

区域酸性沉降的数值研究

II. 个例模拟和试验

王体健

李宗恺

南 方

(南京大学大气科学系, 南京 210093)

(国家环保局南京环境科学研究所, 南京 210042)

摘 要 利用建立的区域酸性污染物沉降模式, 配合中尺度模式 MM4 预报的气象场, 以 1991 年 6 月 12~14 日淮河流域的一次降雨过程作为实例, 对我国东半部及其相邻地区的酸沉降进行了数值模拟和试验研究。结果表明, 模式基本上能够模拟出区域酸性沉降的特征, 具有良好的综合模拟性能和广阔的应用前景。

关键词 数值模拟 中尺度 酸性沉降

1 个例模拟

为了检验模式的综合模拟性能, 以 1991 年 6 月 12~14 日淮河流域的一次降雨过程作为实例, 对我国东半部及其相邻地区($2400 \times 2340 \text{ km}^2$, 中心纬度 36°N , 经度 117°E) 的酸沉降状况进行了数值模拟。气象场由中尺度模式 MM4 预报得到, 与实况资料比较一致^[1,2]。这次降雨过程由中尺度对流云团引起, 雨区呈东西向带状分布, 24 h 累积降水最大达 197 mm(图 1)。在长江以南地区, 整个对流层中下层为一致的偏西南气流, 850 hPa 和 700 hPa 等压面上分别有风速大于 12 m/s 和 16 m/s 的西南低空急流(图 2), 地面气压图上, 我国南方呈现东高西低的形势^[1]。

计算时水平格距取为 60 km, 格点数 41×40 , 铅直方向分 10 层, 对应的 σ 值是 1.0, 0.99, 0.97, 0.93, 0.85, 0.75, 0.60, 0.45, 0.3, 0.15, 0.0, 顶层气压 100 hPa。利用算子分裂法求解输送物种的浓度变化方程, 平流项采用 Smolarkiewicz 修正的上游差分方案^[3], 铅直扩散项采用显式的 Crank-Nicolson 方案, 采用 Hybrid 方案及误差分配质量守恒技术求解非线性气相化学动力学方程组, 液相化学动力学方程组采用 QSSA 方法求解^[4]。积分时源排放、平流、扩散和干沉积的时步取为 10 min, 气相化学过程的时步为 60 s, 与云雨有关的过程每小时强迫一次, 等过程时步取 30 s。模拟结果如下。

1.1 SO_2 和 SO_4^{2-} 的浓度

模拟的 SO_2 日均地面浓度分布特征表现为浓度呈现明显的不均匀性, 在江苏及山东半岛、华北平原及辽东半岛和四川盆地三个地区存在高值中心, 对应着这些地区有较强的工业污染源, 这说明我国 SO_2 污染严重地区主要是局地源形成的, 排放源对地面浓度分布起了决定性的作用。四川的总排放量虽然大于江苏, 但就排放强度而言, 江苏要大于四川, 然而在江苏地区并未形成特别大的高值浓度, 原因在于该地区多为平原,

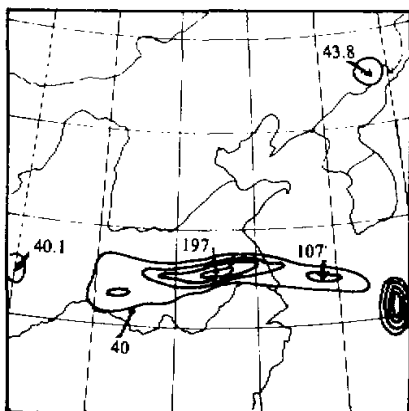


图1 6月12~13日24 h 累积降水(mm)分布

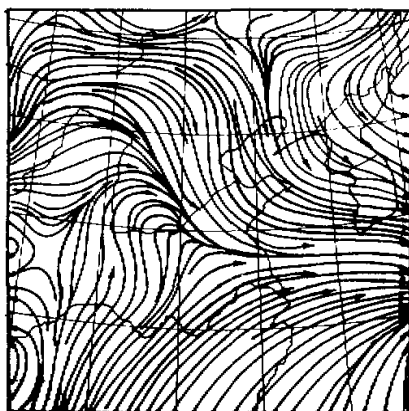


图2 6月12日14:00 2 km 高度流场分布

东部邻海, 大气的稀释能力比较强, 污染物易于向外输送和扩散。另外, 城市所在地区的网格平均浓度在 $10 \sim 40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 范围, 最大值 $83 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 出现在重庆及其周围地区; 远离城市的地方浓度较小, 一般低于 $5 \mu\text{g}/\text{m}^3$; 淮河流域、华中和东北地区浓度都较小, 这是降水清除带来的直接效果。

SO_2 浓度的高空分布表现为高层有与源排放和地面浓度相对应的大值区, 且浓度随高度递减, 在边界层顶以上的高度, 浓度已经很小, 水平方向的分布也比较均匀, 污染物受高空西风气流引导输送的轨迹非常明显。

SO_4^{2-} 的日均地面浓度分布基本和 SO_2 相似, 也存在三个浓度的相对大值区, 但其峰值要比 SO_2 低 1~2 个量级, 最大值出现在西南, 约 $3 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 。总的来说, SO_4^{2-} 的分布比 SO_2 均匀, 且输送扩散的距离比 SO_2 更远, 这是因为模式考虑的 SO_4^{2-} 全部由气相 SO_2 转化而来, 而这种转化需要一个时间过程。

1.2 SO_2 和 SO_4^{2-} 的干沉积

图 3、图 4 分别是 SO_2 和 SO_4^{2-} 的日干沉积量分布, 与地面浓度分布状况相类似, 存在三个高值区, 这意味着大气污染物在邻近源区有主要的沉降。在城市区, SO_2 的干沉积量多在 $4 \sim 10 \text{ mg}/\text{m}^2$, 最大可达 $44 \text{ mg}/\text{m}^2$, 在广大非城市区, 其值只有 $1 \text{ mg}/\text{m}^2$ 。 SO_4^{2-} 的干沉积量在数值上远远小于 SO_2 , 这是由于雨天 SO_2 的气相转化率较小, SO_4^{2-} 浓度较低, 且 SO_4^{2-} 的干沉积速度比 SO_2 小几倍。

1.3 云水和地面雨水中 SO_2 和 SO_4^{2-} 的浓度

地面雨水中 SO_2 的浓度极低, 而 SO_4^{2-} 的浓度较高, 在 $10 \sim 400 \mu\text{mol}/\text{L}$ 范围, 说明 SO_2 的氧化是 SO_4^{2-} 形成的主要途径。 SO_4^{2-} 在云水中的浓度通常要小于在雨水中的浓度, 前者为后者的 30%~80%, 表明在酸雨的形成过程中, 云中清除和氧化占据主要地位, 云下过程也起到一定的酸化作用。 SO_4^{2-} 浓度的高值区并不完全和降水中心相对应, 而是偏于雨区边缘, 因为在强降水的地方, 虽然 SO_2 的清除量大, 但由于降水

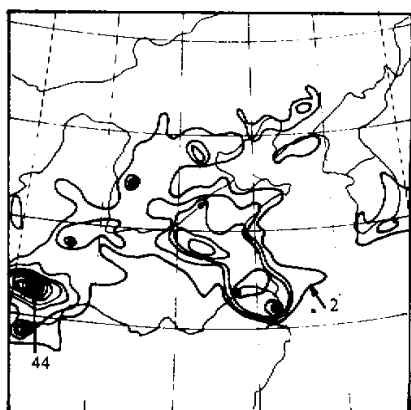


图3 SO_2 的日干沉积量
单位: mg/m^2 , 等值线间距为 2

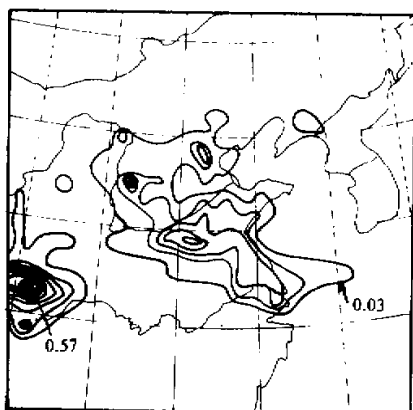


图4 SO_4^{2-} 的日干沉积量
单位: mg/m^2 , 等值线间距为 0.03

量多, 使得浓度变稀。

1.4 云雨水的 pH 值

从雨水的 pH 值分布图上可以看出, 降水强度大的地方往往雨水的 pH 值高, 而雨区边缘 pH 值较低, 可能是那里降雨量少, H^+ 浓度大, 且有足够 SO_2 和氧化剂充足的缘故。云水的 pH 值分布与雨水比较类似, 且云水 pH 值略高于雨水 pH 值, 说明导致酸雨形成的过程主要在云内, 云下过程对雨水只有弱的酸化作用。此外, 比较 pH 值和 SO_4^{2-} 的浓度可以发现, 两者有着较好的负相关关系。由于缺少基础资料, 模式没有考虑云水和雨水对其他碱性气溶胶粒子的清除作用, 所以模拟得到的云雨水 pH 值总体上偏低。

1.5 SO_2 和 SO_4^{2-} 的湿沉积

图 5、图 6 给出了 SO_2 和 SO_4^{2-} 的湿沉积量分布, 可以发现, SO_4^{2-} 湿沉积量与地面降水分布形式是一致的, 沉降量的极大值出现在降水中心附近, 因为在强降水中心, H_2O_2 、 O_3 等氧化剂和 SO_4^{2-} 气溶胶粒子被有效清除而进入雨水中, 非常有利于 SO_2 的转化, 造成较大的湿沉降量, 数值一般在 $100 \text{ mg}/\text{m}^2$ 左右。 SO_2 的湿沉降量要比 SO_4^{2-} 小得多, 几乎可以忽略, 表明由于清除而溶解于水中的 SO_2 绝大部分被氧化掉了。

1.6 地区侧边通量

侧边通量指的是通过给定地区侧边界的污染物量, 以浓度与风速分量的乘积来表示, 规定输出为正, 输入为负, 它可以反映一个区域与其周围污染物输送和交换的特征。我们选择了江苏和山东这两个 SO_2 排放 ($4085 \text{ t}/\text{d}$ 、 $5586 \text{ t}/\text{d}$) 较大的沿海省份, 计算了两省的侧边通量。从计算结果来看, 在贴地层, 两省在边界交换的数量并不大, 一般不超过区域排放量的 10%, 2000 m 以上交换量已经很小, 把四个边界的收支相抵消后, 净通量更小。就本个例的天气条件下, 在东部边界, 江苏为整层输出, 山东是低

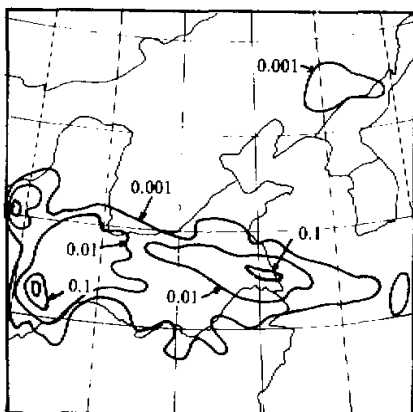


图 5 SO_2 的日湿沉积量
单位: mg/m^2

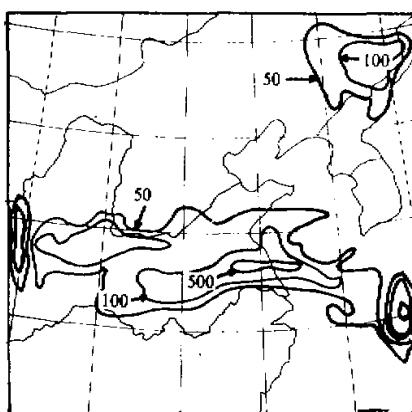


图 6 SO_4^{2-} 的日湿沉积量
单位: mg/m^2

层输入、高层输出。

上述个例模拟所得到的定量结果和定性结论与同类工作^[5~8]相呼应,这说明本文建立的简化模式具有良好的模拟性能。

2 数值试验

在个例模拟的天气状况下,做了三项数值试验。按照试验所提供的方法,在完成大量业务计算后,可以为搞清我国各地区以及周边国家酸沉降的来源和相互影响,并进一步制定控制对策提供理论依据。

2.1 本地源和外地源对华东地区贡献的研究

我国的酸雨集中在西南、华南和东部沿海一带,“六五”和“七五”对西南酸雨和华南酸雨作了比较全面深入的研究,这里重点探讨华东地区酸沉降的特征和规律。我们尤其关心的是对华东地区酸沉降产生影响的污染源中本地源和外地源的贡献比,为此,首先去除其他地区的排放,保留华东的排放,计算得到的 SO_2 和 SO_4^{2-} 的干湿沉降量分布,计算结果表明本地源对华东地区的贡献是主要的,一般在 90% 左右。再去除华东的排放,保留其他地区的排放,结果发现外地源的影响不超过 10%,但这种影响主要集中在华东地区西部与其他省份相连的地方。可见,在本个例中,华东地区的酸沉降主要来自本地源,外地源的影响较小。

2.2 源排放和酸沉降关系的研究

酸沉降研究中人们普遍关注的一个问题是源和接受体的关系如何,即源排放和酸沉降之间的关系是线性的还是非线性的。为了研究这个问题,我们改变源排放的大小以考察沉降量对源变化后的响应。影响硫沉积的源包括 SO_2 和 NO_x , 前者的影响是直接的,后者的影响则是间接的。

先将 SO_2 的排放量减少 50%, 计算硫的干湿沉积量, 发现硫的干沉积几乎线性地减少了 50%, 而硫的湿沉积并不因为 SO_2 排放的减半而减半, 呈现强烈的非线性。硫的干沉积(F_d)、湿沉积(F_w)分别用以下两式来计算:

$$F_d(S) = 0.5F_d(\text{SO}_2) + 0.33F_d(\text{SO}_4^{2-}), \quad (1)$$

$$F_w(S) = 0.5F_w(\text{SO}_2) + 0.33F_w(\text{SO}_4^{2-}). \quad (2)$$

NO_x 削减一半以后硫的干湿沉降量变化不大, 因为导致 SO_2 气相氧化的 OH 、 HO_2 自由基来自与 NO_x 有关的反应, 在本个例雨天的条件下, 这些化学反应受到抑制, 所以 NO_x 的源变化对硫的沉降量影响不大, 但可以预期, 如果是晴天, 将会产生一定的影响。这一结果对酸沉降的控制有着重要的意义, 即削减 SO_2 的排放可以减少硫的干沉积, 但未必能减少硫的湿沉积, 而改变 NO_x 的排放量可以间接地影响硫的干湿沉积。

2.3 气象条件和酸沉降关系的研究

除了源排放外, 与酸沉降关系比较密切的因子就是气象条件, 其中风直接影响污染物的输送、扩散和沉降, 降水导致湿沉降的产生。为了研究这两个气象因子对酸沉降的影响, 做了两项工作。

首先计算了风向不变, 风速增大一倍时硫的干湿沉降。可以看出, 由于风速的增强, 污染物散布范围变大, 原先几个高值区的浓度值明显下降, 表明大气扩散能力的增强对干沉降起到抑制作用。但湿沉降的分布基本没有什么改变, 说明在 SO_2 的排放量足够大的情况下, 风速对湿沉降的影响极小。

其次, 计算了降水量增大一倍时硫的干湿沉降, 发现雨强的增加对干沉降几乎没有影响, 却使湿沉降量有一定程度的减少, 说明液相化学过程使酸沉降的增加也是非线性的, 在已有一定降水的情况下, 雨强进一步的增加, 湿沉降却有可能减少, 原因是雨强大时, 尽管更多的 SO_2 、 H_2O_2 氧化剂和 SO_4^{2-} 气溶胶被清除, 但由各种途径产生的雨水中的 SO_4^{2-} 离子的浓度却不高, 从而导致湿沉降的减少。

3 结论

本文利用建立的区域酸性污染物沉降模式和中尺度气象模式 MM4 的预报场, 以 1991 年 6 月 12~14 日淮河流域的一次降雨过程作为实例, 对我国东半部及其相邻地区的酸沉降进行了数值模拟和试验研究。结果表明: 我国 SO_2 、 SO_4^{2-} 地面浓度的高值中心出现在江苏及山东半岛、华北平原及辽东半岛和四川盆地, 与排放源的三个大值中心有较好的响应; 硫的干沉积以 SO_2 为主, SO_2 、 SO_4^{2-} 的干沉积量分布与其地面浓度分布类似; 硫的湿沉积以 SO_4^{2-} 为主, 其高值区和降水中心一致; 云水和雨水中 SO_2 的氧化是产生 SO_4^{2-} 的主要途径, 酸雨的形成一般以云内过程为主; 雨水 pH 值与雨水中 SO_4^{2-} 的浓度呈负相关, 和降水率呈正相关; 侧边通量数值上只有源排放量的 10% 左右, 江苏为整层输出, 山东为低层输入、高层输出。

个例数值试验的结果表明: 本地源对华东地区酸沉降的贡献是主要的, 外地源的影

响一般不超过 10%； SO_2 的排放与硫的下沉积有较好的线性关系，和湿沉积的关系是非线性的， NO_x 的排放可以间接地影响硫的沉降；气象条件中风速和降水是酸沉降的敏感因子，风速对于沉降起阻碍作用，在一定的条件下，降水的增强可能导致湿沉降的减少。

从个例模拟和数值试验的结果来看，本文建立的模式基本上能够模拟出区域酸性沉降的特征，具有良好的综合模拟性能。由于输出信息量大，且在 486 微机上即能实现，计算费用也不大，因而具有较强的实际应用性。限于目前的资料条件，模式在处理气溶胶的云雨清除方面尚不够充分，这是模式今后需要进一步完善和发展的地方。

致谢：中国科学院大气物理研究所黄美元研究员为本文提供了基础源资料，在此表示衷心的感谢。

参 考 文 献

- 1 潘益农等, 1993, 一次暴雨过程的分析研究和数值模拟, 南京大学学报, 29, 118~122.
- 2 郑维忠等, 1992, 中尺度数值模式 MM4 模拟系统介绍, 南京大学出版社, 2~16.
- 3 Smolarkiewicz, Piotr K., 1983, A simple positive definite advection scheme with small implicit diffusion, *Mon. Wea. Rev.*, 111, 479~486.
- 4 Odman, Mehmet T., 1992, A comparison of fast chemical kinetic solvers for air quality modeling, *Atmos Environ.*, 26A(9), 1783~1789.
- 5 贾新媛, 1993, 区域酸沉降模式, 大气科学, 17, 732~740.
- 6 殷达中等, 1993, 一个远距离输送-化学转化模式及其在酸雨研究中的应用, 环境科学学报, 13(1), 11~21.
- 7 毛节泰, 1992, 广东、广西地区酸沉降统计模式的研究, 环境科学学报, 12(1), 28~36.
- 8 秦瑜等, 1992, 一个欧拉型污染物沉降的中尺度模式, 北京大学学报, 28(5), 603~612.

Numerical Modeling of Regional Acid Deposition Part II. Case Study and Numerical Experiment

Wang Tijian and Li Zongkai

(Department of Atmospheric Sciences, Nanjing University, Nanjing 210093)

Nan Fang

(Institute of Environmental Sciences, EPA, Nanjing 210042)

Abstract Using the regional acid pollutant deposition model constructed and the meteorological data predicted by MM4, we studied a process of precipitation in Huaihe River basin from June 12 to 14 in 1991 and made some numerical experiments on the acid deposition in the east part of China and its contiguous area. The results show that the basic characteristics of regional acid deposition were simulated by the model and it can be applied extensively in the future.

Key words numerical modeling mesoscale acid deposition