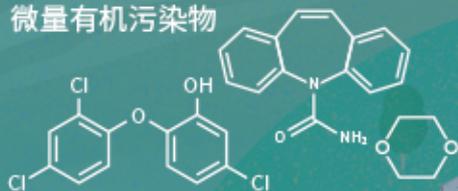


### 城市污水再生处理中微量有机污染物控制的关键难题与解决思路

王文龙, 吴乾元, 杜焯, 黄南, 陆韻, 魏东斌, 胡洪营

#### 微量有机污染物



#### 深度处理

- 污染物非靶向筛查
- 新型处理技术开发
- 处理效率替代性指标
- 工艺运行指南与排放标准

污水处理厂

深度处理

污水再生利用

湖泊湿地等

景观娱乐用水

污水达标排放

下游城市河湖

■ 主办 中国科学院生态环境研究中心

■ 出版 科学出版社



2021年6月

第42卷 第6期

Vol.42 No.6

目次

综述与专论

城市环境生物安全研究的进展与挑战 ..... 苏建强, 安新丽, 胡安谊, 朱永官 (2565)  
 城市污水再生处理中微量有机污染物控制的关键难题与解决思路 ..... 王文龙, 吴乾元, 杜焯, 黄南, 陆韻, 魏东斌, 胡洪莹 (2573)  
 污泥 EPS 作为阻燃剂的机制归纳与潜力分析 ..... 郝晓地, 赵梓丞, 李季, 时琛, 吴远远 (2583)

研究报告

北京大气 PM<sub>2.5</sub> 载体金属浓度、来源及健康风险的城郊差异 ..... 周安琪, 刘建伟, 周旭, 毕思琪, 张博哈, 高越, 曹红斌 (2595)  
 京津冀及周边 MAIAC AOD 和 PM<sub>2.5</sub> 质量浓度特征及相关性分析 ..... 金国因, 杨兴川, 晏星, 赵文吉 (2604)  
 天津市 PM<sub>2.5</sub> 中二次硝酸盐形成及防控 ..... 肖致美, 武婷, 卫昱婷, 徐虹, 李立伟, 李鹏, 陈魁, 邓小文 (2616)  
 南京市大气细颗粒物 (PM<sub>2.5</sub>) 中硝基多环芳烃污染特征与风险评估 ..... 傅银银, 文浩哲, 王向华, 于南洋, 李冰, 韦斯 (2626)  
 汾渭平原吸收性气溶胶时空演化及潜在源区分析 ..... 刘旻霞, 李亮, 于瑞新, 宋佳颖, 张国娟, 穆若兰, 徐璐 (2634)  
 西南典型区域夏季大气含氧挥发性有机化合物来源解析 .....  
 ..... 陈木兰, 王赛男, 陈天舒, 朱波, 彭超, 周佳维, 车汉雄, 黄汝辉, 杨复沫, 刘合凡, 谭钦文, 韩丽, 陈军辉, 陆克定, 陈阳 (2648)  
 气溶胶中溶解性有机质 (DOM) 液相氧化 ..... 陶冶, 陈彦彤, 李楠旺, 张敬宇, 叶招莲, 盖鑫磊 (2659)  
 基于 MERRA-2 再分析资料的上海市近 40 年大气黑碳浓度变化及潜在来源解析 .....  
 ..... 曹闪闪, 段玉森, 高婵婵, 苏玲, 杨怡萱, 张洋, 蔡超琳, 刘敏 (2668)  
 石家庄市臭氧和二氧化氮的时空演替特征及来源解析 ..... 王帅, 聂赛赛, 冯亚平, 崔建升, 陈静, 刘大喜, 石文雅 (2679)  
 基于光化学指数的邯郸市臭氧生成敏感性 ..... 牛元, 程水源, 欧盛菊, 姚诗音, 沈泽亚, 关攀博 (2691)  
 基于 Landsat 数据的关中盆地腹地 AOD 时空格局及城市化对其影响 ..... 郑玉蓉, 王旭红, 张秀, 胡贵贵, 梁秀娟, 牛林芝, 韩海青 (2699)  
 基于卫星遥感和地面观测的人为源 VOCs 区域清单多维校验 ..... 王玥, 魏巍, 任云婷, 王晓琦, 陈赛赛, 程水源 (2713)  
 中原城市群国家干线公路 SOA 生成潜势估算 ..... 王娜萍, 李海萍, 张帆 (2721)  
 北京市“大气十条”实施的空气质量改善效益 ..... 卢亚灵, 范朝阳, 蒋洪强, 牛传真, 李勃 (2730)  
 工业大气污染源排放绩效定量评价及应用 ..... 李廷昆, 冯银厂, 吴建会, 毕晓辉, 张裕芬 (2740)  
 基于生态风险的我国水环境高风险抗生素筛选排序 ..... 周力, 刘珊, 郭家骅, 李琦 (2748)  
 基于 RDA-REM 模型的我国再生水开发利用潜力 ..... 郑锦涛, 马涛, 刘九夫, 彭安帮, 邓晰元, 郑皓 (2758)  
 基于模型研究质量评价的 SWAT 模型参数取值特征分析 ..... 荣易, 秦成新, 杜鹏飞, 孙博 (2769)  
 大型浅水湖泊水质模型边界负荷敏感性分析 ..... 王亚宁, 李一平, 程月, 唐春燕, 陈刚 (2778)  
 不同流域水陆过渡带磷有效态的特征对比及环境意义 ..... 朱海, 袁旭音, 叶宏萌, 成瑾, 毛志强, 韩年, 周慧华 (2787)  
 基于不同赋权方法的北运河上游潜在非点源污染风险时空变化特征分析 .....  
 ..... 李华林, 张建军, 张耀方, 常国梁, 时迪迪, 徐文静, 宋卓远, 于佩丹, 张守红 (2796)  
 长期施肥和耕作下紫色土坡耕地径流 TN 和 TP 流失特征 ..... 吴小雨, 李天阳, 何丙辉 (2810)  
 渭河和泾河流域浅层地下水水化学特征和控制因素 ..... 刘鑫, 向伟, 司炳成 (2817)  
 太湖流域上游南苕溪水夏季水体溶存二氧化碳和甲烷浓度特征及影响因素 .....  
 ..... 梁佳辉, 田琳琳, 周钟昱, 张海阔, 张方方, 何圣嘉, 蔡廷江 (2826)  
 低温期浅水湖泊氮的分布及无机氮扩散通量: 以白洋淀为例 ..... 文艳, 单保庆, 张文强 (2839)  
 覆盖条件下底泥微环境对内源磷释放的影响 ..... 陈姝彤, 李大鹏, 徐楚天, 张帅, 丁玉琴, 孙培荣, 黄勇 (2848)  
 圩区河道底泥腐殖酸对重金属和抗生素的共吸附 ..... 薛向东, 杨宸豪, 于荐麟, 庄海峰, 方程冉 (2856)  
 两种 PPCPs 对雅鲁藏布江沉积物硝化作用的影响 ..... 凌欣, 徐慧平, 陆光华 (2868)  
 铁碳微电解及沸石组合人工湿地的废水处理效果 ..... 赵仲婧, 郝庆菊, 张尧钰, 熊维霞, 曾唯, 陈俊江, 江长胜 (2875)  
 CDs-BOC 复合催化剂可见光下活化过硫酸盐降解典型 PPCPs ..... 雷倩, 许路, 艾伟, 李志敏, 杨磊 (2885)  
 pg-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/BiOBr/Ag 复合材料的制备及其光催化降解磺胺甲噁唑 ..... 杨利伟, 刘丽君, 夏训峰, 朱建超, 高生旺, 王洪良, 王书平 (2896)  
 海藻酸钠负载硫化零价铁对水体中 Cr(VI) 的还原去除 ..... 王旭, 杨欣楠, 黄币娟, 刘壮, 牟诗萌, 程敏, 谢燕华 (2908)  
 超顺磁性纳米 Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>@SiO<sub>2</sub> 功能化材料对镉的吸附机制 ..... 张立志, 易平, 方丹丹, 王强 (2917)  
 典型药物在医院废水和城市污水处理厂中的污染特征及去除情况 ..... 叶璞, 游文丹, 杨滨, 陈阳, 汪立高, 赵建亮, 应光国 (2928)  
 印染废水循环利用抗生素抗性基因丰度变化特性 ..... 徐瑶瑶, 王锐, 金鑫, 石炬, 王岩, 金鹏康 (2937)  
 短程硝化反硝化除磷颗粒污泥的同步驯化 ..... 王文琪, 李冬, 高鑫, 刘博, 张杰 (2946)  
 厌氧氨氧化颗粒污泥的长期保藏及快速活性恢复 ..... 李冬, 刘名扬, 张杰, 曾辉平 (2957)  
 市政污泥热解过程中重金属迁移特性及环境效应评估 ..... 姜媛媛, 王彦, 段文焱, 左宁, 陈芳媛 (2966)  
 不同作物农田土壤抗生素抗性基因多样性 ..... 黄福义, 周曙仡, 王佳妮, 苏建强, 李虎 (2975)  
 宁夏养牛场粪污和周边土壤中抗生素及抗生素抗性基因分布特征 ..... 张俊华, 陈睿华, 刘吉利, 尚天浩, 沈聪 (2981)  
 温度和搅拌对牛粪厌氧消化系统抗生素抗性基因变化和微生物群落的影响 .....  
 ..... 许继飞, 张秋萍, 朱天骄, 秦帅, 朱文博, 庞小可, 赵吉 (2992)  
 小麦秸秆生物质炭施用对不同耕作措施土壤碳含量变化的影响 ..... 刘振杰, 李鹏飞, 黄世威, 金相乐, 张阿凤 (3000)  
 农牧交错带典型区土壤氮磷空间分布特征及其影响因素 ..... 张燕江, 王俊鹏, 王瑜, 张兴昌, 甄庆, 李鹏飞 (3010)  
 汞矿区周边土壤重金属空间分布特征、污染与生态风险评价 ..... 王锐, 邓海, 贾中民, 王佳彬, 余飞, 曾琴琴 (3018)  
 调理剂对磷镉富集土壤中两种元素交互作用的影响 ..... 黄洋, 胡学玉, 曹坤坤, 张敏, 胡晓晓, 王子劲 (3028)  
 S-烯丙基-L-半胱氨酸缓解水稻种子幼根和幼芽镉胁迫机制 ..... 程六龙, 黄永春, 王常荣, 刘仲齐, 黄益宗, 张长波, 王晓丽 (3037)  
 连续 4 个生长季大气 CO<sub>2</sub> 升高与土壤铅 (Pb) 污染耦合下刺槐幼苗根际土壤微生物特征 .....  
 ..... 贾夏, Lkhagvajargal Khadkhurel, 赵永华, 张春燕, 张宁静, 高云峰, 王子威 (3046)  
 嗜热脂肪地芽孢杆菌对聚苯乙烯的降解性能 ..... 邢睿智, 赵子强, 赵文琪, 陈志, 陈金凤, 周顺桂 (3056)  
 冬青和女贞叶表面颗粒物微形态及叶际细菌群落结构 ..... 李慧娟, 徐爱玲, 乔凤祿, 蒋敏, 宋琪 (3063)  
 罗红霉素对大型溛孳殖生长及抗氧化系统的影响 ..... 张凌玉, 刘建超, 冷阳, 陆光华 (3074)  
 中国粮食作物产量和木本植物生物量与地表臭氧污染响应关系 ..... 冯兆忠, 彭金龙 (3084)  
 《环境科学》征订启事 (2698) 《环境科学》征稿简则 (2712) 信息 (3027, 3055, 3073)

# 基于光化学指标法的邯郸市臭氧生成敏感性

牛元, 程水源\*, 欧盛菊, 姚诗音, 沈泽亚, 关攀博

(北京工业大学环境与能源工程学院, 区域大气复合污染防治北京市重点实验室, 北京 100124)

**摘要:** 邯郸市近年来 O<sub>3</sub> 污染状况越发严峻, 2018 年夏季(6~8月), 邯郸市 O<sub>3</sub> 日最大 8 h 平均浓度为 175 μg·m<sup>-3</sup>, 超标天数达 54 d, 超标率 59%, 最高浓度达 257 μg·m<sup>-3</sup>. 本研究应用 WRF-CMAQ 模式系统和光化学指标法对邯郸市夏季 O<sub>3</sub> 生成敏感性特征进行分析. 结果表明, 用 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>/HNO<sub>3</sub> 表征 O<sub>3</sub> 生成敏感性较其他指标在理论和模拟效果方面均更合适. 基于精细化的源清单和网格分辨率, CMAQ 对 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 和 HNO<sub>3</sub> 有较好的模拟效果. 对 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>/HNO<sub>3</sub> 的模拟结果显示, 邯郸市 VOCs 控制区范围逐月减少, 6 月协同控制区范围占比最大, 7 月和 8 月以 NO<sub>x</sub> 控制区为主. 邯郸市各区县 VOCs 和 NO<sub>x</sub> 排放量比值显著的空间差异, 是 O<sub>3</sub> 生成敏感性差别的主要原因. VOCs/NO<sub>x</sub> < 1.7 的区域, 其 O<sub>3</sub> 生成趋向于受 VOCs 控制, 邯郸南部 VOCs/NO<sub>x</sub> > 6.9 的区域, NO<sub>x</sub> 是 O<sub>3</sub> 生成的主控因子, 1.7 < VOCs/NO<sub>x</sub> < 6.9 的区域更易受到 VOCs 和 NO<sub>x</sub> 的协同控制. 当 HCHO/NO<sub>2</sub>、O<sub>3</sub>/HNO<sub>3</sub> 和 O<sub>3</sub>/NO<sub>x</sub> 过渡范围分别为 0.35~0.6、20~35 和 10~25 时, 可以得到与 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>/HNO<sub>3</sub> 较为一致的敏感性空间分布, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>/(O<sub>3</sub> + NO<sub>2</sub>) 不能指示出与其他指标一致的结果, 表明该指标可能不适用于邯郸市.

**关键词:** WRF-CMAQ; 光化学指标; 邯郸市; 臭氧; 敏感性

中图分类号: X515 文献标识码: A 文章编号: 0250-3301(2021)06-2691-08 DOI: 10.13227/j.hj.kx.202010243

## Applying Photochemical Indicators to Analyze Ozone Sensitivity in Handan

NIU Yuan, CHENG Shui-yuan\*, OU Sheng-ju, YAO Shi-yin, SHEN Ze-ya, GUAN Pan-bo

(Key Laboratory of Beijing on Regional Air Pollution Control, College of Environmental and Energy Engineering, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China)

**Abstract:** Ozone pollution in Handan has become severe in recent years and in the summer of 2018, the average maximum daily 8-hour average ozone concentration in Handan was 175 μg·m<sup>-3</sup> with a maximum of 257 μg·m<sup>-3</sup>. Ozone concentrations exceeded the National Air Quality Grade II Standard in 59% of cases. In this study, the H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>/HNO<sub>3</sub> indicator was applied to analyze summertime ozone sensitivity in Handan using the WRF-CMAQ modeling system. The results showed that H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>/HNO<sub>3</sub> was more appropriate than other ozone indicators, both theoretically and based on simulation outputs. The good simulation effect of CMAQ on H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> and HNO<sub>3</sub> was attributed to fine emission inventory and grid resolution. The H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>/HNO<sub>3</sub> simulation results showed that the relative importance of a VOCs-limited regime decreased month by month; a VOCs-NO<sub>x</sub>-mixed-limited regime was dominant in June; and a NO<sub>x</sub>-limited regime was more dominant in July and August than in June. The remarkable spatial difference in VOCs and NO<sub>x</sub> emission ratios among the counties of Handan led to differences in ozone sensitivity. The VOCs-limited regime was concentrated in counties where VOCs/NO<sub>x</sub> emission ratios were lower than 1.7. Southern counties had a NO<sub>x</sub>-limited regime, where VOCs/NO<sub>x</sub> emission ratios were higher than 6.9. Counties with VOCs/NO<sub>x</sub> emission ratios varying from 1.7 to 6.9 were more susceptible to both VOCs and NO<sub>x</sub>. According to these results, the transition range of HCHO/NO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>/HNO<sub>3</sub>, and O<sub>3</sub>/NO<sub>x</sub> ratios were adjusted to 0.35-0.6, 20-35, and 10-25 respectively. Adjusting the transition range of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>/(O<sub>3</sub> + NO<sub>2</sub>) was not effective, indicating that this indicator may not be applicable to Handan.

**Key words:** WRF-CMAQ; photochemical indicator; Handan City; ozone; sensitivity

近年来,我国的空气污染具有 PM<sub>2.5</sub> 浓度高、O<sub>3</sub> 污染问题逐渐突出和能见度低等特点<sup>[1]</sup>. 在过去的几十年间,我国一直致力于大气污染的防治工作, PM<sub>2.5</sub> 污染情况出现好转. 然而,长三角<sup>[2,3]</sup>、京津冀<sup>[4-7]</sup>和珠三角<sup>[8]</sup>等城市群所在的中国东部地区, O<sub>3</sub> 污染十分严重,逐渐成为仅次于 PM<sub>2.5</sub> 的影响空气质量优良天数的重要因素. 据统计, 2019 年全国 337 个城市 O<sub>3</sub> 浓度同比上升 6.5%, 以 O<sub>3</sub> 为首要污染物的超标天数占总超标天数的 41.8%.

邯郸市位于河北省南部,是国家重点布局的老工业基地,聚集了钢铁、焦化、建材、水泥和电力等重工业, 2019 年第二产业在 GDP 中占比高达 44.6%. 由于工业结构重、能源消费体量大,加之人

口密度大活动水平高,导致邯郸市大气污染物排放负荷高<sup>[9]</sup>,从而成为我国空气污染最为严重的城市之一. 2019 年 O<sub>3</sub> 日最大 8 h 平均浓度第 90 百分位数为 201 μg·m<sup>-3</sup>,超过国家二级标准(160 μg·m<sup>-3</sup>) 0.26 倍. 邯郸市目前正经历由过去比较单一的煤烟型污染向大气复合污染的转变,以 O<sub>3</sub> 和 PM<sub>2.5</sub> 为特征污染物的区域性复合型大气污染日益突出,严重制约社会经济的可持续发展,威胁人民群众身体

收稿日期: 2020-10-29; 修订日期: 2020-12-07

基金项目: 大气重污染成因与治理攻关项目(DQGG0501, DQGG020102); 国家重点研发计划项目(2018YFC0213206)

作者简介: 牛元(1994~),男,硕士研究生,主要研究方向为大气污染防治及环境管理, E-mail: niuyuan@emails.bjut.edu.cn  
\* 通信作者, E-mail: chengsy@bjut.edu.cn

健康<sup>[10]</sup>.

近地面 O<sub>3</sub> 属于二次污染物,是在太阳光照射下,由挥发性有机物(VOCs)、氮氧化物(NO<sub>x</sub>)和自由基之间经过一系列复杂的化学反应产生的<sup>[6, 11]</sup>,其浓度还受到平流、扩散和沉降等大气物理过程的影响<sup>[12]</sup>,因此与气象因素(太阳辐射强度、温度、湿度、风向和风速)有密切关系<sup>[13]</sup>.通常在太阳辐射强度高、高温、低相对湿度和低风速的条件下,易发生高浓度 O<sub>3</sub> 污染事件<sup>[14]</sup>.VOCs 主要来源于化石燃料燃烧、工业<sup>[15]</sup>、机动车<sup>[16]</sup>和溶剂使用的排放<sup>[17]</sup>,而化石燃料燃烧、机动车和工业源是 NO<sub>x</sub> 的主要排放源<sup>[18]</sup>.O<sub>3</sub> 生成敏感性是 O<sub>3</sub> 与前体物之间非线性关系的简明体现,是表征影响 O<sub>3</sub> 浓度的主要前体物类型的重要指标<sup>[19]</sup>.因此,明确 O<sub>3</sub> 生成敏感性可为当地制定有效控制 O<sub>3</sub> 污染的策略提供理论支撑.

O<sub>3</sub> 生成敏感性的研究方法主要有指示剂法、源示踪法和敏感性测试法.敏感性测试法是利用空气质量模型<sup>[20]</sup>模拟在不同前体物排放情景下 O<sub>3</sub> 浓度的变化,以确定不同前体物的敏感性贡献.聂滕等<sup>[19]</sup>利用 Models-3/CMAQ 模式系统,对北京市夏季 O<sub>3</sub> 前体物控制区进行划分.结果表明,从北京市城近郊区到远郊区, O<sub>3</sub> 生成由主要受 VOCs 控制逐渐转变为受 VOCs 和 NO<sub>x</sub> 共同控制,进而过渡到主要受 NO<sub>x</sub> 控制.Sillman 等<sup>[21, 22]</sup>在用指示剂法研究 O<sub>3</sub> 生成敏感性方面进行了卓有成效地探索,提出以 HNO<sub>3</sub>/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 作为指示剂确定 O<sub>3</sub> 生成敏感性<sup>[23]</sup>.此后, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>/NO<sub>2</sub>、H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>/(O<sub>3</sub> + NO<sub>2</sub>)、HCHO/NO<sub>2</sub>、O<sub>3</sub>/NO<sub>x</sub> 和 NO<sub>y</sub> 等多种指标也被应用于 O<sub>3</sub> 生成敏感性的研究<sup>[22, 24, 25]</sup>.

探究 O<sub>3</sub> 生成敏感性对于邯郸市有针对性地制定污染物减排政策、控制 O<sub>3</sub> 污染和改善空气质量具有重要意义.到目前为止,少有关于邯郸市 O<sub>3</sub> 生成敏感性的系统研究,欧盛菊等<sup>[26]</sup>利用 VOCs/NO<sub>x</sub> 比值法和强力关闭法研究了邯郸市市区的 O<sub>3</sub> 生成敏感性,但缺乏对整个邯郸市域的研究.由于邯郸市面积较大, O<sub>3</sub> 前体物的排放特性差异很大,不同地区影响 O<sub>3</sub> 浓度的主要前体物类型有显著差异.因此,本研究采用光化学指标法,主要选取 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>/HNO<sub>3</sub> 作为指示剂,利用 WRF-CMAQ 耦合模式,分析邯郸市夏季 O<sub>3</sub> 生成敏感性的时空分布特征,深入探究不同区域 VOCs 和 NO<sub>x</sub> 排放量比值与 O<sub>3</sub> 形成控制区的联系,以期为 O<sub>3</sub> 污染治理提供重要依据,并根据 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>/HNO<sub>3</sub> 指示的 O<sub>3</sub> 生成敏感性特征,探析适用于邯郸市大气环境的 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>/(O<sub>3</sub> + NO<sub>2</sub>)、

HCHO/NO<sub>2</sub>、O<sub>3</sub>/HNO<sub>3</sub> 和 O<sub>3</sub>/NO<sub>x</sub> 过渡范围.

## 1 材料与方法

### 1.1 模式系统介绍及数据来源

选取中尺度气象模式 Weather Research and Forecasting (WRF v3.3.1) 以及化学传输模式 Community Multiscale Air Quality (CMAQ v4.7.1) 构建适用于邯郸市及周边区域的大气污染数值模式系统.CMAQ 模式用于区域和城市规模的空气质量模拟,它将大量空气质量问题(颗粒物、臭氧、酸沉降和能见度等)整合到“一个大气”方法中,在空气质量预报和大气污染物传输等方面得到广泛地应用<sup>[27-29]</sup>.本研究的驱动气象输入是由 WRF 模式提供的,使用气象-化学接口处理器(MCIP)将 WRF 输出结果转换为网格化的气象场数据作为 CMAQ 的输入数据.模拟使用 CB-IV 化学机制,该模型由 36 种化学物质、93 种化学反应和 11 种光化学反应组成.

模拟区域水平方向采用双层嵌套模式,外层网格分辨率为 9 km,范围覆盖京津冀地区、内蒙古、河南、山东和山西等省部分地区;内层网格分辨率为 3 km,覆盖邯郸市域及周边区域,网格数分别为 78×90 和 66×42(图 1).模式顶高设置为 5 000 Pa,垂直方向分为 30 层,物理过程和气相化学过程参数方案见表 1.模拟时段为 2018 年 6~8 月.

本文的初始气象场和边界条件采用 NCEP 提供的 6 h 1°×1°分辨率的全球对流层分析资料,空气质量监测数据来自城市监测站点的空气质量发布平台.京津冀区域外大气污染物排放清单采用清华大学研发的 MEIC 清单,京津冀地区排放清单来自本课题组多年积累,是采用拉网式调查获取县区级详细活动水平数据,结合本地化排放因子,自下而上建立起来的,包含的物种有 SO<sub>2</sub>、CO、NO<sub>x</sub>、NH<sub>3</sub>、VOCs、PM<sub>2.5</sub> 和 PM<sub>10</sub>.其中点源按照经纬度、烟囱高度确定其三维空间分布,面源按照道路、农田、居民、工地、建筑和裸地等不同土地利用类型分摊到网格,按照各污染源类成分谱数据,将 VOCs、PM<sub>2.5</sub>

表 1 模式物理与化学过程参数化方案

Table 1 Parametric scheme of physical and chemical processes in the applied model

项目	模式选项	参数化方案
物理过程	陆面过程方案	Noah 陆面过程方案
	积云对流	Kain-Fritsch 方案
	边界层方案	YSU 方案
	长波辐射	RRTM 方案
	短波辐射	Dudhia 方案
化学过程	气相化学机制	CB05 化学机制
	气溶胶化学机制	Aero6 方案

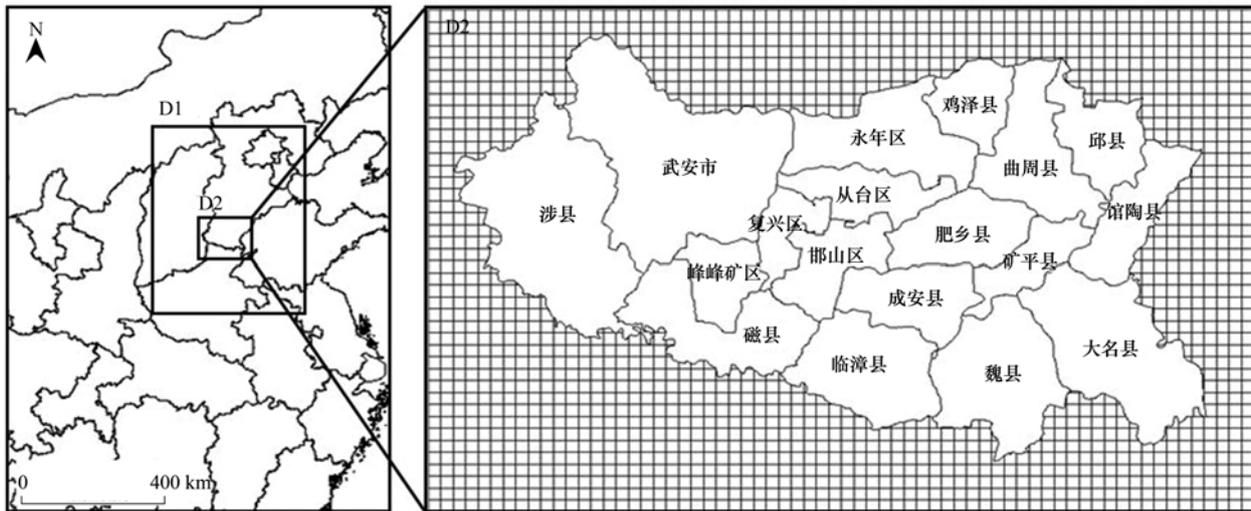


图1 双层嵌套区域示意

Fig. 1 Schematic diagram of the two-level nested-grid modeling domain

和  $PM_{10}$  排放量分配到模式输入清单需要的各物种. 课题组采用总量校验方法分析了清单的不确定性<sup>[30]</sup>, 结果表明清单误差在可接受范围内, 说明本研究建立的大气污染源排放清单具有较高的准确性.

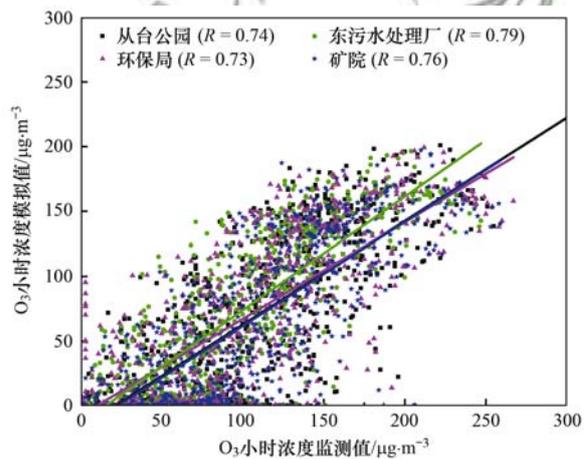
### 1.2 模拟效果评估

使用中国环境监测总站发布的邯郸市 4 个国控站点(丛台公园、东污水处理厂、环保局和矿院)  $O_3$  监测数据对模式模拟效果进行评估. 模式性能验证采用的指标包括标准平均偏差(normalized mean bias, NMB)、标准平均误差(normalized mean error, NME)和相关系数(correlation coefficient,  $R$ ). 图 2 为邯郸市 4 个国控站点  $O_3$  小时浓度模拟值和监测值的对比, 结果显示各监测点  $R$  为 0.73 ~ 0.79, 显著水平均为  $P < 0.01$ , 相关性显著. NMB 为  $-26.3\% \sim -37.1\%$ , NME 为  $36.3\% \sim 42.0\%$ . 模型能较好地反映  $O_3$  小时浓度的变化趋势, 但对于污染时段的高值模拟效果较差, 除了排放清单本身存在的误差以外, WRF 气象模式结果的准确性, CMAQ 模式的物理和化学机制的不确定性等都会导致模拟值与监测值的误差. 总体来看, 本研究所选取的空气质量模型及参数化方案, 满足美国 EPA 关于空气质量模型验证的相关要求<sup>[31]</sup>, 可用于开展后续的敏感性研究.

## 2 结果与讨论

### 2.1 污染物排放量特征

2018 年夏季(6 ~ 8 月)邯郸市 VOCs(人为源和天然源)和  $NO_x$  月排放量及 VOCs/ $NO_x$  比值见图 3. VOCs 物种包括甲醛、乙醛、丙醛和更高碳数同系物、甲醇、乙醇、乙烷、链烷烃碳键(C—C)、乙烯、末端烯烃碳键( $R-C=C$ )、内烯烃碳键

图2  $O_3$  模拟值与监测值的对比Fig. 2 Comparison of simulated and measured  $O_3$  concentrations

( $R-C=C-R$ )、苯、甲苯和其他单酰基芳香化合物、二甲苯和其他多酰基芳香化合物、甲酚和更高分子质量的酚类、卤代烃、异戊二烯和萜烯这 17 类. 邯郸市西北部区县 VOCs 排放量高主要是因为这些区县有较多的钢铁、焦化、水泥和标准件紧固件等工业企业; 植被 VOCs 排放则是东南部区县 VOCs 的主要来源. 西部区县聚集了大量的工业企业, 且主城区内道路移动源活动水平高, 造成  $NO_x$  的大量排放; 东部区县无重工业分布, 且人口密度小活动水平低,  $NO_x$  排放量较少. 因此邯郸市 VOCs 和  $NO_x$  排放量均呈现出西部高于东部的特点. VOCs/ $NO_x$  值则表现为东部区县低于西部区县. 邯郸市主城区 VOCs/ $NO_x$  值在 1.7 ~ 4.0 之间, 西部污染物排放量大的区县 VOCs/ $NO_x$  排放量比值在 1.2 ~ 4.6 之间, 东部区县则大多分布在 6.9 ~ 13.2 值之间. 在 VOCs/ $NO_x$  低的情况下,  $O_3$  的产生更多受到 VOCs 的控制,  $O_3$  生成随着 VOCs 的增加而增加,

在 VOCs/ $\text{NO}_x$  值高的情况下,  $\text{O}_3$  的产生易受  $\text{NO}_x$  的控制, 且随着  $\text{NO}_x$  的增加而增加。

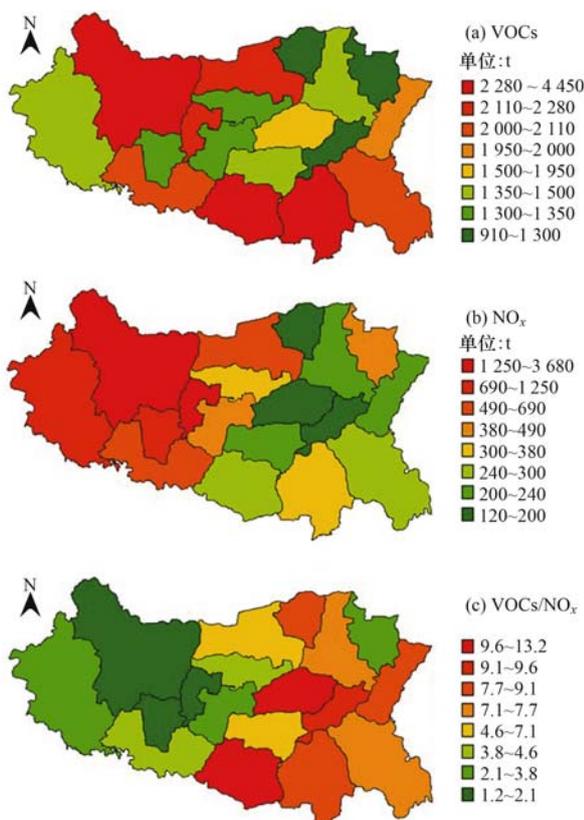


图3 2018年夏季邯郸市月均VOCs和 $\text{NO}_x$ 排放量空间分布及VOCs/ $\text{NO}_x$ 比值

Fig. 3 Spatial distribution of monthly VOCs and  $\text{NO}_x$  emissions and VOCs/ $\text{NO}_x$  ratios in Handan during the summer of 2018

## 2.2 $\text{O}_3$ 生成控制区光化学指标选择

$\text{O}_3$  产生受 VOCs 控制还是受  $\text{NO}_x$  控制取决于过氧化物形成 ( $\text{HO}_2 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$ ;  $\text{HO}_2 + \text{RO}_2 \rightarrow \text{RO}_2\text{H} + \text{O}_2$ ) 相对于硝酸形成 ( $\text{NO}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{HNO}_3$ ) 的速率<sup>[22]</sup>. 当过氧化物超过硝酸作为自由基汇时,  $\text{O}_3$  产生受  $\text{NO}_x$  控制, 而当硝酸在自由基反应中占主导地位时,  $\text{O}_3$  产生受 VOCs 控制. Peng 等<sup>[32,33]</sup> 使用  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3$ 、 $\text{O}_3/\text{HNO}_3$  和  $\text{O}_3/\text{NO}_x$  这3种光化学指标研究  $\text{O}_3$  生成敏感性, 发现在所有的光化学指标中, 无论从理论还是模拟效果来看,  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3$  均要比其他指标有效, 因此本研究使用  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3$  作为评价邯郸市  $\text{O}_3$  生成敏感性的指标。

光化学指标的过渡值与当地的前体物排放特点和气象条件有关. Sillman 等<sup>[34]</sup> 使用光化学指标评价亚特兰大、纽约和洛杉矶这3个城市的  $\text{O}_3$  生成敏感性特点, 并确定了 VOCs 敏感和  $\text{NO}_x$  敏感之间的过渡值. 尽管针对不同城市使用不同的模拟方法和排放清单, 但所有模拟的  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3$  过渡值均为 0.3 ~ 0.6, 即  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3 < 0.3$  的区域  $\text{O}_3$  产生

受 VOCs 控制,  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3$  在 0.3 ~ 0.6 之间时为受 VOCs 和  $\text{NO}_x$  协同控制,  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3 > 0.6$  的区域  $\text{O}_3$  产生受  $\text{NO}_x$  控制. 文献[35]从理论方面也支持了这个过渡值。

7月邯郸市4个国控站点的  $\text{H}_2\text{O}_2$  和  $\text{HNO}_3$  模拟体积分数平均值见图4.  $\text{H}_2\text{O}_2$  的月均体积分数为  $0.85 \times 10^{-9}$ , 最大值为  $2.17 \times 10^{-9}$ . 日间(08:00 ~ 20:00)均值为  $1.01 \times 10^{-9}$ , 体积分数峰值出现在 14:00 ~ 18:00. 但目前没有同时段的  $\text{H}_2\text{O}_2$  观测数据来直接评估其模拟体积分数, 国家气象局于2014年在保定望都展开一次大气过氧化物的测量活动,  $\text{H}_2\text{O}_2$  的24h平均值为  $0.51 \times 10^{-9}$ , 日间(06:00 ~ 18:00)平均值为  $0.55 \times 10^{-9}$ <sup>[36]</sup>. 总体而言  $\text{H}_2\text{O}_2$  模拟值与文献观测值是一致的。

$\text{HNO}_3$  模拟值的月平均体积分数为  $2.03 \times 10^{-9}$ , 日间(08:00 ~ 20:00)均值为  $2.60 \times 10^{-9}$ , 峰值出现在 10:00 ~ 13:00, 均值为  $3.50 \times 10^{-9}$ . Spataro 等<sup>[37]</sup> 于2007年8月在北京市区对大气  $\text{HNO}_3$  进行了测量, 发现24h日平均体积分数为  $0.10 \sim 1.53 \times 10^{-9}$  (平均值为  $0.75 \times 10^{-9}$ ), 最高值出现在 10:00 ~ 12:00 之间. 本研究对  $\text{HNO}_3$  的模拟值与已有研究的观测值同样具有很好的一致性。

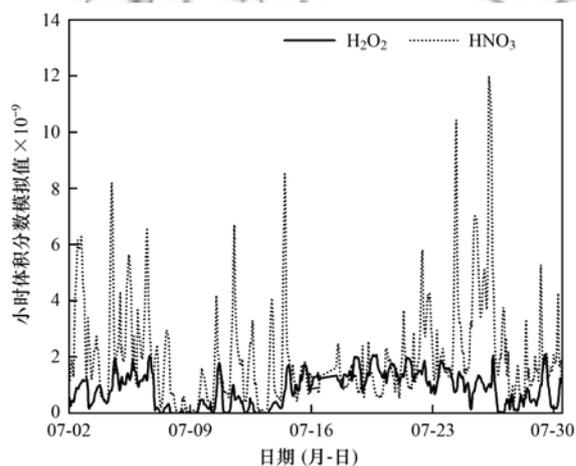


图4 2018年7月模拟中邯郸市国控站点大气  $\text{H}_2\text{O}_2$  和  $\text{HNO}_3$  的时间廓线

Fig. 4 Temporal trends in atmospheric  $\text{H}_2\text{O}_2$  and  $\text{HNO}_3$  at Handan National Control Station simulated in July 2018

## 2.3 夏季 $\text{O}_3$ 生成控制区时空特征

在对  $\text{H}_2\text{O}_2$  和  $\text{HNO}_3$  较好模拟的基础上, 进一步计算邯郸地区下午(12:00 ~ 18:00)的月平均模拟  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3$  比值. 如图5所示, 邯郸市域内6~8月  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3 < 0.3$  (VOCs 控制区) 的面积分别占总面积的 14.6%、13.9% 和 10.7%,  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3$  介于 0.3 ~ 0.6 之间 (VOCs 和  $\text{NO}_x$  协同控制区) 的面积分别占总面积的 64.4%、35.6% 和 40.6%,  $\text{H}_2\text{O}_2/$

$\text{HNO}_3 > 0.6$  ( $\text{NO}_x$  控制区) 的区域分别占总面积的 21.0%、50.5% 和 48.6%。邯郸市 VOCs 控制区逐月减少, 但基本占到邯郸市的 10% 左右, 6 月以协同控制区占绝大多数, 7 月和 8 月邯郸市以  $\text{NO}_x$  控制区为主。这种变化趋势与 3 个月的气温和降水量变化有关, 7 月的平均气温 ( $29.1^\circ\text{C}$ ) 显著高于 6 月 ( $27.8^\circ\text{C}$ ) 和 8 月 ( $27.8^\circ\text{C}$ ), 高温导致植被和人为 VOCs 挥发量更大, 同时 7 月降水量 ( $162.9\text{ mm}$ ) 较 6 月 ( $22.3\text{ mm}$ ) 和 8 月 ( $91.9\text{ mm}$ ) 更为充沛, 对气态  $\text{HNO}_3$  的湿清除效果更加明显, 因此 7 月邯郸市东部区县  $\text{O}_3$  生成受  $\text{NO}_x$  控制更为显著,  $\text{NO}_x$  控制区范围更大。

6 月, 邯郸市  $\text{VOCs}/\text{NO}_x$  比值较小的地区属于 VOCs 控制区,  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3$  比值在 0.1 ~ 0.3 之间, 东南部  $\text{VOCs}/\text{NO}_x$  排放量比值较大的地区属于  $\text{NO}_x$  控制区, 剩余其他地区均属于协同控制区, 如图 5 (a) 所示; 与 6 月相比, 7 月邯郸市 VOCs 控制区和协同控制区的范围均有不同程度的缩小, 东部  $\text{VOCs}/\text{NO}_x$  比值大的区县  $\text{O}_3$  生成受  $\text{NO}_x$  控制; 8 月与 7 月的敏感性分布情况基本相似, 但与 7 月相比, 8 月的协同控制区和  $\text{NO}_x$  控制区分界线向东部偏移, 同时 VOCs 控制区范围进一步缩小, 但控制区域基本没有变化。

$\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3$  表征的邯郸市 2018 年夏季  $\text{O}_3$  生成控制区空间分布见图 6 (a), 其自西向东呈现为: 协同控制区、VOCs 控制区、协同控制区和  $\text{NO}_x$  控制

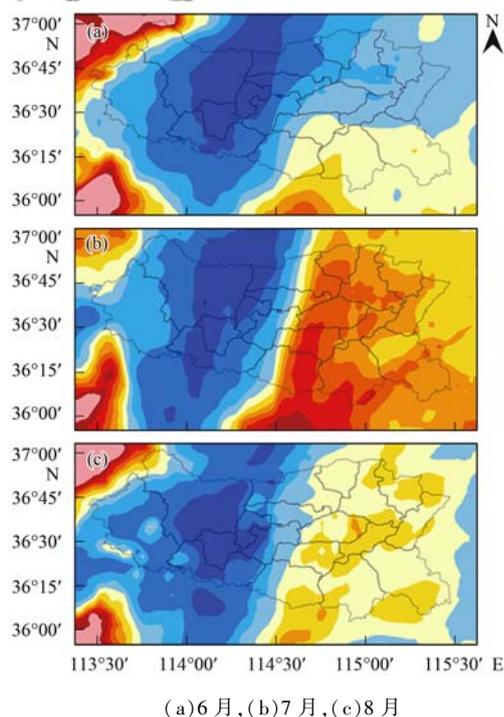


图 5 邯郸市 2018 年夏季下午模拟的  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3$  月均比值  
Fig. 5 Simulated monthly average  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3$  ratios  
in the summer afternoon of 2018 in Handan

区的分布特征。将  $\text{O}_3$  生成控制区分布特点与 2.1 节中  $\text{VOCs}/\text{NO}_x$  比值相对照, 发现  $\text{VOCs}/\text{NO}_x < 1.7$  的区域, 其  $\text{O}_3$  生成趋向于受 VOCs 控制,  $1.7 < \text{VOCs}/\text{NO}_x < 6.9$  的区县受到 VOCs 和  $\text{NO}_x$  的协同控制,  $\text{VOCs}/\text{NO}_x > 6.9$  的区域,  $\text{O}_3$  生成受到  $\text{NO}_x$  的控制。

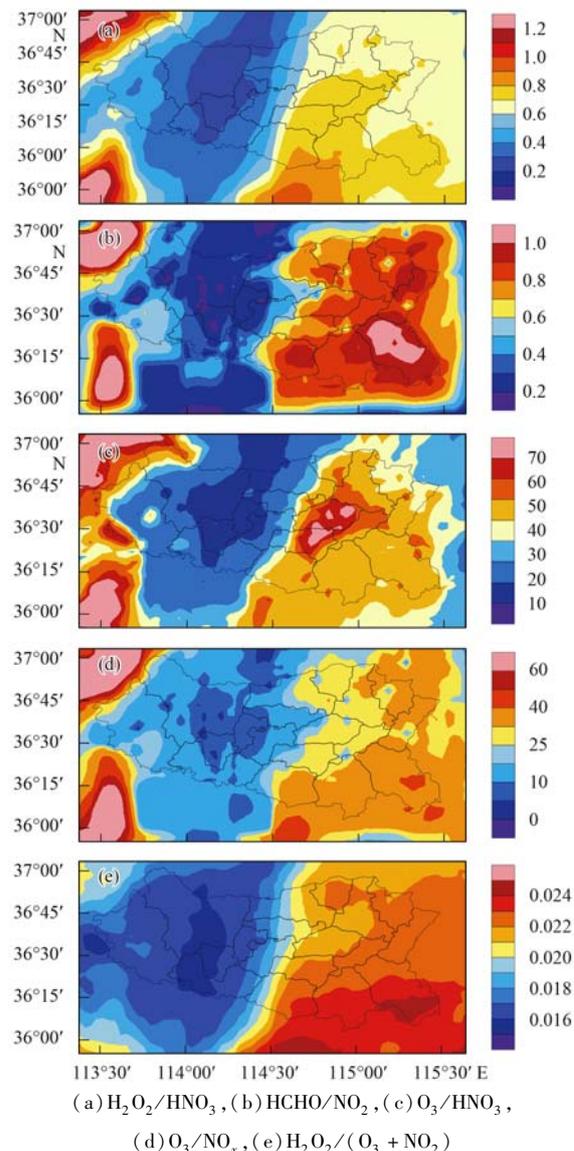


图 6 邯郸市 2018 年夏季下午模拟的  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3$ 、  
 $\text{HCHO}/\text{NO}_2$ 、 $\text{O}_3/\text{HNO}_3$ 、 $\text{O}_3/\text{NO}_x$  和  $\text{H}_2\text{O}_2/(\text{O}_3 + \text{NO}_2)$  比值  
Fig. 6 Simulated average  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3$ ,  $\text{HCHO}/\text{NO}_2$ ,  $\text{O}_3/\text{HNO}_3$ ,  
 $\text{O}_3/\text{NO}_x$ , and  $\text{H}_2\text{O}_2/(\text{O}_3 + \text{NO}_2)$  ratios in the summer  
afternoon of 2018 in Handan

#### 2.4 其他光化学指标的过渡范围调整

本研究应用  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3$  比值对邯郸市进行  $\text{O}_3$  生成敏感性分析, 与武卫玲等<sup>[38]</sup> 的研究结果具有较好的一致性。该研究利用 OMI 对流层柱浓度  $\text{HCHO}/\text{NO}_2$  分析夏季京津冀及周边地区的  $\text{O}_3$  生成敏感性, 对  $\text{O}_3$  控制区空间分布特征的分析结果表明, 邯郸市 VOCs 控制区主要分布在主城区; 中部区县和西北部分地区为协同控制区; 东部区县属于

$\text{NO}_x$  控制区, 与本研究的结果基本一致. 因此, 本研究使用  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3$  表征 VOCs 控制区和  $\text{NO}_x$  控制区的过渡范围介于 0.3 ~ 0.6 是符合邯郸市大气环境条件的.

不仅  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3$  可以作为表征  $\text{O}_3$  生成敏感性光化学指标,  $\text{O}_3/\text{HNO}_3$ 、 $\text{HCHO}/\text{NO}_2$ 、 $\text{O}_3/\text{NO}_x$  和  $\text{H}_2\text{O}_2/(\text{O}_3 + \text{NO}_2)$  也可以作为  $\text{O}_3$  生成敏感性的指标<sup>[39]</sup>, 国外的研究将  $\text{O}_3/\text{HNO}_3$  过渡范围定为 12 ~ 15<sup>[22]</sup>,  $\text{HCHO}/\text{NO}_2$  推荐的过渡值为 1,  $\text{O}_3/\text{NO}_x$  为 15,  $\text{H}_2\text{O}_2/(\text{O}_3 + \text{NO}_2)$  为 0.02<sup>[40,41]</sup>, 这些指标的过渡值是在其他地区基于现场测试或使用不同的化学机制和水平网格分辨率的模型模拟下得到的, 并且都不是基于对邯郸市的观测和模拟. 因此需要探究本地化的光化学指标过渡范围, 以使得这些光化学指标更好的适应邯郸市的大气环境条件.

本研究通过对邯郸市夏季  $\text{O}_3$  生成敏感性的模拟, 对其他光化学指标范围进行探析. 图 6 为邯郸市 2018 年夏季 (6 ~ 8 月)  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3$ 、 $\text{HCHO}/\text{NO}_2$ 、 $\text{O}_3/\text{HNO}_3$ 、 $\text{O}_3/\text{NO}_x$  和  $\text{H}_2\text{O}_2/(\text{O}_3 + \text{NO}_2)$  均值的空间分布. 可以看出, 当  $\text{HCHO}/\text{NO}_2$  过渡范围为 0.35 ~ 0.6,  $\text{O}_3/\text{HNO}_3$  过渡范围为 20 ~ 35,  $\text{O}_3/\text{NO}_x$  过渡范围为 10 ~ 25 时, 这些指标能够预测出与  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3$  一致的  $\text{O}_3$  生成敏感性空间分布特征. 调整  $\text{H}_2\text{O}_2/(\text{O}_3 + \text{NO}_2)$  的过渡范围不能得到和其他指标一致的结果, 表明该指标可能不适用于邯郸市的大气条件.

### 3 结论

(1) 邯郸市 VOCs 和  $\text{NO}_x$  排放量均呈现出西部区县高于东部区县的情况, VOCs/ $\text{NO}_x$  比值则表现为东部区县低于西部区县.

(2)  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3$  模拟结果表明, 邯郸市 6 月协同控制区占绝大多数, 而 7 月和 8 月  $\text{NO}_x$  控制区占大多数. 6 月仅有 14.6% 的区域属于 VOCs 控制区, 其他大多地区属于协同控制区; 7 月和 8 月的敏感性分布情况相似, VOCs 控制区范围较 6 月缩小, 同时协同控制区范围较 6 月有大面积缩小, 东北部区县  $\text{O}_3$  产生由受 VOCs 和  $\text{NO}_x$  协同控制区转变为受  $\text{NO}_x$  控制. 8 月与 7 月相比协同控制区和  $\text{NO}_x$  控制区分界线略有右移, 气温与降水量的变化是产生敏感性差异的主要原因.

(3)  $\text{O}_3$  生成控制区分布与 VOCs 和  $\text{NO}_x$  排放量比值密切相关,  $\text{VOCs}/\text{NO}_x < 1.7$  的区域, 其  $\text{O}_3$  生成趋向于受 VOCs 控制,  $1.7 < \text{VOCs}/\text{NO}_x < 6.9$  的区域受到 VOCs 和  $\text{NO}_x$  的协同控制,  $\text{VOCs}/\text{NO}_x > 6.9$

的区域,  $\text{O}_3$  生成受到  $\text{NO}_x$  的控制. 邯郸市自西向东呈现出: 协同控制区、VOCs 控制区、协同控制区和  $\text{NO}_x$  控制区的空间分布特征.

(4) 本研究对邯郸市  $\text{O}_3$  敏感性的研究与已有的研究结果具有较好的一致性. 根据模拟的邯郸市夏季  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3$  的空间分布及 0.3 ~ 0.6 的过渡范围, 当邯郸市夏季  $\text{HCHO}/\text{NO}_2$ 、 $\text{O}_3/\text{HNO}_3$  和  $\text{O}_3/\text{NO}_x$  过渡范围分别为 0.35 ~ 0.6、20 ~ 35 和 10 ~ 25 时, 可以得到与  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{HNO}_3$  表征的臭氧生成控制区较为一致的空间分布, 调整  $\text{H}_2\text{O}_2/(\text{O}_3 + \text{NO}_2)$  过渡范围不能得到与其他指标一致的结论, 表明该指标可能不适用于邯郸市的大气条件.

### 参考文献:

- [1] Wang N, Lyu X P, Deng X J, *et al.* Aggravating  $\text{O}_3$  pollution due to  $\text{NO}_x$  emission control in eastern China[J]. *Science of the Total Environment*, 2019, **677**: 732-744.
- [2] 蒋美青, 陆克定, 苏榕, 等. 我国典型城市群  $\text{O}_3$  污染成因和关键 VOCs 活性解析[J]. *科学通报*, 2018, **63**(12): 1130-1141.
- [3] Jiang M Q, Lu K D, Su R, *et al.* Ozone formation and key VOCs in typical Chinese city clusters[J]. *Chinese Science Bulletin*, 2018, **63**(12): 1130-1141.
- [4] Wang T, Xue L K, Brimblecombe P, *et al.* Ozone pollution in China: a review of concentrations, meteorological influences, chemical precursors, and effects[J]. *Science of the Total Environment*, 2017, **575**: 1582-1596.
- [5] Cheng N L, Chen Z Y, Sun F, *et al.* Ground ozone concentrations over Beijing from 2004 to 2015: variation patterns, indicative precursors and effects of emission-reduction[J]. *Environmental Pollution*, 2018, **237**: 262-274.
- [6] 漏嗣佳, 朱彬, 廖宏. 中国地区臭氧前体物对地面臭氧的影响[J]. *大气科学学报*, 2010, **33**(4): 451-459.
- [7] Lou S J, Zhu B, Liao H. Impacts of  $\text{O}_3$  precursor on surface  $\text{O}_3$  concentration over China [J]. *Transactions of Atmospheric Sciences*, 2010, **33**(4): 451-459.
- [8] 王燕丽, 薛文博, 雷宇, 等. 京津冀地区典型月  $\text{O}_3$  污染输送特征[J]. *中国环境科学*, 2017, **37**(10): 3684-3691.
- [9] Wang Y L, Xue W B, Lei Y, *et al.* Model-derived source apportionment and regional transport matrix study of ozone in Jingjinji[J]. *China Environmental Science*, 2017, **37**(10): 3684-3691.
- [10] Wei W, Li Y, Ren Y T, *et al.* Sensitivity of summer ozone to precursor emission change over Beijing during 2010-2015: A WRF-Chem modeling study [J]. *Atmospheric environment*, 2019, **218**, doi: 10.1016/j.atmosenv.2019.116984.
- [11] Hu J L, Wang Y G, Ying Q, *et al.* Spatial and temporal variability of  $\text{PM}_{2.5}$  and  $\text{PM}_{10}$  over the North China Plain and the Yangtze River Delta, China [J]. *Atmospheric Environment*, 2014, **95**: 598-609.
- [12] 刘卫, 马笑, 王丽涛, 等. 邯郸市大气  $\text{PM}_{2.5}$  成分空间分布研究[J]. *环境工程*, 2017, **35**(10): 105-109, 60.
- [13] Liu W, Ma X, Wang L T, *et al.* Analysis of the space distribution of composition of  $\text{PM}_{2.5}$  in Handan [J]. *Environmental Engineering*, 2017, **35**(10): 105-109, 60.
- [14] 齐艳杰, 于世杰, 杨健, 等. 河南省臭氧污染特征与气象因子影响分析[J]. *环境科学*, 2020, **41**(2): 587-599.
- [15] Qi Y J, Yu S J, Yang J, *et al.* Analysis of characteristics and

- meteorological influence factors of ozone pollution in Henan province[J]. *Environmental Science*, 2020, **41**(2): 587-599.
- [11] Guo H, Chen K Y, Wang P F, *et al.* Simulation of summer ozone and its sensitivity to emission changes in China [J]. *Atmospheric Pollution Research*, 2019, **10**(5): 1543-1552.
- [12] Sillman S, He D Y, Pippin M R, *et al.* Model correlations for ozone, reactive nitrogen, and peroxides for Nashville in comparison with measurements; Implications for O<sub>3</sub>-NO<sub>x</sub>-hydrocarbon chemistry [J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 1998, **103**(D17): 22629-22644.
- [13] 程念亮, 李云婷, 张大伟, 等. 2014 年北京市城区臭氧超标日浓度特征及与气象条件的关系[J]. *环境科学*, 2016, **37**(6): 2041-2051.
- Cheng N L, Li Y T, Zhang D W, *et al.* Characteristics of ozone over standard and its relationships with meteorological conditions in Beijing city in 2014 [J]. *Environmental Science*, 2016, **37**(6): 2041-2051.
- [14] 王磊, 刘端阳, 韩桂荣, 等. 南京地区近地面臭氧浓度与气象条件关系研究[J]. *环境科学学报*, 2018, **38**(4): 1285-1296.
- Wang L, Liu D Y, Han G R, *et al.* Study on the relationship between surface ozone concentrations and meteorological conditions in Nanjing, China [J]. *Acta Scientiae Circumstantiae*, 2018, **38**(4): 1285-1296.
- [15] Wei W, Ren Y T, Yang G, *et al.* Characteristics and source apportionment of atmospheric volatile organic compounds in Beijing, China [J]. *Environmental Monitoring and Assessment*, 2019, **191**(12), doi: 10.1007/s10661-019-7813-5.
- [16] Lang J L, Zhou Y, Cheng S Y, *et al.* Unregulated pollutant emissions from on-road vehicles in China, 1999-2014 [J]. *Science of the Total Environment*, 2016, **573**: 974-984.
- [17] Liu Y H, Wang H L, Jing S G, *et al.* Characteristics and sources of volatile organic compounds (VOCs) in Shanghai during summer; Implications of regional transport [J]. *Atmospheric Environment*, 2019, **215**, doi: 10.1016/j.atmosenv.2019.116902.
- [18] Li Y, Lau A K H, Fung J C H, *et al.* Ozone source apportionment (OSAT) to differentiate local regional and super-regional source contributions in the Pearl River Delta region, China [J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2012, **117**(D15), doi: 10.1029/2011JD017340.
- [19] 聂滕, 李璇, 王雪松, 等. 北京市夏季臭氧前体物控制区的分布特征[J]. *北京大学学报(自然科学版)*, 2014, **50**(3): 557-564.
- Nie T, Li X, Wang X S, *et al.* Characteristics of the spatial distributions of ozone-precursor sensitivity regimes in summer over Beijing [J]. *Acta Scientiarum Naturalium Universitatis Pekinensis*, 2014, **50**(3): 557-564.
- [20] Castell N, Stein A F, Mantilla E, *et al.* Evaluation of the use of photochemical indicators to assess ozone-NO<sub>x</sub>-VOC sensitivity in the Southwestern Iberian Peninsula [J]. *Journal of Atmospheric Chemistry*, 2009, **63**(1): 73-91.
- [21] Sillman S. The relation between ozone, NO<sub>x</sub> and hydrocarbons in urban and polluted rural environments [J]. *Atmospheric Environment*, 1999, **33**(12): 1821-1845.
- [22] Sillman S, He D Y. Some theoretical results concerning O<sub>3</sub>-NO<sub>x</sub>-VOC chemistry and NO<sub>x</sub>-VOC indicators [J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2002, **107**(D22), doi: 10.1029/2001JD001123.
- [23] Sillman S, Logan J A, Wofsy S C. The sensitivity of ozone to nitrogen oxides and hydrocarbons in regional ozone episodes [J]. *Journal of Geophysical Research*, 1990, **95**(D2): 1837-1851.
- [24] Li L, Chen C H, Huang C, *et al.* Ozone sensitivity analysis with the MM5-CMAQ modeling system for Shanghai [J]. *Journal of Environmental Sciences*, 2011, **23**(7): 1150-1157.
- [25] Sillman S, West J J. Reactive nitrogen in Mexico City and its relation to ozone-precursor sensitivity: results from photochemical models [J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2009, **9**(11): 3477-3489.
- [26] 欧盛菊, 魏巍, 王晓琦, 等. 华北地区典型重工业城市夏季近地面 O<sub>3</sub> 污染特征及敏感性 [J]. *环境科学*, 2020, **41**(7): 3085-3094.
- Ou S J, Wei W, Wang X Q, *et al.* Pollution characteristics and sensitivity of surface ozone in a typical heavy-industry city of the north china plain in summer [J]. *Environmental Science*, 2020, **41**(7): 3085-3094.
- [27] Liu X H, Zhang Y, Xing J, *et al.* Understanding of regional air pollution over China using CMAQ, part II. Process analysis and sensitivity of ozone and particulate matter to precursor emissions [J]. *Atmospheric Environment*, 2010, **44**(30): 3719-3727.
- [28] Xing J, Ding D, Wang S X, *et al.* Development and application of observable response indicators for design of an effective ozone and fine-particle pollution control strategy in China [J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2019, **19**(21): 13627-13646.
- [29] Lang J L, Cheng S Y, Li J B, *et al.* A monitoring and modeling study to investigate regional transport and characteristics of PM<sub>2.5</sub> pollution [J]. *Aerosol and Air Quality Research*, 2013, **13**(3): 943-956.
- [30] 李亚林, 郭秀锐, 程水源, 等. 邯郸市大气污染源排放清单建立及总量校验 [J]. *环境科学研究*, 2020, **33**(1): 1-8.
- Li Y L, Guo X Y, Cheng S Y, *et al.* Establishment and verification of air pollution source emission inventory in Handan city [J]. *Research of Environmental Sciences*, 2020, **33**(1): 1-8.
- [31] United States Environmental Protection Agency (USEPA). State Implementation Plan (SIP) Attainment Demonstration Guidance [EB/Z]. <https://www.epa.gov/scram/state-implementation-plan-sip-attainment-demonstration-guidance>, 2018-11-29.
- [32] Peng Y P, Chen K S, Wang H K, *et al.* Applying model simulation and photochemical indicators to evaluate ozone sensitivity in southern Taiwan [J]. *Journal of Environmental Sciences*, 2011, **23**(5): 790-797.
- [33] Peng Y P, Chen K S, Lai C H, *et al.* Concentrations of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> and HNO<sub>3</sub> and O<sub>3</sub>-VOC-NO<sub>x</sub> sensitivity in ambient air in southern Taiwan [J]. *Atmospheric Environment*, 2006, **40**(35): 6741-6751.
- [34] Sillman S, He D Y, Cardelino C, *et al.* The use of photochemical indicators to evaluate ozone-NO<sub>x</sub>-hydrocarbon sensitivity: Case studies from Atlanta, New York, and Los Angeles [J]. *Journal of the Air & Waste Management Association*, 1997, **47**(10): 1030-1040.
- [35] Sillman S. The use of NO<sub>y</sub>, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, and HNO<sub>3</sub> as indicators for ozone-NO<sub>x</sub>-hydrocarbon sensitivity in urban locations [J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 1995, **100**(D7): 14175-14188.
- [36] Wang Y, Chen Z M, Wu Q Q, *et al.* Observation of atmospheric peroxides during Wangdu Campaign 2014 at a rural site in the North China Plain [J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2016, **16**(17): 10985-11000.
- [37] Spataro F, Ianniello A, Esposito G, *et al.* Occurrence of atmospheric nitrous acid in the urban area of Beijing (China)

- [J]. *Science of the Total Environment*, 2013, **447**: 210-224.
- [38] 武卫玲, 薛文博, 雷宇, 等. 基于 OMI 数据的京津冀及周边地区 O<sub>3</sub> 生成敏感性[J]. *中国环境科学*, 2018, **38**(4): 1201-1208.
- Wu W L, Xue W B, Lei Y, *et al.* Sensitivity analysis of ozone in Beijing-Tianjin-Hebei (BTH) and its surrounding area using OMI satellite remote sensing[J]. *China Environmental Science*, 2018, **38**(4): 1201-1208.
- [39] Lu C H, Chang J S. On the indicator - based approach to assess ozone sensitivities and emissions features [J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 1998, **103** (D3): 3453-3462.
- [40] Tonnesen G S, Dennis R L. Analysis of radical propagation efficiency to assess ozone sensitivity to hydrocarbons and NO<sub>x</sub>: 1. Local indicators of instantaneous odd oxygen production sensitivity [J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2000, **105** (D7): 9213-9225.
- [41] Tonnesen G S, Dennis R L. Analysis of radical propagation efficiency to assess ozone sensitivity to hydrocarbons and NO<sub>x</sub>: 2. Long-lived species as indicators of ozone concentration sensitivity [J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2000, **105** (D7): 9227-9241.

## 欢迎订阅 2021 年《环境科学》

《环境科学》创刊于 1976 年,由中国科学院主管,中国科学院生态环境研究中心主办,是我国环境科学学科中最早创刊的学术性期刊。

《环境科学》自创刊以来,始终坚持“防治污染,改善生态,促进发展,造福人民”的宗旨,报道我国环境科学领域内具有创新性高水平,有重要意义的基础研究和应用研究成果,以及反映控制污染,清洁生产和生态环境建设等可持续发展的战略思想、理论和实用技术等。

《环境科学》在国内外公开发行,并在国内外科技界有较大影响,被国内外一些重要检索系统收录,如工程索引 Ei Compendex;医学索引 MEDLINE; Scopus; 化学文摘 CA;俄罗斯文摘杂志 AJ;美国生物学文摘预评 BP;美国医学索引 IM;日本科学技术情报中心数据库 JICST;英国动物学记录 ZR;剑桥科学文摘(CSA); Environmental Sciences;剑桥科学文摘(CSA); Pollution Abstracts;剑桥科学文摘(CAS); Life Sciences Abstracts 等;国内的检索系统有中国科技论文统计与引文数据库(CSTPCD);中文科技期刊数据库(维普);中国期刊全文数据库(CNKI);数字化期刊全文数据库(万方);中国科学引文数据库(CSCD);中国生物学文摘等。

全国各地邮局均可订阅,如有漏订的读者可直接与编辑部联系,办理补订手续。

国内统一连续出版物号:CN 11-1895/X

国际标准连续出版物号:ISSN 0250-3301

国外发行代号:M 205

国内邮发代号:2-821

编辑部地址:北京市海淀区双清路 18 号(2871 信箱) 邮编:100085

电话:010-62941102;传真:010-62849343;E-mail:hjcx@rcees.ac.cn;网址:www.hjcx.ac.cn

## CONTENTS

Advances and Challenges in Biosafety Research for Urban Environments .....	SU Jian-qiang, AN Xin-li, HU An-yi, <i>et al.</i>	(2565)
Key Problems and Novel Strategy of Controlling Emerging Trace Organic Contaminants During Municipal Wastewater Reclamation .....	WANG Wen-long, WU Qian-yuan, DU Ye, <i>et al.</i>	(2573)
Mechanisms Summary and Potential Analysis of EPS as a Flame Retardant .....	HAO Xiao-di, ZHAO Zi-cheng, LI Ji, <i>et al.</i>	(2583)
Concentrations, Sources, and Health Risks of PM <sub>2.5</sub> Carrier Metals in the Beijing Urban Area and Suburbs .....	ZHOU An-qi, LIU Jian-wei, ZHOU Xu, <i>et al.</i>	(2595)
MAIAC AOD and PM <sub>2.5</sub> Mass Concentrations Characteristics and Correlation Analysis in Beijing-Tianjin-Hebei and Surrounding Areas .....	JIN Jian-nan, YANG Xing-chuan, YAN Xing, <i>et al.</i>	(2604)
Formation and Prevention of Secondary Nitrate in PM <sub>2.5</sub> in Tianjin .....	XIAO Zhi-mei, WU Ting, WEI Yu-ting, <i>et al.</i>	(2616)
Pollution Characteristics and Risk Assessment of Nitro Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in PM <sub>2.5</sub> of Nanjing, China .....	FU Yin-yin, WEN Hao-zhe, WANG Xiang-hua, <i>et al.</i>	(2626)
Spatio-temporal Patterns and Potential Sources of Absorbing Aerosols in the Fenwei Plain .....	LIU Min-xia, LI Liang, YU Rui-xin, <i>et al.</i>	(2634)
Sources Apportionment of Oxygenated Volatile Organic Compounds (OVOCs) in a Typical Southwestern Region in China During Summer .....	CHEN Mu-lan, WANG Sai-nan, CHEN Tian-shu, <i>et al.</i>	(2648)
Aqueous-phase Oxidation of Dissolved Organic Matter (DOM) from Extracts of Ambient Aerosols .....	TAO Ye, CHEN Yan-tong, LI Nan-wang, <i>et al.</i>	(2659)
Changes and Potential Sources of Atmospheric Black Carbon Concentration in Shanghai over the Past 40 Years Based on MERRA-2 Reanalysis Data .....	CAO Shan-shan, DUAN Yu-sen, GAO Chan-chan, <i>et al.</i>	(2668)
Spatio-Temporal Evolution Characteristics and Source Apportionment of O <sub>3</sub> and NO <sub>2</sub> in Shijiazhuang .....	WANG Shuai, NIE Sai-sai, FENG Ya-ping, <i>et al.</i>	(2679)
Applying Photochemical Indicators to Analyze Ozone Sensitivity in Handan .....	NIU Yuan, CHENG Shui-yuan, OU Sheng-ju, <i>et al.</i>	(2691)
Spatiotemporal Distribution of Aerosol Optical Depth Based on Landsat Data in the Hinterland of the Guanzhong Basin and Its Relationship with Urbanization .....	ZHENG Yu-rong, WANG Xu-hong, ZHANG Xiu, <i>et al.</i>	(2699)
Multidimensional Verification of Anthropogenic VOCs Emissions Inventory Through Satellite Retrievals and Ground Observations .....	WANG Yue, WEI Wei, REN Yun-ting, <i>et al.</i>	(2713)
Estimation of the SOA Formation Potential of the National Trunk Highway in Central Plains Urban Agglomeration .....	WANG Na-ping, LI Hai-ping, ZHANG Fan	(2721)
Economic Benefit of Air Quality Improvement During Implementation of the Air Pollution Prevention and Control Action Plan in Beijing .....	LU Ya-ling, FAN Zhao-yang, JIANG Hong-qiang, <i>et al.</i>	(2730)
Emission Performance Quantitative Evaluation and Application of Industrial Air Pollution Sources .....	LI Ting-kun, FENG Yin-chang, WU Jian-hui, <i>et al.</i>	(2740)
Screening and Sequencing High-risk Antibiotics in China's Water Environment Based on Ecological Risks .....	ZHOU Li, LIU Shan, GUO Jia-hua, <i>et al.</i>	(2748)
China's Reuse Water Development and Utilization Potential Based on the RDA-REM Model .....	ZHENG Jin-tao, MA Tao, LIU Jiu-fu, <i>et al.</i>	(2758)
Characteristic Analysis of SWAT Model Parameter Values Based on Assessment of Model Research Quality .....	RONG Yi, QIN Cheng-xin, DU Peng-fei, <i>et al.</i>	(2769)
Sensitivity Analysis of Boundary Load Reduction in a Large Shallow Lake Water Quality Model .....	WANY Ya-ning, LI Yi-ping, CHENG Yue, <i>et al.</i>	(2778)
Comparison of Available Nitrogen and Phosphorus Characteristics in the Land-Water Transition Zone of Different Watersheds and Their Environmental Significance .....	ZHU Hai, YUAN Xu-yin, YE Hong-meng, <i>et al.</i>	(2787)
Analysis of Spatial-Temporal Variation Characteristics of Potential Non-point Source Pollution Risks in the Upper Beiyun River Basin Using Different Weighting Methods .....	LI Hua-lin, ZHANG Jian-jun, ZHANG Yao-fang, <i>et al.</i>	(2796)
Characteristics of Runoff-related Total Nitrogen and Phosphorus Losses Under Long-term Fertilization and Cultivation on Purple Soil Sloping Croplands .....	WU Xiao-yu, LI Tian-yang, HE Bing-hui	(2810)
Hydrochemistry and Its Controlling Factors and Water Quality Assessment of Shallow Groundwater in the Weihe and Jinghe River Catchments .....	LIU Xin, XIANG Wei, SI Bing-cheng	(2817)
Characteristics and Drivers of Dissolved Carbon Dioxide and Methane Concentrations in the Nantiaoxi River System in the Upper Reaches of the Taihu Lake Basin During Summer-Autumn .....	LIANG Jia-hui, TIAN Lin-lin, ZHOU Zhong-yu, <i>et al.</i>	(2826)
Nitrogen Distribution and Inorganic Nitrogen Diffusion Flux in a Shallow Lake During the Low Temperature Period: A Case Study of the Baiyangdian Lake .....	WEN Yan, SHAN Bao-qing, ZHANG Wen-qiang	(2839)
Effects of Sediment Microenvironment on Sedimentary Phosphorus Release Under Capping .....	CHEN Shu-tong, LI Da-peng, XU Chu-tian, <i>et al.</i>	(2848)
Coadsorption of Heavy Metal and Antibiotic onto Humic Acid from Polder River Sediment .....	XUE Xiang-dong, YANG Chen-hao, YU Jian-lin, <i>et al.</i>	(2856)
Effects of Two PPCPs on Nitrification in Sediments in the Yarlung Zangbo River .....	LING Xin, XU Hui-ping, LU Guang-hua	(2868)
Wastewater Treatment Effects of Ferric-carbon Micro-electrolysis and Zeolite in Constructed Wetlands .....	ZHAO Zhong-jing, HAO Qing-ju, ZHANG Yao-yu, <i>et al.</i>	(2875)
CDS-BOC Nanophotocatalyst Activating Persulfate Under Visible Light for the Efficient Degradation of Typical PPCPs .....	LEI Qian, XU Lu, AI Wei, <i>et al.</i>	(2885)
Preparation of pg-C <sub>3</sub> N <sub>4</sub> /BiOBr/Ag Composite and Photocatalytic Degradation of Sulfamethoxazole .....	YANG Li-wei, LIU Li-jun, XIA Xun-feng, <i>et al.</i>	(2896)
Sodium Alginate Loading of Zero-Valent Iron Sulfide for the Reduction of Cr(VI) in Water .....	WANG Xu, YANG Xin-nan, HUANG Bi-jian, <i>et al.</i>	(2908)
Adsorption Mechanism of Cadmium by Superparamagnetic Nano-Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> @SiO <sub>2</sub> Functionalized Materials .....	ZHANG Li-zhi, YI Ping, FANG Dan-dan, <i>et al.</i>	(2917)
Pollution Characteristics and Removal of Typical Pharmaceuticals in Hospital Wastewater and Municipal Wastewater Treatment Plants .....	YE Pu, YOU Wen-dan, YANG Bin, <i>et al.</i>	(2928)
Abundance Change of Antibiotic Resistance Genes During PDWW Recycling and Correlations with Environmental Factors .....	XU Yao-yao, WANG Rui, JIN Xin, <i>et al.</i>	(2937)
Simultaneous Domestication of Short-cut Nitrification Denitrifying Phosphorus Removal Granules .....	WANG Wen-qi, LI Dong, GAO Xin, <i>et al.</i>	(2946)
Long-term Storage and Rapid Activity Recovery of ANAMMOX Granular Sludge .....	LI Dong, LIU Ming-yang, ZHANG Jie, <i>et al.</i>	(2957)
Migration and Environmental Effects of Heavy Metals in the Pyrolysis of Municipal Sludge .....	JIANG Yuan-yuan, WANG Yan, DUAN Wen-yang, <i>et al.</i>	(2966)
Profiling of Antibiotic Resistance Genes in Different Croplands .....	HUANG Fu-yi, ZHOU Shu-yi-dan, WANG Jia-ni, <i>et al.</i>	(2975)
Distribution Characteristics of Antibiotics and Antibiotic Resistance Genes in Manure and Surrounding Soil of Cattle Farms in Ningxia .....	ZHANG Jun-hua, CHEN Rui-hua, LIU Ji-li, <i>et al.</i>	(2981)
Effects of Temperature and Stirring on the Changes of Antibiotic Resistance Genes and Microbial Communities in Anaerobic Digestion of Dairy Manure .....	XU Ji-fei, ZHANG Qiu-ping, ZHU Tian-jiao, <i>et al.</i>	(2992)
Effects of Wheat Straw-derived Biochar Application on Soil Carbon Content Under Different Tillage Practices .....	LIU Zhen-jie, LI Peng-fei, HUANG Shi-wei, <i>et al.</i>	(3000)
Spatial Patterns of Nitrogen and Phosphorus in Soil and Their Influencing Factors in a Typical Agro-pastoral Ecotone .....	ZHANG Yan-jiang, WANG Jun-peng, WANG Yu, <i>et al.</i>	(3010)
Spatial Distribution Characteristics, Pollution, and Ecological Risk Assessment of Soil Heavy Metals Around Mercury Mining Areas .....	WANG Rui, DENG Hai, JIA Zhong-min, <i>et al.</i>	(3018)
Interaction and Mechanism Between Conditioning Agents and Two Elements in the Soil Enriched with Phosphorus and Cadmium .....	HUANG Yang, HU Xue-yu, CAO Kun-kun, <i>et al.</i>	(3028)
Mechanism of S-allyl-L-cysteine Alleviating Cadmium Stress in Seedling Roots and Buds of Rice Seedlings .....	CHENG Liu-long, HUANG Yong-chun, WANG Chang-rong, <i>et al.</i>	(3037)
Consecutive 4-year Elevated Atmospheric CO <sub>2</sub> on Shaped Microbial Communities in the Rhizosphere Soil of <i>Robinia pseudoacacia</i> L. Seedlings Grown in Pb-contaminated Soils .....	JIA Xia, Lkhagvajargal Khadkhurel, ZHAO Yong-hua, <i>et al.</i>	(3046)
Biodegradation of Polystyrene by <i>Geobacillus stearothermophilus</i> .....	XING Rui-zhi, ZHAO Zi-qiang, ZHAO Wen-qi, <i>et al.</i>	(3056)
Micro-morphological Characteristics of Particles on Holly and Ligustrum Leaf Surfaces and Seasonal Changes in Bacterial Communities .....	LI Hui-juan, XU Ai-ling, QIAO Feng-lu, <i>et al.</i>	(3063)
Effects of Roxithromycin on Reproduction, Growth, and Anti-oxidation System of <i>Daphnia magna</i> .....	ZHANG Ling-yu, LIU Jian-chao, LENG Yang, <i>et al.</i>	(3074)
Relationship Between Relative Crop Yield/Woody Plant Biomass and Ground-level Ozone Pollution in China .....	FENG Zhao-zhong, PENG Jin-long	(3084)