区域高时空分辨率 VOC 天然源排放清单的建立

胡泳涛,张远航,谢绍东,曾立民(北京大学环境科学中心环境模拟与污染控制国家重点联合实验室大气环境模拟分室,北京 100871, E-mail:ythu@ces.pku.edu.cn)

摘要:将中尺度气象模式 MM5 应用于估算 VOC 天然源排放的研究,建立了高时空分辨率 VOC 天然源排放清单的估算方法.根据方法需要,确定了我国部分树木排放异戊二烯和萜烯的标准排放因子,各植被类型排放各种 VOC 的标准排放因子,以及各植被类型季节平均的叶生物量密度.应用该方法估算了华南地区满足区域空气质量数值模拟要求的高时空分辨率 VOC 天然源排放清单.结果表明,华南地区夏季典型日的 VOC 天然源排放总量约1.12×10⁴t, VOC 排放速率具有明显的时空分布,其中地理分布取决于植被类型及其分布,日变化规律则依赖于太阳辐射和温度的高低.并讨论了 VOC 天然源排放估算过程中误差的来源.

关键词: VOC;天然源排放清单; VOC标准排放因子; MM5;植被

中图分类号: XI 31 文献标识码: A 文章编号:0250-3301(2001)06-06-0001

Development of Biogenic VOC Emissions Inventory with High Temporal and Spatial Resolution

Hu Yongtao, Zhang Yuanhang, Xie Shaodong, Zeng Limin (The LAES of National Key Laboratory of Environmental Simulation and Pollution Control, Center of Environmental Sciences, Peking University, Beijing 100871, China E-mail: ythu @ces.pku.edu.cn)

Abstract: A new method was developed to estimate biogenic VOC emissions with high temporal and spatial resolution by use of Mesoscale Meteorology Modeling System Version5 (MM5). In this method, the isoprene and monoterpene standard emission factors for some types of tree in China were given and the standard VOC emission factors and seasonally average densities of leaf biomass for all types of vegetation were determined. A biogenic VOC emissions inventory in South China was established which could meet the requirement of regional air quality modeling. Total biogenic VOC emissions in a typical summer day were estimated to be 1.12×10^4 metric tons in an area of $729 \, \text{km} \times 729 \, \text{km}$ of South China. The results showed the temporal and spatial distributions of biogenic VOC emission rates in this area. The results also showed that the geographical distribution of biogenic VOC emission rates depended on vegetation types and their distributions and the diurnal variation mainly depended on the solar radiation and temperature. The uncertainties of estimating biogenic VOC emissions were also discussed.

Keywords: VOC; biogenic emissions inventory; standard VOC emission factor; MM5; vegetation

估算 VOC 天然源排放一直是国内外大气化学领域倍受关注的研究内容,因为天然源 VOC 排放量大、化学活性强,在大气光化学氧化和全球碳循环过程中具有重要作用.国内这方面的研究很少,国外利用源调查法,即通过测定植物排放因子并结合植物生物量数据进行估算,分别获得了欧洲和全球的天然源 VOC 年均排放量[1,2],但结果很难满足研究区域空气质量问题时要求源排放清单应具有的高时空分辨率.本文对源调查法进行了改进,可获得具有很高分辨率的区域 VOC 天然源排放时空分布.

1 方法

植物叶排放是天然源 VOC 的主要来源,其他如海洋土壤等排放加合起来只占天然源排放总量的百分之几[3],因此本文着重探讨植物叶排放 VOC 的估算.

若将估算区域划分为若干网格,于是该区域植物

基金项目:UNDP CPR/96/305 项目

作者简介:胡泳涛(1970~),男,博士,助理研究员,主要从事

空气质量数值模拟研究。

收稿日期:2001-02-09

叶排放 VOC 总量可用下式计算[4]:

$$E_{\text{sum}} = \sum_{k,i} A_{k,i} D_{k,i} \sum_{j} \left| \int_{\mathcal{A}} \mathcal{E}_{i,j} \mathcal{V}_{i,j}(t,k) dt \right|$$
 (1)

式中, $A_{k,i}$ 为第 k 个网格内第 i 种植被的面积 $; D_{k,i}$ 为第 k 个网格内第 i 种植被的叶生物量密度 $(g/m^2, T)$ 重) $; \mathcal{L}_{i,j}$ 为第 i 种植被的第 j 种 VOC 的标准排放因子 [以 C 计 $,\mu g^{\bullet}(g^{\bullet}h)^{-1}$],即在叶温度为 30 $^{\circ}$ C和光合有效辐射通量 PAR 为 1000μ mol $^{\bullet}(m^2 \cdot s)^{-1}$ 时的排放因子 ; $V_{i,j}(t,k)$ 是第 i 种植被于 t 时刻在第 k 个网格上排放第 j 种 VOC 的环境校正因子,它是叶温度和 PAR 的函数 .

本文将天然源 VOC 分为异戊二烯, 萜烯和其它 VOC 3 种^[1], 忽略不同植被受环境影响的差异, 对这 3 种 VOC 可由以下各式分别计算环境校正因子^[4].

对于异戊二烯:

$$Y = C_{\rm L} C_{\rm T} \tag{2a}$$

$$C_{\rm L} = \frac{\alpha_{\rm Li} Q}{\sqrt{1 + \alpha^2 Q^2}} \tag{2b}$$

$$C_{T} = \frac{\exp \frac{C_{T1} (T - T_{s})}{RT_{s} T}}{1 + \exp \frac{C_{T2} (T - T_{M})}{RT_{s} T}}$$
(2c)

式中, C_L 和 C_T 分别为 PAR 和叶温度校正因子; Q 为叶吸收的 PAR[μ mol•(m^2 •s) $^{-1}$]; T 为叶温度(K); T_s 为标准条件下的叶温度, 为 303 K; R 是气体常数,其值

为 8. 31 4J K⁻¹• mol⁻¹; α 、 c_{L1} 、 c_{T1} 、 c_{T2} 和 T_M 是经验参数,由大量实测数据确定^[4],其值分别为 0. 0027、1. 066 .95000 J• mol⁻¹ .230000 J• mol⁻¹ 和 31 4 K.

对于萜烯和其他 VOC:

$$V = \exp[\beta(T - T_s)] \tag{3}$$

式中, T 和 T_s 同上; β 为经验参数, 取值 0.09 $K^{-1[4]}$.

可见要获得高时空分辨率的源排放清单,关键是要有高分辨率的叶温度和 PAR 数据.本文将中尺度气象模式 MMs 应用于 VOC 天然源的估算,利用 MMs 提供高时空分辨率的植被冠顶气温和冠顶太阳短波辐射通量以及云量数据,这些数据由 MMs 应用对实测资料进行四维同化的技术运行得到,其结果与实际情况吻合得很好^[5].然后用下述方法分别计算得到相应的叶温度和 PAR,进而获得高时空分辨率的源排放清单.

首先直接取冠顶气温为整个植物冠层的平均叶温度[61],然后由光合有效辐射占太阳短波辐射的比例系数 C_1 和冠顶太阳短波辐射通量计算得到冠顶 PAR , C_2 由下式计算[7]:

$$C_{t} = \frac{C_{d} + C_{b} S_{b} / S_{d}}{1 + S_{b} / S_{d}}$$
 (4)

式中, S_b 是太阳辐射的直接辐射, S_d 是散射辐射, S_b / S_d 通常为 $1 \cdot S_0^{[7]}$; C_b 是直接辐射中 PAR 的比例, C_d 是散射辐射中 PAR 的比例, 不同云量和太阳高度角条件下的 C_b 和 C_d 的取值见表 1 和表 2 .

表 1 C_b 和 C_d 与太阳高度角的关系 $^{[7]}$ Table 1 Values of C_b and C_d in different solar zeniths

太阳高度角	5	10	20	30	40	50	60	70
$C_{\rm b}$	0.20	0.28	0.37	0.40	0.42	0.425	0.43	0.43
$C_{ m d}$	0.61	0.62	0.63	0.65	0.67	0.70	0.73	0.76

对于针叶林和阔叶林,根据叶面积指数 LAI 的大小将冠层分为若干层,按与冠顶 PAR 的比例系数给出

每一层的 PAR^[6],而对其他植被直接将冠顶 PAR 作为冠层平均 PAR^[6].

表 2 C_d 与云量的关系[7]

Table 2 Values of C_d in different cloud percents

云量	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$C_{\rm d}$	0.68	0.675	0.67	0.66	0.65	0.64	0.62	0.60	0.57	0.53	0.48

2 参数的确定

2.1 植被面积

应用《中华人民共和国植被图》⁸¹(比例尺 1: 4 百万,最小分辨率 4km)的植被分类及其地理分布,利用地理信息系统软件 ArcInfo 对矢量化的植被图计算划定网格或范围的每一种植被的面积,并根据估算年份

期间的全国森林资源调查结果校正植被分类中针叶林和阔叶林的面积.该植被图采用现状植被并结合潜在植被的观点进行编辑,根据该图生成的矢量化数据库是"九五"国家科技攻关项目 97-925-02-01 专题中国植被数据库部分的重要成果.该植被图将中国植被按针叶林、阔叶林、灌丛和萌生矮林、荒漠、草原和稀树灌木草原、草甸和草本沼泽以及无植被地段和农业植被分为8大类,并结合不同气候带和垂直分布,再细分为109种,详见文献[8].

2.2 标准排放因子

本文利用(2)式和(3)式将国内已报道的部分树种的天然源 VOC 排放因子实测值[9]换算成标准排放因子 .部分结果见表 3.

表 3 国内部分代表性树种的 **VOC** 标准排放因子(以 C 计)/ μg*(g*h) -1

Table 3 VOC standard emission factors of typical Chinese trees

146	424 £4b	标准排放因子			
地区	树种	异戊二烯	萜烯		
福建	桉树	7.35	0.15		
	马尾松	0.35	5.58		
四川	青冈栎	191	3.43		
	墨西哥柏	0.08	2.14		
北京	杨树	34.3	0.1		
	油松	0.01	2.9		

对于植被类型的 VOC 标准排放因子,通常采用分档方法处理[1,2],以保证取值的合理性,原因是各种植

物的 VOC 标准排放因子实测值有一定的变化范围 .具体数值计算时 ,先以本研究计算获得的国内部分树种的 VOC 标准排放因子和世界各地各种植物的 VOC 标准排放因子实测值 $^{[10]}$ 为基础 ,根据植被类型中各种植物所占比例进行加权平均 ,然后将加权平均值与 VOC 标准排放因子的分档值进行比较 ,取数值最接近的分档值为该植被类型的 VOC 标准排放因子 .对异戊二烯的排放(以 C 计)分为 $^{0.1}$ $^{1.0}$ $^{0.0}$ 0

2.3 叶生物量密度

根据国内已有实测研究结果[11]计算得到各植被分类的平均叶生物量密度 D_a .同前,仅将最后得到的各种植被的平均叶生物量密度,按 8 大类给出数值范围列于表 4.假设 D_a 为年均旬度值,于是可通过标准差分植被指数 NDVI的旬度值,计算估算时段所在旬的叶生物量密度 D,计算式为:

$$D = 0 G < G_2 (5a)$$

$$D = D_a \left| \exp \left| \ln(2) \left| \frac{G - G_2}{G_{avg} - G_2} \right| \right| - 1 \right|$$

$$G > G_2 (5b)$$

式中, G 是植被指数, G = 100(1 + NDVI); G_2 是判断叶生物量密度是否为零的阈值,对森林植被设为 110,对其他植被设为 $102^{[2]}$; G_{avo} 为植被指数的年均旬度值.

表 4 各植被分类平均叶生物量密度 $/g^{\bullet}$ m⁻²、标准排放因子 $/\mu g^{\bullet}(g^{\bullet}h)^{-1}$ 和叶面积指数 $/m^{2}$ • m⁻²的数值范围

Table 4 Values range of leaf biomass density, VOC standard emission factors and leaf area indexes of different plantation types

	植被分类	D_{a}	异戊二烯	萜烯	LAI ^[6]
	针叶林(15种)	155 ~ 1625	0.1 ~1.0	0.65 ~ 3.0	3 或 7
自	阔叶林(18种)	245 ~ 1325	0.1 ~ 60.0	0.1 ~ 0.65	5
然	灌丛和萌生矮林(16种)	50 ~ 685	0.1 ~ 8.0	0.1 ~ 0.65	
が 植 被	荒漠(15种)		0	0	
	草原和稀树灌木草原(16种)	75 ~ 195	0.1	0.1	
	草甸和草本沼泽(9种)	75 ~ 155	0.1	0.1	
	无植被地段(6种)		0	0	
	农业植被(14种)	400 ~ 1000	0.1	0.1	

3 华南地区天然源 VOC 排放清单的估算

3.1 结果与讨论

珠江三角洲地区包括香港、澳门、是我国经济建设

迅猛发展的重要地区,近年来光化学烟雾日益严重.受UNDP资助,CPR/96/305项目专门研究该地区的这一污染问题.考虑到光化学污染的区域输送特征,本文应用上述方法建立了华南地区1998年夏季典型日的

VOC 天然源排放清单,基本满足了对珠江三角洲地区进行空气质量数值模拟的需要.

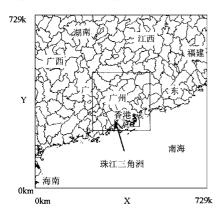


图 1 估算范围及珠江三角洲在其中的位置

Fig. 1 Estimation domain and location of pearl river delta area

ArcInfo 和 MMS 均采用 Lambert 投影坐标,2 条真纬度分别为北纬 25°和北纬 47°,坐标原点在北纬 19°49′56″,东经110°19′15″.选取 x 方向 0 到 729km,y 方向 0 到 729km 之间以珠江三角洲地区为中心的正方形区域作为估算范围,按网格距 9km 将该区域划分为 81×81 个正方形网格.在总面积 729km×729km的范围内包括广东、香港 澳门,以及广西、湖南、江西、福建和海南各一部分,另外海洋占近 1/3 面积,如图 1 所示.估算范围内植被面积的统计结果列于表 5.选取 1998-07-01 为估算日,时间分辨率取为 1h,按前述方法估算VOC 天然源排放.

限于篇幅,仅给出 02,08,14,19 的 4 个时次按网格的 VOC 排放速率(以 C 计,kg/h)分布图,见图 2a、

b.c.d.同时还给出网格(28,79)和(29,38) VOC 排放速率的日变化曲线,如图 3 所示.

由图 2a,b,c,d 可见,在整个区域内 VOC 排放速率呈现明显的地理分布差异.湖南,广西和广东三省交界处的 VOC 排放速率明显高于其他地区,尤其在白天,这个高值区内的网格排放速率(以 C 计)最高可达 3500 kg·h⁻¹以上,比其他地区最多可高出 100 倍,主要是因为这里分布着高排放因子的阔叶林.而广西和广东交界处的低排放因子阔叶林地区则始终是排放速率低值区,网格排放速率白天和晚上大都在 80 kg·h⁻¹以下.珠江三角洲地区主要分布着农业植被和灌木,网格排放速率在白天大都低于 160 kg·h⁻¹,而在夜间大都低于 80 kg·h⁻¹,日夜间的排放速率差异不大.图中多个孤立的面积较小的高值区,分布着密度较大的阔叶林或针叶林,在白天具有相对较高的排放速率.可见该源排放清单充分显示出植被分布与排放速率地理分布之间的直接对应关系.

由图 2 还可见,就整个区域而言,夜间 VOC 网格排放速率的最大值(C)大约 250 kg·h⁻¹,在日出后的早上 8 时最大值(C)达到 1631 kg·h⁻¹,随后逐时提高而在午后气温最大的 14 时达到 3598 kg·h⁻¹的高值,随后逐时降低,在日落时分降至 505 kg·h⁻¹,显示出太阳辐射和气温对排放速率日变化的综合影响.图 3 中网格(28,79)和(29,38) VOC 排放速率的日变化曲线也可明显地看出这种影响,这 2 个网格的 VOC 排放速率都呈现出显著的峰形特征,随日出迅速增加,午后气温最高时达到最大值,日落前后迅速降低,夜间保持低值.十分明显,气温增加导致的 VOC 排放速率的增加幅度超过了辐射减弱导致的排放速率的减少幅度,故VOC 排放速率最大值出现在 14 时而不是 12 时.

表 5 估算范围内植被面积统计×10⁴/hm²

Table 5 Plantation areas of different types in estimation domain

植被	针叶林	阔叶林	灌丛和萌生矮林	草原和稀树灌木草原	农业植被	海洋
面积	572.8	543.9	1143	21.5	661	2019

网格(28,79)的优势植被为阔叶林,而网格(29,38)的优势植被为农业植被和灌木.对比图 3a 和图 3b 中两者的 VOC 排放速率日变化曲线可见,图 3a 的曲线呈尖峰状,图 3b则峰线平坦;夜间两者的 VOC 排放速率都较低且数值接近,但在白天图 3a 最大值可达3598 kg·h⁻¹,而图 3b 最大值只有121 kg·h⁻¹;图 3a 日间最高值是夜间最低值的 70 倍,而在图 3b 这种日夜间极值差异仅为 2 倍左右.由于网格(28,79)和(29,

38) 2 个地点的太阳辐射和温度差别不大,因而造成以上差异的主要原因是这 2 个地方分布着不同类型的植被.网格(28,79)的阔叶林的异戊二烯排放因子很高而萜烯排放因子很低,而网格(29,38)的农业植被和灌木的异戊二烯和萜烯排放因子都很低.异戊二烯在夜间排放为零,在白天其排放速率受太阳辐射和温度大小控制,而萜烯和其他 VOC 的排放仅受温度影响.因此,夜间上述 2 个地点都只排放萜烯和其他 VOC,由于两

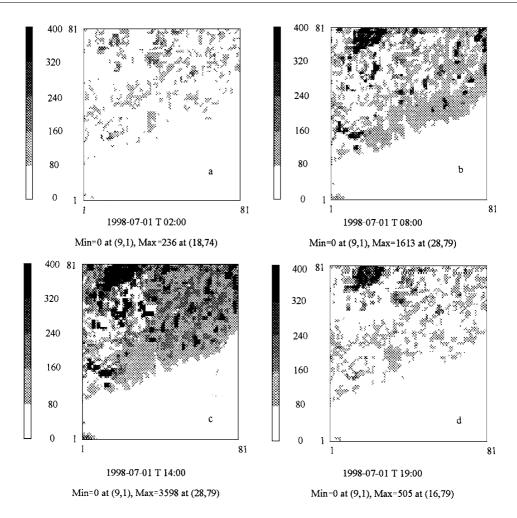


图 2 华南地区 1998-07-01T02:00,08:00,14:00 和 19:00 VOC 天然源排放速率[以 C 计,kg/ (h*格) - 1]分布图 Fig. 2 Biogenic VOC emission rates distribution in southern China in 1998-07-01

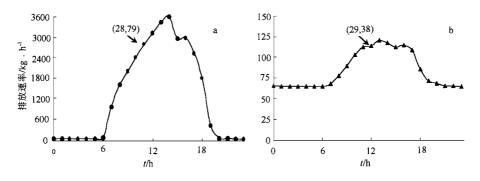


图 3 网格 (28,79)和 (29,38) VOC 排放速率日变化曲线

Fig. 3 VOC e mission diurnal profile in grid (28,79) and (29,38)

者的排放因子都很小且差别不大,因而夜间 VOC 排放 但前者排放因子远大于后者,因而造成图 3a 的排放速速率低且数值接近;而在白天,两者都排放异戊二烯, 率随日出迅速增加,日间最大排放速率远高于夜间,而

图 3b 白天的排放速率增幅并不明显,日最大值也很低.总之,植被类型及其面积大小是造成排放速率地理分布差异的主要原因,而太阳辐射和温度是造成排放速率日变化的主要原因.

由网格排放速率求和计算区域小时排放总量和日排放总量. 结果表明,整个区域 1998-07-01 的 24 h VOC 排放总量为 $1.12 \times 10^4 t$;其中区域 VOC 最大小时排放总量为 970t,夜间区域排放总量较低而且变化幅度不大,其小时排放总量维持在 220t 左右.由日排放总量可粗略估算出该区域的年排放总量大约是 $2.5 \times 10^6 t \sim 3.0 \times 10^6 t$.

3.2 不确定性

在 VOC 天然源排放的估算过程中,其估算误差主要来自以下几个方面:

植被图与实际估算时段植被地理分布的差异所导致的误差.用校正系数计算估算年份的实际植被面积,能保证总面积的准确程度,但无法估计实际年份植被地理分布上的改变,因此将影响估算结果空间分布的准确程度.

其次,不同地区的同种植被其叶生物量密度可能存在很大差异,在缺乏足够数量样地的叶生物量密度实测数据时,选取一个平均值作为不同地区的同种植被的叶生物量密度,可能造成取值与实际情况的差异而产生误差.

缺乏城市地区及城市植被的分布数据,是估算误差的另一个来源.另外,由于无法准确给定冠层内各部分的叶片温度和 PAR,可能造成 15%左右的估算误差[5];未考虑除了植物叶排放以外的其他天然源,尤其是当估算区域内有大面积海域而未考虑海洋排放时,也会造成估算误差,但这部分误差估计不会超过10%[3].

4 结论

- (1)将中尺度气象模式 MM5 应用于 VOC 天然源排放清单的确定,可建立高时空分辨率 VOC 天然源排放清单的估算方法.并应用该方法确定了华南地区满足区域空气质量数值模拟要求的时空分辨率高的 VOC 天然源排放清单,该清单显示出华南地区夏季典型日排放速率地理分布和日变化的显著特征,区域网格排放速率最大值为 3598 kg·h⁻¹,即 44.42 kg·(h·km)⁻¹,出现在14:00,该地区 24h VOC 天然源排放总量约1.12×10⁴t.
- (2)一个区域的 VOC 排放速率是由该区域分布的 植被类型及其面积大小所决定的,但又明显受到太阳

辐射和温度大小的影响。

- (3) 我国针叶林的平均叶生物量密度在 $155 \, g^{\bullet} \, m^{-2} \sim 1625 \, g^{\bullet} \, m^{-2} \sim 10.1 \, c^{-1} \, .$ 排放萜烯的标准排放因子为 $0.1 \sim 1.0 \, \mu g^{\bullet} \, (g^{\bullet} \, h)^{-1} \, .$;阔叶林的平均叶生物量密度 在 $245 \, g^{\bullet} \, m^{-2} \sim 1325 \, g^{\bullet} \, m^{-2} \sim 10 \, .$ 其排放异戊二烯的标准排放因子为 $0.1 \sim 60.0 \, \mu g^{\bullet} \, (g^{\bullet} \, h)^{-1} \, .$ 排放萜烯的标准排放因子为 $0.1 \sim 0.65 \, \mu g^{\bullet} \, (g^{\bullet} \, h)^{-1} \, .$
- (4)估算 VOC 天然源排放误差主要来自植被图的植被分布与实际情况的差异,叶生物量密度取值与估算区域实际情况的差异,叶温度和 PAR 在冠层内的分布差异,缺乏城市植被的分布数据,以及未考虑植物叶排放以外的其他天然源排放.

参考文献:

- Simpson D et al. Inventorying emissions from nature in Europe. Journal of Geophysical Research, 1999, 104 (7): 8113 ~ 8152.
- 2 Guenther A et al. A global model of natural volatile organic compound emissions. Journal of Geophysical Research, 1995, 100(5):8873~8892.
- 3 Lamb B et al. A national inventory of biogenic hydrocarbon emissions. Atmospheric Environment, 1987, 21(8): 1695 ~1705.
- 4 Guenther. Seasonal and spatial variations in natural volatile organic compound emissions. Ecological Application, 1997, $7(1):34\sim45$.
- 5 Seaman N L et al. A multiscale four dimensional data assimilation system applied in the San Joaquin Valley during SARMAP. J. Appl. Meteor., 34(8): 1739~1761.
- 6 Guenther A et al. Natural emissions of non-methane volatile organic compounds, carbon monoxide, and oxides of nitrogen from North America. Atmospheric Environment, 2000, 34(12):2205~2230.
- 7 卢其尧等译.植被大气原理.北京:农业出版社,1984,137 ~139.
- 8 中国科学院植物研究所 .中华人民共和国植被图 . 北京 : 地图出版社 ,1979 .
- 9 周秀骥主编.中国地区大气臭氧变化及其对气候环境的 影响(二).北京:气象出版社,1997.94~98.
- 10 Kessel meier J, Staudt M. Biogenic volatile organic compounds (VOC): An overview on emission, physiology and ecology. Journal of Atmospheric Chemistry, 1999, 33(1): 23 ~ 88.
- 11 冯宗炜,王效科,吴刚,中国森林生态系统的生物量和生产力,北京:科学出版社,1999,34~311.