

大气污染防治与生态
文明建设系列丛书

大气环境数值模式应用于 城市大气复合污染诊断研究

DAQI HUANJING SHUZHI MOSHI YINGYONGYU
CHENGSHI DAQI FUHE WURAN ZHENDUAN YANJIU

周 阳 张丽娜 姚立英 等 / 编著

中国环境出版集团

大气污染防治与生态文明建设系列丛书

大气环境数值模式应用于城市大气 复合污染诊断研究

周 阳 张丽娜 姚立英 等 编著

中国环境出版集团·北京

图书在版编目 (CIP) 数据

大气环境数值模式应用于城市大气复合污染诊断研究/
周阳等编著. —北京: 中国环境出版集团, 2018.7

(大气污染防治与生态文明建设系列丛书)

ISBN 978-7-5111-3731-9

I. ①大… II. ①周… III. ①城市空气污染—
污染防治—研究—天津 IV. ①X51

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2018) 第 161586 号

出版人 武德凯
责任编辑 殷玉婷 沈建
责任校对 任丽
封面设计 彭杉

出版发行 中国环境出版集团
(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)
发行热线: 010-67125803, 010-67113405 (传真)

印 刷 北京中科印刷有限公司
经 销 各地新华书店
版 次 2018 年 7 月第 1 版
印 次 2018 年 7 月第 1 次印刷
开 本 787×960 1/16
印 张 21.5
字 数 275 千字
定 价 60.00 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

编委会

主 编 周 阳 张丽娜 姚立英

副主编 黄浩云 张 涛 陈 璐 郭安可

编 委 (按姓氏汉语拼音排序)

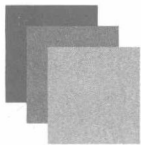
高玉平 吉 晟 李 璠 李雨蒙 李志强

刘 玲 马 瑶 马寅平 彭 茵 秦 龙

孙晓蓉 王同猛 王文秀 王艳丽 王艳云

王永敏 吴 岳 殷 江 翟鸿哲 张时佳

张晓旭 张 圆 朱明奕



序

良好的生态环境是实现中华民族永续发展的内在要求，是增进民生福祉的优先领域。党的十八大将生态文明建设纳入中国特色社会主义事业“五位一体”总体布局，“美丽中国”成为中华民族追求的新目标。

党的十八大以来，我国的大气环境保护工作从认识到实践都发生了历史性和全局性的变化，污染治理力度前所未有的。大气环境管理由总量控制为主向环境空气质量改善为主转型升级。2013年，国务院颁布了《大气污染防治行动计划》（简称“大气十条”），经过五年的努力，“大气十条”目标已全面实现，2017年，全国地级及以上城市PM₁₀平均浓度比2013年下降22.7%；京津冀、长三角、珠三角等重点区域PM_{2.5}平均浓度比2013年分别下降39.6%、34.3%和27.7%。大气污染防治取得阶段性成绩的同时，我们也应该清醒地认识到，我国面临的大气环境质量形势依然十分严峻，颗粒物浓度超标严重，重污染天气仍然时有发生，臭氧污染问题日益凸显，复合型污染态势仍然十分突出，环境问题成为制约经济可持续发展的瓶颈，成为全面建成小康社会的明显短板。

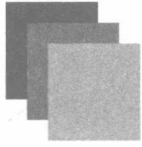
环境空气质量问题的本质是二氧化硫、氮氧化物、颗粒物及挥发性有机物等大气污染物排放远远超过区域大气环境容量，多种污染物相互叠加耦合，导致一次污染和二次污染共存、本地污染与区域污染叠加，中国的大气环境问题比世界上任何其他国家都更为复杂，治理也更加艰难。在制定具体大气污染防治措施时，应充分考虑措施的可行性和环境空气质量改善目标的可达性，在具体实施过程中也应进一步做好跟踪评估，不断调整优化，这是科学制定大气污

染防治决策的内在要求。

大气污染源排放清单的建立是一项重要的基础性工作，它既是大气污染防治工作的出发点，也是最终评价实施效果的落脚点。空气质量模式是关联源排放和空气质量，建立减排与空气质量改善定量关系，推进大气环境精细化管理的重要技术方法。随着大气污染防治工作的深入，空气质量改善目标的实现对治理决策科学性要求日益严格，清单与空气质量模型在科学诊断城市大气复合污染成因、识别重点控制源和优先控制源、评估防治措施有效性中发挥越来越重要的作用。

天津市环境保护科学研究院以及天津市大气污染防治重点实验室长期从事天津市以及京津冀区域的大气污染防治研究，对于基层大气污染防治工作有着深刻的理解与认识。其近年来承担了天津市大气复合污染数值诊断技术研究、天津市清新空气行动方案制定与实施效果评估、天津市锅炉大气污染物排放标准修订、天津市工业企业挥发性有机物排放控制标准制定、天津市源排放特征与应急减排方案研究以及天津市复合污染机理和政策措施评估等多项环境管理和省部级科研课题项目。本书作者及其所在团队长期奋斗在大气环境科学与管理研究一线，在大气环境科研领域，特别是高时空分辨率城市大气污染源排放清单编制、污染物特征成分谱构建、不同尺度空气质量扩散模型研究与应用以及城市大气污染成因研究与政策措施制定评估等方面有着长期工作经验，对相关问题有着独到的认识与理解。本书内容涵盖城市污染源排放清单编制、污染物特征成分谱研究、排放清单处理模型开发应用、空气质量模拟平台搭建以及政策措施评估，较为完整地介绍了采用数值模式在城市尺度开展大气复合污染诊断研究的工作方法，是作者及其所在团队长期工作经验与成果的总结与提炼，具有较强的实用性，对于从事源清单编制和区域空气质量模型研究等的人员具有很好的参考和借鉴意义。





内容简介

近 30 年以来，我国经济一直保持持续快速增长、城市化进程不断加速，机动车保有量急剧增加、国家经济实力显著增强，人们生活水平显著提高。与之相伴的是，我国大气污染形势日益严峻，区域型、大范围、长时段重污染天气频繁出现，发达国家几百年工业化发展过程中逐步显现的环境问题近年来在我国京津冀、长三角等经济发达区域集中爆发，并有向中西部地区发展的趋势，给我国的生态环境安全和人民群众的身体健康造成极大威胁。2013 年，“大气十条”颁布以来，国家和地方各级政府对大气污染治理的重视程度达到了前所未有的高度，并已取得阶段性显著成绩。但是也应该看到，距消除重污染天气、实现空气质量全面达标还有很大的距离，我国的大气污染治理依然任重道远。

工业、机动车、扬尘等各类源综合叠加，各类污染物排放量巨大，极大超出区域大气容量并将导致大气氧化性不断增强，二次污染严重是造成我国严重的区域大气污染的根本原因。局地污染与区域污染复合、冬季细颗粒污染和夏季臭氧污染突出是当前我国大气复合污染的主要特征。对污染来源以及各类源的排放贡献进行准确识别和定量表征，在此基础上运用区域空气质量模型研究大气污染生消机制、进行污染溯源追踪、定量评估不同治理方案措施的预期效果，结合环境空气质量控制目标优化方案措施是找准污染成因、科学制定大气污染防治措施的有效手段。

本书结合笔者近年来在大气污染源排放清单编制、区域质量模型模拟

以及大气污染防治对策评估方面所做工作，系统地介绍了空气质量模型的发展历程、大气污染源分类方法以及清单编制方法、模式化大气化学反应机理以及本地化模式成分谱构建方法、模式化大气污染源排放清单生成方法以及区域空气质量模拟平台构建方法。最后，以天津市清新空气行动方案实施效果评估为案例详细介绍了上述方法的实际运用。

全书共分为 7 章：

第 1 章为绪论，概述了以细颗粒物和臭氧为典型代表污染物的城市大气复合污染的污染来源及危害。同时论述了大气复合污染控制研究方法。

第 2 章简要介绍了大气环境数值模式的发展历程、主要的空气质量模式以及区域空气质量模型中的溯源诊断模式分析方法。

第 3 章主要介绍城市大气污染源排放清单的基本概念、国内外研究进展、清单分类与编码分级方法以及不同源类的清单编制方法。

第 4 章主要介绍了区域空气质量模式中主要的大气化学反应机理、气溶胶机理以及基于模型化学机理的物种成分谱构建方法。

第 5 章主要介绍从排放源清单总量数据到空气质量模型所需的模式化清单处理方法，包括清单的时空分配处理方法、物种分配处理方法、SMOKE 清单处理模型，重点介绍了基于 NCL 的本地化排放清单生成工具开发方法等。

第 6 章以 WRF-CMAQ 为核心模式简要介绍大气复合污染数值诊断平台建立方法、模型参数设置以及模拟结果可靠性评估分析、模式气溶胶机制改进运用等。

第 7 章以天津市清新空气行动方案实施效果评估工作为主要案例介绍了数值模式运用于城市大气污染诊断和评估的具体方法，包括不同类型源减排核算方法、气象因素、区域传输以及不同治理工程措施对于空气质量改善贡献等。

运用空气质量模型开展大气污染防治研究涉及排放源清单、化学机

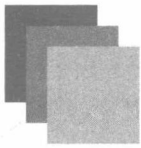
理、空气质量模型系统等多方面内容,要求专业人员具备环境监测与分析、大气化学、大气物理、跨平台计算机编程等多方面知识,使得入门学习门槛较高,市面上,相关综合性、系统介绍的书籍并不多见。本书是笔者在多年相关课题研究工作基础上,结合近年的实际清单编制和模型运用经验,总结、提炼而来,内容丰富,适用性强。希望能为从事大气污染源清单编制、区域空气质量模型运用等相关工作的科研和技术人员提供一定的帮助和参考。

本书编写过程中参考了大量国内外学者优秀的研究成果,涉及的许多工作也是建立在参考和借鉴前人工作基础上,同时在写作过程中也得到笔者所在单位天津市环境保护科学研究所和天津市大气污染防治重点实验室领导和同事的大力支持,在此衷心感谢各位前辈、同行、同事们,感谢你们的大力帮助和支持。

笔者深知本书由于自身学术水平、学术视野的限制,加之时间仓促,在编写过程中难免存在诸多不足,恳请广大读者和同行批评指正。

作者

2018年6月于天津



目 录

1 绪论	1
1.1 城市大气复合污染概述	1
1.1.1 细颗粒物污染概述	2
1.1.2 臭氧污染概述	6
1.2 大气复合污染控制对科学研究的需求	10
1.2.1 污染特征及形成机制研究方法	10
1.2.2 基于空气质量数据分析的大气复合污染研究方法	12
1.2.3 基于大气数值模式的大气复合污染研究方法	14
1.3 本书主要内容	16
参考文献	17
2 大气环境数值模式发展及主要模式介绍	26
2.1 第一代大气环境数值模式	26
2.2 第二代大气环境数值模式	28
2.2.1 AERMOD	28
2.2.2 ADMS	29
2.2.3 CALPUFF	30
2.3 第三代大气环境数值模式	32

2.3.1	CMAQ	33
2.3.2	CAMx	36
2.3.3	WRF-Chem.....	37
2.3.4	NAQPMS.....	39
2.4	模式分析方法简介	41
2.4.1	Brute-Force	41
2.4.2	DDM/HDDM	42
2.4.3	PSAT	43
2.4.4	OSAT.....	44
	参考文献.....	46
3	城市大气污染物排放源清单编制	51
3.1	大气污染物排放源清单概述	51
3.1.1	大气污染物排放源清单基本概念	51
3.1.2	大气污染物排放源清单的估算方法	53
3.1.3	大气污染源排放清单研究进展	54
3.2	城市大气污染源排放清单编制技术路线	68
3.3	排放源分类分级和编码	69
3.3.1	排放源分类分级方法	69
3.3.2	排放源分类编码建立	70
3.4	高时空分辨率城市排放清单的建立方法	93
3.4.1	固定燃料燃烧源	93
3.4.2	工艺过程源	97
3.4.3	溶剂使用源	99
3.4.4	道路移动源	102
3.4.5	非道路移动源	104

3.4.6 农业源.....	105
3.4.7 扬尘源.....	107
3.4.8 天然源.....	109
参考文献.....	112
4 模式化大气化学反应机制及本地化模式成分谱构建.....	117
4.1 大气化学反应机理.....	117
4.1.1 CBM 机制.....	118
4.1.2 SAPRC 机制.....	121
4.1.3 RADM 和 RACM 机制.....	125
4.2 大气气溶胶机理.....	126
4.3 基于模型化学机理的物种成分谱建立方法.....	129
4.3.1 VOCs 模式机制物种成分谱构建方法.....	129
4.3.2 基于 CB05 机制的重点行业 VOCs 成分谱的建立与比较分析.....	132
4.3.3 基于 SAPRC99 机制的重点行业 VOCs 成分谱的建立与 比较分析.....	139
参考文献.....	147
5 模式化排放源清单处理.....	154
5.1 大气环境数值模式对排放源清单的要求.....	154
5.1.1 模式化排放清单时间分配处理概述.....	155
5.1.2 模式化排放清单空间分配处理概述.....	156
5.1.3 模式化排放清单物种分配处理概述.....	157
5.2 SMOKE 模式介绍.....	158
5.2.1 模式化排放源清单处理模型 SMOKE.....	158
5.2.2 SMOKE 模型处理流程.....	160

5.3	本地化排放清单处理模块建立	161
5.3.1	需求分析及开发意义	161
5.3.2	数据结构及开发环境	164
5.3.3	系统结构及流程实现	166
	参考文献	176
6	大气复合污染数值诊断平台建立	178
6.1	大气复合污染数值诊断平台建立	178
6.1.1	平台整体结构	178
6.1.2	模式参数设置	180
6.2	大气复合污染数值诊断平台模拟可靠性分析	181
6.2.1	气象要素模拟可靠性分析	182
6.2.2	污染物浓度模拟可靠性分析	186
6.2.3	不同化学机制结果差异性比较	189
6.2.4	气溶胶机制改进试验	193
	参考文献	201
7	天津市清新空气行动方案评估	205
7.1	近年来天津市空气质量变化特征	205
7.1.1	空气质量等级变化	205
7.1.2	重污染天数变化趋势	208
7.1.3	主要污染物浓度变化	210
7.2	天津市空气质量存在的问题及科技需求	219
7.3	天津市清新空气行动方案概况	219
7.4	评估主要背景及目的	220
7.5	评估主要内容及技术路线图	221

7.6	控煤减排效益评估	222
7.6.1	电力源	222
7.6.2	燃煤锅炉源	233
7.6.3	散煤燃烧源	243
7.7	控车减排效益评估	258
7.7.1	道路移动源	258
7.7.2	非道路移动源	264
7.8	控尘减排效益评估	265
7.8.1	建筑施工扬尘源	265
7.8.2	堆场扬尘源	267
7.8.3	裸地扬尘源	269
7.8.4	道路扬尘源	270
7.9	控污减排效益评估	271
7.9.1	工业硫氧化物、氮氧化物及颗粒物源	271
7.9.2	工业挥发性有机物源	276
7.10	实施清新空气行动方案主要大气污染物排放变化汇总分析	279
7.11	空气质量改善评估	286
7.11.1	气象因素对空气质量的影响	286
7.11.2	区域传输对空气质量的影响	293
7.11.3	不同治理工程措施环境效益	296
	参考文献	315
	附件	319

1

绪 论

1.1 城市大气复合污染概述

自改革开放以来,特别是进入 21 世纪以后,我国经济保持着持续快速增长态势,城市化进程不断加快,机动车保有量急剧增加。能源的大量消耗以及人类经济活动导致的各类污染物排放大幅增加,多种污染物均以较高的浓度同时存在,发生复杂的相互作用导致二次污染,使我国经济发达的城市群大气复合污染日益严峻。大量研究结果显示,以大气臭氧(O_3)和细颗粒物($PM_{2.5}$)为代表的大气复合型污染正在成为影响人民生活质量和导致严重环境效应的重大污染问题(胡敏等, 2009),其中京津冀、长三角、珠三角等城市群尤为严重(吴兑等, 2006, 2008; Tie and Cao, 2009a)。大气细粒子的污染特征及其理化性质与大气中的非均相化学反应密切相关,并能引起能见度下降、酸雨频率增加、全球气候变化等一系列环境问题(张小曳, 2007)。此外,细颗粒物($PM_{2.5}$)粒径小、比表面积大,易于富集空气中的有毒有害物质,并通过呼吸进入人体肺泡或血液循环系统,对人体健康造成严重危害(Craig et al., 2008)。高浓度地面臭氧(O_3)会增加城市光化学烟雾污染,它具有很强的氧化性,对眼睛和呼吸道有强烈的刺激性,损害人体肺功能,甚至导致各种疾病。因此,以 $PM_{2.5}$ 和 O_3 为关键因子的大气复合污染引起了国外学者的广泛关注。

1.1.1 细颗粒物污染概述

(1) 细颗粒物的理化性质

细颗粒物 ($PM_{2.5}$) 又称为细粒子、细颗粒, 是指环境空气中空气动力学当量直径小于等于 $2.5 \mu m$ 的颗粒物。其在空气中含量越高, 空气污染越严重。虽然 $PM_{2.5}$ 只是地球大气成分中含量很少的组分, 但它对空气质量和能见度等有重要的影响。与较粗的大气颗粒物相比, $PM_{2.5}$ 粒径小、面积大, 活性强, 易附带有毒、有害物质且在大气中的停留时间长、输送距离远, 因而对人体健康和大气环境质量的影响更大。 $PM_{2.5}$ 的主要组分包括有机碳、元素碳、硝酸盐、硫酸盐、铵盐、钠盐和部分金属元素等。

(2) 细颗粒物污染来源

大气环境中的细颗粒物是一次颗粒物与二次颗粒物的混合物, 成分复杂, 多种气态、固态前体物如氨 (NH_3)、二氧化硫 (SO_2)、氮氧化物 (NO_x)、有机碳 (OC) 等可通过均相和非均相反应转化成为硫酸盐、硝酸盐、铵盐等二次 $PM_{2.5}$ 。从一次来源看, 主要包括人为源和自然源两个方面。

人为源排放主要包括以下几类:

化石燃料燃烧: 煤、石油等化石燃料燃烧是大气中颗粒物的重要排放源。煤是主要的工业和民用燃料, 主要成分是碳, 并含有氢、氧及少量氮、硫和金属化合物。煤在燃烧时会产生大量烟尘, 除此之外还会形成一氧化碳、二氧化碳、硫氧化物、氮氧化物、烃类等有害物质。火力发电厂、钢铁厂及装配了大型锅炉的工厂是用煤量最大的工矿企业。在民用燃煤方面, 生活燃煤即家用小炉灶, 具有分布较广, 排放高度低, 无治理措施的特点, 其污染物排放量往往不低于大型锅炉, 部分地区甚至更高。

移动源排放: 以内燃机为主的各类道路及非道路移动源排放的废气中不仅含有一氧化碳、氮氧化物、碳氢化合物, 同时也是一次颗粒物的重要排放源, 特别是在城市区域, 随着经济水平的提高, 城市建设的加速, 家用轿车、中重型柴油货车、

各类建筑施工机械的排放量越来越大成为大中型城市颗粒物污染的重要来源。

工业生产：工业生产过程中排放到大气中的污染物种类多、数量大，是城市颗粒物污染的另一重要来源。城市工业排放的污染物构成与该区域产业结构构成有密切关系，许多高污染高能耗产业如炼钢、炼焦、炼铁等黑色及有色金属冶炼和压延加工，水泥生产等非金属矿物制品业等生产中都可能排放大量的粉尘。

市政活动：伴随着经济发展和城市化进程的加快，房屋建设施工、房屋拆除、道路与管线施工、物料运输等活动产生的大量扬尘是城市颗粒物的一个重要来源。

生物质燃烧：在我国广大农村地区，一方面，还存在以稻草、玉米等农作物茎秆为燃料；另一方面，随着农村生活水平的提高，家用电器、液化石油天然气的推广普及使得农民对柴草的需求量下降，每年农作物收割完毕后，大量秸秆被露天焚烧，产生的大量污染物也是颗粒物污染的一个重要来源，在一定条件下，大量秸秆集中焚烧往往会造成较为严重的空气污染。

固体废物焚烧：即垃圾焚烧。固体废物是多种工农业生产和生活产生的固体废物的总称，其组成极其复杂，通常与来源、生活水平等密切相关。目前处理固体废物的主要方法是焚烧，其热能可以利用，但其中的有害物质进入大气便造成了大气污染。

与人为源相比，自然源所排放的大气污染物种类少、浓度低，但从世界角度来看，自然源依然很重要，尤其在清洁地区其污染效应更为明显。自然源主要包括风蚀扬尘、沙尘暴以及海盐粒子等。

(3) 细颗粒物的危害

细颗粒物对人体健康造成危害的主要对象包括以下几个方面：呼吸系统、心血管系统、血液系统和神经系统等。细颗粒物浓度每增长 $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ，对成年男性和女性而言，感冒的发病率分别会升高 4.81% 和 4.48%。细颗粒物浓度每增长 $10 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ，肺功能会下降 1%。在心脏神经系统中，细颗粒物会改变血液黏度和心率等，使心肌梗死的突发性增加。高浓度细颗粒物会使血液黏稠度和血液中的白蛋白数增加，可能引发血栓。此外，一些有毒的重金属元素会在细颗粒物上富