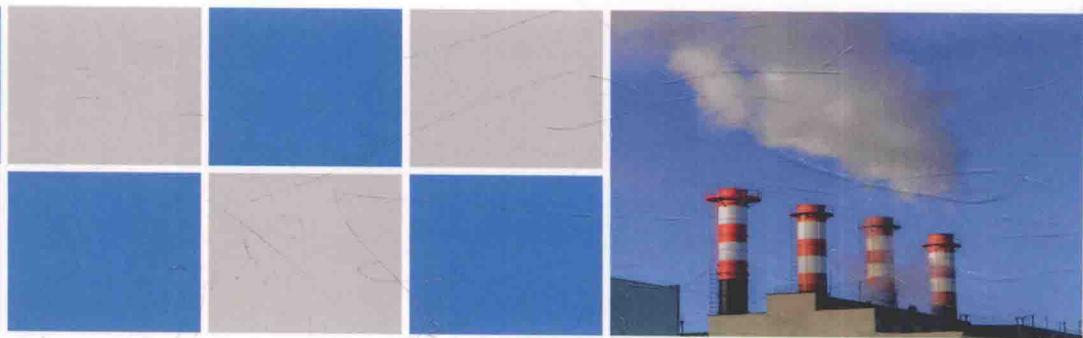


Control Priority Classification Technology of
Air Pollution Sources



大气污染源 优先控制分级技术研究

程水源 周 颖 郎建垒 著

中国环境出版社

环保公益性行业科研专项经费项目系列丛书

大气污染源优先控制分级 技术研究

程水源 周 颖 郎建垒 著

中国环境出版社·北京

图书在版编目 (CIP) 数据

大气污染源优先控制分级技术研究/程水源, 周颖, 郎建垒著. —北京: 中国环境出版社, 2016.3

ISBN 978-7-5111-2795-2

I . ①大… II . ①程… ②周… ③郎… III . ①空
气污染控制—研究 IV . ①X510.6

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2016) 第 096691 号

出版人 王新程

责任编辑 孟亚莉

责任校对 尹芳

封面设计 岳帅

出版发行 中国环境出版社

(100062 北京市东城区广渠门内大街 16 号)

网 址: <http://www.cesp.com.cn>

电子邮箱: bjgl@cesp.com.cn

联系电话: 010-67112765 (编辑管理部)

010-67112735 (第一分社)

发行热线: 010-67125803, 010-67113405 (传真)

印 刷 北京盛通印刷股份有限公司

经 销 各地新华书店

版 次 2016 年 12 月第 1 版

印 次 2016 年 12 月第 1 次印刷

开 本 787×1092 1/16

印 张 13.5

字 数 339 千字

定 价 85.00 元

【版权所有。未经许可请勿翻印、转载, 违者必究】

如有缺页、破损、倒装等印装质量问题, 请寄回本社更换

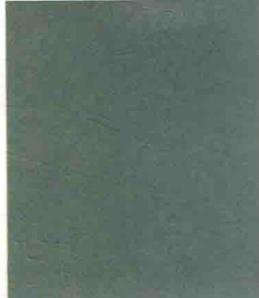
《环保公益性行业科研专项经费项目系列丛书》

编 委 会

顾 问 吴晓青

组 长 刘志全

成 员 禹 军 陈 胜 刘海波



序 言

我国作为一个发展中的人口大国，资源环境问题是长期制约经济社会可持续发展的重大问题。党中央、国务院高度重视环境保护工作，提出了建设生态文明、建设资源节约型与环境友好型社会、推进环境保护历史性转变、让江河湖泊休养生息、节能减排是转方式调结构的重要抓手、环境保护是重大民生问题、探索中国环保新道路等一系列新理念新举措。在科学发展观的指导下，环境保护工作成效显著，在经济增长超过预期的情况下，主要污染物减排任务超额完成，环境质量持续改善。

随着当前经济的高速增长，资源环境约束进一步强化，环境保护正处于负重爬坡的艰难阶段。治污减排的压力有增无减，环境质量改善的压力不断加大，防范环境风险的压力持续增加，确保核与辐射安全的压力继续加大，应对全球环境问题的压力急剧加大。要破解发展经济与保护环境的难点，解决影响可持续发展和群众健康的突出环境问题，确保环保工作不断上台阶出亮点，必须充分依靠科技创新和科技进步，构建强大坚实的科技支撑体系。

2006年，我国发布了《国家中长期科学和技术发展规划纲要（2006—2020年）》（以下简称《规划纲要》），提出了建设创新型国家战略，科技事业进入了发展的快车道，环保科技也迎来了蓬勃发展的春天。为适应环境保护历史性转变和创新型国家建设的要求，原国家环境保护总局于2006年召开了第一次全国环保科技大会，出台了《关于增强环境科技创新能力的若干意见》，确立了科技兴环保战略；2012年，环境保护部召开第二次全国环保科技大会，出台了《关于加快完善环保科技标准体系的意见》，全面实施科技兴环保战略，建设满足环境优化经济发展需要、符合我国基本国情和世界环保事业发展趋势的环境科技创新体系、环保标准体系、环境技术管理体系、环保产业培育体系和科技支撑保障体系。几年来，在广大环境科技工作者的努力下，水体污染控制与治理科技重大专项实施顺利，科技投入持续增加，科技创新能力显著增强，现行国家标准达1300余项，环境标准体系建设实现了跨越式发展，完成了100余项环

保技术文件的制修订工作，确立了技术指导、评估和示范为主要内容的管理框架。环境科技为全面完成环保规划的各项任务起到了重要的引领和支撑作用。

为优化中央财政科技投入结构，支持市场机制不能有效配置资源的社会公益研究活动，“十一五”期间国家设立了公益性行业科研专项经费。根据财政部、科技部的总体部署，环保公益性行业科研专项紧密围绕《规划纲要》和《国家环境保护科技发展规划》确定的重点领域和优先主题，立足环境管理中的科技需求，积极开展应急性、培育性、基础性科学的研究。“十一五”以来，环境保护部组织实施了公益性行业科研专项项目 439 项，涉及大气、水、生态、土壤、固废、核与辐射等领域，共有包括中央级科研院所、高等院校、地方环保科研单位和企业等几百家单位参与，逐步形成了优势互补、团结协作、良性竞争、共同发展的环保科技“统一战线”。目前，专项取得了重要研究成果，提出了一系列控制污染和改善环境质量技术方案，形成一批环境监测预警和监督管理技术体系，研发出一批与生态环境保护、国际履约、核与辐射安全相关的关键技术，提出了一系列环境标准、指南和技术规范建议，为解决我国环境保护和环境管理中急需的成套技术和政策制定提供了重要的科技支撑。

为广泛共享“十一五”以来环保公益性行业科研专项项目研究成果，及时总结项目组织管理经验，环境保护部科技标准司组织出版环保公益性行业科研专项经费系列丛书。该丛书汇集了一批专项研究的代表性成果，具有较强的学术性和实用性，可以说是环境领域不可多得的资料文献。丛书的组织出版，在科技管理上也是一次很好的尝试，我们希望通过这一尝试，能够进一步活跃环保科技的学术氛围，促进科技成果的转化与应用，为探索中国环保新道路提供有力的科技支撑。

中华人民共和国环境保护部副部长

吴晓青

2011 年 10 月

前 言

目前，我国区域大气复合污染问题形势严峻，全国频现持续多日的大范围灰霾天气，大气氧化能力不断增强，大气细粒子浓度远远高于世界卫生组织（WHO）的指导值。区域性高浓度复合污染问题，已严重制约我国经济社会发展，影响人民群众的身体健康和生态安全，大气环境质量持续改善是当前迫切需要解决的环境问题。

改善环境空气质量的有效途径最终需落实在污染源减排上。大气污染物总量控制制度，作为一项非常重要的环境调控手段，在我国大气污染控制中发挥了重要作用，成为我国大气污染控制的基本手段之一。但传统的污染源减排过程中，总量减排目标与环境质量改善关系不对应，各地区减排指标往往“自上而下”逐级“分解落实”，未考虑不同地区污染源排放对环境质量影响的差异性。而由于气象、地形、扩散能力不同，相同排放量的排放源会因所处地理位置不同而对空气质量产生不同程度的影响，且影响水平差异较大。为此，我国大气污染控制战略亟须改进思路，综合考虑区域大气一次污染与二次污染问题，建立污染源分级技术体系，甄别需优先控制的污染源，量化污染源优先控制级别及优化减排量，将我国当前以结构减排、技术减排、管理减排为主的大气污染物总量控制工作，向科学减排、效果减排推进，在保证减排任务有效完成的同时，实现最佳的环境效益和社会经济效益。

环境保护部 2012 年度环保公益性行业科研专项针对大气污染源优先控制分级技术方法设立了“基于大气污染物总量优化减排的污染源分级技术研究”项目，北京工业大学作为“区域大气复合污染防治北京市重点实验室”，承担了该项目的研究工作，本书即是项目组成员历时多年的研究成果，针对污染源分级技术基础数据获取、区域敏感源筛选技术、大气污染源优先控制分级技术等

内容进行了详细介绍。在本研究工作的基础上，项目组编制了《大气污染源优先控制分级技术指南（试行）》。环境保护部已于2014年8月20日正式发布该指南，用于指导城市或区域环境保护部门开展大气污染源优先控制分级工作，旨在进一步挖掘污染减排潜力，加强污染物减排与环境质量改善的直接关联，为编制城市或区域大气污染源优化减排方案和应急预案提供科学依据。本书也是针对该指南的全面、深入解读。

相关研究工作和本书的编写工作中，黄青、王芳、李莉、李国昊、温维、樊守彬、孙筱强、刘宇婷、李文忠、隗潇、张筱青、赵蓓蓓、王刚、杨孝文、李松、田亮等做了大量工作。在研究开展过程中，编写组得到任阵海院士、徐祥德院士、郝吉明院士及多位业内专家的大力支持，特此感谢！同时感谢中国环境出版社的编辑在本书出版过程中付出的辛勤努力。本书出版获得了环保公益性行业科研专项（201209003）、国家自然科学基金委、北京市科学技术委员会和北京市教育委员会的共同资助。

在本书编写过程中，虽力求反映研究取得的新成果和新方法，但由于区域大气污染源的复杂性和不确定性以及编者水平所限，书中难免有不妥和疏漏之处，敬请广大读者批评指正。

著 者

2016年3月

目 录

第 1 章 研究背景与意义	1
1.1 研究背景 / 1	
1.2 研究意义 / 2	
1.3 国内外研究现状 / 3	
第 2 章 研究目标与主要内容	32
2.1 研究目标 / 32	
2.2 研究内容 / 32	
第 3 章 大气污染源排放清单编制	34
3.1 大气污染源分类体系构建 / 34	
3.2 各类污染源排放估算方法 / 35	
3.3 区县分辨率大气污染源建立新技术方法 / 47	
3.4 典型地区大气污染源排放清单 / 67	
3.5 排放清单校验与不确定性分析 / 77	
第 4 章 大气污染源 VOCs 成分谱与臭氧生成潜势研究	99
4.1 大气污染源成分谱监测设备研发 / 99	
4.2 大气污染源 VOCs 采样分析方法 / 103	
4.3 典型 VOCs 排放源成分谱 / 106	
4.4 各典型 VOCs 排放源单位排放的臭氧生成潜势 / 134	
第 5 章 区域敏感源筛选技术	139
5.1 研究思路 / 139	
5.2 敏感源筛选技术 / 139	
5.3 典型地区敏感源筛选 / 145	

第 6 章 大气污染源优先控制分级技术	170
6.1 基于常规污染物环境影响的污染源分级技术 / 170	
6.2 基于臭氧生成潜势的 VOCs 污染源分级技术 / 174	
6.3 基于常规污染物环境影响的污染源分级技术在北京地区的示范应用 / 176	
6.4 基于常规污染物环境影响的污染源分级技术在唐山地区的示范应用 / 179	
6.5 基于臭氧生成潜势的 VOCs 污染源分级技术在唐山地区的示范应用 / 187	
第 7 章 结论与环境管理建议	190
7.1 大气污染源排放清单 / 190	
7.2 典型源 VOCs 成分谱特征 / 190	
7.3 典型地区大气污染敏感区域 / 191	
7.4 典型地区大气污染源优先控制分级结果与控制建议 / 191	
第 8 章 展望	193
8.1 污染源分级依据进一步完善 / 193	
8.2 污染源分级依据侧重进一步研究与调整 / 194	
8.3 污染源分级技术综合考虑 / 194	
8.4 污染源分级结果与 PM _{2.5} 来源解析结果综合考虑 / 195	
附录 大气污染源优先控制分级技术指南（试行）	196

第1章

研究背景与意义

1.1 研究背景

当前，我国的大气污染问题十分严峻。传统的以二氧化硫（SO₂）、氮氧化物（NO_x）、可吸入颗粒物（PM₁₀）为代表的煤烟型污染尚未解决；与此同时，以臭氧（O₃）和大气细颗粒物（PM_{2.5}）为代表的二次污染物浓度水平正快速上升。我国部分地区大气臭氧浓度以全球最快速度增长，部分城市及乡村地区1小时最大臭氧体积分数值均不同程度地超过了国家空气质量臭氧二级标准，重点城市地面臭氧最大小时平均体积分数逐年递增，最大值的出现时间也提前。大气细颗粒物污染远远高出世界卫生组织（WHO）的指导值，京津冀、长三角和珠三角城市群屡屡发生持续多日的区域性重污染天气，其每年出现雾霾的天数达到100天以上，一些城市的微细颗粒物浓度甚至已经超过了微细颗粒物污染重城——墨西哥城；与20世纪60年代初期相比，我国东部地区大气能见度已下降了7~15 km。我国空气污染已经由煤烟型污染转变为煤烟与机动车尾气污染并存的复合型污染，大气氧化能力不断增强，相当多的地区出现区域性多种污染物同时以高浓度并存的严峻局面。区域性大气污染问题发生频率之高、影响范围之大、污染程度之重，在世界范围内都是少见的，严重威胁人民群众的身体健康和生态安全，这已经成为我国社会经济和谐发展的关键限制因素。区域大气复合污染，作为社会各界高度关注和亟待解决的重大环境问题，在国家中长期科技发展规划中被列为资源环境领域的优先主题。

大气污染物总量控制制度（以下简称“总量控制”），作为一项非常重要的环境调控手段，在我国大气污染控制中发挥了重要作用，成为我国大气污染控制的基本手段之一。“六五”期间，我国开始引入总量控制思想，开展了总量控制研究和试点工作。“九五”期间，全面针对烟尘、工业粉尘和SO₂实施了总量控制，从区域性的角度规划“两控区”，进行酸雨和SO₂控制。经10多年努力，我国酸雨和SO₂污染控制产生了一定效果，在我国一次能源消耗超常规增长的背景下，酸雨和硫沉降污染的恶化趋势得到了初步遏制。然而，近年来随着NO_x排放水平的增加，NO_x在我国酸雨污染中的作用日趋显现，我国的酸雨正在由硫酸型酸雨向硫氮复合型酸雨转变，这对我国酸雨污染防治提出了新的要求。为此，环境保护部在部署大气污染防治工作时明确表示，“十二五”期间，NO_x将作为约束性指标纳入大气污染物总量控制范畴，NO_x总量控制将在全国范围内实行。

与 SO_2 有所不同，氮氧化物是雾霾与光化学污染的重要前体物之一，既可以通过二次转化形成硝酸盐，又可以在阳光照射下，与挥发性有机化合物（VOCs）发生一连串的光化学反应，生成臭氧、甲醛、乙醛等多种二次污染物，形成光化学烟雾，导致大气氧化性增强，会加速细微颗粒物和二次气溶胶的形成。美国颁布的《清洁大气法案》，欧盟颁布的《长距离大气污染公约》《控制酸沉降、富营养化和臭氧协议》，在控制 NO_x 时，均将酸雨和近地面臭氧列入其控制目标，规定了 SO_2 、 NO_x 、 NH_3 、VOCs、颗粒物的协同排放限值。而我国在 2010 年颁布的《关于推进大气污染联防联控工作改善区域空气质量的指导意见》中，明确指出 SO_2 、 NO_x 、 PM_{10} 和 VOCs 是当前大气污染防治的 4 大重点内容。因此，在区域范围内，以一次污染和二次污染综合防治为目的，对 SO_2 、 NO_x 、颗粒物以及二次污染物前体物（如 VOCs）排放进行联合优化控制，这成了当前我国空气质量改善的迫切要求和挑战。

如何把总量污染负荷科学合理地分配到具体的污染源是大气污染物总量控制的核心问题。“十一五”期间，我国仅针对电力行业采用了相对公平的排放绩效方法，建立了 SO_2 总量指标的分配体系，从工程减排、结构减排、管理减排三方面入手开展分地区 SO_2 总量减排工作。尽管“十一五” SO_2 减排取得了前所未有的成绩，但依然存在不少问题。一是总量减排目标与环境质量改善关系不对应，各地区减排指标往往“自上而下”逐级“分解落实”，未考虑地区差异性；二是减排对象过分偏重重点行业，未考虑各类污染源污染物排放的环境影响贡献差异，未实施“效率减排”。而前期研究发现，相同的污染源排放量，由于排放位置、排放高度、排放时间、排放化学组分的不同，其对区域和目标城市空气污染物浓度贡献比值可达数倍之多，差异显著。以北京地区为例，各区县 PM_{10} 单位排放对整个北京地区污染物浓度的贡献中，最大值东城区约为最小值密云县的 5 倍，即削减相同量的污染物，东城区的控制效率是密云县的 5 倍左右。

综上所述，我国大气污染控制战略亟须改进思路，甄别优先控制的污染源，将我国当前以结构减排、技术减排、管理减排为主的大气污染总量控制工作，向科学减排、效果减排推进，在保证减排任务有效完成的同时，实现环境效益和社会经济效益的最大化。

1.2 研究意义

本书中针对区域大气污染控制问题，以区域和城市空气质量改善为目标，笔者建立了区域污染源分级识别技术体系，给出区域空气质量改善须优先控制的污染源。这将对满足我国经济社会发展中的环境保护重点需求、改善大气环境质量、实现可持续发展具有重大意义。具体包括：

（1）指导我国污染源优化减排方案制定

我国传统的污染源控制以结构减排和管理减排为主，未考虑不同污染源控制带来的经济与环境效益，该技术通过确定不同污染源的优先控制级别，可指导城市或区域污染源优

化减排方案的制定，促进我国污染源控制向科学减排、效果减排发展。

(2) 促进空气质量快速有效改善

该技术通过计算不同污染源的单位污染物排放(1 t)对空气质量的影响大小，筛选确定优先控制的污染源，可使得在控制相同污染物排放量的情况下，空气质量改善效果最佳，因而可促进空气质量的快速有效改善。

(3) 为经济、能源结构调整提供科技支撑

该技术通过给出不同排放源、不同燃料使用源的优先控制级别，因而可为区域经济、能源结构调整提供科技支撑。

1.3 国内外研究现状

1.3.1 大气污染源排放清单

在排放清单建立研究方面，欧美等发达国家起步较早。美国基于排放源测试结果于20世纪90年代编制了第一版大气污染物排放因子数据库AP-42^[1]，在排放因子集编制基础上，编制了国家排放清单(National Emission Inventory, NEI)^[2]。欧洲自1980年起进行国际排放清单建立，编制了CORINAIR90排放清单^[3]。与欧美发达国家相比，我国的排放清单工作开展相对滞后。国内研究学者参考欧美国家的排放清单编制方法，开展了我国污染源清单的编制工作。田贺忠等针对电力、工业、建筑、交通运输、商业、居民生活消费以及其他7大类经济部门、11种燃料类型消耗的NO_x排放进行了估算，分析了1980—1998年中国NO_x排放变化趋势^[4]。王丽涛等^[5]建立了中国大陆CO人为源排放清单，文章将CO排放源分为固定燃烧源、工业工艺源及移动源三大类，对固定燃烧源又分为电力、工业、居民生活及秸秆燃烧四类子源，并对四类子源在不同燃料、燃烧方式以及应用比例下的排放因子进行了讨论。宋宇等^[6]建立了包含畜禽养殖、化肥施用、土壤挥发、固氮植物、秸秆堆肥、生物质燃烧、人体氨、化工行业、废弃物处理、交通等多类排放源的中国1 km×1 km分辨率NH₃排放清单。谢绍东等^[7]基于文献调研与模型计算得到的排放因子，结合年鉴统计数据，建立了中国1980—2005年VOCs排放清单。张强等^[8]建立了中国2001年人为源颗粒物排放清单，并对电力、工业、民用燃煤各种燃烧方式下多种除尘方式的除尘效率进行了讨论。祝斌等^[9]对农作物秸秆燃烧PM_{2.5}的排放因子进行了大量研究，测定了我国几个不同地区关于小麦秸秆、玉米秸秆及水稻秸秆等在明火和烟火等不同燃烧方式下的PM_{2.5}排放因子，同时也与国外学者^[10,11]给出的农作物秸秆及草类在不同方式燃烧情况下的排放因子进行了对比。李伟等^[12]定量分析了中国大陆道路移动源的污染排放状况，建立了涵盖THC、NMVOCs、CH₄、CO、NO_x、CO₂、SO₂、Pb、PM₁₀、N₂O共10种污染物的排放因子和排放总量计算方法。宋翔宇等^[13]以中国2002年各省统计年鉴中关于机动车及道路信息的数据为基础，根据COPERTIII模型计算出2002年中国各省区各种机动车类型

在城区、郊区和高速公路 3 种行驶工况下的排放因子，应用 GIS 技术建立了 $40\text{ km} \times 40\text{ km}$ 的高空间分辨率的中国机动车 CO、 NO_x 、NMVOCs 和 PM_{10} 排放清单。阎雁等^[14]将全国划分为若干网格，利用 1:1 000 000 植被分布、叶面积指数、生物量、冠层、标准排放因子、实时气温、湿度、风速辐射和干旱指数等数据，结合气体逸出效率，对全国植被 VOCs 排放量进行计算，得到的全国天然源 VOCs（包括异戊二烯单萜烯以及其他 VOCs）的年排放总量。在区域尺度排放清单编制方面，陈长虹等^[15]、王书肖^[16]等分别建立了 2007 年、2010 年长三角地区多污染物排放清单。郑君瑜等^[17-19]针对珠三角地区排放清单开展了较为系统的研究。清华大学^[20]对国内的排放清单编制成果进行了系统整合，开发了中国多尺度排放清单模型。

为统一环境统计、污染源普查中污染源排放估算依据，我国于 1996 年发布了《工业污染物产生和排放系数手册》^[21]，首次建立了工业源排放因子数据库；为配合第一次全国污染源普查，在此基础上，国家环保总局和相关部门整合了一些排放源测试结果，编写了《第一次全国污染源普查工业污染源产排污系数手册》^[22]。以此作为环保职能部门较为统一的工业源排放因子集。此外，为了进一步规范清单编制方法，环保部整合了国内研究学者的研究成果，初步构建了我国大气污染物源排放清单编制技术指南体系^[23]。

在活动水平方面，我国目前的主要信息渠道是国家统计数据发布，利用各级统计年鉴获取各类反映生产、生活的基础数据，尚缺乏系统、规范的渠道对描述排放源活动特征的关键信息进行收集和整理，且缺乏必要的质量保证和质量控制（QA/QC）。此外，国家统计口径得到的信息往往缺乏某些生产工艺多样化的工业部门基础数据，缺乏对应于不同工艺或设备类型的活动水平，这使得这些部门生产工艺的进步不能反映到污染物排放量的估算结果中，因此需要建立适用于我国统计系统的活动水平收集、整理方法。

综上所述，我国目前的排放清单编制技术尚不能满足建立反映我国复杂源排放特征的高分辨率排放清单这一要求。因此，必须基于我国较为稀缺的排放源信息，结合及时更新的排放因子信息，构建适用于我国目前统计体系，能反映我国排放水平快速变化特征的排放清单编制技术方法。

1.3.2 数值模式发展与应用

1.3.2.1 气象模式

气象模式的研究开展较早，尤其是随着近半个世纪以来计算机技术和气象观测技术的发展，中尺度气象数值模式和模拟得到了迅速发展。20 世纪 90 年代后，一些中尺度模式已发展得较为先进，并在世界范围内得到了广泛推广，不仅应用于气象预测，也成为空气质量模式模拟的必要基础。目前先进的中尺度大气数值模式主要包括美国宾夕法尼亚大学（PSU）与国家大气研究中心（NCAR）联合开发的中尺度模式第五版本 MM5 模式，美国科罗拉多州立大学（CSU）开发的区域大气 RAMS 模式，美国俄克拉荷马大

学(UO)开发的先进区域预报系统 ARPS 模式,美国北卡罗来纳州立大学开发的中尺度大气模拟系统 MASS, RWM 模式(空军全球天气中心(AFGWC)的重置窗口模式),海军业务区域预报系统 NORAPS, 海军舰队数值气象和海洋中心(FNMOC)的耦合海洋/大气中尺度预报系统 COAMPS, 美国 NOAA、NCEP、Air Force 等联合开发的下一代多尺度数值预报模式 WRF, 英国气象局采用的业务中尺度模式 UKMO 模式, 加拿大的中尺度可压缩共有模式 MC2, 法国的中尺度非静力模式 MESO NH 模式, 日本的区域谱模式 JRSM 等。此外, 我国也在发展自己的中尺度模式, 如 GRAPES 等。下面介绍主要的几种模式。

(1) RAMS

RAMS (Regional Atmosphere Modeling System) 是美国科罗拉多州立大学(CSU)开发的区域大气模式。该模式是非流体静力、原始方程中尺度模式, 模式的垂直坐标采用地形追随坐标 $sz = (z - zt) / (zs - zt)$, 其中, zs 是模式顶层高度; zt 是地形高度。该模式的一个重要特点是可以采用双向嵌套网格技术。这一特点使得其可以采用精细网格模拟小尺度或中尺度系统, 同时用粗网格模拟大尺度气象背景场, 因而可以用于城市局地尺度大气环境动力场模拟研究。

(2) MM5

MM5 (Fifth-Generation NCAR/Penn State Mesoscale Model) 是由美国宾夕法尼亚大学(PSU)和美国国家气象中心(NCAR)在 MM4 基础上联合开发的有限区域中尺度数值预报模式。该模式具有非静立平衡机制并采用地形追随(Terrain-Following)的 Sigma 坐标系。自 20 世纪 70 年代问世以来, MM5 在世界范围内得到了广泛的研究及应用, 由于其对中尺度及区域尺度大气环流的模拟与预报具有较好的效果, 我国许多气象部门也将其用于业务运行。MM5 具有以下 5 个主要特征: ①多重嵌套功能; ②采用非静力的动力框架, 使得模式可以精确到几公里的尺度; ③支持大型计算机的并行计算; ④具有气象数据四维同化(FDDA)系统, 可对卫星、雷达等非常规气象资料进行同化处理, 为模式提供最优初始场; ⑤模式有丰富的物理参数化方案可供选择。除了在气象领域的推广外, MM5 作为气象场提供模块, 还与多种空气质量模型, 如 CMAQ/Model-3、CAMX、CALPUFF 等进行耦合, 应用于空气质量的模拟与预测中。

(3) ARPS

ARPS 气象模式是由美国俄克拉荷马大学的风暴预报中心, 在美国国家科学基金会和联邦航空管理局联合资助下开发的非静力平衡的三维动力学气象预报模式, 适用范围较广。该模式使用追随地形的坐标系统, 水平方向为等间距网格, 垂直方向采用可变格局模式将风矢分量和各状态分量表示成基态值(平均值)和扰动量的和, 求解完整的动力学和热力学方程组。

总的来说, ARPS 是当前国内外应用较为广泛的中尺度数值模式, 其模式本身的完善程度与所考虑物理过程的全面性, 使其成为当前最为较为成功的中尺度数值模式之一。

ARPS 能达到较高的模式分辨率，并具有较高的可信度。其非静力平衡特征更能反映小尺度的气象信息，小于 10 km 的尺度上具有更明显的优势及可信度，较适合小尺度的气象模拟。ARPS 模型在大气环境模拟方面也有一定的应用。

(4) WRF

WRF (Weather Research and Forecasting model) 模式是由美国 NOAA、NCEP、Air Force 等联合开发的下一代多尺度数值预报模式。模式具有良好的计算架构及全面的物理参数化方案，同时它也是 Models-3 等气象模型今后用来替代 MM5 的气象预报模式。WRF 模式是一个完全可压非静力模式，控制方程组都写为通量形式。网格形式与 MM5 的 Arakawa B 格点不同，而是采用 Arakawa C 格点，有利于在高分辨率模拟中提高准确性。模式的动力框架有三个不同的方案。前两个方案都采用时间分裂显示方案来解动力方程组，即模式中垂直高频波的求解采用隐式方案，其他的波动则采用显示方案。这两种方案的最大区别在于所采用的垂直坐标不同，分别是几何高度坐标和质量（静力气压）坐标。第三种模式框架方案是采用半隐式半拉格朗日方案来求解动力方程组。这种方案的优点是能采用比前两种模式框架方案更大的时间步长。

WRF 模式应用了继承式软件设计、多级并行分解算法、选择式软件管理工具、中间软件包（连接信息交换、输入/输出以及其他服务程序的外部软件包）结构，并将有更为先进的数值计算和资料同化技术、多重移动套网格性能以及更为完善的物理过程（尤其是对流和中尺度降水过程）。因此，WRF 模式将有广泛的应用前景，包括在天气预报、大气化学、区域气候、纯粹的模拟研究等方面的应用，它将有助于开展针对我国不同类型、不同地域天气过程的高分辨率数值模拟。另外，WRF 在环境数值模拟中的应用也较为广泛。

1.3.2.2 空气质量模式

空气质量模式的发展与气象模式相比较晚。这主要是由于环境学科本身的起源时间就晚于气象学科。环境学科从出现至今仅半个世纪左右，而人们对气象问题的关注则至少已有几个世纪。但是，随着环境观测技术、气象模拟与环境化学机理的发展，空气质量模式的发展较快，目前已成为研究局地与区域大气污染问题的必备工具与基础。空气质量模式主要包括高斯模型、箱式模型、ADMS、CALPUFF、UAM、CMAQ/Model-3、CAM_x、NAQPMS 等。下面将选择几种主要的空气质量模式进行介绍。

(1) 高斯模型

多年来，高斯模式一直被用在点源污染浓度估计方面，主要是因为与其他扩散模式 (K 模式、统计模式和相似模式) 相比，高斯模式的物理意义比较直观，且其数学表达式简单，便于分析各种物理量之间的关系和数学推演，易于掌握和计算。作为法规模式，它可以用最简捷的方式最大限度地将浓度场与气象条件之间的物理联系及观测事实结合起来。

高斯模式的理论基础是：在平原地区，流场是接近于平稳和均匀，三维空间除地表外可看成是无边界的，在这样的条件下，物质在大气中的运动首先是沿着盛行风向扩散，然

后向各个方向扩散，扩散微粒位移的概率服从正态分布（高斯分布）。

此后的线源、体源、面源、烟流、烟团、CRSTER、CTDM、ATDL 窄烟云、熏烟、CRADM 以及 G-H 等模式都是基于高斯这个基本模式的改造、修正和补充。高斯模式在大气质量预测时容易操作，尤其是用于模拟高架点源，但高斯模式难以配合风场的变化以及无法处理因地形引起的局部环流，同时也没有考虑化学氧化和干沉积对污染物的去除作用。因此，在用高斯模型来预测城市大气质量时，由于城市污染源的分布和地形较为复杂，应用该模式往往带来较大的误差。

（2）ADMS 模型

ADMS-城市扩散模型是由英国剑桥环境研究公司在耦合了大气边界层研究的最新进展的基础上开发的大气污染物扩散模型。它利用常规气象要素来定义边界层结构，在模式计算中只需要输入常规气象参数，使得污染物浓度计算结果更为准确，因而能很好地描述大气扩散过程。ADMS 模型与其他大气扩散模型的一个显著区别是：使用 Monin-Obukhov 长度和边界结构的最新理论，精确地定义边界层特征参数。同高斯模式类似，ADMS 模型也可以模拟计算点源、线源、面源、体源所产生的浓度，尤其适用于对高架点源的大气扩散模拟。方力等利用 ADMS-城市扩散模型和鞍山市 2002 年排放清单数据库，建立了鞍山市 SO₂ 空气扩散模型，并用实测数据进行模型验证。模拟计算结果表明，不论年还是四季，SO₂ 监测值和预测值的一致性都较好^[24]。ADMS 在国外也有很好的应用^[25]。

（3）箱式模式

箱式模式常用于城市下垫面和封闭地形条件下的大气污染物浓度预测，主要考虑了热力因子与动力因子的影响，在质量输入—输出简单模式的基础上建立起来的。

三维多箱模型是目前发展最为完善的箱式模型。它结合了二维多箱模型和单箱模型的优点，既考虑到污染源的不均匀、研究区域可分为不同功能区这一特点，又考虑了在铅垂方向上风场随高度的变化，还加入了物理干沉积和化学变化对污染物浓度的影响。多箱模型可以弥补单箱模型的缺陷和不足，可使大气预测方法更完善，也会使预测结果更接近实际^[26]。多维多箱模型除了具有直观、计算简单、比较适宜于大气环境容量的研究等特点，还综合考虑了地形、气象等因素的影响以及非线性的反应，可谓是较完善的扩散模式。该模式已在北京、唐山等地得到了广泛应用^[27,28]。

（4）空气流域模型

UAM (Urban Airshed Model) 经历了 30 多年的持续发展，如今已成为一个用于城市尺度的较成熟的三维数值模式。通过模拟大气物理、化学过程，该模式既可计算惰性物质的浓度分布，也可以模拟和计算具有化学反应性物质的浓度分布；UAM 提供了先体物的释放、污染物输运、湍流扩散、化学反应、清除过程、初边界条件等大气物理、大气化学的数学表达式。作为一个开放的模式，UAM 的一个重要特点就是可将如何在数学上表达市区或城市下风向臭氧形成的物理化学过程的最新研究成果模式及改进方案引入其中。