

“九五”重大项目技术报告之一

空气污染数值预报模式系统

中国科学院大气物理研究所
大气边界层物理和大气化学国家重点实验室 编



气象出版社

“九五”重大项目技术报告之一

空气污染数值预报模式系统

中国科学院大气物理研究所

大气边界层物理和大气化学国家重点实验室 编

气象出版社

内容提要

本书包括“城市空气污染数值预报模式系统(版本1)”和“区域尺度空气污染预报模式(版本1)”两部分。第一部分对空气污染数值预报的方法、特点以及构成城市空气污染数值预报的模式系统作了介绍,详细地论述了 M- β 尺度动力学模式和污染物浓度预报模式的模式结构和程序框架,并给出了模式系统的预报效果。第二部分介绍了模式的动力框架、所涉及的主要物理过程的处理、计算方案的选择以及模式区域和边界条件的考虑、输入资料的来源和气象场的选用,还重点介绍了模式的模拟能力,并简要绘制了本模式最重要的一个子程序的流程图。

本书模式系统可以作为空气污染数值预报的基本工具为大气环境的管理决策提供及时、准确和全面的大气环境质量信息,也可作为大气环境、气象等领域的教学、科研教材和参考读物。

图书在版编目(CIP)数据

空气污染数值预报模式系统/中国科学院大气物理研究所大气边界层物理和大气化学国家重点实验室编。-北京:气象出版社,1999.5

ISBN 7-5029-2728-X

I. 空… II. 中… III. 空气污染-数值-预报 IV. X831

中国版本图书馆 CIP 数据核字(1999)第 21996 号

“九五”重大项目技术报告之一

空气污染数值预报模式系统

中国科学院大气物理研究所

大气边界层物理和大气化学国家重点实验室 编

责任编辑:李太宇 终审:周诗健

封面设计:李继东 责任技编:吴庭芳 责任校对:胡朝霞

气象出版社出版

(北京海淀区白石桥路 46 号 100081)

新华书店总店北京发行所发行 全国各地新华书店经销

北京金瀑印刷厂印刷

开本:787×1092 1/16 印张:5.00 字数:128 千字

1999 年 6 月第 1 版 1999 年 6 月第 1 次印刷

印数:1~1500 定价:12.00 元

ISBN 7-5029-2728-X/P·0963

前 言

《城市空气污染数值预报模式系统》对空气污染数值预报的方法、特点以及构成城市空气污染数值预报的模式系统进行了介绍，详细地论述了M- β 尺度动力学模式和污染物浓度预报模式的模式结构和程序框架，并给出了模式系统的预报效果。该模式系统可以作为空气污染数值预报的基本工具为大气环境的管理决策提供及时、准确和全面的大气环境质量信息，也可作为大气环境、气象等领域的教学、科研提供教材和参考读物。

《城市空气污染数值预报模式系统》共分五个部分，由雷孝恩、韩志伟、张美根和田瑞明共同研制和发展，并由雷孝恩、韩志伟、张美根编写完成。

《区域尺度空气污染预报模式》是以黄美元教授、徐华英教授和沈志来教授为核心的研究集体发展起来的数值预报模型。这里重点介绍了该模式的动力框架和对所涉及的主要物理化学过程的简化及（或）处理，扼要介绍了计算方案与边界条件的选择以及输入资料的来源和气象场的选用。最后给出了模式对某些个例及（或）特殊天气的模拟能力。文中未直接评述国内外同行专家、学者的工作，这可通过查阅文中所列出的有关文献间接了解到。

《区域尺度空气污染预报模式》共分七个部分（请参阅该部分引言）。第一部分，即引言由安俊岭和黄美元执笔。最后一部分，即附录由安俊岭和王自发编写。其余部分由安俊岭、王喜全、程新金、王自发和高会旺共同协作完成。全文最后由黄美元审阅。胡朝霞作了大量的整编、校对等方面的工作。不妥或错误之处，请读者批评指正。

本技术报告得到中国科学院“九五”重大项目“大气污染预测的理论和研究方法研究”的资助。项目编号 KZ951-A1-403。

目 录

前言	(1)
第一部分 城市空气污染数值预报模式系统 (版本 1)	
1 空气污染预报	(1)
2 预报问题的特点	(1)
2.1 尺度及预报时效	(2)
2.2 时空高分辨率	(2)
2.3 多种化学物	(2)
2.4 理化生过程耦合	(3)
2.5 城市空气污染气象特征	(3)
3 模式系统	(4)
3.1 中尺度气象模式	(4)
3.2 PBL 湍流统计量参数化模型	(5)
3.3 污染源模型	(6)
3.4 干湿沉积模式	(7)
3.5 对流层高分辨化学模式	(8)
4 M- β 尺度动力学模式	(8)
4.1 方程组	(9)
4.2 数值计算方案	(10)
4.3 边界及初始条件	(10)
4.4 套网格与四维资料同化技术	(13)
4.5 输入参数和资料	(14)
4.6 模式的优点及不足	(16)
4.7 程序框架	(16)
4.8 预报实例	(18)
5 高分辨对流层化学模式	(23)
5.1 输送过程	(24)
5.2 新的干沉积速度型	(24)
5.3 分层的水平涡旋扩散系数型	(25)
5.4 分层的垂直涡旋扩散系数型	(26)
5.5 云雨和湿沉积过程	(26)
5.6 气相化学	(28)
5.7 初始和边界条件	(31)
5.8 输入参数和资料	(31)
5.9 程序框架	(33)
5.10 预报实例	(40)
参考文献	(46)

第二部分 区域尺度空气污染预报模式 (版本 1)

6	引言.....	(48)
6.1	区域尺度空气质量预报模式发展历史	(48)
6.2	污染预报的预备实验	(48)
6.3	简介	(48)
7	模式的动力框架.....	(49)
8	物理过程.....	(50)
8.1	干沉降过程	(50)
8.2	湿清除过程	(50)
8.3	平流和扩散过程	(50)
8.4	化学过程	(50)
9	计算方法、模式区域及边界的处理.....	(53)
10	输入资料与气象场	(54)
	有关文献	(56)
	附录一 SEIDEL 子程序流程图	(58)
	附录二 1998 年 4 月 9~23 日强黄沙输送过程	(59)
	附录三 模拟 1998 年 4 月 15~17 日北京“雨土”事件	(66)
	附录四 1998 年 9 月 7~13 日北京污染状况回顾及展望	(68)

1 空气污染预报

大气酸化（或酸雨），对流层臭氧增加和平流层臭氧减少所引起的全球化学系统的改变^[7]，大面积森林被毁和荒漠化引起的生态环境不平衡，温室气体积累造成的气候变化^[26]是 21 世纪人类面临的四大环境问题^[18,34,44]。它们不但关系到人类基本生活条件，比如食品、水及能源的维持，而且也涉及到土地资源最终能承受多少人口的重大战略决策问题。虽然这四类问题相当复杂，对生态环境影响程度及应采取的措施也不完全相同，但它们都涉及到不同类型污染物的来源、形成、演变过程、生态效应及其对区域生态环境和人体健康的影响。

环境与发展是当今世界共同关注的重大问题，环境保护与经济持续发展的协调是各国政府面临的一个严峻而又急待解决的难题。保护环境，防治污染，其实质就是保护生产力。

目前，我国经济正处在高速发展期，如能源、交通（特别是城市汽车尾气）、城市人口膨胀及范围的扩大、大型工业开发区的发展等造成的大气污染已远远不只是一个工厂范围的局部污染问题，其环境污染物排放总量不断增加，污染范围继续扩大，以颗粒物、二氧化硫、氮氧化物、O₃ 等为主要污染物的大气环境污染问题日趋严重，对资源、环境的巨大冲击日益威胁着可持续发展的基础。在这种情况下，为更好地反映环境污染变化趋势，为环境管理决策提供及时、准确、全面的环境质量信息，为使我国环境预测、预报工作与国际接轨，加大环境污染控制力度，预防严重污染事件发生，同时为使环境保护工作更好地接受广大人民群众的监督，开展城市空气质量报告及空气污染预报工作是十分必要的。进行空气污染预报方法研究，建立适合于我国城市空气污染特点的模式预报系统、高时空分辨率的监测站网及信息网络系统，是开展空气污染预报工作的必要技术准备。

空气污染预报是一项复杂和昂贵的系统工程，需要一个完善的大气质量模式作为其理论基础，该模式必须较全面地包含污染物在大气中的物理、化学和生态过程，能很好地反映污染物在大气中的演变规律，为大气环境的综合治理提供决策依据。一个完整的大气质量模式主要包括两大部分：气象模式和化学物质浓度模式。一个正确而合理的气象模式是大气质量模式的基础。特别对于复杂地形和下垫面地区，由于地形的动力作用，会使流场发生形变，产生气流的辐合与辐散，增强气流的切变，地形或下垫面的加热不均会引起某些局地环流，这些作用都会影响气流的轨迹和大气湍流强度，从而影响污染物的输送和扩散，因此建立一个能正确预报复杂下垫面条件下的风场、温度场、湿度场及其降水量的气象模式是十分必要的。

本报告将对构成城市空气污染数值预报的模式系统作一般性的介绍，重点和详细地论述中尺度 β 动力学模式及其污染物浓度预报模式，并给出模式的程序框架。

2 预报问题的特点

城市空气污染预报与一般的天气预报相比，要求更高、问题更复杂，它有着独特的

特征，下面分五个方面论述。

2.1 尺度及预报时效

所谓预报，本报告是指对未来 24~36 小时污染物浓度的定量预报。虽然城市空气污染预报是三维中- β 尺度 ($M-\beta$) 范围 (一般在 200 km 以内) 浓度时空分布预报问题，但它必然要涉及到对中- α 尺度天气过程的预报，由于水平影响范围是天气尺度 (可大于 3000 km)，其垂直尺度必须考虑到整个对流层 (可大于 16 km) [21,22]。预报问题与事后个例研究和诊断问题不同，它要求有充分的预报时效，即包括所有输入资料的准备时间、整个模式系统的运行时间及其对各种媒体公告所需时间的总和应远远小于 24 小时。也就是说既要考虑大、中、小尺度模式之间相互耦合、相互嵌套，宏观和微观过程之间相互作用和影响的非线性问题，以满足浓度预报的精度，但又不能太复杂，比如小尺度湍流和化学转化过程必须简化或参数化。如果在预报的模式系统里包括小尺度湍流预报方程及其所有涉及到的化学污染物和反应方程，按照现有的计算机能力，则整个模式系统的运行时间会远远超过 24 小时。因此，如何处理精度和计算时效之间的关系，也是衡量模式预报系统的优劣及实用性的关键。

2.2 时空高分辨率

整个污染预报模式系统涉及到的污染物、热量、水汽、辐射及其它们的通量大部分都来源于行星边界层 (PBL) [35] 下层，这些变量在 PBL 内的垂直切变非常明显，而且呈多极值或多中心分布，而且大气稳定度参数垂直变化最激烈区域也在 PBL 下层。因此，在 PBL 内必须有高的垂直分辨率，比如为了要很好地考虑生态下垫面植物冠层垂直结构的影响、人群呼吸道的高度及其激烈的垂直切变，模式系统的最低层应在 10 m 以下，100 m 以内的近地面层应有 3~4 个网格层为宜，整个 PBL 最好有 5~8 个网格层，整个对流层以 10~12 个网格层为最佳 [30]，这样构成一个垂直方向高分辨的合理的模式层结构。作为城市污染预报问题，如何反映城市功能区的源结构及下垫面水平非均匀性的影响也是预报成功与否的关键，高水平分辨率的模式系统是非常必要的，一般水平网格小于 5 km 为宜。大气稳定度的预报，要求温度在垂直方向有较高的精度，而温度与大气辐射有密切关系，它们均反映出明显的日变化。典型的晴天，深夜与中午及其早上、傍晚的过渡时期，不论是气象场还是物质场均有明显差异，在同一污染源条件下，深夜与中午的地面浓度可相差数量级。因此，高时间分辨率的模式设计是重要的，一般以预报每小时浓度分布为宜。

2.3 多种化学物

大气污染预报与一般的天气预报不同在于，它除了要有高精度、高分辨率的气象要素预报外，还必须作高精度、高分辨率的物质浓度预报。虽然最终发布的预报是以大气污染指数 (API) 形式发出的，但 API 是由不同污染物的毒性及其它们的浓度按照大气质量和卫生标准导出的，因此准确地预报出各种污染物浓度的时空分布是 API 预报的基础。根据国内外目前作污染预报的项目看，一般有 SO_2 、 NO_x 、 O_3 、CO 及总悬浮颗粒物 (TSP) 或 PM_{10} 。如果要预报 24~36 小时内 NO_x 和 O_3 的浓度分布，必然要涉及到 20 多种主要的化学物质 (包括酸性物质、氧化剂、温室气体等一次和二次污染物) 和几十类化学反应 (包括光化学反应、热力反应、Troe 反应、平衡反应和某些特殊反应，有机化学、无机化学，液相化学、气相化学，线性化学、非线性化学及其均相

化学、非均相化学等)^[12,42], 因此它是一个多种类化学问题。由于化学反应是一微观过程, 在化学过程与宏观的气象过程耦合时, 时空尺度之间兼容性或相互匹配是一个非常关键的问题。

2.4 理化生过程耦合

从学科上讲, 大气污染预报是涉及多介质、多界面、多物质之间相互作用和影响的学科的综合性问题, 需要预报多种污染物在多种介质及多界面中经历的四大基本过程。

输送过程是指在同一介质中物质由运动量引起的位移, 即物质从一个位置移动到另一位置, 在移动过程中可发生平均动量交换及其物质的搬运。在大气中这种输送过程一般是由三维风场来完成的, 在水中主要靠水的流动, 在土壤中物质的输送大小依赖于土壤的孔隙、密度及其含水量。这三类介质中的输送过程以大气中的风场时空变化最为激烈, 而且也最难预报。输送过程在土壤中可以有相变, 但基本上是属于物理过程。

湍流或涡旋扩散过程是指在同一介质中污染物质由大气中不同尺度的湍流或在水中不同尺度的涡旋作用下向三维方向的散布过程。由于湍流扩散, 使大量排放到空气中的污染物质稀释冲淡。因此既要挖潜大气这一自然资源的潜力为发展工业服务, 又要保护好人类生存的大气环境正是大气污染预报研究的目的之一。通常作湍流场及其湍流垂直结构的预报是相当困难的, 它是物理学领域研究的难点之一。但随着计算机技术的高速发展, 对湍流参数和结构的模式化及其参数化已有一些可实际应用的方法和模型。

化学转化过程指的是化学物质在大气中由于各种化学反应而产生、消失和转变的过程。由于不同物质的化学活性与半衰期不同, 在作大气污染预报中某些物质必须考虑它们的时间变化, 有的可以当成平稳过程处理, 有的则可看成常数, 比如甲烷^[38]; 另外, 有些化学物质必须考虑非线性化学反应过程, 有的则只考虑线性化学反应即可; 再则, 在整个对流层化学中, 有些化学物质与其他物质的联系非常广泛, 一种化学物质涉及到几十甚至上百个化学反应方程, 为了使计算简化, 我们必须根据其重要性与贡献大小作简化。化学转化过程主要发生在同一介质中, 也可发生在界面上。

干湿迁移过程指的是物质通过界面从一种介质迁移或转移到另一类介质的过程^[46,49,50]。所谓湿迁移过程是指与云和降水场有关的物质迁移过程, 通常称为降水冲刷过程。在界面上各种变量通常发生非常复杂的交换过程: 全反射、全吸收、部分反射和部分吸收, 溶解和非溶解, 相变, 生物和非生物过程, 热量、动量和水汽通量交换等。界面过程与不同的生态下垫面有密切关系, 因此迁移过程与生态过程及生态效应密不可分。其生态过程和生态效应主要反映在: 农作物和森林冠层对物质与动量的吸收过程或作用; 由于微生物作用从土壤中可排放出不同的化学物质, 土壤是 N_2O 的主要来源之一; 农作物和森林通常排放大量挥发性的有机化学组分 (VOC)、 C_xH_x 及其 NO_x 。

总之, 污染物在大气中的行为是非常复杂的, 它涉及污染物在气、土、水、生物介质及其界面上的交换、转化的理化生全过程。因此空气污染预报系统必须要很好地考虑这三大过程之间相互耦合、作用与反作用^[33]。

2.5 城市空气污染气象特征

城市下垫面的三大基本特征是干、热、粗。非均匀的下垫面造成动力学粗糙度增大 (其地面粗糙度长可从 1 到 3 m 之间变化), 使得城区风速减小, 气流不规则, 湍流强

度增大，湍流混合加大，大气扩散速率增强。在一些大面积高建筑的背风面，常常形成尾流区，可造成高浓度积累。城市空气污染浓度有明显日变化，一是由于气象条件的日变化，二是人为活动的日变化规律所致。

由城乡水平温差（一般大于 3°C 以上）引起的热岛效应^[2]和热岛环流（冷空气从四周的乡村流向市中心，在市中心形成辐合上升气流，并将暖空气带到高空，为满足动量守恒原理，在市中心上空与乡村区域形成补偿的辐散和下沉气流，连同市中心的辐合上升气流组成一完整的闭合环流，其环流的厚度与城市范围及建筑物高度有关。例如重庆市平均厚度约为 300 m，并形成夜间混合层，这是影响最为突出的城市空气污染气象学问题之一。大量观测事实表明，晴朗白天，城乡受太阳辐射加热，气温随高度分布都呈递减不稳定状况，因此，城乡的空气污染物散布状况基本相似。夜间，乡间由于辐射冷却，近地面层常常形成辐射逆温层，日出后，逆温层逐渐破坏并抬升，这是一般的变化规律；但在城区，由于存在热岛效应^[2]，当乡间较冷的气流流进相对较暖的城区上空时，下层空气被重新加热而形成混合层，其上空仍维持逆温，这就是夜间城市混合层，其厚度由城市的规模和来流性质以及日变化时间而定。这种边界层结构下，城区积聚的空气污染物往往也会被对流混合层带到地面，形成城市特有的混合层熏烟现象，有可能给夜间的城区造成地面高浓度。

另外，城市常常位于沿海及江边（并伴随有山地），海陆风、河陆风及山谷风，这也是影响污染物分布的重要气象条件。因此，如何准确地预报复杂下垫面情况下的局地环流，也是城市空气污染浓度预报的关键问题。

按预报模式性能的不同，可分为潜势预报、统计模式和数值模式预报三类。按照污染预报的要素之不同，可分为污染潜势预报和空气污染浓度预报。统计方法和数值模式方法都属于浓度预报，如果采用数值预报模式和统计预报模式两种方法相结合，有利于彼此对比验证预报结果。此外，尚有一种模拟和预测方法，即流体力学物理模拟，原则上讲，它也可以用来预报污染物浓度时空分布。

3 模式系统

模式系统是污染物定量预报的基本工具，本节将一般性地论述五类模式（或模型）系统。其模式系统的结构给在图 3.1 中。

3.1 中尺度气象模式

影响气象要素时空变化的因子有三类：大的天气系统（台风，西南和东北季风，副热带高压，锋面过程等）影响，热力作用及动力作用。要预报这三类过程通常采用中尺度气象模式（MMM），在空气污染预报中一般使用以下三类 MMM。

流场诊断模式（DMF），它客观分析观测资料以获得每个计算网格上的气象信息，为预报模式提供初始场和四维资料同化（FDDA）场。此类模式一般由三部分组成：求解连续方程，客观内插初始风场及风场调整。

M- α 气象预报模式用以预报 24~36 小时内大尺度天气过程，输出每小时 3-D 风场、温度场、湿度场和地面降水量。通常预报范围为 $3000 \times 3000 \times 16 \text{ km}^3$ ，水平格距不小于 30 km。在 100 m 的垂直范围内至少有两个网格层次。这方面模式的代表是滨州

大学和 NCAR 共同研制的 MM4^[1,13,20,23]（流体静力平衡的中尺度模拟系统）和在 MM4 基础上新近发展的非流体静力中尺度模式 MM5^[24]等。国内比较成功的有中国科学院大气物理研究所的 Eta 模式。

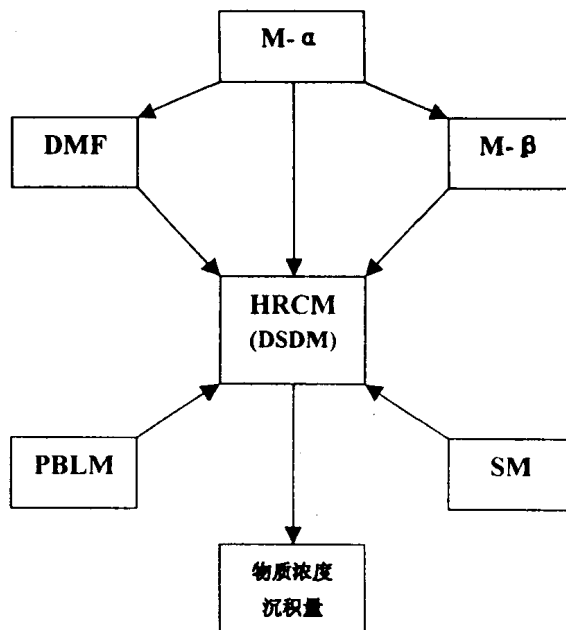


图 3.1 模式系统结构

M- β 气象预报模式，通常水平格距不大于 5 km，在 100 m 的垂直范围内有四层利用 M- α 模式预报的每小时结果，采用套网格和 FDDA 技巧，同步预报城市尺度的风温场，细致地反映局地热力过程(山谷风、河陆风、海陆风、城市热岛等环流)^[37]及大风中性情况的动力过程（高山和大面积高建筑物引起的上升和下沉运动及其绕流）的时空演变。这些热力和动力作用都会影响气流的轨迹和大气湍流强度，从而影响污染物的输送扩散过程。区域大气模拟系统（RAMS）就是一典型的求解三维有限范围、非静力平衡原始方程的 M- β 气象模式^[19,23,47]。

因此，建立一个高分辨率中尺度气象预报模式系统是大气污染预报的基础。

3.2 PBL 湍流统计量参数化模型

污染物在大气中扩散是由湍流引起的，而湍流的发生、发展与大气条件、下垫面型特征、太阳辐射等密切相关。严格地讲，PBL 湍流结构要由 PBL 模式（PBLM）预报。通常 PBL 模式有二阶闭合模式^[36,43]，大涡模拟（LES）模式^[45]和植物冠层模式^[41,46,49,50]，但作为预报而言，它们太复杂。因此，在大量湍流观测资料分析及其有关理论的基础上，找出湍流统计量的时空分布规律或参数化关系（尤其是 PBL 内）也是污染物扩散研究及城市空气污染模式建立的重要基础。

局地尺度与中尺度输送扩散的一个重大差别是垂直扩散范围不同，局地尺度主要发生在常通量层内，而中距离湍流扩散则是在整个 PBL 内进行。因此，有关 PBL 的厚度 (z_i) 和湍流统计量随高度变化参数化便成了问题的关键^[9]。

特别是近 10 年来，随着整个 PBL 湍流垂直结构野外测试的广泛开展，进一步改善

和发展现有的湍流扩散理论与模型是中距离湍流扩散理论研究的一大特点,而所有的扩散理论几乎都依赖于相同的 PBL 湍流参数组:湍流脉动量三坐标分量的标准差(σ_u , σ_v 和 σ_w),三坐标方向的拉氏时间尺度(T_L^u, T_L^v, T_L^w)及局地雷诺应力或湍流速度尺度(u_*),加上经常使用的地转风速 G , z_0 和 z_i 等外参数以及近地面层的速度尺度 u_{*0} ,莫宁-奥布霍夫长(L_M),对流速度尺度(w_*),尤其是这些参数组的垂直廓线更是发展扩散理论和中距离模式所必须的。我们在以后的模式中凡涉及到的 PBL 湍流统计特征量,均采用^[3]经过大量资料验证后得到的参数化关系。

另外,大气湍流扩散过程主要取决于大气的湍流状态。在近地面层,这种湍流状态的经验分类(大气稳定度类)与湍流之间的关系已经得到了相当满意的解决,使用最广泛的是 Pasquill 稳定度分类所对应的湍流扩散型^[8,9]。但随着观测手段越来越先进,观测高度越来越高,发现在研究 PBL 内的中尺度扩散问题时,这种适用于近地面层的稳定度分类方法就显得有些不足,需要有更合适的或更定量化的参数来代替这种经验性的稳定度分类方法。目前存在这样一种观点:虽然经验性的分类法是非常有用的,但它们不能与控制扩散的湍流量建立起定量联系,由于用日常的气象观测资料估计 w_* , u_{*0} , L_M 及 z_i 有简单易行的方法,而且这四个微气象量能更好地描述 PBL 内的湍流扩散过程,并且可以很方便地与大气湍流统计量建立起定量关系,因此,随着观测资料的不断完善,有取消现行定性的稳定度分类法的可能性。本报告将 $\mu (= z_i / L_M)$ 作为 PBL 稳定度参数。

预报模式需要的大气稳定度参数理查逊数 (Ri)、 L_M 和 μ ^[8],均可由风速和温度随高度分布资料在模式计算中自动获得。大气稳定度类是描述被动物质(含水汽)垂直交换或混合程度的一个重要判据,也是河陆风强弱,混合层及逆温厚度演变的一个重要判据。因此,它也是边界层气候特征及其 PBL 湍流统计量参数化研究的重要内容。

3.3 污染源模型

污染源分成人为源和自然源两大类。自然源又分成生物源和非生物源。污染源还可分成一次污染源和二次污染源,二次污染源是一次污染物在大气中经过复杂化学反应后的产物^[50]。一次人为污染源通常有 SO_2 , NO_2 , NO , CO 和 TSP ,一次生物污染源通常有 VOC , NO_x , C_xH_x 和 CH_4 。观测表明,城市的空气污染程度有明显的时间起伏变化,日变化、周变化、年变化以及各种非周期性的变化,这些都与污染源的时间变化有关。人们的生产与生活有一定规律,人为活动会加剧污染物排放量的增加,造成地面高值浓度。污染源表现出明显的时间变化,比如人们冬季取暖加大污染源的排放量,农作物的生长季节生物源的排放量增加,夜间汽车尾气排放明显减少,居民做饭时间会造成面源的增加等。城市空气污染是由性质和形式非常不同的大量污染物造成的,针对不同形式的排放源应分别设计不同的参数化模型,选用不同性质的模式及参数。通常按以下几类源模式化模型(SM)作为大气污染预报模式系统的主要成分^[25,48]。

3.3.1 孤立高架点源排放型

这些具有巨大热浮力的污染源(如火电厂的高烟囱)排放的烟羽可抬升到几百米以上高空(通常称为有效源高)。在区域尺度里,这类源按烟气抬升公式逐个加以处理。日间混合层对流活跃,夜间城市混合层经常发生,其模式上下边界以多次反射来处理夜

间混合层的作用。通常，把此类熏烟型污染作为事故处理，主要因为：烟羽下缘的向下伸展很快（与烟羽抬升相比），并使污染物接地；尺度与烟羽高度相仿的大气垂直对流活动强烈，会将烟羽带到地面；加一些下垫面的特殊地形影响，如城市附近的陡峭山谷，水陆界面或城市向乡村的过渡区域都可能形成特殊的大气过程。

3.3.2 孤立的低矮工业烟囱排放型

许多孤立的工业烟囱排放源不划归高架点源处理。尤其在城市，要考虑烟囱附近高大建筑物群使湍流增强所引起的污染物向下混合或者由于排放物出口速度较低而造成烟流下洗作用的影响。一般采用烟囱高度大于附近建筑物高度 2.5 倍的经验规则来模式化处理，不满足这一规则的个别源需按孤立高架点源考虑。

3.3.3 面源排放型

由大量低矮的污染源（如居民和工业取暖系统以及其他小的城区污染）一起构成面源排放，通常按单位面积总排放量处理。这类源的排放总量通常占城市污染负荷的较大成数。确定面源强度是个比较困难又相当重要的工作。对城市面源的处理，大多数仍以高斯烟羽模式为基础，也有直接采用数值积分物质守恒方程求解。不论采用什么模式处理，关键问题是精确确定源强，提高源强的时空分辨率。

3.3.4 流动源排放型

此类污染源主要包括卡车、小汽车，而飞机、火车等也属此类源但不是主要的。交通排放主要污染物是 CO 和氮氧化物，大多将它们转换成面源或线源处理。但是，这样的面源和线源时空变化非常明显，与城市交通状况密切相关。城市 CO 和氮氧化物的排放及其浓度分布与城区建筑群结构及空气动力学效应有关，也应该考虑街区对 CO 和氮氧化物浓度分布的复杂影响。

3.4 干湿沉积模式

污染物的迁移清除包括干湿两类沉积过程，通常采用干湿沉积预报模式（DSDM）预报。

干沉积过程涉及各种复杂的微观物理、化学及其生态过程，例如凝聚力、物质在不同界面上的碰撞、吸收、反射、溶解与吸附等。这些过程的综合影响通过干沉积速度（ V_d ）来表现^[5,6,10,11,14~17]。干沉积过程会明显改变城市空气污染物的时空浓度分布，尤其是下垫面复杂的城市区域。

污染物的降水清除（或冲刷），包括许多重要的云雨微物理过程，如云下冲刷、云中湍流混合和云中清除过程等。如果污染物浓度假设成指数规律清除，它必须定义一个清除系数（或冲刷系数），其系数与降水强度、云的类型和高度、地形标高及其化学物质性质有关。

粒子（或气溶胶）污染物可通过重力沉降过程和碰撞、吸收、吸附等过程被清除。重力沉降速度和沉积速率分别反映了不同粒径污染物的清除过程。

利用新的干沉积速度型^[28,29,33,38,40]，导出不同下垫面型（水域、农作物、山地、林区及城市等）的沉积速度，再应用干湿沉积预报模式预报出各种化学物的地面干沉积量、湿沉积量及干湿沉积总量的空间分布。干湿沉积预报模式与对流层高分辨化学预报模式（HRCM）相互耦合。

3.5 对流层高分辨化学模式

一些普通的污染物如氮氧化物、硫氧化物以及碳氢化合物，在日光条件下发生氧化作用，生成新的二次污染物。大气中，存在于污染烟流中的二氧化硫既具化学活性又具很高水溶性，一方面它可转化成硫酸盐气溶胶，另一方面，还可以在光化学烟雾形成中，抑制臭氧的生成。在城市大气中，只要存在一定污染水平的污染物，便可能发生大量的，尚不完全清楚的化学反应，这一领域需要进一步探索研究。

将光化学反应引入物质守恒方程，物质剂量随时空变化，其变化速率与所涉及的化学反应速率成比例。化学反应速率与反应物质的克分子浓度成比例，其比例常数称之为比速率常数，它与反应物质的化学性质和环境状况（主要是温度）有关。参加大气化学反应的物质总量，遵守连续性原理而随时间变化，求解比较复杂，因为大气湍流对进行化学反应的气团有影响，从而影响到参与扩散过程的物质浓度，这通常是一复杂的非线性过程。现在可以借助数值求解方法，当化学反应速度与大气混合过程相比是相当缓慢的情况下，问题的处理可以大为简化。这种情况下，化学反应实际上不起多大作用，而只要考虑污染物质的总量就行。于是，大气污染过程的处理就可以不考虑细致的化学反应了。事实上，目前，对范围不大的一些大气污染问题都是这样处理的，但作为具有多种化学物质的城市空气污染预报问题，化学转化过程是非常重要的。

浓度计算模式将采用欧拉型 HRCM^[30]，该模式包含对流层内物质输送、扩散、转化、迁移等主要过程，可预报对流层内气体污染物（酸性物质 SO_2 、 NO_x ，温室气体和氧化剂，TSP 等）的时空分布及演变过程。HRCM 也适用于区域尺度（几千公里范围）。

需输入到模式中的资料有逐时三维风场、温度场和湿度场，湍流扩散场（湍流统计量随高度、稳定度、下垫面型变化及拉氏时间尺度），下垫面型，每小时地面降水量及污染源（人为、自然和生态源）排放清单。

4 M- β 尺度动力学模式

有关大气参数和扩散过程的研究有三种基本方法：野外测试、数值试验和物理模拟。野外测试是基础，数值试验的结果要靠它验证，物理模拟的参数要靠它提供，但它的周期长，花费钱和劳动力，往往存在时间和空间的资料窗。而数值试验方法则是将实际问题用计算机作各种可控试验，它有坚实的数理基础，省钱和劳动力，可填补野外测试的资料窗，并可作定量的预测，尤其是现代计算机技术高速发展的今天，越来越显出它的优越性。

本节介绍的模式是一个准静力的动力学模式，通常在下述条件下，大气运动可假定是准静力平衡的^[13]：（1）对流活动较弱，垂直速度较小；（2）地形坡度较小（例如小于 45° ）；（3）地形的特征尺度不小于几公里。合乎上述条件的大气运动可采用准静力模式。在这类模式中，气压场是根据大气准静力关系，由温度场计算得到。

模式采用了考虑地形影响的地形追随坐标系，考虑了地表温度和水温的日变化，采用套网格与四维资料同化技术，求解流体力学和热力学方程组等，用此模式可建立和预测风和温度场之间的时空关系；较为全面地反映天气系统、下垫面的动力和热力作用对

气象要素的共同影响,可较好地模拟山谷风、海陆风、河陆风、城市热岛等局地环流的基本特征。

4.1 方程组

模式采用如下地形追随坐标系

$$z^* = \frac{z - z_G}{D}, \quad D = \frac{z_T - z_G}{z_T} \quad (4.1)$$

动力学方程、静力平衡方程、连续方程和热力学方程分别为

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} = & \frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial x} (Du^2) - \frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial y} (Duv) - \frac{\partial}{\partial z^*} (uw^*) - \Theta \frac{\partial p'}{\partial x} + g \frac{\theta'}{\Theta} \left(1 - \frac{z^*}{z_T}\right) \frac{\partial z_G}{\partial x} \\ & + \frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial x} (DK_H \frac{\partial u}{\partial x}) + \frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial y} (DK_H \frac{\partial u}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z^*} (K_V \frac{\partial u}{\partial z^*}) \frac{1}{D^2} + fv \end{aligned} \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} = & -\frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial x} (Duv) - \frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial y} (Dv^2) - \frac{\partial}{\partial z^*} (vw^*) - \Theta \frac{\partial p'}{\partial y} + g \frac{\theta'}{\Theta} \left(1 - \frac{z^*}{z_T}\right) \frac{\partial z_G}{\partial y} \\ & + \frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial x} (DK_H \frac{\partial v}{\partial x}) + \frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial y} (DK_H \frac{\partial v}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z^*} (K_V \frac{\partial v}{\partial z^*}) \frac{1}{D^2} - fu \end{aligned} \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial \pi'}{\partial z^*} = g \frac{\theta'}{\Theta^2} D \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (Du) + \frac{\partial}{\partial y} (Dv) + \frac{\partial}{\partial z^*} (Dw^*) = 0 \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta'}{\partial t} = & -\frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial x} (Du\theta') - \frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial y} (Dv\theta') - \frac{\partial}{\partial z^*} (w^*\theta') - DS w^* - \left(u \frac{\partial z_G}{\partial x} \right. \\ & + v \frac{\partial z_G}{\partial y} \left. \right) S \left(1 - \frac{z^*}{z_T}\right) + \frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial x} (DK_H \frac{\partial \theta'}{\partial x}) + \frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial y} (DK_H \frac{\partial \theta'}{\partial y}) \\ & + \frac{\partial}{\partial z^*} (K_V \frac{\partial \theta'}{\partial z^*}) \frac{1}{D^2} \end{aligned} \quad (4.6)$$

其中 $\pi = c_p (\pi / \pi_0)^{R/c_p}$, $\theta = T(p_0 / p)^{R/c_p}$ 。

方程中的常量和变量的含义说明如下:

π, π' : 天气尺度的 Exner 函数和相对于天气尺度的偏差

Θ, θ' : 天气尺度的位温和相对于天气尺度的偏差

p_0, p : 地面气压和气压

z_T : 模式顶高度

z_G : 地形高度

c_p, R : 干空气定压比热和干空气气体常数

S : 初始位温递减率 ($= d\Theta / dz$)

f : 科氏参数

K_H, K_V : 水平和垂直扩散系数

u, v : 水平风场的分量

w^* : z^* 坐标系中的垂直速度

4.2 数值计算方案

水平方向采用等距网格，垂直方向采用不等距网格。数值差分格式采用交错网格。这种交错网格的优越性是能利用一阶差分格式达到二阶的精度。其中平流项采用施主格式 (Donor scheme)。

$\partial u / \partial t = -u(\partial u / \partial x)$ 写为

$$u_{i,j,k}^{n+1} = u_{i,j,k}^n - \frac{Dt}{Dx} u_{i,j,k}^n (u_{i,j,k}^n - u_{i-1,j,k}^n) u_{i,j,k}^n > 0 \quad (4.7)$$

$$u_{i,j,k}^{n+1} = u_{i,j,k}^n - \frac{Dt}{Dx} u_{i,j,k}^n (u_{i+1,j,k}^n - u_{i,j,k}^n) u_{i,j,k}^n < 0 \quad (4.8)$$

$\partial u / \partial t = -v(\partial u / \partial x)$ 写为

$$u_{i,j,k}^{n+1} = u_{i,j,k}^n - \frac{Dt}{dy} \bar{v}_{i,j,k}^n (u_{i,j,k}^n - u_{i-1,j,k}^n) \bar{v}_{i,j,k}^n > 0 \quad (4.9)$$

$$u_{i,j,k}^{n+1} = u_{i,j,k}^n - \frac{Dt}{Dy} \bar{v}_{i,j,k}^n (u_{i+1,j,k}^n - u_{i,j,k}^n) \bar{v}_{i,j,k}^n < 0 \quad (4.10)$$

其中 $\bar{v}_{i,j,k}^n = (v_{i-1,j,k}^n + v_{i-1,j+1,k}^n + v_{i+1,j,k}^n + v_{i+1,j+1,k}^n) / 4$ 。

在垂直方向上，垂直速度定义在全面 z^* 上，其他变量定义在半 z^* 面上。半 z^* 面上的变量代表了整层的平均。表 4.1 给出了垂直分层定义。

表 4.1 模式的垂直 z^* ($\times 10$ m) 分层 (k)

k	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	
整层	0	0.4	1.6	3.4	6.6	8.4	12	28	52	68	92	108	192	208	292	
半层	/	0.2	1.0	2.5	5.0	7.5	10	20	40	60	80	100	150	200	250	/

模式的时间差分前差格式。为了避免解的分离，对所有预报量作频率滤波。

$$\tilde{\alpha}^\tau = (1 - \nu)\alpha^\tau + \frac{1}{2}\nu(a^{\tau+1} + \tilde{\alpha}^{\tau-1}) \quad (4.11)$$

其中 $\tilde{\alpha}$ 是滤波后的变量，模式中系数 ν 取为 0.1。

4.3 边界及初始条件

4.3.1 初始条件

在开始积分预报方程组时，其预报变量都要求有初值。对 M- β 模式我们采用两种方法获得初始场。一是将现有的观测资料 (包括风、温和湿度场)，采用中尺度范围的 DMF，以客观分析方法内插到模式网格上。经过 DMF 计算的风场满足连续性原理。由于高空实测资料少，在 PBL 内变量垂直内插时，常常使用平均风场随高度和稳定度变化的参数化关系^[3]。

另外一种方法是使用 M- α 模式预报的气象场作为 M- β 模式的输入场，这些输入场既可作为初始场，也可作为 FDDA 场。这里简单介绍 DMF。

诊断方法即先用客观内插的方法将实际观测资料插值到模式所计算区域内的每个格点上，然后用变分法对风场进行调整，使调整后的风场满足连续性条件，同时又使这一

调整风场与原插值风场的总体偏差为最小。

质量守恒约束的三维风场诊断方法是获得非均匀地形情况下三维风场的有效方法之一。近些年来,这种调整模式在大气边界层和大气扩散数值模拟的研究中已被广泛采用。按此方法建立起来的风场能够满足连续性方程约束,较好地反映地形对流场的动力扰动作用,可在一定程度上弥补复杂地形条件下观测资料方面的不足;但此方法要求测站对模式区域内流动有充分的代表性,对实测资料的要求较高,需要花费大量的人力和物力,模拟结果的质量主要取决于初始客观内插风场和参数的选取。

连续方程在 $xy\sigma_z$ 坐标系下,考虑在水平范围不是太大的情况下,边界层运动可以认为是不可压缩的,运动连续性方程可以写成:

$$\frac{\partial u^*}{\partial x} + \frac{\partial v^*}{\partial y} + \frac{\partial w^*}{\partial \sigma_z} = 0 \quad (4.12)$$

其中

$$\sigma_z = (z - h'_s) / [H(x, y) - h'_s] \quad (4.13)$$

$$u^* = u \Delta H(x, y) \quad (4.14)$$

$$v^* = v \Delta H(x, y) \quad (4.15)$$

$$w^* = d\sigma_z / dt \Delta H(x, y) = w - (u \partial z_g / \partial x + v \partial z_g / \partial y) - \sigma_z [u \partial \Delta H(x, y) / \partial x + v \partial \Delta H(x, y) / \partial y] \quad (4.16)$$

$$\Delta H(x, y) = H(x, y) - h'_s(x, y) \quad (4.17)$$

这里 $H(x, y)$ 为模式上边界, h'_s 为模式下边界,为10 m风标观测的地面风高度, z_g 为地形相对高度, u , v 和 w 分别是 x , y 和 σ_z 方向的平均风速。

风场调整方法 为使 $xy\sigma_z$ 坐标下的插值风场满足连续性方程(4.12),同时又使三维风场的调整量达到最小,即求以下关系式的极小值:

$$E(u^*, v^*, w^*, \lambda) = \int [\alpha_1^2 (u^* - u_0^*)^2 + \alpha_1^2 (v^* - v_0^*)^2 + \alpha_2^2 (w^* - w_0^*)^2 + \lambda (\partial u^* / \partial x + v^* / \partial y + w^* / \partial \sigma_z)] dx dy d\sigma_z \quad (4.18)$$

这里 u^* , v^* , w^* 表示调整后的风场, u_0^* , v_0^* , w_0^* 为初始插值风场, λ 为拉格朗日算子, α_1 , α_2 为代表水平及垂直方向观测误差大小的系数,上式取极小的欧拉-拉格朗日方程组由下式和(4.12)组成

$$u^* = u_0^* + (\partial \lambda / \partial x) / (2\alpha_1^2) \quad (4.19)$$

$$v^* = v_0^* + (\partial \lambda / \partial y) / (2\alpha_1^2) \quad (4.20)$$

$$w^* = w_0^* + (\partial \lambda / \partial \sigma_z) / (2\alpha_2^2) \quad (4.21)$$

边界条件为:

$$n_x \lambda \delta(u^*) = 0, \quad (4.22a)$$

$$n_y \lambda \delta(v^*) = 0, \quad (4.22b)$$

$$n_{\sigma_z} \lambda \delta(w^*) = 0. \quad (4.22c)$$