

· 专论与综述 ·

大气扩散 CALPUFF 模型技术综述

伯鑫^{1,2}, 丁峰², 徐鹤¹, 李时蓓²

(1. 南开大学环境科学与工程学院, 天津 300071; 2. 国家环境保护部环境工程评估中心, 北京 100012)

摘要:介绍了 CALPUFF 模式系统的理论知识, 以及在应用尺度、适用范围、气象与地形预处理、特殊计算功能模块等方面的特点和优势, 综述了其模式验证及在国内的应用情况, 提出了模型在应用方面的局限性。

关键词: CALPUFF; CALMET; 大气扩散模型

中图分类号: X169 **文献标识码:** A **文章编号:** 1006 - 2009(2009)03 - 0009 - 05

Review of Atmospheric Dispersion Model CALPUFF Technology

BO Xing^{1,2}, DING Feng², XU He¹, LI Shi-bei²

(1. Nankai University, College of Environmental Science and Engineering, Tianjin 300071, China; 2. The State Environmental Protection Administration, Environmental Engineering Assessment Center, Beijing 100012, China)

Abstract: The CALPUFF model system was described in theoretical knowledge, as well as its applied scale, scope of application, weather and terrain pre-processing, special function modules such as computing features and advantages. In this review, verification and application of the model in China were summarized and the limitation in applying the model was proposed.

Key words: CALPUFF; CALMET; Atmospheric diffusion model

CALPUFF 为三维非稳态拉格朗日扩散模式系统, 与传统的稳态高斯扩散模式相比, 能更好地处理长距离污染物运输 (50 km 以上的距离范围)。CALPUFF 由西格玛研究公司 (Sigma Research Corporation) 开发, 是美国国家环保局 (USEPA) 长期支持开发的法规导则模型, 也是我国环境保护部颁布的《环境影响评价技术导则 大气导则》(修订版) 推荐的模式之一, 其最新版本为 Version 6.0。

CALPUFF 具有下列优势和特点: 能模拟从几十米到几百公里中等尺度范围; 能模拟一些非稳态情况 (静小风、熏烟、环流、地形和海岸效应), 也能评估二次污染颗粒浓度, 而以高斯理论为基础的模式则不具备^[1]; 气象模型包括陆上和水上边界层模型, 可利用小时 MM4 或 MM5 网格风场作为观测数据, 或作为初始猜测风场; 采用地形动力学、坡面流参数方法对初始猜测风场分析, 适合于粗糙、复杂地形条件下的模拟; 加入了处理针对面源 (森林火灾) 浮力抬升和扩散的功能模块^[2]。

CALPUFF 模型系统包括 3 部分——CALMET (California Meteorological Model)、CALPUFF、CALPOST, 以及一系列对常规气象、地理数据作预处理的程序。CALMET 是气象模型, 用于在三维网格模型区域生成小时风场和温度场; CALPUFF 是非稳态三维拉格朗日烟团输送模型, 利用 CALMET 生成的风场和温度场文件, 输送污染源排放的污染物烟团, 模拟扩散和转化过程; CALPOST 通过处理 CALPUFF 输出的文件, 生成所需浓度文件用于后处理。

1 风场参数计算方法

CALMET 为 CALPUFF 烟团扩散模型提供必要的三维气象场, 包括诊断风场模块和微气象模块。诊断风场模块对初始猜测风场 (MM4 或 MM5 网格风场、常规监测的地面与高空气象数据) 进行地形

收稿日期: 2008 - 10 - 12; 修订日期: 2009 - 03 - 20

作者简介: 伯鑫 (1983—), 男, 山东烟台人, 硕士, 主要研究方向为大气环境质量模拟及应用。

动力学、坡面流、地形阻塞效应调整,产生第一步风场,导入观测数据,并通过插值、平滑处理、垂直速度计算、辐散最小化等产生最终风场;微气象模块根据参数化方法,利用地表热通量、边界层高度、摩擦速度、对流速度、莫宁-奥布霍夫长度等参数描述边界层结构。

1.1 第一步风场

1.1.1 地形动力学效应

CALMET利用 Liu和 Yocke提出的方法处理地形动力学效应^[3],通过计算整个区域的风来获得受地形影响的垂直风速,并满足大气稳定度递减指数函数。对初始猜测风场重复执行辐散最小化方法,直到三维辐散小于阈值,以获得水平方向风分量所受到的地形动力学影响。

先利用区域平均风速获得笛卡尔坐标系中风速的垂直分量 w ,再计算转化成地形跟踪坐标系中的垂直速率 W 。

$$w = (V \cdot \nabla h_i) \exp(-kz) \tag{1}$$

$$W = w - u \frac{\partial h_i}{\partial x} - v \frac{\partial h_i}{\partial y} \tag{2}$$

式中, V 为区域平均风速, m/s ; h_i 为地形高度, m ; k 为与稳定度有关的指数衰减系数; z 为垂直坐标。

$$k = \frac{N}{|V|} \tag{3}$$

$$N = \left[\left(-g \right) \frac{d}{dz} \right]^{1/2} \tag{4}$$

式中, N 为 Brunt - Väisälä 频率, s^{-1} ; g 为位温, K ; g 为重力加速度, m/s^2 ; $|V|$ 为区域平均风速绝对值。

1.1.2 坡面流

在 CALMET中,坡面流利用地形坡度、坡高、时间等参数计算,其风分量调入风场调整空气动力学影响。坡面流算法根据 Mahrt的射流 (shooting flows)参数化基础^[4],射流是浮力驱动的气流,依靠微弱的平流输送、地表曳力、坡面流层的夹卷作用平衡。坡面层厚度随坡顶高程而变化。

$$S = Se [1 - \exp(-x/Le)]^{1/2} \tag{5}$$

$$Se = [hg(\theta) \sin(\theta) / (C_D + k)]^{1/2} \tag{6}$$

$$Le = h / (C_D + k) \tag{7}$$

式中, S 为坡面流速度; Se 为坡面流平衡速度; Le 为平衡长度尺度; x 为距山顶的距离; θ 为环境周围位温差; θ_0 为环境周围位温; C_D 为地面阻力系

数; h 为坡面流高度; θ 为坡形水平角度; k 为坡面流层顶部夹带系数; g 为重力加速度。

1.1.3 地形阻塞效应

地形对风场的热力学阻塞效应通过局地弗罗得 (Froude)数计算^[5]。如果网格点计算值小于临界弗罗得数 (阻塞作用阈值默认值为 1),且风有上坡分量,则风向调整为与地形相切的方向,风速不变;如果超过临界弗罗得数,则不需要调整。

$$Fr = \frac{V}{N h_r} \tag{8}$$

$$h_r = (h_{max})_{ij} - (z)_{ijk} \tag{9}$$

式中, Fr 为局地弗罗得数; V 为网格点风速, m/s ; N 为 Brunt - Väisälä 频率, s^{-1} ; h_r 为有效障碍高度, m ; $(h_{max})_{ij}$ 为网格点 (i, j) 影响半径内的最大地形高度, m ; $(z)_{ijk}$ 为高空层 k 中网格点 (i, j) 的高度, m 。

1.2 最终风场

最终风场通过客观分析将观测资料引入第一步风场,主要包括插值、平滑处理、垂直风速的 O'Brien调整、辐散最小化 4个子过程。用户可以在平滑处理和 O'Brien调整步骤之间调用海风程序,以模拟海岸线风场^[6]。

2 CALPUFF烟团扩散模式原理

2.1 烟团模式的一般形式

与 AERMOD与 ADMS不同, CALPUFF采用非稳态三维拉格朗日烟团输送模型。烟团模式是一种比较简便灵活的扩散模式,可以处理有时空变化的恶劣气象条件和污染源参数,比高斯烟羽模式使用范围更广。在烟团模式中,大量污染物的离散气团构成了连续烟羽。烟团模式一般由以下几方面构成: 烟团的质量守恒; 烟团的生成; 烟团运动轨迹计算; 烟团中污染物散布; 迁移过程; 浓度计算^[7]。

假设烟团为对称分布,其物质的浓度分布在水平和垂直两个方向都为高斯型,方程表达式为:

$$q(x, y, z, s) = \frac{Q(s)}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x(s) \sigma_y(s) \sigma_z(s)} \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2(s)}\right] \exp\left[-\frac{z^2}{2\sigma_z^2(s)}\right] \tag{10}$$

式中, $Q(s)$ 为 s 处烟团物质质量, g ; y 为离烟团中心的水平 (径向) 距离, m ; z 为烟团中心离地高度, m 。

大多烟团模型利用“快照”方法预测接受点浓度,每个烟团在特定时间间隔被“冻结”,浓度根据此刻被“冻结”的烟团计算,然后烟团继续移动,大小和强度等继续变化,直到下次采样时间再次被“冻结”。在基本时间步长内,接受点浓度为周围所有烟团采样时间内平均浓度总和。

对比烟羽方法,烟团方法具有很多优点:可以处理静风问题;在离开模拟区域前,烟团都参加扩散计算;烟团在三维风场遵循非线性运动轨迹;一个烟团平流经过一个区域,烟团的形状尺寸会随之发生变化。而高斯烟羽仅考虑污染源和预测点的地形差异,不考虑两点之间地形对烟羽的影响。

常规的烟团方法在“快照”时,烟团间隙的预测点浓度偏低,中心的预测点浓度偏高。CALPUFF解决此问题的方法一种是采用积分采样方法即 CALPUFF 积分烟团方法(最早用于 MESOPUFF);另一种是沿风向拉长非圆形烟团,解决释放足够烟团的问题,即 Slug方法^[2]。

2.2 CALPUFF积分烟团

在 CALPUFF烟羽扩散模型中,单个烟团在某个接受点的基本浓度方程为:

$$C = \frac{Q}{2 \sqrt{\pi} \sigma_x \sigma_y} g \exp \left[- \frac{d_a^2}{2 \sigma_x^2} \right] \exp \left[- \frac{d_c^2}{2 \sigma_y^2} \right] \quad (11)$$

$$g = \frac{2}{\sqrt{2\pi} \sigma_z} \exp \left[- \frac{(He + 2nh)^2}{2 \sigma_z^2} \right] \quad (12)$$

式中, C 为地面浓度, g/m^3 ; Q 为源强; σ_x 、 σ_y 、 σ_z 为扩散系数; d_a 为顺风距离; d_c 为横向距离; He 为有效高度; h 为混合层高度; g 为高斯方程垂直项,解决混合层和地面之间多次反射的问题。

在中尺度距离传输中,烟团体积在采样步长内的分段变化通常很小,积分烟团可以满足计算要求。当模型用来处理局地尺度问题时,由于部分烟团的增长速率可能很快,积分烟团的处理能力难以达到要求。

2.3 Slug计算公式

Slug方法用来处理局地尺度大气污染,将烟团拉伸,可以更好地体现污染源对近场的影响。Slug可以被看成一组分隔距离很小的重叠烟团,利用 Slug模式处理时,污染物被均匀分散到 Slug里。一个 Slug的浓度可以表示为:

$$C(t) = \frac{Fq}{(2\pi)^{1/2} u} g \exp \left[- \frac{d_c^2}{2 \sigma_y^2} \times \frac{u^2}{u^{1/2}} \right] \quad (13)$$

$$F = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erf} \left[\frac{d_{a2}}{\sqrt{2} \sigma_y} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{-d_{a1}}{\sqrt{2} \sigma_y} \right] \right] \quad (14)$$

$$u = (u^2 + v^2)^{1/2} \quad (15)$$

式中, u 为平均风速矢量, m/s ; u 为风速标量; v 为风速方差; q 为污染源排放速率, g/s ; F 为因果函数; g 为高斯方程垂直项。

Slug描述了烟团连续排放,每个烟团都含有无限小的污染物。和烟团一样,每个 Slug都能根据扩散局地影响、化学转化等独立发生变化,邻近 Slug的端点相互链接,确保模拟烟羽的连续性,摒弃了烟团方法的间隔缺陷。在整个平均时间间隔内,超过 $\text{Slug} \pm 3 \sigma_y$ 范围的接受点不在计算范围之内。

采用 Slug模式,当横向扩散参数 σ_y 增长接近于 Slug自身长度时(下风距离内会发生这种情况),CALPUFF开始利用烟团(puff)模式对污染物采样,提高计算效率。在足够大的下风距离内,利用 Slug模式模拟没有优势,因而积分烟团模式适合中等尺度范围,Slug模式适合局地尺度^[8]。

2.4 扩散作用 (Dispersion)

在 CALPUFF扩散模型中,需要考虑水平方向和垂直方向的高斯扩散系数,即 σ_y 和 σ_z 。

扩散过程中扩散系数计算公式如下:

$$\sigma_{yn}^2(\sigma_y) = \sigma_{yt}^2(\sigma_{yn} + \sigma_y) + \sigma_{ys}^2 + \sigma_{yb}^2 \quad (16)$$

$$\sigma_{zn}^2(\sigma_z) = \sigma_{zt}^2(\sigma_{zn} + \sigma_z) + \sigma_{zb}^2 \quad (17)$$

式中, σ_{yn} 、 σ_{zn} 为 $t=0$ 时的虚拟源参数; σ_{yn} 、 σ_{zn} 为扩散过程中某指定位置的水平和垂直扩散系数; σ_{yt} 、 σ_{zt} 为大气湍流作用形成的扩散系数 σ_y 和 σ_z ; σ_{yb} 、 σ_{zb} 为扩散过程中浮力抬升产生的 σ_y 和 σ_z 分量; σ_{ys} 为面源侧向扩散产生的水平扩散系数分量。

2.4.1 大气湍流分量

计算 σ_y 和 σ_z 时,尽可能使用大量精确数据,当数据不能被使用时,模型提供不要求输入精确数据的计算公式。根据 5 种不同的扩散选项,模型将输入的数据分为 3 级。5 种扩散选项分别为:

- 根据湍流运动的监测值计算扩散系数 σ_v 和 σ_w ;
- 利用微气象变量计算扩散系数 σ_v 和 σ_w ;
- 通过 ISCST模型计算乡村区域 PG扩散系数和 McElroy - Pooler城市区域扩散系数;
- 除 PG扩散系数之外,通过 MESOPUFF 计算的扩散系数; 稳定和

中性气象条件下 (假设 v 和 w 已读取), CDM 的值和不稳定条件下第 3 种选项的值。输入的数据有 3 种: 湍流扩散系数, 即 v 和 w 直接监测值; 通过 CALMET 或其他模型对微气象参数计算得到的横向和垂直分量; PGT 或 ISCST 模型中的扩散系数, 或 MESOPUFF 的乡村扩散参数。

2.4.2 浮力抬升扩散

因烟羽抬升, 烟羽浮力对扩散系数的作用通过以下公式计算:

$$y_b = H/3.5 \quad (18)$$

$$z_b = H/3.5 \quad (19)$$

式中, H 为烟羽抬升高度, m。

2.4.3 初始烟羽大小

体源排放烟团的初始大小由用户定义的初始扩散系数 (y_0 和 z_0) 决定。1 个体源可以看作由特定区域内许多指定的面源组成的单个污染源, 随着体源排放扩散到一定体积, 可用 y_0 和 z_0 表示。体源烟团扩散可以当作点源烟团计算处理, 采用虚拟源设置初始 y_0 和 z_0 。

2.4.4 烟团分裂

垂直风切变有时是影响烟团传输和扩散的一个重要因素。CALPUFF 可以处理单个烟团切变, 当切变作用明显时, 将烟团分裂成多个, 分裂后的烟团独立传输和扩散。如果单个烟团在模拟区域时间足够长, 则可能被多次分裂, 在垂直方向仍是高斯形式的烟团将不再被分裂。

2.5 烟羽抬升

CALPUFF 模型中烟羽的抬升关系适用于各种类型的源和各种特征的烟羽。烟羽抬升算法考虑了以下几个方面: 烟团的浮力和动量; 稳定的大气分层; 部分烟团穿透进入稳定的逆温层; 建筑物下洗和烟囱顶端下洗效应; 垂直风切变; 面源烟羽抬升; 线源烟羽抬升。

2.5.1 基本点源烟羽抬升公式

基本点源烟羽抬升公式以 B riggs 方程为基础。在中性或不稳定的气象条件下:

$$z_r = [3F_m x / (u_j^2 S^{1/2}) + 6F / (u_j^2 S)]^{1/3} \quad (20)$$

式中, F_m 为动力通量, m^4/s^2 ; F 为浮力通量, m^4/s^2 ; u_j 为出口风速, m/s ; x 为下风向距离, m ; α 为中性夹卷参数 ($\alpha = 0.6$); β 为急流夹卷系数, $\beta = 1/3 + u_j/w$; w 为烟气排放速率。

在稳定的气象条件下:

$$Z_{gr} = [3F_m / (\alpha u_j S^{1/2}) + 6F / (\alpha u_j S)]^{1/3} \quad (21)$$

式中, α 为稳定夹卷参数 ($\alpha = 0.36$); S 为稳定度参数 $[g/T_a] (d/dz)$; g 为重力加速度, m/s^2 ; T_a 为环境温度, K ; d/dz 为位温递减率, K/m 。

2.5.2 局部烟羽穿透作用

CALPUFF 中烟羽穿透参数 P 及烟羽在混合层下停留参数 f 的计算公式如下:

$$P = \frac{F_b}{u_s b_i (h - h_s)^2} \quad (22)$$

$$f = \begin{cases} 1 & (P < 0.08) \\ \frac{0.8}{P} - P + 0.8 & (0.08 < P < 0.3) \\ 0 & (P > 0.3) \end{cases} \quad (23)$$

式中, u_s 为烟囱出口风速; F_b 为初始浮力通量; h 为逆温层高度; h_s 为烟囱高度; b_i 为逆温层强度 ($b_i = g - T_i/T_a$); T_i 为穿透逆温层时的温度; T_a 为周围空气温度; g 为重力加速度。

2.5.3 垂直风切变作用

可以通过烟羽抬升方程式中的烟囱出口风速计算烟囱顶端风速变化情况。

许多公式都假设烟囱顶端风速不变, 该情况适合于比较高的烟囱, 而比较低的烟囱顶部风速变化对于正确评价烟羽浮力抬升作用具有非常重要的意义。当烟囱顶部垂直风速近似看作 $u(z) = u_s (z/h_s)^2$ 时, 较低烟囱排出的烟羽抬升高度可根据下列公式计算。

在中性或稳定条件下:

$$z_w = \left\{ \left[\frac{e^2}{(6+2p)} \right] (F_{sm}^{3p}) / (\alpha u_m^3) \right\}^{1/e} x^{2/e} \quad (24)$$

$$e = 3 + 3p \quad (25)$$

式中, p 为风速幂指数。

在稳定条件下:

$$z_w = \left\{ \left[2(3+p) \frac{F_{sm}^p}{\alpha} \right] / (\alpha u_m S) \right\}^{1/(3-p)} \quad (26)$$

3 CALPUFF 模式验证与在国内的应用

3.1 模式验证

美国空气质量模型小组 (WAQM) 利用“跨阿巴拉契亚示踪试验”(Cross-Appalachian Tracer Experiment) 数据评估 CALPUFF 模型, 结果表明利用 MM4 数据的 CALPUFF 模式模拟效果较好^[2]。此外, Inwin 利用爱达荷州 3 h 示踪试验, 美国环境保护署利用萨凡纳河实验场和大平原实验室示踪试验对比 CALPUFF 扩散模型模拟结果。在这 3 个示

踪试验中,观测时间内烟羽抵达和全部通过采样弧线的时间与模型模拟总体一致,只是模拟传输方向趋向偏离实际方向 $1^{\circ} \sim 15^{\circ}$;绝大部分模拟结果与观测值有较好的一致性。萨凡纳河实验场和爱达荷州试验的模拟统计结果在观测值两倍之内,预测结果的总体趋势较好。大平原实验室 100 km 采样弧的横向扩散预测结果偏低,中心最大浓度和横向积分浓度预测结果偏高,而 600 km 采样弧 7 月 8 日的模拟结果显示,中心最大浓度和横向积分浓度比观测值小 2~5 倍,横向扩散浓度比观测值大 2.5~3.5 倍。原因是 CALMET 未精确模拟好气象条件,600 km 横向扩散浓度过大可能是受夜晚低空射流的影响,气象模型、大气扩散中的假设和简化造成了观测值和模拟值的差异,关于 100 km 的结果差异研究人员未找出合理解释^[9]。

3.2 国内应用实例

CALPUFF 在国内的应用以数学模拟和模型理论研究为主,直接应用于环境质量模拟与环境影响评价的成熟案例不多。

王淑兰等^[10]利用 CALPUFF 系统,采用 2000 年的气象资料,选择 $(350 \times 240) \text{ km}^2$ 研究区域,通过数值模拟和排放源现状分析,揭示了珠江三角洲城市之间污染物相互输送的特点和规律,分析了不同城市空气污染影响因素的差异,定量提供了珠江三角洲城市间空气污染的相互影响和相互贡献。宋宇等^[11]2002 年利用 CALPUFF 研究了石景山区 PM_{10} 污染对北京市的影响,详细解析了石景山区各主要污染物对市区不同区域浓度的贡献,认为通过监测数据比较,利用 CALPUFF 模拟系统能较成功地模拟石景山区飘尘污染。王繁强等^[12]以 CALPUFF 为核心建立了区域大气质量评价数值模式系统平台,利用 2004 年的气象资料对某工程模拟分析,较好地模拟了污染物浓度分布范围、风场、混合层高度等关系。杨多兴等^[13]利用 CALPUFF 与 MM5 耦合系统,模拟了 2004 年门头沟排放的大气颗粒物浓度的时空分布及向北京主城区的输送过程,分析了下垫面非均匀性和气象条件对输送过程的影响,以及门头沟污染物对主城区颗粒物浓度的贡献,通过与观测结果对比,表明该模式对 PM_{10} 浓度分布和输送态势具有较强的模拟能力。岳丽等^[14]利用 CALPUFF 成功模拟了 2004 年贵州“西电东送”火电项目火电厂排放的 NO_2 时空分布特征,结果表明电厂排放 NO_2 主要对贵州省中西部

有一定影响。四川某石化项目将 CALPUFF 应用于环境影响评价,预测范围 $(60 \times 60) \text{ km}^2$,模拟时段为 2005 全年,利用 CALPUFF 成功模拟了该项目排放 SO_2 的时空分布状况,确定了其对成都市空气质量的贡献及时空分布特征。

4 CALPUFF 模式的局限性

虽然 CALPUFF 在处理化学转化、物理沉降等方面具有优势,并能处理 $> 50 \text{ km}$ 范围的污染,但由于其自身限制,在湍流扩散影响强烈的区域(如城市环境),不推荐使用 CALPUFF 模式系统^[15]。

CALPUFF 模型不能精确预测短期排放和短期产生的峰值浓度,如泄漏排放事故。在该类事故中,环境污染物峰值浓度可能远远大于浓度均值,从而对人群健康产生急性毒性影响。CALPUFF 扩散参数化使用的单位平均时间一般需要约 1 h,而脉动扩散作用发生的时间短得多,对于小烟团(刚释放出来),控制其扩散的主要因素是脉动作用,而不是烟团自身的增长。因此,烟团模型不适合对污染源瞬时释放(尤其是近场)作合理浓度预测^[16]。

CALPUFF 模式本身具有较强的复杂性,对计算数据要求较高,而一些气象数据很难获取。如 CALMET 需要的数据至少包括每日逐时地面气象数据和一日两次探空数据,而目前国内气象站一般只提供一日四次地面气象数据。当某些气象数据缺失时,CALMET 会通过插值等技术估算风场、温度场、湍流场等,降低了模型气象场的精确度,最终会降低模拟结果的精确度。此外,CALPUFF 模式系统对某些计算要求有限制,如对于污染源数量,点源、面源、体源不能超过 200 个,线源不能超过 24 个,用户只能通过修改 CALPUFF 源代码达到计算要求。

[参考文献]

- [1] 迟妍妍,张惠远. 大气污染物扩散模式的应用研究综述[J]. 环境污染与防治, 2007, 29(5): 377.
- [2] SCREJ S, STRMARTIS D G, YAMARTNO R J. A user's guide for the CALPUFF dispersion model (Version 5) [M]. Concord, MA: Earth Tech Inc, 2000: 1 - 79.
- [3] LU M K, YOCKE M A. Siting of wind turbine generators in complex terrain [J]. Journal of Energy, 1980, 4(10): 16.
- [4] MAHRTL. Momentum balance of gravity flows [J]. Journal of the Atmospheric Sciences, 1982(39): 2701 - 2711.

(下转第 47 页)

法,并经 DB - 35ms柱和 DB - XLB 柱双柱确认, PCP 质量比为 1.60 μg/kg. 实际样品色谱峰见图 3。

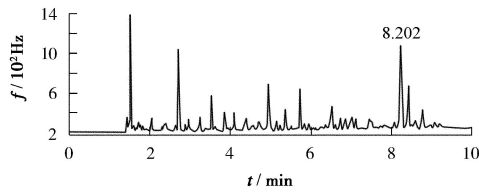


图 3 实际样品色谱峰

3 结语

以正己烷 丙酮为萃取试剂,硫酸酸化,采用索氏提取法萃取,再用正己烷净化,乙酸酐衍生化,气相色谱法测定土壤中的 PCP,方法重复性好,准确度高,仪器设备简单,适用于常规实验室对土壤中 PCP 的检测。

[参考文献]

[1] United Nations Environment Programme. Stockholm convention on persistent organic pollutants (POPs) [R]. Stockholm: United Nations Environment Programme, 2001.
 [2] RAO K R. Pentachlorophenol: chemistry, pharmaceutical, and environmental toxicology[M]. New York: Plenum Press, 1978.
 [3] 李萍,管秀娟. 吸附 - 共代谢再生污泥法降解五氯苯酚的研究 [J]. 环境科学与技术, 2007, 25 (2): 13 - 14.
 [4] ALONSO M C, PUIG D, SLCONER I et al Determination of

priority phenolic compounds in soil samples by various extraction methods followed by liquid chromatography-atmospheric pressure chemical ionisation mass spectrometry[J]. J Chromatogr, 1998, 823 (1 - 2): 231 - 239.
 [5] RODRIGUEZ A M, YANEZ S P, POLO D L. Determination of pentachlorophenol by flow-injection analysis with spectrophotometric detection[J]. Talanta, 1988, 35 (8): 601 - 604.
 [6] PATRICIA N, ANGEL M, ROSA P, et al Development of an enzyme-linked immunosorbent assay for pentachlorophenol [J]. Analytica Chimica Acta, 2002, 460 (2): 279 - 288.
 [7] ANDRE B, ROLAND G, PIERRE T, et al Determination of pentachlorophenol and its hydrocarbon solvent in wood, soil, and water by gas chromatography and FT-IR spectroscopy in a single-sample treatment[J]. Anal Chem, 1995, 67 (2): 442 - 446.
 [8] 王俊,孙津生. 河流底泥沉积物中五氯酚和六氯苯残留的同时测定 [J]. 质谱学报, 2006, 27 (2): 79 - 83.
 [9] 范苓,夏豪刚. 气相色谱/质谱法测定水中五氯酚 [J]. 环境监测管理与技术, 2001, 13 (1): 33 - 34.
 [10] 孙磊,蒋新,周健民,等. 红壤中痕量五氯酚的气相色谱法测定 [J]. 分析化学, 2003, 31 (6): 716 - 719.
 [11] LUCIANA P, MARIA L R. Methods for determination of hexachlorobenzene and pentachlorophenol in soil samples [J]. Talanta, 1998, 46 (5): 915 - 920.
 [12] LIU Y, WEN B, SHAN X. Determination of pentachlorophenol in wastewater irrigated soils and incubated earthworms [J]. Talanta, 2006, 69 (5): 1254 - 1259.
 [13] JIN M, WANG B. Characterization of pentachlorophenol in soil by liquid chromatography-mass spectrometry [J]. Donghua University (Eng ed), 2004, 21 (6): 146 - 148.

(上接第 13 页)

[5] ALLWINE K J, MELSAR W C D. A mesoscale air quality model for complex terrain: volume 1 - overview, technical description and user's guide [M]. Richland, Washington: Pacific Northwest Laboratory, 1985.
 [6] SCREJIS, STRMARTIS D G, YAMARTNO R J. A user's guide for the CALMET dispersion model (Version 5) [M]. Concord, MA: Earth Tech Inc, 2000: 15 - 31.
 [7] 蒋维楣. 空气污染气象学 [M]. 南京: 南京大学出版社, 2003: 102 - 104.
 [8] Environmental Protection Agency. A comparison of CALPUFF with ISC3 [M]. North Carolina: Office of Air Quality Planning and Standards Research Triangle Park, NC, 1998: 1 - 10.
 [9] Environmental Protection Agency. A comparison of CALPUFF modeling results to two tracer field experiments [M]. North Carolina: Office of Air Quality Planning and Standards Research Triangle Park, NC, 1998: 26 - 27.
 [10] 王淑兰,张远航,钟流举,等. 珠江三角洲城市间空气污染的

相互影响 [J]. 中国环境科学, 2005, 25 (2): 133 - 137.
 [11] 宋宇,陈家宜,蔡旭晖. 石景山工业区 PM₁₀ 污染对北京市影响的模拟计算 [J]. 环境科学, 2002 (23): 65 - 68.
 [12] 王黎强,周阿舒,王琦,等. 区域大气质量评价数值模式系统的建立及试用 [J]. 气象科技, 2007, 35 (6): 764 - 770.
 [13] 杨多兴,韩永伟,拓学森. 门头沟生态区排放的大气颗粒物输送的模拟研究 [J]. 西南大学学报 (自然科学版), 2007, 29 (5): 113 - 118.
 [14] 岳丽,段宁,刘厚凤. 贵州“西电东送”火电项目对区域 NO_x 的影响 [J]. 科技信息 (科学·教研), 2007, 13 (1): 21 - 23.
 [15] HOLMES N S, MORAWSKA L. A review of dispersion modeling and its application to the dispersion of particles: an overview of different dispersion models available [J]. Atmospheric Environment, 2006, 40 (30): 5902 - 5928.
 [16] 张建国,安宇,魏利军. 危险化学品事故应急响应大气扩散模型及系统概述 [J]. 环境监测管理与技术, 2008, 20 (2): 7 - 8.

本栏目责任编辑 姚朝英