夏雨晨, 银燕, 陈倩, 等. 2019. 深对流系统对污染气体CO垂直动力输送作用的数值模拟研究 [J]. 大气科学, 43(6): 1280−1294. XIA Yuchen, YIN Yan, CHEN Qian, et al. 2019. Numerical Simulation of Vertical Transport of Pollutant Gasesin Deep Convective System [J]. Chinese Journal of Atmospheric Sciences (in Chinese), 43(6): 1280−1294. doi:10.3878/j.issn.1006-9895.1901.18186

深对流系统对污染气体CO垂直动力输送作用的数值模拟研究

夏雨晨　银燕　陈倩　胡汉峰

南京信息工程大学气象灾害预报预警与评估协同创新中心/中国气象局气溶胶与云降水重点开放实验室，南京210044

摘　要　本文采用高分辨率WRF-Chem模式模拟了2014年7月27日和8月24日发生于长三角地区的两次强度不同的深对流系统对污染气体CO的再分布作用，对比分析了模拟的两次深对流系统在CO垂直输送过程中的差异。通过与实际雷达回波的比较发现，两次模拟的深对流发生时间、回波强度等都与实际观测接近。8月24日深对流过程发生前的对流有效位能和0～6 km垂直风切变强度均高于7月27日个例，因此8月24日深对流系统更不稳定，发展高度更高。从CO浓度垂直剖面、质量通量随高度的变化特征发现，7月27日的深对流系统最高可以将CO输送到14 km高度处，8月24日的深对流系统最高可以将CO输送到16 km高度处。对CO浓度的垂直通量散度平均垂直廓线分析看出，7月27的深对流系统主要将CO输送到12 km附近，导致7月27日个例对流层中层的CO浓度更高，8月24日的深对流系统主要将CO输送到15 km附近，导致8月24日个例对流层上层的CO浓度更高。对垂直通量求和的分析表明，8月24日的深对流系统每小时垂直输送的CO浓度是7月27的1.3倍，而考虑到8月24日的深对流系统持续时间更长，8月24日的深对流系统对CO的垂直输送作用远远大于7月24日的深对流系统的垂直输送作用。

关键词　深对流　垂直输送　WRF-Chem模式

文章编号　1006-9895(2019)06-1280-15　　**中图分类号**　P401　　**文献标识码**　A

doi:10.3878/j.issn.1006-9895.1901.18186

Numerical Simulation of Vertical Transport of Pollutant Gasesin Deep Convective System

XIA Yuchen, YIN Yan, CHEN Qian, and HU Hanfeng

Collaborative Innovation Center on Forecast and Evaluation of Meteorological Disasters/Key Laboratory for Aerosol-Cloud-Precipitation of China Meteorological Administration, *Nanjing University of Information Science & Technology*, *Nanjing* 210044

Abstract　The Weather Research and Forecasting model coupled with chemistry (WRF-Chem) has been used to investigate the redistribution of pollutant gas CO in two deep convective systems occurred over the Yangtze River Delta on July 27 and August 24 2014, respectively. Compared with observed radar echo properties of the convection, the onset of the convection and echo intensity simulated by WRF-Chem are consistent with observations. Both the convective available potential energy and vertical wind shear between altitudes of 0 and 6 km were larger in the case of July 27 than

收稿日期　2018-07-02；**网络预出版日期**　2019-05-16

作者简介　夏雨晨，男，1994年出生，硕士研究生，主要从事深对流研究。E-mail: 911047702@qq.com

通讯作者　银燕，E-mail: yinyan@nuist.edu.cn

资助项目　国家自然科学基金项目91644224、41775136，江苏高校优势学科建设工程资助项目(PAPD)

Funded by　National Natural Science Foundation of China (Grants 91644224, 41775136), A Project Funded by the Priority Academic Program Development of Jiangsu Higher Education on Institutions National (PAPD)

in the case of August 24, which led to the more unstable convective system that reached higher altitude on August 24. The analysis of vertical cross sections of CO concentration and vertical mass fluxes shows that the deep convection on July 27 could transport CO to the altitude up to 14 km, whereas CO could reach up to 16 km in the case of August 24. The differences between mean profiles of CO concentration and vertical flux divergence suggested that most of the CO was transported to the altitude of about2 km, which resulted in a higher CO concentration at the middle troposphere for the case of July 27; CO was mainly transported to the altitude of 15 km for the case of August 24, which led to higher CO concentration at the upper troposphere. Analysis of vertical flux shows that deep convective transport per hour in the case of August 24 was 1.3 times greater than that in the case of 27 July. As the deep convection lasted longer in 24 August, more CO was transported in this case than in the case of July 27.

Keywords Deep convection, Vertical transport, Weather Research and Forecasting model coupled with chemistry (WRF-Chem)

1 引言

深对流系统对全球大气成分的变化起着重要作用，它可以在较短的时间内将边界层内的污染物快速输送到对流层上层甚至进入平流层（Chatfield and Crutzen, 1984; Holton et al., 1995; Skamarock et al., 2000）。这些被垂直输送到大气上层的痕量气体通常有着比在大气低层更长的生命期和滞留时间，当它们被输送到对流层上层时，会对大气化学成分分布产生重要的影响作用（Mullendore et al., 2005）。其中，非甲烷碳氢化合物（NMHCs）、过氧化物、甲醛（CH_2O）等可以和HO_2、SO_2、NO_2等发生反应并产生臭氧（O_3），对流过程中的闪电也会产生大量O_3的前体物氮氧化物（NO_x）（Pickering et al., 1992; Ridley et al., 1994, 2004)。NMHCs、SO_2和挥发性有机物（VOCs）可以互相反应并生成新的气溶胶粒子（Thornton et al.,1997）。一些卤素可以通过对流过程输送到平流层从而影响平流层的O_3（Dvortsov et al.,1999）。另外，生命期较长的温室气体如O_3和水汽等，还可以影响地球的辐射平衡（de F Forster and Shine,1999）。因此，深对流输送可以改变污染物分布从而影响区域和全球大气气候。

针对深对流系统对大气化学成分的影响作用，国际上已经先后进行了多项观测试验。例如1996年在美国科罗拉多地区进行的平流层—对流层辐射、气溶胶和臭氧研究试验（STERAO/Deep Convection），1998年在欧洲进行的闪电与氮氧化物试验（EULINOX），2003～2005年在巴西实施的欧共体项目TROCCINOX，2005～2006年在澳大利亚达尔文地区进行的ACTIVE（英国）、TWP-ICE（美国NASA/ARM）、SCOUT-O3（欧共体）项目联合观测试验，以及近几年在美国科罗拉多地区进行的深对流云和化学试验（DC3）等。外场观测试验（Scala et al., 1990; Bertram et al., 2007; Barth et al., 2015）和卫星探测（Levizzani and Setvák, 1996; Khaykin et al., 2009; Livesey et al., 2013; Barret et al., 2016）都表明，深对流活动可以影响对流层上层的水汽和化学成分，对大气化学成分的再分布有着重要影响。Dickerson et al.（1987）对一次雷暴过程的观测资料进行分析后指出，雷暴中的上升气流会把NO_x带到高处，造成云内NO_x的体积分数增加。银燕等（2010）利用ACTIVE外场观测数据进行研究，结果表明，深对流云将对流层下层以及对流云周围环境中的CO夹卷并垂直输送到对流云顶部卷云砧中。Barth et al.（2007a）分析了STERAO试验的观测数据，研究发现，保留在冰相粒子中的可溶性气体会对化学成分产生很大的影响。但是，由于观测手段的限制，对流层顶部的深对流活动很难直接进行飞机观测，深对流过程中的微物理和化学过程还有很多问题有待解决。数值模拟可以对无法直接观测的深对流系统有更进一步的认识，从而进一步了解深对流系统对污染气体的再分布作用。

国内外很多学者利用数值模式对深对流云的输送作用进行了研究（Cotton et al.,1995; Skamarock et al., 2000; Lawrence et al., 2003）。李冰等（2001）利用一个三维冰雹云模式对一次单体积云对流的发展过程及其对对流层O_3和NO_x等化学成分再分布

的作用进行模拟，结果表明，云内强烈的垂直输送过程维持30分钟左右，边界层内低浓度的O_3和高浓度的NO_2被快速、有效地输送到对流层的上部，造成化学物种的再分布。Yin et al.（2001, 2002）利用二维分档云模式对深对流系统进行研究，结果表明，气体在液水中的溶解度和液水冻结时的保有率对气体垂直分布有着较大影响，大气环境中气溶胶的特性以及由此造成的云微物理结构的差异对痕量气体的输送也有重要影响。Mari et al.（2000）使用了一维夹卷模式研究了深对流云中的输送和湿沉降过程，模拟结果与赤道—大西洋大气传输与化学试验观测结果进行对比，发现模拟的SO_2清除过程受到过氧化氢（H_2O_2）液相化学反应影响。Barth et al.（2007b）等使用不同的化学传输模式模拟了深对流云输送和湿沉降过程，研究结果表明，CO和O_3输送的模拟结果与观测结果很接近，模式对NO_x的模拟结果差异很大，原因是模式对O_3前体物的模拟不够准确，如硝酸（HNO_3）、过氧化氢和甲醛等。

深对流输送的机制非常复杂，不同的深对流系统对污染气体的输送可能存在较大差异（Bigelbach et al., 2014），深对流系统的宏微观特性的变化都会对污染气体的再分布产生影响，因此，研究不同的深对流系统对污染气体的输送作用很有必要。本文利用数值模式，考虑不同强度的深对流系统对化学气体的垂直分布以及对流输送过程的影响。

2 模式与资料介绍

2.1 模式设置

早期的很多数值模式空间分辨率不高，对化学反应物的类型考虑的也不够全面。近几年来，很多学者使用分辨率较高的WRF-Chem模式来模拟深对流对污染气体的输送作用（Barth et al., 2012; Yang et al., 2015; Barth et al., 2016; Bela et al., 2016; Fried et al., 2016; Phoenix et al., 2017）。WRF-Chem模式是在WRF模式的基础之上，将化学模式与WRF模式在线耦合后完成的（Grell et al., 2005; Fast et al., 2006; Zhang et al., 2010）。该模式不仅拥有完整的WRF模式功能，可以计算各种动力参数和微物理变量（例如，风、温度、边界层、水成物粒子的数浓度和质量浓度等），在其化学部分还包括了完整的传输（平流、对流和扩散）、干湿沉降、气相化学过程、辐射和光化学等过程。可以有效的模拟深对流系统中的微物理和化学过程。

本文采用WRF-Chem（version3.7）中尺度模式，对2014年7月27日和2014年8月24日发生于长三角地区两次强度不同的深对流过程进行模拟，深对流个例模拟时间分别为7月26日18:00（协调世界时，下同）至7月27日18:00和8月23日18:00至8月24日18:00，两次深对流过程的模拟采用相同的嵌套和参数化方案设置。模拟区域如图1所示，中心经纬度为（32°N，118.7°E）。模拟方案采用三层嵌套，网格格点数分别为100×112、133×151和181×211。水平分辨率分别为27 km、9 km、3 km，垂直分层为40层，模式每半小时输出一次模拟结果。第三层时间积分步长6.67秒。本文的结果分析主要来自于第三层嵌套网格的模拟数据。模式的微物理方案使用Morrison双参方案（Morrison et al., 2009），长/短波方案使用RRTMG方案（Iacono et al., 2008），陆面方案使用Noah方案（Koren et al., 1999），边界层方案使用YSU方案（Hong et al., 2006），积云对流参数化方案使用Kain-Fritsch方案（Kain and Fritsch, 1990）。化学方案使用MOZART方案（Emmons et al., 2010），湿沉降方案使用Neu方案（Neu and Prather, 2012）。

2.2 气象初始场与排放源

模式气象场采用欧洲中期天气预报中心（ECMWF）提供的ERA-Interim再分析数据，该数据包括水平风速、垂直风速、温度、水汽混合比、O_3混合比等一系列要素。数据的水平分辨率为0.75°×0.75°，时间分辨率为6小时，一天提供4次分析数据（00:00，06:00，12:00，18:00），垂直方向一共27层，从地面到高空0.1 hPa。

WRF-Chem模式的火点排放源来源于美国国家大气研究中心（NCAR）的Fire Inventory（FINN）的MODIS卫星数据，水平分辨率为1 km。人为排放源来源于2012年的中国多尺度排放清单模型Multi-resolution Emission Inventory（MEIC），生物质燃烧源来源于Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature v2.04（MEGAN）的在线计算结果。

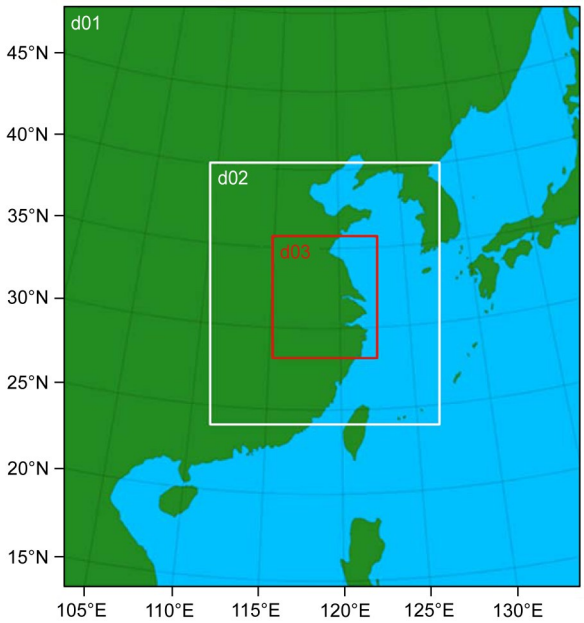

图1　模式模拟的三层嵌套区域示意图

Fig. 1　The triply-nested domain of WRF simulations

3　两次深对流系统宏微观特性分析

3.1　天气背景条件

由于深对流系统的产生与大尺度天气背景和中低层系统密切相关，图2所示为两次深对流过程发生前的500 hPa、850 hPa和925 hPa天气形势图。从图2a中可以看到，7月27日的深对流发生前，500 hPa等压面上有一根槽从日本北部伸展到我国东部地区，槽后有强的冷平流，槽前有气流疏散，副热带高压线压到南京地区。从图2c和图2e的850 hPa和925 hPa形势图上可以看到，山东半岛地区存在一条西北—东南走向的风切变线，由南向北的最大风速接近10 m s^{-1}，沿着切变线向北输送大量水汽。从图2b中可以看到，8月24日的深对流发生前，500 hPa等压面上有一根槽从贝加尔湖伸展到我国湖北地区。槽前有冷温度平流，槽后有暖温度平流，副热带高压线压到浙江中部地区，两次深对流发生前副热带高压强度差异不大。安徽地区存在一条西北—东南走向的风切变线，水汽沿着切变线向北输送。

3.2　热力条件对比

图3是两次深对流系统发生前南京地区（32°N，119°E）的探空曲线，从图中可以看出，7月27日对流有效位能（CAPE）达1245 J kg^{-1}，抬升凝结高度（LCL）为992 hPa，而8月24日对流有效位能达1720 J kg^{-1}，抬升凝结高度为986 hPa。因此，两次过程都是在不稳定大气层结条件下发展起来的，而8月24日深对流系统的大气热力条件更不稳定。

较强的垂直风切变也是维持对流系统内长时间上升气流的重要环境因素，如果有足够强的垂直于对流系统的低层切变分量，就能够阻止风暴出流的快速向前运动，从而维持低层垂直气流的不断抬升（Thorpe et al., 1982）。采用以下公式计算对流发生前0～6 km垂直风切变Δv:

$$\Delta v = \sqrt{v_1^2 + v_2^2 - 2v_1v_2\cos\theta}, \qquad (1)$$

其中，v_1为0 km高度层风速，v_2为6 km高度层风速，θ为两层风向差（徐芬等，2016）。结果得到7月27日对流发生前南京的0～6 km垂直风切变为14.4 m s^{-1}，8月24日为18.9 m s^{-1}，可以看出8月24日深对流系统垂直风切变强于7月27日深对流系统的垂直风切变，说明8月24日的深对流系统可能比7月27日的深对流系统发展更强。

3.3　雷达回波特征分析

2014年7月27日00:00～11:00长三角地区发生了一次深对流过程，影响范围大致为（30°～34°N，116°～121°E）。其中，此次深对流过程在南京地区持续了大约8小时（01:00～09:00）。图4是本次深对流过程中不同时刻的雷达组合反射率因子图，雷达资料来源于南京信息工程大学的C波段多普勒天气雷达，雷达所在位置为模式中心位置（32°N，118.7°E），探测半径150 km。从观测的雷达反射率随时间的演变特征可以看到，本次深对流过程前期有几个初生的对流单体出现在安徽地区，随后回波开始逐渐加强，并很快发展起来，后期发展形成的对流单体合并，形成一个很强的深对流系统，系统成熟后向东南方向移动。7月27日01:12深对流系统的雷达回波还很弱（图4a），大部分回波强度低于30 dBZ，只有几个小尺度对流单体的回波强度达到50 dBZ，代表对流处于初生阶段。随着深对流系统的发展和成熟，雷达回波逐渐增强，强回波面积增大。至7月27日05:14，对流单体的数量增加，许多小对流单体开始合并，有形成深对流系统的趋势（图4c）。7月27日07:06，回波几乎形成一个整体，回波边缘整齐，中心强度达到60 dBZ，表明此时深对流发展进入成熟阶段（图4e）。从图中可以看出，处于成熟阶段的深对流系

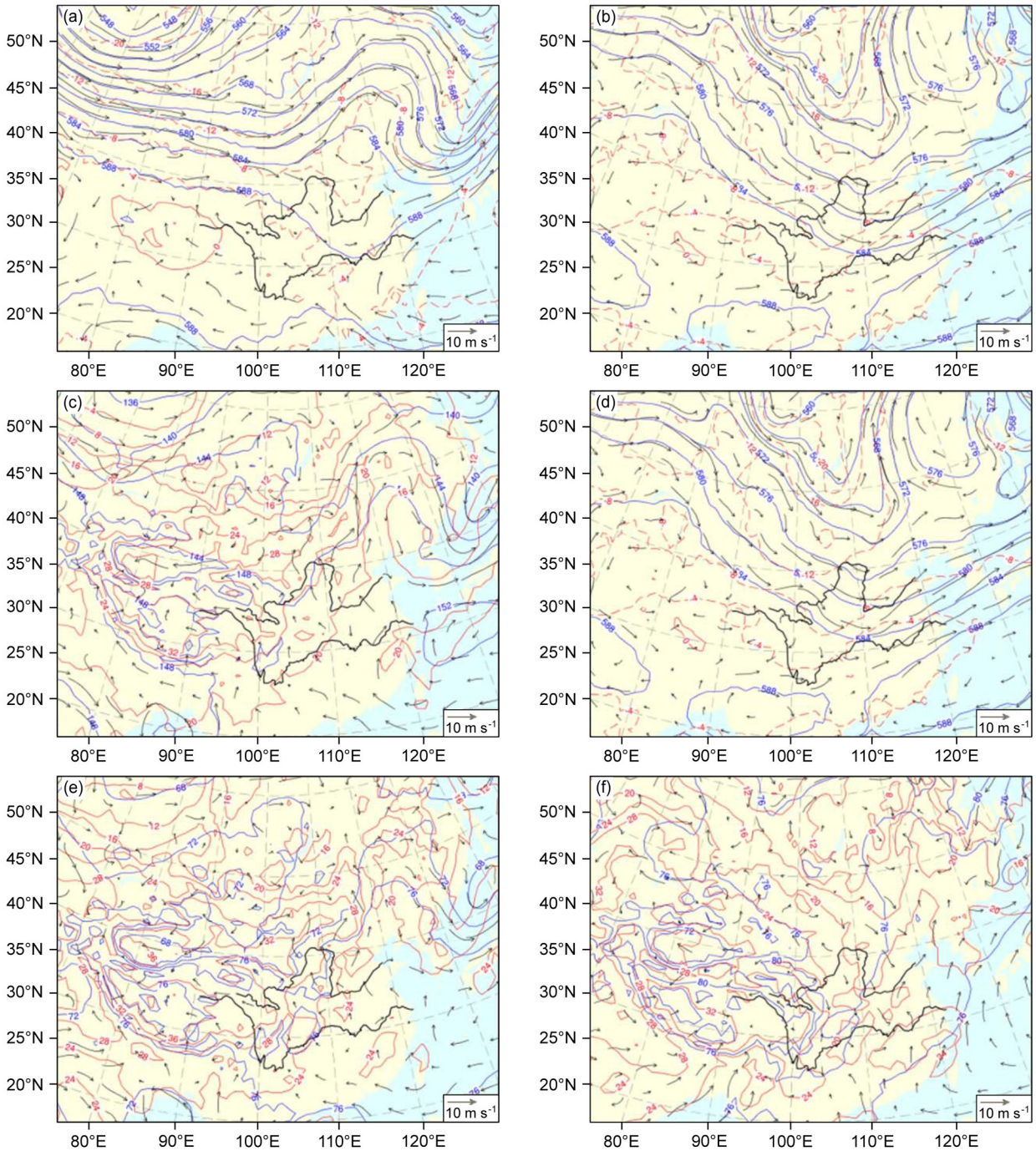

图2 2014年（a，c，e）7月26日18:00（协调世界时，下同）和（b，d，f）8月23日18:00两次深对流系统（a，b）500 hPa、（c，d）850 hPa和（e，f）925 hPa天气形势场（蓝色等值线为位势高度，单位：dagpm红色等值线为温度，单位：℃）以及风矢量分布（单位：m s^{-1}）。图a，b中的黑色方框为深对流发生区域

Fig. 2 (a, b) 500 hPa, (c, d) 850 hPa, and (e, f) 925 hPa geopotential height (blue contours, units: gpm), temperature (red dashed contours, units: ℃), and wind vectors (units: m s^{-1}) at (a, c, e) 1800 UTC 26 July and (b, d, f) 1800 UTC 23 August in 2014. Black rectangles in figures 2a and 2b denote the areas affected by convection

统主体部分位于安徽和江苏的交界处，周围伴随着许多小尺度对流单体，随着对流向东南方向的移动，这些小单体并入对流的主体，形成了深对流系统。将观测结果与模拟结果进行对比可以发现，模式较好地模拟出本次深对流系统的初生、发展和成熟过程，模拟的对流系统在7月27日01:00生成，

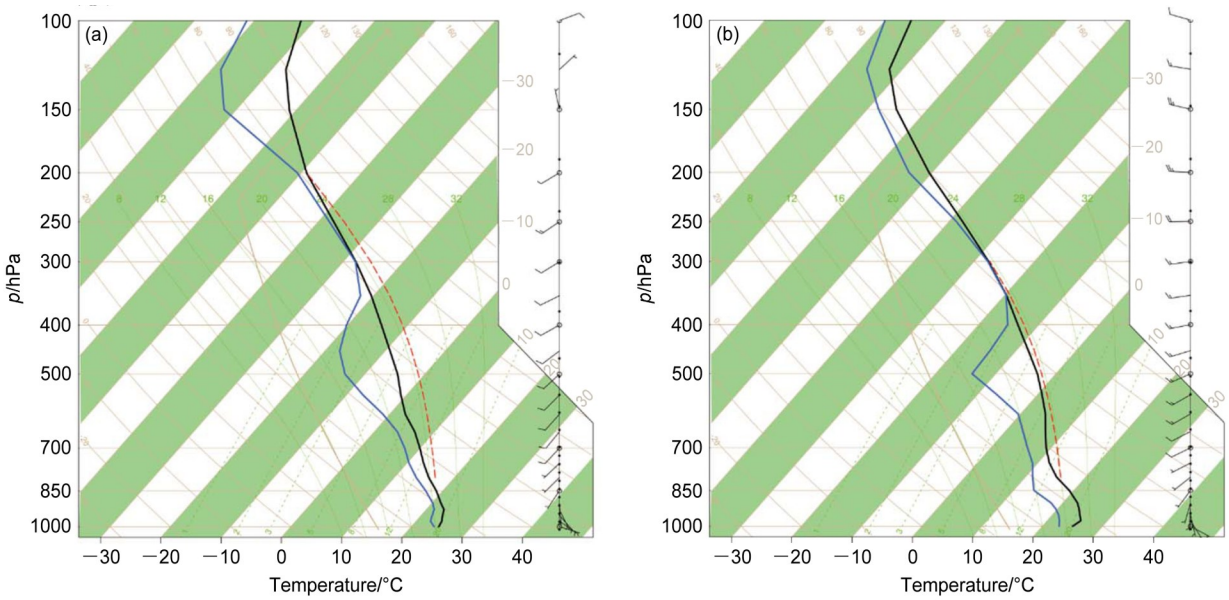

图3　2014年（a）7月27日和（b）8月24日深对流系统发生前南京地区的探空曲线。蓝色实线为露点温度，黑色实线温度曲线

Fig. 3　Skew *T*–ln*p* diagram in Nanjing area before the deep convection on (a) 27 July and (b) 24 August 2014.. The blue lines denote dew point curves and the black lines denote temperature curves

随后向东移动，先后经过安徽中部和江苏南部地区。模式模拟的深对流系统在11:00减弱消亡，生命周期与实况基本一致，模拟的该深对流个例回波强度与观测结果接近，模拟的回波面积比观测结果略大。综上所述，本次数值模拟对7月27日深对流系统的影响范围和发展趋势都有较好的描述。

2014年8月24日江苏境内出现的另外一个深对流系统影响范围大致为（31°～36°N，117°～122°E）。其中，在南京地区持续了大约10小时（01:00～11:00）。图5是2014年8月24日观测和模拟的深对流过程发展不同阶段的雷达组合反射率。从图5的雷达组合反射率图可以清楚的看出本次深对流的演变趋势。由于雷达的探测距离有限，本次深对流系统的初生阶段未能全部观测到。从模拟结果来看，本次深对流系统初生与江苏北部的对流过程密切相关。8月24日02:04深对流系统出现在实测雷达回波图的西北方向，由数个小对流单体组成，并具有合并的趋势（图5a）。8月24日06:03，深对流系统移动到南京地区，回波明显发展增强，回波面积增大，回波合并后组织性增强，已初步形成弓状回波，最大雷达回波达到55 dB*Z*（图5c）。8月24日09:04，回波发展进入成熟阶段，雷达东南方向的回波已经连成一片，面积增大，形成一个强中尺度对流系统，回波中心强度达到60 dB*Z*，此时弓形回波呈东北—西南带状（图5e）。该系统进入成熟阶段后向东南方向移动，影响了江苏大部分地区。对比模拟和观测的雷达回波可以看出，模式同样较好的模拟出深对流系统的初生、发展和成熟过程，模拟的深对流系统在8月23日23:00生成，随后向东南方向移动，先后经过江苏北部和江苏南部地区，在8月24日12:00减弱消亡，生命周期与实况基本一致。

通过多普勒雷达资料的对比分析，可以看出两次深对流系统的不同之处。首先，8月24日的个例持续时间比7月27日的个例时间持续时间长。其次，两次深对流系统的影响范围不同，7月27日的个例是由小单体合并形成的，回波高值区比较分散，呈现团状回波，而8月24日的个例影响范围更大，类似于飑线系统，出现了明显的弓状回波，回波高值区呈准线性分布。总体来说，本文采用的参数化方案可以较好的模拟出长三角地区两次深对流过程的影响范围和发展趋势，因此使用WRF-Chem模式进一步研究深对流对污染气体的再分布作用。

3.4　深对流系统的宏微观特性分析

深对流系统发展过程中宏微观特性的差异会导致污染气体的垂直输送也产生差异。为了了解两次深对流系统发展过程中的差异，图6给出了两次深

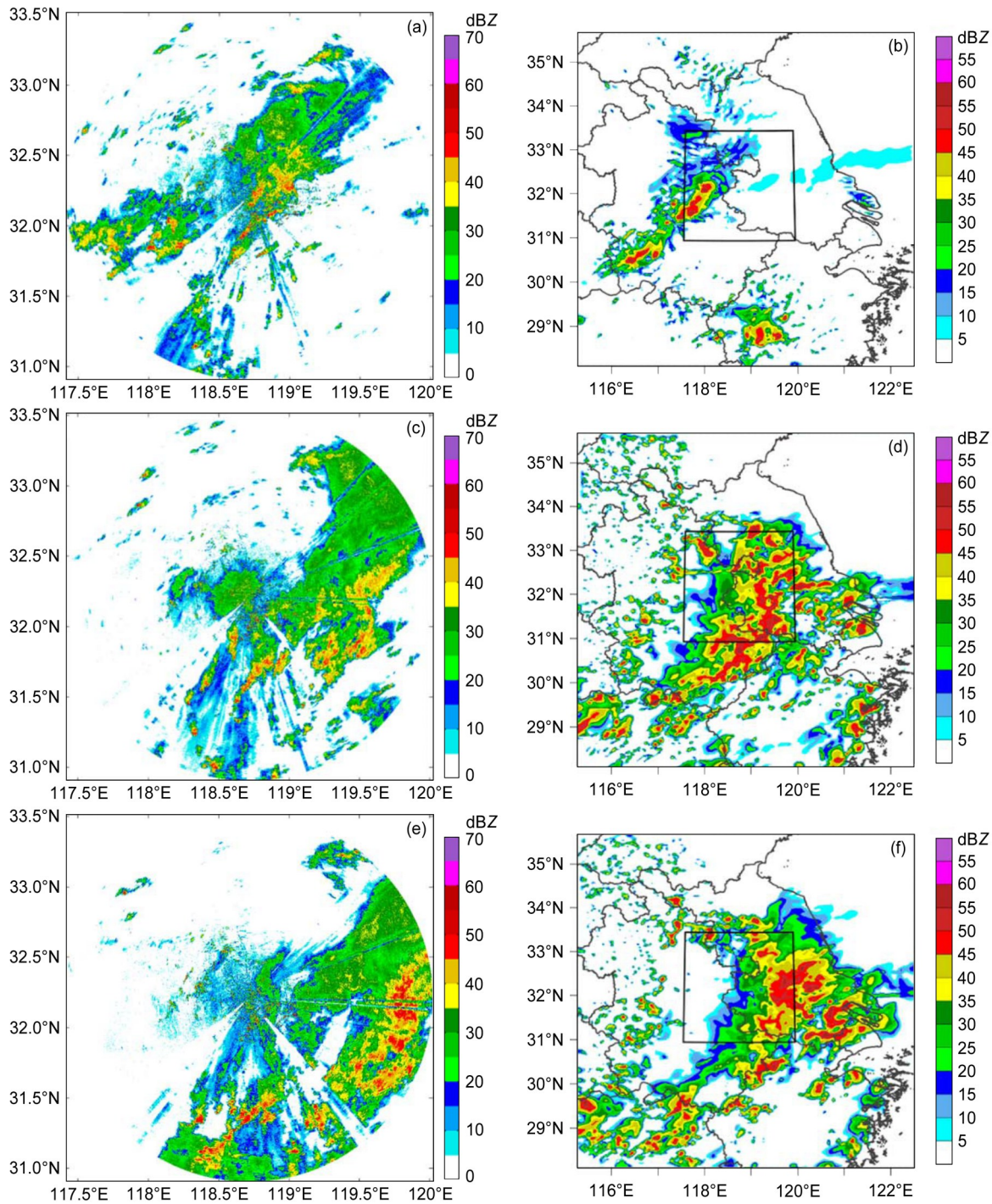

图4 2014年7月27日（a，c，e）观测与（b，d，f）模拟（黑色方框是雷达观测区域）雷达回波图：（a）01:12；（b）01:30；（c）05:14；（d）05:00；（e）07:06；（f）07:00

Fig. 4 (a, c, e) Observed and (b, d, f) simulated (black rectangles denote the areas observed by the radar) radar echoes on 27 July 2014: (a) 0112 UTC; (b) 0130 UTC; (c) 0514 UTC; (d) 0500 UTC; (e) 0706 UTC; (f) 0700 UTC

对流过程中整个模拟时段内平均水汽混合比、垂直速度和云量随高度的变化，其中平均水汽混合比和垂直速度是将雷达反射率因子大于0的格点进行平均，每个高度上云量是将水平网格上的有云格点数（将格点总云水含量大于10^{-6} kg kg^{-1}的格点视为有云格点）除以水平区域总格点数得到的。从图6a中可以看出，两次深对流系统的水汽混合比差别不大，相对于7月27日个例，8月24日个例对流层中

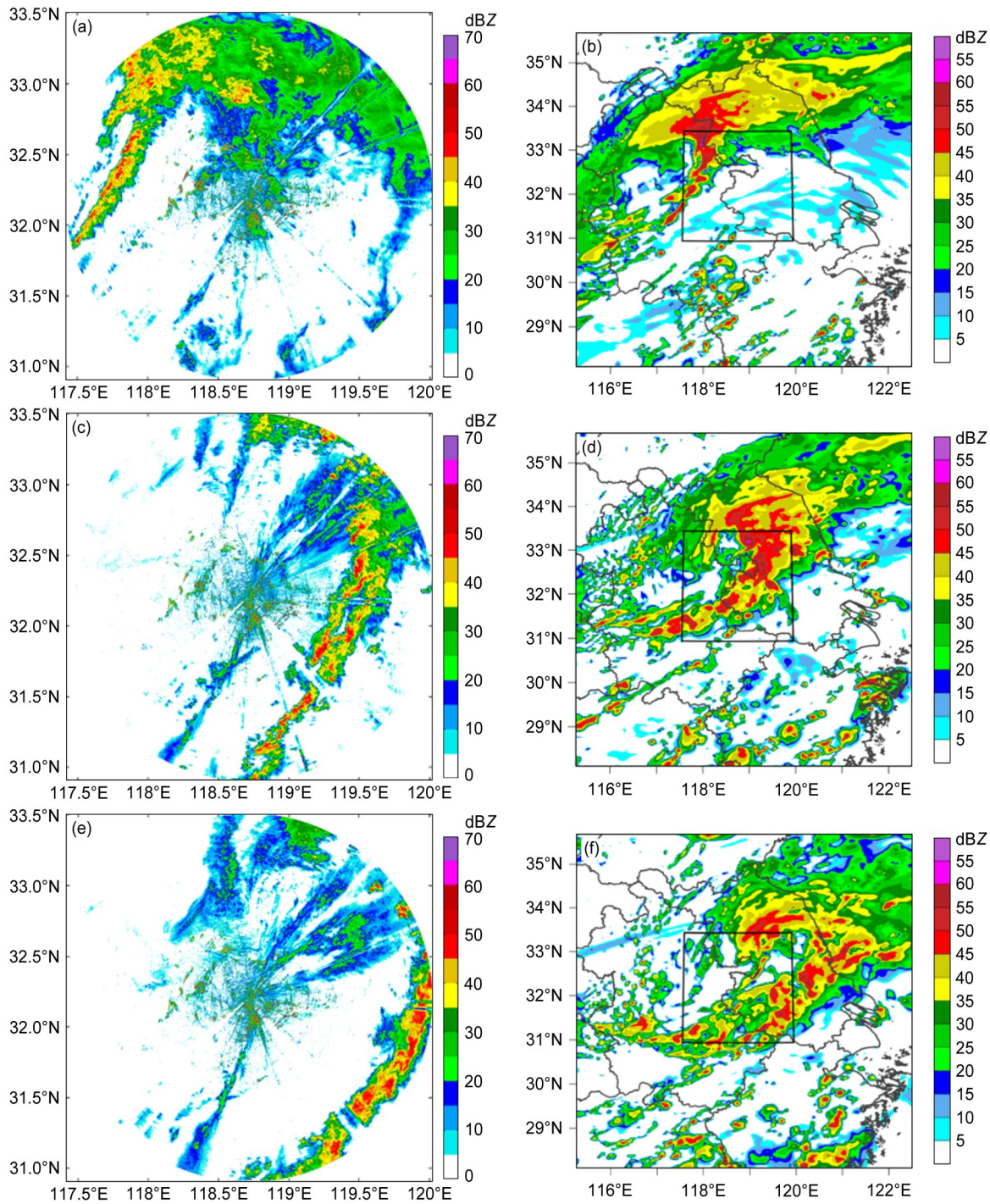

图5　2014年8月24日（a，c，e）观测与（b，d，f）模拟（黑色方框是雷达观测区域）雷达回波图：（a）02:04；（b）03:00；（c）06:03；（d）06:00；（e）09:04；（f）09:00

Fig. 5　(a, c, e) Observed and (b, d, f) simulated (black rectangles denote the areas observed by the radar) radar echoes on 24 August 2014: (a) 0204 UTC; (b) 0300 UTC; (c) 0603 UTC; (d) 0600 UTC; (e) 0904 UTC; (f) 0900 UTC

低层大气（5 km以下）水汽较为丰沛，而平均垂直速度和云量在垂直分布上有较大差异。8月24日深对流系统的垂直风速极值小于7月27日对流系统，11 km以下垂直风速小于后者，而11～15 km垂直风速大于后者。相对于7月27日个例，8月24日深对流过程垂直速度随高度的分布表现为较为明显的向上抬升。同时，从云量的分布来看，8月24日的深对流云顶高度更高，云的覆盖范围更大。

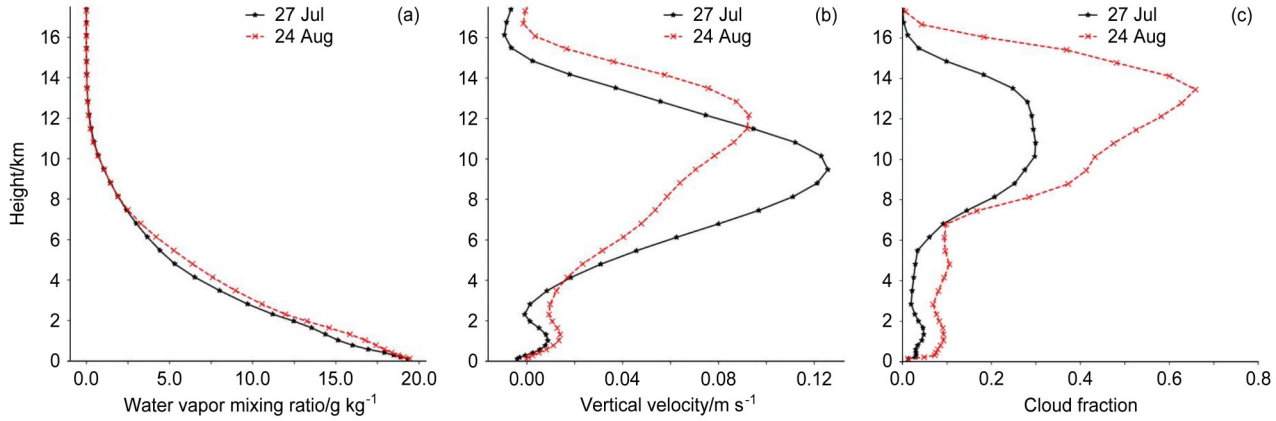

图6 模拟得到的第三层嵌套2014年7月27和8月24日两次深对流系统平均（a）水汽混合比、（b）垂直速度和（c）云量随高度的变化

Fig. 6 Vertical changes of (a) water vapor mixing ratio, (b) vertical velocity, and (c) cloud fraction averaged over Domain 3 during simulation periodof the two deep convections on 27 July and 24 August 2014

4 污染气体的空间分布特征

4.1 CO分布特征

为了探究深对流系统对污染气体再分布的作用，本文选取CO作为示踪气体研究深对流的垂直输送过程。CO的主要排放源是人类活动，其垂直分布特征表现为对流层低层浓度较大，随高度升高浓度降低，基本不参与大气中的化学反应，因此可以有效的说明深对流系统对污染气体的垂直输送作用（Mullendore et al., 2009）。图7是两次深对流过程发生前和发展过程中地面和对流层上层（300 hPa附近）CO浓度的对比。从图7a和图7b中可以看出，两次深对流发生前地面的CO浓度都很高，CO的地面排放分布差异不大。从图7c和图7d中可以看到，深对流处于初生阶段时，对流层上层CO浓度高值区范围较小。随着深对流进入成熟阶段（图7e，f），对流层上层的CO浓度高值区范围明显增加，CO体积分数浓度最大值为270 ppb（ppb表示10^{-9}）左右，CO浓度高值中心与雷达回波中心位置一致（图4c、图7e、图5c、图7f），这说明对流层上层CO浓度的增加与对流的垂直输送有关。在深对流进入消散阶段时（图7g，h），对流层上层的CO浓度极值区范围减小，这可能与对流层上层的平流输送有关。从300 hPa高空风场来看，8月24日的深对流系统高空风速大于7月27的深对流系统高空风速，高层的辐散更有利于上升气流的生成，上升气流会从边界层内携带大量的CO到达对流层高层，从而使得对流层高层的CO浓度更高。由于两次深对流过程发生前地面的CO浓度分布情况接近，因此可以认为高空的CO浓度分布不同是由对流输送强度不同导致的。综上所述，深对流系统可能影响对流层上层污染气体的空间分布，因此可能对全球气候产生重要的影响作用。

为了进一步了解深对流系统对污染气体的垂直输送作用，图8给出了两次个例不同时刻CO浓度沿32°N的剖面。从图8中可以看到，在对流发生后，对流活跃部分云体内CO垂直向上输送非常迅速，很快被输送到对流层顶，因此使得对流层顶的CO浓度有显著增加（图8a，b）。比较两次个例的CO垂直分布可以看出，7月24日的深对流系统可以将CO输送到14 km高度处（图8d），CO体积分数浓度最大值为300 ppb左右，14 km以上CO浓度随高度减小，而8月24的深对流系统可以把CO输送到16 km处，CO体积分数浓度最大值为330 ppb左右。比较两次个例对流层上层的CO浓度可以发现（图8c，d），7月27日个例CO浓度高值区主要集中在8～14 km，而8月24日个例CO浓度高值区集中在12～16 km。结合图6b的垂直速度分布特征，说明7月27日的深对流系统在对流层中层的输送作用较强，而8月24日的深对流系统在对流层上层的输送作用相对较强。这可能与两次深对流系统对流强度的不同有关。对流越强，CO就可能被垂直输送到更高的高度，因此对流层上层的CO浓度也越高。由于8月24日的深对流系统高空风速强于7月27日的深对流系统高空风速，所以高空风对CO的水平输送效果更强，使得CO的污染范围增大，从而改变CO区域分布。

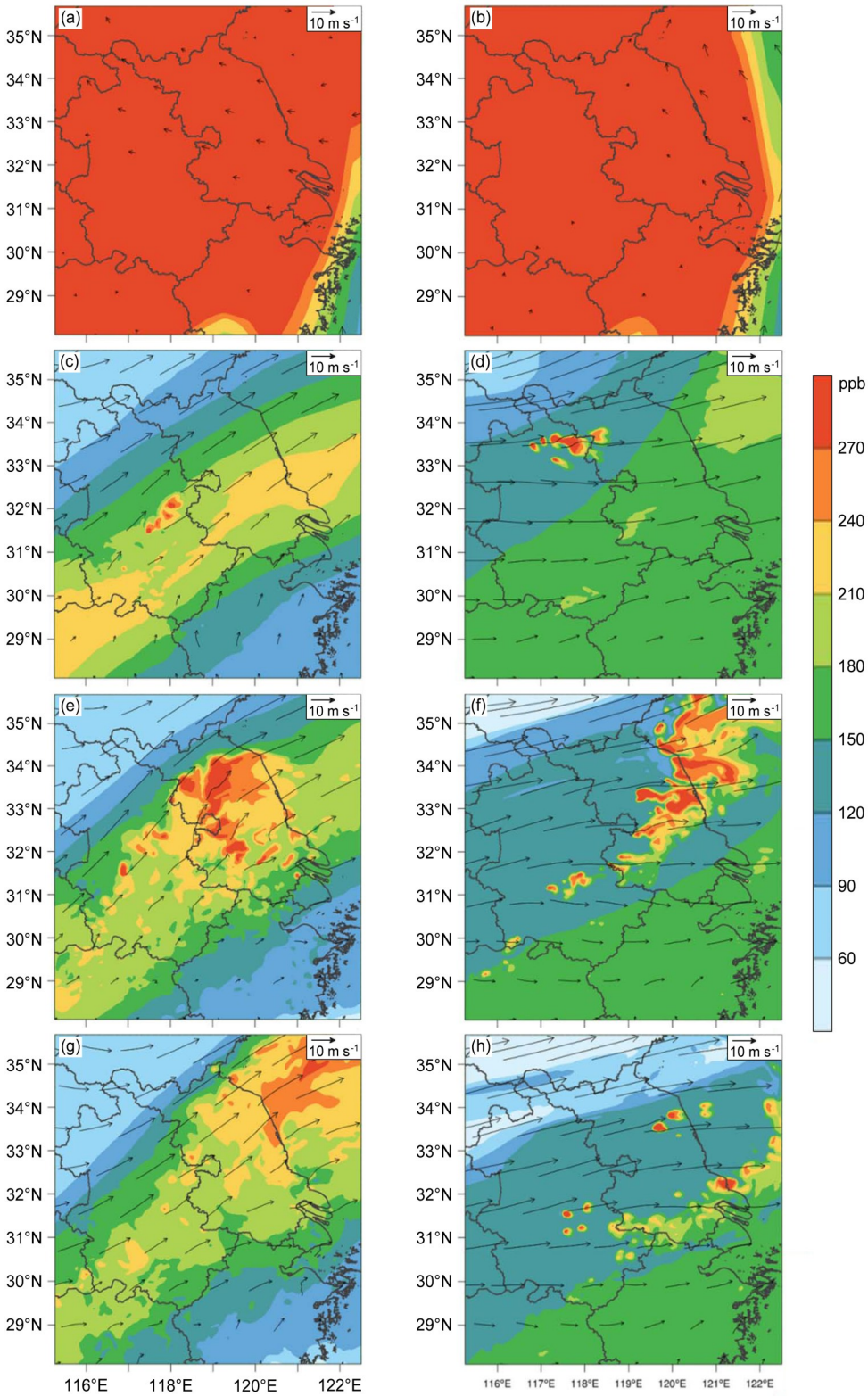

图7　2014年（a）7月26日与（b）8月23日两次深对流过程发生前模拟得到的地面CO浓度和风矢量以及7月27日和8月24日模拟对流发生的不同时次（c）01:00、（e）06:00、（g）10:00、（d）01:00、（f）06:00、（h）10:00 300 hPa CO浓度和风矢量分布：（c、d）两次深对流初生阶段；（e、f）成熟阶段；（g、h）消散阶段

Fig. 7　Simulated CO concentration and wind vectors at 1000 hPa on (a) 26 July and (b) 23 August 2014 before the two convections and at (c–h) 300 hPa at (c) 0100 UTC, (e) 0600 UTC, (g) 1000 UTC 27 July 2014 and (d) 0100 UTC, (f) 0600 UTC, (h) 1000 UTC 24 August 2014. (c, d) Primary stages of the two deep convections; (e, f) the mature stages; (g, h) the dissipating stages

CO在对流层高层的残留时间与多个影响因素有关。首先，8月24的深对流系统的强度比7月27的深对流系统大，从图6可以看出，8月24的深对流系统发展高度更高，对流层高层的垂直速度和云量都更大，因此可以将更多的CO输送到对流层高层，从而导致对流层高层CO浓度的增加。其次，对流层高层的风场也会影响CO在对流层高层的残留时间，对流层高层风速越大，CO的水平输送就越强，使得CO浓度降低。从图7g和图7h发现，8月24日的深对流系统高层风速更大，因此对CO水平输送更强，使得CO残留时间更短。以上结果表明对流越强，对流层上层的污染气体分布受到的影响越大。与Li et al.（2017）对美国科罗拉多地区的研究结果相比，长三角地区对流层上层的CO浓度偏高，可能的原因是长三角地区的污染较严重，边界层内的污染气体浓度较高，从而使得垂直输送到对流层上层的污染气体浓度也变高。

4.2 对流垂直输送特征

4.2.1 质量通量特征

深对流系统中污染气体是通过上升气流进行垂直输送的，上升气流越强，被输送到对流层上层的污染气体越多。本文使用对流系统上升气流的质量通量（f）表示单位截面向上输送的空气质量大小，

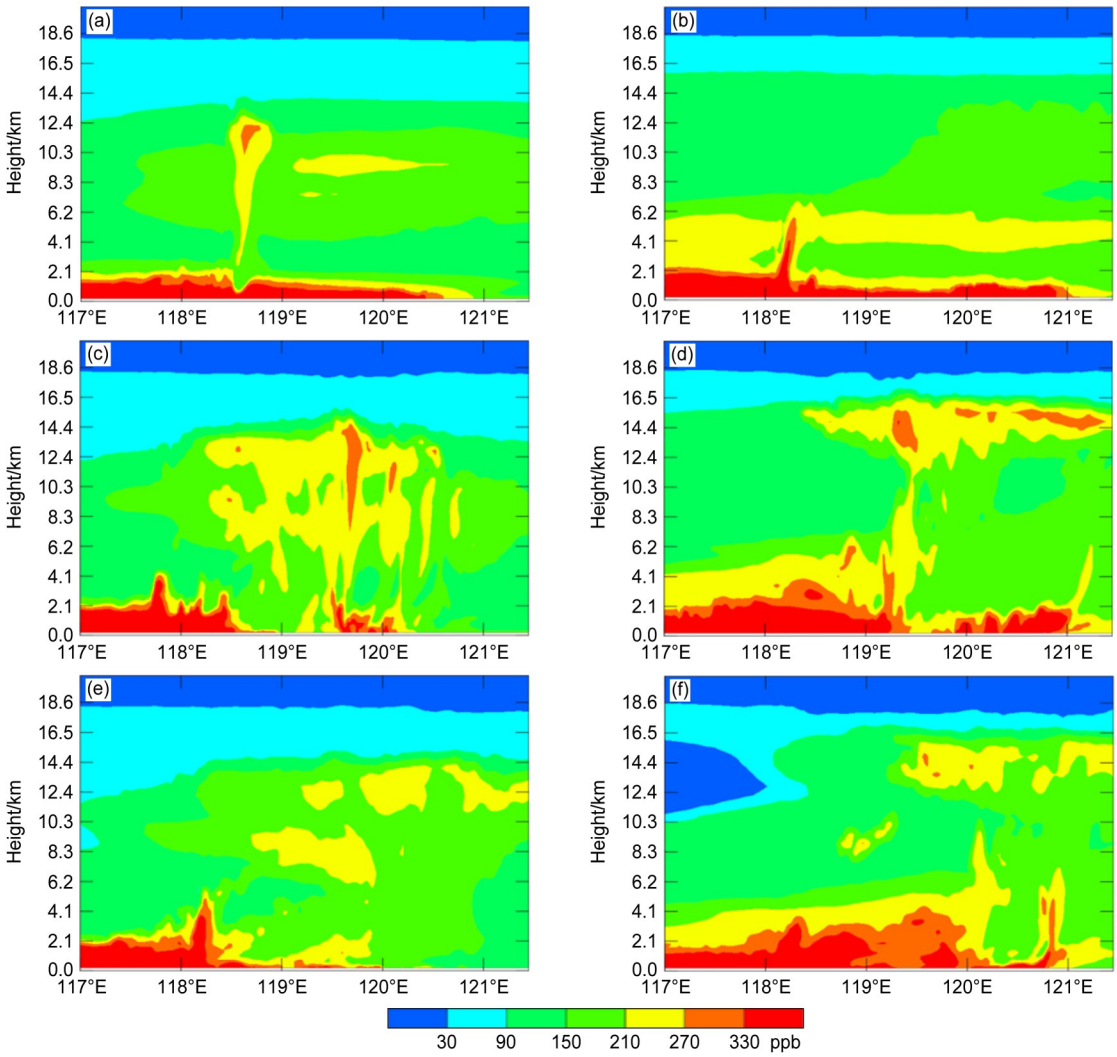

图8 2014年（a，c，e）7月27日与（b，d，f）8月24日模拟的两次深对流在（a，b）初生阶段、（c，d）成熟阶段和（e，f）消散阶段CO浓度（阴影）沿32°N的垂直剖面：（a）01:00；（b）03:00；（c）06:00；（d）07:00；（e）10:00；（f）11:00

Fig. 8 Vertical cross sections of simulated CO concentration along 32°N at (a, b) the primary stages, (c, d) the mature stages, and (e, f) the dissipating stages of the two deep convections: (a) 0100 UTC; (c) 0600 UTC; (e) 1000 UTC on 27 Jul 2014; (b) 0300 UTC; (d) 0700 UTC; (f) 1100 UTC on 24 Aug 2014

$$f = \rho w\,, \tag{2}$$

其中，ρ表示空气密度，w表示垂直风速，质量通量越大表示向上输送作用越强。图9是整个模拟时段发生对流区域（将雷达反射率大于0的格点视为对流发生格点）平均质量通量随高度的变化，从图9中可以看到，在深对流过程中，质量通量随高度先增加后减小，这与图6b中垂直速度的变化是一致的，表明污染气体的垂直输送与垂直风速关系很大。其中7月27日的深对流系统在2～7.5 km高度处质量通量随高度增加，7.5 km高度以上质量通量随高度减小，也就说明7.5 km处垂直输送作用最强， 15 km以上质量通量接近于0，这表明对流向上输送最高可以到达15 km的高空。8月24日的深对流系统在3～10 km高度处质量通量随高度增加，10 km高度以上质量通量随高度减小，10 km处平均质量通量最强，16 km以上质量通量接近于0。比较两次深对流过程中质量通量的变化可以发现，7月27日的对流质量通量极值更大，因此输送到对流层中层的污染气体更多，而8月24日的深对流系统可以将污染气体输送到更高处。

深对流系统对CO的垂直输送取决于垂直质量通量、对流区域的大小和对流系统的持续时间，对两次深对流系统在成熟阶段1小时内0～8 km的垂直质量通量求和结果表明，7月27的个例对CO的垂直输送为8.94×10^6 kg h^{-1}，而8月24日的个例对CO的垂直输送为1.15×10^7 kg h^{-1}，8月24日深对流系统每小时垂直输送的CO浓度是7月27日的1.3倍，考虑到8月24日的深对流系统持续时间更长，8月24日的深对流系统对CO的垂直输送作用远远大于7月24日的深对流系统的垂直输送作用。

4.2.2 垂直通量散度特征

质量通量的分布特征可以反映对流发展的最高高度，但是无法确定由于不同高度垂直速度大小的差异所引起的污染气体的累积情况，因此需要使用垂直通量散度来判断污染气体主要在哪个高度被卷入或卷出云体。根据Skamarock et al.（2000）文中的公式，示踪气体的输送可以用以下方程来表示：

$$\frac{\partial(\overline{\rho\Phi})}{\partial t} = -\frac{\partial(\bar{\rho}u\Phi)}{\partial x} - \frac{\partial(\bar{\rho}v\Phi)}{\partial y} - \frac{\partial(\bar{\rho}w\Phi)}{\partial z}, \tag{3}$$

其中，Φ是示踪气体体积分数，$\bar{\rho}$是平均空气密度，u和v是水平速度，w是垂直风速，将方程（3）在水平层上积分可以得到：

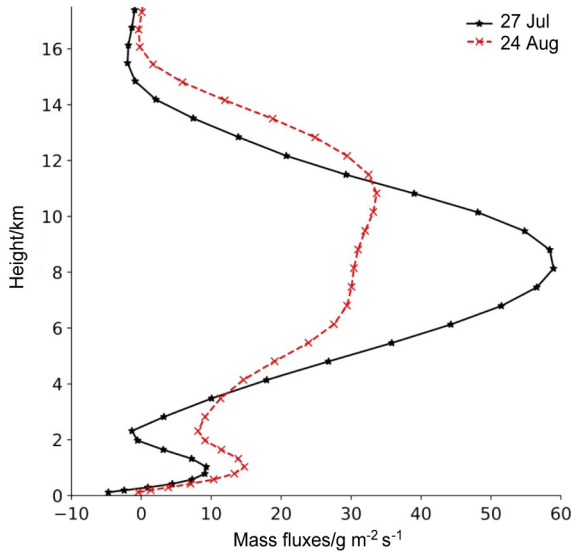

图9 模拟过程中对流发生区域内平均质量通量随高度的变化

Fig. 9 Mean profiles of air mass fluxes in convection area during simulation period

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Omega}(\bar{\rho}\Phi)\mathrm{d}\Phi = -\int_{\Omega}\frac{\mathrm{d}(\bar{\rho}w\Phi)}{\mathrm{d}z}\mathrm{d}\Omega - \int_{\Gamma}(\bar{\rho}u_n\Phi)\mathrm{d}\Gamma, \tag{4}$$

其中，z是高度，Ω是整层区域，Γ是区域边界，u_n是边界法相速度，方程（4）右边的最后一项是穿过边界的净通量，在深对流过程中比其他两项数量级小，可以忽略不计。垂直通量散度（VFD，单位：kg m^{-1} s^{-1}）可以定义为

$$\mathrm{VFD} = \sum\frac{\partial\rho w C_{\mathrm{gas}}\dfrac{M_{\mathrm{gas}}}{M_{\mathrm{air}}}}{\partial z}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\,, \tag{5}$$

其中，C_{gas}是示踪气体体积分数，M_{gas}是示踪气体摩尔质量，M_{air}是空气摩尔质量。VFD大于0表示示踪气体被卷入，VFD小于0表示示踪气体被卷出。

选择CO作为示踪气体，使用方程（5）每半小时对模拟区域内雷达组合反射率大于0的区域进行积分，比较两次深对流系统在成熟阶段（大约3小时）的VFD差异（图10a）。由图可知，8 km以下CO垂直通量散度几乎都大于0，这表明深对流系统可以将8 km以下的CO卷入，8～15 km CO垂直通量散度几乎都小于0，这表明深对流过程在8～15 km将CO卷出，从而造成对流层上层CO浓度的增加。比较两次对流过程的CO垂直通量散度可以发现，7月27日深对流系统的CO垂直通量散度

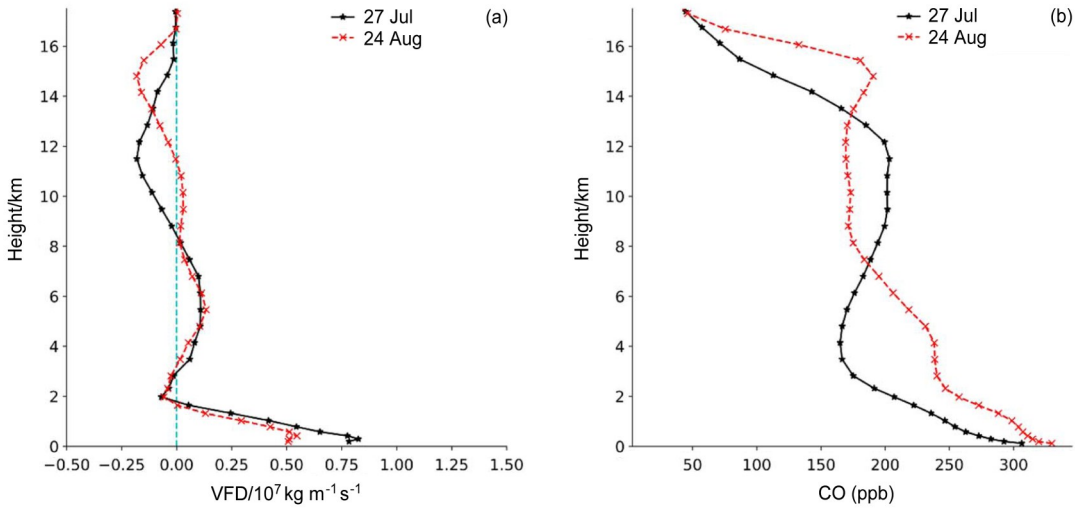

图10 两次对流过程中对流成熟阶段对流发生区域平均的（a）CO垂直通量散度随高度变化和（b）CO浓度随高度变化

Fig. 10 Mean profiles of (a) upward CO flux divergence and (b) CO concentration during the mature stage of the two deep convections

在12 km附近最小，因此表明在该高度卷出效果更强，深对流系统主要将高浓度的CO输送到12 km高度处，而8月24日深对流系统的CO垂直通量散度在15 km附近最小，因此主要将高浓度的CO输送到15 km高度处。对成熟阶段模拟区域内雷达组合反射率大于0的CO浓度进行平均，得到图10b所示的CO平均浓度垂直廓线图，由图可知，7月27日深对流过程中CO浓度在3 km以下随高度逐渐减小，在3～12 km高度处CO浓度随高度逐渐增加，8月24日深对流过程中CO浓度在7 km以下随高度逐渐减小，在7～15 km高度处CO浓度随高度逐渐增加。结合图10a垂直通量散度的变化可以发现，CO浓度最大值出现的高度与VFD最小值出现的高度是对应的，因此可以解释两次深对流系统输送导致CO浓度最大值高度出现的不同。综上所述，深对流系统可以通过对流输送过程在很短的时间内将边界层内的CO等污染气体输送到对流层上层，从而改变对流层上层的大气化学成分。

5 总结与结论

本文利用WRF-Chem模式对2014年发生在江苏境内的两次深对流系统进行了模拟，分析了深对流系统的结构特点和发展情况，研究了深对流过程对污染气体的垂直输送作用以及对上层大气成分变化的作用。主要结论如下：

（1） 模拟选择的物理参数化方案可以有效的模拟出深对流系统的发展情况， 从模拟结果与雷达观测结果比较发现，WRF-Chem模拟的对流发生区域、发展趋势和对流强度都与实际观测结果接近，可以有效模拟出两次深对流系统的发展情况，两次对流发展高度的不同可能与深对流系统的强度不同有关。

（2）从示踪气体CO的模拟结果可以看出，深对流系统可以在几个小时内将高浓度的CO输送到对流层上层。对CO浓度垂直剖面和质量通量随高度的变化分析看出，7月27日的深对流系统最高可以将CO输送到14 km高度处，8月24日的深对流系统最高可以将CO输送到16 km高度处。对CO浓度的垂直廓线和垂直通量散度分析看出，7月27的深对流系统主要将CO输送到12 km附近，导致7月27日个例对流层中层的CO浓度更高，8月24日的深对流系统主要将CO输送到15 km附近，导致8月24日个例对流层上层的CO浓度更高。垂直质量通量散度能够反映污染气体在对流层低层卷入云体以及在对流层高层累积的过程。

本文研究结果有助于进一步理解深对流过程中的动力输送过程。在深对流发展过程中，CO基本不参与化学反应，因此本文主要对示踪气体的动力输送过程进行分析，后续研究将讨论易于参与化学反应的其他气体成分。

参考文献（References）

Barret B, Sauvage B, Bennouna Y, et al. 2016. Upper-tropospheric CO and O_3 budget during the Asian summer monsoon [J]. Atmos. Chem. Phys., 16(14): 9129–9147. doi:10.5194/acp-16-9129-2016

Barth M C, Kim S W, Skamarock W C, et al. 2007a. Simulations of the redistribution of formaldehyde, formic acid, and peroxides in the 10 July 1996 Stratospheric–Tropospheric Experiment: Radiation, aerosols, and ozone deep convection storm [J]. J. Geophys. Res., 112 (D13 D13310. doi:10.1029/2006JD008046

Barth M C, Kim S W, Wang C, et al. 2007b. Cloud-scale model intercomparison of chemical constituent transport in deep convection [J]. Atmos. Chem. Phys., 7(18): 4709–4731. doi: 10.5194/acp-7-4709-2007

Barth M C, Lee J, Hodzic A, et al. 2012. Thunderstorms and upper troposphere chemistry during the early stages of the 2006 North American monsoon [J]. Atmos. Chem. Phys., 12(22): 11003–11026. doi:10.5194/acp-12-11003-2012

Barth M C, Cantrell C A, Brune W H, et al. 2015. The deep convective clouds and chemistry (DC3) field campaign [J]. Bull. Amer. Meteor. Soc., 96(8): 1281–1309. doi:10.1175/BAMS-D-13-00290.1

Barth M C, Bela M M, Fried A, et al. 2016. Convective transport and scavenging of peroxides by thunderstorms observed over the central U.S. during DC3 [J]. J. Geophys. Res., 121(8): 4272–4295. doi:10.1002/2015JD024570

Bela M M, Barth M C, Toon O B, et al. 2016. Wet scavenging of soluble gases in DC3 deep convective storms using WRF-Chem simulations and aircraft observations [J]. J. Geophys. Res., 121(8): 4233–4257. doi:10.1002/2015JD024623

Bertram T H, Perring A E, Wooldridge P J, et al. 2007. Direct measurements of the convective recycling of the upper troposphere [J]. Science, 315(5813): 816–820. doi:10.1126/science.1134548

Bigelbach B C, Mullendore G L, Starzec M. 2014. Differences in deep convective transport characteristics between quasi-isolated strong convection and mesoscale convective systems using seasonal WRF simulations [J]. J. Geophys. Res., 119(19): 11445–11455. doi: 10.1002/2014JD021875

Chatfield R B, Crutzen P J. 1984. Sulfur dioxide in remote oceanic air: Cloud transport of reactive precursors [J]. J. Geophys. Res., 89(D5): 7111–7132. doi:10.1029/JD089iD05p07111

Cotton W R, Alexander G D, Hertenstein R, et al. 1995. Cloud venting — A review and some new global annual estimates [J]. Earth-Science Reviews, 39(3–4): 169–206. doi: 10.1016/0012-8252(95)00007-0

de F Forster P M, Shine K P. 1999. Stratospheric water vapor changes as a possible contributor to observed stratospheric cooling [J]. Geophys. Res. Lett., 26(21): 3309–3312. doi: 10.1029/1999GL010487

Dickerson R R, Huffman G J, Luke W T, et al. 1987. Thunderstorms: An important mechanism in the transport of air pollutants [J]. Science, 235(4787): 460–465. doi:10.1126/science.235.4787.460

Dvortsov V L, Geller M A, Solomon S, et al. 1999. Rethinking reactive halogen budgets in the midlatitude lower stratosphere [J]. Geophys. Res. Lett., 26(12): 1699–1702. doi:10.1029/1999GL900309

Emmons L K, Walters S, Hess P G, et al. 2010. Description and evaluation of the Model for Ozone and Related chemical Tracers, version 4 (MOZART-4) [J]. Geosci. Model Dev., 3: 43–67. doi: 10.5194/gmd-3-43-2010

Fast J D, Gustafson W I Jr, Easter R C, et al. 2006. Evolution of ozone, particulates, and aerosol direct radiative forcing in the vicinity of Houston using a fully coupled meteorology–chemistry–aerosol model [J]. J. Geophys. Res., 111(D21): D21305. doi: 10.1029/2005JD006721

Fried A, Barth M C, Bela M, et al. 2016. Convective transport of formaldehyde to the upper troposphere and lower stratosphere and associated scavenging in thunderstorms over the central United States during the 2012 DC3 study [J]. J. Geophys. Res., 121(12): 7430–7460. doi:10.1002/2015JD024477

Grell G A, Peckham S E, Schmitz R, et al. 2005. Fully coupled "online" chemistry within the WRF model [J]. Atmos. Environ., 39 (37): 6957–6975. doi:10.1016/j.atmosenv.2005.04.027

Holton J R, Haynes P H, McIntyre M E, et al. 1995. Stratosphere–troposphere exchange [J]. Rev. Geophys., 33(4): 403–439. doi: 10.1029/95RG02097

Hong S Y, Noh Y, Dudhia J. 2006. A new vertical diffusion package with an explicit treatment of entrainment processes [J]. Mon. Wea. Rev., 134(9): 2318–2341. doi:10.1175/MWR3199.1

Iacono M J, Delamere J S, Mlawer E J, et al. 2008. Radiative forcing by long-lived greenhouse gases: Calculations with the AER radiative transfer models [J]. J. Geophys. Res., 113(D13): D13103. doi: 10.1029/2008JD009944

Kain J S, Fritsch J M. 1990. A one-dimensional entraining/detraining plume model and its application in convective parameterization [J]. J. Atmos. Sci., 47(23): 2784–2802. doi:10.1175/1520-0469(1990)047<2784:AODEPM>2.0.CO;2

Khaykin S, Pommereau J P, Korshunov L, et al. 2009. Hydration of the lower stratosphere by ice crystal geysers over land convective systems [J]. Atmos. Chem. Phys., 9(6): 2275–2287. doi:10.5194/acp-9-2275-2009

Koren V, Schaake J, Mitchell K, et al. 1999. A parameterization of snowpack and frozen ground intended for NCEP weather and climate models [J]. J. Geophys. Res., 104(D16): 19569–19585. doi: 10.1029/1999JD900232

Lawrence M G, von Kuhlmann R, Salzmann M, et al. 2003. The balance of effects of deep convective mixing on tropospheric ozone [J]. Geophys. Res. Lett., 30(18): 1940. doi:10.1029/2003GL017644

Levizzani V, Setvák M. 1996. Multispectral, high-resolution satellite observations of plumes on top of convective storms [J]. J. Atmos. Sci., 53(3): 361–369. doi: 10.1175/1520-0469(1996)053<0361:MHRSOO>2.0.CO;2

李冰, 刘小红, 洪钟祥. 2001. 三维对流云对大气光化学组分的再分布作用及其化学效应 [J]. 大气科学, 25(2): 260–268. Li Bing, Liu Xiaohong, Hong Zhongxiang. 2001. The role of 3-D convective cloud transport in the redistributions of the tropospheric photochemical species and chemistry effects [J]. Chinese Journal of Atmospheric Sciences (in Chinese), 25(2): 260–268. doi: 10.3878/j.issn.1006-9895.2001.02.12

Li Y Y, Pickering K E, Allen D J, et al. 2017. Evaluation of deep convective transport in storms from different convective regimes during the DC3 field campaign using WRF-Chem with lightning data assimilation [J]. J. Geophys. Res., 122(13): 7140−7163. doi:10.1002/2017JD026461

Livesey N J, Logan J A, Santee M L, et al. 2013. Interrelated variations of O_3, CO and deep convection in the tropical/subtropical upper troposphere observed by the Aura Microwave Limb Sounder (MLS) during 2004−2011 [J]. Atmos. Chem. Phys., 13(2): 579−598. doi:10.5194/acp-13-579-2013

Mari C, Jacob D J, Bechtold P. 2000. Transport and scavenging of soluble gases in a deep convective cloud [J]. J. Geophys. Res., 105(D17): 22255−22267. doi:10.1029/2000JD900211

Morrison H, Thompson G, Tatarskii V. 2009. Impact of cloud microphysics on the development of trailing stratiform precipitation in a simulated squall line: Comparison of one- and two-moment schemes [J]. Mon. Wea. Rev., 137(3): 991−1007. doi: 10.1175/2008MWR2556.1

Mullendore G L, Durran D R, Holton J R. 2005. Cross-tropopause tracer transport in midlatitude convection [J] J. Geophys. Res., 110(D6): D06113. doi:10.1029/2004JD005059

Mullendore G L, Homann A J, Bevers K, et al. 2009. Radar reflectivity as a proxy for convective mass transport [J]. J. Geophys. Res., 114(D16): D16103. doi:10.1029/2008JD011431

Neu J L, Prather M J. 2012. Toward a more physical representation of precipitation scavenging in global chemistry models: Cloud overlap and ice physics and their impact on tropospheric ozone [J]. Atmos. Chem. Phys., 12(7): 3289−3310. doi:10.5194/acp-12-3289-2012

Phoenix D B, Homeyer C R, Barth M C. 2017. Sensitivity of simulated convection-driven stratosphere−troposphere exchange in WRF-Chem to the choice of physical and chemical parameterization [J]. Earth and Space Science, 4(8): 454−471. doi: 10.1002/2017EA000287

Pickering K E, Thompson A M, Scala J R, et al. 1992. Free tropospheric ozone production following entrainment of urban plumes into deep convection [J] J. Geophys. Res., 97(D16): 17985−18000. doi:10.1029/92JD01716

Ridley B A, Walega J G, Dye J E, et al. 1994. Distributions of NO, NO_x, NO_y, and O_3 to 12 km altitude during the summer monsoon season over New Mexico [J]. J. Geophys. Res., 99(D12): 25519−25534. doi:10.1029/94JD02210

Ridley B, Ott L, Pickering K, et al. 2004. Florida thunderstorms: A faucet of reactive nitrogen to the upper troposphere [J]. J. Geophys. Res., 109(D17): D17305. doi:10.1029/2004JD004769

Scala J R, Garstang M, Tao W K, et al. 1990. Cloud draft structure and trace gas transport [J]. J. Geophys. Res., 95(D10): 17015−17030. doi:10.1029/JD095iD10p17015

Skamarock W C, Powers J G, Barth M, et al. 2000. Numerical simulations of the July 10 Stratospheric−Tropospheric Experiment: Radiation, aerosols, and ozone/deep convection experiment convective system: Kinematics and transport [J]. J. Geophys. Res., 105(D15): 19973−19990. doi:10.1029/2000JD900179

Thornton D C, Bandy A R, Blomquist B W, et al. 1997. Vertical transport of sulfur dioxide and dimethyl sulfide in deep convection and its role in new particle formation [J]. J. Geophys. Res., 102(D23): 28501−28509. doi:10.1029/97JD01647

Thorpe A J, Miller M J, Moncrieff M W. 1982. Two-dimensional convection in non-constant shear: A model of mid-latitude squall lines [J]. Quart. J. Roy. Meteor. Soc., 108(458): 739−762. doi: 10.1002/qj.49710845802

徐芬, 郑媛媛, 肖卉, 等. 2016. 江苏沿江地区一次强冰雹天气的中尺度特征分析 [J]. 气象, 42(5): 567−577. Xu Fen, Zheng Yuanyuan, Xiao Hui, et al. 2016. Mesoscale characteristics of a severe hail event over the area along Yangtze River in Jiangsu [J]. Meteorological Monthly (in Chinese), 42(5): 567−577. doi:10.7519/j.issn.1000-0526.2016.05.006

Yang Q, Easter R C, Campuzano-Jost P, et al. 2015. Aerosol transport and wet scavenging in deep convective clouds: A case study and model evaluation using a multiple passive tracer analysis approach [J]. J. Geophys. Res., 120(16): 8448−8468. doi: 10.1002/2015JD023647

银燕, 曲平, 金莲姬, 等. 2010. 热带深对流云对CO、NO、NO_x和O_3的垂直输送作用 [J]. 大气科学, 34(5): 925−936. Yin Yan, Qu Ping, Jin Lianji, et al. 2010. Vertical transport of CO, NO, NO_x, and O_3 by tropical deep convective clouds [J]. Chinese Journal of Atmospheric Sciences (in Chinese), 34(5): 925−936. doi: 10.3878/j.issn.1006-9895.2010.05.08

Yin Y, Parker D J, Carslaw K S. 2001. Simulation of trace gas redistribution by convective clouds—Liquid phase processes [J]. Atmos. Chem. Phys., 1(1): 19−36. doi:10.5194/acp-1-19-2001

Yin Y, Carslaw K S, Parker D J. 2002. Redistribution of trace gases by convective clouds—Mixed-phase processes [J]. Atmos. Chem. Phys., 2(4): 293−306. doi:10.5194/acp-2-293-2002

Zhang Y, Wen X Y, Jang C J. 2010. Simulating chemistry−aerosol−cloud−radiation−climate feedbacks over the continental U. S. using the online-coupled Weather Research Forecasting model with chemistry (WRF/Chem) [J]. Atmos. Environ., 44(29): 3568−3582. doi:10.1016/j.atmosenv.2010.05.056