

参赛密码 _____

(由组委会填写)



第十届华为杯全国研究生数学建模竞赛

题 目 PM2.5 相关问题研究

摘 要：

本文以西安市、武汉市的 PM2.5 情况为主要研究对象，按照题目要求，建立了 AQI 基本指标间的相关分析模型，讨论了 PM2.5 与 TSP 的相关关系，研究了西安市 PM2.5 的时空分布规律和污染评估，刻画了 PM2.5 的发生演变规律，构建了紧急情况下 PM2.5 扩散预测模型，提出了 PM2.5 的减排治理计划，并对治理 PM2.5 的投入经费进行了优化。

本文主要完成的工作有：

I 建立了基于多元回归分析的 AQI 指标相关性模型。首先对西安市 AQI 基本指标进行了统计分析，初步得到各指标之间的相关关系；然后利用多元线性回归模型，通过 F 检验、T 检验、 R^2 检验等方式进一步确定各指标的相关性。最后将其中四个指标数据设为控制变量，分别得到 PM2.5 与各个指标的偏相关关系。结论是：西安市 PM2.5 与 SO_2 、 NO_2 ，PM10，CO 具有显著的相关性，而 PM2.5 与 O_3 基本独立。

II 研究了 PM2.5 与 AQI 基本检测指标以外成分要素之间的关系。首先利用北京市 PM2.5 与 TSP 相关数据，通过时间序列分析定性探讨它们之间的关系，然后利用统计方法对它们进行相关性分析，得到它们之间的相关系数为 0.409，置信度为 98%，最后通过比较真实数据和一元回归曲线，验证了结论的正确性。

III 研究了 PM2.5 的时空分布规律和地区污染评估。首先描述了西安市 PM2.5 浓度随时间、空间的变化情况，发现西安市 PM2.5 浓度具有明显的季节性，冬季浓度最大，夏季浓度最小，而非城区、非工业区的 PM2.5 浓度低于城区、工业区的 PM2.5 浓度。然后分别以首要污染物观测数据的平均值和最大值计算 13 个监测站所在地区的空气质量分指数，对各个地区污染情况进行评估。结论是：1~3 月 12 个监测站所在地区为重度污染，1 个监测站所在地区为严重污染。

IV 建立了基于层次分析法的 PM2.5 发生规律多因素回归模型。首先对影响 PM2.5 发生的因素进行分析，并构建相关指标体系，其次利用 AHP 方法得到各指标对 PM2.5 的影响程度。然后利用所给数据和补充，对 PM2.5 浓度进行多因素线性回归建模，最后对 PM2.5 浓度进行预测。结果表明，90%的预测数据与真实数据误差不超过 10 个浓度单位，模型与实际较为相符。

V 研究了结构网格下基于偏微分方程的 PM2.5 扩散模型。首先采用修正的高斯模型描述 PM2.5 的演变态势，其次引入结构网格下求解偏微分方程数值迭代方法，将西安市 13 个监测站映射到网格节点上，并对湿度、风速和季节等影响因素进行离散化，通过数值迭代的方法进行仿真研究，并采用西安市 1-2 月的数据进行了对比与误差分析，验证了模型的有效性。

VI 建立了修正多因素信息系数的高斯烟羽扩散预测模型。首先忽略气象等因素，对 PM2.5 的自由扩散进行分析，其次在此基础上结合西安有关资料数据，得到高斯烟羽扩散基本模型。然后进一步考虑地面反射、地面粗糙度、气象等资料，对该基本模型进行修正并求解，最后依据模型对西安地区 PM2.5 突发情况进行仿真，结果表明风速、风向、降雨对 PM2.5 的扩散具有较大影响，并给出污染以及安全区域的分析。

VII 构建了边际利益最优条件下的减排指标优化模型。首先利用 2013 年武汉市的大气空气质量监测数据，分析其他污染物与首要污染物 PM2.5 的相关性，确定减排治理的污染源，在确定主要污染源贡献度的基础上建立了基于边际效益理论的优化模型，并对武汉市 2014-2018 年的减排目标进行了优化求解，给出了治理计划与减排指标。

VIII 建立了基于变约束条件的二次规划费用优化模型。首先根据相应减排措施的减排潜力和费效比对减排措施进行了聚类分析，在治理指标给定的情况下求出了综合治理与专项治理的局部最优解，并将其和数学意义上的全局最优解进行对比，说明了该解的合理性以及全局最优解的实际不可行性。

关键词：回归分析；偏相关；时空分布；AHP；结构网格

目 录

一、问题重述	5
二、问题分析	5
三、模型的建立与求解	7
3.1 问题一解答	7
3.1.1 符号说明	7
3.1.2 模型假设	7
3.1.3 基于多元回归分析的 AQI 指标相关性模型	7
3.1.3.1 建模分析	7
3.1.3.2 模型建立与求解	8
3.1.3.3 模型验证	13
3.1.4 北京地区 PM2.5 与 TSP 含量相关度分析	14
3.2 问题二解答	16
3.2.1 符号说明	16
3.2.2 西安地区 PM2.5 的时空分布规律及污染评估	16
3.2.2.1 西安市 PM2.5 浓度的时间分布	16
3.2.2.2 西安市 PM2.5 浓度的空间分布	18
3.2.2.3 分区污染评估	21
3.2.3 基于层次分析法的 PM2.5 发生规律多因素回归分析	23
3.2.3.1 模型假设	23
3.2.3.2 建模分析	23
3.2.3.3 模型建立与求解	24
3.2.3.4 模型验证	25
3.2.4 结构网格下基于偏微分方程的高斯修正扩散模型	26
3.2.4.1 模型假设	26
3.2.4.2 建模分析	26
3.2.4.3 模型建立	26
3.2.4.4 模型求解及验证	28
3.2.5 修正气象信息系数的高斯烟羽扩散预测模型	34
3.2.5.1 模型假设	34
3.2.5.2 建模分析	34
3.2.5.3 模型建立与求解	34
3.2.5.4 模型验证	41
3.2.6 PM2.5 演变规律探究	42

3.3 问题三解答	43
3.3.1 符号说明	43
3.3.2 模型假设	43
3.3.3 边际利益最优条件下的减排指标优化模型	43
3.3.3.1 建模分析	43
3.3.3.2 模型建立	44
3.3.3.3 模型求解	48
3.3.4 基于变约束条件的二次规划费用效益优化模型	50
3.3.4.1 建模分析	50
3.3.4.2 模型建立与求解	50
四、模型评价	53
参考文献	54

一、问题重述

随着国民经济的不断发展，我国人民对生活环境、生活质量的要求越来越高。近年来，雾霾、扬沙等恶劣天气在我国各个城市时有出现，空气质量问题也受到了政府、环境保护部门和全国人民的关注。

在各类大气污染物中，PM_{2.5}会对呼吸系统和心血管系统造成伤害，包括呼吸道受刺激、咳嗽、呼吸困难、降低肺功能、加重哮喘、心律失常、心肺病患者的过早死等。为此，有必要对 PM_{2.5} 相关因素、分布演变、控制管理等方面进行研究，为有关部门的决策、治理提供理论依据。结合所给资料，需要解决以下问题：

(一) PM_{2.5} 的相关因素分析

1. 建立 AQI 各指标之间的相关、独立性分析模型；
2. 分析 PM_{2.5} 与 AQI 基本监测指标以外成分要素的关系；

(二) PM_{2.5} 的分布与演变及应急处理

1. 探求 PM_{2.5} 的时空分布规律和污染评估方法；
2. 刻画 PM_{2.5} 的发生规律的模型；
3. 构造 PM_{2.5} 的演变(扩散、衰减)模型；
4. 建立紧急情况下 PM_{2.5} 的预测模型；
5. 根据以上模型探究 PM_{2.5} 分布、发生、演变的一般规律；

(三) 空气质量的控制管理

1. 制定治理 PM_{2.5} 的可行性计划，并根据要求给出治理指标；
2. 建立减排措施费用效益优化模型。

二、问题分析

本文以西安市、武汉市、北京市 PM_{2.5} 为主要研究对象，根据题目中所给资料和自查资料，做了 8 个方面的工作：建立 AQI 基本指标间的相关分析模型，讨论 PM_{2.5} 与 TSP 的相关关系，研究西安市 PM_{2.5} 的时空分布规律和污染评估，刻画 PM_{2.5} 的发生演变规律，构建紧急情况下 PM_{2.5} 扩散预测模型，提出 PM_{2.5} 的减排治理计划，并对治理 PM_{2.5} 的投入经费进行优化。

下面对本文所需要解决的 8 个问题进行分析：

(1) PM_{2.5} 与 AQI 其它指标之间的相关、独立性分析模型。由于 PM_{2.5} 是我国环境监测的新指标，人们对 PM_{2.5} 与 AQI 其它指标之间关系还没有系统全面的认识。为此本文从各 AQI 指标的监测数值入手，首先利用统计方法对它们进行两两分析，初步得到各指标之间的相关性关系，然后利用线性回归模型对今年西安市 1 月~4 月的数据分析，通过 T 检验、F 检验、R²检验进一步确定各指标的相关性。最后，为排除各指标间的干扰，以回归分析为基础，以四个指标数据为控制变量，分别得到 PM_{2.5} 与其它指标之间的偏相关关系。

(2) PM_{2.5} 与 AQI 基本监测指标以外成分要素的关系分析。PM_{2.5} 的成分、来源较为复杂，为了全面分析 PM_{2.5}，还需对 PM_{2.5} 与监测指标以外的要素进行分析。为此搜集北京市的 PM_{2.5} 与 TSP 的有关数据，首先通过时间序列分析定性探讨它们之间的关系，然后利用统计方法对它们进行相关性定量分析，得到它们之间的相关系数以及置信度，最后通过比较测量数据与一元趋势线的关系，验证结论的正确性。

(3) PM_{2.5} 的时空分布规律和地区污染评估。研究 PM_{2.5} 的时空分布并对其进行污染评估是有效治理 PM_{2.5} 污染的重要基础。本文首先描述西安市 PM_{2.5} 浓度随时间的变化情况。其次利用谷歌地图测得西安市 13 个监测点之间的距离，得到它们的坐标值，并绘制 PM_{2.5} 浓度随地区变化情况，得出该地区 PM_{2.5} 的时空变化规律。然后分别以首要污染物观测数据平均值和最大值计算空气质量分指数，对 13 个地区的空气污染情况进行评估，最后对两种评估方法进行对比。

(4) PM_{2.5} 发生规律模型。PM_{2.5} 是衡量空气质量的重要指标，了解其发生规律有利于对其有效控制、治理。然而在实际中，影响 PM_{2.5} 发生过程的因素有很多，而且它们之间的关系较为复杂。因此对这些因素进行分析，判断它们对 PM_{2.5} 发生过程的影响是建模的基础。为此，首先通过查阅资料构建影响 PM_{2.5} 发生过程的指标体系，其次用 AHP 方法得到各指标对 PM_{2.5} 发生过程的影响程度。然后以主要指标以及搜集的数据为变量，对 2013 年 5 月至 7 月的相关数据进行多因素线性回归分析，得到相关模型，最后对 PM_{2.5} 的浓度进行预测。

(5) PM_{2.5} 的演变规律模型。PM_{2.5} 扩散的动态分析与预测，涉及到湿度、风速、季节与扩散系数等因素，对于制定大气污染防治措施有着较强的指导性和针对性。因此，本文采用修正的高斯模型描述 PM_{2.5} 的发展态势。然后引入结构网格，利用偏微分方程数值求解迭代计算模型的解。结合题中所给出的数据，首先将西安市 13 个监测站映射到网格节点上，综合湿度、风速和季节因素进行离散化，并通过数值迭代的方法进行模拟仿真研究，以此来判断该市 PM_{2.5} 的扩散趋势。

(6) 突发情况下 PM_{2.5} 扩散的预测模型。在一些情形下，PM_{2.5} 的浓度可能会增至数倍，并持续排放。为了减轻突发情形下 PM_{2.5} 带来的危害，有必要建立能够准确预测 PM_{2.5} 扩散情况的模型。本文首先忽略气象因素，对 PM_{2.5} 的自由扩散进行分析，其次在此基础上结合西安有关数据资料，建立高斯烟羽扩散基本模型。然后进一步考虑地面反射、地面粗糙度、气象等因素，对该模型进行修正并求解。最后依据模型对西安地区 PM_{2.5} 突发情况进行仿真，给出污染以及安全区域的分析。

(7) 减排指标优化模型。大气污染防治减排涉及社会生活中多方面的因素，对国民经济其他行业的发展也有着重大的影响。本文首先以 2013 年武汉市的大气空气质量监测数据为原始数据，通过分析其他污染物与首要污染物 PM_{2.5} 的相关性，确定减排治理的污染源，在确定主要污染源贡献度的基础上基于边际效益理论建立了优化模型，并对武汉市 2014-2018 年的减排目标进行了优化求解，给出了专项治理计划。

(8) 基于变约束条件的二次规划费用优化模型。如何付出最小的代价完成既定的经济减排指标在实践过程中具有重要意义。本文首先对相应减排措施的减排潜力和费效比对减排措施进行了聚类分析,在治理指标给定的情况下求出了综合治理与专项治理的局部最优解,并对全局最优解的实际不可行性进行分析。

三、模型的建立与求解

3.1 问题一解答

3.1.1 符号说明

Y	回归分析因变量
x_i	预测因子, 其中 $i=1,2,\dots$
b_i	待估计参数, 其中 $i=1,2,\dots$
σ^2	正态分布方差
ε	服从正态分布 $N(0, \sigma^2)$ 的随机变量
R^2	模拟拟合程度
ξ	相对误差

3.1.2 模型假设

- (1) 所研究地区在一段时间内保持稳定, 没有地震、酸雨等自然灾害的发生。
- (2) 不考虑温度、气压、湿度等因素对 AQI 等指标的直接影响。
- (3) 环保部门对污染物的治理政策保持稳定。

3.1.3 基于多元回归分析的 AQI 指标相关性模型

3.1.3.1 建模分析

可吸入颗粒物 PM2.5 是我国大部分城市的主要空气污染物之一, 它粒径较小、表面积较大, 与粗颗粒物相比, 更容易富集有毒物质, 其质量浓度与人体健康密切相关, 同时, PM2.5 对大气能见度也有较大影响。因此, 对 PM2.5 的研究得到了越来越多的重视。

PM2.5 的分布、扩散以及对人体的影响与其来源、成分息息相关。但 PM2.5 的来源复杂, 其主要成分也较为复杂, 且由于我国缺乏长期的系统监测资料, 对其研究较为困难。有一种研究认为, AQI 监测指标中的二氧化硫、二氧化氮、一氧化碳是在一定环境下形成 PM2.5 前的主要气态物体。由此可见, 研究 PM2.5 与 AQI 其他指标之间的相关关系不仅可以促进对 PM2.5 的认识, 而且对今后的污染治理也有借鉴作用。

在生产和科学研究中, 常常会遇到多个变量处于一个过程之中, 它们是相互关联、相互制约的。人们通过各种事件, 发现变量之间的关系大致分成两类, 一种类型是各变量之间存在着完全确定的关系, 即函数关系; 另一种类型是各变量之间存在一定的

关系，但这种关系并不完全确定。回归分析就是处理这类不完全确定的变量之间的相关关系的有力工具。

回归分析不仅可以提供变量之间相关关系的数学表达式(经验公式)。利用概率统计的基础知识，对此关系进行分析，来判明所建立经验公式的有效性。而且还可以进行因素分析，对于共同影响一个变量的许多因素，找出哪些因素是显著的，哪些是不显著的。

多元线性模型的表达式为：

$$Y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \cdots + b_px_p + \varepsilon\sigma^2 \quad (1)$$

其中，自变量 x_1, x_2, \dots, x_p 为预测因子， y 为因变量， ε 是服从正态分布 $N(0, \sigma^2)$ 的随机变量， b_0, b_1, \dots, b_p 为待估计参数。可采用最小二乘法对 b_0, b_1, \dots, b_p 进行估计。线性回归方程通常采用模型拟合程度 R^2 ，方差分析（ F 检验）， T 检验进行分析验证。

(1).模拟拟合程度 R^2

R 为预测值与观测值的相关系数，可以表示模型对观测数据的解释程度，一般要求达到 0.85 以上。 R 的表达式如下：

$$R = \frac{\sum (y_i - Y)(Y_i - Y)}{\sqrt{\sum (y_i - Y)^2 (Y_i - y)^2}} \quad (2)$$

(2). 方差分析 (F 检验):

用以检验线性回归的整体显著性，即检验假设 $H_0: b_0=b_1=\dots=0$ 是否为真，由于：

$$F = \frac{\sum (Y_i - Y)^2 / P}{\sum (y_i - Y_i)^2 / (n - P - 1)} \sim F(n, n - P - 1) \quad (3)$$

若 $P\{F \geq F(p, n - p - 1)\} \leq a$ ，其中 a 为显著性水平(一般选择 0.05)，则拒绝 H ，即认为 $b_0 \sim b_p$ 不全为 0，回归方程有效。

(3) T 检验

用于检验线性回归中各个回归系数 b_p 的显著性，即检验 $H_a: b; 0$ 是否为真，由于：

$$T = \frac{b_i}{\sqrt{\frac{(y_i - Y_i)^2}{(n - P - 1)} \sum \sqrt{c_{ij}}}} \sim t(n - P - 1) \quad (4)$$

故当 $P\{|T| \geq t_{\frac{a}{2}}(n - p - 1)\} \leq a$ 时，回归系数 b_i 有效，其中 c_{ij} 为 X^T 主对角线上第 $i+1$ 个元素。

本节利用多元回归分析模型对西安市 PM2.5 与 AQI 中其它指标之间的相关与独立性进行研究。首先通过图形定性分析各指标中的关系；其次以 PM2.5 为因变量建立多元线性回归方程，并利用回归分析定量研究 AQI 各个指标的相关、独立关系；再次利用偏相关分析进一步研究 PM2.5 与 AQI 其它指标的关系；最后在回归检验的基础上求解方程，并进行模型检验。

3.1.3.2 模型建立与求解

利用附件 2 所给数据得到西安市 2013 年 1 月 1 日到 4 月 26 日(3 月 25 日 O_3 数据缺失, 将该天数据剔除)的每天平均 $PM_{2.5}$ 、 SO_2 、 NO_2 、 PM_{10} 、 CO 、 O_3 情况, 如图 1 所示。

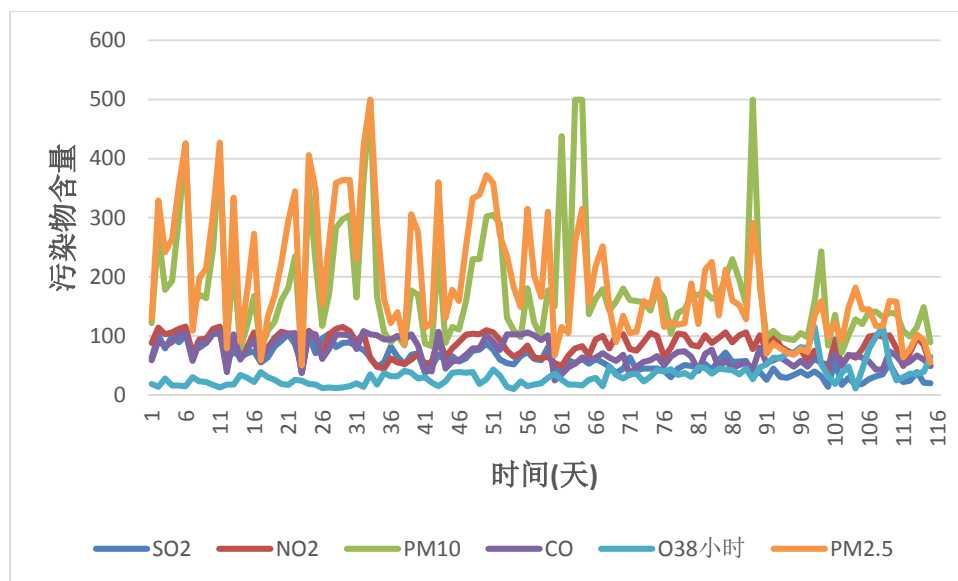


图 1 西安市区污染物随时间变化情况(2013 年 1 月 1 日至 4 月 26 日)

从图中可以定性看出西安市 $PM_{2.5}$ 与其它指标具有一定的相关性。下面利用回归分析模型定量研究各指标之间关系。

(一)多元线性回归模型及其检验

设 $PM_{2.5}$ 含量为因变量 y , 预测因子 SO_2 、 NO_2 、 PM_{10} 、 CO 、 O_3 分别为 x_1 , x_2 , x_3 , x_4 , x_5 , 从附件 2 获得 2013 年 1 月 1 日到 4 月 9 日(剔除 3 月 25 日数据)的 115 个自变量、因变量的数值, 利用 SPSS20.0 的线性回归模块得到以下结果。

从表 1 看出, PM_{10} 和 CO 都与 $PM_{2.5}$ 有较大的相关性, 相关系数分别为 0.743 和 0.742, 而 SO_2 、 NO_2 、 O_3 与 $PM_{2.5}$ 的相关系数分别为 0.674, 0.519, -0.466。臭氧与 AQI 其它指标均为负相关, 且与 NO_2 相关性较小, 仅为 -0.094。

(1) 相关性分析

表 1 相关性分析结果

		pm25	so2	no2	pm10	co	o3
pm25	Pearson 相关性	1	.674**	.519**	.743**	.742**	-.466**
	显著性 (双侧)		.000	.000	.000	.000	.000
	N	115	115	115	115	115	115
so2	Pearson 相关性	.674**	1	.495**	.385**	.647**	-.536**
	显著性 (双侧)	.000		.000	.000	.000	.000
	N	115	115	115	115	115	115
no2	Pearson 相关性	.519**	.495**	1	.382**	.376**	-.094
	显著性 (双侧)	.000	.000		.000	.000	.320
	N	115	115	115	115	115	115
pm10	Pearson 相关性	.743**	.385**	.382**	1	.299**	-.293**
	显著性 (双侧)	.000	.000	.000		.001	.001
	N	115	115	115	115	115	115
co	Pearson 相关性	.742**	.647**	.376**	.299**	1	-.455**
	显著性 (双侧)	.000	.000	.000	.001		.000
	N	115	115	115	115	115	115
o3	Pearson 相关性	-.466**	-.536**	-.094	-.293**	-.455**	1
	显著性 (双侧)	.000	.000	.320	.001	.000	
	N	115	115	115	115	115	115

** .在 .01 水平 (双侧) 上显著相关。

(2) 模型拟合情况 (R^2 检验)

表 2 模型拟合结果

模型	R	R 方	调整 R 方	标准 估计的误差
1	.931 ^a	.867	.861	38.42667

从拟合情况看, 线性回归分析中预测值和观测值的相关系数为 0.931, 模型能够解释 86.1% 的观测数据。

(3) 方差分析 (F 检验)

表3 方差分析结果

模型	平方和	df	均方	F	Sig.
1 回归	1048852.570	5	209770.514	142.062	.000 ^b
残差	160950.352	109	1476.609		
总计	1209802.922	114			

从方差分析结果可以看出, 总体来看, PM_{2.5} 与 SO₂、NO₂、PM₁₀、CO、O₃ 的线性相关性比较显著, 检验显著概率为 0, 故接受 F 检验。

(4) 回归系数检验

表 4 回归系数检验结果

模型	非标准化系数		标准系数	t	Sig.
	B	标准 误差	试用版		
(常量)	-119.918	20.750		-5.779	.000
so2	.507	.247	.111	2.050	.043
no2	.438	.217	.087	2.016	.046
pm10	.548	.042	.517	13.062	.000
co	2.173	.218	.467	9.954	.000
o3	-.178	.228	-.034	-.780	.437

a. 因变量: pm25

回归系数检验的数据表明，采用线性回归方法时，自变量系数 b_0, b_1, b_2, b_3 为 0 的概率分别为 0.043, 0.046, 0, 0，而 b_4 为 0 的概率为 0.437，大于通常要求的 0.05。这说明 O₃ 与 PM_{2.5} 的线性相关性不明显。

(二)偏相关分析

以上我们利用线性回归模型研究了 AQI 中 6 个指标的关系，从分析可以看出，SO₂、NO₂、PM₁₀、CO、O₃ 对 PM_{2.5} 均有一定的影响，因此得到的简单相关系数可能不能完全反映 PM_{2.5} 与其它指标两两之间的关系。

偏相关分析是在多元分析中，排除其它变量的影响，从而得到两个变量之间关系的方法，从某种程度来讲，得到的偏相关系数更能真实反映出两个变量的关系。下面利用 SPSS20.0 的偏相关分析模块分别研究 PM_{2.5} 与 SO₂、NO₂、PM₁₀、CO、O₃ 的关系。

(1)PM_{2.5} 与 SO₂ 的偏相关分析

将 NO₂、PM₁₀、CO、O₃ 设为控制变量，PM_{2.5} 与 SO₂ 的偏相关情况如表 5 所示。

表 5 PM_{2.5} 与 SO₂ 的偏相关分析结果

控制变量		pm25	so2
no2 & pm10 & co & o3	相关性	1.000	.193
	pm25 显著性（双侧）	.	.043
	df	0	109
	相关性	.193	1.000
	so2 显著性（双侧）	.043	.
	df	109	0

从表 5 看出，偏相关系数为 0 的概率为 0.043，小于显著性水平 0.05，因此 PM_{2.5} 与 SO₂ 的偏相关系数为 0.193。

(2) PM_{2.5} 与 NO₂ 的偏相关分析

将 SO₂、PM₁₀、CO、O₃ 设为控制变量，PM_{2.5} 与 NO₂ 的偏相关情况如表 6 所示。

表6 PM2.5与NO₂的偏相关分析结果

控制变量		pm25	no2
pm10 & co & o3 & so2	相关性	1.000	.190
	pm25 显著性（双侧）	.	.046
	df	0	109
	相关性	.190	1.000
	no2 显著性（双侧）	.046	.
	df	109	0

从表 6 看出，偏相关系数为 0 的概率为 0.046，小于显著性水平 0.05，因此 PM2.5 与 NO₂的偏相关系数为 0.190。

(3) PM2.5 与 PM10 的偏相关分析

将 SO₂、NO₂、CO、O₃ 设为控制变量，PM2.5 与 PM10 的偏相关情况如表 7 所示。

表7 PM2.5与PM10的偏相关分析

控制变量		pm25	pm10
co & o3 & so2 & no2	相关性	1.000	.781
	pm25 显著性（双侧）	.	.000
	df	0	109
	相关性	.781	1.000
	pm10 显著性（双侧）	.000	.
	df	109	0

从表 7 看出，偏相关系数为 0 的概率为 0，因此可以认为 PM2.5 与 PM10 的偏相关系数为 0.781。

(4) PM2.5 与 CO 的偏相关分析

将 SO₂、NO₂、PM10、O₃ 设为控制变量，PM2.5 与 CO 的偏相关情况如表 8 所示。

表 8 PM2.5 与 CO 的偏相关分析

控制变量		pm25	co
o3 & so2 & no2 & pm10	相关性	1.000	.690
	pm25 显著性（双侧）	.	.000
	df	0	109
	相关性	.690	1.000
	co 显著性（双侧）	.000	.
	df	109	0

从表 8 看出，偏相关系数为 0 的概率为 0，因此可以认为 PM2.5 与 CO 的偏相关系数为 0.69。

(5) PM2.5 与 O₃ 的偏相关分析

将 SO₂、NO₂、PM10、CO 设为控制变量，PM2.5 与 O₃ 的偏相关情况如表 9 所示。

表 9 PM2.5 与 O₃ 的偏相关分析

控制变量		pm25	o3
so2 & no2 & pm10 & co	相关性	1.000	-.074
	pm25 显著性（双侧）	.	.437
	df	0	109
	相关性	-.074	1.000
	o3 显著性（双侧）	.437	.
	df	109	0

从表 9 看出，偏相关系数为 0 的概率为 0.437，远大于显著性水平 0.05，因此可以认为 PM2.5 与 O₃ 较为独立。

根据以上分析，PM2.5 与 SO₂、NO₂、PM10、CO 均可认为相关，而与 O₃ 独立，因此将 O₃ 系数设为 0，求解以 SO₂、NO₂、PM10、CO 为自变量的多元线性回归方程，得到其表达式为：

$$y = -129.596 + 0.584x_1 + 0.39x_2 + 0.554x_3 + 2.205x_4 + \varepsilon \quad (5)$$

3.1.3.3 模型验证

我们利用所给数据，根据以上线性回归模型，对今年 1 月 1 日至 15 日 15 天的 PM2.5 情况进行验证，即将模型所得结果同实际 PM2.5 情况进行比较。比较结果如图 2 所示。

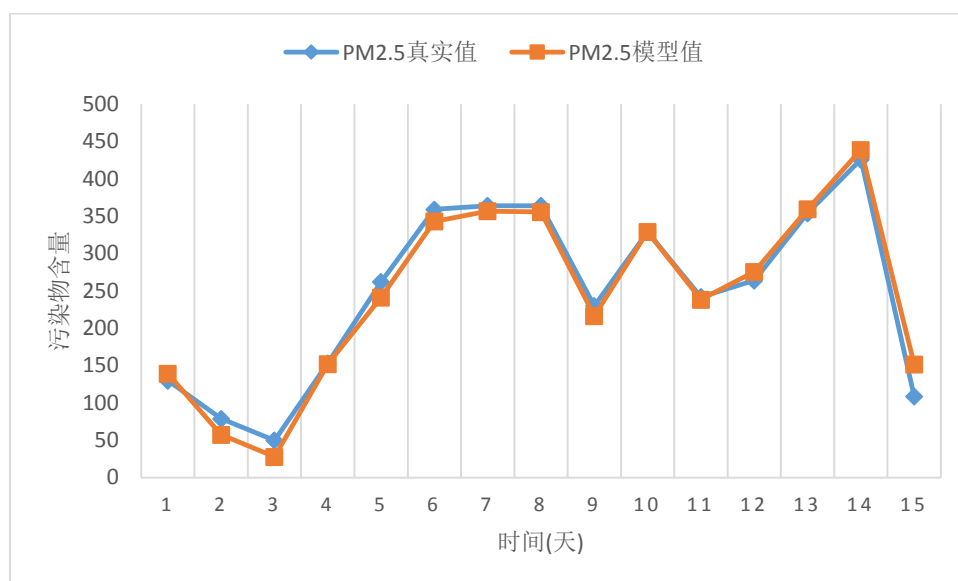


图 2 PM2.5 真实值与模型值比较

从图中我们可以直观地看出该时间段内 PM2.5 模型值与真实值较为吻合。定义相对误差的绝对值 $|\xi|$ 为：

$$|\xi| = \frac{|y_{\text{模}} - y_{\text{实}}|}{y_{\text{实}}} \times 100\% \quad (6)$$

计算结果如表 10 所示：

表 10 相对误差绝对值

日期	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
$ \xi $	7.1%	27.1%	43.8%	0.7%	7.9%	4.4%	2.0%	2.3%	5.9%	0.1%	1.5%	4.4%	1.5%	3.0%	39.2%

从表 10 可以看出，在验证的 15 天内，大多数 PM2.5 真实值与模型值的相对误差在 10 %之内，这说明模型可以较为真实地反映 PM2.5 值的大小。而其中 3 天的 $|\xi|$ 远大于 10，这与回归检验时分析得出的“模型能够解释约 86%的数据”较为相符。同时，以上仿真分析也验证了 AQI 各指标相关性讨论结果的合理性。事实上，若想增加模型的准确度，还需要进一步分析 PM2.5 与其它相关指标的关系。

3.1.4 北京地区 PM2.5 与 TSP 含量相关度分析

3.1.3 节我们利用多元回归模型分析了 AQI 指标之间的相关与独立性，并以 PM2.5 为因变量建立了线性回归方程。然而由于影响 PM2.5 浓度的因素较多，上述线性回归方程只能解释约 86%的观测数据。因此还需寻找与 PM2.5 相关的其它要素，以使模型更加接近实际。

TSP 是英文 total suspended particulate 的缩写，即总悬浮微粒，又称总悬浮颗粒物，是指用标准大容量颗粒采集器在滤膜上收集到的颗粒物的总质量。环境监测中心站的监测数据以及相关文献表明，TSP 是大气主要污染物之一，与 PM2.5 具有一定的相关性。然而缺乏同时间同地点的 TSP 监测数值，本节利用文献[1]的监测数据来研究 TSP 与 PM2.5 的关系。

(一) 数据来源及采集

如文献[1]所述，采样点位于北京西二环与西三环之间车公庄空气质量监测站附近，利用美国 Aerosol Dynamics 公司生产的三通道小流量 PM2.5 化学物种采样器进行测量。采样器布置在距地面约 3m 高的屋顶上，采样进气口距地面约 4.5m；采样流量为 0.4L/min。每批样本的累计采集的时间为一周。样品质量的称量采用美国 Gelman 公司生产的聚四氟乙烯薄膜滤膜。

通过采样、分析、质量控制，得到 1999 年 11 月~2000 年 7 月的 PM2.5 与 TSP 浓度。剔除无效数据，从而得到 32 组有效数据，见附件。

(二) PM2.5 与 TSP 相关度分析

图 3 为北京车公庄 PM2.5、TSP 随时间的变化情况。

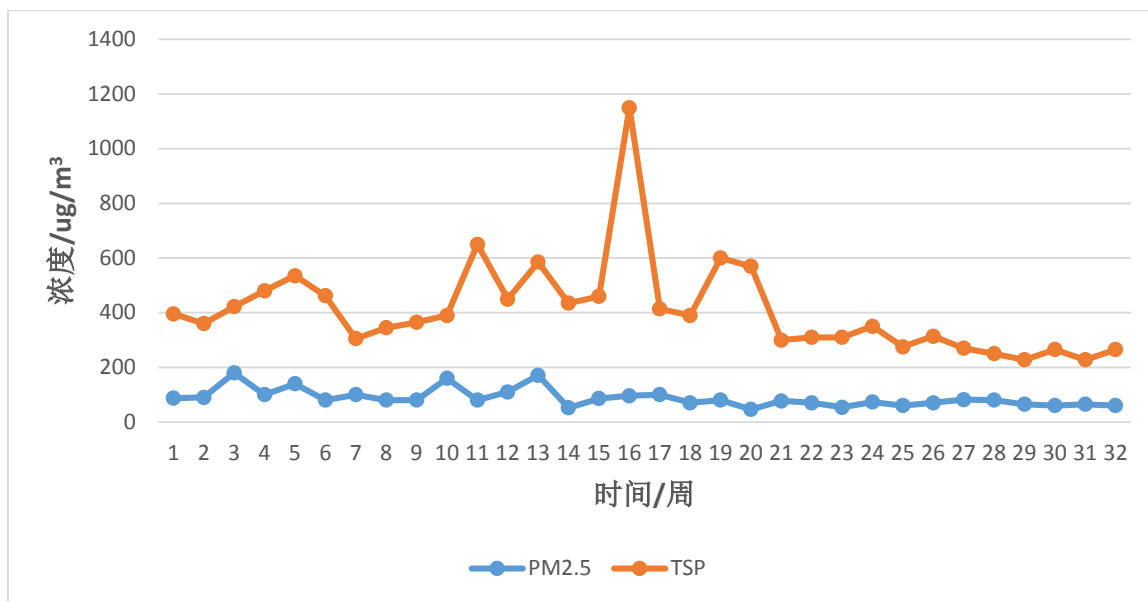


图 3 车公庄污染气体变化情况

从图中可以直观看出，PM2.5 与 TSP 具有一定的相关性。下面利用 SPSS20.0 的相关性分析模块对其进行分析，结果如表 11 所示。

表 11 PM2.5 与 TSP 相关性分析结果

		PM2.5	TSP
PM2.5	Pearson 相关性	1	.409*
	显著性（双侧）		.020
	N	32	32
TSP	Pearson 相关性	.409*	1
	显著性（双侧）	.020	
	N	32	32

*. 在 0.05 水平（双侧）上显著相关。

从表 11 可以看出，PM2.5 与 TSP 的相关系数为 0.409，且相关系数为 0 的概率为 0.02，小于显著性水平 0.05。

以 PM2.5 为因变量，TSP 为自变量，得到线性回归方程为：

$$y=0.131x+44.128+\varepsilon \quad (7)$$

式中，y 为 PM2.5 浓度，x 为 TSP 浓度。

PM2.5、TSP 真实值与回归曲线对比如图 4 所示。

从图中可以看出，真实点基本均匀分布在回归曲线两侧，但约 55% 的点离曲线较远，这证明了 PM2.5 与 TSP 存在一定的相关关系，两者之间相关系数为 0.409 的结论较为合理。此外，相关分析和回归曲线对比也从侧面说明了 PM2.5 的复杂性。

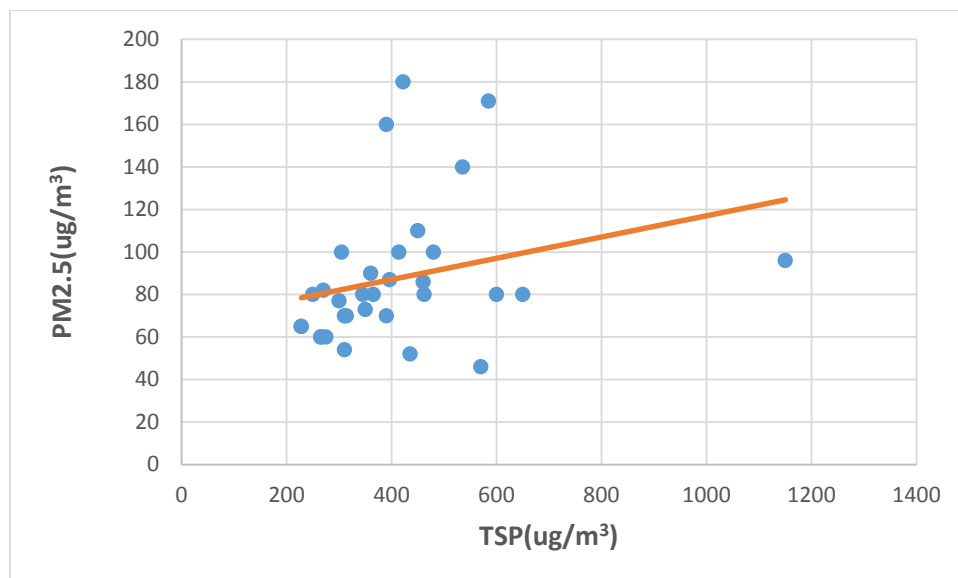


图4 PM2.5、TSP线性回归曲线与真实值

综上所述，PM2.5成分复杂，来源广泛，它与SO₂、NO₂、PM10、CO、TSP均存在一定的相关性，而和O₃基本独立。利用多元回归模型可以较好地反映各项指标之间的关系，并能够对感兴趣的指标进行验证和预测。若想进一步提高模型的准确度，不仅需要找到对感兴趣指标影响较大的因素，还需要充足的监测数据作为保证。

3.2 问题二解答

3.2.1 符号说明

C	PM2.5 浓度
Q	单位时间内的 PM2.5 排放量
H_e	有效源高度
L	建筑物边界与污染源距离
u	风速
I	湿度
α	地面对 PM2.5 的反射系数
β	建筑物边界对污染物的反射系数
σ_y	垂直于主导风向的横向扩散系数
σ_z	铅直扩散系数
D	扩散系数

3.2.2 西安地区 PM2.5 的时空分布规律及污染评估

3.2.2.1 西安市 PM2.5 浓度的时间分布

首先将附件2中PM2.5的数据进行补充，得到13个监测点与全市在2013-01-01至2013-09-20的PM2.5浓度值（数据来源：西安市环境保护局官方网站）

<http://www.xaepb.gov.cn/ptl/index.html>), 从而得到全市平均PM2.5浓度的数据列, 研究借助Matlab软件, 得到PM2.5浓度随时间(2013-01-01至2013-09-20)的变化情况如图5所示。

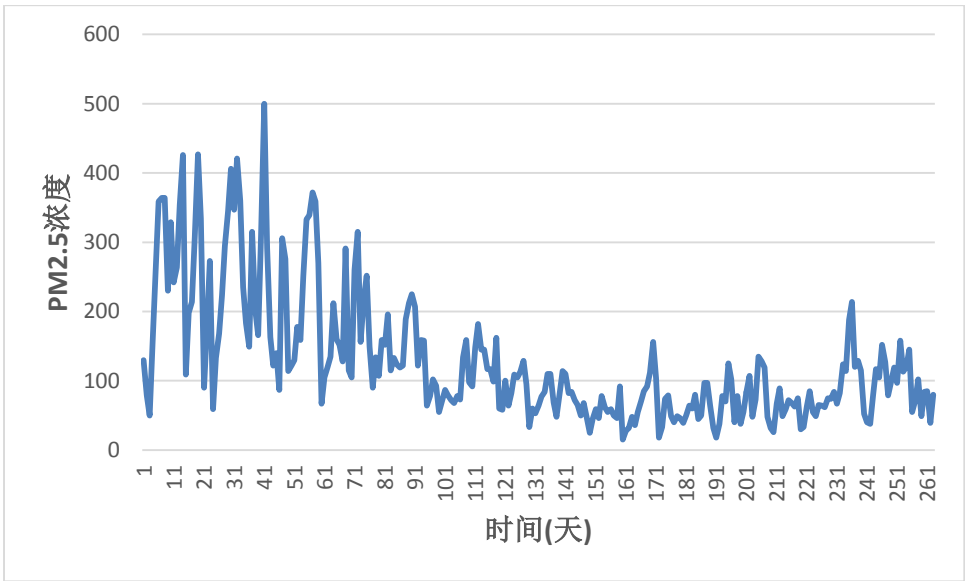


图5 西安市全市平均PM2.5的时间分布图

由图5可知, 总体来看, 西安市全市平均PM2.5浓度在1月份和2月份最大, 其次是3月、4月、8月、9月。

以下以高压开关厂和阎良为例, 分析测量点周围地区PM2.5浓度的时间分布, 结果如图6所示。

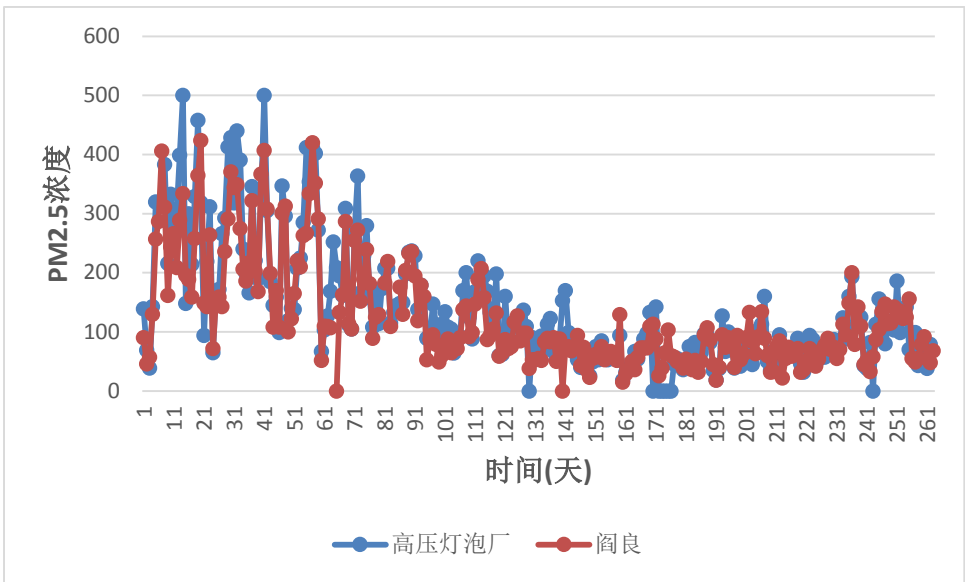


图6 高压开关厂与阎良区PM2.5的时间分布图

由图6可知, 对于高压开关厂和阎良等测量点周围的地区而言, PM2.5浓度也是在1月份和2月份最大, 与全市平均PM2.5的变化规律基本一致。总体来看, 在同一时间阎良区PM2.5浓度略低于高压开关厂的PM2.5浓度, 这说明非城区的空气质量略优于工业区的空气质量。

此外，从图5、图6还可以看出，PM2.5的变化明显具有季节性，冬季PM2.5的浓度最高，春季、秋季其次，夏季的PM2.5浓度最低。一部分原因是因为冬季气压低，气温低，不利于污染物的衰减。

3.2.2.2 西安市 PM2.5 浓度的空间分布

为了研究西安市PM2.5浓度的空间分布，对13个监测站进行编号，令“N₁”表示“高压开关厂”，“N₂”表示“兴庆小区”，“N₃”表示“纺织城”，“N₄”表示“小寨”，“N₅”表示“市人民体育场”，“N₆”表示“高新西区”，“N₇”表示“经开区”，“N₈”表示“长安区”，“N₉”表示“阎良区”，“N₁₀”表示“临潼区”，“N₁₁”表示“曲江文化集团”，“N₁₂”表示“广运潭”，“N₁₃”表示“草滩”。借助Google地图，测量西安市13个测量点之间的距离，如表12所示。

表12 西安市13个监测点之间的距离

距离	N ₁	N ₂	N ₃	N ₄	N ₅	N ₆	N ₇	N ₈	N ₉	N ₁₀	N ₁₁	N ₁₂	N ₁₃
N ₁	0	11.37	18.06	10.17	8.59	7.94	7.9	15.33	51.73	32.79	12.19	17.09	11.53
N ₂	11.37	0	6.96	5.68	3.19	10.70	9.26	13.92	48.77	23.75	5.12	9.01	17.87
N ₃	18.06	6.96	0	11.99	9.69	17.68	13.53	19.08	45.7	17.45	10.51	6.15	22.01
N ₄	10.17	5.68	11.99	0	5.17	5.98	12.06	8.25	54.22	29.17	2.2	14.68	19.77
N ₅	8.59	3.19	9.69	5.17	0	8.95	22.49	13.87	49.04	25.74	5.86	10.45	15.53
N ₆	7.94	10.70	17.68	5.98	8.95	0	13.59	7.26	57.52	34.62	8.06	19.43	19.4
N ₇	7.89	9.26	13.53	12.06	22.49	13.59	0	19.51	44.14	25.53	13.14	10.41	8.55
N ₈	15.33	13.92	19.08	8.25	13.87	7.26	19.51	0	62.7	36.49	8.92	22.84	26.14
N ₉	51.73	48.77	45.70	54.22	49.04	57.52	44.14	62.7	0	33.05	57.04	40.2	40.39
N ₁₀	32.79	23.75	17.45	29.17	25.74	34.62	25.53	36.49	33.05	0	30.47	15.6	49.21
N ₁₁	12.19	5.12	10.51	2.2	5.86	8.06	13.14	8.92	57.04	30.47	0	13.91	21.14
N ₁₂	17.09	9.01	6.15	14.68	10.45	19.43	10.41	22.84	40.19	15.6	13.91	0	17.73
N ₁₃	11.53	17.87	22.01	19.77	15.53	19.40	8.55	26.14	40.39	49.21	21.12	17.73	0

根据上表，以阎良区测量点为原点，并设临潼区测量点位于X轴上，然后利用相交圆法确定广运潭测量点，其方法如图7所示。

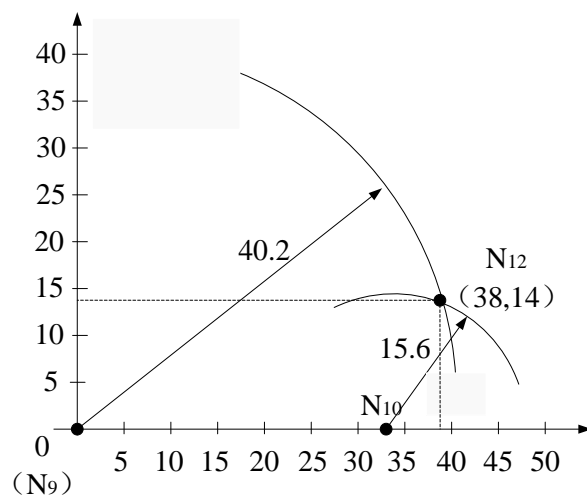


图7 相交圆法确定广运潭测量点示意图

利用同样的方法确定其它10个测量点的坐标，得到13个测量点的平面坐标图，如图8所示。

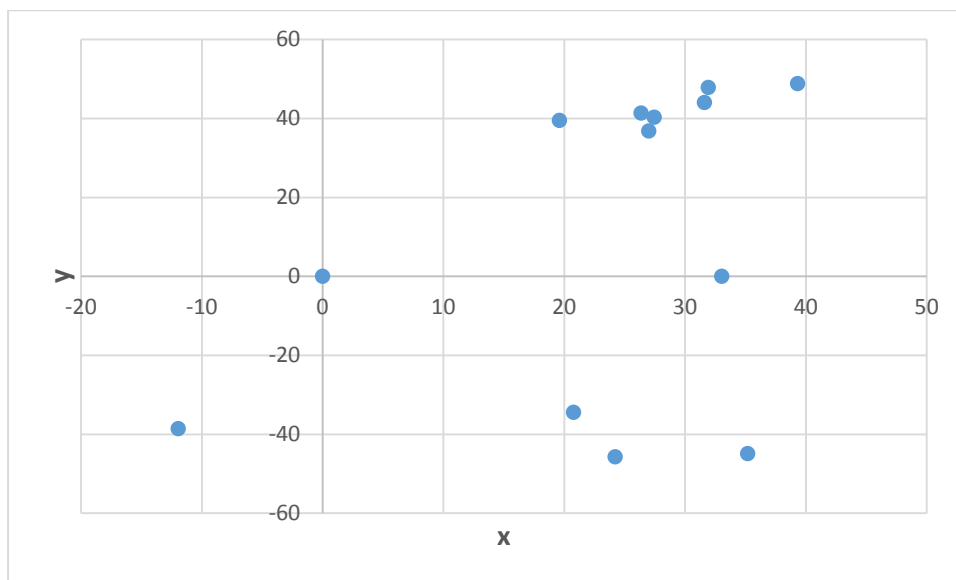


图8 西安市13个测量点的平面坐标图

由于环境保护部《环境空气质量标准》中数据有效性的最低要求部分规定PM2.5“每月至少有27个日平均浓度值（二月至少有25个日平均浓度值）”，鉴于2013年4月只有26个日平均浓度值，不满足数据有效性的最低要求，在计算时不予考虑，为此只有1月、2月和3月的数据有效。根据附件2，分别计算从3个月的13个测量点PM2.5的月平均值，如表13所示。

对于每组月平均值，利用Matlab2013a软件，绘制西安市13个测量点PM2.5浓度随地区变化情况，如图9~图11所示。

表13 西安市13个测量点PM2.5浓度的月平均值

测量点 编号	1月份	2月份	3月份	测量点 编号	1月份	2月份	3月份
N1	263	269	181	N8	213	241	155
N2	239	260	161	N9	226	248	165
N3	236	233	178	N10	232	218	145
N4	221	235	140	N11	274	196	154
N5	250	289	172	N12	242	258	167
N6	272	265	170	N13	286	260	174
N7	279	217	150				

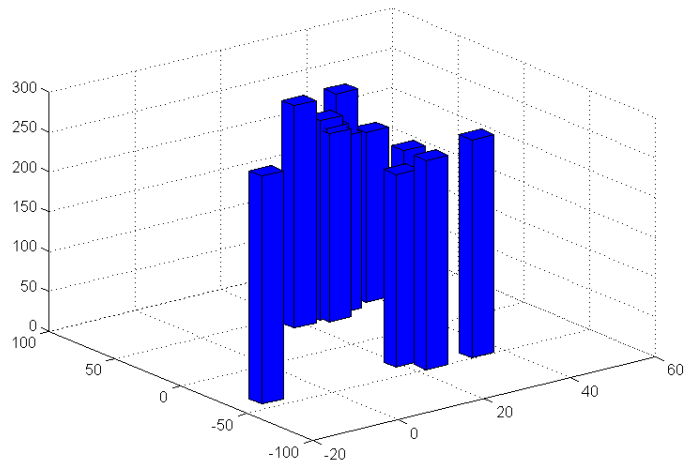


图9 1月份西安市13个测量点PM2.5情况

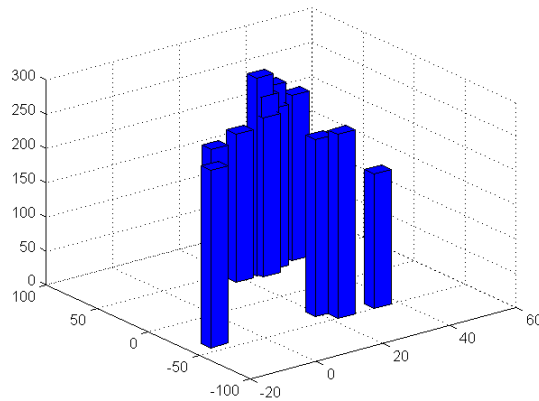


图10 2月份西安市13个测量点PM2.5情况

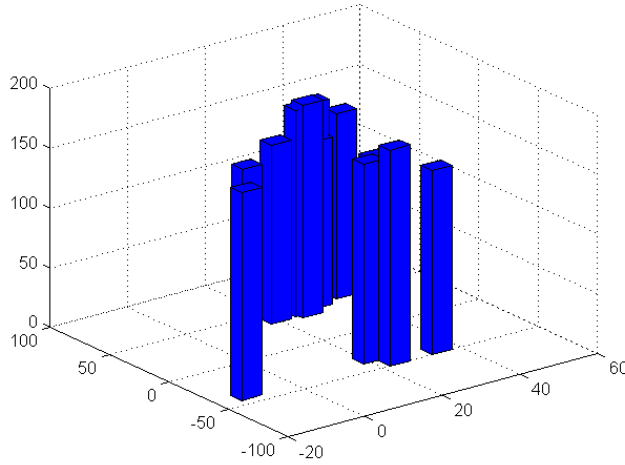


图11 3月份西安市13个测量点PM2.5情况

由图9~图11可知，该地区内PM2.5的空间分布具有如下规律：

- ① 一个时间段内某一监测点PM2.5浓度占总PM2.5浓度的比例大体相同；
- ② 工业区PM2.5浓度普遍高于非工业区，这说明工业排放是影响PM2.5浓度的一个重要因素；
- ③ 一般来讲，城区PM2.5浓度高于非城区，这说明高楼、环境、绿化等因素也是制约PM2.5浓度的因素。

3.2.2.3 分区污染评估

(一) 高压开关厂污染评估

以PM2.5为例，计算空气质量分指数。在自观测以来的117天中，共有2天数据缺失，有效数据为115个。

1 按PM2.5观测数据中的平均浓度计算，则 $C_{PM2.5}=214$ ，依据式(8)计算PM2.5的空气质量分指数平均值：

$$\underline{IAQI}_{PM2.5} = \frac{\underline{IAQI}_{Hi} - \underline{IAQI}_{Lo}}{\underline{BP}_{Hi} - \underline{BP}_{Lo}} (C_{PM2.5} - \underline{BP}_{Lo}) + \underline{IAQI}_{Lo} \quad (8)$$

其中， $\underline{C}_{PM2.5}=214$ ， $\underline{BP}_{Hi}=250$ ， $\underline{BP}_{Lo}=150$ ， $\underline{IAQI}_{Hi}=300$ ， $\underline{IAQI}_{Lo}=200$ ，将数值带入上式，计算可得 $\underline{IAQI}_{PM2.5}=264$ 。

同理，可计算得到SO₂、NO₂、PM₁₀、CO、O₃8小时的空气质量分指数平均值，分别为 $\underline{IAQI}_{SO_2}=45$ ， $\underline{IAQI}_{NO_2}=45$ ， $\underline{IAQI}_{PM_{10}}=73$ ， $\underline{IAQI}_{CO}=270$ ， $\underline{IAQI}_{O_3}=18$ 。

根据式(9)：

$$\underline{AQI} = \max\{\underline{IAQI}_1, \underline{IAQI}_2, \underline{IAQI}_3, \dots, \underline{IAQI}_n\} \quad (9)$$

计算空气质量指数平均值可得高压开关厂的空气质量指数平均值 $\underline{AQI}=270$ ，首要污染物为CO。

2 按PM_{2.5}观测数据中的最大浓度计算，则有C^{PM_{2.5}} =500，同理计算得到IAQI^{PM_{2.5}} =500，IAQI^{SO₂} =93，IAQI^{NO₂} =144，IAQI^{PM₁₀} =400，IAQI^{CO} =397，IAQI^{O₃} =63，进而高压开关厂的空气质量指数最大值AQI^{PM_{2.5}} =500，首要污染物为PM_{2.5}。

根据环境保护部《环境空气质量指数技术规定》中关于空气质量指数及相关信息的内容，可知高压开关厂测量点附近地区的空气质量指数级别为五级，属于重度污染。

(二) 其他测量点污染评估

参照高压开关厂污染评估方法，可得剩余12个测量点空气质量指数计算结果，如表14所示。

表14 剩余12个测量点空气质量指数计算结果

测量点		SO ₂	NO ₂	PM ₁₀	CO	O ₃ 8小时	PM _{2.5}	AQI	首要污染物
N ₂	均值	36	39	72	186	12	244	244	PM _{2.5}
	最大值	65	130	400	343	43	500	500	PM _{2.5}
N ₃	均值	35	46	71	182	13	238	238	PM _{2.5}
	最大值	80	125	400	350	28	497	497	PM _{2.5}
N ₄	均值	41	45	73	277	12	225	277	CO
	最大值	87	123	400	377	28	500	500	PM _{2.5}
N ₅	均值	43	46	73	283	20	255	283	CO
	最大值	87	160	400	367	50	500	500	PM _{2.5}
N ₆	均值	39	44	68	217	17	260	260	PM _{2.5}
	最大值	82	125	400	380	40	500	500	PM _{2.5}
N ₇	均值	35	38	72	210	15	246	246	PM _{2.5}
	最大值	80	122	400	363	36	483	483	PM _{2.5}
N ₈	均值	35	31	71	257	15	228	257	CO
	最大值	83	112	400	423	61	481	481	PM _{2.5}

N ₉	均值	35	30	72	210	16	241	241	PM _{2.5}
	最大值	84	131	400	370	81	449	449	PM _{2.5}
N ₁₀	均值	36	36	70	217	14	229	229	PM _{2.5}
	最大值	84	148	400	380	28	461	461	PM _{2.5}
N ₁₁	均值	36	50	76	263	11	233	263	CO
	最大值	82	143	400	407	45	463	463	PM _{2.5}
N ₁₂	均值	31	41	71	263	16	254	263	CO
	最大值	77	130	400	393	43	499	499	PM _{2.5}
N ₁₃	均值	31	31	71	303	15	260	303	CO
	最大值	80	113	400	450	45	476	476	PM _{2.5}

由上表得出剩余12个测量点的柱状图，如图12所示。

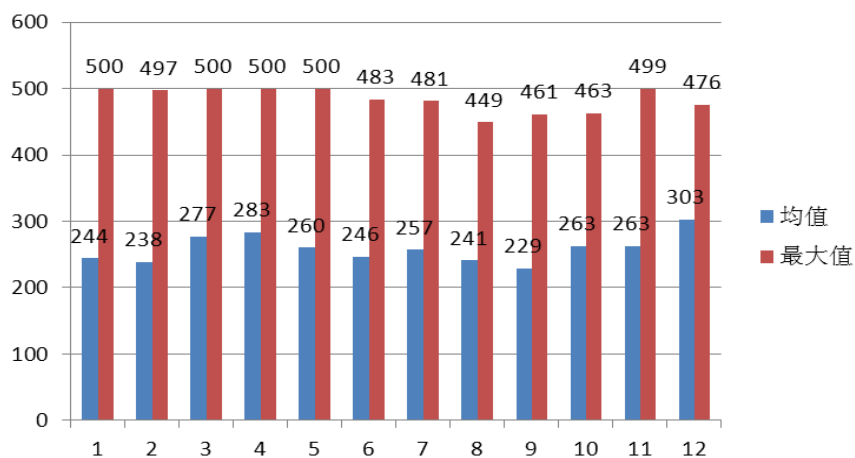


图12 剩余12个测量点PM_{2.5}空气质量指数

从上图可以看出，监测站2-12的空气质量指数平均值介于200和300之间，空气质量指数级别为五级，属于重度污染；监测站13的空气质量指数平均值超出300的范围，空气质量指数级别为六级，属于严重污染。

3.2.3 基于层次分析法的 PM_{2.5} 发生规律多因素回归分析

3.2.3.1 模型假设

- (1) 所研究地区在一段时间内保持稳定，没有地震、酸雨等自然灾害的发生。
- (2) 环保部门对污染物的治理政策保持稳定。

3.2.3.2 建模分析

PM2.5从来源上看可以分为自然源和人为源。据测定，美国和西欧的PM2.5背景浓度大约为3-5微克/立方米，这说明虽然自然过程也会产生PM2.5，但其主要来源还是人为排放。PM2.5的直接排放主要来自燃烧过程，如化石燃料的燃烧、生物质的燃烧、垃圾焚烧等。间接来源主要是空气中二氧化硫、氮氧化物等污染物的转化、扬尘等。而PM2.5的成分不仅包含元素碳、有机碳硫酸盐、硝酸盐等，还包括钠、镁、钙、铝以及重金属等。因此PM2.5的发生过程也非常复杂，直接来研究其发生规律较为困难。

从上面分析可以看出，PM2.5的发生过程与诸多因素有关，不仅包括各类可监测成分，还需要温度、湿度、风速等合适的条件。因此，我们可以利用其他与PM2.5发生相关的因素来探究PM2.5的发生过程。

根据问题要求，构建具有递阶层次结构的PM2.5发生指标体系如图13所示：

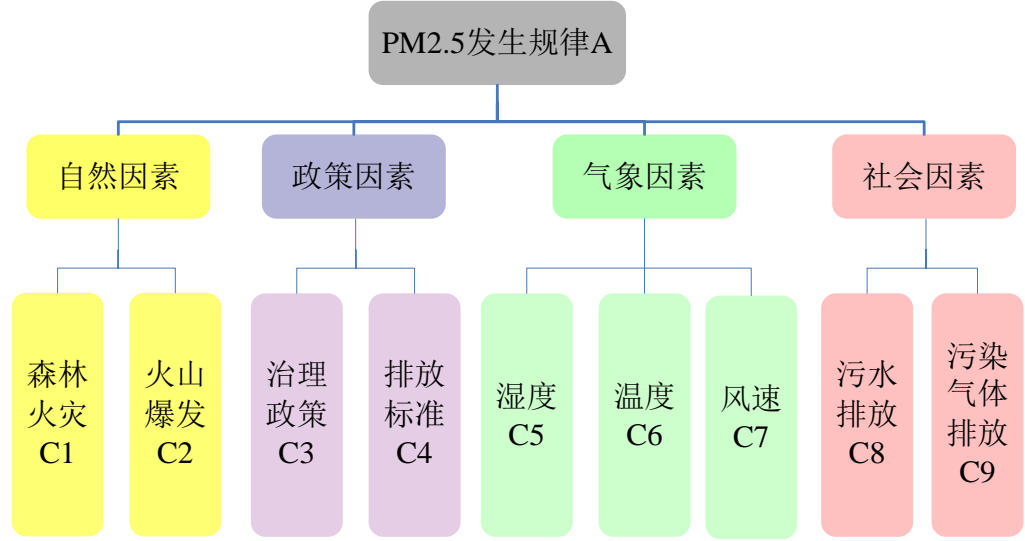


图13 PM2.5指标体系构建

实际中各个因素对PM2.5发生的影响程度是不同的，为了研究各个因素对于PM2.5的影响程度，一种可行的方法就是计算出各因素在PM2.5发生中所占的权重。层次分析法中一般使用判断矩阵来计算权重，可以通过向专家咨询、查阅资料等形式，对同一级要素进行两两重要性比较来确定判断矩阵的各个元素。在这里，我们采用这种方法，并结合所能搜集到的资料，确定利用AQI其它指标、风速、湿度、温度等方面根据多要素回归分析方法来定量刻画它们对西安市PM2.5浓度的影响，从而探究PM2.5发生的规律。

3.2.3.3 模型建立与求解

(一) 数据来源

AQI各项指标浓度数据来源于附件2以及西安市环境保护网公布数据。温度、风速、湿度等气象数据来源于NOAA数据库。

(二) 多要素线性回归模型的建立与求解

描述PM2.5发生的多要素线性回归方程表达式为：

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4 + b_5x_5 + b_6x_6 + b_7x_7 + b_8x_8 + \varepsilon\sigma^2 \quad (10)$$

其中y为PM2.5浓度， $x_1 \sim x_8$ 分别为SO₂、NO₂、PM10、CO、O₃的浓度，平均温度、平均风速、平均湿度。

根据西安市5月1日~7月31日有关数据，利用SPSS20.0回归分析模块，解出各项系数如表14所示。

表14 多要素回归方程的系数

系数	b0	b1	b2	b3	b4	b5	b6	b7	b8
值	-36.71	-0.538	-0.347	1.164	0.882	0.113	-0.651	0.222	0.892

故可得回归方程为：

$$y = -36.71 - 0.538x_1 - 0.347x_2 + 1.164x_3 + 0.882x_4 + 0.113x_5 - 0.651x_6 + 0.222x_7 + 0.892x_8 + \varepsilon\sigma^2 \quad (11)$$

其R²检验如表所示。

表15 R²检验结果

模型	R	R 方	调整 R 方	标准估计的误差
1	.953 ^a	.907	.898	9.64015

通过表15我们可以看出，线性回归分析中预测值和观测值的相关系数为0.953，该模型能够解释约90%的观测数据，回归较为理想。

得到回归方程后，我们就可以通过 $x_1 \sim x_8$ 来预测PM2.5的浓度，从而探究PM2.5的发生规律。

3.2.3.4 模型验证

根据回归方程以及西安市相关AQI以及气象数据，预测2013年8月8日—8月17日10天的PM2.5浓度，真实值和预测值的关系如图所示。

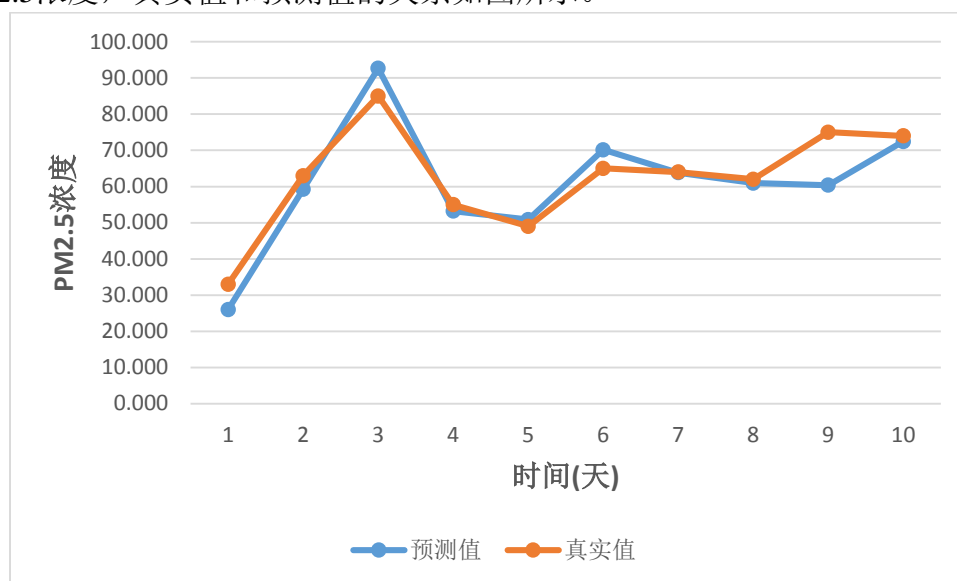


图14 模型预测值和真实值比较

真实值和预测值的绝对误差如表16所示。

表16 预测值与真实值绝对误差情况

日期(日)	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17
绝对误差	7	3.8	7.7	1.8	1.9	5.2	0.2	1.0	14.6	1.56

从图14可以看出，预测值与真实值基本吻合，而由表16知，仅在8月16日预测值与真实值绝对误差达到14.6个单位，其它时间绝对误差均小于10个单位，模型较为准确。

3.2.4 结构网格下基于偏微分方程的高斯修正扩散模型

3.2.4.1 模型假设

- (1) 各测量点周围PM2.5排放源的源强是连续、均匀且速率恒定；
- (2) PM2.5在平整、无障碍的地面上空扩散；
- (3) PM2.5在大气中扩散和衰减时只有物理运动，不发生化学和生物变化，且地面和地标地物对PM2.5无吸附；
- (4) 风向水平，风速和风向均匀稳定；
- (5) 风速大于无风情况下放射性气体扩散的速度；
- (6) 不考率其他污染源的影响。

3.2.4.2 建模分析

为刻画西安市PM2.5的发生和演变（扩散与衰减等）规律，要将PM2.5在当时气象要素以及下垫面条件下的扩散与衰减过程模式化，并确定模式中所需要的参数。

由于西安市13个测量点PM2.5的排放量基本处于同一水平，可看做是13个PM2.5排放源连续排放的情况。为此，本问题属于是大气环境下电源连续排放扩散模式。

由分子扩散的Fick定律（即梯度输送理论：分子扩散的质量通量与扩散物质的浓度梯度成正比）和湍流扩散等理论，可以得到PM2.5迁移、转化的基本方程，如式(12)所示：

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_x \frac{\partial c}{\partial x} + u_y \frac{\partial c}{\partial y} + u_z \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial t} (D_x \frac{\partial c}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (D_y \frac{\partial c}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z} (D_z \frac{\partial c}{\partial z}) + S(x, y, z, c, t) \quad (12)$$

其中， c —PM2.5在大气环境中的浓度，单位为 g/m^3 ；

D_x, D_y, D_z 为 x, y, z 方向上的分子扩散系数，单位为 m^2/s ；

$S(x, y, z)$ 是在大气环境中，由于物理、化学、生物等作用引起PM2.5的增减，是公式中附加的一个源-汇项。

3.2.4.3 模型建立

(一) 大气稳定状态下基本模型

在保持大气环境下风速和各测量点PM2.5排放速率定常的条件下，环境中的PM2.5分布状况也是稳定的。此时，PM2.5在某一空间位置的浓度（即为13个监测站PM2.5扩散到该位置的浓度之和）不随时间变化，这种状态称为稳态。在无边界大气环境下，

对于任一稳定PM2.5排放源连续排放的扩散与衰减模型可通过基本模型简化得到，如式(13)所示：

由高斯扩散模式可得扩散方程为：

$$u \frac{\partial c}{\partial x} = D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \quad (13)$$

已知边界条件为：

$$\begin{cases} x = y = z \rightarrow 0, c \rightarrow \infty \\ x = y = z \rightarrow \infty, c \rightarrow 0 \\ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} u c dy dz = Q \end{cases} \quad (14)$$

求解式(13)可得浓度解为：

$$c(x, y, z) = \frac{Q}{4\pi x(D_y D_z)^{1/2}} \exp\left[-\frac{u}{4x}\left(\frac{y^2}{D_y} + \frac{z^2}{D_z}\right)\right] \quad (15)$$

设 $x = ut$ ，令 $2D_y t = \sigma_y^2$, $2D_z t = \sigma_z^2$ ，

则式(15)的解可表达为：

$$c(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y^2}{\sigma_y^2} + \frac{z^2}{\sigma_z^2}\right)\right] \quad (16)$$

此即为PM2.5连续稳定排放的点源在三维均匀稳定流场中的浓度分布公式，即正态浓度分布公式。

(二) 考虑地面及源高因素对模型的修正

由于PM2.5的颗粒粒径小于2.5um，其扩散和衰减可不考虑重力沉降因素的影响作用，但地面和建筑物边界条件对扩散的影响必须考虑，此时可认为地面像镜子一样对PM2.5起着全反射的作用，这样可以采用“镜像法”处理，如图15所示。

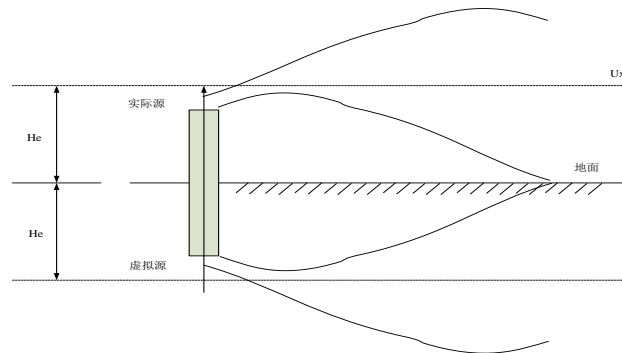


图15 地面和建筑物边界对PM2.5扩散的反射作用

在地面的影响作用下，可以把某一点的PM2.5浓度看成是两部分作用之和。一部分是不考虑地面影响时该点的浓度值，另一部分是由于地面反射作用增加的浓度值。这

相当于当不存在地面时，由位置在（0,0,He）的实际源和位置在（0,0,-He）的虚拟源在该点造成的PM2.5浓度之和（He为有效源高），也就是说 $c(x, y, z) = c_1 + c_2$ ，故浓度值可表达为：

$$c(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{y^2}{\sigma_y^2}\right) \left\{ \exp\left[-\frac{(z-He)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \alpha \exp\left[-\frac{(z+He)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\} \quad (17)$$

同理，当考虑建筑物边界对PM2.5浓度的影响时，浓度值为：

$$c(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \left\{ \exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma_z^2}\right] + \beta \exp\left[-\frac{(x+2L)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\} \quad (18)$$

上述两式中， u 为大气环境中的风速，单位为 m/s ；

σ_y 为垂直于主导风向的横向扩散系数，单位为 m ；

σ_z 为铅直扩散系数，单位为 m ；

Q 为单位时间内的PM2.5排放量，单位为 mg/s ；

He为有效源高度；

L 为建筑物边界与污染源距离，单位为 m ；

α 为地面对PM2.5的反射系数。 $\alpha=0$ 表示地面全吸收， $\alpha=1$ 表示地面全反射，对一般气态污染物和粒径小于 $15 \mu m$ 的颗粒物，取 $\alpha=1$ 。

β 为建筑物边界对污染物的反射系数，对一般气态污染物和粒径小于 $15 \mu m$ 的颗粒物，取 $\beta=0.8$ 。

(三) 考虑湿度因素对模型的修正

湿度对PM2.5颗粒物成分具有稀释扩散作用，可溶性气体、水溶性离子亦可溶于空气水分中，有利于颗粒物的形成，导致颗粒物质量浓度增加。记湿度系数 λ ， λ 与相对湿度之间的关系为：

$$\varphi = aI^b \quad (19)$$

式中， a 、 b 为经验系数， I 为湿度值，通常 $a=1.2 \times 10^{-5}$ ， $b=0.5$ 。

对于湿度导致的PM2.5增加，可采用湿度系数 λ 对源强 Q 进行修正，有：

$$Q(x) = Q \exp\left(\frac{\varphi x}{\mu}\right) \quad (20)$$

其中， μ 为空气的动力粘性系数，可取 $1.8 \times 10^{-5} kg/(m \cdot s)$ 。

由式(18)和(20)可得，某一PM2.5测量点周围点 (x, y, z) 处的PM2.5浓度值为：

$$c(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left\{\left(\frac{\varphi x}{\mu} - \frac{1}{2} \frac{y^2}{\sigma_y^2}\right)\right\} \left\{ \exp\left[-\frac{(z-He)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \alpha \exp\left[-\frac{(z+He)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\} \quad (21)$$

西安市某一点 (x, y, z) 处PM2.5浓度值应为13个测量点浓度值叠加之和，即：

$$C(x, y, z) = \sum_{i=1}^{13} c_i(x, y, z) \quad (22)$$

3.2.4.4 模型求解及验证

寻求高分辨、高精度的数值方法对偏微分方程的数值解的精确性起着和数值方法同样的决定性作用。对于实际问题，数值方法精度再高，如果网格条件与问题不匹配，那么得到的数值解也会有很大的误差，尤其是偏微分方程数值解越来越广泛应用于各种大型的工程问题和军事项目中，所考虑的实际问题难度越来越大，研究的物理模型越来越复杂，因此网格技术的研究也渐渐的成为偏微分方程数值解研究的另外一个热点。数值计算的背景网格是一个包围计算区域的空间网格，在这个网格的节点上定义网格步长控制参数（尺度），在生成过程中通过这些参数来控制空间网格单元大小，图16给出了三种常见的背景网格。

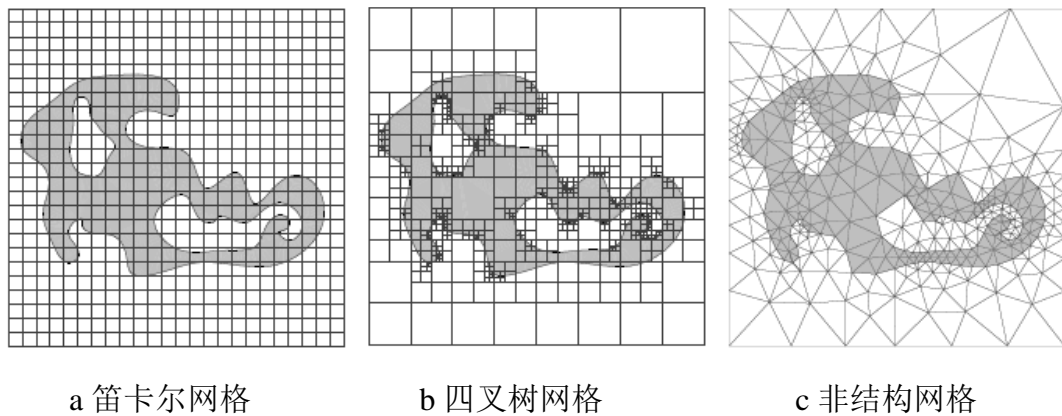


图16 三种常用的背景网格示意图

由于地图中只给了13个点的坐标，此时若生成非结构网格，不仅质量不好，而且还会严重影响了数值求解的精度。这时需要通过添加虚拟点坐标的方式对网格质量进行优化，但增加了问题本身的复杂度。因此，本文数值模拟采用结构的笛卡尔网格进行求解。如图17所示，我们发现，利用取整函数可以将13个监测站的地理坐标放置于结构网格的节点处。

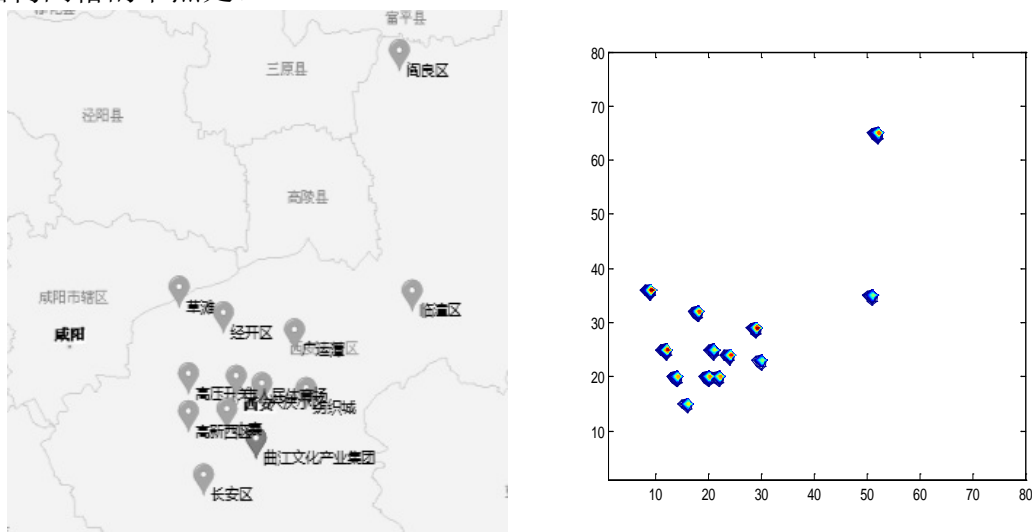


图17 13个监测站映射到网格节点分布图

利用13个监测站的初始数据（ $t=0$ 时刻）可以拟合得到空白区域的浓度值作为迭代的初始值，迭代区域的边界值由第一类边界条件得到，将扩散方程离散化后我们得到 $t=n+1$ 时刻的迭代公式：

$$C(i,j,n+1) = C(i,j,n) + \Delta t \left(\frac{Q(i,j,n)}{2\pi u_x(i,n)u_y(j,n)\sigma_x(i,n)\sigma_y(j,n)} \right) \\ * \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{C(i+1,j,n) + C(i-1,j,n) - 2C(i,j,n)}{\sigma_x(i,n)h^2} + \frac{C(i,j+1,n) + C(i,j-1,n) - 2C(i,j,n)}{\sigma_y(j,n)h^2}\right)\right) + S(i,j,n) \quad (23)$$

其中， $Q(i,j,n) = C(i,j,n)\exp(\frac{aI(n)^b}{\mu})$ 为湿度对浓度值影响， $I(n)$ 为湿度值。 $u_x(i,n)$ ， $u_y(j,n)$ 分别为 x ， y 方向的风速， $\sigma_x(i,n)$ ， $\sigma_y(j,n)$ 分别为 x ， y 方向的扩散系数 $S(i,j,n)$ 为浓度增加的源-汇项，监测站初始时刻PM2.5情况如图18所示。

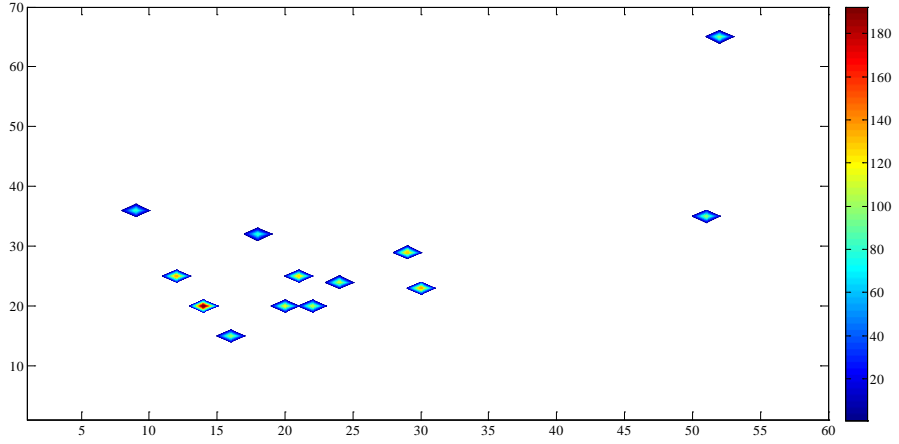


图18 13个监测站的PM2.5浓度示意图($t=0$)

需要说明的是，为了更加清晰地显示监测站的地理对应位置，图18忽略了空白区域的PM2.5浓度。此外，为便于直观与监测站真实数据比较，PM2.5浓度示意图均给出监测站及其附近点的等势图，且三维图形均经过对称旋转。

从图18中可以看出，初始时刻高新西区监测站PM2.5的数值最高，经过5次迭代后，即经过五天的演变，利用Matlab可以得到监测站及其周围的扩散情况，如图19、图20所示。

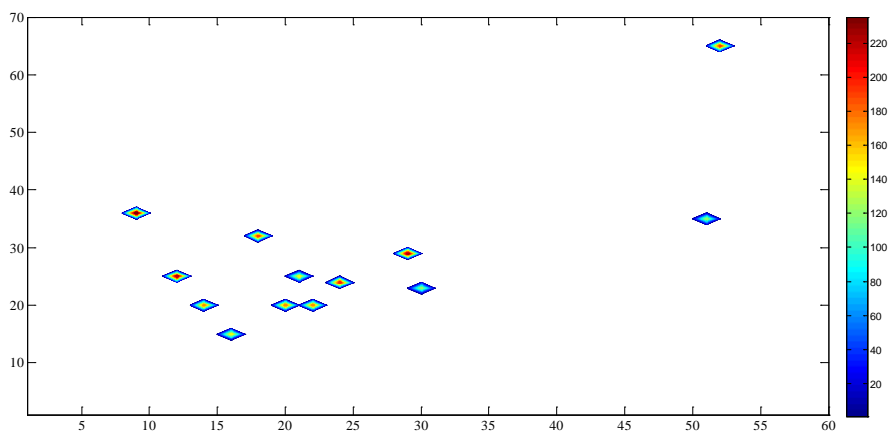


图19 13个监测站PM2.5扩散情况 (t=5)

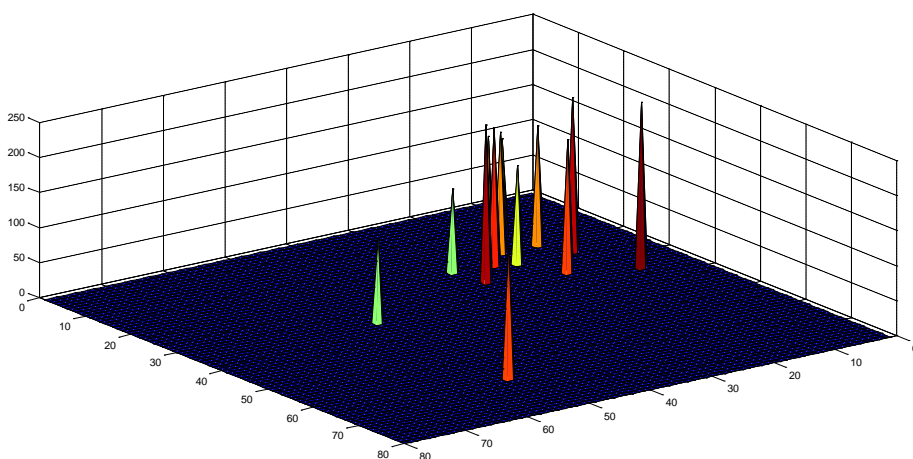


图20 13个监测站PM浓度情况(t=5)

从图19可以看出，5天后多个监测站的PM2.5浓度数值升高，而从图20可以清楚地看到各监测站处整体PM2.5浓度偏高，通过查阅当天的环境监测资料发现当天空气质量为重度污染，数值模拟的结果与真实情况较为符合。t=10时刻的扩散情况如图21所示。

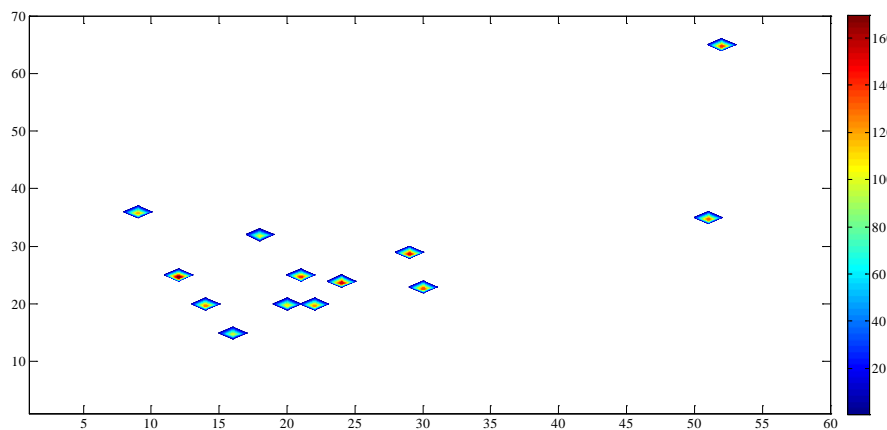


图21 13个监测站PM2.5扩散情况 (t=10)

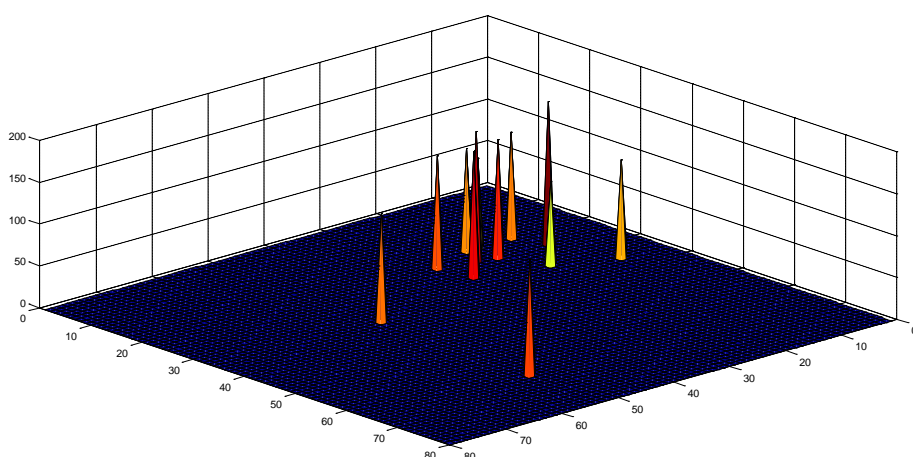


图22 13个监测站处的PM2.5浓度 (t=10)

从图21、22可以看出，该时刻PM2.5的浓度分布发生了变化，临潼监测站、纺织城监测站污染指数明显升高，查阅相关数据可以得到5天内东北风出现3次，PM2.5扩散方向符合真实数据的变化，同时，注意到13个监测站的整体浓度都有所提高，查阅相关数据得到5天内天气均处于阴或多云天气，空气湿度大，PM2.5浓度随之升高，数值模拟符合真实情况。

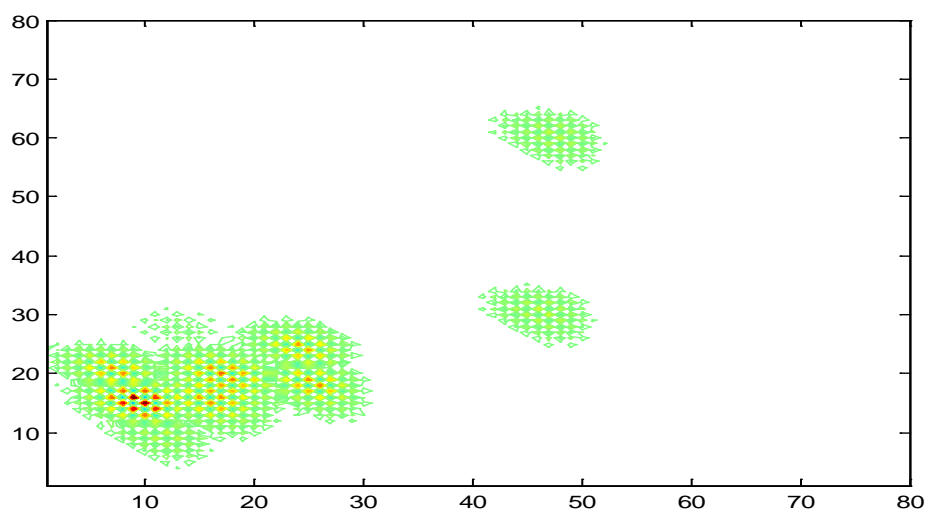


图23 监测站及其周边的PM2.5浓度情况(t=15)

从图23中可以看出，当t=15时，大气污染情况有所改善，但是西部区域污染程度较为严重，查阅相关资料表明五天内西安市大都为晴天，且风向较为均匀，与真实数据相比，西部地区数值模拟达到精度要求，但是东部的监测站数据与真实数据出现误差，这是由于东部监测站较分散且数量较少，数值模拟初期的初始值拟合带来的误差较大从而影响了数值计算的效果，在实际中可以通过增加监测站的方式弥补这一不足。

为了进一步说明扩散模型的有效性，定义系统的相对误差为：

$$\frac{\sum_{i=1}^{13} |C_{i\text{数值}} - C_{i\text{真实}}|}{\sum_{i=1}^{13} C_{i\text{真实}}} \quad (24)$$

采用附件2所给的1-2月数据做误差分析，得到迭代次数与相对误差的关系如图24所示。

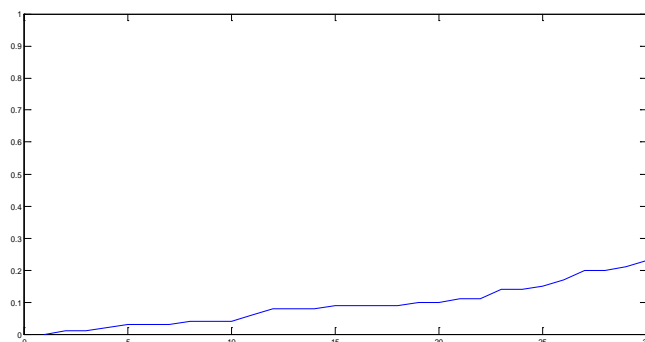


图24 迭代次数与相对误差关系

从图中可以看出，在数值模拟初期，相对误差较小，能很好地模拟空气真实扩散的情形，随着迭代次数的增加和误差的不断累积，部分监测站的数据较真实值出现偏差，通过误差分析，我们认为误差来源有三：一是初值拟合产生的误差通过坐标点的迭代引入到最终的数值误差；二是系数误差如湿度、风速等系数数字化与真实情况不完全匹配产生的误差；三是由于求解偏微分方程时所用的最直接的有限差分方法精度不足带来的误差。在以后的工作中，可以通过大量数据的拟合进行修正。

综上所述，某一位置PM2.5浓度与排放源强度、风向、风速、湿度等密切相关。

(1) 当排放源强增大时，PM2.5浓度随之增大，变化显著，两者呈正相关趋势，具有强相关性。例如，附件2中高压开关厂附近工业生产过程中排放的灰尘、废气较多，PM2.5浓度值为214，高于其他12个测量点和全市平均水平。

(2) 当风向变化时，在顺风方向PM2.5浓度增大，逆风方向浓度减小，PM2.5浓度与风向的正方向呈正相关趋势。例如，2013年2月6日，北风 3-4级 /北风 3-4级，位于西安市正北方向的阎良PM2.5浓度值为322，草滩为324，均高于当天全市平均值315，而位于西安市正南方向的曲江文化集团为234，长安区为312，均低于当天的平均值。

(3) 当风速增大时，PM2.5浓度随之减小，两者呈负相关趋势。例如，2013年4月19日，东风 5-6级 /东风 ≤3级，草滩PM2.5浓度值为83，到4月24日，东北风 ≤3级 /东风 ≤3级，风力减小之后，浓度值上升为232，远高于风速较大时的浓度。

(4) 当大气环境湿度增大时，PM2.5浓度随之增大，两者呈正相关趋势，具有强相关性。例如，2013年4月4日，小雨 /小雨，高新西区PM2.5浓度值为200，到4月6日，晴 /晴，浓度值将为70，远低于湿度较大的阴雨天气浓度值。

3.2.5 修正多因素信息系数的高斯烟羽扩散预测模型

3.2.5.1 模型假设

- (1) PM2.5在空气中不发生化学反应
- (2) PM2.5传播时不收地面粗糙程度的影响
- (3) PM2.5连续生成时速率恒定
- (4) 无风情况下PM2.5扩散速度恒定
- (6)一天内风向水平，风速和风向恒定
- (7)无风情况下PM2.5扩散的速度小于风速

3.2.5.2 建模分析

PM2.5会对呼吸系统和心血管系统造成伤害，包括呼吸道受刺激、咳嗽、呼吸困难、降低肺功能、加重哮喘、导致慢性支气管炎、心律失常、非致命性的心脏病、心肺病患者的过早死。在一些情形下，例如扬尘、工厂进行大规模排放，该地区PM2.5可能突然增至数倍。为了减轻突发情形下PM2.5扩散带来的危害、帮助环境部门制定合理的治理措施，及时准确地预测PM2.5对不同地区的污染程度已经成为急需解决的问题。

3.2.5.3 模型建立与求解

(一) PM2.5自由扩散模型

扩散是由于微小的随机游动使粒子产生的散布现象。不考虑气象因素，如风向、风速、湿度等方面的影响，时刻 t 在位置 x 的PM2.5的相对浓度 $C(x,t)$ 可以由扩散方程的偏微分方差来描述。所谓相对浓度是指已经规范化的浓度函数，即粒子的总质量 $\int C(x,t)dx = 1$ 。

建立扩散方程需要考虑以下因素：

首先，根据质量守恒定律，以 x 点为参考，宽度为 Δx 的小区间内浓度的变化是由在区间的左端点进入的粒子流量 $q(x,t)$ （单位时间通过点 x 的粒子的个数），减去在其右端点流出的粒子流量，即：

$$q(x + \Delta x, t) \approx q(x, t) + \Delta x \partial q / \partial x \Delta t \quad (25)$$

如果 $\partial q / \partial x > 0$ ，则右端流出的物质快于左端进入的物质，PM2.5的浓度将是减少的。在时间区间 Δt 内物质的净减少量为 $\Delta M \approx -\Delta x \partial q / \partial x \Delta t$ ，因此，浓度 $C = M / \Delta x$ 的改变量为 $\Delta C = \Delta M / \Delta x \approx -\partial q / \partial x \Delta t$ ，由此可得：

$$\Delta C / \Delta t \approx -\partial q / \partial x \quad (26)$$

令 $\Delta x \rightarrow 0$ 到取极限就得到方程。

其次，由FICK定律可知扩散的粒子流量与其浓度梯度成正比，于是有：

$$q = -\frac{D}{2} \frac{\partial C}{\partial x} \quad (27)$$

其中 $D > 0$ 为扩散系数，其大小取决于温度、流体黏度与分子大小，并与扩散分子流动的平均速度成正比。由于影响扩散系数的因素较为复杂，上式的扩散系数表达式常用以下经验表达式来代替，即：

$$D = \frac{D_0 \times P_0}{P} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{1.5} \quad (28)$$

将式(27)结合就可得到扩散方程为：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{D}{2} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (29)$$

在不考虑其他因素的前提下，可以利用以上方程来预报PM2.5的扩散。由于偏微分方程不易直接求解，因此对式进行傅里叶变换，得：

$$\hat{C}(k, t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} C(x, t) dx \quad (30)$$

对于所有k，给定初始条件 $\hat{C}(k, 0) = 1$ ，可解得微分方程的解为：

$$\hat{C}(k, t) = e^{-Dtk^2/2} \quad (31)$$

该初始条件的意义是在时刻t，污染物聚集在一点。然后进行傅里叶逆变换，得到扩散方程的解为：

$$C(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Dt}} e^{-x^2/(2Dt)} \quad (32)$$

即得到了PM2.5浓度随时间和距离的表达式。

(二) 修正多因素信息系数的高斯烟羽扩散预测模型

1 基本模型

以原点为排放点（若为高架源，原点为排放点在地面的投影），x轴正向为风速方向，y轴在水平面上且与x轴垂直，正向在x轴的左侧，z轴垂直于水平面xoy，向上为正方向，建立笛卡尔右手直角坐标系。假设在此坐标系下烟流中心线在xoy面的投影与x轴重合，放射性气体扩散在yoz平面呈正态分布的基础上建立高斯烟羽模型坐标系如图23所示。

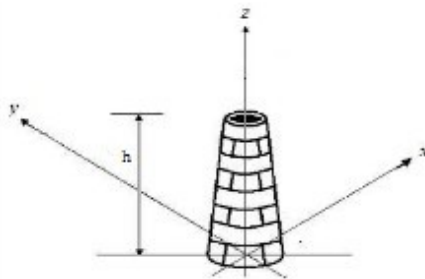


图25 模型空间坐标示意图

一般来讲，对于连续点源的平均气体流，其浓度分布符合正态分布。这里我们假定PM2.5的浓度分布也符合正态分布规律。则可导出下风向任意一点 $X(x, y, z)$ 处PM2.5浓度的函数为：

$$C(x, y, z) = A(x) \cdot e^{-ay^2} \cdot e^{-bz^2} \quad (33)$$

由统计学理论可以写出方差的表达式：

$$\sigma_y^2 = \frac{\int_0^\infty y^2 C dy}{\int_0^\infty C dy} \quad \sigma_z^2 = \frac{\int_0^\infty z^2 C dz}{\int_0^\infty C dz} \quad (34)$$

不考虑衰减，得到源强Q为：

$$Q = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} u C dy dz \quad (35)$$

根据假设，上述方程中已知量为场源Q，平均风速 u 及 σ_y ， σ_z ，未知量为：浓度 C ，待定函数 $A(x)$ ，待定系数 a 、 b 。

将式(34)代入，得：

$$a = \frac{1}{2\sigma_y^2} \quad (36)$$

$$b = \frac{1}{2\sigma_z^2} \quad (37)$$

将式(33)代入，得：

$$A(x) = \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_z u} \quad (38)$$

再将式(35)代入，解之得：

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp \left[- \left(\frac{y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{z^2}{2\sigma_z^2} \right) \right] \quad (39)$$

即为无界条件下风向空间某一点的浓度，式中， σ_y 、 σ_z 为放射性气体在 y 、 z 方向分布的标准差，分别为放射性气体沿侧方向和垂直方向的扩散系数，单位为 m ； $C(x, y, z)$ 为任一点处放射性气体的浓度，单位为 kg/m ； Q 为源强（即PM2.5生成速度），单位为 kg/s ， u 为平均风速，单位为 m/s 。

原点为PM2.5源。若考虑地面影响，原点取为PM2.5源在地面的铅直投影点。这时高斯扩散公式为：

$$C(x, y, z, H) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp \left[\frac{-y^2}{2\sigma_y^2} \right] \cdot \left\{ \exp \left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2} \right] + \exp \left[-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2} \right] \right\} \quad (40)$$

式中H为烟云的有效高度。

2. 扩散系数 σ_y ， σ_z 的确定

扩散参数的确定过程如下：首先根据时间、地理位置确定日倾角、太阳高度角，利用天气条件确定辐射等级，然后利用辐射等级和风速确定大气稳定度，最后查扩散参数幂函数表，确定扩散参数。

根据国家标准(GB/ T 13201 -- 1991)，大气稳定度的级别共分为6级，即A - F，A为极不稳定；F为极稳定。首先，根据释放源所在地的经度和纬度以及泄漏的日期和时间计算当时的太阳高度角 h_0 ；然后，由太阳高度角 h_0 和云量查出太阳辐射等级；最后，再根据地面风速确定当时的大气稳定度。

表 17 大气稳定度的级别参考表

地面风速 ($m \cdot s^{-1}$)	白天太阳辐射			阴天的白天或 夜间	有云的夜晚	
	强	中	弱		薄云遮天或低云 ≥ 0.5	云量 ≤ 0.4
<3	A	A-B	B	D	-	-
2-3	B	B	C	D	E	F
3-5	B-C	B-C	C	D	D	E
5-6	C-D	C-D	D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D	D

得到大气稳定度后，可以查表进行扩散的参数，Briggs扩散参数如表18所示。

表18 Briggs 扩散参数（开阔平原田野）

大气稳定度	σ_y	σ_z
A	$0.22x(1+0.0001x)^{1/2}$	$0.2x$
B	$0.16x(1+0.0001x)^{1/2}$	$0.12x$
C	$0.11x(1+0.0001x)^{1/2}$	$0.08x(1+0.0002x)^{1/2}$
D	$0.08x(1+0.0001x)^{1/2}$	$0.06x(1+0.0015x)^{1/2}$
E	$0.06x(1+0.0001x)^{1/2}$	$0.03x(1+0.0003x)$
F	$0.04x(1+0.0001x)^{1/2}$	$0.016x(1+0.0003x)$

表19 Briggs 扩散参数（城市）

大气稳定度	σ_y	σ_z
A-B	$0.32x(1+0.0004x)^{-1/2}$	$0.24x(1+0.0001x)^{-1/2}$
C	$0.22x(1+0.0004x)^{-1/2}$	$0.20x$
D	$0.16x(1+0.0004x)^{-1/2}$	$0.14x(1+0.0003x)^{-1/2}$
E-F	$0.11x(1+0.0004x)^{-1/2}$	$0.08x(1+0.0015x)^{-1/2}$

(三) 模型优化

1 风速的影响

气象条件对污染物的扩散影响主要条件便是风，风速对它的扩散来讲当然是非常重要的一个因素。风速影响放射性气体的扩散速度和被空气稀释的速度，风速越大，大气湍流越强，空气的稀释作用就越强，风的输送作用也越强。这里按具体参数指标对模型的参数重新划分和界定计算参数。

(1)连续生成（风速 $> 1m/s$ ）

以PM2.5源为原点、风向为 x 轴的空间直角坐标系中一点 (x, y, z) 处的质量浓度为：

$$X(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} e^{\frac{-y^2}{2\sigma_y^2}} \left[e^{\frac{-(z-H)^2}{2\sigma_z^2}} + e^{\frac{-(z+H)^2}{2\sigma_z^2}} \right] \quad (41)$$

(2)连续生成（风速为 $0.5m/s < v < 1m/s$ ）

只考虑对地面的影响，垂直方向不考虑，二维平面上一点 (x, y) 处的质量浓度为

$$X(x, y) = \frac{Q}{4\pi u \sigma_x \sigma_y \sigma_z} e^{\frac{-y^2}{2\sigma_y^2}} \left[1 - (1 - e^{\frac{-x^2}{2\sigma_x^2}}) / 2 \right] \quad (42)$$

(3)连续生成（风速 $< 0.5m/s$ ）

假设围绕PM2.5源气团的质量浓度均匀分布，则距PM2.5源 r 处气团的质量浓度为

$$X(r) = \frac{m}{3\pi} \cdot \frac{b}{b^2 s^2 + a^2 H^2} e^{\frac{b^2 r^2 + a^2 H^2}{2a^2 b^2 Q^2 u^2}} \quad (43)$$

2.地面反射的影响：

在实际中，由于地面的存在，烟羽的扩散是有界的。根据假设可以把地面看做一个镜面，对放射性气体起全反射作用，并采用像源法处理。

PM2.5源有效高度就等于PM2.5源几何高度加污染物抬升高度，影响污染物抬升高度的因素有很多，主要包括：污染物的初始速度和方向、初始温度、泄漏口直径、环境风速及风速随高度的变化率、环境温度及大气稳定度。

有效源高： $H = h + \Delta h$ ，其中， h 为PM2.5源几何架高， Δh 为PM2.5升高度。

影响PM2.5源抬升高度的因素很多，主要包括：扩散气体的初始速度和方向、初始温度、PM2.5源出口直径、环境风速及风速随高度的变化率、环境温度以及大气温度。目前大多采用半经验公式计算抬升高度。这里采用20世纪80年代Wilson通过实验所得到的经验公式：

$$H = 2.4sd / u \quad (44)$$

其中， s 是PM2.5源的释放速度，单位为 m/s ； d 是PM2.5源出口直径，单位为 m ； u 为环境风速，单位为 m/s 。

由以上条件公式可得到高架连续点源扩散的高斯烟羽模型公式为：

$$C(x, y, z, t, H) = \frac{Q}{2\pi k \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{y^2}{\sigma_y^2}\right) \cdot \left[\exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(z-H)^2}{\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(z+H)^2}{\sigma_z^2}\right) \right] \quad (45)$$

3 地面粗糙度的影响:

为了确定地面粗糙度指数值,在上述研究的基础上,我国《建筑结构荷载规范》GBJ 50009 对此作了以下简化:地面粗糙度可分为A、B、C、D 四类:

以半圆影响范围内建筑物平均高度 h 来划分地面粗糙度类别:当 $h > 18m$ 为D 类($a = 0.013$, $HTD=450m$); $9 < h \leq 18m$ 为C 类($a = 0.122$, $HTC=400m$); $h < 9m$ 为B类($a = 0.116$, $HTB=350m$); 海面、海岛、海岸及沙漠地区为A 类 $a = 0.112$, $HTA=300m$)。

根据地面粗糙度对扩散系数进行修正得:

$$\sigma_y' = \sigma_y * (1 + 0.38 * z) \quad (46)$$

$$\sigma_z' = (2.53 - 0.13 * \log(x)) * (0.55 + 0.042 * \log(x))^{-1} * \sigma_z^{0.35 - 0.03 * \log(x)} \quad (47)$$

3.2.4.3 模型求解

(一) PM2.5自由扩散模型的求解

首先考虑PM2.5自由扩散模型。根据所建模型,我们忽略PM2.5在空气中受到的重力、浮力,PM2.5源的高度以及地形的变化,并查阅相关资料得到有关参数,利用Matlab画出PM2.5的扩散情况如图所示。

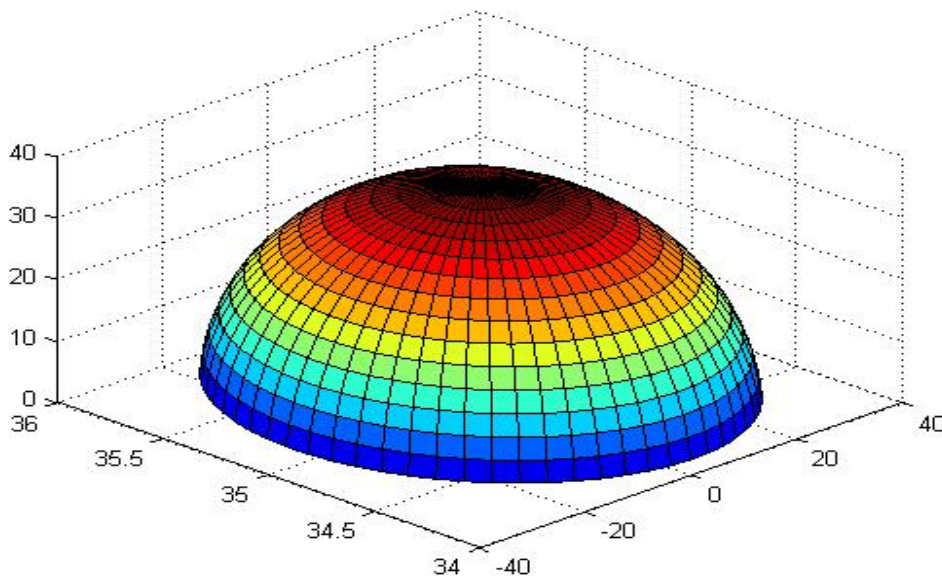


图26 PM2.5自由扩散情况

从图中可以看出,PM2.5自由扩散情况将PM2.5的影响范围简化为一个从球心不断向各个方向均匀扩大的半球体,这说明该模型较为理想。

(二) 修正多因素信息系数的高斯烟羽扩散预测模型的求解

1 突发PM2.5排放的扩散情况

对于不同的PM2.5源实际高度、风速及地面粗糙程度,模型的求解不尽相同。查阅相关数据发现,西安市2013年PM2.5全市平均浓度最高的一天为2月10日,达到了 $500mg/m^3$ 。十三个监测点PM2.5情况如表所示,西安市2月10日气象信息如表20所示。

表20 西安市2月10日各监测点PM2.5情况

监测点	N ₁	N ₂	N ₃	N ₄	N ₅	N ₆	N ₇	N ₈	N ₉	N ₁₀	N ₁₁	N ₁₂	N ₁₃
PM2.5	500	500	496	500	500	500	NA	472	407	NA	415	499	464

表21 西安市2月10日气象信息(数据来源: NOAA数据库)

气象信息	平均风速	风向	平均湿度	平均温度	气压	降水	天气
值	1.67m/s	东/东北	79%	2°C	1018hPa	0	雾

从表21可以看出, 2月10日有6个监测点的PM2.5浓度达到500, 空气污染严重。

依据题意, 选择当天PM2.5及其它污染指标较高的高压灯泡厂为研究对象, 假定高压灯泡厂处PM2.5浓度突然增至2倍, 持续2小时。设风向为东风, PM2.5源有效高度 $H=0$, 于是以高压灯泡厂为原点, 正西为x正半轴, 正南为y正半轴, 建立直角坐标系。

假定大气稳定程度为D, 地面粗糙程度为B, 根据以上分析, 画出仅考虑高压灯泡厂时, 突发情况下PM2.5下风向扩散的情况。

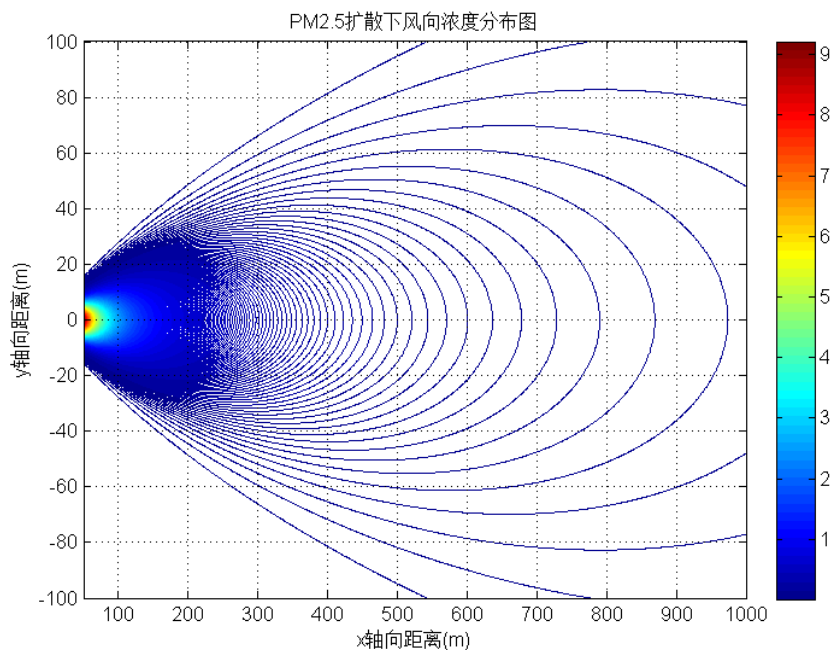


图 27 PM2.5下风向扩散情况

从图27中看出, 当PM2.5突然升高并持续排放时, 该PM2.5源周围的PM2.5浓度迅速升高, 尤其是下风向, 污染物会对人体健康造成很大的影响。同理可以得到其它监测点PM2.5的扩散情况。根据假设, 与高压灯泡厂不同的是, 其它监测点PM2.5不是持续排放的。如图所示, 根据13个监测点的地理位置以及各个监测点附近PM2.5的扩散情况, 可以分析出西安当天较为安全的地方以及危险区域。



图28 监测站地理位置示意图

西安当天温度较低，湿度较大，且为雾霾天气，整体来说PM2.5的浓度较大。考虑到风向、风速以及污染源位置，我们可以预测东郊北面的PM2.5浓度相对来说较低，污染源高压灯泡厂附近，尤其是其下风向，PM2.5的浓度将非常高，较为危险。在这种情况下，人们需要做好防护措施，谨慎出行，离污染源较近的居民尽量远离污染源，以保证健康不受到威胁。

3.2.5.4 模型验证

1 风速与扩散的关系

根据3.2.4.3节的假设，其它数据不变，仅考虑风速对高压灯泡厂PM2.5扩散的影响。当 $t=0.1\text{m/s}$ ， $t=5\text{m/s}$ 时，PM2.5扩散下风向浓度分布图如图29所示。

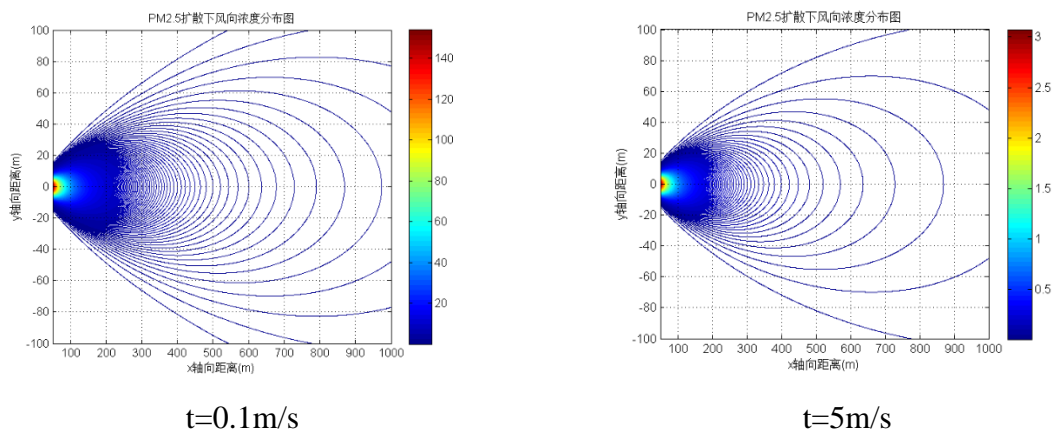


图29 不同风速下PM2.5扩散情况比较

从图中可以看出，风速越低，与PM2.5源距离相等的点的PM2.5的浓度越高，且越接近自由扩散。这说明风速对PM2.5扩散的影响较大，与实际情况较为相符。

2 降水与PM2.5扩散的关系

根据3.2.4.3节的假设，其它数据不变，仅考虑降水对高压灯泡厂PM2.5扩散的影响。当湿沉积耗减因子 r 分别取0与0.4时，画出PM2.5扩散情况如图所示。

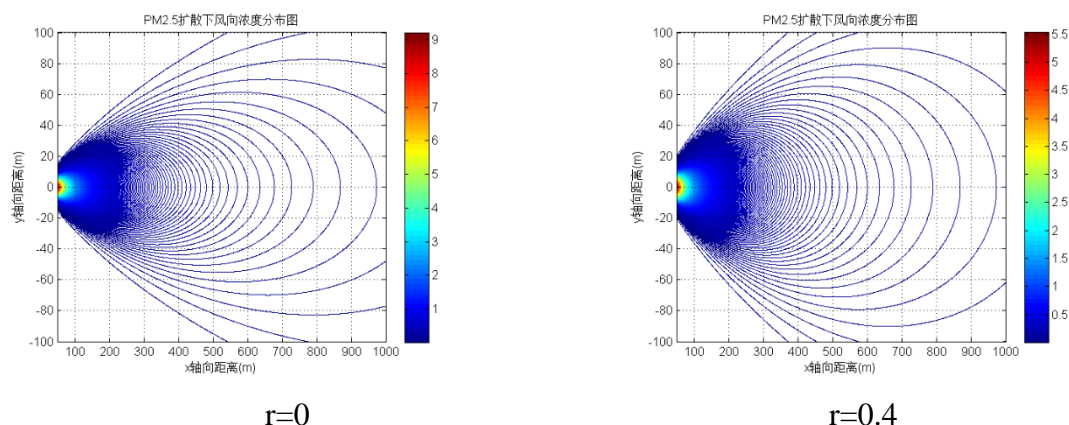


图30 降水对PM2.5扩散的影响

从图30中可以看出，在其它条件不变的情况下，降水对PM2.5有明显的沉积作用，它使得在与PM2.5源相等距离处点的PM2.5浓度明显降低，对PM2.5污染有一定的改善作用，而这与实际情况基本相符。

3.2.6 PM2.5 发生、演变规律探究

根据以上对PM2.5时空分布，发生，演变等方面的研究，我么可以得到PM2.5分布、发生、演变规律：

1. 在时域上，PM2.5的浓度明显随季节变化，冬季其浓度最高，夏季浓度最低；
2. 在空间域上，PM2.5的分布与工业排放、绿化、房屋高度等因素有关，一般来讲，工业区、城区的PM2.5浓度高于非工业区、非城区。
3. 空气能自由流动的区域，PM2.5扩散速度快，PM2.5不容易富集。
4. 有风时，污染源附近PM2.5扩散程度很小，PM2.5向下风向扩散；在垂直距离上，随着污染源高度的增加，污染物扩散范围增大，且污染物扩散得更远，
5. 不考虑化学变化时，PM2.5在实际空气中的扩散系数随空气湿度的增大而增大，即在空气湿度比较大的天气比在空气湿度相对不大的天气更容易扩散。
6. PM2.5向建筑物群扩散过程中，建筑物上风区的浓度分布大体上符合正态分布，而建筑物附近浓度分布与建筑物结构关系密切，浓度波动明显，在建筑物下风向相当距离远处，污染浓度降低并且逐渐趋向稳定。
7. 有风的情况下，建筑物对风场影响很大，垂直距离上越远离建筑物，被干扰的风场范围越小；在水平范围内，随着离建筑物距离的增加，气流干扰程度越小，而当远离建筑群一定距离后，气流恢复到以前的流动状态。在气流形成的漩涡处，污染物容易被卷夹，在此容易形成污染物富集区。

通过以上分析我们可以看出，PM2.5的成分、发生、演变较为复杂，但我们通过研究与PM2.5相关的因素来间接探究PM2.5的一般规律。

3.3 问题三解答

3.3.1 符号说明

P	PM2.5 减排量
$B(P)$	减排产生的社会效应, 其中 $i=1,2,\dots$
$C(P)$	减排的费用
Q	减排产生的综合效益
δ	公众满意度
e_i	第 i 年的减排指标, 其中 $i=1,2,\dots$
x_i	第 i 年采用综合治理的减排量, 其中 $i=1,2,\dots$
y_i	第 i 年采用专项治理的减排量, 其中 $i=1,2,\dots$
A	综合治理总投入费用(百万)
B	专项治理总投入费用(百万)

3.3.2 模型假设

- (1) 忽略农业源对武汉市空气质量的影响
- (2) 假设综合治理的费用随 GDP 等比例上升
- (3) 假设社会综合效益分析与减排量成线性关系

3.3.3 边际利益最优条件下的减排指标优化模型

3.3.3.1 建模分析

我国的空气质量污染形势日趋严峻, 其来源和成因复杂, 对人体和环境的影响非常显著, 不断提高的国家空气质量标准对政策保障区域减排战略提出了更高的要求, 同时, 越来越全面科学的监测评估体系的建立为政策保障区域减排战略提供了更加丰富的样本数据, 采用科学的方法在有限的财力下采用综合治理与专项治理相结合的手段制定合理的减排治污可行规划成为政策制定者改善城市和区域大气环境质量的必然途径。我们利用附件1所给的武汉市空气质量1-8月样本数据, 通过如图 31所示的流程, 给出了武汉市5年内每年的全年年终平均治理指标, 分析了满足治理目标的5年减排实施规划措施的可行性, 为武汉市合理制定减排策略提供了可行的参考。

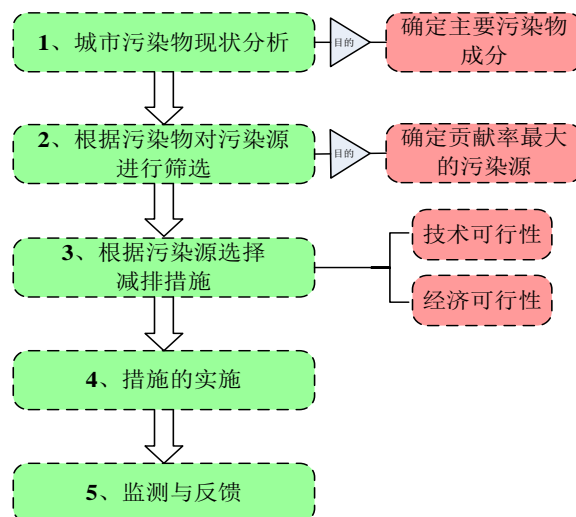


图31 城市污染物减排措施制定与实施流程

3.3.3.2 模型建立

(一) 武汉市环境空气质量现状分析

如图32a所示，2013年1月-8月武汉市空气质量级别属于优或良好的天数占样本总天数的比例为50.84%，如图2b所示武汉市空气主要污染物为PM2.5的天数占样本总天数的57.66%，可以进一步确定影响武汉市空气质量的首要污染物是PM2.5，PM2.5的平均浓度为 $108.937\mu\text{g}/\text{m}^3$ ，超过国家一级标准上限3.1倍。

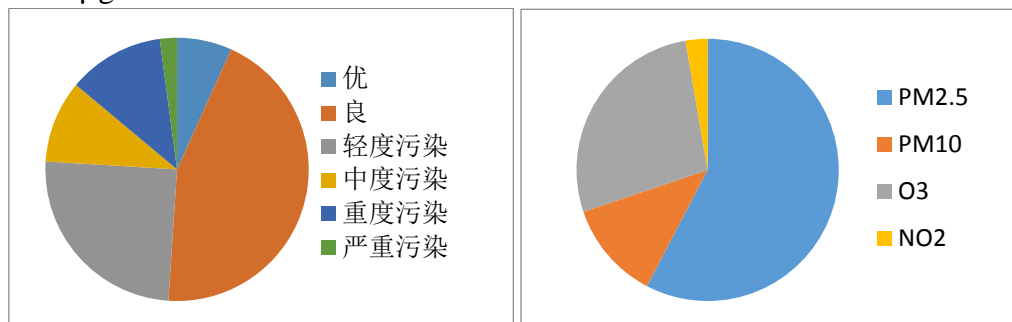


图32a 空气质量为“优”或“良”的比例图 图32b首要污染物为PM2.5的比例图

如图33所示，从季节因素分析，武汉市冬季1-2月PM2.5的平均浓度相对偏高，夏初PM2.5的平均浓度相对较低，反映了冬季生活排放大气污染对的影响，为季节性专项治理方案提供了依据，同时，从影响PM2.5的其他污染物成分进行相关性分析，如表22所示可以得到PM2.5与SO₂、NO₂、PM10、CO等污染物的关系，为采取协同的综合治理策略提供了依据。

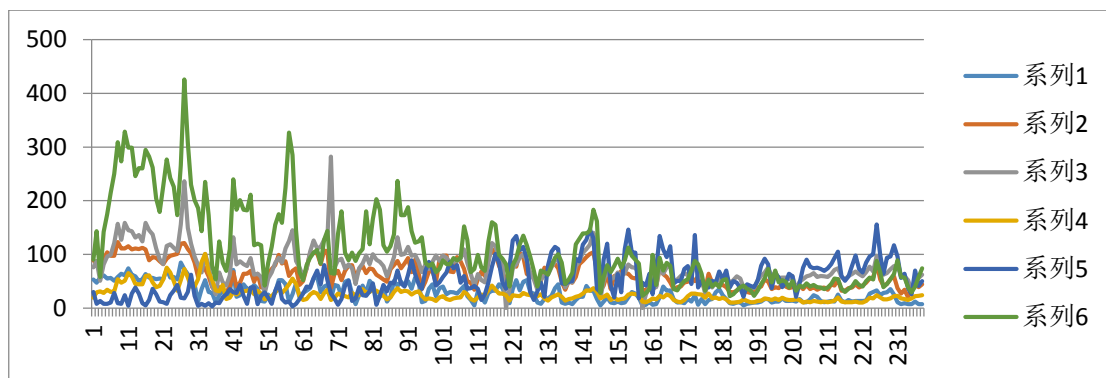


图33 多种污染物浓度随时间变化图

表22 PM2.5与二次污染物的相关度

SO ₂	NO ₂	PM10	CO
0.726	0.734	0.773	0.822

(二) 首要污染物PM2.5的污染源现状分析及贡献度评估

如图34所示，虽然自然过程也会产生PM2.5的背景污染，但其主要来源还是人为排放，人类既直接排放PM2.5，也排放某些气体污染物如二氧化硫、氮氧化物、挥发性有机物等在空气中转变成PM2.5：直接排放主要来自燃烧过程，比如化石燃料（煤、汽油、柴油）的燃烧、生物质（秸秆、木柴）的燃烧、生活垃圾焚烧等；而间接排放的人为来源主要包括工业生产和机动车排放的空气污染物如二氧化硫、氮氧化物、氨气、挥发性有机物等转化为PM2.5，同时还有城市建设产生的道路扬尘、建筑施工扬尘等。从PM2.5污染特征方面分析，在城市区域范围内，PM2.5的浓度取决于源排放、化学变化，以及气象条件、地理条件等复杂因素的交织作用，同时，PM2.5的浓度具有周期性的日变化且随季节不同而有所不同，武汉及其周边地区定性为复合型污染显现区，间接污染 (SO_x, NO_x, NH₃, VOCs, CO)的排放对PM2.5的浓度有重要的贡献，甚至可超过一次源的贡献。根据城市大气污染排放的特征，我们将影响PM2.5的城市污染源大致归为三类：工业源（工业大气污染源），流动源（机动车污染源），面源（民用、商用生活建设污染源）。

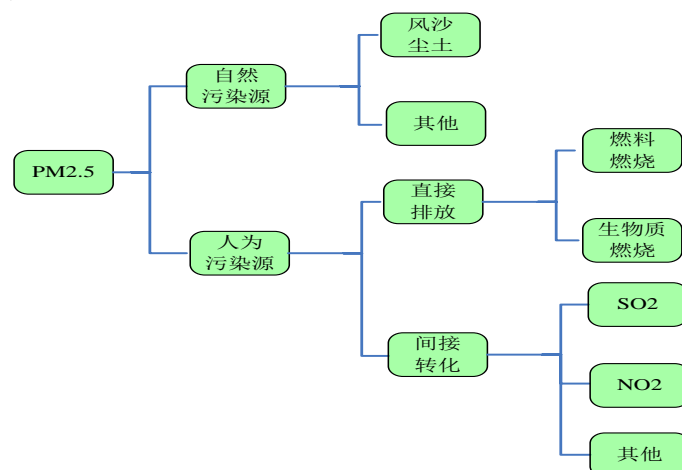


图34 PM2.5的污染源组成

1 工业源大气污染源排放现状

武汉市一直把工业源大气污染防治作为污染防治的首要任务，通过各种手段，有力控制SO₂、NO_x、烟尘和粉尘等大气污染物排放总量。武汉市工业污染物排放总量得到了一定的控制，如表2所示，2010年至2012年SO₂、NO₂、PM₁₀等二次污染源的年均值均有所下降，但是作为一个老工业基地，武汉市第二产业特别是电力、钢铁、建材、化工等高污染高耗能企业比重较大，而高新技术企业、现代服务业所占比重相对较低，产业结构不合理，从源头上导致了能耗高、污染大，企业节能减排任重道远。随着城市的发展，部分工业企业已不适应现有城区功能定位，但搬迁缓慢，工业园区内的循环产业链聚集度低，三废综合利用水平有待进一步提高。

表23 2010-2012年武汉主要二次污染源年均值

	2010	2011	2012
SO ₂ (mg/m ³)	0.041	0.039	0.030
NO ₂ (mg/m ³)	0.057	0.056	0.054
PM ₁₀ (mg/m ³)	0.108	0.100	0.097

2 流动源污染物排放现状

截至2013年6月，武汉市机动车保有量已达143.47万辆，其中绿标车占86.91%，黄标车占汽车总量的13.09%，但黄标车排放的氮氧化物、碳氢化合物、一氧化碳、颗粒物分别占到全市排放量的58.49%、48.30%、43.38%、83.35%。同时，武汉市国III前排放标准的汽车占全市汽车保有量的50.18%，机动车排放标准每提升一个级别，污染物排放就减少30%-50%。按排放标准分类，这表明武汉市汽车老旧车辆所占比例很大，武汉市占汽车保有量13.44%的国I前标准汽车，其排放的四种主要污染物占排放总量的27.5%，而占汽车保有量49.82%的国III及以上标准汽车，其排放的四种主要污染物仅占排放总量的11.06%。如表3所示，2012年武汉市机动车二次污染物排放量较上年增长4%左右，由汽车带来的二次污染源及车辆行驶引起的扬尘日益严重并逐渐成为武汉市的一大主要污染源。

表24 2012年武汉市汽车排放物

排放物	排放量	比上年增长	汽车排放量
氮氧化物(NO _x)	4.84万吨	4.30%	96.64%
碳氢化物(HC)	2.38万吨	3.89%	89.11%
一氧化碳(CO)	20.07万吨	4.30%	90.79%
颗粒物(PM)	0.49万吨	4.67%	98.20%

3 面源污染源排放现状

据统计，10 g泥土经过汽车反复碾轧形成超细灰尘，至少能污染200m²的区域。武汉市每年均有大量工地进行施工,且施工面积逐年增加，扬尘污染问题值得高度重视。

同时，人们由于烧饭、取暖、沐浴等生活上的需要，如炉灶、锅炉等燃烧化石燃料，而向大气排放的煤烟和SO₂等，具有量大、分布广、排放高度低等特点，其危害性不容忽视，而且生活产生的二次污染物具有季节相关性，冬季煤炭燃烧的贡献显著高于其他季节。

(三) 相应治理措施的减排潜力分析

多污染源、多污染物协同控制是细颗粒物污染控制的重要手段，颗粒物来源和构成非常复杂，单纯控制某个污染源排放和单因子控制管理思路已经不能满足颗粒物污染控制的需求，应树立一次污染和二次污染控制相结合，采取多污染物、多污染源协同控制的观念。除了PM₁₀，SO₂，NO_x以外，还应重视二次颗粒物VOCs和氨的污染控制，本文在目前武汉市污染源现状分析的基础上，通过采取细化制定减排目标、调整优化产业结构、推动能效水平提高、强化主要污染物减排、开展农业源污染防治、控制机动车污染物排放等措施，采取一次控制总量、二次加强协同等方式，不仅针对特定污染源的专项减排制定相应的措施，更加注重控制二次污染物的协同控制管理，实现大气复合污染控制减排目标，从而推动大气中细颗粒物PM_{2.5}的治理。

1 工业污染源控制措施

主要采取结构减排与工程减排并举的方式，在大气污染联防联控重点区域积极推进使用清洁能源，改变燃料构成，选用低硫燃料，对重油和煤炭进行脱硫处理，并同时注重对太阳能、氢燃料、地热等新能源开发和利用，以达到节能减排的目的；提高环境准入门槛在重点区域实施更加严格的大气污染物排放标准特别限值，禁止新建、扩建除热电联产以外的燃煤电厂、钢铁厂、水泥厂、大力发展环保产业；深化污染减排推进电力行业和钢铁、石化等非电行业二氧化硫减排治理，加快燃煤机组脱硝设施建设，加强水泥行业氮氧化物治理；改变工业的布局形式，对城区重污染企业实施搬迁，使工业布局尽可能的合理，可方便污染物的扩散，从而减少废气排放量。

2 流动污染源的控制

主要采取管理减排的手段，提升排放标准只能逐步的淘汰旧汽车，这使得三至五年内汽车污染源的控制难以实现，而流动源污染已成为城市PM_{2.5}的主要污染源，加快实施更为严格的汽车排放标准提高燃油品质实施更严格的汽车排放标准，是治理PM_{2.5}最有效的手段，应尽快编制我国的国V、国VI汽车排放标准及相应油品标准，并提出实施计划。现行国III标准对重型汽车颗粒物排放的限值为每公里/小时0.1克（最低燃油消耗率），而国IV标准要求国III标准基础上将颗粒物排放降低了80%以上，不高于每公里/小时0.02克，将车和油作为一个系统，同步实施汽车和油品排放标准，确保汽车排放技术顺利升级；加速淘汰“黄标车”，降低在用车辆尾气排放的污染除了对新生产车辆实行严格的准入制度，加速淘汰高排放“黄标车”、降低在用车辆排放是治理PM_{2.5}的重要手段，“黄标车”尾气排放的污染物是同类满足欧IV标准汽车的20倍左右。禁止在规定的地区使用不符合排放标准的卡车、巴士和柴油乘用车，所有在用的行驶在公路上

的各种汽车也都装上了尾气过滤器，促进了整体大气环境的改善。建议我国加速淘汰“黄标车”，对在用车辆实施加装尾气处理装置的强制措施；发展新能源汽车，推广使用清洁代用燃料建议国家尽快出台节能与新能源汽车发展规划，在积极研制电动汽车与混合动力汽车的同时，针对技术成熟度高、减排效果显著的代用燃料汽车，尽快编制促进政策，大力发展、推广天然气、生物燃料汽车；可先从行驶里程长、排放多的出租车、公交车做起，对使用代用燃料汽车者在价格、税收等方面给予优惠政策。

3 面源的控制减排

将扬尘控制作为城市环境综合整治的重要内容，建立由住房城乡建设、环保、市政、园林、城管等部门组成的协调机构，开展城市扬尘综合整治，加强监督管理。积极创建扬尘污染控制区，控制施工扬尘和渣土遗撒，开展裸露地面治理，提高绿化覆盖率，加强道路清扫保洁，不断扩大扬尘污染控制区面积；结合城市发展和工业布局，加强城市绿化建设，努力提高城市绿化水平，增强环境自净能力。打造绿色生态保护屏障，构建防风固沙体系。实施生态修复，加强对各类废弃矿区的治理，恢复生态植被和景观，抑制扬尘产生。

结合上述分析并根据《重点区域大气污染防治“十二五”规划》，我们进一步估计出相关措施的减排潜力与费用效益比如表25所示。

表25 措施减排潜力与费用效益比分析

污染源	措施	减排潜力	费用效益比 (亿元/万吨)
工业源	二氧化硫综合治理	短期	3.20
	氮氧化物综合治理	短期	2.18
	工业烟粉尘	短期	5.46
	工业布局调整	长期	---
流动源	新能源的开发利用	长期	---
	黄标车淘汰措施	短期	4.98
	升级汽车排放标准	中长期	---
面源	扬尘综合治理	中短期	2.46
	加强城市绿化建设	中长期	---

3.3.3.3 模型求解

根据上述分析，将5年的治理计划转化为求解优化模型：

$$\max \{B(P) - C(P)\} \tag{48}$$

式中P代表PM2.5减排的量，B(P)表示减排带来的综合效益（社会环境效益+经济效益+公众接受度等），C(P)表示减排产生的经济费用。对于单变量的优化问题其最优点

在 $dB/dP - dC/dP = 0$ 时达到，即PM2.5减排量的最优取值 P_{opt} 意味着产生的边际利益等于消耗的边际费用。

社会综合效益 $B(P)$ 分析：严重的大气污染，将威胁人民群众身体健康，增加呼吸系统、心脑血管疾病的死亡率及患病风险，腐蚀建筑材料，破坏生态环境，导致粮食减产、森林衰亡，造成巨大的经济损失，改善大气环境质量是创造一个良好的城市投资环境和保障城市可持续发展的必要条件，减排带来的综合效益主要包括社会环境效益、经济效益和公众接受度等。PM2.5对环境与较粗的大气颗粒物相比粒径较小，含有大量的有毒有害物质，且寿命长、输送距离远，因而对大气环境质量的影响更大，对空气质量和能见度的影响比PM10更直观，从公众接受度的角度出发，PM2.5对人体健康特别是对呼吸系统和心血管系统造成伤害，包括呼吸道受刺激、咳嗽、呼吸困难、降低肺功能、心律失常、非致命性的心脏病等疾病的高发，据统计，如果空气中PM2.5的浓度长期高于 $10\mu\text{g}/\text{m}^3$ ，死亡风险就开始上升。浓度每增加 $10\mu\text{g}/\text{m}^3$ ，总的死亡风险就上升4%，得心肺疾病的死亡风险上升6%，得肺癌的死亡风险上升8%。除了其本身具有毒性外，PM2.5的粒径小，不能被人体鼻腔、喉咙所阻挡，为一些化学物质、细菌、病毒通过呼吸系统吸入沉积提供了载体，如果长期吸入细颗粒物污染的空气，会导致呼吸系统和其他系统与结构的损害。最近一系列的环评抗议事件表明，公众越来越关注空气环境污染对自身健康和当地环境的影响，而企业和政府在做经济目标的同时也必须将公众接受度作为一项重要指标。根据空气污染质量状况，我们可以定性的给出综合社会效益 $B(P)$ 的表达式：

$$B(P) = P * Q * \delta \quad (49)$$

式中， P 为减少的平均浓度值， Q 为产生的综合效益， δ 为公众满意度。

这意味着在重度污染的情况下，公众会对政策制定者提出的任何产生经济效益但不改善环境的计划产生抵触并有可能发生抗议，在轻度或中度污染的情况下，减少污染浓度产生的效益会再某种程度上被负面因素抵消，在空气质量为良或优时，任何降低污染浓度的措施会进一步增加社会效益，同时注意到减排产生的费用 $C(P)$ 随减排浓度 P 的增加而增加。

综合上述分析，我们给出设定5年年终平均治理指标的原则为：在尽可能最大化社会效益的同时，减少所投入的费用，即在污染情形下，采取与最优解偏离度最小的解使得空气质量有质的提升，在空气质量基本达标的情形下，使得与最优解的偏离值最小以期付出最小的费用，以武汉市目前的PM2.5年平均浓度估计为 $280\mu\text{g}/\text{m}^3$ 为例，空气质量状况属于重度污染，属于公众接受度很低的情形，意味着空气质量亟需改善，通过对当年边际利益进行分析，我们确定第一年的全年年终平均治理指标为 $80\mu\text{g}/\text{m}^3$ ，使得多投入专项经费来迅速使空气质量水平回归到中度污染水平，同理给出平均治理指标为 $\{e_1=80, e_2=50, e_3=50, e_4=28, e_5=27\}$

3.3.4 基于变约束条件的二次规划费用效益优化模型

3.3.4.1 建模分析

本节考虑减排措施的经济费用优化问题，设 $\{x_i, i=1,2,3,4,5\}$ 表示依靠综合治理投入减少的PM2.5浓度， $\{y_i, i=1,2,3,4,5\}$ 表示依靠专项治理投入减少的PM2.5浓度， $\{e_i, i=1,2,3,4,5\}$ 表示每年的全年年终平均治理指标，则可以得到：

$$x_i + y_i = e_i \quad (50)$$

设A为综合治理总投入费用(百万)，B为专项治理总投入费用(百万)，可以得到目标函数为：

$$A = x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 \quad (51)$$

$$B = (x_1 + y_1)^2 \times 0.005 + (x_2 + y_2)^2 \times 0.005 + (x_3 + y_3)^2 \times 0.005 + (x_4 + y_4)^2 \times 0.005 + (x_5 + y_5)^2 \times 0.005 \quad (52)$$

则将原问题转化为自定义约束的非线性优化问题，不同的减排目标的制定对应不同的约束条件，得到不同的可行域下的最优解：

$$\begin{cases} \min(A + B) \\ s.t. \ e_1 + e_2 + e_3 + e_4 + e_5 = 245 (x_i > 0, y_i > 0, i = 1, 2, 3, 4, 5) \end{cases} \quad (53)$$

3.3.4.2 模型建立与求解

本文选择了三种方案：年平均治理指标等差下降模型、年平均治理指标等比例下降模型和我们制定的方案作比较，通过分析单位减排成本可以得到当年综合治理的单位减排成本1百万/单位，当年专项治理的单位减排成本0.005 e_i 百万/单位，注意到在年终平均治理指标计划 $e_i \leq 200 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 的情形下，综合治理的单位减排成本均高于专项治理减排成本，而5年内需要减排的PM2.5浓度总指标为 $245 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ，故在三种方案中均假设治理计划必须采取综合治理与专项治理相结合的手段，且每年的综合治理费用随宏观经济的发展均按比例增加，即 $x_{i+1} = k_i x_i$ ，根据世界银行估算，环境保护投入达到GDP的2%，才能抑制环境的恶化趋势，达到GDP的3%才能使环境质量趋向改善，所以每年的综合治理的增长比例至少为当年GDP的增长比例，即 $k_i \geq 7.5\%$ 左右。

三种方案的年平均治理指标制定如图35所示。

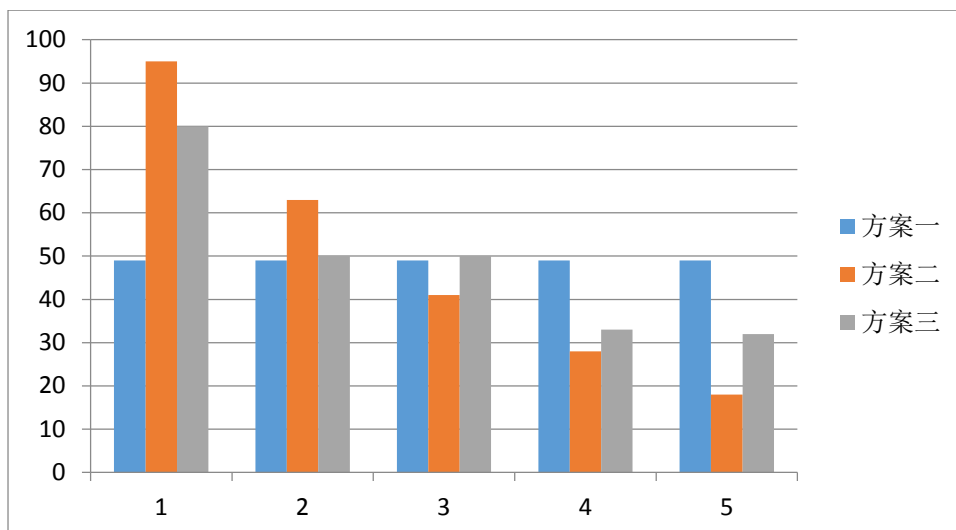


图35 三种方案的年终平均治理指标

方案一：年平均治理指标等差下降模型。为了达到预定的PM2.5减排计划，可以得到5年的年终平均治理指标计划为 $\{e_1=49, e_2=49, e_3=49, e_4=49, e_5=49\}$ ，通过求解二次规划得到总治理费用为：88.7787(百万)，并且此时得到的总治理费用为全局最优解即最经济的方式，但是从边际利益角度分析，由于第一年的年终平均浓度统计指标处于较高的水平，空气质量处于重度污染，采取平均化的减排计划使得在减排初期甚至更长的时间内空气质量得不到较好地改善，这是公众所不能承受的，同时空气质量严重污染也会影响经济投资环境从而进一步减少边际利益。

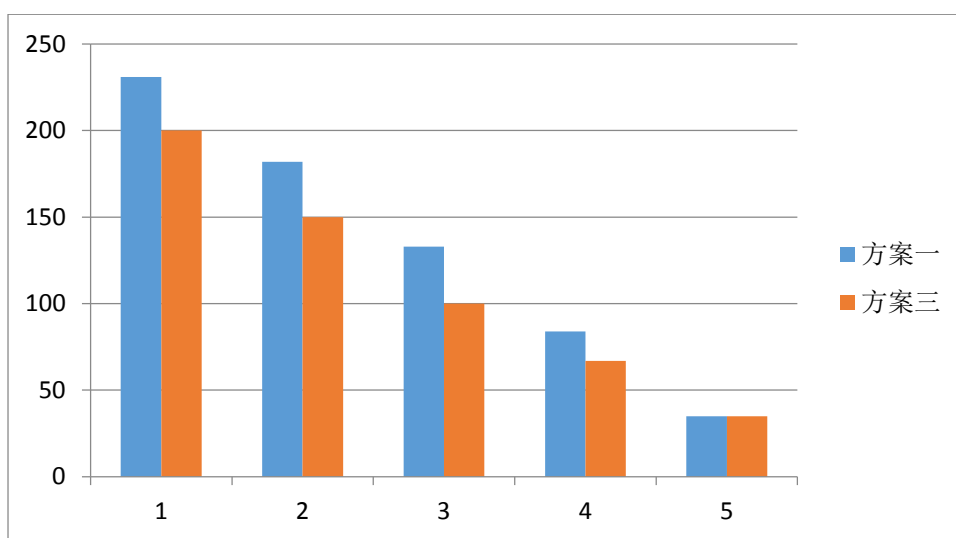


图36 方案一与方案三减排效果对比图

方案二：年平均治理指标等比例下降情形，为了达到预定的PM2.5减排计划，可以得到下降比例 $k=34.02\%$ ，即每年需要减排的PM2.5年终平均治理指标为上一年年终平均浓度统计指标的34.02%，从而得到5年的年终平均治理指标计划为 $\{e_1=95, e_2=63, e_3=41, e_4=28, e_5=18\}$ ，通过求解二次规划，得到总费用为107.669(百万)，

通常政策制定者采取这种比例指标的方式制定方案，但是，通过与我们的方案对比发现，在影响边际利益不大的情况下，该方案需要投入更多的费用。

方案三：本文制定的PM2.5减排方案： $\{e_1=80, e_2=50, e_3=50, e_4=28, e_5=27\}$ ，此时通过求解二次规划，得到总费用为96.3187(百万)，进一步得到专项治理经费 $\{y_1=55, y_2=54.75, y_3=39.48, y_4=39.21, y_5=28.92\}$ ，与方案一相比，我们的减排总费用仅多出7.54（百万），而达到的减排效果如图36所示，可以看到在同样完成减排任务指标的条件下，方案三平均污染物浓度均低于方案一；与方案二相比，在达到相同污染级别的情形下，方案三比方案二节约了11.35(百万)。

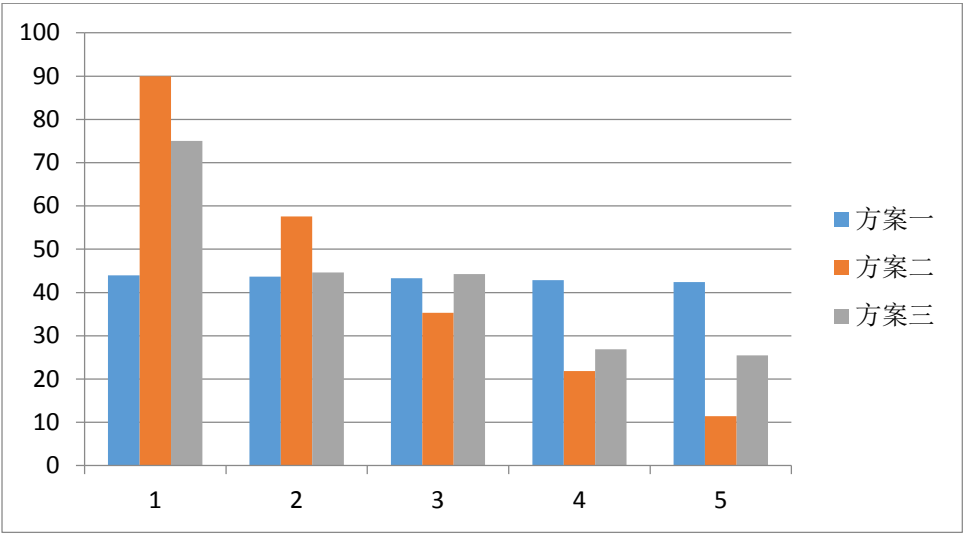


图37 三种方案的专项治理费用对比

根据如图37所示每年的专项治理经费并结合表25中相应措施的减排潜力与费用能效比，我们给出专项经费使用的原则是首先采取减排潜力为短期的且费效比较低的措施，以期在最短的时间内用最小的经济代价实现最大的减排力度，专项减排经费具体措施如表26所示：

表26 专项经费年度使用计划

年份	专项治理经费（万元）	专项治理措施
第一年	75.00	重点解决：工业源氮氧化物综合治理 面源扬尘综合治理
第二年	44.65	重点解决：工业源二氧化硫综合治理 流动源黄标车淘汰补偿机制
第三年	44.27	重点解决：流动源黄标车淘汰补偿机制 工业源烟粉尘综合治理
第四年	26.87	重点解决：工业布局调整

		加强城市绿化建设
第五年	25.44	重点解决：工业布局调整 加强城市绿化建设

四、模型评价

(1) 对于AQI指标相关性模型，利用多元线性回归模型，通过 R^2 检验、F检验、T检验等方式分析了各指标间的相关性，得到了相关性系数与回归模型参数。通过设定控制变量分析了PM2.5与其它指标的偏相关关系，有效避免了指标间的相互影响。建模思路清晰，方法合理。不足之处在于，由于数据种类和数量有限，所建模型只能解释86%的观测数据。

(2) 对于PM2.5与TSP的相关性分析。采用统计方法分析了二者的相关性，得到了相关系数，并利用证明了结论的正确性。不足之处在于仅有周测量数据，无法具体分析雾天、扬沙等天气对二者相关性的影响。

(3) 对于PM2.5时空分布和污染评估，分别在时域和空间域对PM2.5的情况进行了分析，得出了PM2.5随时间、空间变化的规律。分别依据平均浓度和最高浓度计算了空气质量分指数，然后根据相关指标评价了各个区前三个月的空气质量。不足之处在于PM2.5数据不足一年，无法更精确研究季节对PM2.5浓度的影响。

(4) 对于PM2.5发生规律模型，首先通过查阅资料建立了影响PM2.5发生的指标体系，其次利用层次分析法筛选出影响较大的指标，然后根据现有数据建立了多因素回归模型，并对今年8月内10天的PM2.5浓度数据进行了有效预测。不足之处在于缺少重要性排序数据，在层次分析时仅做了定性说明。

(5) 对于PM2.5演变模型。首先采用修正的高斯模型描述PM2.5的发展态势，引入基于结构网格的求解偏微分方程的数值迭代方法，将西安市13个监测站映射到网格节点上，并对湿度、风速和季节等影响因素进行离散化，通过数值迭代的方法进行模拟仿真研究，最后进行误差分析验证了模型的有效性。不足之处在于模型侧重分析比对了监测站局域的扩散结果，对全域的扩散效果分析不够。

(6) 对于PM2.5扩散预测模型。从PM2.5的自由扩散分析出发，建立了高斯烟羽扩散预测模型，然后针对地面粗糙度、风向等因素对该模型进行了修正，对紧急情况下PM2.5的扩散进行了有效解释。不足之处在于没有考虑其它PM2.5源的扩散。

(7) 边际利益最优条件下的减排指标优化模型：首先以2013年武汉市的大气空气质量监测数据为原始数据，通过分析其他污染物与首要污染物PM2.5的相关性，确定减排治理的污染源，在确定主要污染源贡献度的基础上基于边际效益理论建立了优化模型，并对武汉市2014-2018年的减排目标进行了优化求解。不足之处在于评价边际效应时只是定性分析了减排力度或者说大气环境质量对社会效益的影响，没有定量的说明。

(8) 基于变约束条件的二次规划费用优化模型：首先通过相应减排措施的减排潜力和费效比对减排措施进行了聚类分析，在治理指标给定的情况下求出了综合治理与专项治理的局部最优解，并对全局最优解的实际不可行性进行了分析，不足之处在于对于相应减排措施的细分程度不够，在实践过程中可能还要查阅更加具体的实施方案。

参考文献

- [1] 杨复沫,贺克斌,马永亮,张 强,余学春.北京 PM_{2.5} 浓度的变化特征及其与 PM₁₀、TSP 的关系[J], 中国环境科学, 2002, 22(6):506-510.
- [2] 何晏春,郜永祺,王会军.2011 年 3 月日本福岛核电站核泄漏在海洋中的传输[J].海洋学报,2012, 7 (34).
- [3] 韩明山,梅 宁,梁泽德.城市大气污染扩散监测模型的理论及试验研究[J].环境工程,2004,4 (22):62-67.
- [4] NACAA PM_{2.5} Modeling Implementation Workgroup. PM_{2.5} Modeling Implementation for Projects Subject to National Ambient Air Quality Demonstration Requirements Pursuant to New Source Review[R].2011 ,07.
- [5] 傅敏宁,郑有飞,徐星生,牛鲁燕.PM_{2.5} 监测及评价研究进展[J].气象与减灾研究, 2011 ,12 (34).
- [6] 朱增银,李 冰,赵秋月,夏思佳,李 荔.对国内外 PM_{2.5} 研究及控制对策的回顾与展望[J].环境科技, 2013, 02 (26).
- [7] 但德忠.环境空气 PM_{2.5} 监测技术及其可比性研究进展[J].中国测试,2013,03 (39).
- [8] 廖乾邑,张 巍,陈建文,曹 攀,范文武.环境空气背景值中 PM_{2.5} 和 PM₁₀ 的相关性分析[J].四川环境,2013,04 (32).
- [9] 春香,赵淑敏.几种大气污染扩散模式的应用比较[J]. 环境科学与管理, 2007,10, (32).
- [10] 王 玮,汤大钢,刘红杰,岳 欣,潘 志,丁 焰.中国 PM_{2.5} 污染状况和污染特征的研究[J].环境科学研究,2000,01 (13).
- [11] 周灵君,夏思佳,姜伟立.建立江苏省 PM_{2.5} 环境空气质量标准的需求探讨[J].环境工程技术学报,2011,05, (01).
- [12] 徐 敬,丁国安,颜 鹏,王淑凤,孟昭阳,张养梅,刘玉彻,张小玲,徐祥德.北京地区 PM_{2.5} 的成分特征及来源分析应用[J].气象学报,2007,10, (18).
- [13] 赵 睿. 武汉市大气污染特征分析及其防治对策[J].环境科学,2005.09, (46)

- [14]李 芳. 西安市大气颗粒物 PM_{2.5}污染特征及其与降水关系研究[D].西安建筑科技大学,2012,05.
- [15]魏复盛,滕恩江,吴国平,胡 伟.我国 4 个大城市空气 PM_{2.5}、PM₁₀ 污染及化学组成[J].中国环境监测,2001,01, (17).
- [16]周 亮,梅凡民,傅成诚,张 莎.基于单点观测的西安东二环附近 TSP 特性研究[J].环境科学与管理,2010,01,(35).
- [17]杨复沫,贺克斌,马永亮,张 强,姚小红.北京大气细粒子 PM_{2.5} 的化学组成[J].清华大学学报(自然科学版),2002,12, (42).