

区域空气质量数值预报模型^{*}

安俊岭 王自发 黄美元 陶树旺 程新金

(中国科学院大气物理研究所大气边界层物理和大气化学国家重点实验室, 北京 100029)

叶 红

(北京轻工业学院自动化工程系, 北京 100037)

摘 要 给出了区域尺度空气质量数值预报模型的基本物理构架, 重点介绍了欧拉型输送/沉降模式对各种物理(沉降、输送)、化学(气相化学与液相化学)过程、初值与边界条件等问题的处理/简化; 利用本模型作了一周的预报实验, 实验结果与分析说明, 区域空气质量数值预报模型能够较好地反映全国重点城市的空气质量以及污染物随时间的演变态势; 最后, 指出了需要进一步完善的工作。

关键词 空气质量 空气质量周报 空气污染指数 数值预报模型

1 引言

我国经济的高速发展普遍改善了国民的生活条件, 但生存环境尤其是空气质量却在不断恶化。1997年的统计结果表明, 我国有相当数量的城市已处在较重的污染水平, 而且北方城市重于南方城市^[1]。统计城市中约72%的南方城市出现酸雨, 酸雨出现频率大于90%的城市有长沙、景德镇和遵义; 北方城市降水平均pH值低于5.6的城市有图们、青岛和太原。新近的研究结果指出, 北京地区也出现了酸雨^[2], 可在80年代末其降水pH值高于6.3^[3]。这说明我国的酸雨面积在继续扩大、北移; 以煤烟型为主, 主要污染物是SO₂和烟尘的空气污染问题仍相当严重。另外, 少数特大型城市如上海、广州、北京在煤烟型污染还未得到妥善解决的同时又向NO_x(主要由机动车辆排放)污染型转化^[4]。空气质量周报指出, 北京地区自1998年9月初开始至1999年1月(仍在继续)空气质量基本上维持在IV级水平(大风天气除外), 首要污染物为氮氧化物。总之, 全国大多数城市的空气质量已到了非治理不可的地步。1997年3月15日原国家环保局终于发出了《关于在重点城市开展空气污染周报工作有关问题的通知》, 全国各大城市很快相继通过新闻媒体向社会公布空气质量状况, 即空气质量周报^[4](城市空气质量在过去一周内的现状报告), 大大提高了公众对环境的关注意识, 也为空气质量预报的开展以及进一步业务化作了准备。

空气质量预报常用方法有两种, 即数值预报和统计预报, 各有所长。空气质量预报若按研究尺度的不同又可分为区域(尺度)预报和城市(尺度)预报两种。区域预报与城市预报是紧密相关的。前者为后者提供大背景场; 后者则通过局地效应来影响前者。

1999-05-10 收到

^{*} 中国科学院“九五”重大A项目KZ951-A1-403-03-03专题资助

城市预报与区域预报又是各有特色, 无法相互替代的。一些重要过程若不从区域尺度来着手解决, 那简直无法想象。如, 光化学反应生成的二次污染物 O_3 的生成和消毁本身就具有区域性, 即 O_3 的高值区一般在城市下风方向 100~200 km 范围内, 这已是观测事实; 空气中总悬浮颗粒物 (TSP) 的预报要涉及沙尘粒子, 而扬沙和沙尘暴现象往往不局限于某个城市或地区, 如 1988 年 4 月 9~23 日的黄沙输送过程, 从新疆塔克拉玛干开始, 经青海、黄土高原直插我国东部地区, 最东端到达日本, 最南端接近桂林, 几乎席卷了整个东亚^[5]; 另外, 若要有效、合理地控制空气污染, 污染物的减排规划方案设计必须从全局 (全国范围或一个较大的区域) 来考虑, 相邻的城市或地区必定存在着相互的影响和制约 (如输送)。由此可见, 区域尺度空气质量数值预报的开展是必不可少的。

数值预报除重视科学性外, 还必须考虑计算时效。在现有条件下, 有些物理、化学过程 (这些过程的完善有待于科学技术的发展和计算方法的改进以及计算条件的改善) 必须简化或参数化以达到节省计算时间的目的。本模式的设计也体现了此原则。

2 区域尺度空气质量数值预报模型

区域空气质量数值预报模型主要由气象模式和欧拉型输送/沉降模式两大部分构成, 基本物理构架见图 1。所涉及的各种物理、化学过程的处理或参数化介绍如下。

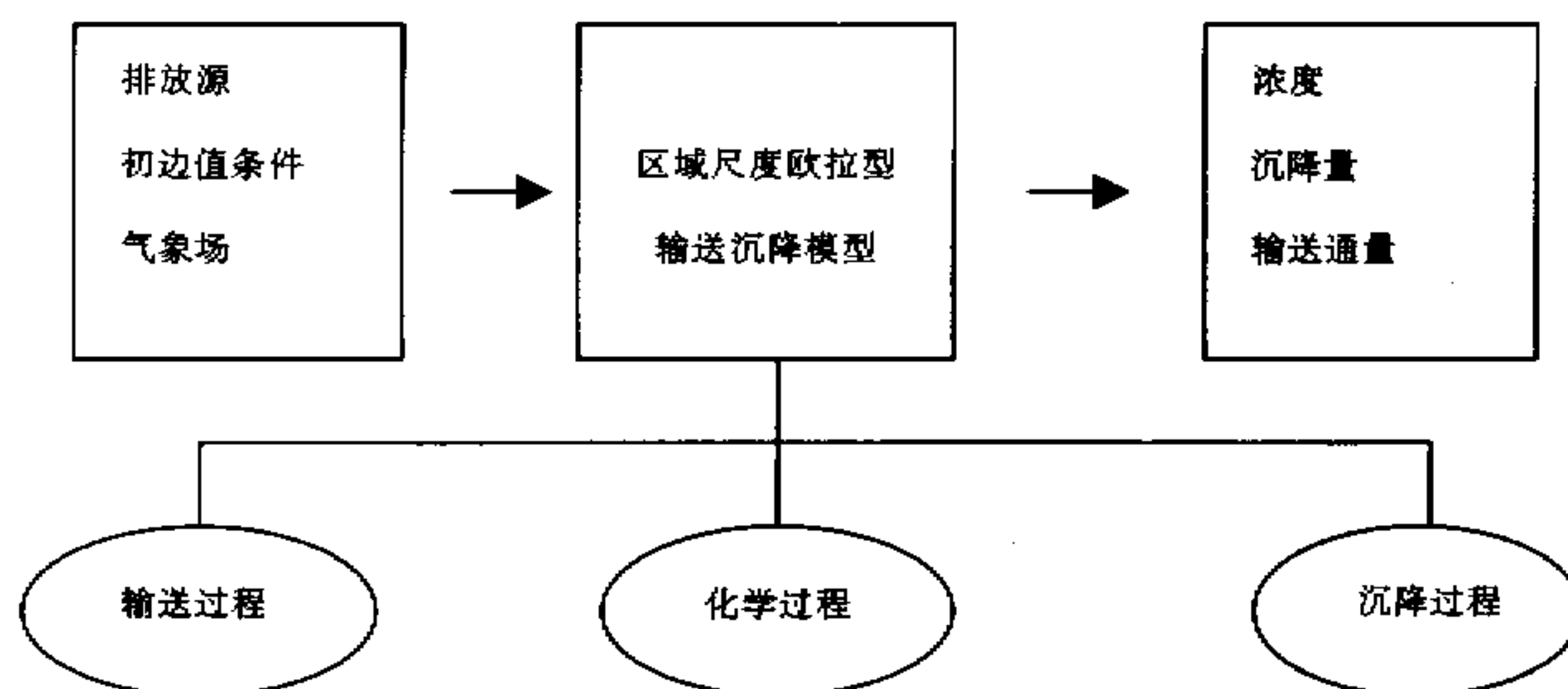


图 1 区域空气质量数值预报模型的物理框图

2.1 沉降过程

沉降过程包括干、湿两种沉降过程。干沉降过程是影响污染物浓度时空分布和长距离输送的重要过程, 一般由干沉降速度来表征。干沉降速度的大小随大气状况、污染物种类以及下垫面类型的不同会出现很大的变化。本模式选用阻力模型, 即假定污染物的干沉降速度与其在沉降过程中受到的阻力成反比^[6]。湿清除过程假定降水冲刷量决定于污染物浓度和雨水冲刷系数, 冲刷系数与雨强、雨滴谱分布以及各种污染物浓度有关^[7]。

2.2 输送过程

输送过程主要指平流和扩散过程。长距离污染物输送过程中, 水平湍流扩散项远小于水平输送项, 故可忽略。但垂直扩散是重要的, 特别是在边界层大气中具有重要作用。扩散系数的大小反映了大气湍流过程对污染物在水平和垂直方向上的输送能力, 它既取决于大气状态(如平均风速、风切变、大气稳定度等), 又与考虑的尺度有关。本模式目前未对边界层湍流进行参数化处理, 只对扩散系数作简单考虑, 取为常数。水平扩散系数取 $45 \text{ m}^2/\text{s}$, 垂直扩散系数在 1000 m 以下取 $10 \text{ m}^2/\text{s}$, 1000 m 之上取 $12 \text{ m}^2/\text{s}$, 其中包含了部分对流活动的贡献^[7,8]。模式的垂直分层是不等距的, 下层每层的厚度较薄, 上层厚度较厚。

2.3 化学过程

化学过程既包括气相化学过程又涉及液相化学过程。气相化学机制有两种选择, 即碳键 IV (CBM IV) 机制与简单区域性光化学模式 (SRAS)。前者可参阅文献[9]; 后者是何东阳和黄美元在 Atkinson (CBM IV) 基础上简化得到的可用于区域尺度空气质量模拟的化学模式^[10]。高会旺等^[11]又在该模式中加入了一些重要的硫化学反应, 使得该化学模型目前含有 31 个物种、52 个反应方程。安俊岭等^[12]通过比较 SRAS 模型与 LLA-C 光化学机制^[13]的模拟结果, 并结合我国城市光化学污染的现状, 对 SRAS 模型在中国区域空气质量模拟的可行性作了肯定回答。为了节省计算时间, 可对该模型进行数值实验, 找出一些影响气相氧化率的主要因子(如光强、温度、湿度、物种浓度等), 根据一定的标准(如氧化率的改变不大于 $0.1\%/\text{h}$), 把这些因子(在输送模型中可以直接得到的物理、化学参量)分为不同的档, 然后应用本气相化学模式计算各种分档组合下化学物种的气相转化率, 得出气相转化率的查算表。在输送模型中不用求解光化学方程, 直接根据不同的条件, 用查表法得到化学物种的气相转化率。这种方法的精度取决于选择因子和分档的粗细。

液相氧化过程参照国外的一些文献, 对化学物种的液相氧化率取为不同的常数。对有云的网格点, 化学物种的总氧化率定义为液相氧化速率和气相氧化速率的总和^[7]。

2.4 计算方法、模式区域及边界的处理

污染物输送方程的差分格式必须满足质量守恒关系, 特别是平流项的差分方法, 如果选择不当很容易引起计算不稳定。为了满足质量守恒方程, 本模式采用交错网格, 网格垂直方向不等间距地分为 8 层(采用 σ 坐标), 最低层约 50 m 。高度 ΔH 与浓度 c 分布在同一点上, 垂直速度分布在两层的交界面上, 其他变量分布在每一层的中间。变量在空间格点上的分布见图 2^[7]。

输送项的差分格式采用迎风格式, 湍流扩散项选用中央差分^[7]。

模式的边界对模拟结果有一定的影响。模式侧边界应尽可能离模拟区域远一些, 并且最好在侧边界附近没有污染源存在, 这样处理边界条件时便可以选取背景值作为边界条件。模式水平范围为 ($98 \sim 146^\circ\text{E}$, $16 \sim 50^\circ\text{N}$), 水平网格距是 $1^\circ \times 1^\circ$ 。侧边界为单向面, 允许物质流出但不许流入。上边界为封闭面, 下边界为吸收边界^[7,8]。

2.5 输入资料与气象场

排放源资料中国大陆采用国家环保局公布的资料, 其他地区选用 Akimoto^[14]的排放源资料。资料的处理方法也类似于 Akimoto 的方法。日本的火山对硫沉降的影响很

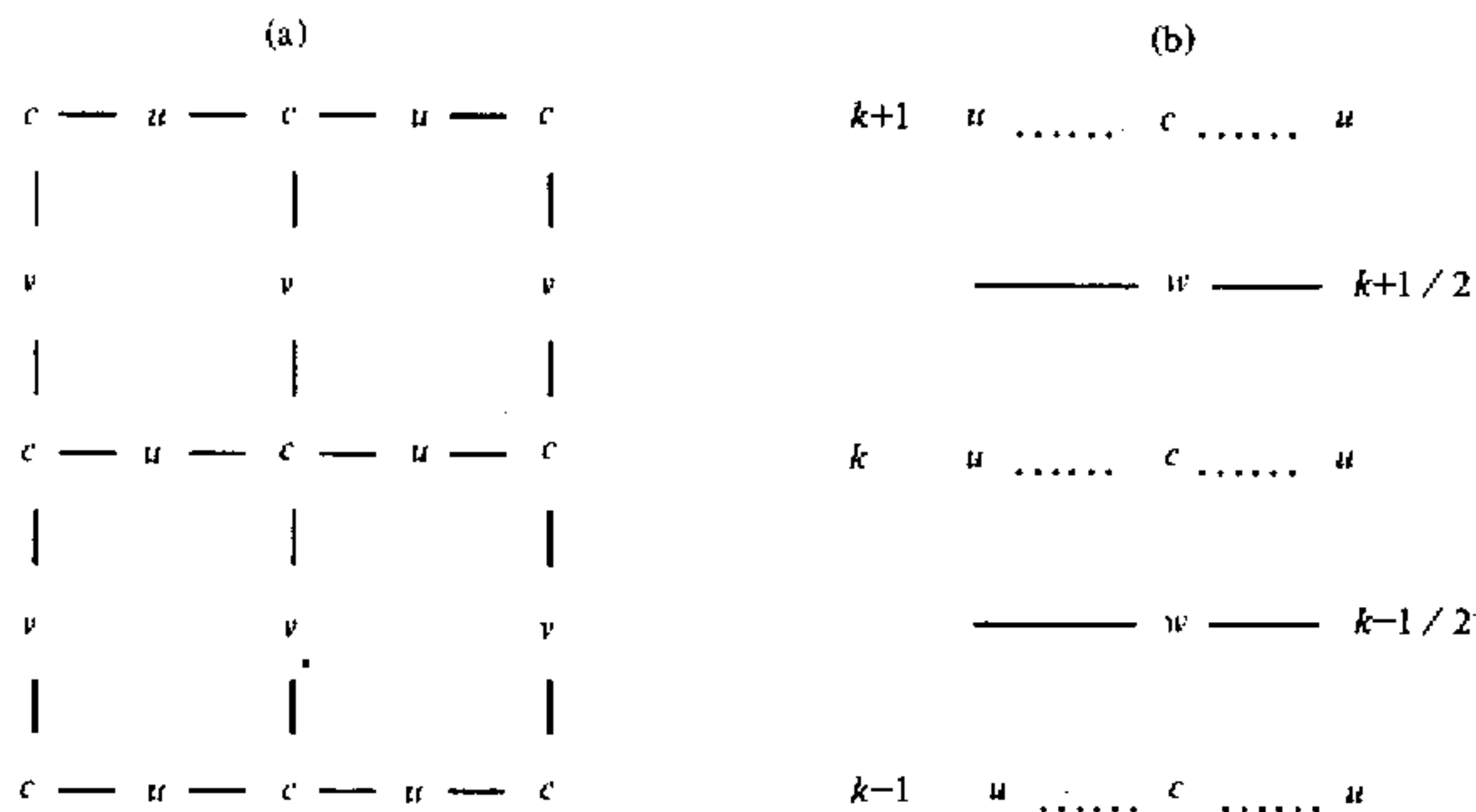


图2 变量在格点上的分布
(a) 水平分布; (b) 垂直分布

大, 因此加入了日本火山源的资料。地面植被资料来源于卫星遥感, 并按照 MM4 分类法归为 8 类: 城市、农作物、草原、森林、灌木、沙漠(荒原)、水面、农草混合下垫面。地形资料来自中国科学院大气物理所资料中心的平均地形资料。对流层高度随季节、纬度而变化, 一般来说, 低纬度地区对流层顶高, 高纬度地区对流层顶低, 本模型南端取 11 km, 北端取 9 km, 中间随纬度线性变化。

气象场选用宇如聪等^[15]设计的考虑陡峭地形的 E 网格有限区域数值预报模式(LASG-REM)。LASG-REM 模式垂直坐标选用 η 坐标, η 坐标保留了 σ 坐标的优点, 又避免了在陡峭地形情况下等值面过于倾斜带来的误差。该模式成功预报了一些典型天气并应用于 1993 年和 1994 年的汛期预报, 得到了合理的效果。

3 数值预报实验

利用区域尺度空气质量数值预报模型对全国空气质量作了一周(1998 年 10 月 23~29 日, 冷空气活动频繁, 出现了大风和降水天气)预报。这一周以化学物种(NO_x 、 SO_2 等)为首要污染物的全国重点城市的污染指数(计算方法参见文献[16])与空气质量(质量等级也参考文献[16])观测值(《中国环境报》刊登的重点城市空气质量周报)和模拟结果列于表 1。

表1 1998 年 10 月 23~29 日以化学物种为首要污染物的全国重点城市
空气质量模拟值与观测结果比较

城 市	污染指数观测值	污染指数模拟值	空气质量	首要污染物
北 京	215	211	IV	NO_x
重 庆	202	225	IV	SO_2
长 沙	103	120	III	SO_2
贵 阳	141	189	III	SO_2

从表 1 可以看出, 区域空气质量数值预报模型合理地给出了预报结果(空气质量与首要污染物)。不过, 污染指数均比实测值要高(北京除外)。实测值这里指地面观测结果, 模拟值是距地面 50 m 左右的预报值。从理论上讲, 模拟结果应当小于或等于观测值。这种反常现象的出现很可能是污染源调查不准确所致。这一周首要污染物为总悬浮颗粒物 TSP(非化学物种)的主要城市也有不少, 其中污染最重的是兰州和西宁。这两地的空气质量分别达到了 V 级和 IV 级水平。本模型之所以未给出预报结果, 是由于 TSP 的来源相当分散, 不确定性极大, 加之各种下垫面的起沙机制还很不成熟。这方面的完善有待大量野外观测实验或物理模拟实验的开展。

为了更清楚地了解污染物随时间的演变趋势, 本文给出了同一天(1998 年 10 月 25 日)不同时刻(世界时)的预报结果(图 3~7)。这天北京周边地区的天气实况是阴有中雨。

图 3、4 指出北京地区降水前(00 UT)后(12 UT)近地面层以及高空的 NO_x 浓度减低了不少。 SO_2 浓度的变化也是如此(限于篇幅, 未给出)。对比图 3 与图 4 不难发现, 低层 NO_x 浓度较高、分布范围也较广, 高层正好相反, 这说明区域空气质量数值预报模型较好地反映了实际物理过程。除 NO_x 与 SO_2 外, 降水过程对臭氧的清除作

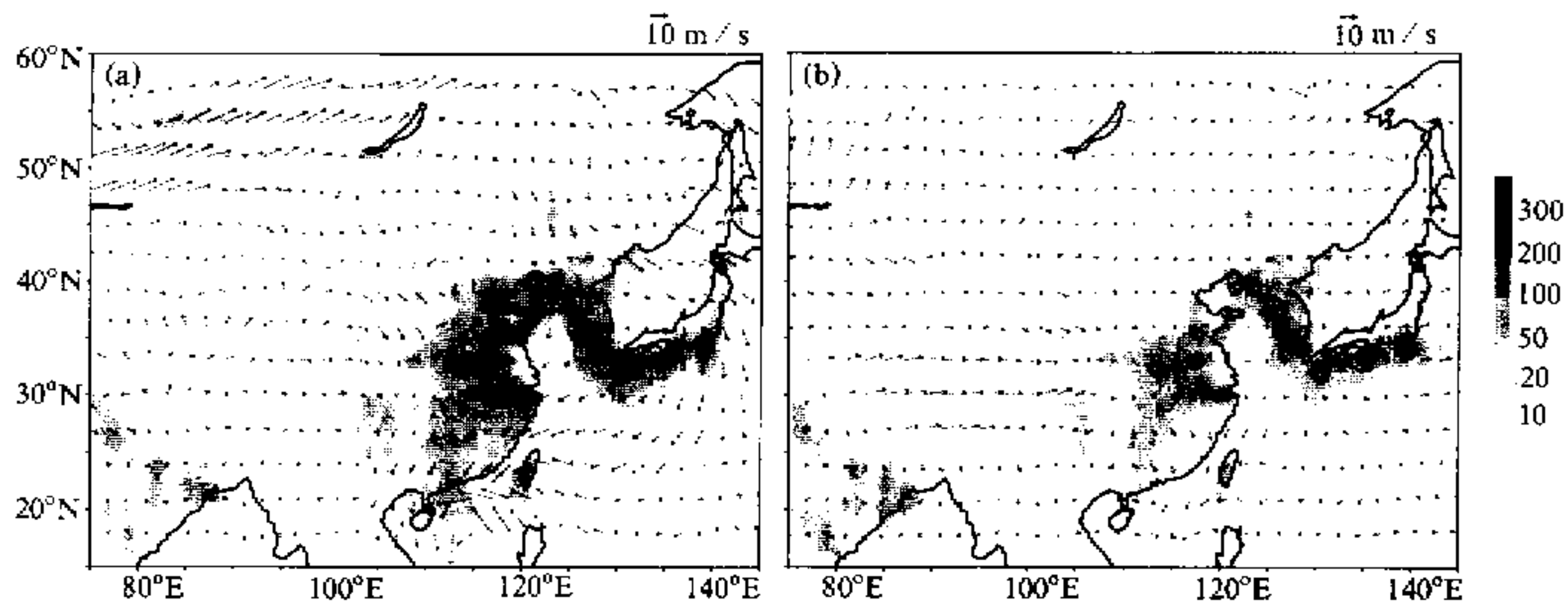


图 3 1998 年 10 月 25 日不同时刻近地面层 NO_x 体积分数 (10^{-9}) 的预报结果
(a) 00 UT; (b) 12 UT。箭头表示风场

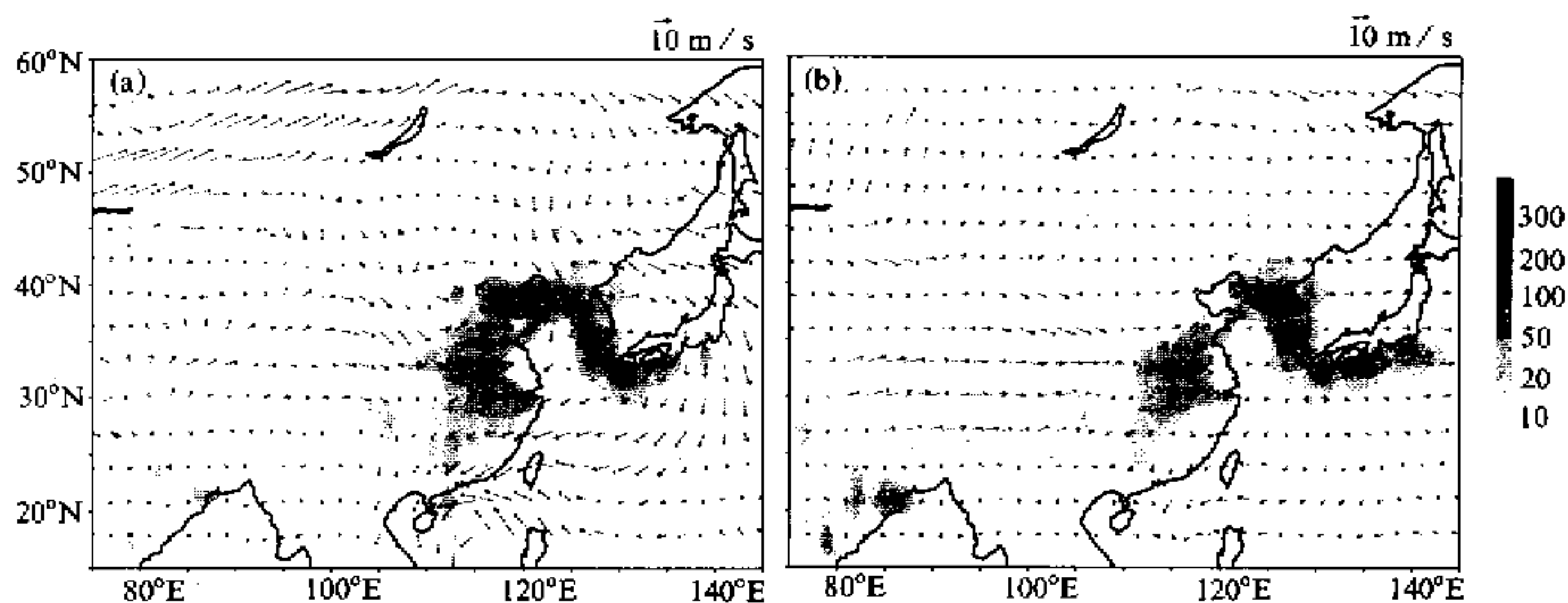


图 4 1998 年 10 月 25 日不同时刻 1.2 km 高空处 NO_x 体积分数 (10^{-9}) 的预报结果
(a) 00 UT; (b) 12 UT。箭头表示风场

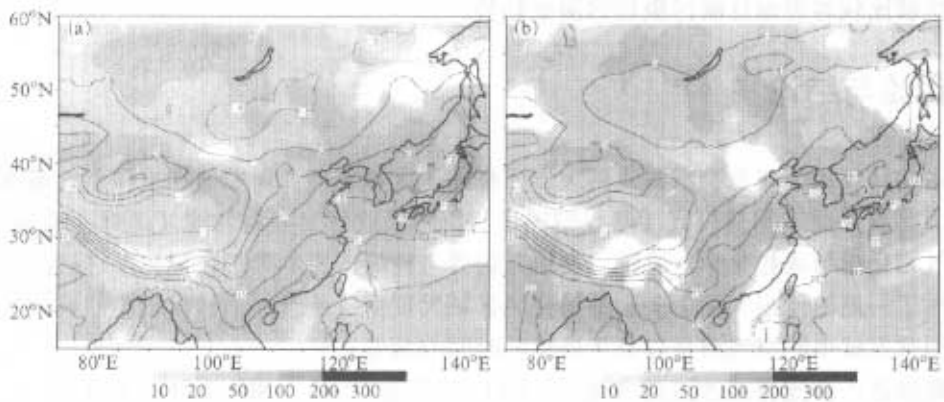


图 5 1998 年 10 月 25 日不同时刻近地面层 O_3 体积分数 (10^{-9}) 的预报结果
(a) 00 UT; (b) 12 UT. 等值线为温度

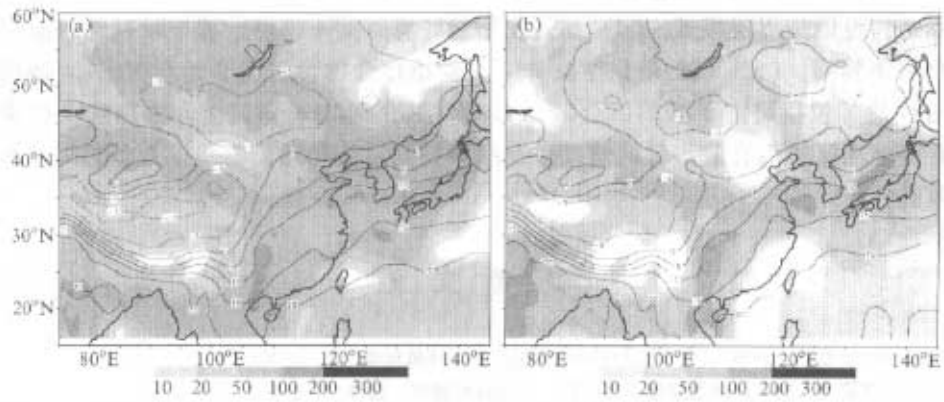


图 6 1998 年 10 月 25 日不同时刻 1.2 km 高空处 O_3 体积分数 (10^{-9}) 的预报结果
(a) 00 UT; (b) 12 UT. 等值线为温度

用也非常显著。降水过后北京近地面层与高空的 O_3 浓度明显降低 (图 5、6)。从图 6 上还可看出, 在大陆上空 (00 UT 时, 范围: 105°E 、 20°N ~ 30°N ; 12 UT 时, 范围: 105°E 、 16°N ~ 30°N) 1.2 km 处出现了一条形 O_3 高值区, 体积分数约为 100×10^{-9} , 其成因还有待进一步的研究。图 3~6 反映的是整个研究区域内污染物预报浓度的分布状况。图 7 为单个地区污染物 (NO_x 、 O_3 、 SO_2) 浓度的连续演变形态, 很明显, 图 7 完整、合理地描绘了降水过程对 NO_x 、 O_3 、 SO_2 的有效清除作用。以上的实验结果比较和分析说明, 区域尺度空气质量数值预报

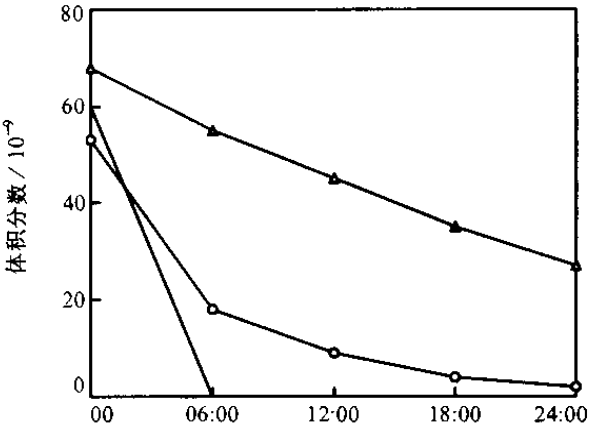


图 7 北京地区近地面层污染物
预报体积分数随时间的变化
实线、空心圆和三角连线分别代表 NO_x 、 O_3 和 SO_2

模型能够比较客观地反映污染物的演变趋势。

4 讨论与结论

本文从气象模式与物质模式两大方面描述了区域空气质量数值预报模型的基本物理构架,重点介绍了物质模式(欧拉型输送/沉降模式)对各种物理(沉降、输送)、化学(气相化学与液相化学)过程、初值与边界条件等问题的处理或简化。之后,运用本模型作了一周的预报实验。实验结果说明区域尺度空气质量数值预报模型能够较好地反映全国重点城市的空气质量以及污染物随时间的演变态势。

需要进一步完善或改进的方面有:(1)污染源(NO_x 、 SO_2 、 CO 、 CH_4 等),尤其是 TSP 与非甲烷烃来源的调查必须加强。(2)监测资料,特别是高空多层污染物浓度的监测资料极少,给模式验证带来了极大的困难。(3)需要一个能够很好反映近地层污染物输送特性的边界层模式。(4)如何在增加计算时间不多的前提下较好地将液相化学过程引入本模型。(5)TSP 中化学成分(主要指化合物含量而非元素构成),特别是各种可溶性盐(包括可溶于酸的部分,如 CaCO_3) 的确定迫切需要大大加强,这项工作的完善对酸雨区或潜在酸雨区的演变以及酸雨控制对策和污染物减排方案的实施有着举足轻重的作用。

参 考 文 献

- 1 国家环境保护总局, 1998, 1997 年中国环境状况公报, 环境保护, 7, 3~8.
- 2 王文兴、张婉华, 1997, 论北京降水的酸性, 环境科学研究, 10(4), 6~9.
- 3 中国环境科学学会, 1989, 酸雨文集, 北京: 中国环境科学出版社, 228~230.
- 4 万本太, 1998, 城市空气质量周报的意义及其作用, 环境保护, 6, 5~7.
- 5 黄美元、王自发, 1998, 东亚地区黄沙长距离输送模式设计, 大气科学, 22(4), 625~637.
- 6 Gao Huiwang, Huang Meiyuan and An Junling, 1998, Numerical studies of effects of source, dry deposition and gas-phase chemistry on sulfur deposition, *Chinese Journal of Atmospheric Sciences*, 22(1), 39~45.
- 7 王自发、黄美元、何东阳、徐华英、周玲, 1997, 关于我国和东亚酸性物质的输送研究 I. 三维欧拉污染物输送实用模式, 大气科学, 21(3), 366~378.
- 8 Huang Meiyuan, Wang Zifa, He Dongyang, Xu Huaying and Zhou Ling, 1995, Modeling studies on sulfur deposition and transport in East Asia, *Water Air Soil Pollution*, 85(4), 1921~1926.
- 9 Gery M. W., G. Z. Whitten, J. P. Killus and M. C. Dodge, 1989, A photochemical kinetics mechanism for urban and regional scale computer modelling, *J. Geophys. Res.*, 94(D10), 12925~12956.
- 10 何东阳、黄美元, 1992, 一个适用于区域性大气环境模拟的大气光化学模式, 环境科学学报, 12(2), 182~192.
- 11 Gao Huiwang, Huang Meiyuan and Xu Huaying, 1997, The heterogeneous oxidation of SO_2 on aerosol surface, *Science in China (Series D)*, 40(5), 518~523.
- 12 安俊岭、高会旺、王自发、黄美元等, 1999, 区域性光化学模式与 LLA-C 机制的模拟性能比较, 大气科学, 23(4), 422~426.
- 13 Lurmann, F. W., A. C. Lloyd and R. Atkinson, 1986, A chemical mechanism for use in long-range transport/acid deposition computer modelling, *J. Geophys. Res.*, 91, 10905~10936.
- 14 Akimoto H., 1994, Distribution of SO_2 , NO_x and CO_2 emissions from fuel combustion and industrial activities in Asia with $1^\circ \times 1^\circ$ resolution, *Atmos. Environ.*, 28, 213~225.
- 15 宇如聪, 1989, 陡峭地形有限区域数值预报模式设计, 大气科学, 13, 139~149.

16 范元中, 1998, 空气污染指数计算程序, 环境保护, 8, 19~20.

Numerical Regional-Scale Air Quality Forecast Model

An Junling, Wang Zifa, Huang Meiyuan, Tao Shuwang and Cheng Xinjin

*(State Key Laboratory of Atmospheric Boundary Layer Physics and Atmospheric Chemistry,
Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029)*

Ye Hong

(Department of Automation Engineering, Beijing Institute of Light Industry, Beijing 100037)

Abstract The paper gives a general description of the numerical regional-scale air quality forecast model, with emphasis on solution schemes for all possible processes (emissions, transport, deposition, chemistry, and initial and boundary conditions) considered in the Eulerian transport/deposition model. One-week regional-scale air quality is forecasted using the numerical model. Comparison and analysis indicate that the air quality of key cities over China and the time evolution of pollutants over the whole area of China can well be forecasted by the numerical model. Further improvements in some important aspects are needed and presented.

Key words air quality air quality weekly report air pollution index numerical forecast model