



区域大气环境-化学-气候模拟

王体健 等 著

国家科学技术学术著作出版基金资助出版

区域大气环境-化学-气候模拟

王体健 李 树 庄炳亮 谢 旻 李蒙蒙 著

内 容 简 介

本书介绍了我国大气污染的基本特征、大气环境质量状况以及大气环境模拟的基本方法,综述了大气污染输送扩散模式、大气酸沉降模式、光化学烟雾模式、大气颗粒物模式等方面的研究进展。基于作者多年来的研究成果,着重介绍了自主发展的区域大气环境模拟系统(RegAEMS)、区域气候化学模拟系统(RegCCMS)和区域空气质量模拟系统(RegAQMS)的设计框架、模块组成和测试结果。同时,重点介绍了这些系统在区域酸沉降、光化学烟雾、细颗粒物等大气复合污染过程模拟,不同类型气溶胶和对流层臭氧等大气污染物的辐射强迫和气候效应研究,区域大气环境影响评估和城市大气环境容量测算中的应用案例。此外,还针对小尺度污染扩散、城市大气污染化学、全球大气污染输送等方面的模式和应用进行了阐述,对未来大气环境模式的发展动向做了展望。

本书是关于区域大气环境、化学和气候模式发展和应用问题研究的一本专著,可供大气环境、大气物理、大气化学、气象、气候等领域的科研、教学和业务工作者阅读及参考,也可以作为高等院校研究生的教学材料和参考书籍。

图书在版编目(CIP)数据

区域大气环境-化学-气候模拟 / 王体健等著. — 北京:气象出版社, 2017.6
ISBN 978-7-5029-6573-0

I. ①区… II. ①王… III. ①区域大气环境-环境模拟②区域-大气化学-模拟③局地气候-气候模拟 IV. ①X16②P402③P463.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2017)第 128633 号

Quyú Dàqì Huánjīng-Huàxué-Qìhòu Mòní

区域大气环境-化学-气候模拟

王体健 李 树 庄炳亮 谢 旻 李蒙蒙 著

出版发行:气象出版社

地 址:北京市海淀区中关村南大街 46 号

电 话:010-68407112(总编室) 010-68408042(发行部)

网 址:<http://www.qxcbs.com>

责任编辑:黄红丽

责任校对:王丽梅

封面设计:楠竹文化

印 刷:北京中科印刷有限公司

开 本:787 mm×1092 mm 1/16

字 数:570 千字

版 次:2017 年 6 月第 1 版

定 价:120.00 元

邮政编码:100081

E-mail: qxcbs@cma.gov.cn

终 审:吴晓鹏

责任技编:赵相宁

印 张:22.5

印 次:2017 年 6 月第 1 次印刷

前 言

当前我国大气污染呈现以酸沉降、光化学烟雾和细颗粒物为典型特征的复合型污染,大气污染物(SO_2 , NO_x , NH_3 , VOC)及其通过化学反应转化而成的产物(硫酸盐、硝酸盐、二次有机气溶胶、 O_3 和硫氮沉降),对空气质量、人体健康和生态环境产生重要影响。此外,这些污染物还具有辐射效应,可以对区域和全球气候产生影响,因而研究大气复合污染及其对气候环境的影响对合理制定污染控制对策、有效改善大气环境质量、科学评估空气污染的气候效应具有重要的理论意义和实用价值。

空气污染和气候变化是当今人类面临的主要大气环境问题,数值模拟是研究这一科学问题的重要手段。为了定量研究大气复合污染的形成机理及其对气候和环境的可能影响,南京大学大气科学学院王体健教授课题组自1991年以来开始大气环境模拟的发展和应用研究,先后发展了区域大气环境模拟系统(RegAEMS)、区域气候化学模拟系统(RegCCMS)和区域空气质量模拟系统(RegAQMS),分别在大气环境模拟和空气质量预测、空气污染与气候变化相互作用、大气环境影响评估和容量测算等方面成为很好的研究工具,在多个国家自然科学基金项目(91544230, 41575145, 41621005, 40305019)、国家科技重大研发计划(2016YFC0203303, 2016YFC0208504)、973项目(2006CB403706, 2010CB428503, 2011CB403406, 2014CB441203)、863项目(2006AA06A307)、气象行业专项(GY-HY201206011, GYHY200806001)、环保行业专项(201409008)和欧盟FP7合作项目(REQUA, PIRSES-GA-2013-612671)中得到很好的应用。

《区域大气环境-化学-气候模拟》一书是作者三十年来从事大气环境学习、教学和研究的成果结晶。王体健负责本书总体框架的设计,并完成主要章节内容的撰写和全书的校对。研究团队主要成员李树、庄炳亮、谢旻、李蒙蒙和同门弟子王勤耕、南方、金龙山、朱庚富、孙振海、汪小钦、许丽人等参与了个别章节内容的撰写或对本书提出了宝贵意见。此外,我所指导过的研究生张明、张艳、杨浩明、高丽洁、王婷婷、刘丽、江飞、邓君俊、殷长秦、黄晓娴、刘倩、沈凡卉、张欣、张颖、刘芷君、陈璞珑等参加了部分章节内容的撰写,周凯旋负责参考文献的录入和校对,李宗恺教授为本书的学术顾问。

作为南京大学大气科学学院大气物理学与大气环境专业研究生课程《大气环境理论和模式》、《大气化学专题》和《大气环境数值模拟》的参考材料,本书力求系

统介绍大气环境模拟预测、影响评估和气候-化学相互作用研究的基本原理和基本方法,并且注重理论和实践的结合,给出了具体的应用实例。

本书的完成历时将近六年,在这里要特别感谢气象出版社黄红丽副编审的鼓励和帮助,使得本书获得国家科学技术学术著作出版基金的支持,并能在规定时间内顺利出版。在完成本书的最后三个月,适逢本人不慎骨折而在家休养,在此期间我的父母、岳父母、妻子和姐姐给予悉心的照顾,我的同事和朋友给予莫大的鼓励,我的学生给予有益的帮助,没有他们的支持,我无法最终完成本书,在这里一并表示由衷的感谢。

由于著者水平有限,书中难免有疏漏和不正之处,敬请读者不吝指正。

王体健

2017年5月20日于仙林风华园

目 录

前 言

第 1 章 绪论	(1)
1.1 我国大气环境状况	(1)
1.2 大气环境模拟方法	(3)
1.3 大气环境模式进展	(4)
1.3.1 大气输送扩散模式	(4)
1.3.2 大气酸沉降模式	(6)
1.3.3 光化学烟雾模式	(6)
1.3.4 大气细颗粒物模式	(8)
第 2 章 区域大气环境模拟系统	(10)
2.1 引言	(10)
2.2 系统框架	(11)
2.3 区域气象模式	(11)
2.3.1 中尺度气象模式 MM5	(11)
2.3.2 中小尺度气象模式 TAPM	(15)
2.3.3 新一代中尺度天气预报模式 WRF	(19)
2.4 大气环境模式	(20)
2.4.1 平流输送	(21)
2.4.2 湍流扩散	(21)
2.4.3 干沉积	(22)
2.4.4 气相化学	(32)
2.4.5 液相化学和湿清除	(35)
2.4.6 无机气溶胶化学	(38)
2.4.7 二次有机气溶胶化学	(42)
2.4.8 海盐气溶胶	(45)
2.4.9 沙尘气溶胶	(48)
2.4.10 气溶胶表面非均相化学	(53)
2.4.11 自然源排放	(54)
2.4.12 汞化学	(56)
2.4.13 二氧化碳的源汇和转化	(57)
2.5 工程化模式	(58)

2.5.1	气相化学模式简化	(58)
2.5.2	无机气溶胶模式简化	(59)
2.5.3	二次有机气溶胶模式简化	(59)
2.5.4	液相化学模式简化	(60)
2.5.5	湿清除过程简化	(60)

第3章 区域大气复合污染模拟 (61)

3.1	模式性能分析	(61)
3.1.1	干沉降子模式分析	(61)
3.1.2	气相化学子模式分析	(70)
3.1.3	无机气溶胶化学子模式分析	(73)
3.1.4	非均相化学子模式分析	(77)
3.1.5	汞化学子模式分析	(80)
3.1.6	综合性能检验	(83)
3.2	大气酸沉降模拟	(85)
3.2.1	典型酸雨事件模拟	(85)
3.2.2	全国大气沉降模拟	(88)
3.2.3	华东大气沉降模拟	(91)
3.2.4	长三角大气沉降模拟	(94)
3.3	光化学烟雾模拟	(96)
3.3.1	珠三角区域光化学模拟	(96)
3.3.2	城市光化学烟雾模拟	(98)
3.4	细颗粒污染模拟	(100)
3.4.1	长三角地区霾天气的时空分布特征	(100)
3.4.2	一次典型持续霾天气过程的模拟	(102)
3.5	大气汞污染模拟	(104)
3.5.1	模拟方案	(104)
3.5.2	不同形态汞化物的浓度	(104)
3.5.3	三类汞化物的干沉降量	(109)

第4章 区域气候化学模拟系统 (113)

4.1	引言	(113)
4.2	系统结构	(115)
4.3	区域气候模式	(116)
4.3.1	区域气候模式 RegCM2	(116)
4.3.2	区域气候模式 RegCM3	(117)
4.3.3	区域气候模式 RegCM4	(117)
4.4	大气化学模式	(117)
4.4.1	排放过程	(119)
4.4.2	输送过程	(123)

4.4.3	沉积过程	(123)
4.4.4	化学过程	(123)
4.4.5	辐射强迫	(126)
4.4.6	模式耦合技术	(130)
4.5	模式验证	(131)
4.5.1	气相化学模式性能分析	(131)
4.5.2	气态物模拟性能检验	(138)
4.5.3	气溶胶模拟性能检验	(154)
第5章	大气化学与气候相互作用模拟	(169)
5.1	对流层臭氧辐射效应模拟	(169)
5.1.1	1900年我国对流层臭氧分布	(169)
5.1.2	1995年我国对流层臭氧分布	(169)
5.1.3	1900—1995年对流层臭氧变化引起的辐射强迫	(171)
5.2	硫酸盐气溶胶气候效应模拟	(172)
5.2.1	硫酸盐气溶胶的直接气候效应	(173)
5.2.2	硫酸盐气溶胶的间接气候效应	(176)
5.3	硝酸盐气溶胶气候效应模拟	(179)
5.3.1	硝酸盐气溶胶的直接气候效应	(179)
5.3.2	硝酸盐气溶胶的间接气候效应	(182)
5.4	黑碳气溶胶气候效应模拟	(186)
5.4.1	黑碳气溶胶的直接气候效应	(186)
5.4.2	黑碳气溶胶的间接气候效应	(190)
5.4.3	黑碳-云滴内部混合半直接效应	(193)
5.5	沙尘气溶胶气候效应模拟	(197)
5.5.1	沙尘气溶胶的间接辐射强迫	(197)
5.5.2	沙尘气溶胶的间接气候效应	(198)
5.6	海盐气溶胶气候效应模拟	(200)
5.6.1	模拟方案	(200)
5.6.2	海盐气溶胶的空间分布	(200)
5.6.3	海盐气溶胶的光学厚度与直接辐射强迫	(203)
5.6.4	海盐气溶胶的直接气候效应	(207)
5.7	气溶胶和东亚季风的相互影响	(208)
5.7.1	东亚人为气溶胶的模拟	(208)
5.7.2	气溶胶引起的气候因子变化	(211)
5.7.3	气溶胶对东亚季风的影响	(213)
5.7.4	东亚季风对气溶胶的影响	(215)
5.8	东亚冬季风对气溶胶分布的影响	(218)
5.8.1	强弱冬季风年的选取	(218)
5.8.2	模拟结果评估	(219)

5.8.3	强弱季风年个例模拟分析	(222)
第6章	区域空气质量模拟系统	(226)
6.1	引言	(226)
6.2	区域空气质量模拟系统结构	(227)
6.2.1	模拟系统的构成	(227)
6.2.2	模式计算条件	(228)
6.3	区域气象模式	(228)
6.3.1	客观分析模式	(229)
6.3.2	风场调整模式	(230)
6.3.3	大气边界层模式	(232)
6.4	局地空气质量模式	(237)
6.4.1	平原地区模式	(237)
6.4.2	山区复杂地形模式	(241)
6.4.3	沿海复杂地形模式	(245)
6.5	区域空气质量模式	(254)
6.5.1	拉格朗日 K 模式	(254)
6.5.2	欧拉 K 模式	(258)
6.5.3	分段烟流模式	(261)
6.5.4	区域模式与局地模式的嵌套	(262)
6.6	大气环境容量模型	(263)
6.6.1	概念	(263)
6.6.2	理想大气环境容量	(263)
6.6.3	现实大气环境容量	(264)
第7章	空气质量模拟与环境影响评估	(267)
7.1	平原地区空气质量模拟	(267)
7.1.1	模式系统应用设计	(267)
7.1.2	上海地区电厂群环境影响分析	(268)
7.2	山区复杂地形空气质量模拟	(270)
7.2.1	地形预处理	(277)
7.2.2	电厂群大气环境影响模拟	(277)
7.3	沿海地区生物气溶胶扩散模拟	(282)
7.3.1	RegAQMS 应用设计	(283)
7.3.2	气象场模拟评估	(285)
7.3.3	源排放类型对生物气溶胶浓度的影响	(286)
7.3.4	物理和生物过程对生物气溶胶浓度的影响	(291)
7.3.5	生物气溶胶浓度的模拟和风险等级评估	(296)
7.4	大气环境容量规划应用实例	(302)
7.4.1	环境质量控制目标	(302)

7.4.2	参与规划计算的污染源	(303)
7.4.3	环境容量计算方案	(303)
7.4.4	环境容量计算结果	(304)
7.4.5	污染减排方案的环境效益分析	(312)
第8章	展望	(317)
8.1	非区域尺度大气环境问题	(317)
8.1.1	小尺度污染扩散	(317)
8.1.2	城市尺度大气污染	(318)
8.1.3	全球大气污染输送	(319)
8.2	大气环境模式的发展	(320)
8.2.1	新技术在大气环境模式中的应用	(321)
8.2.2	空气质量和气象耦合模式	(323)
8.2.3	大气化学和气候耦合模式	(324)
8.2.4	地球系统模式	(325)
参考文献	(326)
索引	(344)

第1章 绪论

本章主要介绍我国大气污染的基本特征、大气环境质量状况,以及大气环境模拟的基本方法。针对大气环境数值模拟,概述大气污染输送扩散模式、大气酸沉降模式、光化学烟雾模式、大气颗粒物模式等方面的研究进展。

1.1 我国大气环境状况

我国的大气污染大体上经历了三个阶段,分别呈现不同的特点:①1980—1990年,主要是由燃煤大气污染物形成的,故可称为“煤烟型”污染。主要特征是大多数城市空气污染物以燃煤形成的二氧化硫(SO_2)、氮氧化物(NO_x)和烟尘为主,且处在较严重的污染水平,同时酸雨污染并存;②1990—2000年,大气污染呈现典型的“煤烟”和“汽车尾气”混合型。主要特征是大气污染物以 SO_2 , NO_x 和可吸入颗粒物(PM_{10})为主,浓度居高不下,酸雨严重;③2000年以后,大气呈现以酸雨、光化学烟雾和细颗粒物为主要特征的复合型污染。 SO_2 , NO_x , PM_{10} 浓度开始逐步下降,细颗粒物($\text{PM}_{2.5}$)和臭氧(O_3)成为很多城市大气的主要污染物。纵观我国近40年大气环境保护的发展历史,当前空气污染特征已经从传统的煤烟型污染向“复合型”污染转变,传统的一次污染物(如二氧化硫和总悬浮颗粒物)的增长趋势已经得到有效遏制,氮氧化物和非甲烷碳氢呈现一定的上升趋势,而对二次生成的臭氧及细颗粒物的控制逐渐成为重点和关键。空气污染的范围也从局地性的一次污染转变为区域性的二次污染。一些地区高浓度的臭氧和细颗粒物同时并存,显示了我国多污染物共生、多污染源叠加、多尺度关联、多过程耦合、多介质影响的独特的大气污染特征。

根据《2015 中国环境状况公报》(<http://www.zhb.gov.cn/>),2015年我国 $\text{PM}_{2.5}$ 全国所有监测站点年均浓度 22~107 $\mu\text{g}/\text{m}^3$,总平均 55 $\mu\text{g}/\text{m}^3$,比2014年下降 14.1%; PM_{10} 全国所有监测站点年均浓度 40~174 $\mu\text{g}/\text{m}^3$,总平均 93 $\mu\text{g}/\text{m}^3$,比2014年下降 11.4%; SO_2 年均浓度 5~71 $\mu\text{g}/\text{m}^3$,平均 25 $\mu\text{g}/\text{m}^3$,比2014年下降 21.9%; NO_2 年均浓度 14~61 $\mu\text{g}/\text{m}^3$,平均 39 $\mu\text{g}/\text{m}^3$,比2014年下降 7.1%; O_3 日最大 8 小时平均值第 90 百分位数浓度范围为 95~203 $\mu\text{g}/\text{m}^3$,平均 150 $\mu\text{g}/\text{m}^3$,比2014年上升 3.4%;CO 日均值第 95 百分位数浓度范围为 0.9~5.8 mg/m^3 ,平均 2.1 mg/m^3 ,与2014年持平(图 1.1)。2015年全国城市空气质量总体趋好,首批实施新环境空气质量标准的 74 个城市细颗粒物($\text{PM}_{2.5}$)平均浓度比2014年下降 14.1%。全国 338 个地级以上城市中,有 73 个城市环境空气质量达标,占 21.6%;265 个城市环境空气质量超标,占 78.4%。

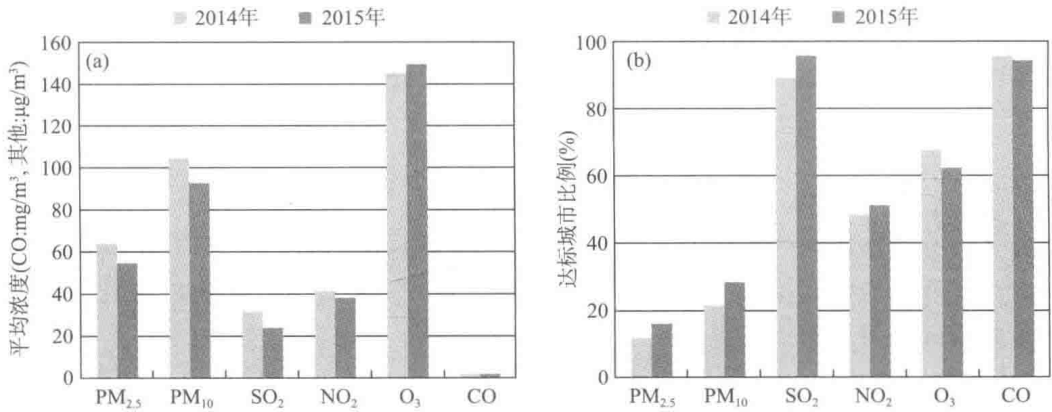


图 1.1 2015 年 74 个城市 6 项污染物年际比较

(a)平均浓度;(b)达标城市比例

2015 年 480 个城市(区、县)开展了降水监测,酸雨城市比例为 22.5%,酸雨频率平均为 14.0%,比 2014 年有所下降(图 1.2)。降水中的主要阳离子为钙和铵,分别占离子总当量的 25.9%和 14.5%,分别比 2014 年上升 1.0%;主要阴离子为硫酸根,占离子总当量的 24.7%,比 2014 年下降 3.8%;硝酸根占离子总当量的 8.5%,比 2014 年上升 1.1%(图 1.3)。酸雨类型总体仍为硫酸型,酸雨污染主要分布在长江以南到云贵高原以东地区(图 1.4)。

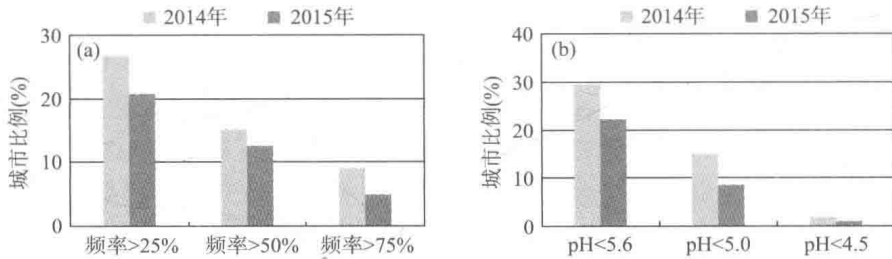


图 1.2 2015 年不同酸雨频率的城市比例年际比较(a)和不同降水 pH 年均值的城市比例年际比较(b)

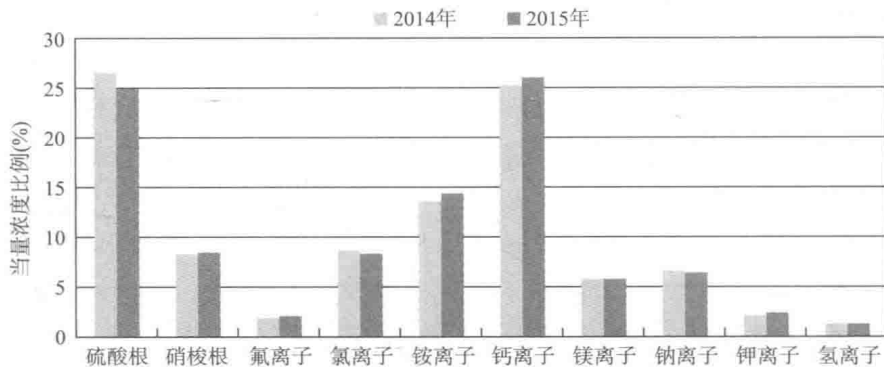


图 1.3 2015 年降水中主要离子当量浓度比年际比较



图 1.4 2015 年全国降水 pH 年均值等值线分布

达标天数比例分析表明,338个城市达标天数比例在19.2%~100%之间,平均为76.7%;其中轻度污染天数比例为15.9%,中度污染为4.2%,重度污染为2.5%,严重污染为0.7%。马尔康、丽江、香格里拉、塔城、阿里和林芝6个城市达标天数比例为100%,150个城市达标天数比例在80%~100%之间,152个城市达标天数比例在50%~80%之间,30个城市达标天数比例不足50%。

各指标分析表明,PM_{2.5}年均浓度为50 μg/m³(超过国家二级标准0.43倍);PM₁₀年均浓度为87 μg/m³(超过国家二级标准0.24倍),同比下降7.4%;SO₂年均浓度比2014年下降16.1%;二氧化氮(NO₂)年均浓度同比下降6.3%。

1.2 大气环境模拟方法

大气环境模拟是研究大气污染形成机理的重要手段,包括物理模拟、生物模拟、化学模拟、数学模拟等多种方法,如风洞试验、大棚试验、烟雾箱试验、数值试验等。各种大气环境模拟方法中以数学模拟应用最为广泛,该方法通过综合气象、大气物理、大气化学、数学、计算机等学科的最新进展,力求细致描述大气中各种动力、物理、化学和生物等非线性过程,再现不同过程在大气污染形成中的作用,综合考虑不同物种之间的相互影响与转化,从不同尺度进行酸沉降、光化学烟雾、细颗粒物等大气复合污染过程的模拟。

大气环境模式的建立和发展经过了三个不同阶段(迟妍妍和张惠远,2007;黄顺祥等,2015;朱好等,2015)。第一代模式是20世纪初建立的、以高斯模式和K模式为代表的大气污染扩散解析模型。解析模式假设平坦均一地形和理想大气边界层,对于复杂地形,尤其风场随时空变化显著的情况并不适用。随着计算机的诞生,在70年代出现了基于准静力假设的大气扩散数值模式,可以模拟非平坦均一复杂地形上的实际大气扩散和输送问题,同时包含化学转

化和干湿沉降过程,称之为第二代模式。第三代模式秉承“一个大气(One Atmosphere)”的理念,将对流层大气作为一个整体,使用一套各个模块相容的大气控制方程,包含对环境大气中的物理、化学过程以及不同物种的相关作用过程,同时可以考虑气象和化学的相互作用,适用于光化学烟雾、区域酸沉降、大气颗粒物污染等多尺度多物种的复杂大气环境模拟。

大气环境模式分为拉格朗日模式和欧拉模式两类。拉格朗日方法是由跟随流体移动的粒子或烟团来描述污染物的浓度及其变化,包括LS(Lagrangian Stochastic Model,拉格朗日随机模式)、MC(Monte-Carlo,蒙特卡罗)模式、LPM(Lagrangian Particle Modelling,拉格朗日粒子模拟)等。欧拉模式重点应用于城市和区域空气质量模拟,包括EITDM(Eulerian Inert Tracer Dispersion Model,欧拉惰性气体扩散模式)、ADPIC(Atmospheric Diffusion Particle in Cell,粒子网格扩散模式)、REMSAD(Regional Modeling System for Aerosols and Deposition,区域气溶胶沉降模拟系统)等。按模式的应用效能,可分为大气输送扩散、酸沉降、光化学烟雾、细颗粒物、重金属模式等主要类型。

过去三十多年来,我国科学家一直致力于发展适用于中国地区的大气环境模式,在引进、改进和自主研发的基础上,建立了全球-区域-城市-街道等多尺度的大气环境模拟系统,实现了对各种不同尺度污染物输送转化和时空变化的模拟。此外,所发展的大气环境模式在区域和城市空气质量预报、大气污染来源解析、大气环境影响评价、突发性大气污染事件应急响应、大气环境容量测算和空气质量达标规划研究等方面得到很好的应用。

1.3 大气环境模式进展

1.3.1 大气输送扩散模式

大气输送扩散模式是模拟大气污染物的迁移过程,预测在不同污染源、气象及下垫面条件下污染物浓度时空分布的数学模型,是低层大气中污染物迁移和扩散规律的数学描述。根据不同的建模理论体系、污染物迁移、扩散过程以及不同的描述对象,模式的形式也各不相同。一般使用最广泛、适用于小尺度、定常流场中连续高架点源污染物浓度估算的为高斯烟流模式,还有普遍使用的、适用于非定常流场和微风条件下的烟团轨迹模式,适用于非定常流场的粒子随机游动模式,用于区域或某些特殊地形条件下的箱模式等等。这些模式一般只考虑影响大气污染的输送和扩散过程,不考虑复杂的化学转化和干湿沉降过程,采用解析方法求解,区别于把输送扩散微分方程变换成差分形式求解的数值模式,也区别于不依赖于输送扩散过程的统计模式。

大气输送扩散模式起源于20世纪20年代和60年代美国和欧洲原子能工程和军事工程,此期间主要应用Tayler的静电统计扩散模式,Sutton的高斯扩散模式。1976年Pasquill出版《大气扩散》,1968年Slade在原子能会议报告中发表《气象学和原子能》,这些对大气输送扩散模式的发展起着积极的推动作用。1973年,美国国家环境保护局(USEPA)会同美国国家技术信息中心(NTIS)公布了第一版“大气污染应用模拟用户网”(UNAMAP),其中包括AP-RAC,CDM等六个大气质量模拟模式,后经几次修订和增补,模式计算工作从简单过渡到复杂,从计算地面最大浓度过渡到计算地面浓度分布、了解高浓度出现的地区和范围、发生频率、持续时间,在模式计算时从单点源过渡到多点源、面源以及点面复合源,从简单的物理传输过渡到可以模拟上百种复杂的化学反应,采用的模式也从单箱模式过渡到多箱模式、复合源高斯

烟流模式、烟团模式以及数值模式。

过去几十年来,国内学者针对污染扩散的特殊性对大气输送扩散模式进行发展和应用。在 20 世纪 70 年代,烟气抬升的研究取得了巨大进展,其中以中性时 Briggs 公式得到最广泛的使用。该公式假定烟流遵循 2/3 次抬升,当其内部的湍流能耗散率等于环境的湍流耗散率时,烟流结构发生溃散,抬升终止。陈家宜(1981)研究了中性层结中湍流对烟云抬升的作用,取外部湍流卷挟率正比于湍流特征速度并叠加于自身卷挟率,分析表明,即使在抬升的早期,环境湍流对弯曲烟云的路径有不可忽视的影响,并使烟云路径加速变平。李宗恺和朱玄玄(1987)发现虽然在抬升初期环境湍流的作用并不重要,但随着烟气上升速度的减小其影响越来越大,而且其累积作用不容忽视,最终使烟气实际路径与 2/3 次律有明显偏离。上述模式从抬升开始即考虑了烟气自身湍流和环境湍流的共同作用,故称之为联合作用模式。王体健等(1998)通过比较指出中国法规性大气扩散模式(GB/T 3840—91)中采用的中性条件下 Briggs 烟气抬升公式没有考虑环境湍流对烟羽的累积作用,对实际抬升有过高估计。

徐大海等(1997)基于大气扩散 K 理论,用作为风速脉动均方差和拉氏时间尺度函数的湍流交换系数,得到了直接利用脉动风速的概率密度函数而不用扩散参数计算浓度分布的大气扩散 PDF 模式,在许多大气扩散问题中有着可替代高斯模式的广泛应用前景。俎铁林等(1999)发展了一个无需做常涡扩散系数或“面源”假设的海岸线熏烟扩散模式,根据二维理论和观测资料对热内边界层高度进行简化,计算发现应尽可能将高污染源设置在远离海岸线处,避免设置在有效源高与当地热内边界层高度相等的地点附近。于洪彬等(1994)基于二阶矩闭合的边界层模式和随机游走模式建立了一个沿岸熏烟扩散的中尺度模拟系统,模拟发现该模型与现行高斯熏烟模式相比更加合理,可以更好地预测热内边界层结构和沿海地区持续发生的熏烟扩散过程。

早期的拉格朗日随机游走方法对极短时扩散或距源极近处的理论描述不正确,当应用于实际大气的非均匀湍流场时会出现所谓伪积聚现象。直到 20 世纪 80 年代后期拉格朗日方法取得了重要理论进展(Thomson, 1987),在实际应用中克服上述理论困难,逐渐发展成为拉格朗日随机模式,并应用于国内沿海扩散(张振州等, 2014)、重粒子扩散(Cai et al., 2006)等过程的研究。但粒子随机游走方法计算量大,在烟云边缘粒子分布稀疏故而浓度会有较大的涨落。蔡旭辉等(2003)发展了大气扩散的随机游走粒子-烟团模式(Random-walk Particle-Puff Model),对随机游走的粒子引入核函数的概念,这种模式对核扩散等实际大气扩散问题具有更好的应用效果。

南京大学自 20 世纪 80 年代开始局地 and 区域尺度大气输送扩散模式的开发和应用研究。Li 等(1988)提出了概率分布函数 PDF 模式,可用于对流大气边界层小尺度污染扩散模拟;李宗恺(1993)发展了粒子随机扩散模式,用于对流大气边界层高架源的垂直扩散模拟;杜曙明(1995)对流边界层地面源的铅直扩散进行了模拟,验证了粒子随机扩散模式的有效性。朱忠湛(1995)发展了双高斯扩散模式,可用于对流大气边界层小尺度污染扩散模拟;孙振海等(1997)在高斯扩散模式的基础上考虑了生物气溶胶的衰变和沉积过程,实现了对生物气溶胶的模拟;王勤耕(1996)基于线性规划方法建立了大气环境容量模式,用于区域大气环境容量的计算。黄晋(1994)基于烟团概念发展了烟团轨迹模式,用于区域大气污染扩散模拟;王体健(1997)基于烟柱概念发展了拉格朗日 K 模式,用于区域大气污染扩散模拟;Li 等(1997)和 Wang 等(1998)发展了区域空气质量模拟系统 RegAQMS(Regional Air Quality Modelling

System),其特点是将平原局地模式 HPDM、山地局地模式 CTDMPPLUS 与区域欧拉 K 模式嵌套在一起,用于区域规划大气环境影响评价;刘丽等(2012)进一步将沿海局地模式 OCM 嵌套到 RegAQMS 中,实现了沿海地区复杂地形大气污染扩散的高分辨模拟,并增加了生物气溶胶模块,可以对花粉、病毒等生物气溶胶的污染扩散进行模拟。

1.3.2 大气酸沉降模式

大气酸沉降包含“湿沉降”与“干沉降”两大类,前者指的是气态污染物或粒状污染物,随着雨、雪、雾或雹等被不同形态降水清除而落到地面上,后者则是指在没有降水的情况下,气态污染物或粒状污染物在湍流运动、分子运动和表面吸附的作用下由大气向地表迁移,最终从大气中被清除。有关描述酸沉降形成的污染物远距离输送/转化/沉降的数学模式很多,主要有拉格朗日型和欧拉型两类。北美和欧洲的模式研究起步较早,所发展的酸沉降模型也相对比较成熟。代表性的拉格朗日型模式,如 Shannon(1981),Eliassen(1982),Endkich(1984)等的工作;欧拉型模式中比较著名的是 RADM(Chang,1987),ADOM(Venkatram et al.,1988),STEM(Carmichael and Peters,1986)。

我国关于大气酸沉降的模型研究起于 20 世纪 80 年代后期。雷孝恩等(1985)、盛裴轩和毛节泰(1987)、Jiang(1991)、殷达中等(1993)发展了拉格朗日模式,毛节泰(1992)、秦瑜和修艾军(1992)、贾新媛(1993)、Huang 等(1995)、郝吉明等(1996)、Wang 等(1996)、王体健(1996a,b)、高会旺(1997)等开发了欧拉模式,分别应用于西南、华南、华东、东亚等地区酸雨的来源和成因研究、跨界输送研究、评价和预测研究、控制对策研究等等,不同模式各有自身的特色。此外,亚洲区域大气污染信息系统 RAINS-ASIA(1994)在国内大气酸沉降和污染控制对策研究中得到较好的应用。

南京大学在 20 世纪 90 年代开始进行大气酸沉降的模型研究。殷达中和李宗恺(1993)发展了拉格朗日远距离输送-化学转化模式,并在华南酸雨研究中得以应用;南方(1993)发展了酸雨液相化学模式,用于云水和雨水酸化的物理化学过程模拟;王体健(1996a,b)发展了区域酸沉降模式 NJURADM,包含复杂的气相和液相化学模式,用于酸雨形成的个例模拟;Wang 等(2000)发展了区域酸沉降模拟系统 RegADMS(Regional Acid Deposition Modelling System),将复杂的酸沉降模型工程化,用于长时间尺度全国大气硫氮沉降模拟;王体健等(2000)和 Wang 等(2003)发展了区域大气环境模拟系统 RegAEMS(Regional Atmospheric Environment Modelling System),增加了无机气溶胶和二次有机气溶胶模块;王婷婷等(2010)、朱佳雷等(2014)在 RegAEMS 中增加了大气汞的化学转化和干沉降过程,开展了全国大气汞浓度和沉降分布的模拟(王体健等,2014)。

1.3.3 光化学烟雾模式

光化学烟雾是汽车、工业等污染源排入大气的碳氢化合物(HC)和氮氧化物(NO_x)等一次污染物在紫外光作用下发生光化学反应生成二次污染物,参与光化学反应过程的一次污染物和二次污染物的混合物(包括气体污染物和气溶胶)所形成的烟雾污染现象,是碳氢化合物在紫外线作用下生成的有害浅蓝色烟雾。光化学烟雾多发生在阳光强烈的夏秋季节,随着光化学反应的不断进行,反应生成物不断蓄积,光化学烟雾的浓度不断升高。

全球最早认识光化学污染是 20 世纪 40 年代美国洛杉矶“光化学烟雾事件”,此后在北美、

日本、澳大利亚和欧洲部分地区也先后出现严重的光化学污染。国外光化学空气质量模式的发展经历了几个阶段(Russell and Dennis, 2000; Seinfeld, 1988; 鲍蕾, 2016; 薛文博等, 2013)。国外光化学模式的发展可以追溯到 1969 年, 当时四家机构(System Development Corp., General Research Corp., Systems, Science and Software 和 California Institute of Technology/Systems Applications, Inc.) 几乎同时开始了臭氧模式的开发。两年后, 劳伦斯利福摩尔国家实验室(Lawrence Livermore National Laboratory) 也开始了臭氧模式的开发。20 世纪 70 年代中期, 美国 EPA 建议采用 Empirical Kinetic Modeling Approach(EKMA) 方法估算有机物和氮氧化物排放的变化对臭氧峰值的影响。但当时除了 EKMA 外, 其他光化学模式在管理机构的应用仍然受到限制。到了 20 世纪 80 年代, 随着大气化学、边界层物理等基础理论研究工作的进展, 逐渐形成了以欧拉网格模型为主的第二代空气质量模式, 如针对光化学污染的 UAM(Urban Airshed Model)、CIT(California Institute of Technology) 等。包括 EKMA 在内的光化学空气质量模型得到普遍接受, 并将其广泛应用于臭氧污染控制策略的制定和评估, 但这类模式无法满足复合型大气污染的特点。90 年代以后, 出现了第三代空气质量模型是以 CAMx(Comprehensive Air Quality Model with Extensions)、CMAQ(Community Multi-scale Air Quality) 和 WRF-Chem(Weather Research and Forecasting-Chemistry) 等为代表的综合空气质量模型, 即“一个大气”模拟系统, 可用于从局地、区域到国家、全球的多尺度模拟。

我国关于光化学烟雾的研究始于 20 世纪 70 年代, 自主发展的光化学模式很少, 主要是应用国外先进的模式进行形成机理和控制对策研究。王喜红和李兴生(1998) 利用三维中尺度非静力模式 MM5 和化学模式, 模拟中国大陆对流层臭氧及其前体物的分布, 发现对流层臭氧浓度的分布与气流的辐合辐散存在较好的对应关系。王雪梅等(2003) 结合模拟和观测分析了广州市地面 O_3 浓度随时间的变化, 发现对流层低层 O_3 浓度日变化较大, 而自由大气层内 O_3 浓度日变化较小。张恺等(2005) 在城市空气污染数值预报系统 CAPPS 中加入光化学模式从而完善模式对 O_3 的模拟, 与监测资料对比表明, 嵌套后的模式对 O_3 浓度变化具备一定的预报能力。张美根(2005) 利用多尺度空气质量模式 CMAQ 研究了东亚地区春季 O_3 及其前体物的输送与演变过程, 模拟系统合理地描述了 O_3 浓度的时空分布, 反映了平流层臭氧输送和对流层光化学过程对对流层臭氧浓度的贡献。余琦等(2004) 通过 CB-IV 机理模拟了前体物 VOC 和 NO_x 的初始浓度比及排放比的变化对 O_3 浓度的影响, 发现 VOC 的增加会使上午时段 O_3 浓度的增长速率提高, 峰值出现时间提前, 而罗蕊等(2006) 利用 OZIPR 模式模拟了前体物 VOC 和 NO_x 对 O_3 生成的影响, 也发现了相似的结论。石玉珍等(2008) 利用 EKMA 经验动力学模拟方法及其内置的 CB-IV 化学反应机理研究了影响北京地区光化学烟雾产生的主要前体物, 得到了前体物 VOC, NO_x 与 O_3 之间的非线性关系。严茹莎等(2016) 基于 WRF-CMAQ 模式和情景模拟分析了上海市夏季臭氧生成与前体物排放之间的关系, 发现上海城区臭氧生成受 VOCs 控制。叶绿萌等(2016) 应用在线大气化学耦合模式 WRF-Chem 对珠三角地区秋季重污染进行模拟并划分臭氧敏感性区域, 研究发现 VOCs 敏感区主要分布在珠三角中心城市及其下风向地区, 而 VOC 敏感区分布在珠三角上风向郊区。王雪松和李金龙(2002) 利用综合空气质量模式 CAMx 模拟了北京市城近郊区不同人为源排放 VOC 对该地区臭氧的贡献, 研究发现, 流动源排放 VOC 的贡献最大。陈皓等(2015) 利用 CAMx 模拟珠三角秋季臭氧演变过程和来源, 发现流动源和溶剂使用是珠三角臭氧生成的主要前体物排放源。王自发等(2008) 利用嵌套网格空气质量预报模式系统(NAQPMS) 模拟奥运期间北京及周边