

大气污染物 SO_x 输送方程的尺度分析*

程新金 黄美元 安峻岭 王自发 徐华英 周玲 肖辉

(中国科学院大气物理研究所 LAPC, 北京 100029)

摘要

文中用量纲分析方法分析了控制大气污染物输送方程的动力学特性。提出了 6 种反映大气污染物输送过程中各种动力、物理和化学过程相对重要性的动力学参数。并以硫氧化物为例进行了各参数量级大小分析,尤其对 3 种起汇作用(去除机理)的机理(化学转化、干沉降和湿清除)在不同尺度大气污染过程中的作用进行了详细分析。结果表明:在一般情况下, SO_2 的气相化学作用小于干沉降和湿清除的作用;干沉降作用很依赖于模式最底层厚度的选取;在有降雨时湿清除作用一般较大。文中还对大气污染物 SO_x 输送方程各项特征量的量级作了分析对比,得出了控制不同尺度大气污染物输送过程的零级近似方程和一级近似方程,并指出了这些方程的基本特征。

关键词: 大气污染输送方程, 量纲分析, 动力学参数。

1 引言

大气污染是一个重要的环境问题。早期人们注意工矿区的大气污染,近 20 a 人们已高度关注城市、区域、洲际和全球范围的大气污染物输送、沉降及其对生态环境的影响。

除建立监测网点进行观测分析研究外,人们常常借助于大气污染物输送方程,建立不同类型的模式,来研究各种尺度的大气污染物扩散、输送和沉降规律。20 世纪 80 年代以来出现了一大批区域污染物输送模式^[1~30],它们分别被用于研究欧洲、北美和东亚等地区 SO_x , NO_x , O_3 和大气气溶胶(包括沙尘)等的分布、输送和沉降。但是在这些研究和模式中还存在着许多不清楚的问题:(1) 模式类型不同,即拉格朗日型和欧拉型,这两种类型的模式对计算结果有什么影响?(2) 模式中对污染物化学过程的处理存在着很大差异。有的把大气化学过程简单地作线性化处理^[1~3, 15, 16, 20, 23~25],即把化学转化速率看作为常数。有的模式对气相化学和液相化学过程考虑得很详细^[4, 5, 9~13, 21, 22, 27, 29, 30],一般含 100~300 个化学反应方程,有的还包括了非均相化学过程^[14, 17~19, 29]。介于两者之间,考虑了中等复杂程度的化学过程^[1~3, 15, 16, 20, 23~25],通常有 30~60 个

化学反应方程,并采用了分裂查表法以减少计算量。化学过程的不同处理对结果有什么影响?怎样处理比较合适?目前尚不清楚。(3) 模式中对于干沉降项的处理各不相同。除了干沉降速度取值不同外,不同模式选取模式最低层的厚度差异很大,有人选 10^0 m,有人取 10^2 m,也有人选取 1~1.5 km。这样必然影响到地面的干沉降量和污染物浓度。(4) 模式中的湿清除过程一般作参数化处理。但是不同模式使用不同的湿清除参数化公式对计算结果会带来多大的影响?(5) 另一重要问题是气象场(风、温度、湿度、云和降水等)和湍流场的获得和处理。大气污染物受气象场的影响非常大,气象场的可靠性直接影响到计算污染物浓度场的真实性。另外,排放源的可靠性、地形的处理、计算方法等问题都影响计算结果。事实上不同模式对同一地区污染物输送也有不同的计算结果。因此,一方面模式需要多次、大量地与实测结果进行对比和验证,并作实际应用。另一方面还要深入研究大气污染物输送方程的动力学特性以及模式中各种物理和化学过程的不同处理对计算结果的影响。

量纲分析和尺度分析在物理学和流体力学中是一种基本的分析方法。它在大气动力学中得到广泛应用,并揭示了许多大气运动的基本动力学特性。

* 初稿时间:2000 年 12 月 10 日;修改稿时间:2001 年 4 月 16 日。
资助课题:《国家重点基础研究发展规划项目》G1999032801、中国科学院重大项目 A(KZ95+ A+ 403-03)和国家自然科学基金(49675247)。

大气污染物的输送是由大气运动和污染物的散布组成。文中将对大气污染物输送方程进行尺度和量纲分析, 讨论污染物(SO₂, SO₄²⁻) 输送中不同物理、化学过程在不同尺度情况下的重要性和简化处理方案。

2 建立无量纲方程

欧拉型大气污染物输送方程(大气污染方程)可以表达如下

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = \\ K_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \\ PC - \frac{V_d}{H_0} C - W_a C + Q \end{aligned} \quad (1)$$

其中 C 为污染物的浓度, u, v, w 为 3 个方向的风速, K_x, K_y, K_z 分别为 x, y, z 方向的湍流交换系数, P 为化学转化速率, V_d 为污染物的干沉降速度, H_0 为最低层厚度, W_a 为湿清除系数, Q 为污染物排放源强。

设 $U = U' \times \bar{U}$, 其中 U 为有量纲量, \bar{U} 为无量纲量, U' 为特征量, U' 不随时间和空间变化。相应 $W = W' \times \bar{W}$, $C = C' \times \bar{C}$, $L = L' \times \bar{L}$, $H = H' \times \bar{H}$, $t = \tau \times \bar{t}$ 。

则可得无量纲方程为

$$\begin{aligned} \frac{C'}{\tau} \frac{\partial \bar{C}}{\partial \bar{t}} + \frac{C' u'}{x'} \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial \bar{x}} + \frac{C' v'}{y'} \bar{v} \frac{\partial \bar{C}}{\partial \bar{y}} + \frac{C' w'}{z'} \bar{w} \frac{\partial \bar{C}}{\partial \bar{z}} = \\ \frac{K_x C'}{x'^2} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{K_y C'}{y'^2} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial \bar{y}^2} + \frac{K_z C'}{z'^2} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial \bar{z}^2} - \\ PC' \bar{C} - \frac{V_d C'}{H_0} \bar{C} - W_a C' \bar{C} + Q \end{aligned} \quad (2)$$

对上述方程除以 $C' S$, 并去掉“ $'$ ”和“-”, 并令 S 表示汇项的速率(如化学转化的净速率或干沉降速率或湿清除速率), 因次为 $\frac{1}{\tau}$ 。则有

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau S} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{U}{LS} \left[u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} \right] + \frac{W}{HS} w \frac{\partial C}{\partial z} = \\ \frac{K_L}{L^2 S} \left[\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + v \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right] + \frac{K_z}{H^2 S} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \\ \frac{P}{S} C - \frac{V_d}{H_0 S} - \frac{W_a}{S} C + \frac{Q}{SC} \end{aligned} \quad (3)$$

3 大气污染的动力参数

在以上无量纲方程中, 出现了一些由特征量和物理量组成的无因次参数。这些参数有着各自的物

理和动力意义, 是大气污染扩散输送中重要的动力参数。现在分别予以讨论。

(1) 令 $H = \frac{1}{\tau S}$, 称为汇项作用参数, 它表示大气污染动力方程中汇项对污染物浓度变化的作用, 是衡量输送时间尺度与汇项变化速率之间的关系, 如果 $H \ll 1$, 即 $S \gg \frac{1}{\tau}$, 说明污染物的汇项(去除机制)对浓度变化没有什么作用, 可以忽略。如果 $H \ll 1$, 说明污染物的汇项在污染物浓度变化中起重要作用。污染物的汇项有 3 种, 即化学转化速率(P), 干沉降速率($\frac{V_d}{H_0}$) 和湿清除速率(W_a), 因此 S 分析表示为 $P, \frac{V_d}{H_0}, W_a$, 相应 $H_1 = \frac{1}{\tau P}, H_2 = \frac{H_0}{\tau V_d}, H_3 = \frac{1}{\tau W_a}$ 。干沉降项不仅决定于污染物的干沉降速度(V_d), 还决定于模式计算的最低层的厚度(H_0), 所以降落到地面的干沉降量与模式所取的最低层厚度有关, 也就是干沉降的作用的重要性与所取的最低层厚度有关。后面将详细讨论。

(2) 令 $W = \frac{U}{LS}$, 称为水平输汇参数, 它表示水平输送作用与汇项作用之比。如果 $W \gg 1$, 说明污染物的水平输送作用远大于使污染物去除的各种汇作用。污染物有源时, 大气中污染物将不断增加。如果 $W \ll 1$, 则与汇的去除作用相比, 水平输送作用很小, 可以忽略, 相应 $W_1 = \frac{U}{LP}, W_2 = \frac{UH_0}{LV_d}, W_3 = \frac{U}{LW_a}$, 分别表示水平输送作用与化学转化、干沉降和湿清除作用之比。

(3) 令 $X = \frac{W}{LS}$, 称为垂直输汇参数, 它表示垂直输送作用与汇作用之比。如果 $X \gg 1$, 说明垂直输送作用远大于汇作用, 各种去除项可以忽略。相反如果 $X \ll 1$, 则与汇的去除作用相比, 垂直输送项不重要, 相应地, $X_1 = \frac{W}{HP}, X_2 = \frac{WH_0}{HV_d}, X_3 = \frac{W}{HW_a}$, 分别表示垂直输送作用与化学转化、干沉降和湿清除作用之比。

(4) 令 $F = \frac{K_L}{L^2 S}$, 称为水平湍流参数, 它表示水平湍流扩散作用与汇作用之比。令 $Z = \frac{K_z}{H^2 S}$, 称为垂直湍流参数, 它表示垂直湍流扩散作用与汇作用

之比。如果 $F \gg 1$ 或 $Z \gg 1$, 说明水平湍流扩散或垂直湍流扩散作用远大于汇作用, 方程中汇项可以忽略。相反如果 $F \ll 1$ 或 $Z \ll 1$, 则汇的去除作用很重要。相应地, $F_1 = \frac{K_L}{L^2 P}$, $F_2 = \frac{K_z H_0}{L^2 V_d}$, $F_3 = \frac{K_L}{L^2 W_a}$, $Z_1 = \frac{K_z}{H^2 P}$, $Z_2 = \frac{K_z H_0}{H^2 V_d}$, $Z_3 = \frac{K_z}{H^2 W_a}$, 分别表示水平、垂直湍流扩散作用与化学转化、干沉降和湿清除作用之比。

(5) 令 $Y = \frac{Q}{SC}$, 称为源汇参数, 它表示源汇相对作用大小。如果 $Y \gg 1$, 则表示排放源强很大, 而去除作用很小, 大气污染将日益严重。相反, 如果 $Y \ll 1$, 则表明污染排放源很小, 大气中的各种去除作用足以减轻大气污染的排放, 大气状况将好转。这是个重要参数, 可以大体鉴别一个地区大气污染未来变化趋势。相应地, $Y_1 = \frac{Q}{PC}$, $Y_2 = \frac{QH_0}{V_d C}$, $Y_3 = \frac{Q}{W_a C}$, 分别表示源强与化学转化、干沉降和湿清除作用之比。

(6) 令 $M_1 = \frac{PH_0}{V_d}$, $M_2 = \frac{P}{W_a}$, $M_3 = \frac{V_d}{H_0 W_a}$ 分别表示化干参数、化湿参数和干湿参数, 他们分别表示

化学转化作用与干湿清除作用之比以及干沉降与湿清除作用之比。如果 $M_1 \gg 1$, $M_2 \gg 1$ 则表明化学转化作用远大于干沉降作用, 远大于湿清除作用, 反之, $M_1 \ll 1$, $M_2 \ll 1$, 则化学转化作用很小, 可以忽略; 如果 $M_3 \gg 1$, 则干沉降作用远大于湿清除作用, 湿清除作用可忽略; 如果 $M_3 \ll 1$, 则干沉降作用很小, 可以忽略。

4 各种动力参数的量纲分析

大气污染方程中涉及到许多大气物理参数, 如风(u, v, w), 湍流交换系数(K_L, K_z)和大气运动的尺度参量(x, y, z, t)。在求解化学转化、干、湿沉降时, 还需要温度、湿度、空气密度和云物理等参量。因此在求解大气污染物浓度时, 必须把大气污染方程与大气运动方程组及相关的云物理方程, 大气边界层方程及大气化学方程联合求解。大气运动有不同的尺度, 所以大气污染问题也有不同的尺度。大气污染的动力参数的量纲在不同尺度的大气污染问题中是不同的, 必须分别予以讨论。

根据大气动力学的分析, 假定用 L, H, V, W 和 τ 分别表示大气运动的水平尺度、垂直尺度、水平速度、垂直速度和时间的特征量, 根据大气运动的尺度分类, 各特征量见表 1^[31, 32]。

表 1 不同尺度大气运动特征量的量级

特征量	L (m)	H (m)	V (m/s)	W (m/s)	τ (s)
大尺度系统	10^6	10^4	10^1	10^{-2}	$10^5 \sim 10^6$
中尺度系统	10^5	10^4	10^1	10^{-2}	10^5
小尺度系统	10^4	$10^3 \sim 10^4$	$10^1 \sim 10^2$	10^{-1}	10^4
微尺度系统	10^3	10^3	$10^0 \sim 10^1$	$10^{-1} \sim 10^0$	10^3

(1) 对于汇项作用参数 $H = \frac{1}{\tau S}$, 表示了运动时间尺度与汇项作用时间的关系。 $H_1 = \frac{1}{\tau P}$, $H_2 = \frac{H_0}{\tau V_d}$, $H_3 = \frac{1}{\tau W_a}$ 大气污染方程中出现了 3 项特别的汇项, 即化学转化项、干沉降项和湿沉降项, 这些汇项在大气污染物输送方程中起着非常重要的作用。

化学转化项包括气相化学转化、液相化学转化和非均相化学转化, 对于不同的物种, 有不同的化学反应方程和转化率。这里以 SO_2 为例讨论其汇项速率及其在大气污染扩散中的作用。大气中 SO_2 的气相转化率的典型值为 $1\%/h$, 即 $2.8 \times 10^{-6} s^{-1}$, 液相转化率的典型值为 $10\%/h$, 即 2.8×10^{-5}

s^{-1} , 因此 SO_2 的化学转化速率特征量为 $P = 10^{-5} \sim 10^{-6} s^{-1}$ 。

干沉降项的作用不只与污染物的干沉降速度有关, 而且还与模式最低层的厚度有关。在大气污染方程的求解中, 对地面的干沉降只在离地面的最低层给予考虑, 所以模式所取的最低层厚度直接影响到干沉降量和该层的污染物浓度, 这一重要特征在过去许多模式计算中没有予以注意。干沉降速度随下垫面、层结状况和气象条件而不同, 对于 SO_2 来说, 一般为 $0.2 \sim 2.2$ cm/s, SO_4^{2-} 为 $0.05 \sim 0.5$ cm/s, 不同模式中所采取的最低层厚度差别很大, 但多数在 $1 \sim 1000$ m, 对于微尺度、小尺度、中尺度和大尺度, 可以分别取其典型值为 1, 10, 100 和

1000 m。

湿清除项的作用与降雨强度有关。一般表示为 $W_a = AI^B$, 其中 I 为雨强, A 和 B 为常数, 不同地区、不同气象条件下 A , B 不同。不同作者使用不同的系数。一般来说, 对于 SO₂, $W_a = 10^{-5} \sim 10^{-6}$

I_s^{-1} , SO₄²⁻ 大约增大 5 倍。

对于不同尺度的大气运动, H_1 , H_2 , H_3 的量级值分别如表 2。

从表 2 可以看到:

① 对于小尺度和微尺度, 即对于几十公里及以

表 2 H_1 , H_2 和 H_3 的量级

	H_1		H_2		H_3					
	气相	液相	SO ₂	SO ₄ ²⁻	1 (mm/h)		10 (mm/h)		100 (mm/h)	
					SO ₂	SO ₄ ²⁻	SO ₂	SO ₄ ²⁻	SO ₂	SO ₄ ²⁻
大尺度	10 ¹	10 ⁰	10 ⁰ ~10 ¹	10 ⁰ ~10 ¹	10 ⁻¹ ~10 ⁰	10 ⁻² ~10 ⁻¹	10 ⁻² ~10 ⁻¹	10 ⁻³ ~10 ⁻²	10 ⁻³ ~10 ⁻²	10 ⁻³ ~10 ⁻²
中尺度	10 ¹	10 ⁰	10 ⁻¹ ~10 ⁰	10 ⁻¹ ~10 ⁰	10 ⁻¹ ~10 ⁰	10 ⁻² ~10 ⁻¹	10 ⁻² ~10 ⁻¹	10 ⁻³ ~10 ⁻²	10 ⁻³ ~10 ⁻²	10 ⁻³ ~10 ⁻²
小尺度	10 ²	10 ¹	10 ⁻¹ ~10 ⁰	10 ⁻¹ ~10 ⁰	10 ⁻¹ ~10 ⁰	10 ⁻² ~10 ⁻¹	10 ⁻¹ ~10 ⁰	10 ⁻² ~10 ⁻¹	10 ⁻² ~10 ⁻¹	10 ⁻² ~10 ⁻¹
微尺度	10 ² ~10 ⁴	10 ¹ ~10 ³	10 ⁻¹ ~10 ⁰	10 ⁻¹ ~10 ⁰	10 ⁰ ~10 ²	10 ⁰ ~10 ¹	10 ⁰ ~10 ¹	10 ⁻¹ ~10 ⁰	10 ⁻¹ ~10 ⁰	10 ⁻¹ ~10 ⁰

下的大气污染物的输送而言, 化学转化对污染物浓度变化影响很小, 可以忽略, 而在城市和区域尺度大气污染问题中液相化学过程必须考虑。SO₂ 气相转化率一般在 0.3%~3.0% h⁻¹, 因此 H_1 的量级在 10⁰~10¹, 气相化学转化作用较小, 但是一般还不能完全忽略。在大气污染方程中气相化学过程很复杂, 有许多化学反应计算量很大。但从其转化率对硫化物浓度变化的影响来看, 作用不是很大。看来把气相化学过程考虑很详细, 力求很精确, 可能是不必要的。对于液相以及转化率相当的非均相化学转化应该给予更大的重视。

② 干沉降项作用很依赖于模式最低层厚度 H_0 的选取, 在上述标准选取时, 从表中可以看出, 在各种尺度运动中, 干沉降对浓度变化是不可忽略的。相对来说, 在大尺度运动中干沉降作用略小, 在一些区域尺度污染物输送模式计算中, H_0 有不同的选取, 从 10~10³ m, 当取 H_0 为 10² m 或 10¹ m 时, SO₂

的 H_2 分别达到 10⁻¹~10⁰ 及 10⁻²~10⁻¹, 相应 SO₄²⁻ 的 H_2 为其 5 倍。可见这时干沉降作用很重要。对于城市尺度的污染模式中, H_0 也有不同的选取, 如果 H_0 为 10¹ m 或 10⁰ m 时, 则表中 H_2 值要小 1~2 个量级, 这时干沉降作用也是很重要。总之, H_2 正比于 H_0 , H_0 愈小, 则 H_2 愈小, 干沉降作用愈大。

③ 降水的湿清除一般都有作用, 特别是当雨强大于 10 mm/h 时, 雨水对污染物的清除作用很重要, 不可忽略。只有在雨强小时 (1 mm/h), 对于微尺度运动, 湿清除作用不重要, 可以忽略。

(2) 对于水平输汇参数 ($W = \frac{U}{LS}$) 也有 3 项,

$W_1 = \frac{U}{LS}$, $W_2 = \frac{UH_0}{LS}$, $W_3 = \frac{U}{LW_a}$ 。根据以上对 P ,

$\frac{V_d}{H_0}$ 以及 W_a 的量级分析和大气运动特征量的量级

列于表 3。

可以看出, 对于小尺度和微尺度大气运动而言,

表 3 W_1 , W_2 和 W_3 的量级

	W_1		W_2		W_3					
	气相	液相	SO ₂	SO ₄ ²⁻	1 mm/h		10 mm/h		100 mm/h	
					SO ₂	SO ₄ ²⁻	SO ₂	SO ₄ ²⁻	SO ₂	SO ₄ ²⁻
大尺度	10 ¹	10 ⁰	10 ⁰ ~10 ¹	10 ⁰ ~10 ¹	10 ⁻¹ ~10 ⁰	10 ⁻² ~10 ⁻¹	10 ⁻² ~10 ⁻¹	10 ⁻³ ~10 ⁻²	10 ⁻³ ~10 ⁻²	10 ⁻⁴ ~10 ⁻³
中尺度	10 ²	10 ¹	10 ⁰ ~10 ¹	10 ⁰ ~10 ¹	10 ⁰ ~10 ¹	10 ⁻¹ ~10 ⁰	10 ⁻¹ ~10 ⁰	10 ⁻² ~10 ⁻¹	10 ⁻² ~10 ⁻¹	10 ⁻³ ~10 ⁻²
小尺度	10 ³ ~10 ⁴	10 ² ~10 ³	10 ⁰ ~10 ²	10 ⁰ ~10 ²	10 ¹ ~10 ³	10 ⁰ ~10 ²	10 ⁰ ~10 ²	10 ⁻¹ ~10 ¹	10 ⁻¹ ~10 ¹	10 ⁻² ~10 ⁰
微尺度	10 ³ ~10 ⁴	10 ² ~10 ³	10 ⁻¹ ~10 ¹	10 ⁻¹ ~10 ¹	10 ¹ ~10 ³	10 ⁰ ~10 ²	10 ⁰ ~10 ²	10 ⁻¹ ~10 ¹	10 ⁻¹ ~10 ¹	10 ⁻² ~10 ⁰

大气的水平输送作用远远大于化学转化作用, 所以在小尺度和微尺度大气污染物输送中, 化学转化可以忽略, 在大尺度运动中, 应考虑液相化学和气相化学过程, 在中尺度大气运动中, 要考虑液相化学。

干沉降作用一般比水平输送作用略小, 对于各

种尺度运动变化不大, 相对而言, 小尺度大气污染输送中, 干沉降作用较小, 在中尺度中有人取 $H_0 = 10^3$ m, 这时, $W_2 = 10^1 \sim 10^2$, 即干沉降作用很小, 更可以忽略。

由表 3 可见, 对于小尺度和微尺度运动而言, 雨

水的清除作用一般小于水平输送,但是在尺度中,降水的清除作用很重要,其量级超过水平输送作用。对于中尺度而言,除雨强小以外,降水的清除作用一般也是很重要的。

(3) 对于垂直输汇参数 $X = \frac{w}{HS}$ 也有 3 项,即

$$X_1 = \frac{w}{HS}, X_2 = \frac{wH_0}{Hv_d}, X_3 = \frac{w}{HW_a}, \text{ 同样可以得到表 4.}$$

表 4 X_1, X_2 和 X_3 的量级

	X_1		X_2				X_3			
	气相	液相	1 mm/h		10 mm/h		100 mm/h			
			SO ₂	SO ₄ ²⁻	SO ₂	SO ₄ ²⁻	SO ₂	SO ₄ ²⁻	SO ₂	SO ₄ ²⁻
大尺度	10 ⁰	10 ⁻¹	10 ⁻¹ ~10 ⁰	10 ⁻¹ ~10 ⁰	10 ⁻² ~10 ⁻¹	10 ⁻³ ~10 ⁻²	10 ⁻³ ~10 ⁻²	10 ⁻⁴ ~10 ⁻³	10 ⁻⁴ ~10 ⁻³	10 ⁻⁵ ~10 ⁻⁴
中尺度	10 ¹	10 ⁻¹	10 ⁻² ~10 ⁻¹	10 ⁻² ~10 ⁻¹	10 ⁻² ~10 ⁻¹	10 ⁻³ ~10 ⁻²	10 ⁻³ ~10 ⁻²	10 ⁻⁴ ~10 ⁻³	10 ⁻⁴ ~10 ⁻³	10 ⁻⁵ ~10 ⁻⁴
小尺度	10 ¹ ~10 ²	10 ⁰ ~10 ¹	10 ⁻² ~10 ⁰	10 ⁻² ~10 ⁰	10 ⁻¹ ~10 ¹	10 ⁻² ~10 ⁰	10 ⁻² ~10 ⁰	10 ⁻³ ~10 ⁻¹	10 ⁻³ ~10 ⁻¹	10 ⁻⁴ ~10 ⁻²
微尺度	10 ² ~10 ³	10 ¹ ~10 ²	10 ⁻² ~10 ⁰	10 ⁻² ~10 ⁰	10 ⁰ ~10 ²	10 ⁻¹ ~10 ¹	10 ⁻¹ ~10 ¹	10 ⁻² ~10 ⁰	10 ⁻² ~10 ⁰	10 ⁻³ ~10 ⁻¹

在大、中尺度运动中,气相化学作用与垂直输送作用相当,而液相化学作用明显大于垂直输送作用。但对于微尺度来说,化学转化作用远小于垂直输送作用,可以忽略,在小尺度运动中,气相化学作用不重要,液相化学作用要保留。

干沉降对于各种尺度的运动都是重要的。一般它比垂直输送作用大一个量级左右。

湿清除作用一般都比垂直输送作用大,特别是在大、中尺度时湿清除作用很大,垂直输送作用可以忽略。雨小时,湿清除作用不大。

(4) 3 项汇作用的相对重要性

① 对于化干参数 $M_1 = \frac{PH_0}{V_d}$, 其量级见表 5。

由表 5 可见,如果模式底层厚度小于 10 m, 则

表 5 M_1 的量级

H_0	气相			液相	
	SO ₂	SO ₄ ²⁻	SO ₂	SO ₄ ²⁻	
1000 m	10 ⁻¹ ~10 ⁰	10 ⁰ ~10 ¹	10 ⁰ ~10 ¹	10 ¹ ~10 ²	
100 m	10 ⁻² ~10 ⁻¹	10 ⁻¹ ~10 ⁰	10 ⁻¹ ~10 ⁰	10 ⁰ ~10 ¹	
10 m	10 ⁻³ ~10 ⁻²	10 ⁻² ~10 ⁻¹	10 ⁻² ~10 ⁻¹	10 ⁻¹ ~10 ⁰	
1 m	10 ⁻⁴ ~10 ⁻³	10 ⁻³ ~10 ⁻²	10 ⁻³ ~10 ⁻²	10 ⁻² ~10 ⁻¹	

干沉降作用远大于化学转化作用,化学转化作用可以忽略。当 $H_0 = 100$ m 时,干沉降作用与液相化学作用相当,比气相化学作用仍然大。当 $H_0 = 1000$ m 时,干沉降作用与气相化学作用相当,液相化学作用则大于干沉降作用

② 对于化湿参数 $M_2 = \frac{P}{M}$, 见表 6。

表 6 M_2 的量级

	1 mm/h		10 mm/h		100 mm/h	
	SO ₂	SO ₄ ²⁻	SO ₂	SO ₄ ²⁻	SO ₂	SO ₄ ²⁻
化学						
气相	10 ⁻² ~10 ⁻¹	10 ⁻³ ~10 ⁻²	10 ⁻³ ~10 ⁻²	10 ⁻⁴ ~10 ⁻³	10 ⁻⁴ ~10 ⁻³	10 ⁻⁵ ~10 ⁻⁴
液相	10 ⁻¹ ~10 ⁰	10 ⁻² ~10 ⁻¹	10 ⁻² ~10 ⁻¹	10 ⁻³ ~10 ⁻²	10 ⁻³ ~10 ⁻²	10 ⁻⁴ ~10 ⁻³

由表 6 可见,湿清除作用均比气相化学作用大,一般情况下,特别是当雨强大于 1 mm/h 时,与湿清除作用相比,气相化学作用可以忽略。液相化学作

用只有在雨强小(1 mm/h)时,其作用才与湿清除作用相当,其他情况下,都比湿清除作用小。

③ 对于干湿参数 $M_3 = \frac{V_d}{H_0 W_a}$, 有表 7。

表 7 M_3 的量级

H_0	1 mm/h		10 mm/h		100 mm/h	
	SO ₂	SO ₄ ²⁻	SO ₂	SO ₄ ²⁻	SO ₂	SO ₄ ²⁻
1 m	10 ¹ ~10 ³	10 ⁰ ~10 ²	10 ⁰ ~10 ²	10 ⁻¹ ~10 ¹	10 ⁻¹ ~10 ¹	10 ⁻² ~10 ⁰
10 m	10 ⁰ ~10 ²	10 ⁻¹ ~10 ¹	10 ⁻¹ ~10 ¹	10 ⁻² ~10 ⁰	10 ⁻² ~10 ⁰	10 ⁻³ ~10 ⁻¹
100 m	10 ⁻¹ ~10 ¹	10 ⁻² ~10 ⁰	10 ⁻² ~10 ⁰	10 ⁻³ ~10 ⁻¹	10 ⁻³ ~10 ⁻¹	10 ⁻⁴ ~10 ⁻²
1000 m	10 ⁻² ~10 ⁰	10 ³ ~10 ¹	10 ⁻³ ~10 ⁻¹	10 ⁻⁴ ~10 ⁻²	10 ⁻⁴ ~10 ⁻²	10 ⁻⁵ ~10 ⁻³

由表 7 可见, 对于 $H_0 \gg 100 \text{ m}$, 除了雨强小以外对 SO_2 来说以外, 干沉降作用都远小于湿清除作用, 干沉降作用可以忽略。当 $H_0 = 10 \text{ m}$ 时, 在雨强 $I < 10 \text{ mm/h}$ 时, 干沉降作用较大, 当 $I > 10 \text{ mm/h}$ 时, 湿清除作用较大。对于 $H_0 = 1 \text{ m}$, 除了雨强 $I > 100 \text{ mm/h}$ 时以外, 干沉降作用都远大于湿清除作用, 湿清除作用可以忽略。

从以上的分析可以知道, ① 对于硫化物的大气输送而言, 硫化物的气相化学转化作用较小, 相对于干沉降和湿清除作用来说, 它的作用较小, 而计算气相化学过程是计算最复杂、计算量最大的一种汇项, 就其作用来说, 不必对气相化学过程进行细致计算, 如果气相化学转化速率取 $1\%/h$, 仔细计算转化速率不会有量级的差别。因为它一般在 $0.3\% \sim 3.0\%/h$, 这一误差在研究硫输送过程中不会带来重要影响, 因为它的作用远小于干沉降和湿清除过程。② 干沉降作用很依赖于模式最低层的选取, 如厚度选取为 1000 m , 则干沉降作用比湿清除作用小很

多, 与气相化学作用相当, 干沉降和气相化学作用都不大。如果 $H_0 = 1 \text{ m}$, 则干沉降作用很大, 远远比化学转化和湿清除作用大。③ 湿清除过程在大多数情况下其作用是很大的, 它的作用远大于化学转化和干沉降, 特别是雨强大于 10 mm/h 时, 更加明显。所以在有雨时, 正确计算湿清除过程具有重要意义。如果湿清除的计算有量级上的误差, 将对硫化物的输送量和沉降量有重大影响。

(5) 现在分析湍流参数 $Z = \frac{K_z}{H^2 S}$, 它也有 3 项,

即 $Z_1 = \frac{K_z}{H^2 P}$, $Z_2 = \frac{K_z \cdot H_0}{H^2 V_d}$ 和 $Z_3 = \frac{K_z}{W_a}$, 分别表示湍流的垂直输送作用与化学转化作用、干沉降作用和湿清除作用的相对重要性。下面予以分析。

对于大尺度、中尺度、小尺度和微尺度大气运动, K_z 的量级可以分别取 $10^1 \sim 10^2$, $10^1 \sim 10^2$, $10^2 \sim 10^3$ 和 $10^2 \sim 10^3$, 单位为 m^2/s 。因此, K_z/H^2 的量级分别为 $10^{-7} \sim 10^{-6}$, $10^{-7} \sim 10^{-6}$, $10^{-4} \sim 10^{-3}$ 和 $10^{-4} \sim 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ 。则 Z_1 和 Z_2 的量级见表 8。

表 8 Z_1 和 Z_2 的量级

	Z_1		Z_2			
	气相	液相	1 m	10 m	100 m	1000 m
大尺度	$10^{-1} \sim 10^0$	$10^{-2} \sim 10^{-1}$	$10^{-5} \sim 10^{-3}$	$10^{-4} \sim 10^{-2}$	$10^{-3} \sim 10^{-1}$	$10^{-2} \sim 10^0$
中尺度	$10^{-1} \sim 10^0$	$10^{-2} \sim 10^{-1}$	$10^{-5} \sim 10^{-3}$	$10^{-4} \sim 10^{-2}$	$10^{-3} \sim 10^{-1}$	$10^{-2} \sim 10^0$
小尺度	$10^2 \sim 10^3$	$10^1 \sim 10^2$	$10^{-2} \sim 10^0$	$10^{-1} \sim 10^1$	$10^0 \sim 10^2$	$10^1 \sim 10^3$
微尺度	$10^2 \sim 10^3$	$10^1 \sim 10^2$	$10^{-2} \sim 10^0$	$10^{-1} \sim 10^1$	$10^0 \sim 10^2$	$10^1 \sim 10^3$

由表 8 可见, 对于小尺度和微尺度大气污染输送而言, 湍流垂直输送作用远大于化学转化作用, 化学作用可以不考虑; 当 H_0 为 $1 \sim 10 \text{ m}$ 时, 湍流垂直输送作用和干沉降作用相当, 当 H_0 为 $100 \sim 1000 \text{ m}$ 时, 湍流垂直输送作用大于干沉降作用。对于大尺度和中尺度大气污染输送问题, 化学转化作用一般大于湍流垂直输送作用, 特别是液相化学转化作用

很明显; 湍流垂直输送作用都远小于干沉降作用, 这时湍流作用是不重要的。

从表 9 中 Z_3 的量级可见, 湍流垂直输送作用一般比湿清除作用小很多。只有在小、微尺度大气污染问题中, 当雨强小时, 湍流垂直输送作用才达到或超过湿清除作用。

从以上分析可以看出, 在大尺度和中尺度大气

表 9 Z_3 的量级

	1 mm/h		10 mm/h		100 mm/h	
	SO_2	SO_4^{2-}	SO_2	SO_4^{2-}	SO_2	SO_4^{2-}
大尺度	$10^{-3} \sim 10^{-1}$	$10^{-4} \sim 10^{-2}$	$10^{-4} \sim 10^{-2}$	$10^{-5} \sim 10^{-3}$	$10^{-5} \sim 10^{-3}$	$10^{-6} \sim 10^{-4}$
中尺度	$10^{-3} \sim 10^{-1}$	$10^{-4} \sim 10^{-2}$	$10^{-4} \sim 10^{-2}$	$10^{-5} \sim 10^{-3}$	$10^{-5} \sim 10^{-3}$	$10^{-6} \sim 10^{-4}$
小尺度	$10^0 \sim 10^2$	$10^{-1} \sim 10^1$	$10^{-1} \sim 10^1$	$10^{-2} \sim 10^0$	$10^{-2} \sim 10^0$	$10^{-3} \sim 10^{-1}$
微尺度	$10^0 \sim 10^2$	$10^{-1} \sim 10^1$	$10^{-1} \sim 10^1$	$10^{-2} \sim 10^0$	$10^{-2} \sim 10^0$	$10^{-3} \sim 10^{-1}$

污染问题中, 湍流输送作用比化学转化、干沉降、湿清除作用小。只有小尺度和微尺度时中, 而且当雨

强很小, H_0 取得较大时, 湍流垂直输送作用才显得重要。在绝大多数情况下, 水平湍流扩散作用比风

的水平输送作用要小得多。

5 大气污染物输送方程各项量纲分析

对大气污染输送方程各项特征量的量级作一对比分析(表 10)。

表 10 不同尺度大气污染物输送方程的各项的量级

	$\frac{1}{T}$	$\frac{U}{L}$	$\frac{W}{H}$	$\frac{K_L}{L^2}$	$\frac{K_L}{H^2}$	P	$\frac{V_d}{H_0}$	W_a
大尺度	$10^{-6} \sim 10^{-5}$	10^{-5}	10^{-6}	$10^{-12} \sim 10^{-11}$	$10^{-7} \sim 10^{-6}$	$10^{-6} \sim 10^{-5}$	$10^{-6} \sim 10^{-5}$	$10^{-5} \sim 10^{-3}$
中尺度	10^{-5}	10^{-4}	10^{-6}	$10^{-10} \sim 10^{-9}$	$10^{-7} \sim 10^{-6}$	$10^{-6} \sim 10^{-5}$	$10^{-5} \sim 10^{-4}$	$10^{-5} \sim 10^{-3}$
小尺度	10^{-4}	$10^{-3} \sim 10^{-2}$	$10^{-5} \sim 10^{-4}$	$10^{-7} \sim 10^{-6}$	$10^{-4} \sim 10^{-3}$	$10^{-6} \sim 10^{-5}$	$10^{-4} \sim 10^{-3}$	$10^{-5} \sim 10^{-3}$
微尺度	$10^{-4} \sim 10^{-3}$	$10^{-3} \sim 10^{-2}$	$10^{-4} \sim 10^{-3}$	$10^{-5} \sim 10^{-4}$	$10^{-4} \sim 10^{-3}$	$10^{-6} \sim 10^{-5}$	$10^{-3} \sim 10^{-2}$	$10^{-5} \sim 10^{-3}$

在源一定的情况下,大气污染分布是定常的,污染物排放靠水平输送和降水的清除来达到平衡。没有降水的情况下,污染物浓度的分布只取决于水平输送。

取量级最大和次大项的一级近似的大气污染方程为

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = K_x \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - PC - \frac{V_d}{H_0} C - W_a C + Q \quad (5)$$

在原方程中,只有湍流的水平扩散可忽略。

②对于中尺度(10^2 km)的大气污染问题,零级近似的大气污染方程为

$$u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = - \frac{V_d}{H_0} C - W_a C + Q \quad (6)$$

当排放源定常时,污染物排放经过水平输送、干沉降、湿清除的共同作用达到平衡,大气污染浓度分布定常。

一级近似的大气污染方程为

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - PC - \frac{V_d}{H_0} C - W_a C + Q \quad (7)$$

在方程中,只有湍流的水平扩散可以忽略。

③对于小尺度($10 \sim 100$ km)的大气污染问题,零级近似的大气污染方程为

$$u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = - \frac{V_d}{H_0} C - W_a C + Q \quad (8)$$

一级近似的大气污染方程

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} =$$

可以看出:①对于大尺度($>> 10^3$ km)的大气污染问题,只取量级最大项的零级近似的大气污染方程为

$$u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = - W_a C + Q \quad (4)$$

$$K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{V_d}{H_0} C - W_a C + Q \quad (9)$$

在小尺度污染问题中,由于时间尺度短,化学转化作用不大,可以忽略。

④对于微尺度($1 \sim 10$ km)的空气污染问题,零级近似的大气污染方程为

$$u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = - \frac{V_d}{H_0} C + Q \quad (10)$$

一级近似的大气污染方程

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = K_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{V_d}{H_0} C - W_a C + Q \quad (11)$$

在微尺度空气污染问题中,水平方向的湍流扩散也要考虑,而化学转化作用可忽略。

上面各尺度的大气污染方程都加上了源强项,

与 $\frac{\partial C}{\partial t}$ 项因次相当的不同尺度的排放源强具有一定的临界值,低于这临界值,则源强对污染物浓度变化影响不显著。从大、中、小、微尺度,临界值分别为 $10^9, 10^8, 10^7, 10^5$ kg/a。

总之,对于零级近似的大气污染输送方程,具有定常、水平输送、无化学变化的特点,即污染物通过水平输送,使得源汇达到平衡,污染物浓度呈现定常分布。在一级近似方程中,对于大尺度和中尺度运动,除无水平湍流扩散外,全部保留;对小尺度运动,无水平湍流扩散,无化学变化;对微尺度运动,不考虑化学变化。

6 结 论

文中通过建立大气污染物输送的无量纲方程, 分析了该方程的动力学特性, 提出了 6 种能反映大气污染物输送中各种动力、物理和化学过程的相对重要性的无因次动力学参数, 并以硫化物为例进行了各参数的量级大小分析, 尤其对 3 种起汇作用(去除作用)的机理(化学转化、干沉降和湿清除)在不同尺度大气污染过程中的作用进行了详细分析。在一般情况下硫化物的气相化学作用小于干沉降和湿清除作用; 干沉降作用依赖于模式最低层厚度的选取; 在有降水时湿清除的作用一般比较大。文中还对大

气污染物输送方程各项特征量的量级进行了分析对比, 得到了控制不同尺度大气污染物输送方程的零级近似和一级近似方程。在零级近似方程中, 大气污染方程具有定常、水平输送、无化学变化的特点。在一级近似方程中, 对于大、中尺度, 除水平湍流扩散项以外, 原方程中的各项都保留。对于小尺度和微尺度污染问题可以略去化学转化项。

应该指出, 对于不同的化学物质, 有不同的化学变化过程, 干沉降速度和湿清除系数也是不同的。因此各种动力参数的量纲将有变化, 大气污染物输送方程的一些汇项特征量值及其相对重要性也会变化, 需要进一步分析。

参考文献

- 1 雷孝恩等. 重庆酸雨分布的一个数值模拟. 大气科学, 1985, 9(3): 276~ 284
- 2 盛裴轩, 毛节泰. 我国大气污染物远距离传输的估计. I: 轨迹分析. 气象学报, 1987, 45(1): 65~ 71
- 3 毛节泰. 广东、广西地区酸沉降统计模式的研究. 环境科学学报, 1992, 12(1): 28~ 36
- 4 雷孝恩. 一个高分辨对流层物质交换模式. 气象学报, 1993, 51(1): 75~ 86
- 5 贾新媛. 区域酸沉降模式. 大气科学, 1993, 17(6), 732~ 740
- 6 王体健, 李宗恺, 南方. 区域酸性沉降的数值研究 I 模式. 大气科学, 1996, 20(5): 606~ 614
- 7 黄美元, 王自发等. 我国和东亚地区硫化物跨边界输送态势研究. 气候与环境研究, 1996, 1(1): 55~ 62
- 8 王自发, 黄美元, 何东阳, 关于我国和东亚地区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, 1997, 21(3): 366~ 378
- 9 高会旺, 黄美元, 徐华英, 等. 欧拉型区域硫沉降模式研究. 大气科学, 1997, 21(5): 615~ 626
- 10 Carmichael G R, Peters L K, An eulerian transport / transformation / removal model for SO_2 and sulfate- I. Model development. Atmos Environ, 1984, 18: 937~ 951
- 11 Carmichael G R, Peters L K, Kitada T, A second generation model for regional scale transport / chemistry deposition. Atmos Environ, 1986, 20: 173~ 188
- 12 Chang J S, et al. A three- dimensional Eulerian acid deposition model: Physical concepts and formation. J Geophys Res, 1987, 92: 14681~ 14700
- 13 Chang Y S, Carmichael G R, Kitada H, et al. The transport and formation of photochemical oxidants in central Japan. Atmos Environ, 1989, 23: 363~ 393
- 14 He Donyang, Huang Meiyuan. A numerical study on tropospheric ozone over China. Atmos Environ, 1996, 30(13): 2449~ 2451
- 15 Eliassen A. The OCED study of long range transport of air pollutants: long- range transport modeling. Atmos Environ, 1978, 12: 479~ 487
- 16 Endlich R M, et al. A long range transport air pollution model for Eastern North American, I: Sulfur Oxidates. Atmos Environ, 1984, 18: 2345~ 2460
- 17 Gao Huiwang, Huang Meiyuan, Xu Huaying. The heterogeneous oxidation of SO_2 on the aerosol surface. Science in China, 1997, 40(5): 518~ 523
- 18 Huang Meiyuan, Wang Zifa, et al. Modeling studies on sulfur deposition and transport in East Asia. Water Air Soil Pollut, 1995, 85(4): 1921~ 1926
- 19 Xiao Hui, Carmichael G R Durchenwald J, Long-rang transport of SO_x and dust in East Asia during the PEM WEST- B Experiment. J Geophys Res, 1997, 102: 28589~ 28612
- 20 Ichikawa Y, S Fujita. An analysis of wet deposition of sulfate using a trajectory model for East Asia. Water Air Soil Pollut,

- 1995, 85: 1927~ 1932
- 21 Kotamarthi V, Carmichael G R. The long-range transport of pollutants in the Pacific Rim Region. *Atmos Environ*, 1990, 24A: 1521~ 1534
- 22 Kurita H, Ueda H. Long-range transport of air pollution under light gradient wind condition. In: *Encyclopedia of Environmental Control*. Gulf Publishing Co. 1989
- 23 Langner J, Rodhe H. A global three-dimensional model of the tropospheric sulfur cycle. *J Atmos Chem*, 1991, 13: 252~ 263
- 24 Murao N, et al. A modeling study on acid rain in East Asia, *International Conference on Regional Environment and Climate Changes in East Asia*, 1993, 305~ 309
- 25 Shannon J D. A model of regional long-term average sulfur atmospheric pollution, sulfur removal and net horizontal flux. *Atmos Environ*, 1981, 9: 643~ 659
- 26 Van Dop H, Dehaan B J. Mesoscale air pollution dispersion modeling. *Atmos Environ*, 1983, 17: 1449~ 1456
- 27 Venkatrans A, Karamchadai P K Misra P K, Testing a comprehensive acid deposition model. *Atmos Environ*, 1988, 22: 737 ~ 747
- 28 Wang Zifa, Huang Meiyuan, et al. Sulfur distribution and transport studies in East Asia using Eulerian model. *Adv Atmos Sci*, 1996, 13(3): 399~ 409
- 29 Zhang Y, et al. Photochemical oxidant process in the presence of dust: An evaluation of the impact of dust on particulate nitrate and ozone formation. *J Appl Meteor*, 1994, 33: 813~ 824
- 30 Zlatev, Z. Christensen J Hov O. A Eulerian air pollution model for Europe with nonlinear chemistry. *J Atmos Chem*, 1992, 15, 1~ 37
- 31 叶笃正, 李崇银, 王必魁. 动力气象学. 台北: 明文书局, 1996. 392
- 32 伍荣生. 大气动力学. 北京: 高等教育出版社, 2002. 314pp

SCALE ANALYSIS OF ATMOSPHERIC TRANSPORT EQUATION OF AIR POLLUTANTS(SO_x)

Cheng Xinjin Huang Meiyuan An Junling Wang Zifa Xu Huaying Zhou Ling Xiao Hui

(LAPC, Institute of Atmospheric Physics, CAS, Beijing 100029)

Abstract

The dynamic characteristics of atmospheric transport equation of air pollutants are analyzed by the scale analysis in this paper. Six important dynamic parameters showing the relative importance of dynamic, physical and chemical processes in atmospheric pollution are proposed originally. Their size of order of magnitude is analyzed for sulfur as an example. Especially, the importance of three sink mechanisms (chemical transfer, dry deposition and wet removal) in process of atmospheric pollution for different scale is discussed. Results show that the role of the gas chemical reaction for sulfur is less than the deposition and wet removal in general situation. The role of dry deposition is much dependent on the thickness chosen for the lowest layer of atmospheric model of air pollution. The wet removal process is important in general when it rains. Based on the analysis of the order of magnitude for the characters of terms in atmospheric pollution equation, we obtain the zero- and first order approximation equation which control the atmospheric transport process of air pollutants(SO_x). Their basic characters are also discussed.

Key words: Air pollutants, Atmospheric transport equation, Scale analysis, Dynamic parameters.