

电子计算机模拟多重污染源排放的二氧化硫的扩散过程

沈阳市环境保护科学研究所
环境质量评价研究室*

为了掌握一个工业城市大气中二氧化硫浓度的变化规律,为控制其排放提供依据,我们采用了大气污染多源模式,利用电子计算机对该城市大气中二氧化硫的扩散进行了模拟,工作程序见图1。计算区域的范围定为600平方公里,完全覆盖了污染源分布区,用经纬度法划分成1平方公里的网格600个,每一个网格做为一个基本的单元。

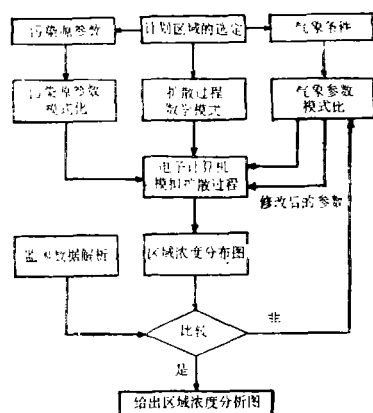


图1 电子计算机模拟程序

一、多源模式

描述扩散过程的多源模式很多,许多国家的主要城市都进行过扩散过程的计算,都应用了适合于各自情况的多源模式。归纳起来,有下面几类:

1. 利用长时期浓度资料和气象资料建立

的统计模式;

2. 高斯模式: 萨顿模式即是其中的一种;
3. 根据质量守恒定律建立的箱式模式;
4. K理论模式: 采用差分方法求数值解。

中国科学院大气物理研究所和北京大学地球物理系各自采用不同的模式进行了某地二氧化硫浓度分布的数值计算,为我国开展这项工作开创了一个良好的先例。我们在向他们学习的基础上,参阅国内外有关文献,根据地区的特点,针对不同的污染源应用下面模式。

(一) 点源

1. 有风 ($V \geq 1$ 米/秒) 时:

以萨顿模式为基础,考虑目前我们对风向的观测达到的精度,二氧化硫监测方法的取样时间,取Y方向上 $\pi/8$ 弧度夹角内二氧

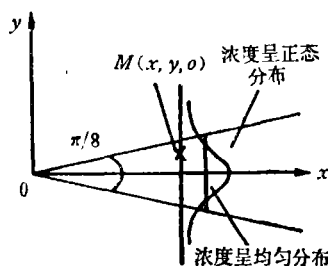


图2 $\pi/8$ 内二氧化硫浓度呈均匀分布示意图

* 持笔人: 陈复、傅官浦

化硫浓度呈均匀分布(图2),则有风时点源下风方向 $\pi/8$ 弧度扇形区内,任意地点地面浓度可用下式计算:

$$C_{(x,y,0)} = 2.8734 \frac{Q_A}{V C_z X^{\frac{4-n}{2}}} \exp\left(-\frac{H_e^2}{C_z^2 X^{2-n}}\right) \quad (1)$$

式中,

$C_{(x,y,0)}$ 点源下风向任意地点地面浓度(毫克/标立方米);

Q_A 点源排出强度(毫克/秒);

V 平均风速(米/秒);

n 湍流指数;

C_z 普遍化扩散系数;

H_e 烟囱有效高度(米);

$x, y, 0$ 以点源为原点的直角坐标系,下风方向为 x ,在地面上与 x 成直角的方向为 y ,沿直方向为 z ,在这里 $z = 0$.

2. 静风($V < 1$ 米/秒)时:

以简化的烟团模式为基础,在静风持续 τ 小时后,任意地点地面浓度可由下式计算:

$$C_{(x,y,0,\tau)} = \frac{2Q_A}{(2\pi)^{3/2}} \int_0^\tau G(r, t) dt$$

$$G(r, t) = \frac{\exp\left(-\left(\frac{r^2}{2\sigma_y^2(t)} + \frac{H_e^2}{2\sigma_z^2(t)}\right)\right)}{\sigma_y(t)\sigma_z(t)} \quad (2)$$

式中,

$C_{(x,y,0,\tau)}$ 静风持续 τ 小时,任意地点地面浓度(毫克/标立方米);

$r = \sqrt{x^2 + y^2}$ 计算点与源的距离(米);

$\tau = m\Delta$ 静风持续时间,一般 $\Delta = 3600$ 秒, $m = 1, 2, \dots, \infty$,经计算可知 $m = 3$ 时与 $m = \infty$ 时的浓度分布接近,所以一般取 $m = 3$;

$\sigma_y(t), \sigma_z(t)$ 为 y, z 方向的扩散参数, σ_y, σ_z 是烟团运行时间 t 的函数.

为简化计算考虑用 $\sigma_y = \alpha t, \sigma_z = \beta t$ 代入(2)式,积分整理后成为下面简化式:

$$C_{(x,y,0,\tau)} = \frac{2Q_A}{(2\pi)^{3/2}} \left(\frac{\beta}{\beta^2 r^2 + \alpha^2 H_e^2} \right) \quad (3)$$

(二) 面源

1. 有风($V \geq 1$ 米/秒)时:

图3是一边长 $2a = 1000$ 米的正方形面源,面源中心为 0 点,当考虑二氧化硫浓度在张角范围内为均匀分布时,面源外任意地点 M 的地面浓度可由下式计算:

$$C_{(x,y,0)} = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{Q_s}{V} \int_{x-a}^{x+a} \frac{1}{\sigma_z} \times \frac{2a}{\frac{\pi}{8}\xi + 2a} \exp\left(-\frac{H_e^2}{2\sigma_z^2}\right) d\xi \quad (4)$$

式中,

Q_s 面源内单位面积排出强度(毫克/平方米·秒);

$\xi = x + x'$ 微小面源 $dx'dy'$ 与计算点在 x 方向上的距离(米);

σ_z z 方向的扩散参数, σ_z 是 ξ 的函数.

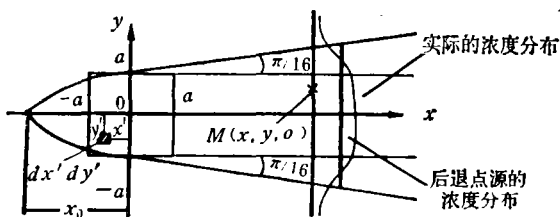


图3 后退虚拟点源示意图

在城市区域多重污染源的情况下,用(4)式计算是有困难的.为简化计算设想面源排出物都集中于面源中心,再向上风方向后退一个距离 x_0 ,变成一个虚拟点源,该虚拟点源排出物经过距离 x_0 后,与面源具有同样的扩散标准差,这样任意点 M 的浓度 $\hat{C}_{(x,y,0)}$ 可由下式计算:

$$\hat{C}_{(x,y,0)} = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{Q_A}{V\sigma_z} \times \frac{1}{\frac{\pi}{8}(x+x_0)} \exp\left(-\frac{H_e^2}{2\sigma_z^2}\right) \quad (5)$$

如果用(4)式计算的任意点 M 的浓度为

$C_{(x,y,0)}$, 对 n 个 M 点, 在

$$\sum_{i=1}^n [C_{(x,y,0)} - \hat{C}_{(x,y,0)}]^2 \rightarrow 0$$

时确定 x_0 , 这样 (5) 与 (4) 计算的结果是近似的, 称这样的 x_0 为虚拟距离, 这种方法叫后退虚拟点源法, 见图 3。

若用 Sutton 的 $\sigma_z = \frac{C_z}{\sqrt{2}} x^{\frac{2-n}{2}}$ 代入 (5)

式则得到面源的计算公式:

$$C_{(x,y,0)} = 2.8734 \frac{Q_A}{V C_z (x + x_0)^{\frac{4-n}{2}}} \times \exp\left(-\frac{H_c^2}{C_z^2 (x + x_0)^{2-n}}\right) \quad (6)$$

2. 静风 ($V < 1$ 米/秒) 时:

将面源看成由许多微小面源组成, 而每一个微小面源看成一个点源, 那么采用点源公式可确定微小面源对某一点的浓度贡献, 而将微小面源在面源内积分, 则可计算出整个面源对某一点的浓度贡献。

$$C_{(x,y,0)} = \frac{2Q_s}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-a}^{+a} \int_{-a}^{+a} \frac{\beta dx' dy'}{\beta^2 [(x + x')^2 + (y + y')^2] + \alpha^2 H_c^2} \quad (7)$$

式中,

x', y' 面源内微小面积 $dx' dy'$ 的坐标 (米)。

(三) 平均浓度的计算

根据风向、风速、大气稳定度、污染源排

放规律确定计算类型, 计算出不同计算类型的浓度 C_i 。若不同计算类型在月(季、年)的发生频率为 $f_i(D_i, V_i, A_k, T_i)$, 则平均浓度 $\bar{C}$ 为:

$$\bar{C} = \sum_{i=1}^n C_i f_i(D_i, V_i, A_k, T_i) \quad (8)$$

式中,

D_i, V_i, A_k, T_i 分别代表风向、风速、大气稳定度、时段的等级;

n 计算类型数。

二、污染源模式化

为取得污染源的实际情况, 用一年多的时间, 进行了工业污染源的普查, 居民消耗燃料的普查, 建立了污染源档案, 在此基础上对污染源进行了模式化。

(一) 源强的确定

1. 重点污染源

计算区域内排放量较大, 烟囱高度超过 100 米的污染源为重点污染源, 源强值根据实际情况给出。

2. 中小烟源

工矿企业、机关、学校等生产和取暖用的锅炉和炉窑消耗大量的燃料, 这些源分布比较分散, 将这部分源按网格模式化。首先根据使用燃料种类和烟囱高度, 将这些源分成四类 (见表 1), 根据源的实际坐标填入网

表 1 分类指标及统计结果表

类 号	1	2	3	4	5	6	7	8
烟囱实体高度(米)	120	120	>40	>40	20-40	20-40	<20	<20
代表高度(米)	120	120	60	60	30	30	10	10
燃料种类与主要工艺特点	工艺过程连续排烟	电厂锅炉连续排烟	以煤为主要燃料的大型锅炉连续排烟	以油为主要燃料的大型锅炉连续排烟	以煤为主要燃料的锅炉及炉窑不均匀排烟	以油为主要燃料的锅炉及炉窑不均匀排烟	居民用的炉灶, 集体食堂用的炉灶不均匀排烟	厂房泄漏的二氧化硫
源个数	1	1	15	19	117	39	88	1
简 称	重点污染源(高架源)		中小烟源(集合点源)				面 源	

格,按网格统计各类源的燃料消耗量。

源强值的计算,考虑诸因素采用下式:

$$Q_A = \frac{2 \times K \times K_1 \times K_2 \times S \times G_{ij} \times 10^9}{24 \times 3600} \quad (9)$$

式中,

K 燃料中的 S 转到 SO_2 中的系数,不同燃料取不同数值,重油类取 $K = 1$,煤类取 $K = 0.9$;

K_1 日不均匀系数(见表 2);

K_2 同时开工系数,考虑工厂休息和设备检修等因素而取的系数,根据统计结果,取暖季取 $K_2 = 0.9$;

S 燃料中含硫量,重油类含硫量取 $S = 0.5\%$,煤类含硫量取加权平均值 $S = 0.67\%$;

G_{ij} 网格内平均燃料量(吨/日)。

表 2 冬季取暖锅炉燃料耗量的日不均匀系数

时 段	22—03	04—08	09—10 14—15	11—13	16—21
日不均匀 系数 K_1	0.4	1.6	1.0	0.8	1.2

3. 面源

城市区域居民用的小炉灶及集体食堂、饮食行业用的炉灶,排烟口很低,作为地面源处理,按网格模式化。首先根据调查材料统计每个网格内居民户数,统计每户居民的日耗煤平均值,计算出每个网格内平均耗燃料量。

源强值的计算,考虑诸因素采用下式:

$$Q_A = \frac{2 \times K \times K_1 \times S \times G_{ij} \times 10^9}{24 \times 3600}$$

式中,

K 燃料中的 S 转到 SO_2 中的系数取 $K = 0.8$;

K_1 日不均匀系数(见表 3);

S 居民用煤的含硫量,加权平均值 $S = 0.65\%$;

G_{ij} 网格内平均耗煤量(吨/日)。

表 3 冬季居民燃料耗量的日不均匀系数

时 段	22—03	04—08	09—10 14—15	11—13	16—21
日不均匀 系数 K_1	0	1.5	0.8	1.3	1.6

(二) 烟囱有效高度

烟囱有效高度在大气扩散中是一个重要参数,烟囱有效高度可用下式计算:

$$H_e = H_0 + \Delta H$$

式中,

H_e 烟囱有效高度(米);

H_0 烟囱实体高度,各类源的实体高度参看表 1(米);

ΔH 烟云抬升高度(米)。

我们选了几个常用的公式,结合本地区的情况进行了计算,从中选出抬升高度适中者,作为计算 ΔH 的公式。

1. 有风 ($V \geq 1$ 米/秒)时

(1) 高架源选用 Carson 公式

$$\Delta H = C_2 Q_H^{1/2} V^{-1}$$

式中,

C_2 不同天气类型选用的系数见表 4;

Q_H 烟囱排热量(卡/秒);

V 烟囱口的风速(米/秒)。

表 4 C_2 值表

大气稳定度	B	C	D	E	F
C_2	0.330	0.250	0.171	0.158	0.145

(2) 中小烟源选用 Concawe 公式

$$\Delta H = 0.75 Q_H^{1/2} V^{-3/4}$$

2. 静风 ($V < 1$ 米/秒)时:

全部烟源选用 Briggs 公式

$$\Delta H = 1.38 Q_H^{1/4} \left(\frac{\partial \theta}{\partial z} \right)^{-3/8}$$

式中, $\frac{\partial \theta}{\partial z}$ 位温梯度($^{\circ}\text{C}/\text{米}$)。

3. 面源有效高度取 10 米

上述公式中排热量的计算采用下式:

$$Q_H = \rho \times V \times C_p \times \Delta T$$

式中,

V 排气量(标立方米/秒);

ρ 排气密度,取 $\rho = 1.275 \times 10^3$ (克/标立方米);

C_p 定压比热,取 $C_p = 0.24$ (卡/公斤 $^{\circ}\text{C}$);

ΔT 排气温度与气温之差($^{\circ}\text{K}$).

排气量的确定,高架源排气量按调查的实际结果给出,集合点源的排气量按下式计算:

$$V = \frac{K_1 \times K_2 \times G \times 10^3}{24 \times 3600}$$

式中,

G 每类源在各网格内,按烟囱个数平均的燃料量(吨/日);

K_1 日不均匀系数;

K_2 单位燃料产生的废气量(标立方米/公斤).

三、气象参数

以常规的气象资料为基础,对重要的气象要素由六个气象单位与全市大气污染监测进行了同步观测,根据取得的资料计算有关气象参数.

(一) 大气稳定度分类

有风($V \geq 1$ 米/秒)时用风速、日射量、云量为分类指标,按 Meade 所用的分类表进行分类.

静风($V < 1$ 米/秒)时,参照日本水岛地区的实例所用的分类法分类.

在电子计算机上对 1977 年全年逐小时进行了分类,年每小时大气稳定度分类后统计的结果见表 5.

表 5 全年每小时大气稳定度分类统计结果

大气稳定度	有风 ($V \geq 1$ 米/秒)					静风 ($V < 1$ 米/秒)			合计
	B	C	D	E	F	CB	CD	CE	
发生小时数	1294	901	3191	357	1646	45	579	747	8760
频率%	14.77	10.28	26.43	4.08	18.79	0.51	6.61	8.53	100

注: A 类很少发生,并入 B 类统计

(二) 不同高度的风速:

用小球测风的资料,根据下式:

$$V = V_0 \left(\frac{z}{z_0} \right)^p$$

式中,

z 任意高度(米);

z_0 地面上 10 米高度(米);

V_0 地面上 10 米高度的风速(米/秒);

V 任意高度风速(米/秒).

按大气稳定度类型整理数据,回归出风速指数 P ,结果见表 6.

(三) 扩散系数 C_z

用下面公式,根据(表 6)中的 P 值,计算出湍流指数 n 值:

表 6 不同大气稳定度 P 值表

大气稳定度	B	C	D	E	F
P 值	0.17	0.20	0.25	0.29	0.38

$$n = \frac{P}{1 + P}$$

然后根据 Sutton 给出的扩散系数 C_z 值表,用插值的方法确定普遍化扩散系数 C_z ,结果见表 7.

静风时的扩散系数,用回归的方法,将 Turner 的曲线用直线来近似,这样给出 α 、 β 值.

(四) 气象要素同时发生频率统计

表 7 计算区域的 C_i 值表

天气类型 污染源 高度(米)	B $n = 0.14$	C $n = 0.17$	D $n = 0.20$	E $n = 0.23$	F $n = 0.27$
10	0.32	0.26	0.21	0.16	0.11
30	0.31	0.25	0.20	0.14	0.10
60	0.26	0.22	0.17	0.12	0.09
120	0.19	0.16	0.12	0.08	0.05

计算平均浓度时,要确定计算类型和发生频率,我们对 1977 年全年逐时的气象要素进行了同时发生频率统计,处理 26,208 个数据,给出了全年各种计算类型和发生频率。

在用电子计算机分类和统计时考虑下面因素:

风向用 D_i 表示,取 $i = 1, 2, \dots, 16$;

风速用 V_j 表示,取 $j = 1, 2, 3, 4, 5$;

大气稳定度用 A_k 表示,取 $k = 1, 2, 3, 4, 5$;

时段用 T_f 表示,取 $f = 1, 2, 3, 4, 5$;同时发生次数用 N_i 表示, N_i 被 D_i, V_j, A_k, T_f 同时发生所决定。计算类型的发生频率 $f_i(D_i, V_j, A_k, T_f)$:

$$f_i = \frac{N_i}{151 \times 24} \times 100\%$$

式中,

f_i 取暖季各种计算类型发生频率;

151 取暖季的日数。

四、计算结果与讨论

在完成上述工作后,按计算类型模拟 1977 年取暖季二氧化硫扩散过程,按取暖季发生的气象要素划分计算类型可简化为 144 个(有风时),6 个(静风时)共计 150 个。简化后在计算时要考虑污染源排放量变化引起的时段划分;污染源点源 192 个,面源 89 个,计算点 600 个。按计算类型计算,按七类污染源的浓度分布打印,共计算出 720,600 个数据,1201 张浓度分布图。

(一) 计算结果与监测数据比较

由于目前我们还没有做到长期连续自动监测,为进行比较,特安排了五天连续监测,在 11 个监测点,取得了 25 个平均浓度值,与相同气象条件下的计算值进行了相关分析(见图 4)。

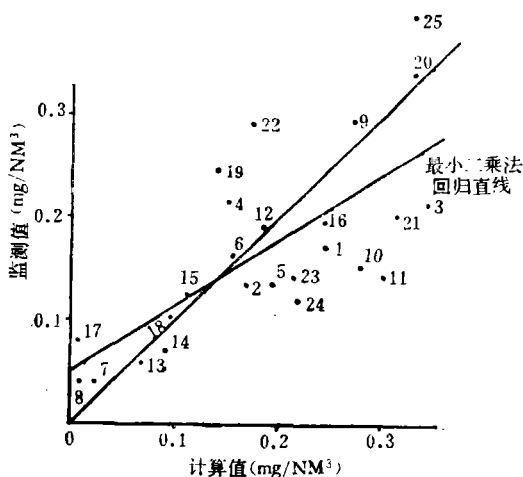


图 4: 计算结果与监测结果相关分析

回归直线的斜率为 0.66, $y = 0.026 + 0.66x$, 相关系数 $r = 0.74$, 计算结果与监测结果的相关性是显著的。

(二) 二氧化硫的季平均浓度

选择的 150 个计算类型,占取暖季全部类型的 90%,考虑不同计算类型的发生频率和污染源的不均匀系数,计算出了季平均浓度分布图(图 5),在同一张图上标出了计算区域内主要的污染源所在地和大致的排放量,该地区在取暖季的主导风向是 NNW,可见就全区域来说,主要污染源位于上风向,而

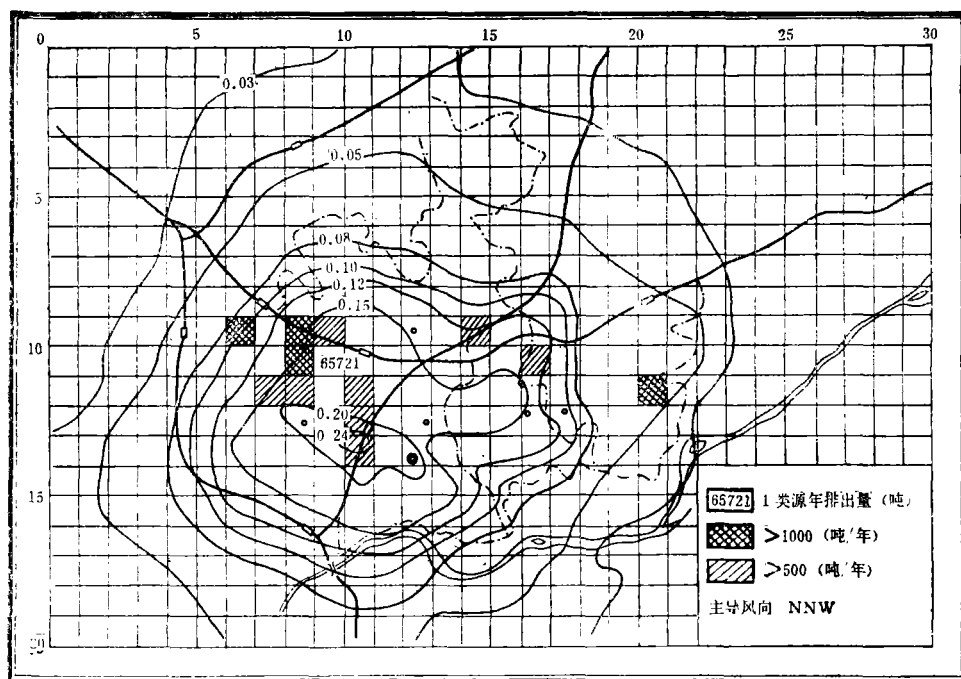


图 5：二氧化硫季平均浓度分布图

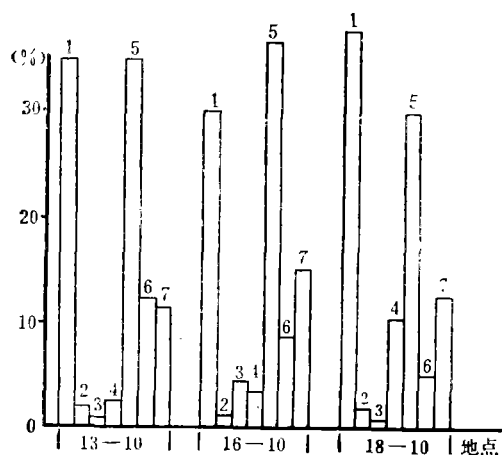


图 6：各类源对不同地点的影响

大部分居民区和市区位于下风向，结果造成取暖季二氧化硫的季平均浓度在 42 平方公里的范围内，超过日平均浓度标准 0.15 毫克/标立方米，说明在取暖季二氧化硫的污染是严重的。

为了说明各类污染源对不同地点的影响，选择了主导风向下方的三个地点进行比

较，各类源对这三点的影响见图 6。从图中可看出各类污染源对不同地点的影响是不同的。在 13—10 点季平均浓度达最高值 0.241 毫克/标立方米。第一、五类源对该点影响相同，比例为 34.8%；第六类源占比例 12.2%；第七类源占比例 11.6%；其余各类源均较小。在坐标 16—10 点，季平均浓度为 0.14 毫克/标立方米。第五类源影响最大，比例为 36.2%；第一类源次之，比例为 30.4%；第七类源占比例为 12.9%。在坐标 18—10 点，季平均浓度为 0.089 毫克/标立方米。第一类源所占比例为 37.6%，第五类源占比例为 30.6%，第七类源所占比例为 16.3%。

在上述三个点出现不同的比例，是由于各类源分布的位置和排放条件不同所造成的。在 13—10 点距第一类高架点源为 1.5 公里，实际上高烟囱排放的二氧化硫几乎没有影响，由于把厂房泄漏计入第一类源中，所以第一类源对此点的影响是明显的。而在上风向分布的 30 米高烟囱排放的二氧化硫，刚

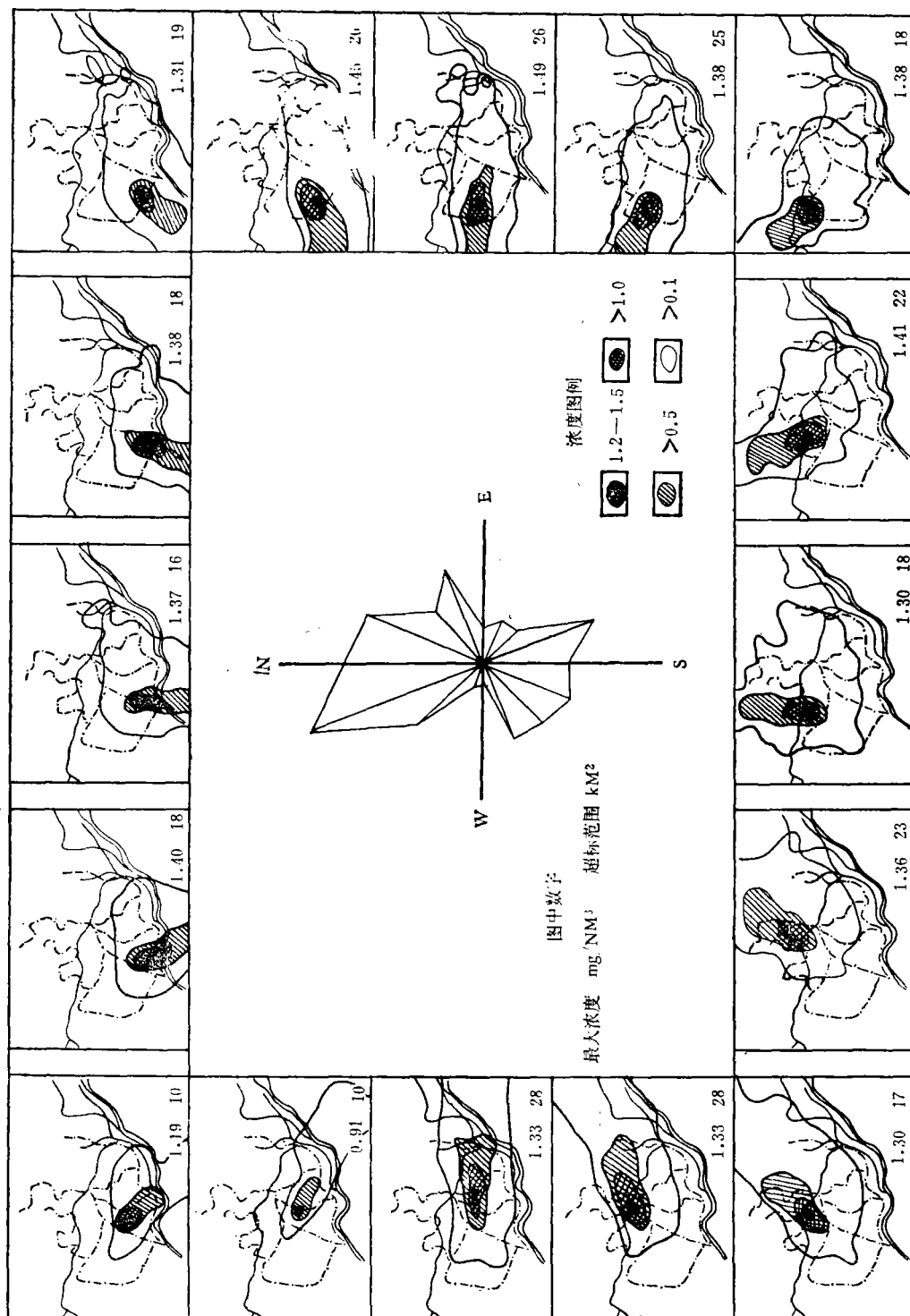


图 7: 浓度分布随风向的变化

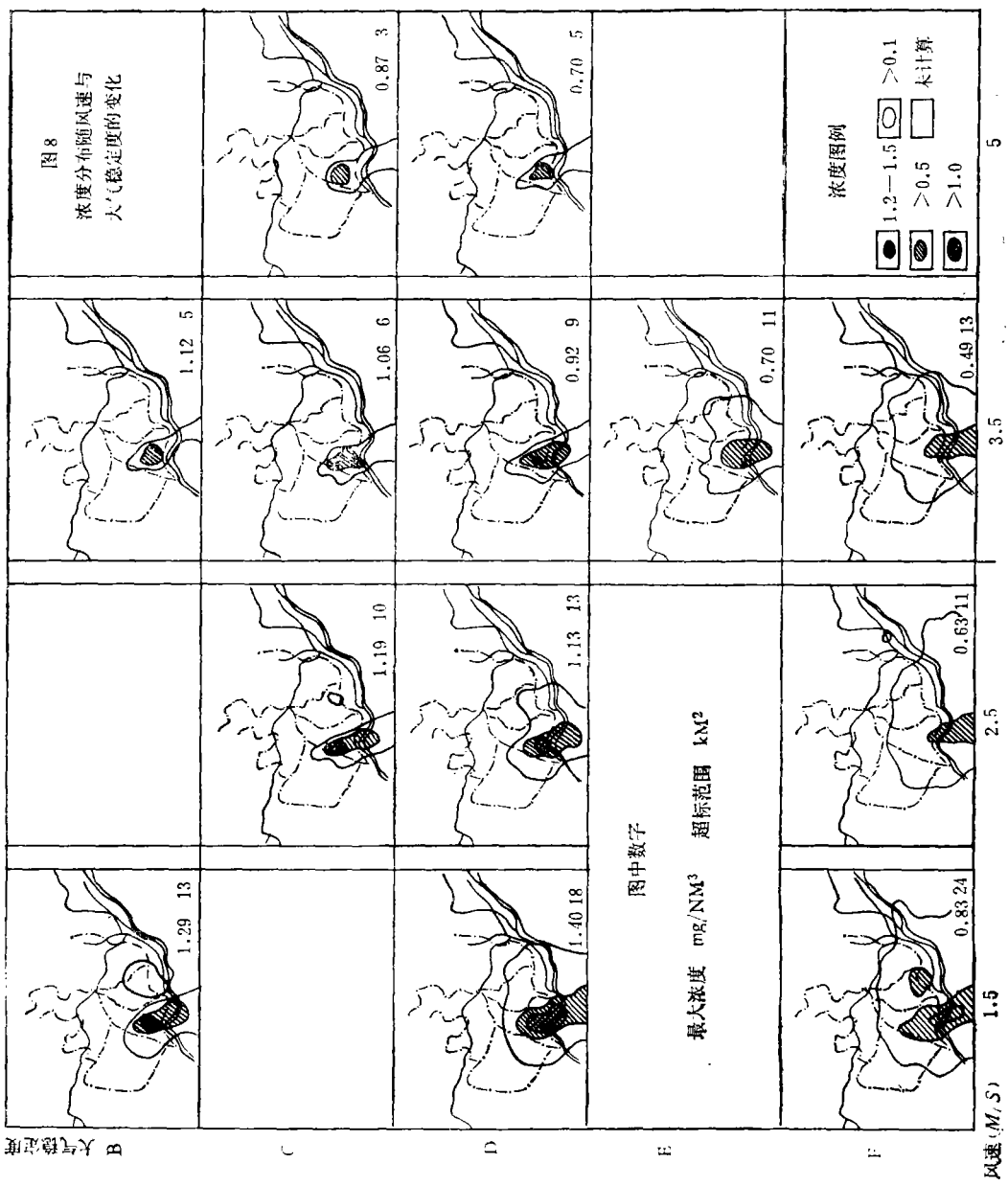


图8：浓度分布随风速与大气稳定度的变化

好在这样的距离上着地,因此造成最大的比例,而在此点,上风向面源较少,所以影响不大。

在 16—10 点,距高架点源 5 公里,厂房泄漏的影响已经甚微,主要是高烟囱排放二氧化硫造成的。由于高烟囱排放受风向影响明显,而在主风向 $\pi/16$ 之外浓度值很小,所以对具体地点的长期平均浓度的影响,仍然不及分布比较广的第五类源,而此点已经位于居民区,所以面源的比例明显上升。

在 18—10 点距各类源都远了,所以高架源的影响上升为主要地位。

以上说明两个问题: 1. 影响具体地点长期平均浓度的大小,不能只看排放量,而要根据排放条件,污染源的距,气象要素等因素联系起来确定。2. 由于各类源对各点造成浓度不同,对不同的污染源来说,在不同地点达到环境标准的要求也不同。所以,如何合理的确定各类源的排放量要全面的统筹考虑。

(三) 重污染时的浓度分布

在不考虑逆温的情况下,归纳为 150 个计算类型,计算了全部污染源在 150 个情况下的浓度分布,从中可比较出重污染发生的条件。在该地区污染源分布的特定条件下,当风向为 WSW,大气稳定度为 F,风速为 1.5 米/秒,污染面积最大,超过小时浓度标准的区域达 94 平方公里。从计算区域中污染源的分布来看,在全区域的西南位置,这样在风向为 WSW 时计算区域的绝大部分是下风向,所以可能出现大面积污染。另一方面由于大气稳定度为 F 类,风速为 1.5 米/秒,高架源影响的范围就要远些,恰好与其他各类源的影响在这一地区叠加,所以造成了大面积污染。在该地出现上述气象条件是由特定的天气形势造成的,这样对如何估计该地区的重污染潜势提供了线索。

(四) 不同条件下浓度分布

从浓度分布图中按 16 个风向选出大气稳定度为 D,风速为 1.5 米/秒的浓度分布

图,按风向排成图 7。图中可反应出造成污染面积最大风向为西风,而造成污染浓度最高的风向为东风。

从浓度分布图中选出风向为 NNW 时各种条件下浓度分布图,按风速和大气稳定度等级排成图 8。从图中可看出污染面积最大和浓度最高均为小风(1.5 米/秒),污染面积最大的大气稳定度为 F 类,污染浓度最高的大气稳定度为 D 类。

通过上述说明,我们可归纳为以下几点:

1. 掌握了本地区取暖季的浓度分布。
2. 为对污染源进行合理的控制提供了依据。
3. 总结出本地区重污染出现的气象条件,为估计重污染潜势提供了线索。

五、两点说明

1. 计算结果与监测结果的相关系数 r ,回归直线的斜率还应当提高,计算结果中还没有考虑背景值的影响,所有这些都会造成与实际情况的误差。
2. 不同气象条件造成污染程度的比较,应当既考虑污染面积又考虑污染浓度,因此以超标区域内计算点超标率之和为指标有可取之处。

主要参考资料

- [1] 中国科学院大气物理研究所四室,大气污染物多源模式在环境规划中的应用,环境科学,1,15(1976)。
- [2] 中央气象局研究所,全国应用气候会议论文集,科学出版社,(1977)。
- [3] 华东水利学院,程序设计,水利电力出版社,(1978)。
- [4] 环境厅大气保全局规制课编,总量规制手册(日),(1976)。
- [5] 近藤次郎编,大气污染现象解析与模式化(日),(1975)。
- [6] 樱庭信一,SO₂的总量规制方式,燃料协会誌(日),55(596),975—980,(1976)。
- [7] 森口实,SO_x总量规制的算法,大气污染研究(日),9(5),25—62,(1975)。
- [8] Howard, E. H., Understanding and Controlling Air Pollution, (1972)。
- [9] John, H. S., Air Pollution Physical and Chemical Fundamentals, (1975)。