

# EKMA 曲线绘制实操

绘制 EKMA (Empirical Kinetics Modeling Approach) 曲线的目的是为了识别所研究地区的臭氧主控区, 科学确定 VOCs、NO<sub>x</sub> 的削减比例。本文介绍采用美国 EPA 提供的 OZIPR (Ozone Isopleth Plotting Program for Research) 模型模拟臭氧最大值、绘制 EKMA 曲线等内容与使用技巧。学习的秘诀是要阅读用户手册 User's Guide for Executing OZIPR、Running the OZIPR Model 等原文, 理解输入输出的各项指标。

## 一、OZIPR 运行

### 第一步: 下载 OZIPR 系列文件

- 1、下载网址: [Air Quality Dispersion Modeling - Alternative Models | Support Center for Regulatory Atmospheric Modeling \(SCRAM\) | US EPA](#), 包括 [Code/Executable/Test Inputs \(ZIP\)](#), 以及用户手册 [User's Guide](#) 等。
- 2、解压 Code/Executable/Test Inputs (ZIP) 所有文件到 c:\ozipr, 也可到其他目录, 下面以此目录为例。

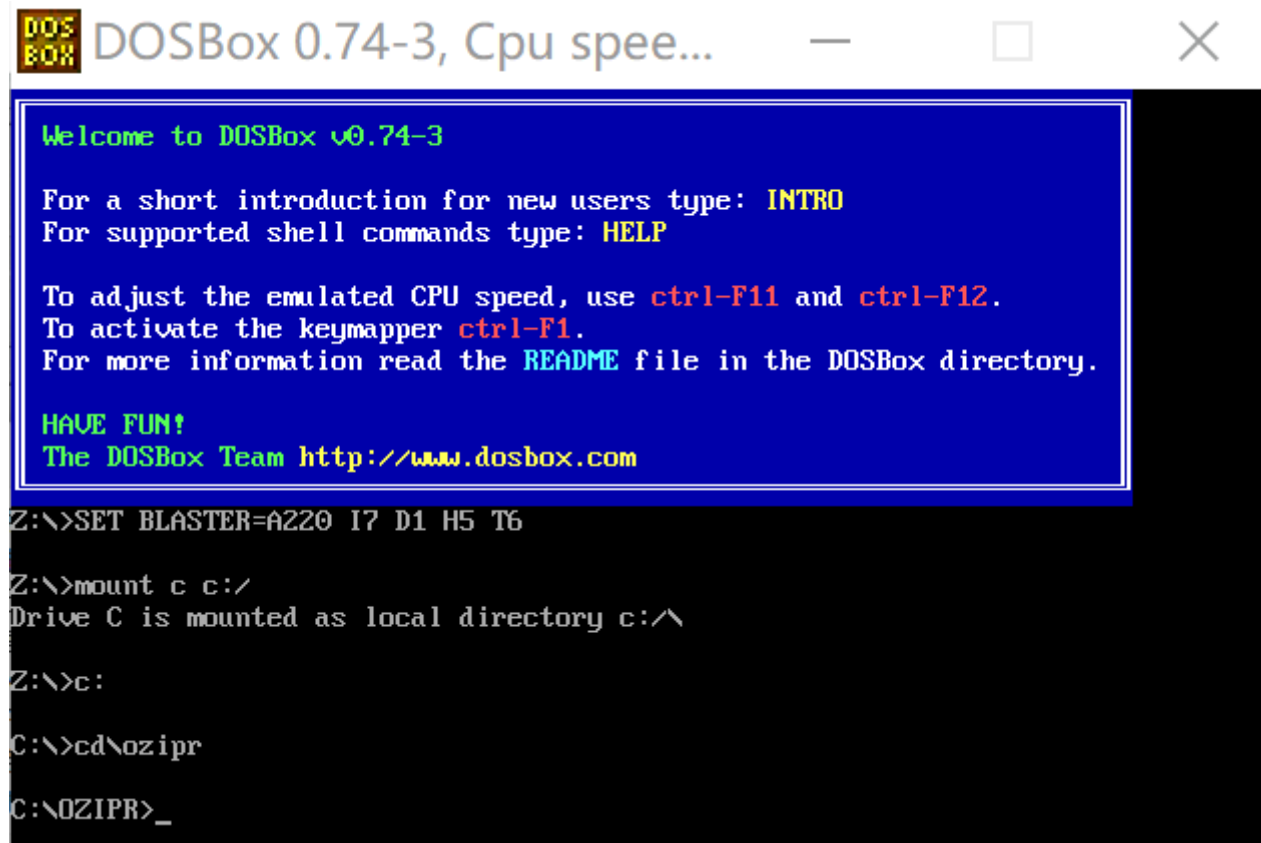
## 第二步：64 位计算机模拟成 32 位的运行环境

如果是 32 位计算机，此步可省。

网上下载 DOSBox0.74-3-win32-installer，然后 copy 到 c 根目录下

## 第三步：运行 ozipr

- 1、运行 DOSBox
- 2、到 dosbox 的命令行，键入 `mount c c:/`（在 dosbox 里有一个虚拟 C 盘==真 c 盘）
- 3、键入 `C:`，进入 C 盘
- 4、键入 `cd\ozipr`，进入 ozipr 目录



```
DOS BOX DOSBox 0.74-3, Cpu spee...
Welcome to DOSBox v0.74-3
For a short introduction for new users type: INTRO
For supported shell commands type: HELP
To adjust the emulated CPU speed, use ctrl-F11 and ctrl-F12.
To activate the keymapper ctrl-F1.
For more information read the README file in the DOSBox directory.
HAVE FUN!
The DOSBox Team http://www.dosbox.com
Z:\>SET BLASTER=A220 I7 D1 H5 T6
Z:\>mount c c:/
Drive C is mounted as local directory c:/\
Z:\>c:
C:\>cd\ozipr
C:\OZIPR>_
```

5、键入 ozipr test1.INP 控制文件，（test1.INP 文件见“三、控制文件释义”，含有 10 个模块，可以拿来给根据需要进行改造），生成 test1.OUT 与 test1.ISO。

6、打开 test1.OUT 查看结果

① 获得各物种的最大浓度与对应的时间：

Maximum AVERAGE Concentrations

Maximum 1 hour ave O3 = .1767 ppm centered at 1720. LDT  
 Maximum 1 hour ave NO2 = .0391 ppm centered at 912. LDT  
 Maximum 1 hour ave CO = .9155 ppm centered at 830. LDT  
 Maximum 1 hour ave PAN = .0051 ppm centered at 1456. LDT  
 Maximum 1 hour ave HNO3 = .0158 ppm centered at 1520. LDT  
 Maximum 1 hour ave H2O2 = 5.9814E-04 ppm centered at 1758. LDT

② 获得O3达标（0.12ppm，美国80年代的标准）情况下的VOC的削减比例为32.9%：

The Following EKMA Simulations were done.

VOC	NOX	O3	Time
1.00000	.10000	.17680	1721.
.96155	.09615	.17405	1720.
.90498	.09050	.17041	1720.
.89859	.08986	.17022	1720.
.44930	.08087	.08896	1646.
.60608	.08087	.12066	1713.
.60281	.08087	.11988	1712.

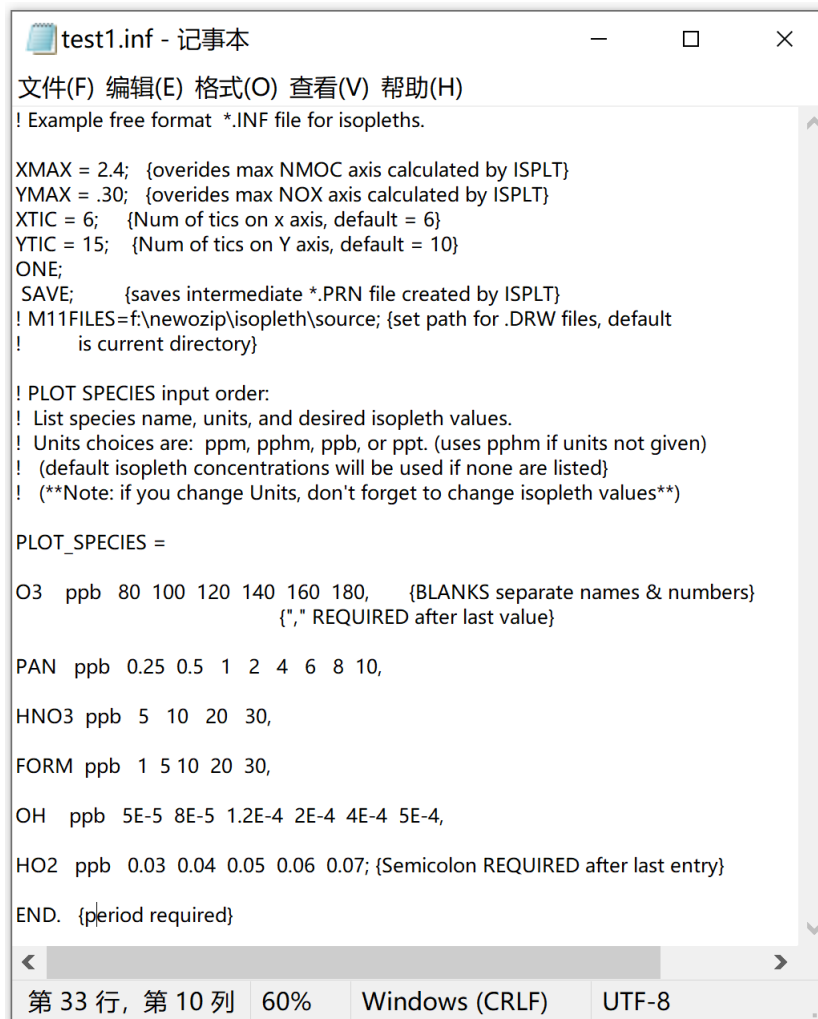
VOC Control Requirement is 32.9 Percent

## 第四步：运行 ISOPLLOT

1、打开目录中的 ISOPLLOT.CFG 文件，修改文件存放路径，如果在当前目录下，即删除黄标的语句，如下：

```
ISOPLLOT configuration file..  
! Pathways can be set for::  
!   Isplt=path      Default = current directory  
!   M11FILES=path  Default = current directory  
ISPLT=a:\run\  
!M11FILES=f:\isopleth\draw\
```

2、打开案例中 test1.INF 文件，根据需要修改坐标轴长度、格距，绘制的物种和等值线浓度值，保存为你的文件\*.INF。



```
test1.inf - 记事本
文件(F) 编辑(E) 格式(O) 查看(V) 帮助(H)
! Example free format *.INF file for isopleths.

XMAX = 2.4; {overrides max NMOC axis calculated by ISPLT}
YMAX = .30; {overrides max NOX axis calculated by ISPLT}
XTIC = 6; {Num of tics on x axis, default = 6}
YTIC = 15; {Num of tics on Y axis, default = 10}
ONE;
SAVE; {saves intermediate *.PRN file created by ISPLT}
! M11FILES=f:\newozip\isopleth\source; {set path for .DRW files, default
! is current directory}

! PLOT SPECIES input order:
! List species name, units, and desired isopleth values.
! Units choices are: ppm, pphm, ppb, or ppt. (uses pphm if units not given)
! (default isopleth concentrations will be used if none are listed)
! (**Note: if you change Units, don't forget to change isopleth values**)

PLOT_SPECIES =

O3 ppb 80 100 120 140 160 180, {BLANKS separate names & numbers}
{"," REQUIRED after last value}

PAN ppb 0.25 0.5 1 2 4 6 8 10,

HNO3 ppb 5 10 20 30,

FORM ppb 1 5 10 20 30,

OH ppb 5E-5 8E-5 1.2E-4 2E-4 4E-4 5E-4,

HO2 ppb 0.03 0.04 0.05 0.06 0.07; {Semicolon REQUIRED after last entry}

END. {period required}

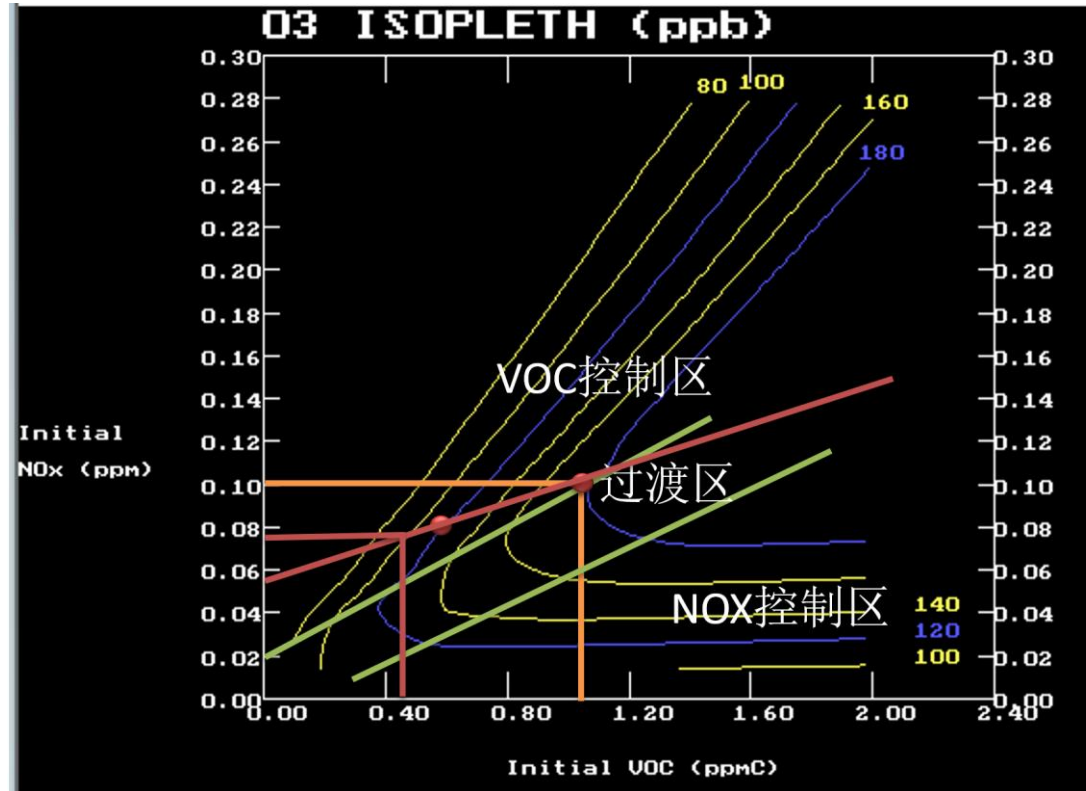
第 33 行, 第 10 列 60% Windows (CRLF) UTF-8
```

3、如果已经退出运行环境，再重复第三步中的 1-4

4、键入：isplt test1.INF test1.ISO，生成 test1.PRN

5、键入：isoplot test1.PRN

获得如下 EKMA 曲线：



**结果:** 1、棕黄线为 VOC-O<sub>3</sub>-NO<sub>x</sub> 初始浓度的关系，即找到目前控制区位于 VOC 控制区与过渡区之间，以控 VOC 为主，控 NO<sub>x</sub> 为辅助；

2、红点为 VOC-O<sub>3</sub>-NO<sub>x</sub> 初始点和 VOC-O<sub>3</sub>-NO<sub>x</sub> 目标点（程序中设置 O<sub>3</sub> 达标值为 0.12ppm，美国 80 年代的标准），你可以通过红线也是最优控制线，设定你的目标值，从而获得 VOC 和 NO<sub>x</sub> 的控制浓度。

3、三根红线交叉点为 O<sub>3</sub> 值为 0.10ppm 的达标目标，对应横纵坐标即为 VOC 和 NO<sub>x</sub> 的控制浓度。

注：1ug/m<sup>3</sup> ≈ 1ppb \* 相对分子质量 / 22.4，1ppm = 1000ppb

## 二、文件类型介绍

序号	文件名	内容
1	*. INP	控制文件。主要包括：化学机理，与臭氧形成有关的化学物种的初始浓度，VOCs源谱比例，NO2/NOX比例，混合层顶与臭氧有关的物种的浓度，从混合层顶扩散到地面的有关的物种的浓度，相关物种的沉降速度，气象条件（如：混合层高度、气压、温湿度等），以及VOCs、NO <sub>x</sub> 、CO等动态排放信息。
2	*.RAD, *.CB4, *.CAL	化学机理文件。
3	REAC. *	与化学机理文件对应的各物种的初始排放比例、混合层顶处和传输到地面各物种的比例。
4	zen.*	依太阳高度角调节的光解率文件。
5	*. OUT	输出文件。主要包括输入的一系列信息以及计算结果，计算结果内容是在CALC里所设置的。
6	ISOPLLOT.CFG	指定ISOPLLOT文件存放路径。
7	*. INF	设置坐标轴长度、格距，绘制的物种和等值线浓度值。
8	*. ISO	输出等值线后处理文件。
9	*. PRN	输出EKMA曲线后处理文件。
10	OZIPR.EXE	OZIPR运行文件。
11	ISPLT.EXE	等值线运行文件。
12	ISOPLLOT.EXE	绘制EKMA曲线文件。

## 三、控制文件释义

序号	控制模块	解释	Tips
1	MLIST; @meccm.cb4 @zen.cb4 .....	MLIST，调用化学机理文件，EPA给的样例中提供了RADM-II、CB4、CAL三种化学机理文件（meccm.RAD，meccm.CB4，meccm.CAL） @meccm.cb4：调用的化学机理文件 @zen.cb4：调用的依太阳高度角调节的光解率文	根据需要选择一种化学机理。



		件 ..... (可以调用多个文件)	
2	BOUNDary >	BOUNDary >, 开始设置边界条件	
2.1	REAC = PAR,            0. 5640,        0. 4980,        0. 4980, ETH,            0. 0370,        0. 0340,        0. 0340, OLE,            0. 0350,        0. 0200,        0. 0200, TOL,            0. 0890,        0. 0420,        0. 0420, XYL,            0. 1170,        0. 0260,        0. 0260, FORM,           0. 0210,        0. 0700,        0. 0700, ALD2,           0. 0520,        0. 0370,        0. 0370, ISOP            0. 0000,        0. 0000,        0. 0000, NR,             0. 0850,        0. 2730,        0. 2730;	各物种比例: 第一列: 物种名称 第二列: 分物种的 VOC 初始排放量占总 VOC 排放量的比例 第三列: 混合层顶部各物种的比例 第四列: 传输到地面的各物种的比例 (EPA 给的样例中没有考虑传输到地面的贡献, 因此此列数据不起作用) 注: 每列占比的总和应该是 1.0。	初始排放可选择早晨 8 点 VOC 各物种的排放量, 或夏季平均值。 混合层顶部各物种数据可以观测, 实在没有, 借用样例中的数据, 算算看效果如何。 值得注意的是物种种类应与调用的化学机理文件中的物种 <b>一致</b> 。
2.2	IFRACtion NO2 = 0. 20;	设置 NO2/NOX 的初始比率	
2.3	TRANsport = O3ALoft        = 0. 08, VOCALoft       = 0. 05, NOXALoft       = 0. 009, COALOFT        = 0. 5;	TRANsport, 混合层发生变化时的传输: 输入混合层顶处的O3浓度 (ppm) 输入混合层顶处的VOC浓度 (ppmC) 输入混合层顶处的NOX浓度 (ppm) 输入混合层顶处的CO浓度 (ppm) 注: 有样例中需要输入传输到地面的数据, 不输入的话, 即 <b>缺省为0</b>	混合层顶处的数据可以用观测的数据, 或区域模型模拟的数据, 或借用周边其他城市的数据。总有一款适合你。
2.4	DEPO [12] = NO2 = 0. 48, 0. 54, 0. 60, 0. 60, 0. 60, 0. 60, 0. 60, 0. 60, 0. 54, 0. 48, , 0. 36, 0. 24, O3 = 0. 60, 0. 70, 0. 80, 0. 80, 0. 80, 0. 80, 0. 80, 0. 80, 0. 70, 0. 60, , 0. 50, 0. 30, HNO3 = 3. 00, 3. 30, 3. 50, 3. 50, 3. 50, 3. 50, 3. 50, 3. 50, 3. 30, 3. 20, , 3. 00, 2. 60, H2O2 =	DEPO [12] =每小时的沉降速度(cm/s)	可以 <b>借用</b> 案例的数据

	1. 80, 1. 90, 2. 00, 2. 00, 2. 00, 2. 00, 2. 00, 2. 00, 1. 90, 1. 80 , 1. 70, 1. 60, PAN = 0. 48, 0. 54, 0. 60, 0. 60, 0. 60, 0. 60, 0. 60, 0. 60, 0. 54, 0. 48 , 0. 36, 0. 24;		
2	<(BOUN)	<(BOUN), 边界条件设置结束	
3	TIME > 0800, 2000 <  TITLE > EXAMPLE - Sample Calculation Using cb4 mechanism <	TIME, 计算时间: 从 8: 00 开始到 20: 00 结束  此案例使用了 <b>CB4</b> 的化学机理文件	
4	PLACE > CITY = CANGZOU; LAT = 38.300; LON = 116.830; TZone = 8; Y = 2021; M = 5; D = 21; < (PLACE)	PLACE, 地点: 城市名称; 纬度、经度、时区; 年, 月, 日;	修改成你自己的。
5	MET > DILution = MHINITIAL = 300, MHFINAL = 1300, TINIT = 0800, TFINAL = 1600; TEMP [13]= 292, 294, 296, 298, 300, 301, 303, 303, 303, 301, 299, 296, 295; PRESSURE[ATM] = 1 ; RH [1] = 50; < (MET)	MET, 气象数据: 最小混合层高度 (米) 最大混合层高度 (米) 最小混合层高度出现时间 最大混合层高度出现时间 温度[13 小时]: 提供的温度时间应大于计算时间, 每小时的温度, K 大气压=1 相对湿度=50%	混合层高度计算可由模型提供, 也可参考 1993 年大气导则中的计算方法, 见本文附录 A 和附录 B。
6	MASS [11] > VOC = 1.0, 9.42, 7.68, 7.54, 5.21, 3.23, 2.24, 2.18, 1.75, 1.72, 2.10, 1.12;	MASS[11 个小时, 选择大于 10 小时的数据即可]每小时排放量, 可以使用多达 10 个物种。 VOC, 初始浓度 ppmC (以碳量计) VOC 每个小时的排放量 (kg/km <sup>2</sup> / hr) NOX, 初始浓度 ppm	初始浓度可采用早晨 8 点的监测数据。  排放数据是从计算时间起到结束的每小时动态排放数

	<p>NOX = 0.1, 8.11, 6.18, 5.65, 4.11, 2.76, 1.90, 1.91, 1.60, 1.42, 1.78, 0.90;</p> <p>CO = 1.0, 12.9, 19.4, 14.2, 11.6, 11.6, 11.6, 11.6, 12.9, 14.2, 15.5, 20.7;</p> <p>&lt; (MASS)</p>	<p>NOX 每个小时的排放量 (kg/km<sup>2</sup> / hr) CO, 初始浓度 ppm CO 每个小时的排放量 (kg/km<sup>2</sup> / hr)</p> <p>注: VOC、NOx、CO 这三组数据必须给, EKMA 需要, 也是仅需要。其分子量 (VOC = 14.5, NOx = 46, and CO = 28) 程序里已给定, 可以缺省不写, 如果还增加其他物种, 需给出对应的分子量。</p>	据。
7	<p>CALC &gt;</p> <p>VOC = 1.0; NOX = 0.1; CO = 1.0; PRINT [CONC] = AVG[6]=O3, NO2, CO, PAN, HNO3, H2O2;</p> <p>&lt; (CALC)</p>	<p>CALC, 模拟计算: VOC初始浓度 (ppmC) ; NOX初始浓度 (ppm) ; CO初始浓度 (ppm) ; PRINT [CONC] 输出每种物种的小时浓度 AVG[7个物种]输出最大小时平均浓度和相应时间</p>	VOC、NOX、CO 等质量数据同 MASS 中的数据
8	<p>EKMA &gt;</p> <p>BASE = O3 = 0.17, RATIO = 10., CO = 1.0; FUTURE = DELNOX = -10, DELCO = -35;</p> <p>&lt; (EKMA)</p>	<p>EKMA, 计算 VOC 削减比例 BASE, 基准年的数据: O3 的浓度 (ppm) VOC/NOX 的比率(ppmC/ppm) CO 初始浓度 (ppm) FUTURE, 规划年的数据: DELNOX, NOX 削减率 DELCO, CO 削减率</p> <p>注: 有样例中规划年需要输入混合层顶的数据和传输到地面的数据, 不输入的话, 缺省为基准年的数据</p>	<p>给出规划年 NOX、CO 削减率, 获得规划年 VOC 削减比例</p> <p>初始浓度同 MASS 中的数据</p> <p>程序中 O3 达标按 0.12ppm 计算的</p>
9	<p>ISOP&gt;</p> <p>VOCMAX = 2.0; NOXMAX = 0.28; CO = 1.0; PLOT = O3, NO2, CO, PAN, HNO3, H2O2;</p> <p>&lt; (ISOP)</p>	<p>ISOP, 计算等值线 VOCMAX, 绘制VOC等值线的最大值; NOXMAX, 绘制NOX等值线的最大值; CO, 初始浓度; PLOT, 输出各物种的浓度, 形成test. ISO文件;</p>	初始浓度同 MASS 中的数据

	END.		
10	运行 ISOPLLOT, 见前文 <a href="#">第四步</a>		

至此，恭喜你，你已经成为 OZIPR 的行家里手，可以混饭吃了。

## 四、OZIPR 模拟方法的不确定性

讲到科学都要说说不确定性，OZIPR 模型也存在一些限制，即化学机理、箱体模型、气象数据等。

在化学机理方面，一是实验数据比较少，二是机理中没有包括含氧碳氢化合物的反应，如醇类、醚类和酯类。

模型方面，采用的是箱式模型，假设箱子内的浓度是均匀分布的，为了减少不确定性，建议研究区域不超过县（市、区）的范围。OZIPR 模型是光化学模型，因此夜间条件在光化学模型中很难体现。

# 附录 A 混合层厚度的确定

当大气稳定度为 A, B, C 和 D 时:

$$h = a_s U_{10} / f \quad (\text{A1})$$

当大气稳定度为 E 和 F 时:

$$h = b_s \sqrt{U_{10} / f} \quad (\text{A2})$$

$$f = 2\Omega \sin\varphi \quad (\text{A3})$$

式中:  $h$ ——混合层厚度 (E, F 时指近地层厚度), m;

$U_{10}$ ——10 m 高度处平均风速, m/s; 大于 6 m/s 时取为 6 m/s;

$a_s, b_s$ ——混合层系数, 见表 A1;

$f$ ——地转参数;

$\Omega$ ——地转角速度, 取为  $7.29 \times 10^{-5}$  rad/s;

$\varphi$ ——地理纬度, deg。

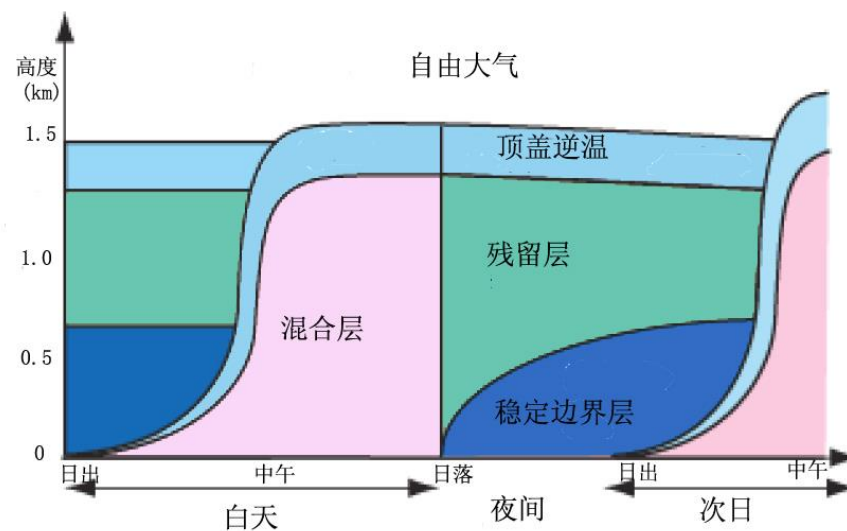
表 A1 我国各地区  $a_s$  和  $b_s$  值

地区	$a_s$				$b_s$	
	A	B	C	D	E	F
新疆 西藏 青海	0.090	0.067	0.041	0.031	1.66	0.70

黑龙江 吉林 辽宁 内蒙古 北京 天津 河北 河南 山东 山西 陕西（秦岭以北） 宁夏 甘肃（渭河以北）	0.073	0.060	0.041	0.019	1.66	0.70
上海 广东 广西 湖南 湖北 江苏 浙江 安徽 海南 台湾 福建 江西	0.056	0.029	0.020	0.012	1.66	0.70
云南 贵州 四川 甘肃（渭河以 南） 陕西（秦岭以南）	0.073	0.048	0.031	0.022	1.66	0.70

注：①A, B, C, D, E 和 F 定义见附录 B。

②静风区各类稳定度的  $a_s$  和  $b_s$  可取表中的最大值。



混合层示意图

## 附录 B 大气稳定度分级

当使用常规气象资料时，大气稳定度等级可采用修订的帕斯奎尔（Pasquill）稳定度分级法（简记 P.S），分为强不稳定、不稳定、弱不稳定、中性、较稳定和稳定六级。它们分别表示为 A，B，C，D，E，F。确定等级时首先由云量与太阳高度角按表 B1 查出太阳辐射等级数，再由太阳辐射等级数与地面风速按表 B2 查找稳定度等级。

表 B1 太阳辐射等级数

云量, 1/10	太阳辐射等级数				
	夜间	$h_0 \leq 15^\circ$	$15^\circ < h_0 \leq 35^\circ$	$35^\circ < h_0 \leq 65^\circ$	$h_0 > 65^\circ$
总云量/低云量					
$\leq 4/\leq 4$	-2	-1	+1	+2	+3
$5 \sim 7/\leq 4$	-1	0	+1	+2	+3
$\geq 8/\leq 4$	-1	0	0	+1	+1
$\geq 5/5 \sim 7$	0	0	0	0	+1
$\geq 8/\geq 8$	0	0	0	0	0

注：云量（全天空十分制）观测规则与中央气象局（即现国家气象局）编定的《地面气象观测规范》相同。

表 B2 大气稳定度的等级

地面风速, m/s	太阳辐射等级					
	+3	+2	+1	0	-1	-2
$\leq 1.9$	A	A~B	B	D	E	F
$2 \sim 2.9$	A~B	B	C	D	E	F
$3 \sim 4.9$	B	B~C	C	D	D	E
$5 \sim 5.9$	C	C~D	D	D	D	D
$\geq 6$	D	D	D	D	D	D

注：地面风速（m/s）系指距地面 10 m 高度处 10 min 平均风速，如使用气象台（站）资料，其观测规则与中央气象局编定的《地面气象观测规范》相同。

太阳高度角  $h_0$  使用下式计算：

$$h_0 = \arcsin[\sin\varphi\sin\sigma + \cos\varphi\cos\sigma\cos(15t + \lambda - 300)] \quad (\text{B1})$$

式中： $h_0$ ——太阳高度角，deg；

$\varphi$ ——当地纬度，deg；

$\lambda$ ——当地经度，deg；

$t$ ——进行观测时的北京时间；

$\sigma$ ——太阳倾角，deg，可按下式计算：

$$\sigma = [0.006918 - 0.39912 \cos \vartheta_0 + 0.070257 \sin \vartheta_0 - 0.006758 \cos 2\vartheta_0 + 0.000907 \sin 2\vartheta_0 - 0.002697 \cos 3\vartheta_0 + 0.001480 \sin 3\vartheta_0] 180/\pi \quad (\text{B2})$$

式中： $\vartheta_0$ —— $360d_n/365$ ，deg；

$d_n$ ——一年中日期序数，0，1，2，…，364。

生态环境部环境工程评估中心

国家环境保护环境影响评价数值模拟重点实验室

李时蓓 首席研究员

Shibeilee@outlook.com

2021年7月