

大气污染

数值预报基础和模式

雷孝恩 张美根 韩志伟等 编著



气象出版社

大气污染数值预报基础和模式

雷孝恩 张美根 韩志伟等 编著

本专著在研究和编写过程中得到中国科学院“九五”重大项目“大气污染预测的理论和方法研究”的资助。项目编号是KZ951-A1-403。

气象出版社

内 容 简 介

本书在大量外场测试资料分析结果的基础上,结合物理、化学、生态过程的数值研究,系统地论述了涉及到多介质、多界面、多物质之间的相互作用和耦合的大气污染数值预报问题。内容包括大气湍流扩散的基本预报理论体系(统计理论、相似理论、涡旋扩散);模式预报系统(污染源模型、三维气象变量诊断模式、 α 中尺度和 β 中尺度气象模式、行星边界层湍流统计量参数化模型、植物冠层模式、干湿迁移模式、Monte-Carlo多源模式、高分辨率对流层化学物质守恒模式)及程序框架;污染源结构的调控(对流层大气污染分布特征、源结构调控对浓度贡献率的预测、对流层化学转化的数值预报)等。

本书是关于大气污染数值预报问题的一本专著,可供大气环境、气象等领域的科研、教学和专业工作者阅读及参考,也可作为研究机构 and 高等院校大气环境、大气物理、大气化学、动力气候等专业学生、研究生的教材和学习参考书。

图书在版编目(CIP)数据

大气污染数值预报基础及模式/雷孝恩等编著. -北京:气象出版社,1998.12

ISBN 7-5029-2606-2

I. 大… I. 雷… II. 空气污染-污染指数-预报 N.X831

中国版本图书馆 CIP 数据核字(98)第 33272 号

气象出版社出版发行

(北京市海淀区白石桥路 46 号 邮编:100081)

责任编辑:郭彩丽 终 审:周诗健

封面设计:郭彩丽 责任技编:郝 平 责任校对:邢惠英

*

北京东光印刷厂印刷

开本:787×1092 1/16 印张:20.75 字数:515.2 千字

1998 年 12 月第 1 版 1998 年 12 月第 1 次印刷

印数:1—800 定价:45.00 元

目 录

1. 大气污染预报	(1)
1.1 大气污染预报问题	(1)
1.2 大气污染预报问题的特点	(2)
1.2.1 问题的尺度及预报时效	(2)
1.2.2 时空高分辨率	(3)
1.2.3 多种化学物质	(3)
1.2.4 理化生过程耦合	(3)
1.2.5 城市空气污染气象特征	(4)
1.3 大气污染预报的主要方法	(5)
1.3.1 大气污染潜势预报	(5)
1.3.2 统计预报	(5)
1.3.3 数值预报	(6)
1.3.4 空气污染指标及标准	(6)
1.4 大气污染数值预报理论体系及模式系统	(9)
1.4.1 大气污染数值预报的理论体系	(9)
1.4.2 中尺度气象预报模式	(9)
1.4.3 PBL 湍流统计量参数化模型	(10)
1.4.4 污染源模式化模型	(11)
1.4.5 干湿沉积预报模式	(12)
1.4.6 三维 Monte-Carlo 多源模式	(12)
1.4.7 对流层高分辨化学预报模式	(13)
1.5 预报效果及检验	(13)
1.5.1 监测系统	(13)
1.5.2 网络信息系统	(14)
1.5.3 预报效果的检验及预报系统的改进	(14)
2. 城市大气污染分布特征	(18)
2.1 城市空气质量状况及其浓度资料的获取	(18)
2.2 SO ₂ 分布特征	(22)
2.2.1 一般特征	(22)
2.2.2 浓度型	(27)
2.3 总悬浮颗粒物分布特征	(29)
2.4 氮氧化物分布特征	(33)
2.5 二次污染物分布规律	(37)

3. 平均风与温度随高度和大气稳定度的变化特征	(44)
3.1 概述	(44)
3.2 大气稳定度类	(45)
3.3 大气辐射	(47)
3.3.1 稳定度类与净辐射关系	(47)
3.3.2 地表反射率	(47)
3.3.3 总辐射和净辐射日变化规律	(49)
3.3.4 有效辐射的导出	(49)
3.3.5 云对总辐射的影响	(50)
3.4 地温	(51)
3.4.1 地温随时间和深度的变化	(51)
3.4.2 地温与大气净辐射的关系	(53)
3.5 温度的垂直结构	(54)
3.5.1 温度随高度分布	(54)
3.5.2 PBL 厚度和混合层厚度	(56)
3.5.3 逆温特征	(58)
3.6 平均风廓线随高度的变化特征	(59)
3.6.1 PBL 风向随高度变化	(59)
3.6.2 PBL 内风速随高度的变化	(62)
3.6.3 PBL 三维环流	(66)
3.6.4 小风平均厚度及其日变化	(72)
4. 湍流统计量的分布特征	(76)
4.1 湍流统计量的预报方法	(76)
4.1.1 PBL 湍流	(76)
4.1.2 PBL 湍流的预报方法	(77)
4.2 资料的获取	(78)
4.3 近地层湍流统计量	(79)
4.4 城市中心湍流统计量随高度的分布	(85)
4.5 城市中心与郊区湍流统计量廓线的对比	(87)
4.6 湍流统计量随高度变化的参数化	(88)
4.6.1 速度尺度	(88)
4.6.2 湍流脉动速度的标准差	(89)
4.6.3 湍流扩散系数和耗散系数	(91)
4.6.4 Lagrange 时间尺度	(92)
5. 中尺度气象预报模式	(96)
5.1 概述	(96)
5.2 控制方程	(97)
5.3 网格结构及差分格式	(98)
5.4 下垫面型及强迫	(99)
5.4.1 下垫面型的参数化	(99)

5.4.2	地面热量平衡	(100)
5.4.3	辐射平衡	(101)
5.4.4	地形的初始化	(102)
5.5	湍流通量的参数化	(102)
5.6	初始及边界条件	(104)
5.6.1	初始条件	(104)
5.6.2	边界条件	(104)
5.7	套网格与四维资料同化方法	(105)
5.8	实例预报结果分析	(107)
5.9	模式程序框架	(116)
5.9.1	程序说明	(116)
5.9.2	程序框架	(117)
6.	局地环流的数值模拟	(136)
6.1	非均匀性和非平稳性	(136)
6.1.1	内边界层和热内边界层	(136)
6.1.2	水平流场的非均匀性	(138)
6.1.3	垂直流场的非均匀性	(144)
6.2	河陆风环流	(145)
6.2.1	河岸的气温、水温及风速变化特征	(145)
6.2.2	河陆风环流的垂直结构	(146)
6.2.3	河陆风的数值模拟	(147)
6.3	山谷风环流	(151)
6.4	城市热岛环流	(155)
6.4.1	重庆温度的水平分布	(155)
6.4.2	热岛环流	(159)
6.4.3	城市热岛效应的垂直结构	(160)
6.5	海陆风环流	(164)
6.5.1	地表温度及水面温度	(164)
6.5.2	海陆风环流的热力和动力强迫	(168)
6.5.3	海陆风环流的预报	(170)
7.	沉积过程的预测	(173)
7.1	沉积过程	(173)
7.2	干沉积过程的外场测试	(174)
7.2.1	资料的获取	(174)
7.2.2	植物冠层内的动量通量	(176)
7.2.3	植物冠层内的物质通量	(177)
7.2.4	干沉积速度	(178)
7.2.5	湍流耗散系数	(181)
7.2.6	湍流谱特性	(182)
7.2.7	湍流尺度	(183)

7.3	新的干沉积速度型	(185)
7.4	干湿沉积因子的模式化	(187)
7.4.1	不同生态下垫面型及地形特征	(187)
7.4.2	干沉积因子	(188)
7.4.3	湿沉积因子	(189)
7.5	干湿沉积量的实际预测	(191)
7.5.1	干沉积量的预测	(191)
7.5.2	湿沉积量的预测	(192)
7.5.3	干湿沉积总量的预测	(193)
7.6	小结	(194)
8.	大气污染化学预报模式	(197)
8.1	物质守恒方程	(197)
8.2	平流过程	(198)
8.3	湍流扩散过程	(198)
8.4	干沉积过程	(199)
8.5	云雨和湿沉积过程	(199)
8.5.1	云场的特征	(199)
8.5.2	次网格尺度垂直重新分配	(199)
8.5.3	液相化学及冲刷	(200)
8.6	气相化学	(200)
8.6.1	光化学反应	(200)
8.6.2	热力反应	(202)
8.6.3	Troe 反应	(203)
8.6.4	平衡反应	(203)
8.6.5	特殊反应	(204)
8.7	多源问题	(204)
8.8	初始及边界条件	(204)
8.9	模式预报效果的验证	(204)
8.10	实例预报	(205)
8.11	模式程序框架	(208)
8.11.1	模式说明	(208)
8.11.2	程序框架	(210)
9.	Monte-Carlo 多源模式	(222)
9.1	概述	(222)
9.2	污染物质点的轨迹	(223)
9.3	污染物的浓度分布	(227)
9.4	污染物的迁移和转化过程	(230)
9.5	模式所需输入参数和资料	(231)
9.6	污染物浓度实例预报	(234)
9.6.1	不利气象条件下污染预测	(234)

9.6.2 Monte-Carlo 模式预报结果验证	(241)
9.7 模式的程序框架	(242)
9.7.1 程序说明	(242)
9.7.2 程序框架	(244)
10. 对流层污染物化学转化的数值预报	(264)
10.1 概述	(264)
10.2 化学转化过程的模式化	(265)
10.3 预报实例	(267)
10.4 对流层中 NO_2 分布特征	(270)
10.5 对流层中氧化剂分布规律	(270)
10.5.1 PAN 的时空分布规律	(270)
10.5.2 H_2O_2 时空分布规律	(278)
10.6 对流层臭氧来源及分布规律	(279)
10.7 一次污染与二次污染的关系	(283)
10.8 区域尺度环境影响问题	(285)
11. 污染源结构调控及其对浓度贡献率的预测	(289)
11.1 大气污染的危害	(289)
11.2 大气环境容量的预测	(291)
11.3 大气污染总量调控预测	(291)
11.4 大气污染调控效益	(293)
11.5 污染源结构	(295)
11.5.1 能源构成	(295)
11.5.2 三类源的划分	(296)
11.5.3 各行业排放源	(297)
11.5.4 不同源排放高度	(298)
11.6 总悬浮颗粒物来源解析	(299)
11.7 不同源高对浓度的贡献率	(302)
11.7.1 对地面浓度的贡献率	(302)
11.7.2 对 50 m 高度平面浓度的贡献率	(303)
11.7.3 对 500 m 高度平面浓度的贡献率	(306)
11.8 三类源对浓度的贡献率	(309)
11.9 不同行业源对浓度的贡献率	(313)
11.10 小结	(318)
附录:书中使用的固定符号说明	(320)

1. 大气污染预报

雷孝恩

(LAPC, 中国科学院大气物理研究所, 北京 100029)

摘 要

大气污染数值预报是涉及到多介质、多界面、多物质之间相互作用和耦合的多学科问题。本章概括地论述了开展此项研究的目的、意义及其国内外发展趋势;大气污染预报问题的主要特征(尺度及预报时效、时空高分辨率、多种化学物质、理化生过程耦合、城市空气污染气象与污染物排放特征);预报的基本方法(大气质量标准与大气污染指数、潜势预报、统计模式、数值模式);数值预报的基本理论(统计理论、相似理论、涡旋扩散或 K 理论)与数值预报模式系统(源的模式化、三维流场客观内插与调整模式、 α 中尺度和 β 中尺度气象预报模式、行星边界层湍流统计量参数化模型、干湿迁移模式、Monte-Carlo 多源模式、高分辨率对流层化学物质守恒模式);预报效果检验问题(外场测试、物理模拟、数值模拟是大气污染预报研究的三大基本方法)等。

1.1 大气污染预报问题

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(肖辉,1993),大面积森林毁坏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(Kondo,1991)是 21 世纪人类面临的四大环境问题(Lei 等,1998;Tester,1990)。它们不但关系到人类基本生活条件比如食品、水以及能源的维持,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,对生态环境影响的程度及应采取的对策措施也不完全相同,但它们都与污染物质的来源、形成、演变及生态效应有关。

环境与发展是当今世界共同关注的重大问题,环境保护与经济可持续发展的协调是各国政府面临的一个严峻而又亟待解决的难题(Corell,1991)。保护环境、防治污染的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)规模的扩大、城市人口的膨胀、大型工业开发区的发展等造成的大气污染已不再是一个工厂范围的局部污染问题,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,为了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,为使我国大气环境预测、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的研究,建立适合于我国城市空气污染特点的预报模式系统及其高时空分辨率的监测站网,是开展空气污染预报的理论基础和技术准备。

从 60 年代起,随着大气污染防治和研究工作的开展,人们迫切需要了解空气污染的影响及变化趋势,空气污染的预报应运而生。较早开展空气污染预报研究的美国,于 1976 年公布了全国统一的污染物标准指数(PSI),供各级大气污染防治机构采用,并通过报纸、电视等公共媒体向公众发布空气污染状况和预报结果,同时提醒人们在 PSI 达到一定值后应采取的相应措施,以保护人民身体健康。

近十多年来,许多国家和地区按照各自的环境保护法规的要求和规定,相继开展了空气污染警报和污染预报工作,它已成为空气监测网络的主要任务之一。通过建立实时动态监测系统,可发布空气污染警报并进行污染预报、及时地为污染物排放控制提供技术支持。例如德国国家和地方空气监测网络,通过计算机系统迅速地与其它国家的监测站及网络中心交换数据,取得各监测站的监测结果以及相邻网络提供的空气污染跨越边境的信息,结合气象预报系统,提供污染的早期预警和预报,并可协同联邦环保机构采取污染源调控措施,减少污染事件(主要是冬季 SO_2 污染和夏季 O_3 污染)的发生。目前为监控更大尺度光化学烟雾的形成,西欧各国正在加强联合监测网络,并将其扩大到整个欧洲。

1988 年 12 月,日本为了加强防治日趋严重的汽车尾气污染,决定在污染严重的大阪、东京地区开展氮氧化物污染预报业务,在每日上午的新闻中发布前一日的污染状况和当日预报结果。而当空气污染超过规定的警报水平时,空气自动监测系统向新闻媒介发出污染警报。荷兰 1989 年开始在部分地区进行空气污染预报,1992 年已能够在全国范围以日均浓度水平发布空气污染预报,冬季预报 SO_2 和小于 $10\text{ }\mu\text{m}$ 的粒子(PM_{10}),夏季预报 O_3 的浓度,并开发了多种预报技术与方法,其预报时效从几小时到 3 天。

由于能源结构的差异和汽车的使用与普及程度的不同,不同国家的空气污染特征也不完全相同。目前国外空气污染预报的重点为汽车尾气污染所导致的光化学烟雾,具体预报项目为臭氧和一氧化碳。墨西哥城和法国巴黎因空气污染水平超过了规定指标阈值,而采取了一系列限制措施,如限制汽车的行驶和速度、鼓励使用公共交通、压缩汽车生产等。巴黎市政府还采取了更为根本性的措施,设立汽车的“绿标”通行证制,防止空气质量的恶化,此计划将扩大到法国所有的大城市,国际舆论与社会公众对此反映强烈,评价较高。韩国及我国香港、台湾地区也已利用空气监测网络发布空气污染预警。

1.2 大气污染预报问题的特点

大气污染预报(尤其是城市空气污染预报)与一般的天气预报不同,它有着独特的特征,下面分五方面论述。

1.2.1 问题的尺度及预报时效

城市 24 h 污染浓度预报的空间范围一般小于 200 km。虽然城市污染预报范围是 β 中尺度范围浓度时空分布问题,但它必然要涉及到预报 α 中尺度的天气过程,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)(Gifford, 1988a, 1988b)。预报问题与研究 and 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 h。因此既要考虑大、中、小尺度模式之间的相互耦合,宏观和微观的理化生过程,以满足浓度预报的精度,但又不能太复杂,有些过程如小尺度湍流、化学转化等过程必须简化或参数化。

如果在模式预报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,整个模式系统的计算时间会远远超过 24 h。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。

1.2.2 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)(Longhetto,1980)下层,这些量在 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变化最激烈的区域也在 PBL 下层。因此,模式在 PBL 内必须有较高的垂直分辨率。例如,应细致地考虑生态下垫面、植物冠层的垂直结构、剧烈的垂直切变以及人群呼吸道的高度等,模式系统的最低层应在 10 m 以下、100 m 以内的近地面层,垂直方向应有 3~4 层为宜,整个 PBL 最好有 5~8 层,整个对流层应有 10~12 层为最佳(Lei 和 Chang,1992c),这样就构成了一个垂直方向高分辨率的模式结构。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之一。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一定数量级。因此,设计高时间分辨率的模式是非常重要的,一般以预报每小时的浓度分布为宜。

1.2.3 多种化学物质

大气污染预报与一般的天气预报的不同点在于,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)形式给出的,但 API 是由不同污染物及其它们的浓度导出的,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 及总悬浮颗粒物或 PM10。如果要预报整个 24 h 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)和几十类化学反应方程(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,及均相化学、非均相化学等)(ADMP,1987;Stockwell,1989)。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,时空尺度之间的兼容性或相互匹配是一个非常关键的问题。

1.2.4 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多学科问题。它必须包括污染物在多种介质和多界面中经历的四个基本过程。

输送过程 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,在土壤中则依赖于土壤的孔隙、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,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变化过程。

湍流或涡旋扩散过程 湍流或涡旋扩散过程是指在同一介质中污染物质在大气中不同尺

度的湍流或水中不同尺度的涡旋作用下的散布过程。湍流扩散使大量排放到空气中的污染物稀释冲淡。因此如何利用大气这一自然资源为发展工业服务,同时又保护人类赖以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,它是物理学研究领域的难点之一。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参数化已有一些方法和模型。

化学转化过程 化学转化过程指的是化学物质在大气中由各种化学反应使之产生、消失和转变成其它化学物质的过程。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,对某些物质必须考虑它们的时间变化,而有的可以当成平稳过程处理,有的可看成常数,比如甲烷(NAPAP,1990);另外,有些化学物质必须考虑非线性化学反应过程,有的则只需要线性化学反应即可;再则,在整个对流层化学中,有些化学物质与其它物质联系非常广泛,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。化学转化过程可以发生在同一介质中,也可以发生在界面上。

干湿迁移过程 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(Underwood,1987;Wesely,1985,1988)。所谓湿迁移过程是指与云和降水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;由于微生物的作用,土壤中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、 C_xH_x 以及 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很好地考虑这三大过程之间相互耦合及作用与反作用(Lei等,1998)。

1.2.5 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(其地面粗糙度长可在1~3 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,可造成物质的高浓度积累。城市空气污染浓度有明显日变化,这主要是由于气象条件的日变化,以及人为活动的日变化规律所致。

由于城乡水平温差(一般大于 $3^{\circ}C$ 以上)引起的热岛效应(蒋国碧,1985)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的规模及建筑物高度有关,重庆市平均约为300 m),并形成夜间混合层,这是城市空气污染气象学中的关键问题之一。大量观测事实表明,晴朗的白天,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,逐渐破坏抬升,这是一般的变化规律;但在城区,由于存在热岛效应,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,在这种结构情况下,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,有可能使城区形成地面高浓度。

另外,城市常常位于沿海、江边或山地之上,海陆风、河陆风及山谷风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之一。

1.3 大气污染预报的主要方法

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,则有利于预报结果的对比和验证。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的时空分布。

60年代国际上以潜势预报方法为主,预报可能出现严重污染的气象条件,而且只涉及到气象因子。大气污染自动监测系统及站网广泛建立后,空气污染预报变成以污染物浓度预报为主,预报未来污染物浓度的时空分布、污染指数的时空分布、污染危害程度、持续时间等。

1.3.1 大气污染潜势预报

大气污染潜势预报可以看成是以气象上的天气形势预报为基础的“二次预报”,其预报的准确程度与天气形势预报的准确程度和预报精度有着直接关系,一般预报中提到的潜势预报准确率都是把天气形势预报准确率当做100%来考虑的。

潜势预报采用的基本方法是从已发生的各污染事件着手,归纳总结出发生污染事件时,所特有的气象条件、天气形势及气象指标。目前的潜势预报所采用的方法与早期的天气形势预报有相似之处,都是以天气因子的某一临界值作为预报依据。

最通用的潜势预报指标一般有风速、温度梯度、混合层高度、气压场配置和能见度指标。它们可组成一些综合指标,像通风系数、滞留区域、污染综合临界系数等。美国在70年代制定的全国空气污染潜势预报程序中的工作步骤是:确定滞留区域,计算滞留区域内的混合高度和输送风速,判别是否符合潜势报告指标。参数值的获得都是从无线电探空观测和初始动力学预报方程计算而来的。滞留区内所有点的上午和下午的混合高度和输送风速可通过计算得到。

在稳定的层结和微风条件下,城市中、低架源的排放(主要是汽车运输)可造成严重的空气污染。通常我们使用的决定污染趋势的方法本质上是指低架源。例如,在美国,许多研究都把高潜势理解为(近地面层中风速为 $4\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$,3 km高度上风速为 $12\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$)整个2.5 km以内的大气层中存在一强的风切变,并有一强的下沉运动相配合,这种条件的持续时间为36 h。

1.3.2 统计预报

统计预报是在不了解事物变化机理的情况下,通过分析事物规律来进行预测的方法,大气污染统计预报是不依赖物理、化学及生物过程的预测方法,主要有因次分析法和回归分析法。

在一特定的区域或城市,首先需要多年同时间的气象与污染物浓度分布资料,分析多年的天气变化规律,找出若干种天气类型,然后分析各种天气类型的典型参数,将这些参数与相对应的环境质量实测数据建立起各种定量或半定量关系,这些关系可以是线性的,也可以是非线

性的,它们可以是有量纲的组合,也可以是无量纲的组合,最后根据这些关系作定量或半定量的空气污染浓度预报。经验统计模式的不足之处在于它假定预报区域内的污染源排放是平稳的,浓度与污染源不发生直接联系,要求有详实的气象和空气质量实测数据。正因为需要大量的长时间的监测资料,一般要花费大量的人力和物力,常常存在较大的时空资料窗。其优点是简便、易普及,因此有一定的实用性。

统计模式是在建立数值定量预报模式之前的常用方法,至今仍有实际应用价值,主要有三种类型:

(1) 统计学回归模型。即根据实测值与预测值之间的比较原理,应用过去的浓度、气象资料进行诊断预测。通常采用回归分析、相关分析、线性模型等方法。

(2) 分类法。通过分析过去的污染物浓度型与天气形势类型之间的对应关系,导出每类天气型的浓度时空分布规律,并建立起定量关系,以作出预报。

(3) 趋势外推法。此方法遵从连贯性原则,通过各类过程发展变化的一致性和连续性来预测未来。应该指出趋势外推法进行定性预报是一种简便的方法,而作为定量预测,其准确度和精度都不是非常理想。

1.3.3 数值预报

潜势预报的方法是以天气形势及其气象要素指标为依据,对未来大气环境质量状况进行定性或半定量的分析。为了定量描述空气中大气污染物的浓度,预报它的变化,就要掌握大气污染物在空气中的演变规律,即要了解污染物在空气中所经历的理化生过程。用于描述这些过程的定量数学方程系统被称为模式,它们可以是 Lagrange 模型、Euler 模型或混合模型。能够定量预报大气污染物浓度方法的代表性模型有烟羽(Plume)模式(雷孝恩,1981,1982)、烟团(Puff)模型(Lei 和 Qian,1987;Lei 等,1987)、箱式(Box)模型,及求解物质守恒方程的数值模式(雷孝恩,1990b; NAPAP,1990)四类。

数值模式是用数值计算方法直接求解物质守恒方程,或者求解在各种近似条件下简化形式的物质守恒方程,以求得污染物浓度在环境介质中与界面上的交换特征及其分布规律。通常采用的欧拉系统,适用于非定常和非均匀流场、大范围、大量排放源、大量线性和非线性的化学反应、干湿沉积和其它迁移与清除过程、生物效应等的处理。取不同的湍流闭合方案建立各种类型的数值模式,并以网格形式实施。这种方法难度大、花费的计算时间长,但科学性强,能作出定量的浓度时空预报,并能填补资料窗,而且节省钱和人力,因此是空气污染预报的发展方向。

1.3.4 空气污染指标及标准

API 是间接表征空气污染程度的一种方法,其特点是综合、简便、直观,适用于描述城市短时间内空气质量状况及污染程度,因此,在国内外环境质量综合评价中被普遍采用。

大气质量标准是制定 API 的出发点,我国采用现行的空气质量标准 GB:3095-1996,它是污染区的划分、污染控制措施的实施、污染对生态环境(含人)影响的经济损益分析、各类区域环境污染现状的评价和对策等的法律依据。

由于各国经济发展阶段和水平的不同,因而在制定国家空气质量标准时,对污染物浓度的限值也不同。根据主要污染物的浓度及(可能)持续时间,划分污染警报的级别,以用于污染现状警报及短时效预报,是非常有效的方法,日本几个大城市的污染警报即属于此类形式(表

1.1)。

表 1.1 日本空气污染警报限值(ppmv^①)

污染物		SO ₂	CO	总悬浮颗粒物	NO ₂	氧化剂
环境标准		日均值 0.04 小时值 0.1	日均值 10 8 h 值 20	日均值 0.10 mg·m ⁻³ 小时值 0.20 mg·m ⁻³	日均值 0.04~0.06	小时值 0.06
警 报 限 值	一 般 警 报	小时值>0.2 (持续 3 h); 小时值>0.3 (持续 2 h); 48 h 均值>0.15	小时值>30	小时值>2.0 mg·m ⁻³ (持续 2 h)	小时值>0.5	小时值>0.12
	紧 急 警 报	小时值>0.5 (持续 3 h); 小时值>0.7 (持续 2 h)	小时值>30	小时值>3.0 mg·m ⁻³ (持续 3 h)	小时值>1	小时值>0.4

将污染物的浓度与相应的环境空气质量标准值比较,用线性方法分段计算各种污染物的污染分指数,取所有污染物分指数中最高者代表当地的 API 值。各国和地区计入 API 的项目不同。美国有 SO₂,NO_x,CO,O₃,PM10 等;香港对同一项目采取不同时段分别计算,如 CO 有 8 h 和 24 h 均值,这样计入 API 的指标共有八项(表 1.2)。各国和地区 API 取值范围和分级也不尽相同,美国采用 PSI500 系列,分七级;我国台湾采用 API300 系列,分五级(表 1.3)。

表 1.2 香港 API 浓度限值(mg·m⁻³)

API	总悬浮颗粒物		SO ₂		NO ₂		CO		O
	24 h	24 h	1 h	24 h	1 h	8 h	1 h	1 h	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
50	0.080	0.08	0.40	0.080	0.15	5	15	0.12	
100	0.260	0.35	0.80	0.150	0.30	10	30	0.24	
200	0.375	0.80	1.60	0.280	1.13	17	60	0.40	
300	0.625	1.60	2.40	0.565	2.26	34	90	0.80	
400	0.875	2.10	3.20	0.750	3.00	46	120	1.00	
500	1.000	2.62	4.00	0.940	3.75	57	150	1.20	

表 1.3 台湾 API 分级

API	0~50	51~100	101~199	200~299	>299
污染水平	良好	一般	不好	非常不好	有害

在确定 API 分级时,各级污染指数所对应的浓度限值必须与各国的空气质量标准相对应,才能使 API 与本国空气质量标准相衔接,否则,在评价城市空气质量时就没有执行本国的空气质量标准。

① 1 ppmv=10⁻⁶。

根据国家空气质量标准的有关规定及我国目前城市开展空气质量例行监测项目的实际情况,在选取表征城市空气质量状况的项目时,只采用了 SO_2 、总悬浮颗粒物和 NO_x 三项污染指标。为此,我国城市空气质量预报的 API 分级标准如表 1.4 所示。

表 1.4 我国大陆城市 API 分级浓度限值($\text{mg} \cdot \text{m}^{-3}$)

API	总悬浮颗粒物	SO_2	NO_x
500	1.000	2.620	0.940
400	0.875	2.100	0.750
300	0.625	1.600	0.565
200	0.500	0.250	0.150
100	0.300	0.150	0.100
50	0.120	0.050	0.050

从表 1.4 可看出,API 的范围从 0 到 500。其中 50,100,200 分别对应于我国空气质量标准中日均值一、二、三级标准的污染物浓度限值;而 API300,400,500 所对应的各污染物浓度限值是借鉴香港同级 API 对应的污染物浓度值(见表 1.2)。

我国 API 分为五级,每一级对应的污染物浓度值及其对人体健康的影响程度是不同的(见表 1.5)。

表 1.5 API、质量级别及人体健康影响

API	空气质量级别	空气质量状况	对健康的影响	对应空气质量的适用范围
0~50	I	优	可正常活动	自然保护区、风景名胜区和其它需要特殊保护的地区
51~100	II	良好	可正常活动	为城镇规划中确定的居住区、商业交通居民混合区、文化区、一般工业区和农村地区
101~200	III	轻度污染	长期接触,易感的人症状有轻度加剧,健康人群出现刺激症状	特定工业区
201~300	IV	中度污染	接触一定时间后,心脏病和肺病患者症状显著加剧,运动耐受力降低,健康人群中普遍出现症状	
300~500			健康人除出现较强烈症状,运动耐受力降低外,长期接触会提前出现某些疾病	
>500	V	重度污染	病人和老年人可能提前死亡,健康人群出现不良症状,影响正常活动	

从表 1.5 可看出,当 API 超过 200 点时,就属中度污染,长期接触可对健康人群构成威胁,500 点则是对人体健康产生明显危害的污染水平。

设 C 为污染物的浓度,则 API 可使用以下关系导出:

$$API = (API_M - API_L) \frac{C - C_L}{C_M - C_L} + API_L$$

式中 C_M 与 C_L 是在 API 分级限值表 1.4 中最接近 C 的两个值, C_M 为大于 C 的浓度限值, C_L 为小于 C 的浓度限值。 API_M 与 API_L 是在 API 分级限值(表 1.4)中最接近 API 的两个值, API_M 为大于 API 的值, API_L 为小于 API 的值。

1.4 大气污染数值预报理论体系及模式系统

理论及其模式系统是污染物定量预报的基本工具,本节将论述三大理论体系及六类模式(或模型)系统:

1.4.1 大气污染数值预报的理论体系

湍流场中物质行为的理论处理主要按三类理论体系发展(Lei 等,1998;Pasquill,1983;Smith,1978),即统计理论、相似理论,以及涡旋扩散理论或 K 理论。

统计理论的出发点是将物质在大气中的行为用速度场的运动学统计特征来描述。早期的理论只考虑均匀湍流情况,比如 1921 年 Taylor 提出的均匀湍流统计理论。随后 Batcheler, Pasquill 等将此理论应用到风切变流中,并在湍流扩散研究中得到广泛应用(Pasquill,1983;Smith,1978)。Monte-Carlo 模式是湍流统计理论的发展,它能更好地反映湍流随机运动的本质(邓玉珍、雷孝恩,1990;雷孝恩、邓玉珍,1990;田瑞明,1994)。近来,Gifford 将质点运动学和动力学相结合,提出了拉氏动力学理论(雷孝恩、李新伟,1992;Sumner,1987),并将该理论实用范围扩大到上千公里及整个对流层。

相似理论的基本假设是在常通量层中物质的运动行为可以由速度尺度、温度尺度与动力学粗糙度长(z_0)表征。早期,通常利用此理论计算近距离的物质垂直扩散问题(雷孝恩等,1977,1981)。70 年代,Pasquill 应用 PBL 局地湍流相似理论(雷孝恩、任阵海,1981),研究了垂直非均匀湍流对中距离湍流垂直扩散的影响,并得到了包括大气稳定度类、下风方向距离及下垫面粗糙度等因子的中尺度垂直扩散型。Gifford(1988b)研究了对流层的谱相似。

涡旋扩散理论或 K 理论本质上是在不同假设条件下求解物质守恒方程。为了使方程闭合,通常将湍流通量与平均变量的梯度成比例,其比例系数为 K ,通常称为 K 理论,也称为一价闭合理论。如果守恒方程的系数均为常数,其解的分布函数就是 Gauss 形式,对物质扩散而言,就是通常所说的 Gauss 模式,其方程也称为 Fick 扩散方程。涡旋扩散系数 K 可以有不同形式,如果 K 及风速是时空的复杂函数,守恒方程只能有数值解,即是数值模式的基本方程(雷孝恩、邓玉珍,1984;雷孝恩、张时禹,1992;Lei 和 Han,1993)。

1.4.2 中尺度气象预报模式

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)、热力作用及动力作用。预报这三类过程通常采用中尺度气象模式,在空气污染预报中一般使用以下三类模式: