DOI: 10.13671/j.hjkxxb.2025.0058
王昭桐,徐鑫,王刚, 等.2025.SCICHEM局地尺度$O_3$与$PM_{2.5}$溯源研究:以北京市大兴区为例[J].环境科学学报,45(5):61-70
WANG Zhaotong, XU Xin, WANG Gang, *et al*.2025.Localized source tracing of $O_3$ and $PM_{2.5}$ using SCICHEM model: A case study of Daxing District, Beijing[J].Acta Scientiae Circumstantiae,45(5):61-70

# SCICHEM局地尺度$O_3$与$PM_{2.5}$溯源研究:以北京市大兴区为例

王昭桐[1,2],徐鑫[1,2],王刚[3],伯鑫[1,2,*],张英磊[1,2,*]

1. 北京化工大学环境科学与工程系,北京 100029
2. 北京化工大学北化中国工业碳中和研究院,北京 100029
3. 三捷环境工程咨询(杭州)有限公司,杭州 310012

**摘要**:基于中国高分辨率碳与大气污染物排放数据库(CHRED3.0A),进一步分配了2023年北京市大兴区的排放清单,分辨率为2 km,并将其细分至318个网格.采用SCICHEM模型模拟大兴区各网格及网格内的交通源、工业源、农业源、生活源对区域内空气质量监测站点的影响,并开展$O_3$及$PM_{2.5}$溯源研究.结果表明,受人口分布及路网分布影响,交通源与生活源对$O_3$浓度贡献主要集中在大兴区北部及西北部,对$PM_{2.5}$浓度贡献主要集中在大兴区西部.而工业源对$O_3$和$PM_{2.5}$贡献为大兴区中部及北部地区,对$O_3$和$PM_{2.5}$贡献最大的19#、294#网格,均受工业源影响明显.整体来看,1月份大兴区$PM_{2.5}$与7月份$O_3$浓度在大兴区本地源各部门中显著受生活源和交通源影响.交通源与生活源在1月份与7月份平均贡献占比分别为51.05%和31.74%.相比之下,工业源和农业源对$PM_{2.5}$及$O_3$浓度的贡献处于较低水平.研究结果表明,在大兴区本地源污染治理中应重点关注生活源和交通源的排放控制.本研究为局地尺度下SCICHEM模型在$PM_{2.5}$与$O_3$快速溯源中提供了重要案例支持.

**关键词**:局地尺度;SCICHEM;$O_3$;$PM_{2.5}$;溯源

**文章编号**:0253-2468(2025)05-0061-10　　**中图分类号**:X51　　**文献标识码**:A

# Localized source tracing of $O_3$ and $PM_{2.5}$ using SCICHEM model: A case study of Daxing District, Beijing

WANG Zhaotong[1,2], XU Xin[1,2], WANG Gang[3], BO Xin[1,2,*], ZHANG Yinglei[1,2,*]

1. Department of Environmental Science and Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029
2. BUCT Institute for Carbon-neutrality of Chinese Industries, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029
3. Trinity Consultants Inc., Hangzhou 310012

**Abstract**: Based on the China High Resolution Emission Gridded Data (CHRED3.0A), this study further assigned the emission inventory of Daxing District (Beijing) in 2023 with 2 km resolution and subdivided it into 318 grids. The SCICHEM model was used to simulate the influence of sources of traffic, industrial, agricultural, and domestic emissions on air quality within each grid in Daxing District, and to conduct $O_3$ and $PM_{2.5}$ traceability studies. Owing to the population distribution and road network pattern, results indicated that the contribution of traffic and domestic sources to $O_3$ and $PM_{2.5}$ concentration were concentrated mostly in the north and northwest of Daxing District, whereas the contribution of industrial sources to $O_3$ ($PM_{2.5}$) is in the central and northern (western) areas of Daxing District. The 19# and 294# grids, which contributed most to $O_3$ and $PM_{2.5}$, were affected substantially by industrial sources. Overall, the concentrations of $PM_{2.5}$ in January and $O_3$ in July in Daxing District were affected strongly by domestic sources and traffic sources in all local source departments. The average contributions of traffic and domestic sources in January and July were 51.05% and 31.74%, respectively. In contrast, the contributions of industrial and agricultural sources to $PM_{2.5}$ and $O_3$ concentrations were comparatively low. The findings suggest that control of domestic and traffic emissions should receive greater attention in terms of local pollution control in Daxing District. The case study provides robust support for the use of SCICHEM model in rapid traceability of $PM_{2.5}$ and $O_3$ at the local scale.

**Keywords**: local scale; SCICHEM; $O_3$; $PM_{2.5}$; source tracing

**收稿日期**:2024-11-11　　**修回日期**:2025-02-18　　**录用日期**:2025-02-19
**基金项目**:国家自然科学基金(No.72174125);中央高校基本科研业务费资助项目(No.buctrc202133)
**作者简介**:王昭桐(2002—),男,E-mail:wangzt@buct.edu.cn; * **责任作者**,E-mail:boxin@buct.edu.cn;zhangyinglei@aircapital.cn

中国知网 https://www.cnki.net

## 1 引言(Introduction)

当前,利用空气质量模型开展$O_3$和$PM_{2.5}$溯源研究主要集中在区域或城市尺度,研究中常用的模型包括CMAQ(The Community Multiscale Air Quality Modeling System)、CAMx(Comprehensive Air Quality Model with Extensions)、RegAEMS(Regional Atmospheric Environment Modeling System)等区域尺度模型(蒋争明等, 2023; 刘颀娴等, 2023; 许亦非等, 2023).众多学者通过模型中的溯源功能模块,如CMAQ中的ISAM(Integrated Source Apportionment)模块(王伊凡等, 2023)、RegAEMS中的APSA(Air Pollution Source Apportionment)模块(王德羿, 2020)、CAMx中的OSAT(Ozone Source Apportionment)模块(Chen *et al.*, 2024)等,实现对京津冀、榆林市、大湾区、北京市等地区$PM_{2.5}$或$O_3$污染的来源解析.然而,区域尺度模型通常需要占用大量计算资源,且在局地尺度下的模拟精度有限.

在局地尺度下应用较为广泛的空气质量模型如CALPUFF、AERMOD等,由于受到化学反应机制的限制,其简单的"线性"化学反应机制无法模拟$O_3$等二次污染物生成及传输过程中涉及复杂的非线性关系(王昭桐等, 2024).因此,目前缺乏局地尺度模型的$O_3$溯源研究,而在局地尺度下的$PM_{2.5}$溯源研究也应进一步探讨.

相比之下,在EPRI(The Electric Power Research Institute,https://www.epri.com)公司资助下于1999年开发的SCICHEM(SCIPUFF with chemistry)模型,是基于二阶闭合集成烟团(SCIPUFF, Second-order Closure Integrated PUFF)扩散模型的拉格朗日光化学扩散模式,使用高斯烟团来表示三维的、随时间变化的浓度场,同时考虑了光化学反应,能够模拟局地尺度和城市尺度的$O_3$和二次$PM_{2.5}$的生成和扩散过程(Karamchandani *et al.*, 2002; EPRI, 2021 ).此外, SCICHEM支持点源、面源、线源等多种输入格式, 相较于区域尺度模型仅适用于网格源的局限性.SCICHEM能够更精确地描述近源$O_3$和二次$PM_{2.5}$的扩散和传输过程.例如,Karamchandani等(2020)对比了SCICHEM与CMAQ、CAMx模拟$O_3$的不同,结果表明SCICHEM能够更好地反映出排放源周围NO滴定作用.同时,SCICHEM采用自适应地表网格技术,可根据计算需要动态调整网格分辨率,具有较高的模拟效率(EPRI, 2021).

SCIPUFF作为SCICHEM模型的核心模块,广泛应用于溯源研究.Allen等(2007)将SCIPUFF模型与遗传算法相结合,通过计算各污染源的排放因子并利用实测数据进行验证,从而有效地实现污染源的溯源.Leone等(2016)利用SCIPUFF模型量化了2015年卡塞塔地区两个水泥厂排放对监测站点$PM_{10}$的全年贡献浓度,模拟结果显示$PM_{10}$模拟值与实测值具有良好的一致性,水泥厂为该地区$PM_{10}$污染的主要来源.研究为SCICHEM模型开展溯源分析提供理论支持.然而,目前SCICHEM主要应用于模型对比、性能评估及企业模拟等(Karamchandani *et al.*, 2020 , 刘孟雄等, 2022),利用SCICHEM模型用于$O_3$和$PM_{2.5}$溯源分析的研究仍较少.

针对上述问题,本研究以北京市大兴区为例,建立了基于SCICHEM的局地尺度下$O_3$与$PM_{2.5}$污染溯源模型.通过结合人口、土地利用、路网数据,进一步分配CHRED3.0A(China High Resolution Emission Gridded Data 3.0A)清单得到2023年北京市大兴区污染物排放清单(分辨率:2 km).通过SCICHEM对分配网格多次模拟实现针对北京市大兴区本地源的$O_3$与$PM_{2.5}$污染的快速溯源分析,研究结果可为局地尺度下$O_3$、$PM_{2.5}$溯源研究提供案例支持.

## 2 研究方法(Research methods)

### 2.1 研究区域

研究区域为北京市大兴区,位于北京市南部,地处京津冀地区的重要交汇点,辖区内包含2个空气质量监测站—大兴黄村站与大兴旧宫站(图1).北京市大兴区因大兴生物医药基地、亦庄经济技术开发区、北京大兴国际机场等项目的建设,经济迅速发展,成为北京市经济技术创新的重要区域.《北京市生态环境状况公报》显示,2023年北京市大兴区空气质量相对其他区较差,$PM_{2.5}$年均浓度为36 μg·m$^{-3}$,$O_3$日最大8 h滑动平均第90百分位浓度值为175 μg·m$^{-3}$.

中国知网 https://www.cnki.net

### 2.2　SCICHEM 模型输入数据及参数

本研究模拟范围为北京市大兴区,面积为 60 km×50 km.研究时段为 2023 年 1 月、7 月 .SCICHEM 采用自适应地表网格技术,模型根据需要动态调整水平网格的分辨率,模型垂直分辨率设置 250 m,背景浓度数据来自 CMAQ 模型,经 CTM2SCICHEM 工具将 CMAQ 输出转化为 SCICHEM 模型可识别背景浓度数据格式 . 在化学机制方面, SCICHEM 气相化学机制采用 CB6r2 机制,气溶胶模块包括 ISORROPIA II 无机热力学模块(Fountoukis *et al.*, 2007)、二次有机气溶胶(SOA)模块(Carlton *et al.*, 2010)、云化学模块(Carlton *et al.*, 2008)等.

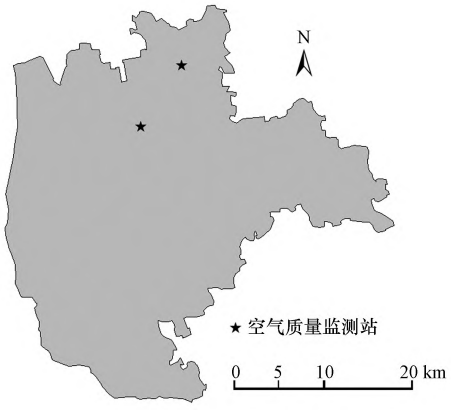



**图 1　北京市大兴区空气质量监测站示意图**

Fig.1　Schematic diagram of air quality monitoring stations in Daxing District, Beijing

气象数据输入北京市大兴区地面气象站数据及高空模拟气象数据.地面气象数据来自中国气象局提供的 2023 年北京市大兴区气象站逐日逐小时数据(站号 54594, 39.72°N,116.35°E),地面观测资料包括风向、风速、温度等. 2023 年 1 月、7 月北京市大兴区风速风向情况如图 2 所示,1 月风向以北风为主导,7 月风向以东北风、南风为主导 .1 月份静稳频率为 28%,7 月份静稳频率为 9%.

2023 年 1 和 7 月份北京市大兴区高空模拟气象数据来自 WRF(Weather Research and Forecasting)模式模拟结果,通过 MMIF(Meteorology-Chemistry Interface Processor)工具进行转化 . 数据包括每日早 8:00 和晚 8:00 不同等压面上的气压、离地高度、干球温度、风向及风速,其中垂直方向分为 21 层,离地高度从 0~1919 m.

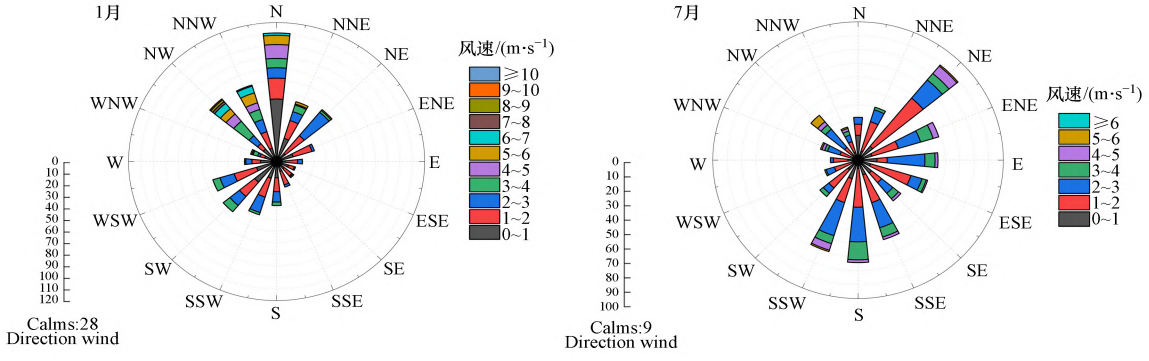



**图 2　2023 年北京市大兴区 1 月、7 月风玫瑰图**

Fig.2　Wind rose diagrams for January and July 2023 in Daxing District, Beijing

**2.2.1　背景浓度数据**　由于常规环境测量无法提供完整的区域反应性污染物和氧化剂的时间和空间变化(Agency, 2017),本研究利用光化学网格模型 CMAQ 提供的研究区域的三维污染物浓度场作为 SCICHEM 模型的背景浓度.

本研究选用 CMAQ 5.0.2 版本,该版本成熟且广泛应用,并在不同场景和条件下得到了充分证明(Zheng *et al.*, 2019;Luo *et al.*, 2023; Wang *et al.*, 2023).CMAQ v5.0.2 采用 CB05 气象化学反应机理和 AER06 气溶胶化学模块;水平平流采用 Yamo 方案计算;垂直对流采用分段抛物法(Piecewise Parabolic Method, PPM)计算;垂直扩散采用非对称对流模型(Asymmetric Convective Model version 2, ACM2)计算;并考虑了干沉降和湿沉降过程 .WRF 模式提供 CMAQ 气象输入,采用两层嵌套的方式进行运算,网格设置采用兰伯特投影,中心经纬度为 102°E、37°N.WRF 模型采用了 RRTM(Rapid Radiative Transfer Model)方案为长波辐射方案;Dudhia 方案为短波辐射方案;YSU(Yonsei University)方案为边界层物理方案;Monin-Obukhov 方案为地表物理方案;WSM 3-class simple ice scheme 用于微物理过程.

中国知网　https://www.cnki.net

CMAQ各层网格在WRF网格的基础上，水平方向4个边界分别减少3个网格，以减小边界的影响.CMAQ网格水平分辨率分别为：第一层覆盖全国范围，分辨率为27 km×27 km，网格数为182×155；第二层覆盖京津冀地区，分辨率为9 km×9 km，网格数为66×93.在垂直方向上分层为38层，分别是1.00、0.995、0.99、0.985、0.98、0.975、0.97、0.965、0.96、0.955、0.95、0.945、0.94、0.93、0.92、0.91、0.90、0.88、0.85、0.82、0.79、0.76、0.73、0.69、0.65、0.60、0.55、0.50、0.45、0.40、0.35、0.30、0.25、0.20、0.15、0.10、0.05、0.00.

为降低初始条件和边界条件对模拟结果的影响，模拟时间提前了3 d，本研究分别模拟2022年12月28日—2023年2月2日、2023年6月27日—2023年8月2日作为2023年1、7月份北京市大兴区背景浓度.CMAQ模式运行第一层嵌套时，采用模式自带的清洁大气垂直廓线作为初始浓度和边值条件，运行第二层嵌套时采用第一层的输出结果作为初始浓度和边界场.清单采用清华大学开发的中国多尺度排放清单(Multi-resolution Emission Inventory for China)，空间分辨率为0.25°×0.25°.

**2.2.2 清单分配** 北京市大兴区排放清单数据基于本研究团队中国高分辨率碳与大气污染物排放数据(CHRED3.0A)(Gao *et al.*, 2022)，污染因子包括CO、$NO_x$、$SO_2$、$PM_{2.5}$、$PM_{10}$、VOCs和$NH_3$等.通过人口数据、路网数据、土地利用类型数据对CHRED3.0A清单在北京市大兴区进行空间分配，将分辨率从10 km提升至2 km，总计318个网格(图3).其中人口数据来自美国能源部橡树岭国家实验室开发的1 km×1 km高分辨率人口数据库(Landscan全球人口空间数据，https://landscan.ornl.gov)，路网数据来自OSMstreet(https://www.openstreetmap.org)，土地利用来自中国科学院资源环境科学与数据平台(https://www.resdc.cn).

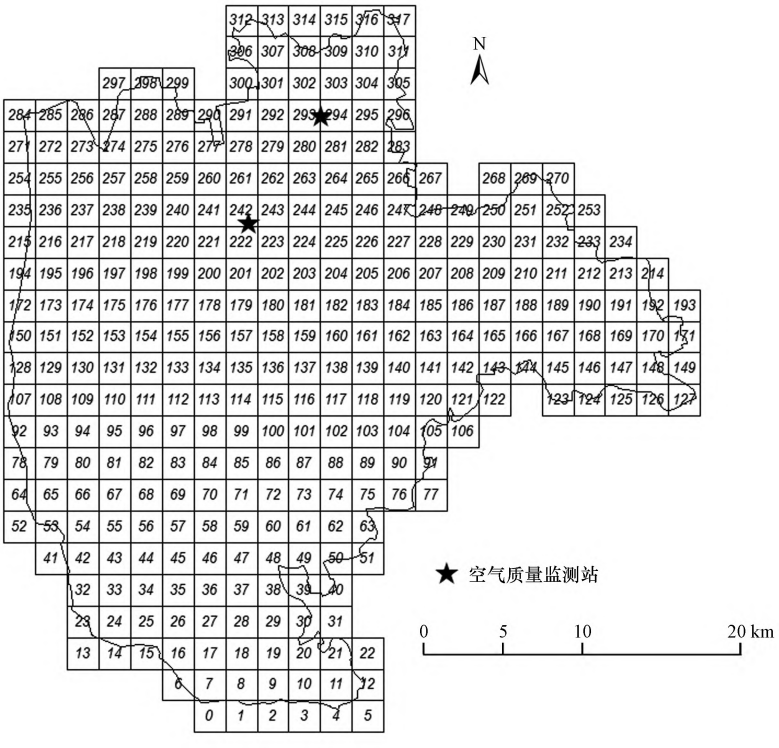



**图3 北京市大兴区清单分配网格**

Fig.3 Emission inventory allocation grid for Daxing District, Beijing

### 2.3 模型模拟评估

本研究参考国内外文献的评估方法(朱玉祥等, 2016; 史梦雪等, 2020;陈雷等, 2021)，利用统计学方法计算北京市大兴区污染物排放对空气质量监测站$O_3$及$PM_{2.5}$模拟值与实际监测值的相关系数，以验证模型的模拟效果.相关性$r$的计算公式见式(1).

$$r = \frac{\sum_{i=1}^{n}(O_i - \bar{O})(M_i - \bar{M})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(O_i - \bar{O})^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(M_i - \bar{M})^2}} \quad (1)$$

中国知网 https://www.cnki.net

式中,$O_i$ 和 $M_i$ 空气质量监测站点实际监测值,$\bar{O}$ 和 $\bar{M}$ 为模型计算模拟均值与观测均值;$n$ 为参与评估的总样本数量.

## 3　结果与讨论(Results and discussion)

### 3.1　北京市大兴区污染物排放情况

2023 年北京市大兴区污染物排放源结构图与空间特征如图 4~5 所示.大兴区 CO、$NO_x$、$SO_2$、VOCs、$PM_{2.5}$、$PM_{10}$ 和 $NH_3$ 年排放量分别为 $6.43\times10^4$、$0.97\times10^4$、$0.63\times10^4$、$1.84\times10^4$、$0.21\times10^4$、$0.35\times10^4$、$0.29\times10^4$ t.由图 4 可知,CO、$SO_2$、$PM_{2.5}$、$PM_{10}$ 排放受生活源影响显著,分别占各污染物排放总量的 77.56%、97.49%、88.84%、92.99%.由于生活源排放受到人口分布影响,大兴区人口密度分布较高地区主要为大兴区北部及西北部地区,因此 CO、$SO_2$、$PM_{2.5}$、$PM_{10}$ 污染物排放量较大的地区主要分布在大兴区北部及西北部(图 5).$NO_x$ 排放主要受交通源影响,占比为 64.19%.大兴区道路分布密集区域与人口分布较为相似,$NO_x$ 排放量较大地区分布与 CO、$SO_2$、$PM_{2.5}$、$PM_{10}$ 排放量较大地区一致.VOCs 排放主要来自工业源,占比分别为 60.22%,其中,VOCs 排放量较大的地区集中在大兴经济开发区周边及中部地区.$NH_3$ 排放主要来自农业源,占比 81.80%.

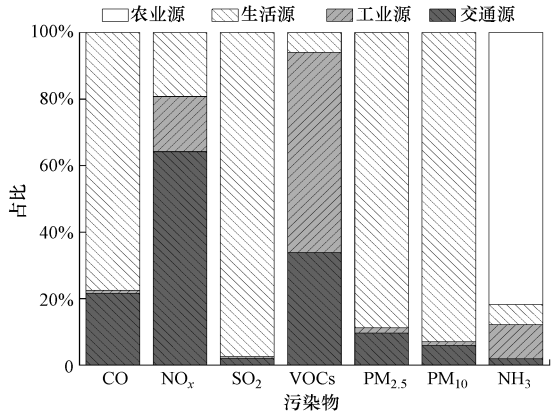



**图 4　北京市大兴区污染物排放源结构图**

Fig.4　Structure diagram of pollutant emission source in Daxing District, Beijing

### 3.2　大兴区排放贡献模拟研究

**3.2.1　SCICHEM 模拟效果评估**　模型模拟值与实际监测值相关性受到多种因素影响,本研究主要考虑本地源对大兴区空气质量监测站 $PM_{2.5}$ 及 $O_3$ 的影响,并选取空气质量站(大兴黄村站与大兴旧宫站)2023 年 1 月份日均 $PM_{2.5}$ 模拟均值与实测均值、7 月份 MDA8$O_3$ 模拟均值与实测均值进行验证分析,以评估 SCICHEM 模型对 $PM_{2.5}$ 及 $O_3$ 模拟性能,相关性结果表明 $PM_{2.5}$ 模拟与实测相关性为 0.49,$O_3$ 模拟值与实测相关性为 0.55.

**3.2.2　重点网格贡献分析**　北京市冬季 $PM_{2.5}$ 污染程度突出(徐楠等,2021),而夏季受 $O_3$ 污染影响明显(王佳颖, 2019).本研究重点分析北京市大兴区本地源对空气质量监测站的 1 月 $PM_{2.5}$ 与 7 月 $O_3$ 污染贡献及各网格与网格各部门模拟值之间的相对比例.结果显示,1 月各网格对空气质量监测站 $PM_{2.5}$ 平均浓度贡献前 15 网格贡献占比总和为 11.79%,7 月各网格对大兴区空气质量监测站 $O_3$ 平均浓度贡献前 15 网格贡献占比总和为 34.76%,因此,本研究重点开展北京市大兴区空气质量监测站贡献排前 15 网格贡献分析.

**表 1　重点网格 1 月份、7 月份 $PM_{2.5}$、$O_3$ 贡献占比**

Table 1　$PM_{2.5}$ and $O_3$ contribution ratios for key grids in January and July

| 序号 | 1 月 | | 7 月 | |
|---|---|---|---|---|
| | 网格编号 | $PM_{2.5}$ 贡献占比 | 网格编号 | $O_3$ 贡献占比 |
| 1 | 19# | 1.06 | 294# | 10.62 |
| 2 | 11# | 0.88 | 179# | 5.83 |
| 3 | 43# | 0.84 | 302# | 1.97 |
| 4 | 150# | 0.82 | 293# | 1.90 |
| 5 | 30# | 0.81 | 292# | 1.78 |
| 6 | 156# | 0.80 | 280# | 1.78 |
| 7 | 38# | 0.80 | 279# | 1.77 |
| 8 | 255# | 0.77 | 301# | 1.28 |
| 9 | 285# | 0.77 | 243# | 1.23 |
| 10 | 9# | 0.74 | 222# | 1.13 |
| 11 | 287# | 0.74 | 303# | 1.12 |
| 12 | 179# | 0.74 | 308# | 1.11 |
| 13 | 14# | 0.73 | 307# | 1.09 |
| 14 | 46# | 0.72 | 244# | 1.09 |
| 15 | 196# | 0.71 | 304# | 1.05 |

1 月 $PM_{2.5}$ 与 7 月 $O_3$ 重点网格溯源结果如表 1 所示.1 月对空气质量监测站 $PM_{2.5}$ 浓度贡献较大的网格分布在大兴区周边区域.其中 19# 网格污染物排放对空气质量监测站 $PM_{2.5}$ 浓度贡献值占比最高,为 1.06%.11# 网格污染物排放为空气质量监测站 $PM_{2.5}$ 浓度第二贡献来源,占比 0.88%.

7 月对空气质量监测站 $O_3$ 浓度贡献较大的网格分布在大兴区北部及西北部.受大兴区产业布局及网格与空气质量监测站距离共同影响,对空气质量监测站 $O_3$ 浓度贡献较大区域集中在大兴区经济开发区周边.294# 网格污染物排放对空气质量监测

中国知网　https://www.cnki.net

站$O_3$浓度贡献值占比最高，为10.62%. 179#网格污染物排放为空气质量监测站$O_3$浓度第二贡献来源，占比0.87%. 179#网格与294#网格分别为VOCs及$NO_x$排放量第一和第二大网格，294#网格距监测站最近为0.97 km，而179#网格距监测站距离最近为5.10 km，但由于179#网格VOCs及$NO_x$排放量大，其对$O_3$浓度贡献仍然显著.因此，$O_3$前体物的排放量及与监测站的距离是决定网格对监测站$O_3$浓度贡献的关键因素.

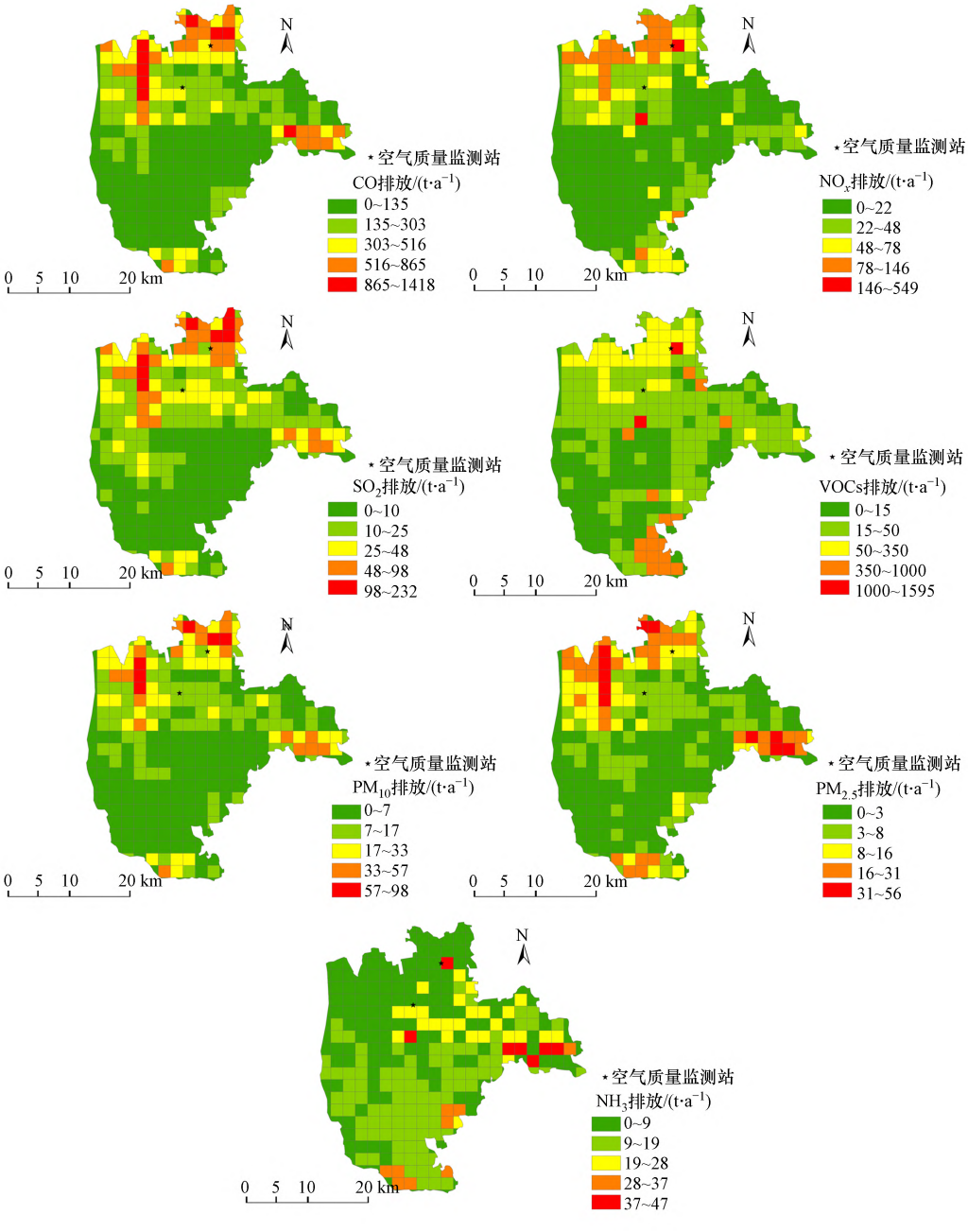



**图5 2023年北京市大兴区污染物排放量空间分布情况**

Fig.5 Spatial distribution of pollutant emissions in Daxing District, Beijing, in 2023

### 3.3 重点排放源溯源分析

图6为1月北京市大兴区空气质量监测站$PM_{2.5}$溯源结果.从图6可知，北京市大兴区空气质量监测站$PM_{2.5}$浓度部门来源贡献由高到低依次为交通源>生活源>农业源>工业源，贡献占比分别48.72%、42.87%、5.85%和3.94%.交通源排放作为$PM_{2.5}$贡献的第一大来源，其显著影响可能源于交通源在一次$PM_{2.5}$来源占比

中国知网 https://www.cnki.net

和二次反应生成$PM_{2.5}$中发挥的重要作用(安欣欣等, 2022; 景宽等, 2024).生活源为空气质量监测站$PM_{2.5}$浓度的第二大来源,表明本地居民生活排放对$PM_{2.5}$具有较大影响.农业源对$PM_{2.5}$浓度贡献处于较低水平.工业源对$PM_{2.5}$浓度贡献占比最小,侧面反映出北京市燃煤清洁能源改造和"散乱污"企业整改措施效果显著(Li *et al.*, 2021 , 安欣欣等, 2022).

图7为1月北京市大兴区空气质量监测站$PM_{2.5}$浓度贡献前15网格中各部门比例.结果表明,交通源为多数网格的主要贡献部门,如150#、38#、255#等网格,交通源占比在34.31%~66.95%之间,表明交通源在$PM_{2.5}$浓度贡献中占主导作用.工业源在19#、11#、30#、156#网格对$PM_{2.5}$浓度贡献的第一大来源,工业源占比在36.28%~43.79%之间.其中19#、11#网格分别为监测站$PM_{2.5}$浓度贡献的第一大和第二大网格,这可能与该网格内工业企业的集中分布有关.生活源在43#、14#和46#网格对$PM_{2.5}$浓度贡献的第一大来源,占比分别为35.37%、35.87%.此外,在所有网格中农业源对$PM_{2.5}$浓度贡献均为最低,表明农业源对$PM_{2.5}$浓度影响有限.

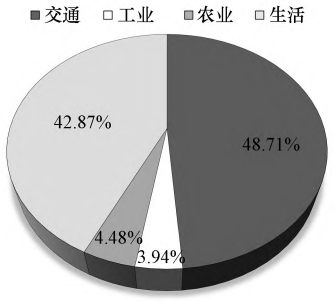



**图6　2023年1月大兴区空气质量监测站$PM_{2.5}$溯源结果**

Fig.6　Source apportionment results of $PM_{2.5}$ at national control points in Daxing District in January 2023

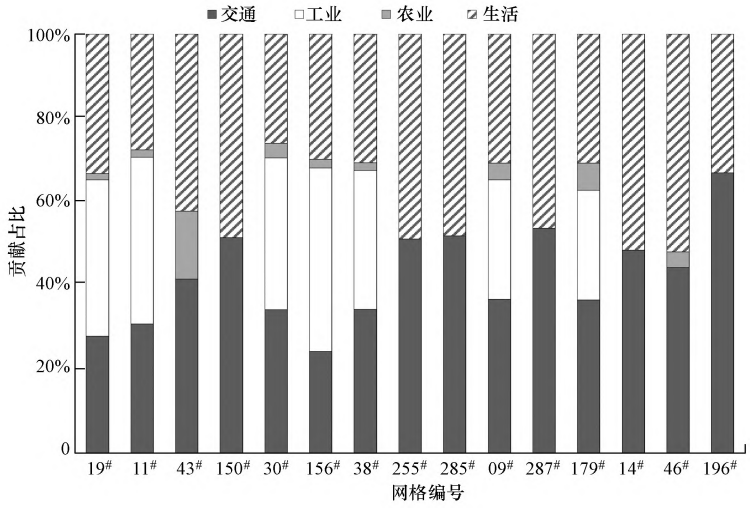



**图7　2023年1月大兴区$PM_{2.5}$浓度贡献前15网格各部门比例**

Fig.7　Proportions of various industries contributing to the $PM_{2.5}$ concentration from the top 15 grids in Daxing District in January 2023

2023年1月,北京市大兴区各部门排放对大兴区空气质量监测站点$PM_{2.5}$浓度的贡献比例情况如图8所示.不同部门对$PM_{2.5}$浓度贡献比例分布不同,生活源、交通源排放对$PM_{2.5}$浓度贡献高值区分布在大兴区西部.农业源对$PM_{2.5}$浓度贡献主要为大兴区东南部,反映了农业活动对$PM_{2.5}$污染的局部影响.工业源对$PM_{2.5}$浓度贡献出现以19#、11#和156#网格为中心的高值区分布特征,可能与网格内工业企业的集中分布及工业生产活动频繁相关,表明了工业源的集中排放对局部区域$PM_{2.5}$浓度具有重要影响.

图9为2023年7月份北京市大兴区空气质量监测站$O_3$溯源结果.北京市大兴区本地源中交通源为$O_3$的第一大来源,对$O_3$的贡献占比为53.37%,其次为生活源与工业源,贡献占比分别为20.61%和12.44%,农业源占比最小,为1.89%.

图10为7月对空气质量监测站贡献排名前15网格中不同部门对空气质量监测站$O_3$浓度贡献比例.除294#和179#网格外,其余网格对空气质量监测站$O_3$浓度贡献主要受到交通源影响,交通源占比介于38.43%~85.94%之间.而294#、179#分别为$O_3$浓度贡献的第一大和第二大来源,其受工业源影响显著,分别占89.19%、91.83%.所有网格中农业源对空气质量监测站$O_3$浓度贡献均为最低.

中国知网　https://www.cnki.net

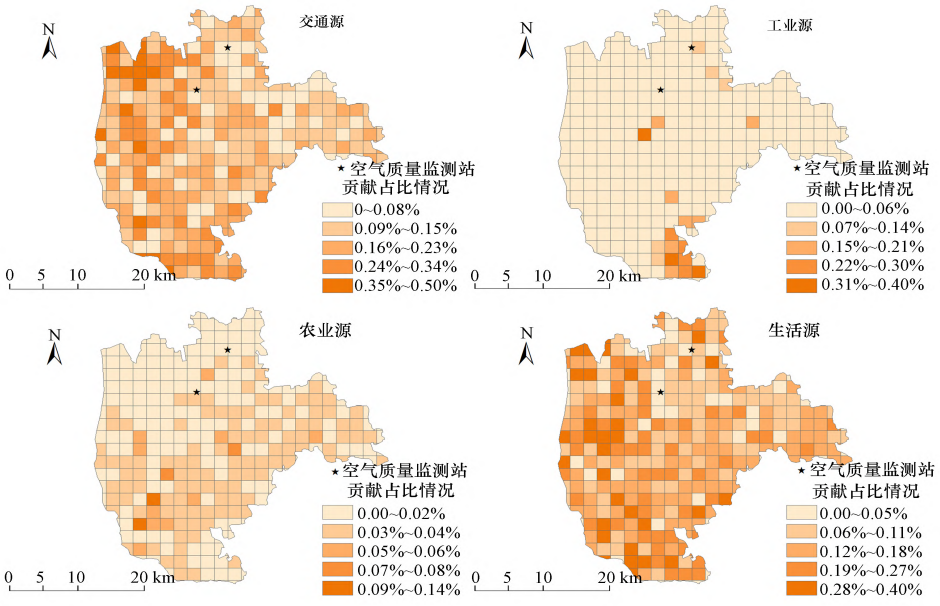



**图8 2023年1月份北京市大兴区交通源、工业源、农业源、生活源排放对$PM_{2.5}$浓度贡献比例空间分布情况**

Fig.8 Spatial distribution of the contribution ratio of emissions from transportation, industry, agriculture, and domestic sources to $PM_{2.5}$ concentration in Daxing District, Beijing in January 2023

2023年7月,北京市大兴区不同部门排放对大兴区空气质量监测站点的$O_3$贡献比例情况如图11所示.不同部门的$O_3$贡献分布存在差异,生活源和交通源的$O_3$浓度贡献高值区主要位于大兴区西北部及北部,这一分布特征与该区域经济开发区及密集的路网布局相关.农业源对$O_3$贡献高值区主要分布在大兴区北部及西北部以外的区域,凸显了不同区域污染源贡献的差异性,可能与农业用地分布相关.工业源贡献高值区主要集中在大兴区工业企业分布密集的中部及北部区域,从工业源污染物分配

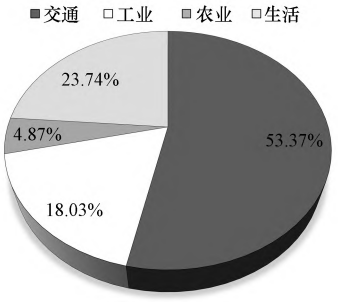



**图9 2023年7月大兴区空气质量监测站$O_3$溯源结果**

Fig.9 Source apportionment results of $O_3$ at air quality monitoring stations in Daxing District in July 2023

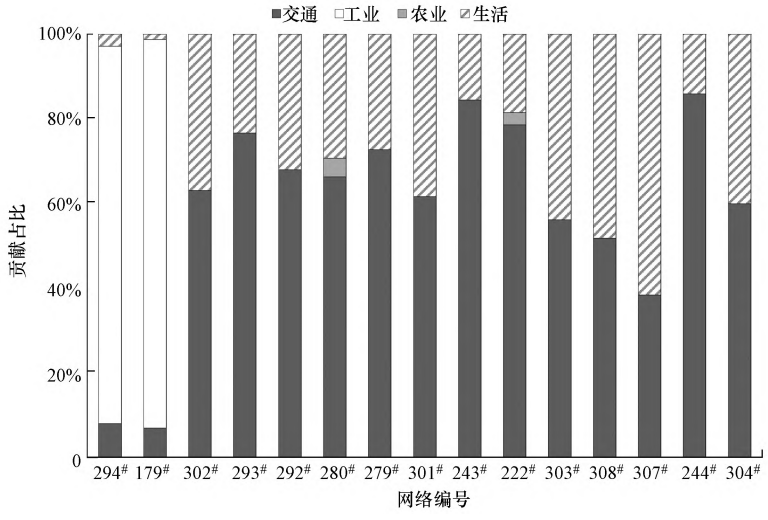



**图10 2023年7月大兴区对空气质量监测站$O_3$浓度贡献前15网格各部门贡献比例**

Fig.10 Contribution ratios of different sectors in the top 15 grids to $O_3$ concentrations at air quality monitoring stations in Daxing District, July 2023

中国知网 https://www.cnki.net

清单结果情况来看,该区域以 294#和 179#网格为中心,而 294#和 179#网格臭氧前体物 $NO_x$ 和 VOCs 排放量位居工业源总排放的前两位,对 $O_3$ 生成影响显著.

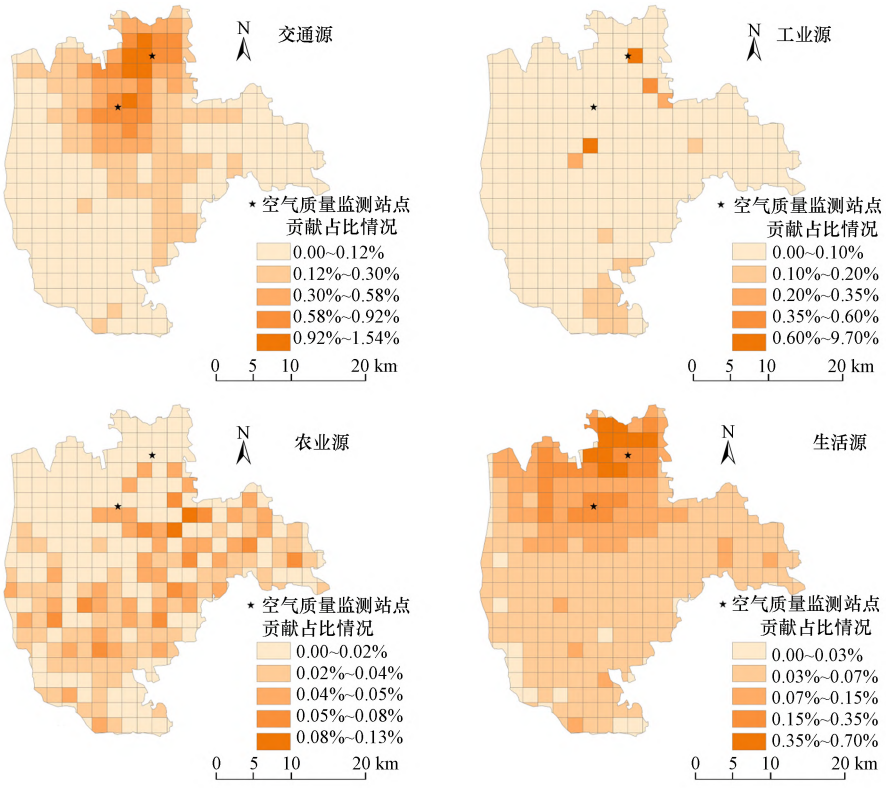



**图 11　2023 年 7 月份北京市大兴区交通、工业、农业、生活源排放对 $O_3$ 浓度贡献比例空间分布情况**

Fig.11　Spatial distribution of the contribution ratio of emissions from transportation, industry, agriculture, and domestic sources to $O_3$ concentration in Daxing District, Beijing in July 2023

### 3.4　不确定性分析

本研究存在几个不确定因素:①排放清单在分配过程中受到了人口数据、土地利用数据、路网数据精度影响,导致分配后清单的准确性(王君驰, 2022),进而增加了模型的不确定性.②数值模型不确定性,SCICHEM 需要输入 CMAQ 所模拟的三维浓度场作为背景浓度场,而 CMAQ 模型受到源清单、分辨率、气象场、化学机制等多种因素影响(Gao *et al.*, 2024).③本研究主要针对本地源对 $O_3$ 及 $PM_{2.5}$ 浓度的贡献影响,模型在计算过程中主要基于本地清单,尚未充分考虑区域传输影响,从而增加了模型的不确定性.

## 4　结论(Conclusions)

1)本研究基于 CHRED3.0A 清单分配的北京市大兴区清单,利用 SCICHEM 模型模拟大兴区污染排放影响.模拟验证结果显示,2023 年 1 月份模拟日均 $PM_{2.5}$ 浓度、7 月份 MDA8$O_3$ 浓度与实测值浓度的相关性分别为 0.49、0.55.

2)受人口分布、路网密度等影响,生活源及交通源对大兴区 $PM_{2.5}$、$O_3$ 浓度贡献高值区均出现在北部及西北部,而工业源对大兴区 $PM_{2.5}$、$O_3$ 浓度高值区出现在工业活动频繁区域周边.农业源对大兴区 $PM_{2.5}$、$O_3$ 浓度贡献均处于较低水平.

3)重点网格溯源结果显示,重点网格受交通源和生活源影响明显.尽管整体工业源对 $PM_{2.5}$、$O_3$ 浓度贡献处于较低水平,但 $PM_{2.5}$、$O_3$ 浓度贡献最大的 19#、294#网格受工业源影响较大,可能是与工业区集中分布区域相关.

4)对北京市大兴区本地源中各部门对 $PM_{2.5}$ 和 $O_3$ 浓度的贡献分析显示,交通源和生活源为主要贡献来

中国知网　https://www.cnki.net

源.1月份,交通源对$PM_{2.5}$浓度占比最高,为48.72%,其次为生活源,占比42.87%.7月份,交通源$O_3$浓度贡献最大,占比53.37%,生活源位居第二,占比20.61%.整体来看,工业源及农业源对$PM_{2.5}$及$O_3$浓度贡献有限.

**参考文献(References):**


Agency, USEP. 2017. Guidance on the Use of Models for Assessing the Impacts of Emissions from Single Sources on the Secondarily Formed Pollutants: Ozone and $PM_{2.5}$[R]. Research Triangle Park, NC: U.S: Environmental Protection Agency, Office of Air Quality Planning and Standards, Air Quality Assessment Division

Allen C T, Haupt S E, Young G S. 2007. Source characterization with a genetic algorithm-coupled dispersion-backward model incorporating SCIPUFF [J]. Journal of Applied Meteorology and Climatology, 46(3):273-287

安欣欣, 曹阳, 王琴, 等. 2022. 北京城区$PM_{2.5}$各组分污染特征及来源分析 [J]. 环境科学, 43(5): 2251-2261

Carlton A G, Bhave P V, Napelenok S L, *et al*. 2010. Model representation of secondary organic aerosol in CMAQv4.7 [J]. Environmental Science and Technology, 44(22):8553-8560

Carlton A G, Turpin B J, Altieri K E, *et al*. 2008. CMAQ model performance enhanced when in-cloud secondary organic aerosol is included: Comparisons of organic carbon predictions with measurements [J]. Environmental Science and Technology, 42(23):8798-8802

Chen Y, Lu X C, Fung J C H. 2024. Spatiotemporal source apportionment of ozone pollution over the Greater Bay Area [J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 24(15):8847-8864

陈雷, 王鹏, 伯鑫, 等. 2021. 新冠期间河北省典型钢铁企业大气污染影响 [J]. 中国环境科学, 41(8): 3927-3933

EPRI. 2021. SCICHEM Version 3.3: Technical Documentation. [R]. Palo Alto, CA

Fountoukis C, Nenes A. 2007. ISORROPIA II: A computationally efficient thermodynamic equilibrium model for $K^+$-$Ca^{2+}$-$Mg^{2+}$-$Nh^{4+}$-$Na^+$-$SO_4^{2-}$-$NO_3^-$-$C^l$-$H_2O$ aerosols [J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 7(17): 4639-59

Gao Y, Zhang L, Huang A S, *et al*. 2022. Unveiling the spatial and sectoral characteristics of a high-resolution emission inventory of $CO_2$ and air pollutants in China [J]. Science of the Total Environment, 847:10

Gao Z Q, Zhou X H. 2024. A review of the CAMx, CMAQ, WRF-Chem and NAQPMS models: Application, evaluation and uncertainty factors [J]. Environmental Pollution, 343: 14

蒋争明, 高缨红, 赵志远, 等. 2023. 中山市臭氧污染来源解析与敏感性分析[J]. 环境监控与预警, 15(5): 112-120

景宽, 王友峰, 刘保献, 等. 北京城区大气$PM_{2.5}$组分特征与典型污染过程分析[J]. 环境科学, 1-19 DOI:10.13227/j.hjkx.202403254

Karamchandani P, Seigneur C, Vijayaraghavan K, *et al*. 2002. Development and application of a state-of-the-science plume-in-grid model [J]. Journal of Geophysical Research-Atmospheres, 107:13

Karamchandani P, Vennam P, Shah T, *et al*. 2020. Single source impacts on secondary pollutants using a Lagrangian reactive puff model: Comparison with photochemical grid models [J]. Atmospheric Environment, 237:19

Leone, V, Cervone, G, Iovino P. 2016. Impact assessment of $PM_{10}$ cement plants emissions on urban air quality using the SCIPUFF dispersion model [J]. Environmental Monitoring and Assessment, 188(9):12

Li J Y, Gao W K, Cao L M, *et al*. 2021. Significant changes in autumn and winter aerosol composition and sources in Beijing from 2012 to 2018: Effects of clean air actions [J]. Environmental Pollution, 268(10): 115855

Luo Z W, Han Y, Hua K, *et al*. 2023. The effect of emission source chemical profiles on simulated $PM_{2.5}$ components: sensitivity analysis with the Community Multiscale Air Quality (CMAQ) modeling system version 5.0.2 [J]. Geoscientific Model Development, 16(22):6757-6771

刘孟雄, 王春迎, 谢志辉, 等. 2022. SCICHEM模型对单污染源生成的二次污染物的模拟研究:与光化学网格模型CAMx的比较. [C]//第二十六届大气污染防治技术研讨会论文集,中国浙江杭州: 中国环境科学学会, F, 2022

刘颀娴, 刘彬, 张壹, 等. 2023. 唐山市$PM_{2.5}$和$O_3$行业来源解析 [J]. 大气科学学报, 46(5):679-693

史梦雪, 伯鑫, 田飞, 等. 2020. 基于不同空气质量模型的二噁英沉降效果研究[J]. 中国环境科学, 40(1): 24-30

Wang Y F, Tong J L, Chen Y X, *et al*. 2023. Analysis of $O_3$ sources in Yulin City in summer based on WRF-CMAQ/ISAM Model [J]. Huan jing ke xue, 44(7):3676-3684

王德羿. 2020. 京津冀及周边地区"2+26"城市大气复合污染来源解析研究[D]. 江苏:南京大学

王佳颖. 2019. 北京市臭氧污染的特征、来源及形成机制分析[D]. 湖北:武汉大学

王君驰. 2022. 区域网格化模式清单不确定性分析与诊断研究[D]. 广东:暨南大学

王伊凡, 仝纪龙, 陈羽翔, 等. 2023. 基于WRF-CMAQ/ISAM模型的榆林市夏季$O_3$来源解析 [J]. 环境科学, 44: 3676-3684

王昭桐, 刘子伊, 张心钰, 等. 环境影响评价中空气质量模型综述及其效果评估[J]. 三峡生态环境监测: 1-29 https://link.cnki.net/urlid/50.1214.x.20240820.1813.002

徐楠, 王甜甜, 李晓, 等. 2021. 北京冬季$PM_{2.5}$中有机气溶胶的化学特征和来源解析 [J]. 环境科学, 42: 2101-2109

许亦非, 崔寅平, 朱溢啸, 等. 2023. 广东省区域臭氧污染过程三维输送特征分析与定量来源解析[J]. 中国环境科学, 43(5): 2119-27

Zheng H T, Cai S Y, Wang S X, *et al*. 2019. Development of a unit-based industrial emission inventory in the Beijing-Tianjin-Hebei region and resulting improvement in air quality modeling [J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 19(6):3447-3462

张树宪, 李洋, 张众志, 等. 2022. 基于CMAQ/ISAM空气质量模型的北京市夏季臭氧来源解析研究[J]. 环境科学研究, 35: 1183-1192

朱玉祥, 黄嘉佑, 丁一汇. 2016. 统计方法在数值模式中应用的若干新进展[J]. 气象, 42: 456-465


中国知网 https://www.cnki.net