

大气平流扩散的箱格预报模型与污染潜势指数预报*

徐大海 朱 蓉

(中国气象科学研究院, 北京 100081)

提 要

该文在对平流扩散方程积分的基础上, 建立了对初始浓度有记忆力, 并对非相邻地区的浓度有感受力的箱格预报模式, 该模式的框架可用于各种时、空间尺度或多尺度的空气污染预测、预报. 文中还定义了物理意义明确的空气污染潜势指数 PPI 以反映大气通风扩散稀释和干、湿沉降清除大气污染物的总能力, 结合天气预报模式和箱格预报模式则可进行空气污染潜势预报. 给出了对源强和浓度监测要求灵活的空气污染指数 PSI 的预报公式和方法. 在仅使用常规浓度监测资料的条件下, 检验了该文的基本方法, 其结果看来是可接受的.

关键词: 大气污染 箱格预报模式 穿越性 空气污染潜势预报

引 言

在 20 世纪中后期, 全球社会经济和工业化过程的飞速发展, 人口急剧的增长给大气环境带来了前所未有的巨大压力, 人们越来越认识到保护人类赖以生存的大气环境的重要性与紧迫性. 从 50 年代后期起, 一些国家为了控制或减少危险大气污染事件的发生, 开始进行大气污染气象条件预报(污染潜势预报), 例如 WMO 的 121 期技术报告中就介绍了 70 年代前后的许多污染潜势的预报方法, 其中有使用统计表对各种气象要素及其组合加权记分的预报法, 也有直接用箱模式导出的标准化浓度 X/Q (X 为混合层内污染物平均浓度, Q 为面源源强) 作为污染潜势或空气停滞指标, 因为按标准化浓度计算公式 $X/Q = L/(2HV)$, 它仅与城市尺度 L , 混合层厚 H 及混合层内的平均风速 V 有关. 我国在 1980 年秋冬到 1981 年春也进行过一次北京的城市空气污染气象预报试验^[1], 这是一次以天气学方法为主, 兼采用经验统计表法的主观定性预报. 后来的 3 个五年计划里, 我国污染气象条件方面的研究工作大多是在制定大气污染物排放标准、大气环境影响评价、酸雨成因研究、气候变化等重大项目中配合进行的. 在这个阶段, 积累了许多国内研制和国外引进的大量各种尺度、各种类型的有关大气污染物传输、扩散和化学演变模式. 例如用于区域酸沉降的 RAMS 系统, 用于区域和全球烟云扩散、轨迹计算的先进的 Hypsplit 模式等等都已引入我国. 同时也为这些模式积累了许多污染气象或气候参数, 加之近年来计算技术的高度发展, 为当前开展大气污染浓度预报和潜势预报都奠定了一定的基础.

* 1999-04-21 收到, 1999-06-02 收到修改稿.

大气污染物的浓度预报,可分统计预报和数值预报两类,统计预报是将历史上的污染物的浓度监测值与前期的气象条件(气象要素及其时空分布、天气类型)联系起来,建立具有一定信度的统计关系并利用该关系对未来的污染物浓度进行预报.一般而言,在有长期的监测数据的城市,应用统计方法进行预报是不困难的.如果建立统计关系前后的城市大气污染物的排放源的源强及其时空分布没有太大的变化,统计预报的效果也是相当好的.大气污染物浓度数值预报,一般是在气象场预报模式的基础上数值求解污染物的有源汇传输扩散方程,需要较详尽的源强及其时空分布资料和时空分辨率很高的气象预报模式,在目前条件下,用上述思路进行的浓度预报只能在有条件的个别城市进行.

在全国范围内则可进行污染气象条件或大气污染潜势指数预报,它将在大尺度范围内给城市大气污染浓度预报提供有意义的气象背景.为了预报大气污染潜势,本文对平流扩散方程积分后进行了物理分析,建立了对实时监测浓度有记忆能力且能感受非临近地区浓度的箱格积分模型,找出了能代表大气对污染物清除或稀释能力的量,即大气污染潜势指数 PPI ,并将它与可预报的气象要素联系起来.此外本文还在潜势预报的基础上发展了由前期污染物浓度及气象场监测值进行浓度预报的无源参数的箱格数值预报模式,并给出了该模式在一些台站的业务预报试验的结果.

1 平流扩散方程的积分与箱格预报模型的建立

1.1 平流扩散方程的积分

如果大气污染物浓度 c 是由体积 τ 内若干位于 $\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ 源强分别为 q_i 源产生,风速为 \vec{V} ,湍流交换系数为二阶张量 \vec{k} ,干沉降速度为 \vec{v}_d ,湿沉降速度为 \vec{v}_w ,降水率为 R ,降水清洗比为 w_r ,那么大气中气载污染物不考虑化学反应的平流扩散方程,按污染物守恒的原则,可写为:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla c = \sum q_i \delta(\vec{r}_i) - \nabla \cdot (c\vec{v}_d) - \nabla \cdot (c\vec{v}_w) + \nabla \cdot \vec{k} \cdot \nabla c \quad (1)$$

根据定义, \vec{v}_d 和 \vec{v}_w 只有铅直方向分量且指向地面. \vec{v}_w 的值等于降水率 R 和降水清洗比 w_r 的乘积

$$v_w = w_r R \quad (2)$$

对式(1)在体积 τ 内积分后再对体积平均可得:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{1}{\tau} \iiint \vec{V} \cdot \nabla c d\tau \\ &= \frac{1}{\tau} \iiint \sum q_i \delta(\vec{r}_i) d\tau - \frac{1}{\tau} \iiint \nabla \cdot (c\vec{v}_d + c\vec{v}_w) d\tau + \frac{1}{\tau} \iiint \nabla \cdot \vec{k} \cdot \nabla c d\tau \end{aligned} \quad (3)$$

其中

$$\bar{c} = \frac{1}{\tau} \iiint c d\tau \quad (4)$$

因为 $\vec{V} \cdot \nabla c = \nabla \cdot (\vec{V}c) - c \nabla \cdot \vec{V}$, 在低速大气中,空气十分近似于不可压流体,故

$\nabla \cdot \vec{V} = 0$, 那么式(3)左方第二项可写为

$$\frac{1}{\tau} \iiint_{\tau} \vec{V} \cdot \nabla c d\tau = \frac{1}{\tau} \iiint_{\tau} \nabla \cdot (\vec{V}c) d\tau = \frac{1}{\tau} \oint_S \vec{V} \cdot d\vec{s} \quad (5)$$

式(5)的最右方为曲面积分, \vec{s} 为包围体积 τ 的表面, 其法线方向指向体积外为正. 式(3)右方第一项为体积 τ 内单位时间大气污染物排放(包括点源、面源与线源排放)的总量 Q , 即:

$$\frac{1}{\tau} \iiint_{\tau} \sum_i q_i \delta(\vec{r}_i) d\tau = \sum_i q_i = Q \quad (6)$$

式(3)右方第二项为体积 τ 内大气污染物的干、湿清除项.

$$\frac{1}{\tau} \iiint_{\tau} \nabla \cdot (c\vec{v}_d + c\vec{v}_w) d\tau = \frac{1}{\tau} \iint_S c(\vec{v}_d + \vec{v}_w) \cdot d\vec{s} \quad (7)$$

式(3)右方第三项湍流通量项, 在城市尺度、中等风速的条件下该项的大小约为平流项的百分之几, 可以忽略, 但在小风速或静风条件下该项必须保留. 因为按原始定义, 湍流通量可表达为:

$$-\vec{k} \cdot \nabla c = \vec{i} \overline{u'c'} + \vec{j} \overline{v'c'} + \vec{k} \overline{w'c'} \quad (8)$$

若将湍流通量用虚拟湍流输送速度 $\vec{V}_t = \vec{i}u_t + \vec{j}v_t + \vec{k}w_t$ 表示, 即

$$u_t = \overline{u'c'}/c, v_t = \overline{v'c'}/c, w_t = \overline{w'c'}/c \quad (9)$$

那么式(8)可改写为:

$$-\vec{k} \cdot \nabla c = \vec{V}_t c \quad (10)$$

这里要指出的是, 在式(1)的原来意义上, \vec{V}_t 的方向总是从浓度高值区指向低值区. 在本文讨论的情况下, \vec{V}_t 垂直于体积 τ 的表面, 其法线方向指向浓度低值区为正

$$\frac{1}{\tau} \iiint_{\tau} \nabla \cdot \vec{k} \cdot \nabla c d\tau = -\frac{1}{\tau} \iiint_{\tau} \nabla \cdot (\vec{V}_t c) d\tau = -\frac{1}{\tau} \iint_S \vec{V}_t c \cdot d\vec{s} \quad (11)$$

于是式(3)可写为:

$$\tau \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = Q - \oint_S c(\vec{V} + \vec{V}_t + v_d + v_w) \cdot d\vec{s} \quad (12)$$

上式是平均浓度的预报方程, 它的最右方的积分项表示体积 τ 内大气对污染物的清除能力, 这些清除是由通风扩散稀释和干湿沉降过程进行的, 若设该积分值对平均浓度的比值为:

$$V_c = \frac{1}{c} \oint_S c(\vec{V} + \vec{V}_t + v_d + v_w) \cdot d\vec{s} \quad (13)$$

V_c 代表着该时段的大气通风扩散稀释和干湿沉降的总能力的平均值. 这时式(12)立即可解得:

$$\bar{c} = e^{-\int V_c dt} \left(\int Q e^{\int V_c dt} dt + \bar{c}_0 \right) \quad (14)$$

其中积分常数 \bar{c}_0 表示初始平均浓度. 在给定的时段 δT 内, 若 V_c 和 Q 都与时间关联甚小, 上式可解出

$$\bar{c} = \frac{Q}{V_c} (1 - e^{-\frac{V_c}{\tau} \delta T}) + \bar{c}_0 e^{-\frac{V_c}{\tau} \delta T} \quad (15)$$

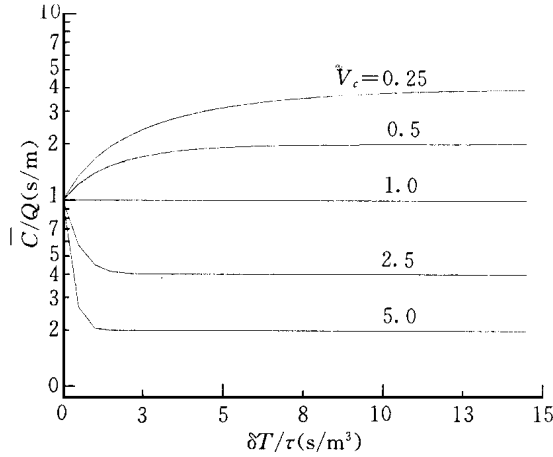


图1 式(15)所确定的浓度-时间曲线

由式(15)绘制的单位源强浓度曲线图1(这里已取 $\bar{c}_0/Q = 1$)可见,在大气对污染物的清除能力很大时,如 $V_c = 5.0$,那么该体积内的污染物将很快达到平衡浓度 $1/V_c = 0.2$;相反,若大气对污染物的清除能力很小,如 $V_c = 0.25$,那么该体积内的污染物将会在初始浓度 \bar{c}_0/Q 的基础上缓慢地向平衡浓度 $1/V_c = 4$ 增加.这种特点很相似于实际大气中的过程:连续数天的静风条件,将使大气污染状况日趋严重;而一场持续数小时的强风,就会使空气立即清新起来.当平均时段较长,这时 V_c 将为时间的函数,其平均浓度应按式(14)的积分计算.事实上,上述积分是在一个单体积 τ 中进行的,只要 V_c 是常值,时间间隔 δT 足够长,或者式(12)中的时间局地变化项为零,它和经典的箱模型全同.在一般情况下多了非常重要的时间变化项,从而能用来预报在小风条件下逐渐恶化的污染过程.此外平流扩散方程的差分模式只能描述短时间步长的过程且存在污染物不守恒问题,而使用式(15)就可避免这些问题.在任何情形下表示积分的 V_c 总可由箱格模式求得.由式(13)见到, V_c 不但依赖于箱体内部的参数而且也依赖于箱体外部参数.要准确计算某个箱体的 V_c 值就必须将所有有关箱体的浓度计算出来,只有这样才能准确地计算出该箱体的浓度变化,于是根据具体资料与计算条件设计不同计算模式就成了一个不可缺少的步骤.

1.2 箱格预报模式

在箱格预报模式中,设中心位置在 $x = (i + 1/2)\delta X$, $y = (j + 1/2)\delta Y$, $z = (k + 1/2)\delta Z$, $i = 1, 2, \dots, M$; $j = 1, 2, \dots, N$; $k = 1, 2, \dots, L$ (在黑圆点坐标网中 $x = i\delta X$, $y = j\delta Y$, $z = k\delta Z$)的箱体 $abcd-efgh$ 的体积 $\tau = \delta X \times \delta Y \times \delta Z$,它沿 X -方向水平体长为 δX , Y -方向水平宽度为 δY ,高为 δZ ,见图 2a,设箱格风速矢量坐标网为图 2b,浓度标量坐标网为黑圆点网,见图 2c.在 $t = n\delta T$ 时体积内浓度平均值为 $c_{i,j,k}$,通过界面 $abcd$ 、 $efgh$ 、 $aecg$ 、 $bfdh$ 、 $cdgh$ 、 $abef$ 并与之垂直的平均风速分别为:

$$\begin{aligned}
 u_i &= 1/4(u_{i,j,k} + u_{i,j+1,k} + u_{i,j,k+1} + u_{i,j+1,k+1}) \\
 u_{i+1} &= 1/4(u_{i+1,j,k} + u_{i+1,j+1,k} + u_{i+1,j,k+1} + u_{i+1,j+1,k+1}) \\
 v_j &= 1/4(v_{i,j,k} + v_{i+1,j,k} + v_{i,j,k+1} + v_{i+1,j,k+1}) \\
 v_{j+1} &= 1/4(v_{i,j+1,k} + v_{i+1,j+1,k} + v_{i,j+1,k+1} + v_{i+1,j+1,k+1})
 \end{aligned} \tag{16}$$

$$w_k = 1/4(w_{i,j,k} + w_{i,j+1,k} + w_{i+1,j,k} + w_{i+1,j+1,k})$$

$$w_{k+1} = 1/4(w_{i,j,k+1} + w_{i,j+1,k+1} + w_{i+1,j,k+1} + w_{i+1,j+1,k+1})$$

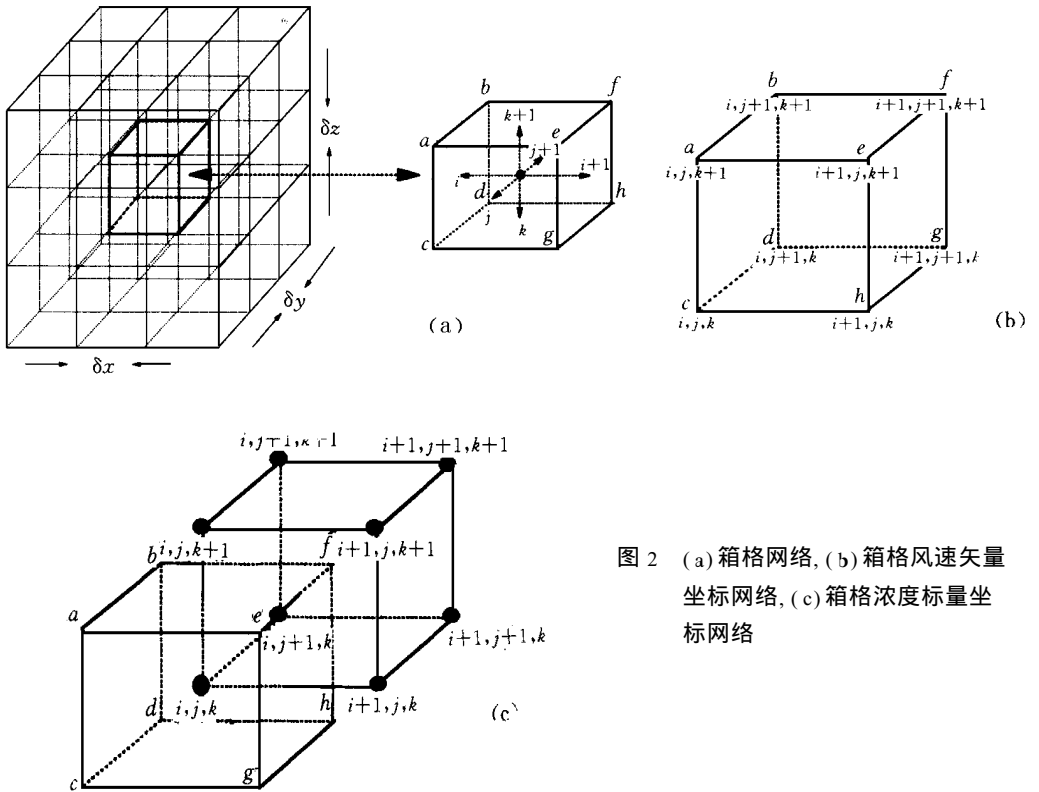


图 2 (a) 箱格网络, (b) 箱格风速矢量坐标网络, (c) 箱格浓度标量坐标网络

其中, $u_{i,j,k}, v_{i,j,k}, w_{i,j,k}$ 为 c 点上风速矢量 $\vec{v}_{i,j,k}$ 的 3 个分量; $u_{i,j+1,k}, v_{i,j+1,k}, w_{i,j+1,k}$ 为 d 点上风速矢量 $\vec{v}_{i,j+1,k}$ 的分量; $u_{i,j,k+1}, v_{i,j,k+1}, w_{i,j,k+1}$ 为 a 点风速矢量 $\vec{v}_{i,j,k+1}$ 的分量; $u_{i,j+1,k+1}, v_{i,j+1,k+1}, w_{i,j+1,k+1}$ 为 b 点上风速矢量 $\vec{v}_{i,j+1,k+1}$ 的分量; 其它类推. 这些垂直通过界面的风速所携带的浓度分别为 $c_i, c_{i+1}, c_j, c_{j+1}, c_k, c_{k+1}$, 可用黑圆点坐标网络上的浓度表示为:

$$c_i = \begin{cases} c_{i-1,j,k} & u_i > 0 \\ c_{i,j,k} & u_i < 0 \end{cases} \quad c_{i+1} = \begin{cases} c_{i,j,k} & u_{i+1} > 0 \\ c_{i+1,j,k} & u_{i+1} < 0 \end{cases} \quad c_j = \begin{cases} c_{i,j-1,k} & v_j > 0 \\ c_{i,j,k} & v_j < 0 \end{cases} \quad (17)$$

$$c_{j+1} = \begin{cases} c_{i,j,k} & v_{j+1} > 0 \\ c_{i,j+1,k} & v_{j+1} < 0 \end{cases} \quad c_k = \begin{cases} c_{i,j,k-1} & w_k > 0 \\ c_{i,j,k} & w_k < 0 \end{cases} \quad c_{k+1} = \begin{cases} c_{i,j,k} & w_{k+1} > 0 \\ c_{i,j,k+1} & w_{k+1} < 0 \end{cases}$$

在体积界面 $abcd, efgh, aecg, bfdh, cdgh, abef$ 上虚拟湍流输送速度分别为 $u_{t,i}, u_{t,i+1}, v_{t,j}, v_{t,j+1}, w_{t,k}, w_{t,k+1}$ 输送的浓度分别为:

$$\begin{aligned} \Delta_{i,i-1}C &= c_{i,j,k} - c_{i-1,j,k} & \Delta_{i,i+1}C &= c_{i,j,k} - c_{i+1,j,k} \\ \Delta_{j,j-1}C &= c_{i,j,k} - c_{i,j-1,k} & \Delta_{j,j+1}C &= c_{i,j,k} - c_{i,j+1,k} \\ \Delta_{k,k-1}C &= c_{i,j,k} - c_{i,j,k-1} & \Delta_{k,k+1}C &= c_{i,j,k} - c_{i,j,k+1} \end{aligned} \quad (18)$$

此外在 $k \leq 0$ 的平面上, $w_k = w_{t,k} = 0$, 干、湿沉降速度 $v_{d,i,j,k}, v_{w,i,j,k}$ 都只有 k 方向分量, 其方向向下(其中对非重力沉降物 v_d 只有在与地面相贴的箱表面上有有限值, 在其他

箱面上均为零值), 并认为干沉降在时间间隔 δT 内, 在形式上仅将污染物降到临近的下一个箱体. 那么按式(13), V_c 的平均值 $\bar{V}_{c, t=(n+1)\delta T}$ 就可以写为:

$$\begin{aligned} \bar{V}_{c, i, j, k, t=(n+1)\delta T} = & \frac{1}{c} \{ (-u_i c_i + u_{i+1} c_{i+1} + u_{t,i} \Delta_{i,i-1} c + u_{t,i+1} \Delta_{i,i+1} c) \delta Y \times \delta Z \\ & + (-v_j c_j + v_{j+1} c_{j+1} + v_{t,j} \Delta_{j,j-1} c + v_{t,j+1} \Delta_{j,j+1} c) \delta X \times \delta Z \quad (19) \\ & + [-w_k c_k + w_{k+1} c_{k+1} + w_{t,k} \Delta_{k,k-1} c + w_{t,k+1} \Delta_{k,k+1} c \\ & + v_{d,i,j,k} \Delta_{k,k+1} c + v_{w,i,j,k} c_{i,j,k}] \delta X \times \delta Y \}_{t=n\delta T} \end{aligned}$$

式(19)仅考虑两个相邻体积间的浓度的扩散过程, 如果平均的时距较长, 湍流的尺度谱分布很广且与单个箱尺度相比, 尺度很大的湍流的能量占总湍能的比例不能忽略, 这时应该按文献[2][3]的概念将 u_t, v_t, w_t 按拉氏自相关尺度分解为:

$$u_{t,i} = \sum_{i' \neq i, 1}^n \alpha_{i,i'} u_{t,i'}, \quad v_{t,i} = \sum_{i' \neq i, 1}^n \beta_{i,i'} v_{t,i'}, \quad w_{t,i} = \sum_{i' \neq i, 1}^n \gamma_{i,i'} w_{t,i'} \quad (20)$$

显然有:

$$\sum_{i' \neq i, 1}^n \alpha_{i,i'} = 1, \quad \sum_{i' \neq i, 1}^n \beta_{i,i'} = 1, \quad \sum_{i' \neq i, 1}^n \gamma_{i,i'} = 1 \quad (21)$$

考虑到大湍流的穿越(transilient)扩散效应^[4], 式(19)可写为:

$$\begin{aligned} \bar{V}_{c, i, j, k, t=(n+1)\delta T} = & \frac{1}{c} \{ (-u_i c_i + u_{i+1} c_{i+1} + u_{t,i} \sum \alpha_{i,i'} \Delta_{i,i'} c) \delta Y \times \delta Z \\ & + (-v_j c_j + v_{j+1} c_{j+1} + v_{t,i} \sum \beta_{j,j'} \Delta_{j,j'} c) \delta X \times \delta Z \quad (22) \\ & + [-w_k c_k + w_{k+1} c_{k+1} + w_{t,k} \sum \gamma_{k,k'} \Delta_{k,k'} c \\ & + v_{d,i,j,k} (c_{i,j,k} - c_{i,j,k+1}) + v_{w,i,j,k} c_{i,j,k}] \delta X \times \delta Y \}_{t=n\delta T} \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} \Delta_{i,i'} c &= c_{i,j,k} - c_{i',j,k} \quad i' (\neq i) = 1, 2, 3, \dots, n \\ \Delta_{j,j'} c &= c_{i,j,k} - c_{i,j',k} \quad j' (\neq j) = 1, 2, 3, \dots, n \\ \Delta_{k,k'} c &= c_{i,j,k} - c_{i,j,k'} \quad k' (\neq k) = 1, 2, 3, \dots, n \end{aligned} \quad (23)$$

由式(15)还可定义出每个箱体内污染物变化的特征(惯性)时间尺度 $T_{i,j,k}$, 它的倒数应满足下式:

$$1/T_{i,j,k} = V_{c,i,j,k}/\tau = V_{c,i,j,k}/(\delta X \times \delta Y \times \delta Z) \quad (24)$$

按式(19)很容易求得:

$$\frac{1}{T_{i,j,k}} = \frac{1}{T_i} + \frac{1}{T_j} + \frac{1}{T_k} \quad (25)$$

$$\frac{1}{T_i} = \frac{1}{c} [(-u_i c_i + u_{i+1} c_{i+1} + u_{t,i} \Delta_{i,i-1} c + u_{t,i+1} \Delta_{i,i+1} c) / \delta X]$$

$$\frac{1}{T_j} = (-v_j c_j + v_{j+1} c_{j+1} + v_{t,j} \Delta_{j,j-1} c + v_{t,j+1} \Delta_{j,j+1} c) / \delta Y \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{T_k} = & [-w_k c_k + w_{k+1} c_{k+1} + w_{t,k} \Delta_{k,k-1} c + w_{t,k+1} \Delta_{k,k+1} c \\ & + v_{d,i,j,k} (c_{i,j,k} - c_{i,j,k+1}) + v_{w,i,j,k} c_{i,j,k}] / \delta Z \end{aligned}$$

式(25)说明, 箱体内惯性时间尺度 $T_{i,j,k}$ 的倒数为箱体三个方向的惯性时间分尺度的倒数和. 在其他条件相同的情况下, 同体积长条形的箱体比正方形的箱体的惯性时间短. 这也说明, 圆形或正方形的城市与长条形城市相比, 大气污染物在市内滞留的时间要长. 以长边垂直于盛行风且上风方污染浓度低的城市的惯性时间为最短.

箱格预报模式的计算流程见图 3, 由气象预报模式给出 $t = n\delta T$ 时刻的风场、降水量分布(计算湿沉降速度)、各种尺度的虚拟扩散速度场等初始场, 还要给出各箱体内的源强及浓度值(要注意的是, 本模式在短时间内对初始浓度依赖性较大, 在长时间后则对源强依赖性大), 通过式(19)或式(22)求得各箱体的通风扩散稀释和干、湿沉降的总能力的平均值 V_c (同时也给出污染物的干、湿沉降量)后, 再按式(15)计算出在一个时间步长 δT 即 $t = (n+1)\delta T$ 时刻的各箱体的浓度值, 该值也就是下一个时间步长开始时的浓度初值. 这里的时间步长可以与气象模式中的步长一致, 也可远大于气象模式中的时间步长, 因为它们之间并无任何直接联系.

一般地说, δT 选取得较小时模式对前期浓度记忆强; δT 选取得大时, 模式对源强依赖大, 在使用中可选 δT 使其满足 $\frac{V_c}{T} \delta T \leq 1$. 在求取单个时段内的 V_c 时, 本箱格模式的作用与传统箱格模式的差异在于各箱体对局地浓度有记忆并且对远方箱体的浓度有感受能力, 能同化实时监测浓度. 箱体可堆满对流层(这时浓度 c 应以浓度与大气密度的积代替), 也可仅堆置于大气边界层(这时箱体堆积总高度为边界层高度, 因此箱体侧边界面积的高度依赖于当地边界层高 H , 例如取 $\delta Z = H/L$, L 为垂直方向箱体个数), 甚至可以将

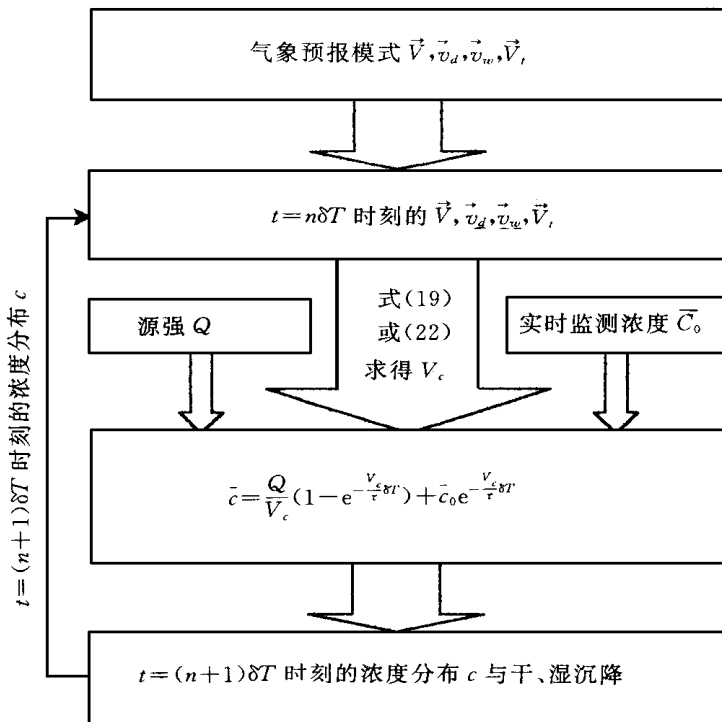


图 3 箱格预报模式的计算流程

箱体离散地放在任意指定的地点.

2 空气污染潜势指数与污染指数的确定

2.1 空气污染潜势指数的确定

在大气边界层顶和地面之间建立一个箱体, 设 $\bar{u} = u_i = u_{i+1} > 0$, $u_{t,i} = u_{t,i+1}$, $v_{t,j} = v_{t,j+1}$, $v_{t,i} = w_i = w_{i+1} = 0$, $\delta Z = H$ 为混合层深度, 上风箱体的平均浓度 c_{i+1} 不为零, 其它相邻箱体內的平均浓度都保持为零, 再设: 箱底面积 $S = \delta X \times \delta Y$, 那么按式(19)可得:

$$V_{c,i,j,0} = \{ [- \frac{c_{i-1}}{c_i} (u_i + u_{t,i}) + (u_i + 2u_{t,i})] \frac{1}{\delta X} + 2v_{t,j} \frac{1}{\delta Y} + (w_{t,k} + v_d + v_w) \frac{1}{H} \} S \times H \quad (27)$$

在小风情形下, 湍流输送虚拟速度 u_t, v_t, w_t , 以及干、湿沉降将成为 V_c 的主要项. H 为混合层深度时, 垂直湍流输送虚拟速度 $w_t = 0$, 再设上风箱体的平均浓度 $c_{i-1} \ll c_i$, 平流风速远大于湍流输送虚拟速度, 式(27)即为

$$V_{c,i,j,0} = [\frac{u_i}{\delta X} + (v_d + v_w) \frac{1}{H}] S \times H \quad (28)$$

按式(15)可得平衡浓度:

$$\bar{c} = Q/V_c = Q/[\delta Y \times H \times u_i + (v_d + v_w) \times S] \quad (29)$$

δX 按文献[5]取为 $2 \sqrt{S/\pi}$, 那么 $\delta Y = S/\delta X = \frac{\pi}{2} \bar{S}$, 上式可写为:

$$Q = [\frac{\pi}{2} \bar{S} u_i \times H + (v_d + v_w) \times S] \times \bar{c} \quad (30)$$

式(30)即为中国国家标准 GB/T3840-91 制定 SO₂ 等气态大气污染物总允许排放量的基本公式原型, 在那里已令干、湿沉降速度为零, 且按地区给出了控制参数 $A_i = u_i \times H \times \frac{\pi}{2}$, 其中 $u_i \times H$ 为各地多年平均通风量. 由此, 对考虑干、湿沉降的大气污染物的允许排放总量由下式计算:

$$Q_{\text{总允许排放量}} = [A_i \bar{S} + (\bar{v}_d + \bar{v}_w) \times S] \times \bar{c}_{\text{标准浓度}} \quad (31)$$

式中 \bar{v}_d, \bar{v}_w 为多年平均的干、湿沉降速度. 对不考虑干、湿沉降的大气污染物总允许排放量的基本公式为:

$$Q_{\text{总允许排放量}} = A_i \times \bar{S} \times \bar{c}_{\text{标准浓度}} \quad (32)$$

由式(31)或(32)按面积 S 、标准浓度及所在地区的参数 $A_i, \bar{v}_d, \bar{v}_w$ 取得 $Q_{\text{总允许排放量}}$ 后, 代入式(15)得到

$$\bar{c} = \frac{Q_{\text{总允许排放量}}}{V_c} (1 - e^{-\frac{V_c \delta T}{\tau}}) + \bar{c}_0 e^{-\frac{V_c \delta T}{\tau}} \quad (33)$$

该式给出箱內初始浓度为 \bar{c}_0 且存在标准源强时的浓度在一个时间步长上的浓度变化. 如果直接将式(31)或式(32)代入式(33)便得到标准源强在实际气象条件下生成的浓度与在标准气象条件下产生的浓度的比值, 这个比值本文称为污染潜势指数 PPI . 该指数事实

上表示的是实际气象条件下的通风扩散稀释和干、湿沉降清除大气污染物的总能力与标准气象条件下这种能力的比值. 考虑沉降时有:

$$PPI = \frac{\bar{c}}{\bar{c}_{标准}} = \frac{A_i \bar{S} + (\bar{v}_d + w, \bar{R}) \times S}{V_c} (1 - e^{-\frac{V_c}{\tau} \delta T}) + \frac{\bar{c}_0}{\bar{c}_{标准}} e^{-\frac{V_c}{\tau} \delta T} \quad (34)$$

其中 $A_i \bar{S} + (\bar{v}_d + w, \bar{R}) \times S$ 就是标准气象条件下的大气稀释和沉降清除污染物能力 $V_{c标准}$ 或者写为:

$$PPI_{t=(n+1)\delta T} = \frac{V_{c标准}}{V_c} (1 - e^{-\frac{V_c}{\tau} \delta T}) + PPI_{t=n\delta T} e^{-\frac{V_c}{\tau} \delta T} \quad (35)$$

不考虑沉降时, 只要将上式中的干、湿沉降速度置零即可.

从式(35)可见, PPI 的预报和源强与浓度初值场的关联不大, 只是在模式第一次运行时需提供 $\bar{c}_0/\bar{c}_{标准}$, 这时可假定 $\bar{c}_0/\bar{c}_{标准} = 1$, 经过数小时或数十小时运行后, 其结果将与初值无关. 这两个式子的其它自变量都是由气象模式提供如 V_c (见式(28))、 H , 或由地理参数决定如面积 S 、 A_i . 由于模式的运行完全脱离污染源和污染浓度监测场, 它预测的只是大气通风扩散稀释和干、湿沉降清除大气污染物总能力的大小, 并不能给出大气的实际污染状态. 如果要预测有限空间 τ 的平均浓度, 那么在各个 τ 体积的污染源源强显然是不可缺少的. 为了弥补源强资料中通常存在的不确定性, 污染浓度监测场的使用将会有效地提高预报效果.

2.2 空气污染指数的确定

污染指数 PSI , 对单种污染物而言, 它定义为真实源强在真实气象条件下产生的平均浓度 \bar{c} 对标准浓度 $c_{标准}$ 的比值即: $PSI = \bar{c}/c_{标准}$. 例如要计算某个箱体的污染指数 PSI , 则仅需将式(33)中的 $Q_{总允许排放量}$ 更换为 $Q_{真实排放总量}$ 并除以 $c_{标准}$, 按定义得:

$$PSI_{t=(n+1)\delta T} = \frac{Q_{真实排放总量}}{V_c \times c_{标准}} (1 - e^{-\frac{V_c}{\tau} \delta T}) + PSI_{t=n\delta T} e^{-\frac{V_c}{\tau} \delta T} \quad (36)$$

在仅有监测浓度的季平均值而无真实排放总量时, 按式(29)可得预报 PSI 的近似式(37):

$$PSI_{t=(n+1)\delta T} = \frac{A_i \bar{S} + (\bar{v}_d_{季平均} + w, \bar{R}_{季平均}) \times S}{V_c} \frac{\bar{c}_{季平均}}{c_{标准}} (1 - e^{-\frac{V_c}{\tau} \delta T}) + PSI_{t=n\delta T} e^{-\frac{V_c}{\tau} \delta T} \quad (37)$$

如果存在着较好的大气污染物监测网, 能按一定的时间间隔提供各种原生的大气污染物的 PSI 值, 在不考虑化学过程情况下, 其污染指数可近似用下式计算.

$$PSI_{t=(n+1)\delta T} = [\frac{V_{c,t=n\delta T}}{V_c} (1 - e^{-\frac{V_c}{\tau} \delta T}) + e^{-\frac{V_c}{\tau} \delta T}] \times PSI_{t=n\delta T} \quad (38)$$

式(38)中的 $PSI_{t=n\delta T}$ 可随时用相应时刻的实测值取代. 无实测值时则用前一步长的计算值迭代计算.

3 空气污染潜势指数与污染指数的试预报

采用京津冀中尺度试验基地的 MOMS 业务模式作为气象预报模式^[6], 格点数为 61 (纬向) × 46 (经向) × 10 (高度), 水平格距 60 km, 顶层气压为 150 hPa. 在使用总体边界层时, 利用 $\sigma = 1$ 和 $\sigma = 0.95$ 两层的温度差及文献[7]给出的判据, 判别大气稳定度, 再由稳定度类别

按文献 [8] 的公式与参数确定大气边界层高度, 再以边界层高度以内的平均风速、当地降水量计算 V_c 值, 其中干沉降速度是作为参数输入的. 当使用高分辨率大气边界层时则直接利用模式输出的边界层高度, 进行上述计算, 不过对边界层高度作了不得低于 200 m 的限制.

预报污染潜势指数 PPI 时是使用式 (34) 进行的. 计算 V_c 值时是在气象模式的 $\sigma = 1$ 平面的每一个格点进行的, 在这里放置的箱体的底面积相当于全国 50 个大中城市的平均面积 81 km^2 , 并按国家标准 GB/T 3840-91 给出 A_i, v_d . 只有在与地面相贴的箱表面上是按文献 [9] 给出, 其他箱面上均取零值. 平均降水量按气候图内插值给出. 虚拟湍流输送速度 \bar{V}_i , 各分量的绝对值的大小则按稳定度的级别 (由箱格的总体理查逊数决定), 取为平均风速的一定百分数, 静风 ($< 0.5 \text{ m/s}$) 时, 则取为各稳定度条件下的 $\sigma_u, \sigma_v, \sigma_w$ 的典型值. 其它地区未置箱体, 其实质相当于在其它地区设置了浓度永为零的箱体. δT 取 10 分钟.

1997 年 3 月 1 日以来, 在京津冀中尺度试验基地, 使用实时气象资料对全国大气污染潜势指数进行了试预报. 图 4 就是 1998 年 10 月 18、20、21 和 22 日我国华北的污染潜势指数 (图右色标数即为 PPI 指数) 分布与 500 hPa 等压面形势图, 黑色为等高线 (gpm), 红色为等温线 (K). 图中 $PPI = 1$, 表示当地大气的通风扩散稀释和干、湿沉降清除大气污染物的总能力与标准 (多年平均) 气象条件的相同. $PPI = 0.5$ 表示当地大气清除污染物的总能力比标准条件的强 1 倍. $PPI = 2.0$, 表示当地大气清除污染物的总能力弱 1 倍, 此地即使按标准源强排放, 由于当天的气象条件不利于大气污染物的稀释扩散与清除, 惰性污染物的浓度将为标准浓度的两倍. 以北京为例, 18 日 (图 4a) 由于有新鲜的冷空气南下, PPI 在 0.25 与 0.5 之间, 大气的污染潜势很低. 到 20 日, 冷平流已经消失, 北京的 PPI 在 1.5 与 2.0 之间, 空气污染潜势已较高. 22 日北京的污染潜势指数接近 2.5, 显著高于邻近的河北与天津. 实际上这一周北京监测站发布的污染指数是该月最高的周均值. 1998 年 10 月模拟的结果与北京监测站发布的污染指数的对应关系很好, 已另外撰文叙述.

为了对上述计算的效果作出估计, 于 1998 年 8 月至 12 月, 在上海市使用本文模式和式 (38), 对 SO_2 、TSP 和 NO_x 的日平均 PSI 值, 逐日进行了预报, 同时有预报值与监测值的日数为 118 天, 并将 PSI 预报值与相应的监测值做了相关对比. 在这里 PSI 指数定义为:

$$PSI = (\text{预报或监测的大气污染物浓度} / \text{国家标准浓度}) \times 100 \quad (39)$$

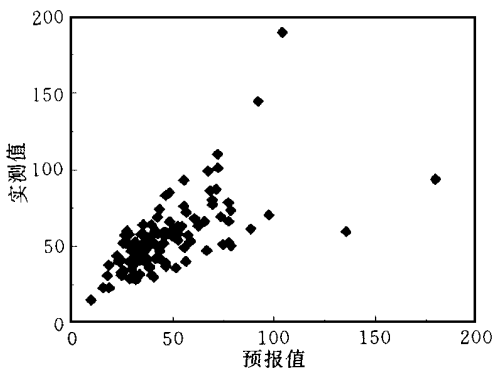


图 5 SO_2 污染指数的预报值与实测值的比较

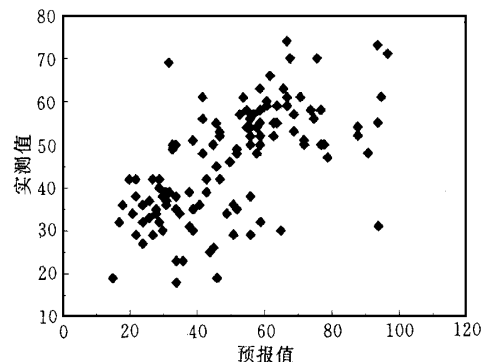


图 6 TSP 污染指数的预报值与实测值的比较

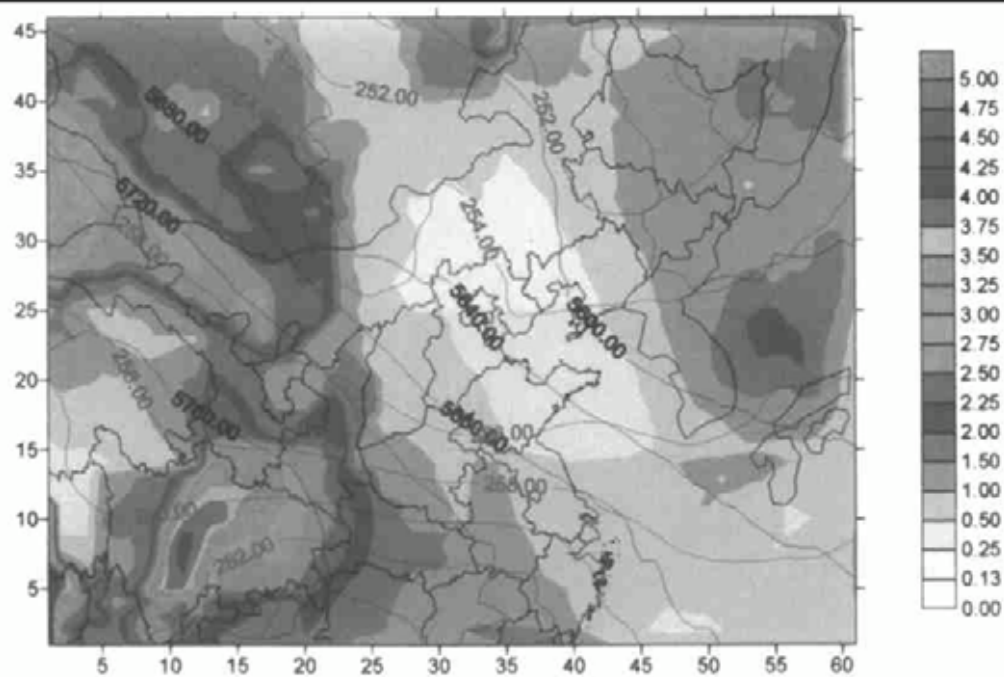


图4a 1998年10月18日我国华北污染潜势模拟图

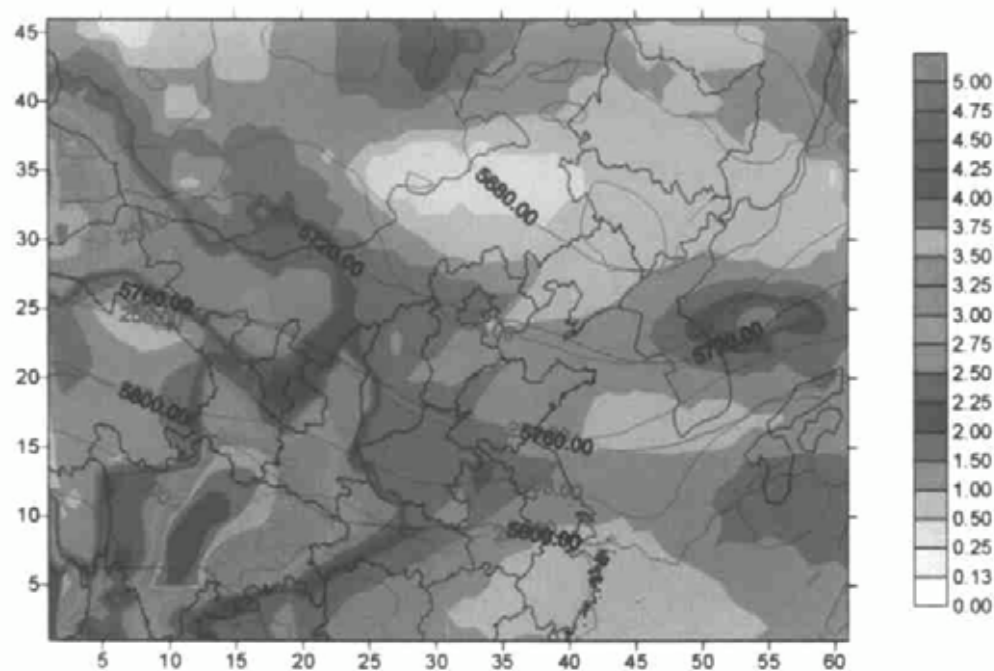


图4b 1998年10月20日我国华北污染潜势模拟图

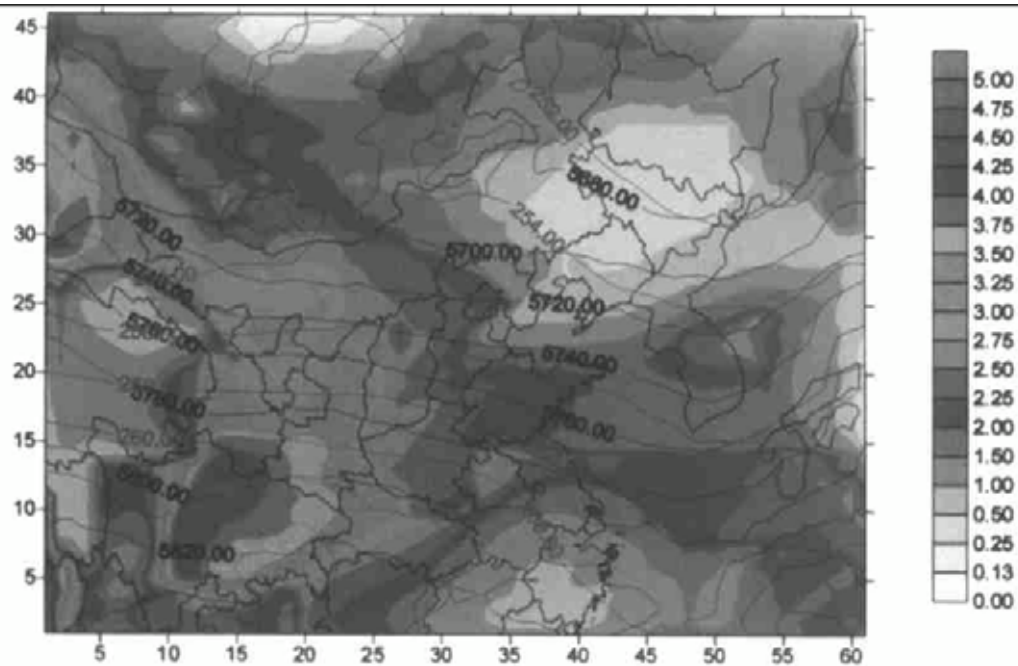


图4c 1998年10月21日我国华北污染潜势模拟图

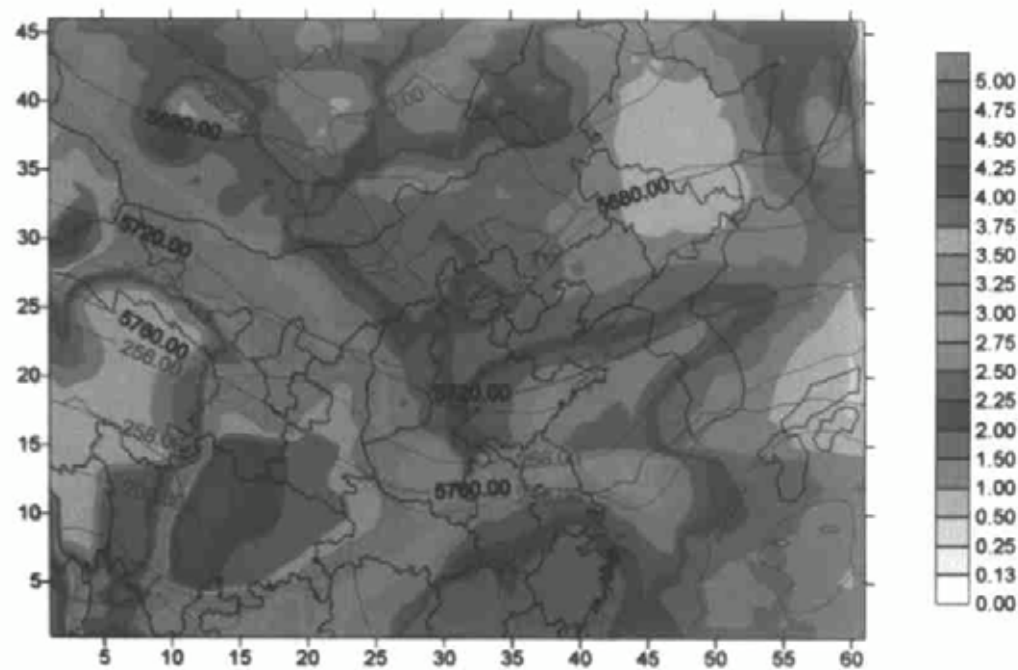


图4d 1998年10月22日我国华北污染潜势模拟图

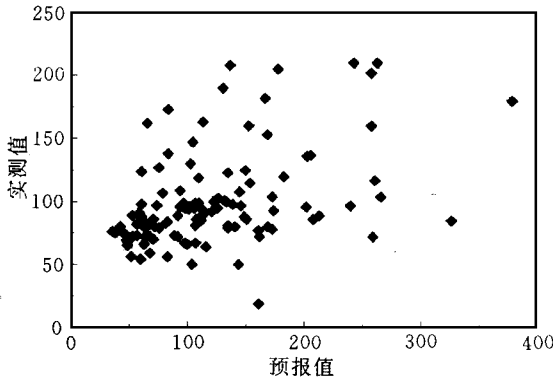


图 7 NO_x 污染指数的预报值与实测值的比较

SO_2 、TSP 和 NO_x 的日平均 PSI 预报值与监测值的相关图见图 5~7。其中 SO_2 的 PSI 日平均预报值与监测值的相关系数为 63.5%，TSP 为 61.8%， NO_x 为 45.0% (样本数都为 118)。

NO_x 的预报水平明显低于 SO_2 及 TSP 的预报水平。这是因为 NO_x 主要是城市车辆等流动源排放的，其源强的时间分布很不均匀，在预报中未考虑排放的时间系数，估计在考虑时间系数以后， NO_x 的预报效果会有一定改善。

鉴于污染潜势预报的基本原理与 PSI 指数的预报原理相似，且不依赖于局地源强的大小，其预报准确性不会低于 PSI 的预报准确率。

4 结 论

(1) 由平流扩散方程积分后再离散化而建立的箱格预报模型能克服经典箱模型对时间步长 δT 远大于 τ/V_c 的要求和不能预测小风条件下逐渐恶化的污染状态的缺点；同平流扩散方程的差分模式相比较，箱格预报模型对时间步长和空间步长的要求特别灵活且不存在不守恒问题；此外箱格预报模型对初始浓度有很好的记忆力，并对非相邻地区的浓度有感受力，因而特别适用于各种时间、空间尺度或多尺度的空气污染预报。

(2) 本文空气污染潜势预报所使用的 PPI 指数与源强和浓度初值场的关联不大，但能很好地反映实际气象条件下的通风扩散稀释和干、湿沉降清除大气污染物的总能力，与经典的空气污染潜势预报方法相比，结构严谨、物理意义更清晰明确。

(3) 本文给出的空气污染指数 PSI 的预报公式和方法对源强和浓度监测的要求灵活，既可以使用源强进行预报也可以使用浓度监测数据进行预报，或同时使用二者进行预报。从初步试预报的检验结果来看，其效果还是可接受的。

(4) 要进一步提高预报准确率，首先要提高气象场，特别是风场的预报效果，还应该在模式中放入一些重要的化学过程。当然，在进行 O_3 预报时必须考虑化学反应过程和太阳辐射强度的预报模式的引入。

致谢：本文的上海市污染指数实测与预报值由邵德民高级工程师提供，在此表示感谢。

参 考 文 献

- 1 预报试验小组. 北京空气污染气象条件的预报试验. 气象, 1981, 11(1): 25~28.
- 2 Xu Dahai, Peter F, et al. Exponential Fitting in Auto-correlation Analysis. Fifth Joint Conference on Application of Air Pollution Meteorology, Chapel Hill: AMS, 1986. 384~351.
- 3 徐大海. 多尺度湍流的扩散及扩散率. 气象学报, 1989, 47(3): 302~311.
- 4 Roland B S. Review of non-local mixing in turbulent atmospheres: Transient turbulence theory. Bound. -Layer Meteor., 1993, 62: 21~96.

- 5 徐大海, 李宗恺. 城市大气污染物排放总量控制中多源模拟法与国家标准 A-P 值方法的关系. 气象科学, 1993, 3 (2): 146~ 151.
- 6 王鹏云, 潘在桃, 徐宝新, 等. 中尺度业务预报试验数值模式系统. 应用气象学报, 1992, 3(3): 257~ 265.
- 7 赵德山, 徐大海, 等. 城市大气污染总量控制方法手册. 北京: 中国环境科学出版社, 1991.
- 8 徐大海. 我国一些地区大气边界层高度诊断分析公式中参数的统计结果. 北京气象学院学术论文集. 北京: 气象出版社, 1987. 72~ 80.
- 9 徐大海, 朱蓉. 国家标准 GB/T 3840-91 中城市大气污染物总量控制 A-P 值法的应用. 城市环境与城市生态, 1993, 6 (2), 36~ 41.

ATMOSPHERIC ADVECTIVE AND DISPERSION NONSTATIC BOX-MODEL FOR PREDICTION OF THE POTENTIAL INDEX OF AIRBORNE POLLUTANT

Xu Dahai Zhu Rong

(Chinese Academy of Meteorological Sciences, Beijing 100081)

Abstract

Besed on the integration of the atm ospheric advective and dispersion equation, a nonstatic box-m odel is built up which has m em ory of previous concentration and may be sensitive to nonadjacent boxes . The fram e of the m odel could be used for prediction of air pollution on various scales. The airborne pollutant potential index (PPI), which has obvious physical meaning, is also defined to represent the ability to dilute the air pollutants by atm ospheric advection and dispersion and/or to clean them out by dry and wet sedimentation. PPI could be used in the nonstatic box-m odel for prediction of the polluted potential in atm osphere. Furthem ore, the prognostic formula and procedure for prediction of pollutant standard index (PSI) are given which depend flexibly on the monitored source strength and/or concentration distribution. Using the regular concentration data, the prediction procedure is tested and the results are acceptable.

Key words: A tm ospheric pollution Nonstatic box-m odel Pollutant potential index (PPI) Prediction