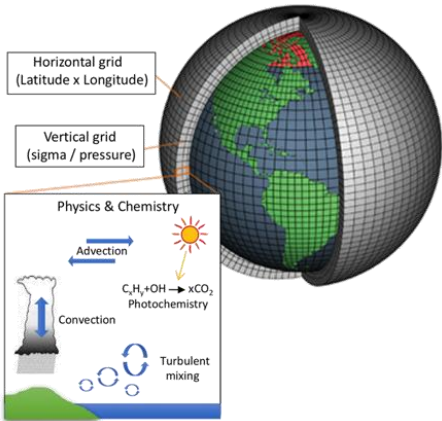


第十章 数值模式



10.1 模式及其基本方程

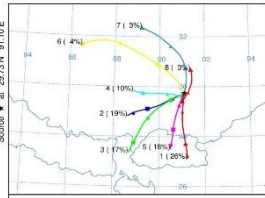
10.1.1 概念与分类

10.1.1.1 基本概念

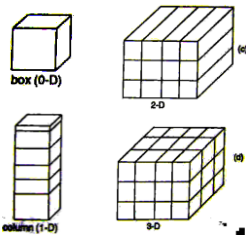
- 解决问题** ① 污染源追踪、污染源对污染物的贡献 ② 协同控制模拟、最有效的治理污染的策略
③ 特定减排对空气质量的影响 ④ 未来预测
- 概念** **空气质量模式**是用于空气质量研究的一种**数学工具**，它建立在**科学的理论和假设**基础上，用**数值方法**描述大气中污染物的**传输、扩散、化学反应以及清除过程**，通过**输入**研究地区的**源排放、地形以及气象资料**、运行模式得到该地区的**空气质量数据** (Seinfeld, 1988)。
- 功能层次** 空气质量模式在功能结构上包括四个层次：
① **物理模型**：通过一系列假设和近似，将真实的物理问题简化为理想的**物理模型**，并保持原有问题的重要的、本质的特征。
② **数学模型**：描述理想物理体系的基本**数学关系**和附设条件。
③ **数值解法**：解基本方程的**数值算法**。 ④ **程序**：具体执行计算的**计算机程序和代码**。

10.1.1.2 模式的分类

- 空间尺度** **微尺度**(南信大的模拟)、**城市尺度**、**区域尺度**(长三角或中国)、**大陆尺度模式**(亚洲地区)和**全球尺度**。
- | 模式分类 | 典型模拟域范围大小 | 典型空间分辨率 |
|------|----------------------------|--------------|
| 微尺度 | 200 m × 200 m × 100 m | 5 m |
| 中尺度 | 100 km × 100 km × 5 km | 2 km (城市尺度) |
| 区域尺度 | 1000 km × 1000 km × 10 km | 20 km |
| 天气尺度 | 3000 km × 3000 km × 20 km | 80 km (大陆尺度) |
| 全球尺度 | 65000km × 65000 km × 20 km | 2°×2° |
- 注意**：有时模式可能有空间嵌套，在某些研究兴趣点做更加精细的网格。
- 时间尺度** **短期模式和长期模式**
短期模式：持续时间相对较短的大气环境事件或污染过程（几天-几十天）
长期模式：长时间的年际差异或气候变化（一年或几年）
- 扩散方法** 按照对**扩散描述方法**分类：**拉格朗日模式和欧拉模式**。
拉格朗日模式：使用**移动的坐标系**描述某一污染气团的传输，又称**轨迹模式**。
欧拉模式：使用**固定的坐标系**描述某一**位置处**污染物的浓度变化。
- 空间维数** **零维、一维、二维、三维模式**
零维：**盒子模式**，假设盒子内污染物均匀分布，其浓度与空间位置无关仅随时间变化， $C(t)$
只考虑**化学反应机制**，忽略传输、扩散等内容。
一维：**柱子模式**，关注浓度随高度变化， $C(z, t)$
二维：**二维全球模式**，假设浓度是纬度和高度的函数，与经度无关， $C(x, z, t)$
三维：**大气化学传输模式**，考虑污染物浓度在整个空间维数上的变化， $C(x, y, z, t)$
- 研究问题** 按照研究的大气环境问题分类：**光化学烟雾模式、酸沉降模式、气溶胶模式、综合空气质量模式**。
光化学烟雾模式：**气相**光化学反应，不考虑液相化学和气溶胶化学。
酸沉降模式： NO_x 和 SO_2 的**气相、液相氧化过程**及**成云去除过程**，同时涉及气相液相和气溶胶化学。
气溶胶模式：**气溶胶化学和物理过程**的表达，同时涉及气相和气溶胶的化学反应与转化过程。
综合空气质量模式：包含所有模块，将整个大气作为研究对象同时模拟**多种类型的大气污染问题**。



拉格朗日模式



10.1.1.3 模式发展的历史

- 第一代** 20 世纪 60 年代-80 年代：第一代空气质量模式，以局地烟流扩散模式以及盒子模式、拉格朗日轨迹模式为主要代表。
- 第二代** 20 世纪 70 年代末：逐步形成了以欧拉网格模型为主的第二代空气质量模式
- 第三代** 从 20 世纪 90 年代起，美国环保局开始致力于开发第三代空气质量模拟系统 Models-3

10.1.2 模拟系统的框架结构

框架结构 模拟研究以**空气质量模式**为核心、包括**气象场**和**污染源排放**的输入、对初始条件和边界条件的设定以及对于**模拟结果**的分析和运用等。

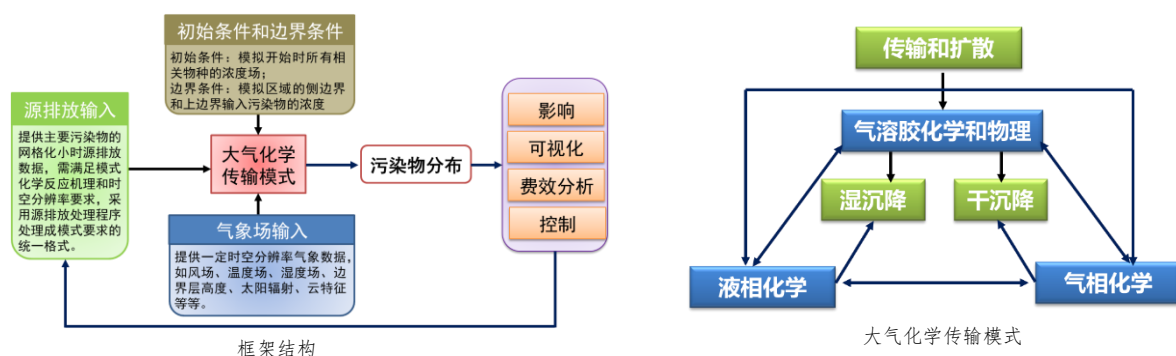
气象场 提供一定时空分辨率的气象数据，如地形、气象观测资料、辐射

源排放输入 提供主要污染物的**网格化小时源排放数据**，需满足模式化学反应机理和时空分辨率要求，采用源排放处理程序处理成模式要求的统一格式。输入如人口、道路、土地使用、工业、气象。

边界条件 模拟区域的**侧边界和上边界输入污染物的浓度**。

初始条件 模拟开始时所有相关物种的浓度场。模式要达到稳定的状态，需要提前模拟一段时间（如 6 个月）。

质量模式 包含传输和扩散、湿沉降、干沉降；气溶胶化学和物理、气相化学、液相化学。



10.1.3 基本方程

连续性方程 描述污染物的化学反应、气象传输和扩散、沉降以及源排放等过程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (u\rho)}{\partial x} + \frac{\partial (v\rho)}{\partial y} + \frac{\partial (w\rho)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \rho}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \rho}{\partial z} \right) + R + S$$

其中 ρ 气体的浓度， t 时间， u, v, w 风速分量， K_x, K_y, K_z 水平和垂直扩散系数， S 污染物的源和汇， R 化学反应项，污染物在大气中的化学转化

算符分离
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \left[- \left(\frac{\partial (u\rho)}{\partial x} + \frac{\partial (v\rho)}{\partial y} + \frac{\partial (w\rho)}{\partial z} \right) \right] + \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \rho}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \rho}{\partial z} \right) \right] + [R + S]$$

平流项： $-\nabla \cdot (U\rho)$

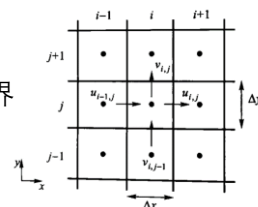
湍流项： $\nabla \cdot (K\nabla \cdot \rho)$

化学项： $P - L$

上述方法称为算符分离。需要注意，该方法是建立在**平流、湍流、化学过程彼此独立**的假设基础上，因此**时间步长必须足够小**，以保证假设在时间步长内合理。

空间离散化 将整个研究区域划分成网格分别进行计算 $\rho(i, j, k, t)$

仅显示二维空间部分，圆点代表计算浓度的网格点，线代表计算传输通量的网格边界



10.2 主要大气化学传输模式

10.2.1 光化学氧化模式

10.2.1.1 基本内容

光化学污染 天然源 *Biogenic* 和人为源 *Anthropogenic* 排放的 **NO_x 和 VOCs** 等污染物在**阳光照射**和**一定的气象条件下**能够发生一系列复杂的反应，产生出**氧化性很强的产物**，如臭氧、醛类 RCHO、PAN 等。

氧化模式 以**光化学烟雾污染**为主要研究对象，模拟光化学烟雾污染的发生、演变过程的空气质量模式。

- 用途**
- ① 研究臭氧的生成机制和各种影响因素的作用
 - ② 探讨控制 NO_x、VOCs 等前体物排放对于控制光化学烟雾污染的效果，为制定有关控制方案和对策提供科学的依据和支持。

10.2.1.2 归纳化学机理

归纳机理 根据 VOCs 的分子结构、类别及反应活性对光化学反应**进行归类处理**。

碳键机理 按**分子结构**进行归纳的机理，该机理以分子中的**碳键**为反应单元，将**成键状态相同的碳原子看作一类**，而不考虑碳原子所在的分子结构。即根据有机化合物官能团及反应活性对有机物进行分类。

SAPRC 机理 按**不同有机分子与 OH 的反应活性进行分类**。

RADM2 机理 对碳氢处理采用固定参数化的方法，**按照不同污染物和 OH 的反应速率进行分类**。

MPRM 机理 根据**有机化合物性质分类**，Morphocules 代表一组有机物，由若干 allomorphs 子物种组成，后者代表一个或几个性质类似的有机物。

10.2.1.3 特定化学机理

特定机理 **详细列出**光化学反应中所包括的反应物、中间产物、产物及反应速率的反应机理。

现状 其对**计算机容量和计算速度要求很高**，目前的空气质量模式中**一般不直接使用特定机理**，是以特定机理为基础，按照一定的方法进行归纳、合并，提出归纳机理，用于模拟计算。

MCM 1997 年首次提出，最新版本 MCMv3.3.1。包括 142 种一次排放有机物的多步氧化反应。

10.2.1.4 总体特点

拉格朗日 模拟城市尺度的臭氧事件及污染物的长距离问题，缺少对重要物理过程的描述。

欧拉模式 盒子模式(如 EKMA)和多维网格模式，数据输入输出吞吐量极大。

- 特点**
- ① 采用了**精致的气相化学反应机理** (如 CB、SAPRC 等)
 - ② **气象过程不复杂**，无法考虑云过程和液相化学或简单湿沉降
 - ③ 需要输入**详细的气象资料和源排放资料**
 - ④ 对 O₃ 模拟的总误差平均在 25-30%，近年来引入气溶胶模块，探究异相反应对 O₃ 影响及 O₃ 与气溶胶的耦合作用
 - ⑤ 一般为边界层模式(2-4km),多尺度嵌套模式顶较高分层多 (15 层) 垂直混合模拟能力更强
 - ⑥ 可以城市尺度、区域尺度和多尺度嵌套

10.2.2 气溶胶模式

气溶胶 **液体或固体微粒**均匀分散在气体中所形成的相对稳定的悬浮体系，包括硫酸盐、硝酸盐、铵盐、钠盐、氯化物、水、有机物、元素碳、痕量金属等。

气溶胶模式 对气溶胶粒子在大气中物理、化学过程处理方法分为**动力学模式和热力学平衡模式**两类。

动力学模式：主要考虑**气溶胶形成的动力学过程**：核化、凝结、蒸发、化学转化、传输和扩散等。

热力学平衡模式：主要考虑**气体和粒子之间的热力学平衡过程**，通过计算使得整个化学体系**吉布斯自由能最小**来确定气相、液相、气溶胶的各组分平衡浓度。

现状：气溶胶动力学模块计算量要求很高，计算时间较长，并且受到动力学过程处理上的复杂性的限制，因此，在目前的大气气溶胶模拟中仍然**广泛应用热力学平衡模式**。

10.2.3 酸沉降模式

酸沉降 大气中的**酸通过降水**(如雨、雾、雪等)迁移到地表，或在**含酸气团气流的作用下**直接迁移到地表。

酸沉降模式 以**大气酸沉降问题**为主要研究对象，模拟酸沉降的发生、发展过程的模式。

用途 ① 预测酸性物质**浓度和沉降速率的时空分布** ② 研究各种因素的作用以及对大气环境造成的影响

- 特点**
- ① 主要的酸沉降模式都是**区域模式**
 - ② 考虑云模式和液相化学比较详尽，**着重考虑湿清除机制**，液相化学以硫化学为主
 - ③ 模式层顶**高至对流层顶或平流层**，研究污染物垂直混合过程
 - ④ 采用光化学氧化模式的气相化学机理 (如 RADM2, SARPC 等)
 - ⑤ 对**硫酸盐沉降**浓度模拟较好，对 H⁺, NO₃⁻, NH₄⁺ 模拟偏差相对高
 - ⑥ 具有模拟光化学氧化的能力

10.2.4 综合空气质量模式

10.2.4.1 总体特点

综合模式 综合空气质量模型将对流层大气作为一个整体来描述，以多种类型污染问题为模拟对象。

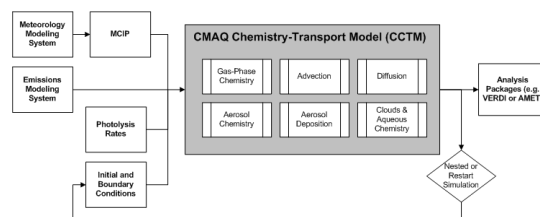
- 总体特点**
- ① 基于“一个大气”的思想，各种污染物通过化学反应紧密联系起来。
 - ② 很好的通用性，采用广义坐标系，空间上进行多尺度、多层次网格模拟，标准输入输出数据接口。
 - ③ 灵活的模块化结构，可供选择的模块库和算法库。
 - ④ 很强的开放性和扩展性，便于引入新的研究成果和数值模拟技术。

10.2.4.2 CMAQ 模式

模式简介 美国环保局发展的第三代空气质量模拟系统 Models-3 中的多尺度空气质量模式(CMAQ)

模式模块

- ① 初始条件模块(ICON)
- ② 边界条件模块(BCON)
- ③ 光解速率模块(JPROC)
- ④ 源排放数据预处理接口模块（由 SMOKE 模式替代）
- ⑤ 气象数据预处理模块(MCIP)(处理 MM5,WRF 等气象模型输出数据为 CMAQ 可读格式)
- ⑥ 化学传输模块(CCTM)



10.3 模式的评价与应用

10.3.1 性能评价

评价类型 空气质量模式的评价包括**操作评价(operational evaluation)**和**诊断评价(diagnostic evaluation)**两种类型

操作评价 模式检验，源排放、气象和污染物监测资料与模拟结果比对，计算一系列**统计特征量**（平均分数偏差、平均分数误差、相关性分析、浓度分布分析等）**量化模式**的误差。

诊断评价 **输入资料、模式设置是否合理**，帮助确定模式的欠缺，寻找模拟失败的原因，对**模式的性能**进行评价。
敏感性分析：模块或化学机理；模式参数化方案、数值解析法、模式结构、输入数据；输入数据对输出源和受体关系的影响。