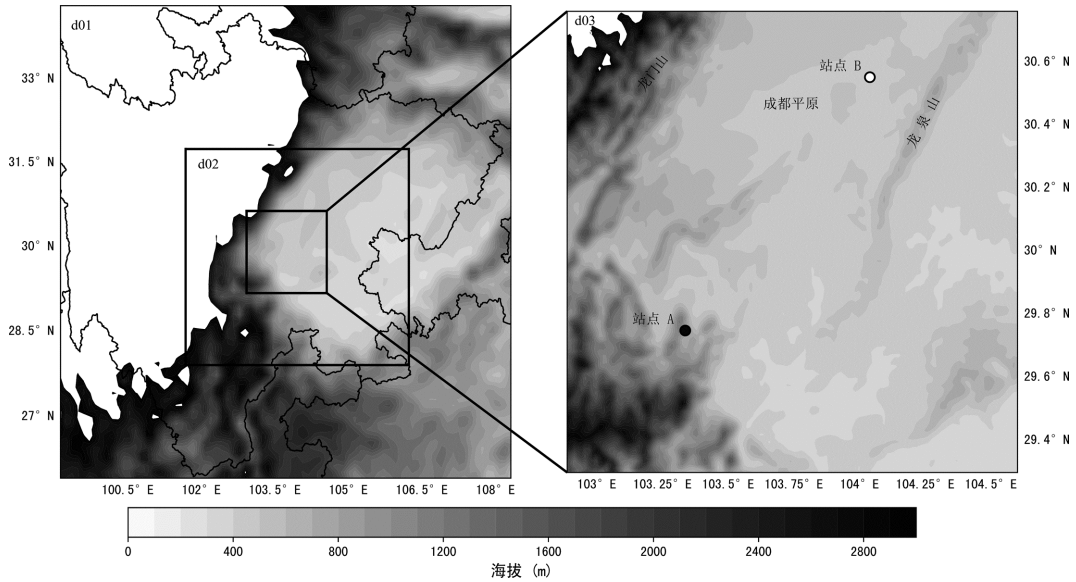


图 2　模式模拟范围

Fig.2　Model simulation domain

审图号:GS(2024)0650 号

表 1　WRF−Chem 模式设置

Table 1　WRF−Chem model configuration

模式运行必要组件	模式必要组件具体配置
水平网格	3 层嵌套(第 1 层:12km×12km,第 2 层:4km×4km,第 3 层:1.3km×1.3km);中心经纬度:30.2°N,103.7°E
垂直层数	38 层,从地表延伸到 100hPa
驱动场	NCEP−FNL 再分析资料(0.25°×0.25°,6 小时间隔)
微物理方案	Lin 微物理方案[20]
长、短波辐射方案	RRTMG 方案[21]
积云对流方案	Grell3D 方案[22]
陆面过程方案	Noah LSM 方案[23]
边界层方案	YSU 方案[24]
气相化学机理	RADM2[25]
气溶胶机理	MADE/SORGAM 方案[26]
光解方案	Madronich 光解(TUV)[27]
近地层方案	MM5Monin−Obukhov 方案[28]
人为源排放数据	MEIC 清单[29]
自然源排放数据	MEGAN 2.0[30]

$$\frac{\partial C}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial z}[K_c(\frac{\partial C}{\partial z}-\gamma_c)-(\overline{w'c'})_h(\frac{z}{h})^3] \tag{1}$$

式中:t 为时间;z 为距地高度;h 为混合层高度;C 为诊断变量(如风速、位温等);K_c 为对应诊断变量 C 的湍流扩散系数;γ_c 为非局地梯度引起的通量输送的局地梯度修正项,夹卷过程则表达为 $-\overline{(w'c')_h}(\frac{z}{h})^3$,其中 $\overline{(w'c')_h}$ 为诊断变量 C 在混合层顶的垂直通量.

YSU 方案中,混合层内动量湍流扩散系数的计算公式如下:

$$K_{zm}=\kappa w_s z(1-\frac{z}{h})^p \tag{2}$$

式中:κ为卡门常数,取 0.4;w_s 为混合层速度尺度;z 为距地高度;h 为混合层高度;p 为廓线形状指数,取值为 2.WRF−Chem v4.0 模式中,YSU 边界层方案 K_{zm} 的默认取值为 0.01m²/s.

1.4　试验方案

基于 WRF−Chem v4.0 模式中的 YSU 边界层参数化方案,设置多个最小湍流扩散系数(*K*zmin)值,开展风速和湍流动量通量对不同 *K*zmin 值的敏感性试验,并结合四峨山站大气环境气象观测塔涡动相关观测数据,评估不同 *K*zmin 值在大落差地形的适用性,进而对 YSU 方案进行订正.

在 YSU 方案订正的基础上,设计两组对比试验:BASE 组采用方案默认 *K*zmin 值;NEW 组采用方案订正后的 *K*zmin 值,并保持 WRF−Chem 模式其他物理和化学参数化方案不变,分别模拟区域 O_3 浓度时空分布,进而评估订正后的 *K*zmin 值对 O_3 平流输送、垂直混合和化学过程的影响.

2　结果与分析

2.1　YSU 方案对于风和湍流动量通量的模拟

YSU 方案的风速模拟结果显示,其对近地层风

速的再现效果较好.在 20m 以下,风速随高度递减的趋势模拟较准确,整体相关系数均超过 0.97,最大误差为 1.28m/s.除 8 月 11 日外,20~60m 高度范围内的风速模拟值普遍存在低估.这一偏差可能与观测点的特殊地形条件密切相关.由于观测点位于半山坡地带,受地形风影响显著,而 YSU 方案在提取和应用过程中未充分考虑地形因素,从而导致模拟误差的产生.

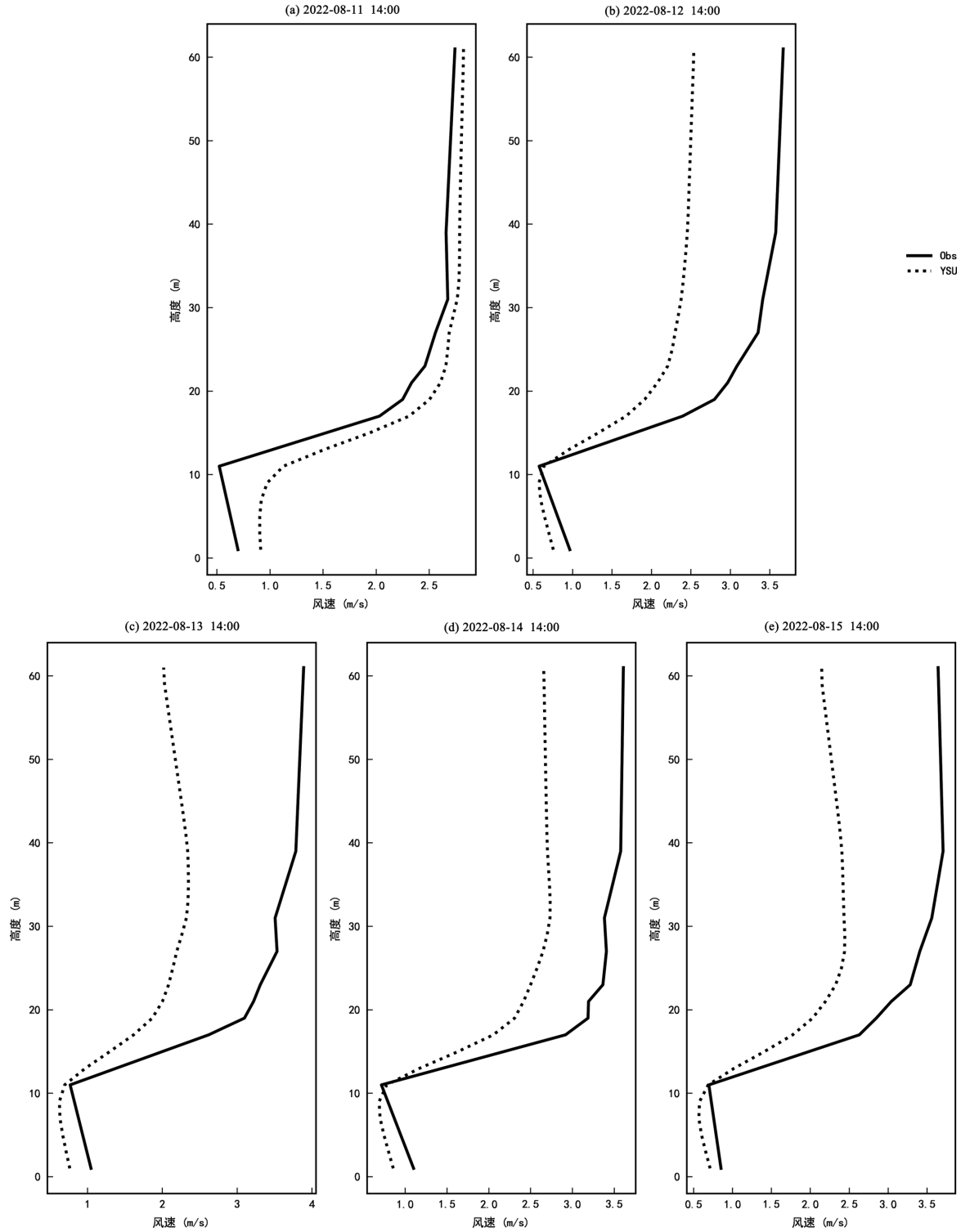


图 3 YSU 方案对风速模拟结果

Fig.3 Wind speed simulation results of the YSU scheme

蓝色为 YSU 方案模拟结果,红色为观测数据

表 2　YSU 方案对风速(m/s)模拟的相关系数和均方根误差

Table 2　Correlation coefficient and root mean square error of wind speed(m/s) simulation in the YSU scheme

时刻	*R*	RMSE
2022-08-15 14:00	0.98	1.07
2022-08-14 14:00	0.99	0.74
2022-08-13 14:00	0.97	1.28
2022-08-12 14:00	0.99	0.91
2022-08-11 14:00	0.99	0.23

在湍流动量通量的模拟中,设置 YSU 方案的 *K*zmin=0.1m^2/s 时,模拟值偏小,随着 *K*zmin 值的增大,模拟效果显著提升.通过分析 8 月 11~15 日的湍流动量通量模拟结果,可以看出,*K*zmin 值的最佳选择在一天中的不同时间段有所不同.具体而言,8 月 11 日 10:30~12:00 时段,*K*zmin=1.0m^2/s 效果最佳;12:00~13:00 时,*K*zmin 接近 0.1m^2/s 表现较好;13:00~16:30 时,*K*zmin=1.0m^2/s 效果更佳,而 17:00 后,*K*zmin=0.3m^2/s 效果最佳.8 月 12 日整体表现显示 *K*zmin 接近 0.1m^2/s 时效果较好,但在 16:00 时观测值突然增大,YSU 方案未能准确捕捉到这一变化,可能与分辨率不足有关.8 月 13 日的模拟结果表明,增大 *K*zmin 值有助于改善峰值的模拟,但可能导致谷值的误差增大.8 月 14 日模拟,即使 *K*zmin 设为 1.0m^2/s,在 10:30~15:30 时段内,YSU 方案仍明显低估湍流动量通量.8 月 15 日的模拟结果则显示,11:00~12:30 时 *K*zmin 接近 0.1m^2/s 效果较好,15:00~15:30 时 *K*zmin 接近 0.8m^2/s 表现最佳,而 16:00~18:00 时段 *K*zmin 接近 0.1m^2/s 效果最佳.总体来看,*K*zmin 值的选择应根据具体时间调整,以适应不同气象条件下湍流动量通量的模拟需求.

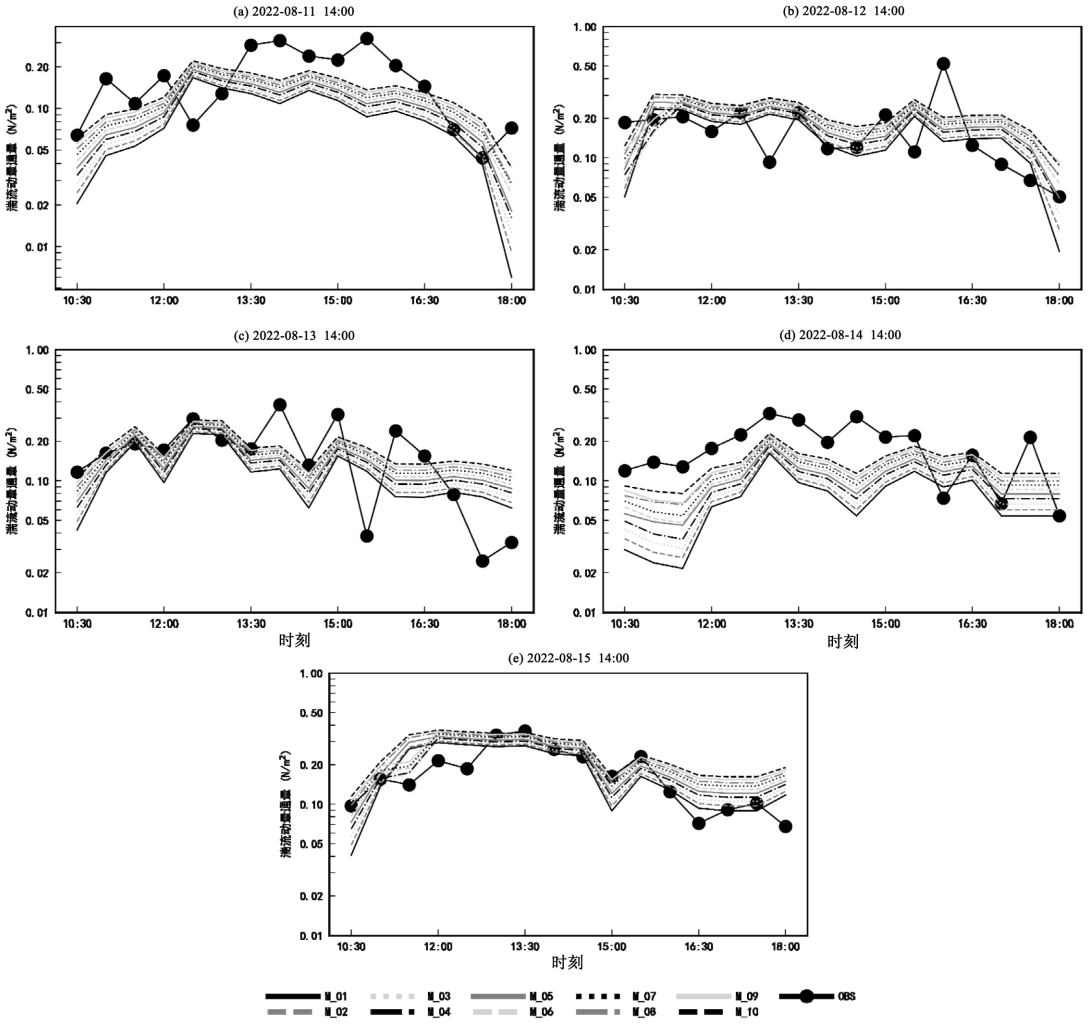


图 4　YSU 方案模拟湍流动量通量的结果

Fig.4　Simulation results of turbulent momentum flux in the YSU scheme

黑色为观测数据,M_**代表不同 *K*zmin 值的模拟结果,**代表 *K*zmin 取值,例如 M_01 代表 *K*zmin 取值为 0.1

表 3 YSU 方案模拟结果的标准化平均偏差(NMB)、一致性指数(IOA)和相关系数(R)

Table 3 Normalized mean bias (NMB), index of agreement (IOA), and correlation coefficient (R) of the YSU scheme simulation results

物理量	*K*zmin(m²/s)	NMB	IOA	*R*
湍流动量通量(N/m^2)	0.1	−30.68%	0.59	0.39
	0.2	−26.78%	0.60	0.39
	0.3	−24.34%	0.61	0.41
	0.4	−20.40%	0.61	0.40
	0.5	−14.78%	0.61	0.38
	0.6	−12.36%	0.62	0.40
	0.7	−8.29%	0.62	0.40
	0.8	−2.57%	0.61	0.38
	0.9	−0.07%	0.62	0.41
	1.0	5.67%	0.61	0.38

为了选择更适合的 *K*zmin 用于后续模拟研究,本文引入了标准化平均偏差(NMB)、一致性指数(IOA)和相关系数(*R*)进行评估,这些指标分别用于衡量模式的偏差、一致性和相关性.NMB 值越接近 0,IOA 和 R 值越接近 1,模式对实际现象的再现能力越强[33-35].根据表 3 的结果,对于湍流动量通量,*K*zmin=0.9m^2/s 时的整体相关系数为 0.41,IOA 为 0.62,显示出较为良好的模拟效果.

2.2 WRF−Chem 模式评估

在本研究中,采用了多个模式性能指标(MB:平均偏差;IOA:一致性指数;RMSE:均方根误差;R:相关系数)来验证气象因子和空气污染(包括距地面 2m 处的温度 T_{2m} 和 O_3 浓度)的模拟效果.这些指标有助于评估模式在模拟不同气象和污染因子时的偏差、一致性、准确性及相关性.

表 4 展示了 YSU 方案在模拟 2m 气温(T_{2m})以及 YSU 与 ACM2(Asymmetric Convective Model version 2)两种边界层方案在模拟 O_3 浓度过程中的平均模式性能指标.从结果来看,T_{2m} 与 O_3 的平均一致性指数(IOA)和相关系数(*R*)均较高,表明模拟结果与观测数据吻合良好.对于 T_{2m} 的模拟,模式结果与观测值非常接近,平均偏差(MB)为 0.53℃,略有高估,均方根误差(RMSE)仅为 1.51℃,误差较小.

表 4 WRF−Chem 模式模拟气象因素和 O_3 的平均性能指标

Table 4 Average performance metrics of meteorological factors and O_3 simulated by the WRF−Chem Model

物理量	MB	IOA	RMSE	*R*
T_{2m}(℃)	0.53	0.93	1.51	0.89
O_3_ACM2(×10^{-9})	−25.27	0.81	40.61	0.80
O_3_BASE(×10^{-9})	−5.14	0.76	39.62	0.67
O_3_NEW(×10^{-9})	−2.32	0.86	32.03	0.80

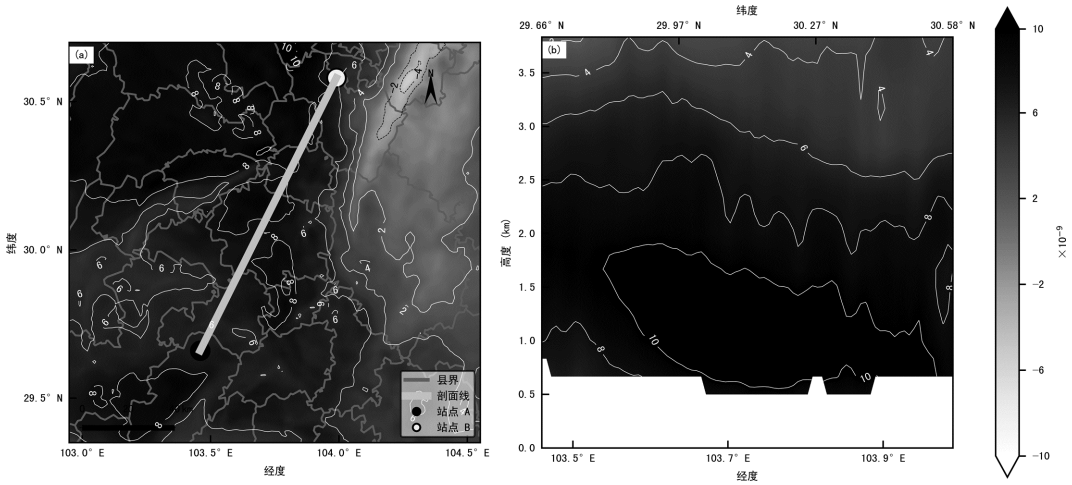


图 5 O_3 浓度差异(NEW − BASE)的分布

Fig.5 Distribution of O_3 concentration differences

(a) 地表差异分布图(审图号:GS(2024)0650 号,灰色线条为县界,下同).(b) 差异的垂直剖面图(图 5a 中的白灰色线)

在地面 O_3 浓度模拟方面,YSU 与 ACM2 两种方案在 IOA 和 RMSE 指标上差异不大,但 ACM2 的相关系数相比 BASE 方案提高了 0.13.两者之间的主要差异体现在平均偏差上:ACM2 方案的 MB 为 −25.27×10^{-9},显著大于 BASE 方案的−5.14×10^{-9},表明 ACM2 存在较为明显的低估问题.为改进 YSU 方案在 IOA 和 *R* 方面相较于 ACM2 的不足,对 YSU 边界层方案的 *K*zmin 进行了调整.结果表明,经过改进的

NEW 在 IOA、RMSE 和 R 等指标上均有显著提升,较好地缓解了地面 O_3 浓度的低估问题.该改进的关键在于增加 *K*zmin 值后,加强了地面与高空之间的物质交换,促使高空 O_3 和 NO_2 等污染物更有效地输送至地面,从而有效改善了 O_3 的模拟精度.

O_3 在垂直方向上的分布对边界层具有多方面的影响,例如可能影响辐射平衡,进而导致温度和热力结构的变化.为进一步评估四川西部 O_3 的垂直模拟效果,本研究对比了 BASE 和 NEW 两种方案的模拟结果.图 5 中,红色表示 NEW 方案与 BASE 方案的差值为正,蓝色表示差值为负(NEW−BASE).以黄色线段的起始和终止点为界,建立了垂直剖面,左下角为四峨山站点,右上角为成都信息工程大学站点.

从模拟的地面O_3浓度空间分布来看,NEW方案使得大部分区域的地面 O_3 浓度有所提高,但在图的右上角出现了一个明显的负值区域,这与该区域山脉地形有关.从垂直剖面模拟结果来看,NEW 方案显著增加了边界层中 O_3 浓度,尤其是在离地面几百米的地方, O_3 浓度的增加尤为明显.总体而言,相比于 BASE 方案,NEW 方案在边界层中增强了 O_3 的模拟能力.

2.3　O_3 模拟改进的关键过程

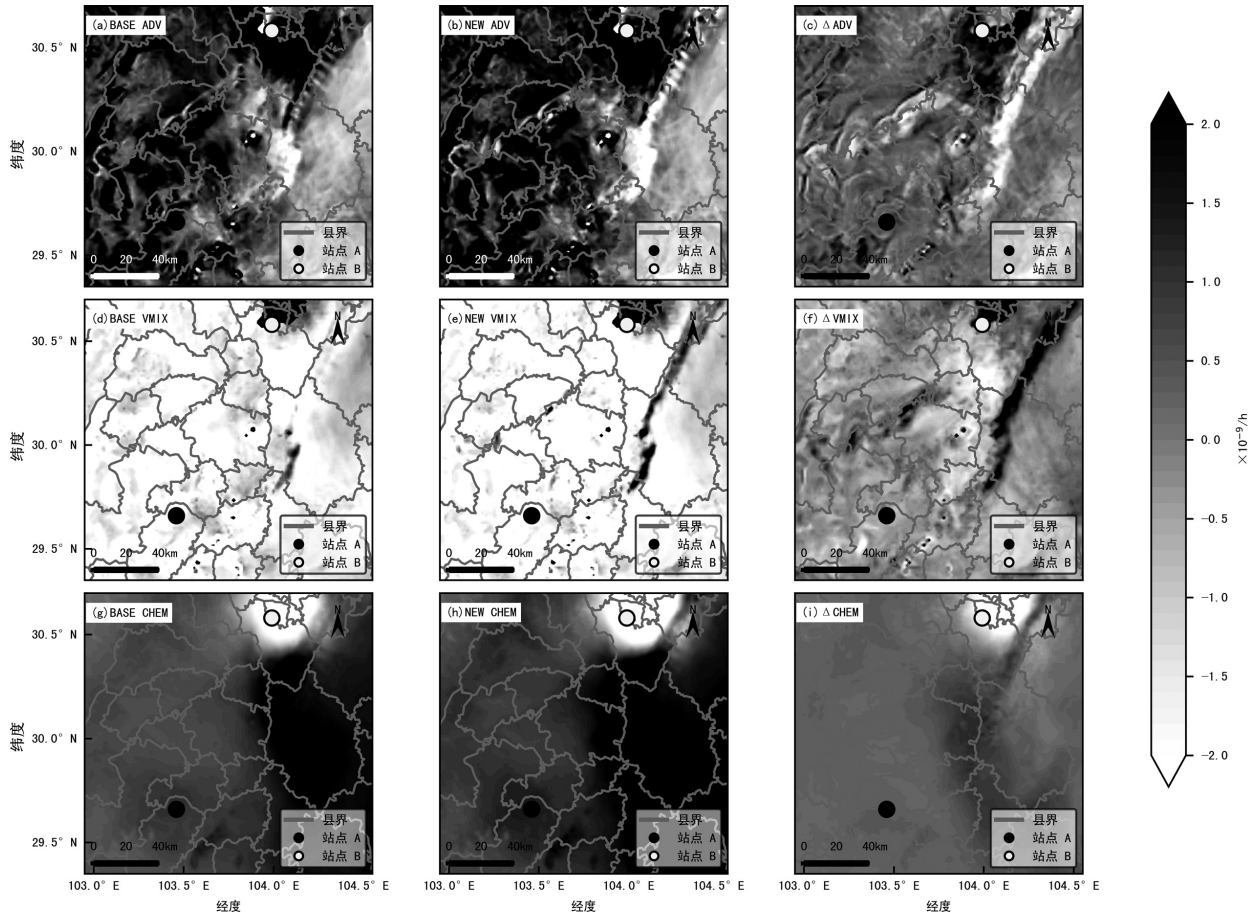


图 6　O_3 各过程的贡献分布和地表差异分布(NEW−BASE)

Fig.6　Distribution of contributions from different O_3 processes and surface difference distribution

图 6 展示了 BASE 和 NEW 方案中平流(ADV)、垂直混合(VMIX)和化学过程(CHEM)对 O_3 浓度的贡献,并通过差异图呈现两方案之间的差异.NEW 方案模拟的地面O_3浓度明显更高,为进一步探讨NEW方案中 O_3 改进的关键过程,本文分析了每个物理和化学过程引起的 O_3 变化.两个方案在 ADV、VMIX、和 CHEM 方面存在显著差异,整体来看,3 个过程的空间分布图右上角均出现与周围呈现相反数值的团状结构,这与该区域下垫面为城市,大量排放 NO_x 导致的滴定效应有关[36].

在 O_3 平流输送(ADV)方面,BASE 和 NEW 方案在西部地区主要表现为正贡献,而东部地区则以负

贡献为主,且 NEW 方案的影响程度略高于 BASE (图 6(a), 6(b)).图 6(c)显示,NEW 相较于 BASE 在四川西部地区的贡献大多为正值,表明 NEW 方案增强了 O_3 的平流输送,从而提高了地面 O_3 浓度,有助于改善低估问题.

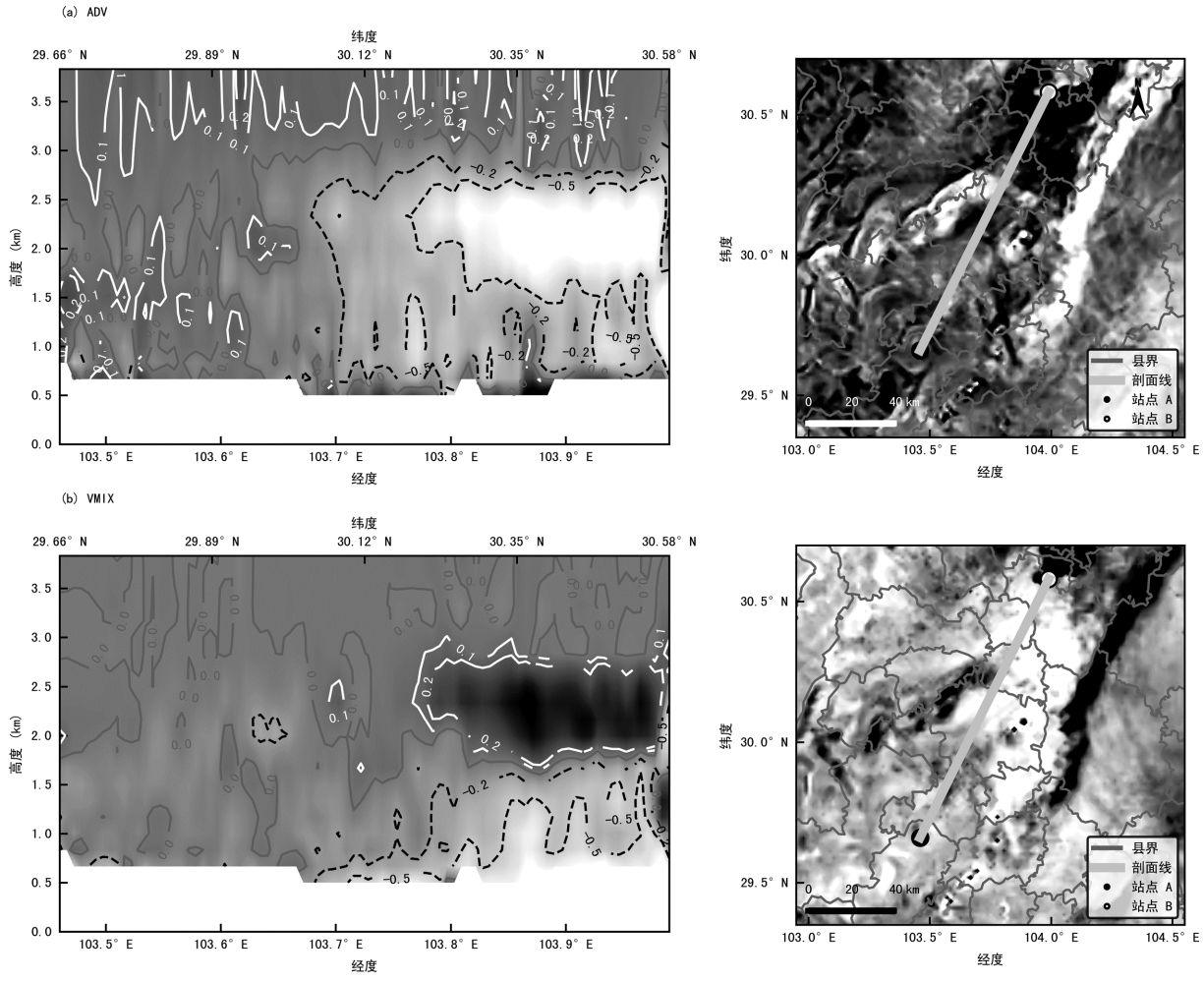
湍流混合(VMIX)主要影响污染物在垂直方向的输送,对于城市地区尤为关键.由于工业和交通排放的 NO_x 和 VOCs 较多, O_3 经湍流扩散由地表向高空输送,导致大多数地区的 VMIX 贡献为负(图 6(d), 6(e)).图 6(f)显示,NEW 方案相比 BASE,在大部分地区的 VMIX 贡献为负,意味着 NEW 方案增强了 O_3 向高空的输送,反而降低了地面 O_3 浓度.因此,VMIX 并非改善 O_3 低估的主要因素.

化学过程(CHEM)涉及 O_3 的生成与消耗以及前体物的影响.在 CHEM 方面,BASE 和 NEW 方案的贡献大多为正,且两者之间的正差异(图 6(i))表明,增加 *K*zmin 后,地面化学反应增强, O_3 生成量增加,从而提高了地面 O_3 浓度.这表明,*K*zmin 影响了 O_3 前体物(如 NO_x 和 VOCs)的浓度,进而影响 O_3 的生成.因此,CHEM 过程是改善地面 O_3 低估的关键因素.

综合来看,订正后的 *K*zmin 主要通过增强 O_3 的平流输送(ADV)和化学生成(CHEM)来提升地面 O_3 的模拟精度.

垂直剖面图展示了从四峨山站点到成都信息工程大学站点,ADV、VMIX 和 CHEM 过程对 O_3 浓度的贡献差异.整体来看,山地一侧的差值明显低于靠近城市一侧,这是由于城市的污染物排放明显高于山地所致.

在 O_3 平流输送(ADV)方面,订正后的 YSU 方案在近地面区域整体上提高了 O_3 浓度.然而,在不同下垫面条件下的高空区域,表现出不同的变化特征.在城市上空,高空 O_3 浓度明显降低,表明新方案使得 O_3 的垂直分布改变;而在山地上空,高空 O_3 浓度未见明显下降,反而与地面变化趋势一致,均有所增加.这表明,*K*zmin 的调整在低空普遍增强了 O_3 浓度,而在高空,其影响因地形不同而呈现差异化特征.



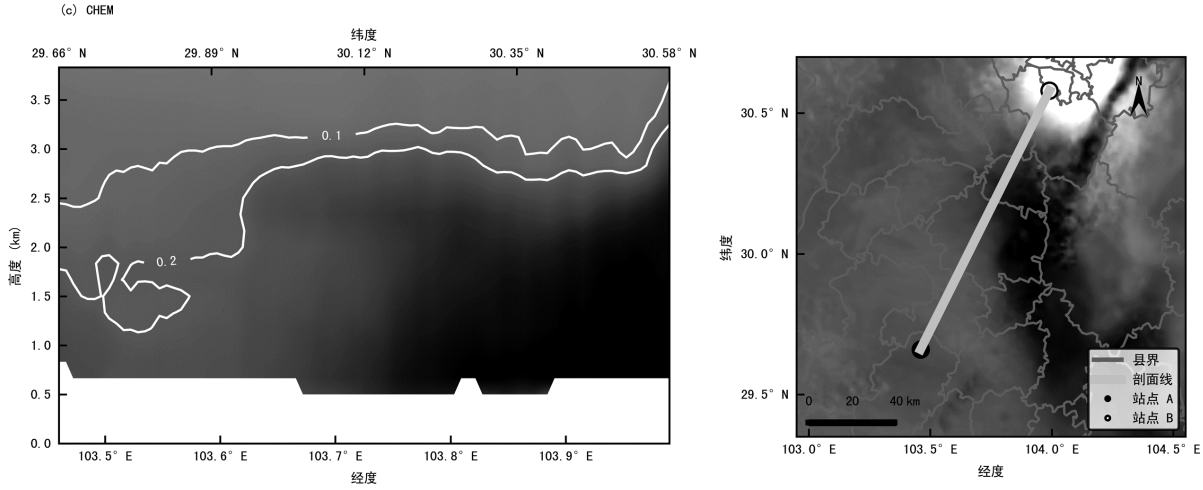


图 7　不同过程贡献差异(NEW−BASE)的分布

Fig.7　Distribution of contribution differences from different processes (NEW−BASE)

在湍流混合(VMIX)方面,城市区域 1.7km 以下的 O_3 浓度差异为负,而 1.7km 以上的高空区域则为正,说明新方案增强了湍流扩散,将地面 O_3 输送至高空.而在山地区域,VMIX 变化整体为负,表明 *K*zmin 的增加促进了地面 O_3 向更高处的输送.在化学反应(CHEM)方面,整个研究高度范围内的 O_3 浓度差异均为正,说明 *K*zmin 的调整影响了 O_3 前体物的浓度分布,进一步促进了 O_3 的生成过程.

总体而言,新方案的综合效应导致地面 O_3 浓度上升,使模拟结果更加符合实际分布特征.在山地区域,ADV 和 VMIX 过程的影响在高空与地面表现一致,而在城市区域,高空和地面的变化趋势则相反.

3　结论

3.1　订正最小湍流扩散系数(*K*zmin)对提升 O_3 模拟准确性具有重要作用,尤其是在地形复杂的高原—盆地过渡带.基于边界层湍流观测数据,发现将 *K*zmin 适度提高至 0.9m^2/s 时,模拟性能最佳.WRF−Chem 模拟结果显示,地面 O_3 浓度的平均偏差由基准方案的−5.14×10^{-9} 降低至−2.32×10^{-9},模拟精度显著提升.调整后的 *K*zmin 增强了湍流动量通量的表现,改善了边界层内的湍流交换能力.

3.2　过程诊断结果表明,平流输送(ADV)与化学反应(CHEM)是缓解 O_3 低估的主要机制.ADV 主导 O_3 的空间输送,CHEM 过程促进 O_3 及其前体物的反应,均对提升地面 O_3 浓度起到关键作用.垂直混合(VMIX)过程增强了 O_3 从地面向高空的输送,部分抵消了 ADV 和 CHEM 的增益效应.

*K*zmin 调整还对 O_3 垂直分布产生显著影响.在不同地形和高度层,高空 O_3 浓度对 *K*zmin 的响应表现出差异.山区高空 O_3 变化趋势与地面一致,而城市区域则呈现相反特征.增强的湍流扩散加强了地面 O_3 向高空的输送,重塑了 O_3 的垂直结构.

参考文献：

[1] Georgiou G K, Christoudias T, Proestos Y, et al. Evaluation of WRF/Chem model (v3. 9.1. 1) real−time air quality forecasts over the Eastern Mediterranean [J]. Geoscientific Model Development Discussions, 2022,2022:1−23.

[2] Guo W, Chen Q, Yang Y, et al. Investigating the mechanism of morning ozone concentration peaks in a petrochemical industrial city [J]. Atmospheric Environment, 2022,270:118897.

[3] Shu Z, Liu Y, Zhao T, et al. Elevated 3D structures of $PM_{2.5}$ and impact of complex terrain−forcing circulations on heavy haze pollution over Sichuan Basin, China [J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2021,21(11): 9253−9268.

[4] Shu Z, Zhao T, Chen Y, et al. Terrain effect on atmospheric process in seasonal ozone variation over the Sichuan Basin, Southwest China [J]. Environmental Pollution, 2023,338:122622.

[5] Zhang L, Guo X, Zhao T, et al. A modelling study of the terrain effects on haze pollution in the Sichuan Basin [J]. Atmospheric Environment, 2019,196:77−85.

[6] Jia W, Zhang X. Impact of modified turbulent diffusion of $PM_{2.5}$ aerosol in WRF−Chem simulations in eastern China [J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2021,21(22):16827−16841.

[7] Ko K, Cho S, Rao R R. Machine−learning−based near−surface ozone forecasting model with planetary boundary layer information [J]. Sensors, 2022,22(20):7864.

[8] 张小玲,卢宁生,雷　雨,等.成都平原城市群夏季臭氧污染特征与成因分析 [C]//第二十五届大气污染防治技术研讨会论文集, 2021.
Zhang Xiaoling, Lu Ningsheng, Lei Yu, et al. Characteristics and causes of summer ozone pollution in the Chengdu Plain urban

agglomeration [C]//Proceedings of the 25th Symposium on Air Pollution Prevention and Control Technology, 2021.

[9] Hong S Y. A new stable boundary‐layer mixing scheme and its impact on the simulated East Asian summer monsoon [J]. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 2010,136(651):1481-1496.

[10] Li X, Rappenglueck B. A study of model nighttime ozone bias in air quality modeling [J]. Atmospheric Environment, 2018,195: 210-228.

[11] Ryzhakova N, Rogova N, Pokrovskaya E, et al. Influence of natural and climatic conditions on the values of the vertical turbulent diffusion coefficient for long observation periods [J]. Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics, 2022,58(6):553-559.

[12] 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.
Zhang B H, Liu S H, Liu H P, et al. The effect of MYJ and YSU schemes on the simulation of boundary layer meteorological factors of WRF [J]. Chinese Journal of Geophysics, 2012,55(7):2239-2248.

[13] 芦延廷,赵秀娟,唐贵谦,等.边界层方案与垂直混合对京津冀地区 O_3 模拟的影响研究 [J]. 中国环境科学, 2022,42(12):5459-5471.
Lu Y T, Zhao X J, Tang G Q, et al. The study on the impact of boundary layer schemes on O3simulations in the Beijing-Tianjin-Hebei region. [J]. China Environmental Science, 2022,42(12):5459-5471.

[14] Du Q, Zhao C, Zhang M, et al. Modeling diurnal variation of surface PM 2.5concentrations over East China with WRF-Chem: Impacts from boundary-layer mixing and anthropogenic emission [J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2020,20(5):2839-2863.

[15] Wang A, Li Y, Zhao C, et al. Influence of different boundary layer 420 schemes on $PM_{2.5}$ concentration simulation in Nanjing [J]. China Environmental Science, 2021,41(7):2977-2992.

[16] Xiao D, Wen L, Zhang Y, et al. Natural gas accumulation in the basin–mountain transition zone, northwestern Sichuan Basin, China [J]. Marine and Petroleum Geology, 2021,133:105305.

[17] Li M, Liu H, Geng G, et al. Anthropogenic emission inventories in China: a review [J]. National Science Review, 2017,4(6):834-866.

[18] Li M, Zhang Q, Kurokawa J I, et al. MIX: A mosaic Asian anthropogenic emission inventory under the international collaboration framework of the MICS-Asia and HTAP [J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2017,17(2):935-963.

[19] Sindelarova K, Granier C, Bouarar I, et al. Global data set of biogenic VOC emissions calculated by the MEGAN model over the last 30years [J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2014,14(17):9317-9341.

[20] Du Y, Xu T, Che Y, et al. Uncertainty quantification of WRF model for rainfall prediction over the Sichuan basin, China [J]. Atmosphere, 2022,13(5):838.

[21] Tian J, Liu R, Ding L, et al. Evaluation of the WRF physical parameterisations for Typhoon rainstorm simulation in southeast coast of China [J]. Atmospheric Research, 2021,247:105130.

[22] Lekhadiya H, Jana R. Assimilation of INSAT-3D satellite data in WRF model [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, India Section A: Physical Sciences, 2020,90:557-564.

[23] Balzarini A, Pirovano G, Honzak L, et al. WRF-Chem model sensitivity to chemical mechanisms choice in reconstructing aerosol optical properties [J]. Atmospheric Environment, 2015,115:604-619.

[24] Thomas A, Huff A K, Hu X M, et al. Quantifying uncertainties of ground-level ozone within WRF-Chem simulations in the mid-Atlantic region of the United States as a response to variability [J]. Journal of Advances in Modeling Earth Systems, 2019,11(4):1100-1116.

[25] Yang J, Kang S, Ji Z. Sensitivity analysis of chemical mechanisms in the WRF-Chem model in reconstructing aerosol concentrations and optical properties in the Tibetan Plateau [J]. Aerosol and Air Quality Research, 2018,18(2):505-521.

[26] Bucaram C J, Bowman F M. Wrf-chem modeling of summertime air pollution in the northern great plains: Chemistry and aerosol mechanism intercomparison [J]. Atmosphere, 2021,12(9):1121.

[27] Mar K A, Ojha N, Pozzer A, et al. Ozone air quality simulations with WRF-Chem (v3. 5.1) over Europe: model evaluation and chemical mechanism comparison [J]. Geoscientific Model Development, 2016, 9(10):3699-3728.

[28] Surussavadee C. Evaluation of WRF near-surface wind simulations in tropics employing different planetary boundary layer schemes; proceedings of the 2017 8th International renewable energy congress (IREC), F, 2017 [C]. IEEE.

[29] Wei W, Li Y, Ren Y, et al. Sensitivity of summer ozone to precursor emission change over Beijing during 2010~2015: A WRF-Chem modeling study [J]. Atmospheric Environment, 2019,218:116984.

[30] Morichetti M, Madronich S, Passerini G, et al. Comparison and evaluation of updates to WRF-Chem (v3. 9) biogenic emissions using MEGAN [J]. Geoscientific Model Development, 2022,15(16):6311-6339.

[31] Hong S-Y, Noh Y, Dudhia J. A new vertical diffusion package with an explicit treatment of entrainment processes [J]. Monthly weather review, 2006,134(9):2318-2341.

[32] Hong S-Y, Pan H-L. Nonlocal boundary layer vertical diffusion in a medium-range forecast model [J]. Monthly weather review, 1996, 124(10):2322.

[33] Emery C, Liu Z, Russell A G, et al. Recommendations on statistics and benchmarks to assess photochemical model performance [J]. Journal of the Air & Waste Management Association, 2017,67(5):582-598.

[34] Hurley P J, Blockley A, Rayner K. Verification of a prognostic meteorological and air pollution model for year-long predictions in the Kwinana industrial region of Western Australia [J]. Atmospheric Environment, 2001,35(10):1871-1880.

[35] Willmott C J, Ackleson S G, Davis R E, et al. Statistics for the evaluation and comparison of models [J]. Journal of Geophysical Research: Oceans, 1985,90(C5):8995-9005.

[36] Liu Y, Tang G, Liu B, et al. Decadal changes in ozone in the lower boundary layer over Beijing, China [J]. Atmospheric Environment, 2022,275:119018.

作者简介：罗才桂(2000-),男,四川自贡人,成都信息工程大学硕士研究生,主要研究方向为大气物理学与大气环境.发表论文 1 篇. 3230101061@stu.cuit.edu.cn.