

步巧利,洪莹莹. 基于 CMAQ 的大气污染个例分析[J]. 陕西气象,2018(4):28-34.

文章编号:1006-4354(2018)04-0028-07

基于 CMAQ 的大气污染个例分析

步巧利¹,洪莹莹²

(1. 佛山市气象局,广东佛山 528000;2. 广东省生态气象中心,广州 510000)

摘要:2017年5月10日,珠三角出现了区域性的细颗粒物和臭氧“双高”型复合大气污染;5月29日,粤珠三角中西部、粤西、粤北出现了大范围的臭氧污染过程。利用常规气象资料和美国国家环境预报中心(NCEP)/美国国家大气研究中心(NCAR)提供的 $1^\circ \times 1^\circ$ 再分析数据及环境监测数据,分析大气污染成因,并且首次在珠三角地区利用区域多尺度空气质量模型(CMAQ)模拟了5月10日各物理和化学过程对臭氧质量浓度的贡献。结果表明:(1)两次污染过程天气形势相似,850 hPa均有反气旋环流,地面呈均压场,风速较小,且污染当天天气晴好,温度较高;两次过程不同点在于“双高”污染前期 NO_2 质量浓度和相对湿度均较大,且前期 $\text{PM}_{2.5}$ 质量浓度已经较高。(2)在城市站点,臭氧的主要来源是水平平流和垂直扩散;而在郊区站点,臭氧则主要来源于气相化学,水平平流和垂直扩散。

关键词: $\text{PM}_{2.5}$; O_3 ; 珠三角; CMAQ

中图分类号:X16

文献标识码:A

近年来,以细颗粒物和臭氧污染为特征的珠三角大气复合污染问题日益凸显^[1-2]。这些污染物带来的最直观的后果就是灰霾天气的出现和能

见度的恶化^[3]。颗粒物的增多降低了大气能见度,影响辐射平衡以及区域天气与气候^[4]。细颗粒物与臭氧还带来了人体健康的负面效应^[5-6]。

收稿日期:2018-02-25

作者简介:步巧利(1987—),女,汉族,山东菏泽人,硕士,工程师,主要从事大气污染研究。

基金项目:广东省气象局面上项目:“2014至2016年气象条件对广州臭氧的调节作用”(GRMC2017M32);佛山市气象局项目:“气象条件调节局地 $\text{PM}_{2.5}$ 和 O_3 的年际变化”(201711)

- [2] 郭洁,姚秀萍,吕明辉. 敏感性行业气象服务效益评估研究与业务进展[J]. 高原山地气象研究, 2015,35(2):88-95.
- [3] 闫敏慧,姚秀萍,王蕾,等. 用层次分析法确定气象服务评价指标权重[J]. 应用气象学报, 2014, 25(4):470-475.
- [4] 陈家金,王加义,黄川容,等. 基于AHP-EWM方法的福建省农业气象灾害风险区划[J]. 自然灾害学报, 2016,25(3):58-66.
- [5] 罗慧,李良序,张彦宇,等. 气象风险源的社会关注度风险等级分析方法[J]. 气象, 2008,34(5):9-13.
- [6] 罗慧,谢璞,俞小鼎. 奥运气象服务社会效益评估个例分析[J]. 气象, 2007,33(3):89-94.
- [7] 曾金全,张焯方,王颖波. 基于综合评价算法的雷电灾害易损度区划模型研究[J]. 气象, 2011, 37(12):1595-1600.
- [8] 马青云,李佳英,王秀荣,等. 基于模糊综合评价法的登陆台风灾害影响评估模型. 气象, 2008,34(5): 20-25.
- [9] 虞晓芬,傅玳. 多指标综合评价方法综述[J]. 统计与决策, 2004(11):119-121.
- [10] SAATY T L. A scaling method for priorities in hierarchical structures[J]. Journal of Mathematical Psychology, 1977, 15(3): 234-281.
- [11] 李梅霞. AHP中判断矩阵一致性改进的一种新方法[J]. 系统工程理论与实践, 2000,20(2):122-125.

2012年2月,在新的《环境空气质量标准》发布后,珠三角的大气环境质量就面临着巨大的挑战^[7]。空气质量的变化受污染物排放、气象条件、地形的共同影响,其中气象条件是一段时间内空气质量的时空分布的决定性因素。气象条件对空气质量的影响一般从天气分型、扩散条件、地面气象要素等角度进行分析^[8-13]。在臭氧的来源和生成机理方面,Mai Khiem等^[14]应用CMAQ(区域多尺度空气质量模型)模拟了日本关东地区臭氧在不同条件下的成因,发现臭氧是由大气的水平传输、垂直扩散、干沉降和化学过程共同影响的,而干沉降和化学过程主要是消耗臭氧,风向和风速则决定了臭氧及其前体物的传输。高怡等^[15]应用CMAQ模型探讨了北京及周边地区在不同污染控制措施下臭氧质量浓度的变化,研究发现奥运期间的污染控制措施能明显降低空气中臭氧质量浓度,但当气象条件不利时,如强辐射、高温或吹南风时,臭氧质量浓度会容易偏高。一些学者^[16]利用WRF-chem/MEGAN模式模拟不同季节和不同地域的生物源产生的挥发性有机化合物(BVOCs)对珠三角近地面臭氧的影响,发现城区近地面臭氧质量浓度对生物源排放的BVOCs较为敏感,因为城区一般是VOCs敏感区。相较于其他模型,CMAQ结构严谨,体系完整^[17]。然而目前利用CMAQ模拟珠三角区域臭氧生成机制的研究还未见报道。

2017年5月,受不利气象条件影响,珠三角多市出现了不同程度的大气污染。本文利用气象资料和环境监测数据,分析两次大气污染过程的成因,并且利用CMAQ模拟5月10日臭氧污染的来源和产生机理以及传输和扩散过程,为有效治理大气污染提供科学依据,并为空气质量预报提供参考和借鉴。

1 资料与方法

1.1 资料

数据主要包括2017年5月10日和2017年5月29日的常规气象资料(相对湿度,气温,气压,风速风向),美国国家环境预报中心(NCEP)/美国国家大气研究中心(NCAR)提供的 $1^\circ \times 1^\circ$ 再分析数据,以及 $PM_{2.5}$ 、 O_3 和 NO_2 的逐小时质量浓度

数据(数据来源于广东省环境监测站),涵盖了此次霾污染前和整个污染时段。

1.2 方法

多尺度空气质量模型CMAQ(communitymultiscale air quality)由美国环保局于1998年6月首次发布,经过十几年的发展,CMAQ在模拟过程中能将天气系统中、小尺度气象过程对污染物的输送、扩散、转化和迁移过程的影响综合考虑,同时兼顾了区域与城市尺度之间大气污染物的相互影响以及污染物在大气中的气相化学过程,可以模拟污染物的传输过程、化学过程和沉降过程。图1为CMAQ模式的流程图^[18],其中气象场的输入由WRF模式提供,气象初始条件和边界条件的数据采用美国国家环境预报中心(NCEP)/美国国家大气研究中心(NCAR)提供的再分析数据。另外,人为排放源采用由清华大学研发的东亚地区排放清单MIX,生物排放源采用MEGAN(model of emission of gas and aerosols from nature)^[19]模型进行计算。CCTM是CMAQ模式的核心模块,利用气象场和排放源的输入对大气中的污染物质量浓度进行计算。模型采用三重嵌套网格,分辨率分别为27/9/3 km,垂直方向分为24层,模式层顶高度为50 hPa。其中第一重网格覆盖中国东部地区,第二重网格覆盖广东省地区,第三重网格覆盖珠三角地区,本研究主要采用第三重网格的模拟结果。过程分析是CMAQ模式的诊断模块,可以逐时输出各个独立的物理和化学过程对模拟污染物质量浓度的贡献。通过过程分析可以探讨上述不同过程对气溶胶质量浓度的贡献值,能更好地了解气溶胶污染的形成机理。

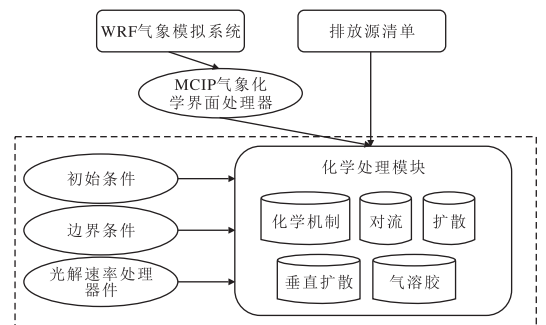


图1 CMAQ区域多尺度空气质量模型流程图

本文利用 CMAQ 的过程分析方法模拟 2017 年 5 月 10 日“双高”污染个例臭氧的来源和产生机理以及传输和扩散过程,揭示此次大气污染过程的成因,为有效治理大气污染提供科学依据,并为空气质量预报提供参考。

2 结果与讨论

2.1 “双高”污染个例分析

2017 年 5 月 10 日,珠三角出现了一次轻度到中度的污染过程。据统计,位于广州、佛山、东莞、深圳等城市的 24 个环保国控站点出现了 $PM_{2.5}$ 和 O_3 质量浓度同时超过国家《大气环境质量标准》中污染物质量浓度限值二级标准的现象(表 1),即 $PM_{2.5}$ 24 h 平均质量浓度超过 $75 \mu\text{g}/\text{m}^3$, O_3 日最大 8 h 平均质量浓度超过 $160 \mu\text{g}/\text{m}^3$, 表现为区域性的“双高”型复合污染。

从表 1 可看出,珠三角“双高”污染时段主要出现在 16—20 时,从影响时间上来看,深圳出现“双高”污染的时间较东莞早 1 h 左右,而东莞出现“双高”污染的时间较广州和佛山早 1 h 左右,这可能和区域传输有关。

从图 2(见 32 页)可以看出,2017 年 5 月 10 日,广州、佛山、东莞、深圳、中山和珠海等珠三角城市出现了“双高”污染,部分站点达到了中度污染,相较于广东省其它区域,珠三角污染较严重;粤西空气质量较好,以优为主;粤北和粤东沿海主要是臭氧污染,空气质量等级以良为主,细颗粒物质量浓度不高。

2.1.1 $PM_{2.5}$ 质量浓度偏高成因分析 图 3 给出的是“双高”污染天气期间 500 hPa 天气形势。从图 3 可看出,10 日,也就是污染当天,广东省受副高控制。850 hPa 存在反气旋环流(图略);地面均压场,风速较小(平均风速 $0.6 \sim 2.8 \text{ m/s}$),不利于污染物水平扩散。天气晴热(日最高气温大于 $32 \text{ }^\circ\text{C}$),形势稳定,有利于臭氧生成。

从图 4 可以看出,在“双高”污染发生前一日: $PM_{2.5}$ 质量浓度已经较高;并且前期 NO_2 质量浓度增长迅速,(从 $31 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 增加到 $101 \mu\text{g}/\text{m}^3$),较高的 NO_2 会导致 NO_3^- 的二次生成; O_3 最大小时质量浓度并不高。另外从 5 月 9 日 19—23 时广

表 1 24 个超标站点最大小时质量浓度及同时出现高质量浓度的时间

站点	$PM_{2.5}$ 最大小时质量浓度/ ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	O_3 最大小时质量浓度/ ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	同时高值出现时刻
花都师范(广州)	109	356	16 时
帽峰山森林公园	123	355	17 时
市五中(广州)	102	298	18 时
市八十六中(广州)	108	283	19 时
广雅中学(广州)	101	305	19 时
体育西(广州)	120	244	20 时
市监测站(广州)	100	278	20 时
麓湖(广州)	94	238	20 时
广东商学院(广州)	93	237	20 时
九龙镇镇龙(广州)	95	268	19 时
容桂街道办(顺德)	104	326	16 时
顺德苏岗	89	316	16 时
南海气象局(佛山)	102	328	19 时
三水监测站(佛山)	116	231	19 时
三水云东海(佛山)	121	252	19 时
华材职中(佛山)	152	283	19 时
湾梁(佛山)	124	276	19 时
南海气象局	102	328	19 时
南城西平(东莞)	145	337	20 时
莞城二水厂(东莞)	129	302	16 时
东城石井(东莞)	129	315	17 时
实验中学(东莞)	117	296	16 时
西乡(深圳)	143	321	15 时
南油(深圳)	126	257	15 时

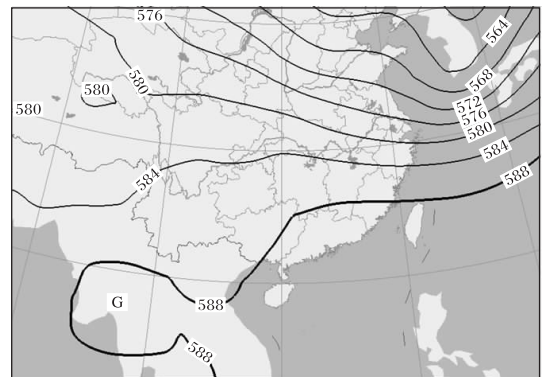


图 3 2017-05-10T08 500 hPa 天气形势(单位: dagpm)

东全省相对湿度变化情况来看(图略),污染过程前期,相对湿度明显增加,有利于颗粒物吸湿增长;从污染当天(5月10日)全省 PM_{2.5} 占 PM₁₀ 质量浓度比例的日平均分布(图5)来看,珠三角区域细粒子所占比例较大,尤其广州、中山、东莞等市比例超过 50%,说明气溶胶以二次生成的细颗粒物为主,加上均压场和静小风等不利的气象条件,导致 PM_{2.5} 质量浓度偏高。

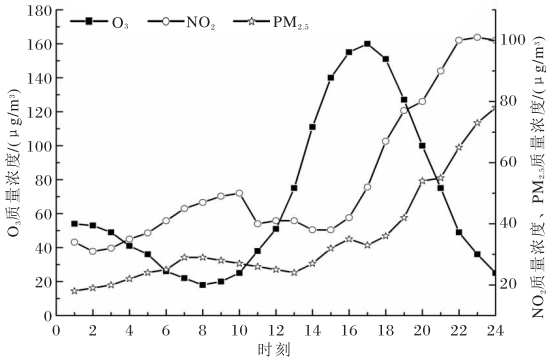


图4 2017-05-09 珠三角 24 个超标站点 PM_{2.5} 和 NO₂ 平均质量浓度及 O₃ 最大小时质量浓度日变化

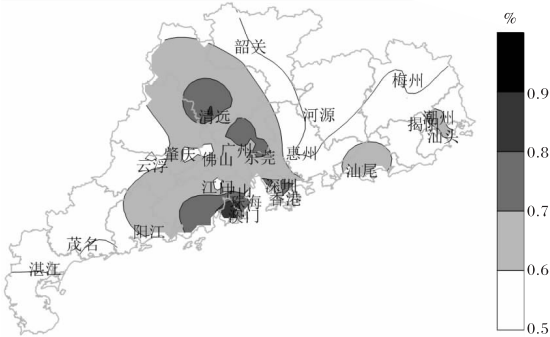


图5 2017-05-10 广东省 PM_{2.5} 占 PM₁₀ 质量浓度比例的日均分布

总体来看,前期污染物的累积和二次气溶胶新粒子的生成再加上不利的气象条件,造成此次 PM_{2.5} 质量浓度和 O₃ 质量浓度双高复合型大气污染。

2.1.2 O₃ 污染成因分析 利用 CMAQ 模型的诊断模块进行过程分析,可以逐时输出各个独立的物理和化学过程对模拟污染物质量浓度的贡献。过程分析包括集合过程速率(IPRs)和集合反应速率(IRR_s)2 种分析方法。IPRs 给出每小时各个独立的物理和化学过程对污染物质量浓度

的贡献值,而 IRR_s 给出每小时各个独立的化学方程对污染物质量浓度的贡献值。在 IPRs 方法中,污染物质量浓度的变化是由 7 种不同类型的物理和化学过程以及质量守恒调整项(ADJC)所决定的,7 类物理化学过程包括源排放过程(EMIS),水平输送过程(HTRA),垂直输送过程(VTRA),干沉降(DDEP),云水化学过程(CLDS),气溶胶过程(AERO)和气相化学反应过程(CHEM)^[20-21]。通过过程分析可以探讨上述不同过程对气溶胶质量浓度的贡献值,能更好的了解气溶胶污染的形成机理。

选取 4 个典型站点,利用 CMAQ 模型对 5 月 10 日各物理和化学过程对臭氧质量浓度的贡献进行模式模拟。模拟结果表明,这些大气过程既有正贡献也有负贡献(图6),正贡献表示在 1 h 内使臭氧质量浓度升高,负贡献则相反,所有贡献之和就是 1 h 内臭氧质量浓度的变化。首先看正贡献:从正贡献能看出对臭氧形成贡献最大的几个大气过程,在城市地区垂直扩散和水平平流是最主要的正贡献过程;而在郊区站点中山,臭氧主要来源于气相化学、水平平流和垂直扩散。气相化学过程在城市和郊区的贡献不同,郊区以生成臭氧为主,城市以消耗臭氧为主,分别对应正贡献和负贡献。高空光化学反应速率高,上层臭氧质量浓度比地面高,由于质量浓度梯度的存在,上层臭氧向地面扩散。从垂直扩散贡献的空间分布(图7)来看,在广东省内垂直扩散贡献都为正,也就是垂直扩散是源过程,有利于臭氧质量浓度的增加。根据以上贡献情况可推断垂直扩散过程使地面臭氧浓度增加。郊区站点的臭氧经过光化学反应生成以后,向城市站点地区输送,从而使城市站点臭氧增加。从日变化来看,白天贡献大于夜间,尤其是 12—15 时,这与有利于臭氧生成的时段相吻合。

2.2 臭氧“单高”污染个案分析

2017 年 5 月 29 日,粤珠三角中西部、粤西、粤北部分市县出现了大范围的臭氧污染过程,其中珠三角达轻度至中度污染,部分市县出现重度污染(图略)。当日,广东省上空受高压控制,850 hPa 处于反气旋环流状态,地面呈均压场,风速较小(平均风速 1.1~2.9 m/s)(图略),天气晴

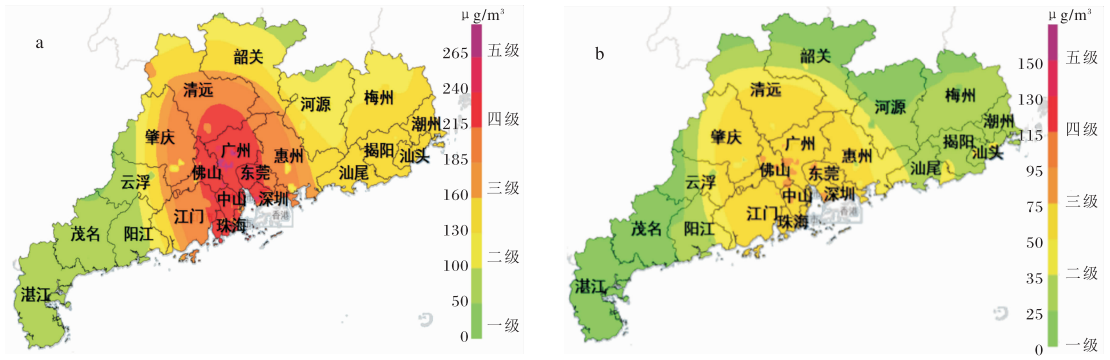


图2 2017-05-10 广东省“双高”污染实况

(a. O₃日最大8 h平均质量浓度; b. PM_{2.5}24 h平均质量浓度)(文见30页)

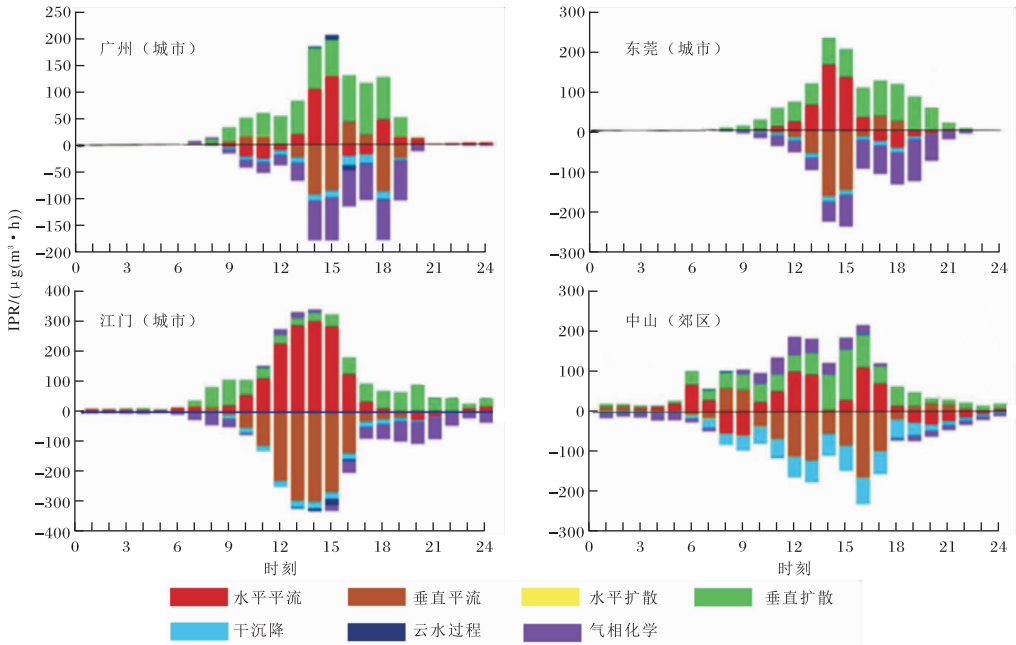


图6 2017-05-10 广东省代表城市各物理和化学过程对臭氧质量浓度的贡献

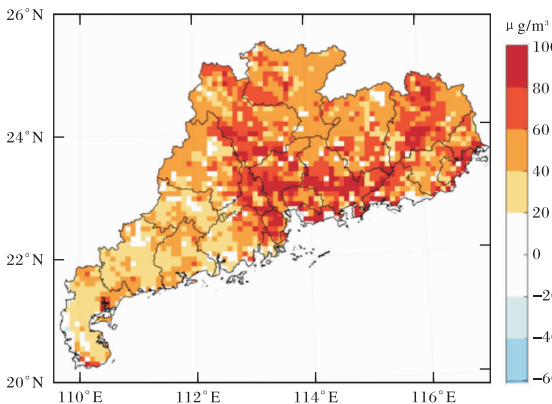


图7 2017-05-10 垂直扩散过程对广东省臭氧质量浓度的贡献

2.3 两个污染个例对比分析

对比分析5月10日和5月29日两次污染个例发现,两个过程的相同点是天气形势相似,850 hPa均有反气旋环流,地面呈均压场,且风速较小,不利于污染物扩散;而且污染当天天气晴好,温度较高,利于臭氧光化学反应生成。两个过程的不同点表现为:“双高”过程前期 PM_{2.5} 和 NO₂ 浓度都较高,前期 NO₂ 浓度增长迅速,较高的 NO₂ 会导致 NO₃⁻ 的二次生成;“双高”过程前期相对湿度比较大(图8),在珠三角地区日均大于80%,有利于异相化学反应发生,加速气溶胶的吸湿增长。

因此,可以推断,若未来几天高空受高压控

热(最高气温 32.7 ℃),形势稳定,有利于臭氧生成。

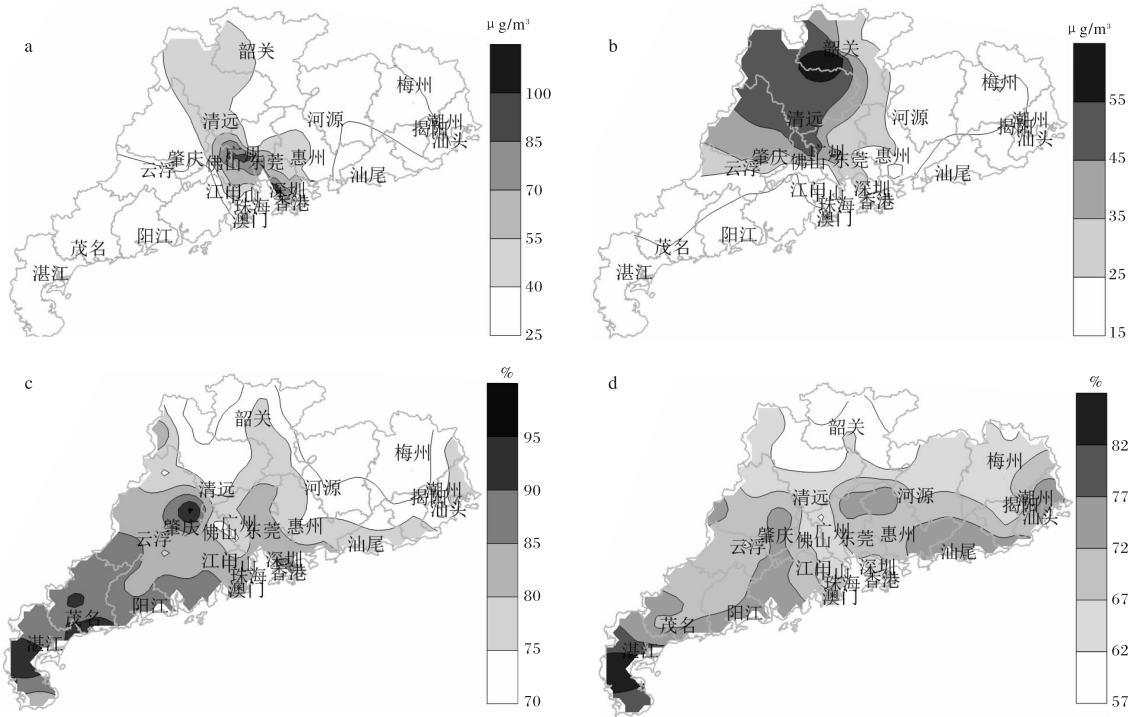


图8 广东2017年5月两次污染个例对比分析(a.5月10日 NO_2 质量浓度日均值;b.5月29日 NO_2 质量浓度日均值;c.5月10日相对湿度;d.5月29日相对湿度)

制,地面均压场且温度较高,同时受到较高相对湿度影响,且 $\text{PM}_{2.5}$ 、 NO_2 起始质量浓度较高时,则可能出现 O_3 和 $\text{PM}_{2.5}$ “双高”复合型污染。这一结论对污染预报预警很有指示意义。

3 结论

(1) 2017年5月10日和5月29日两次大气污染过程期间珠三角天气形势相似,850 hPa均有反气旋环流,地面呈均压场,且风速较小,天气静稳,不利于污染物扩散;而且污染当天天气晴好,温度较高,利于臭氧光化学反应生成。

(2)“双高”污染前期 $\text{PM}_{2.5}$ 和 NO_2 质量浓度都较高,较高的 NO_2 会导致 NO_3^- 的二次生成;“双高”过程前期相对湿度比较大,有利于异相化学反应发生,加速气溶胶的吸湿增长,另外前期细颗粒物的累积,从而使得 $\text{PM}_{2.5}$ 质量浓度升高。

(3)使用CMAQ模拟臭氧来源发现,在城市地区,水平平流和垂直扩散是臭氧质量浓度增加的主要源过程;在郊区站点中山,臭氧主要的来源是气相化学,水平平流和垂直扩散。垂直扩散以

及臭氧在站点周边地区生成然后向水平方向输送,造成站点臭氧质量浓度较高。

(4)若未来几天高空受高压控制,地面均压场且温度较高,同时受到较高相对湿度影响,且 $\text{PM}_{2.5}$ 、 NO_2 起始质量浓度较高时,则利于出现 O_3 和 $\text{PM}_{2.5}$ “双高”复合型污染。

参考文献:

- [1] WU D, TIE X, LI C, et al. An extremely low visibility event over the Guangzhou region: A case study[J]. Atmospheric Environment, 2005, 39(35):6568-6577.
- [2] ZHANG Y H, SU H, ZHONG L J, et al. Regional ozone pollution and observation-based approach for analyzing ozone-precursor relationship during the PRIDE-PRD 2004 campaign[J]. Atmospheric Environment, 2008, 42(25), 6203-6218.
- [3] 吴蒙, 罗云, 吴兑, 等. 珠三角干季海陆风特征及其对空气质量影响的观测[J]. 中国环境科学, 2016, 36(11):3263-3272.

- [4] WANG J, OGAWA S. Effects of meteorological conditions on PM_{2.5} concentrations in Nagasaki, Japan[J]. *International Journal of Environmental Research & Public Health*, 2015, 12(8): 9089–9101.
- [5] MARTINS P C, VALENTE J, PAPOLIA A L, et al. Airways changes related to air pollution exposure in wheezing children[J]. *European Respiratory Journal*, 2012, 39(2): 246.
- [6] ORAKINYO O M, ADEBOWALE A S, MOKGOLU M I, et al. Health risk of inhalation exposure to sub-10 μm particulate matter and gaseous pollutants in an urban-industrial area in South Africa: an ecological study [J]. *Bmj Open*, 2017, 7(3): e013941.
- [7] 吴兑, 吴晓京, 李菲, 等. 中国大陆 1951–2005 年霾与雾的长期变化[C]//中国颗粒学会气溶胶专业委员会. 第十届全国气溶胶会议暨第六届海峡两岸气溶胶技术研讨会摘要集, 2009.
- [8] 吴蒙, 吴兑, 范绍佳, 等. 东莞地区冬季大气边界层结构对 PM_{2.5} 影响的观测研究[J]. *中山大学学报 (自然科学版)*, 2015, 54(4): 158–163.
- [9] ZHANG X Y, SUN J Y, WANG Y Q, et al. Factors contributing to haze and fog in China[J]. *Chinese Science Bulletin*, 2013, 58(13), 1178.
- [10] ZHANG Y, DING A, MAO H, et al. Impact of synoptic weather patterns and inter-decadal climate variability on air quality in the North China Plain during 1980–2013[J]. *Atmospheric Environment*, 2016, 124, 119–128.
- [11] ZHANG Y, MAO H, DING A, et al. Impact of synoptic weather patterns on spatio-temporal variation in surface O₃ levels in Hong Kong during 1999–2011[J]. *Atmospheric Environment*, 2013, 73(4): 41–50.
- [12] ZHANG Z, ZHANG X, GONG D, et al. Evolution of surface O₃ and PM_{2.5} concentrations and their relationships with meteorological conditions over the last decade in Beijing[J]. *Atmospheric Environment*, 2015, 108: 67–75.
- [13] WU M, WU D, FAN S. Meteorological condition associated with poor air quality over Pearl River Delta based on the data of radar wind profiler[J]. *Acta Scientiae Circumstantiae*, 2015, 35(3): 619–626.
- [14] KHIEMM, OOKA R, HUANG H, et al. A numerical study of summer ozone concentration over the Kanto area of Japan using the MM5/CMAQ model [J]. *Journal of Environmental Sciences*, 2011, 23(2): 236–246.
- [15] 高怡, 张美根, 朱凌云, 等. 2008 年奥运会期间北京地区大气 O₃ 浓度模拟分析[J]. *气候与环境研究*, 2010, 15(5): 643–651.
- [16] SITU S, GUENTHER A, WANG X, et al. Impacts of seasonal and regional variability in biogenic VOC emissions on surface ozone in the Pearl River delta region, China[J]. *Atmospheric Chemistry & Physics*, 2013, 13(23): 11803–11817.
- [17] 王占山, 李晓倩, 王宗爽, 等. 空气质量模型 CMAQ 的国内外研究现状[J]. *环境科学与技术*, 2013, 36(z1): 386–391.
- [18] 胡诗玮, 吴小芳, 罗坤, 等. 基于区域多尺度空气质量模型的杭州市大气污染的来源解析[J]. *能源与环境*, 2015(5): 40–44.
- [19] GUENTHER A, KARL T, HARLEY P, et al. Estimates of global terrestrial isoprene emissions using MEGAN (Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature)[J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2006, 6(11): 3181–3210.
- [20] TONSE S R, BROWN N J, HARLEY R A, et al. A process-analysis based study of the ozone weekend effect [J]. *Atmospheric Environment*, 2008, 42(33): 7728–7736.
- [21] KHIEM M, OOKA R, HAYAMI H, et al. Process analysis of ozone formation under different weather conditions over the Kanto region of Japan using the MM5/CMAQ modeling system[J]. *Atmospheric Environment*, 2010, 44(35): 4463–4473.