

全球PM2.5扩散模拟: 拉格朗日粒子模型 vs 高斯烟羽模型

1. 全球大气污染物排放数据源

- **EDGAR**: 欧盟JRC开发的全球排放数据库(Emissions Database for Global Atmospheric Research) 提供了历史至今的各类大气污染物排放数据,包括细颗粒物PM10、PM2.5及碳组分(BC、OC)等,空间分辨率高达0.1° 1 2 。EDGAR提供按国家、部门的年际和格点化排放图,可免费下载使用。
- CAMS排放清单: 欧盟哥白尼大气监测服务(Copernicus Atmosphere Monitoring Service,CAMS)发布了全球格点化的人为与自然排放清单,包括化石燃料、交通、工业和生物源、海洋、土壤等排放 3 。该数据集以NetCDF格式提供全球0.1°(人为)至0.5°(自然)分辨率格点数据,时间分辨率可达 月度 4 5 。
- 生物质燃烧排放:全球火源排放数据库(GFED)和NOAA的快速火焰排放数据集(QFED)提供生物质燃烧(森林火灾、农作物焚烧等)的排放估计 ⁶ 。例如GFED4.1s和QFED2.5等数据库已被用于全球火源PM2.5浓度模拟研究 ⁶ 。这些数据可用于补充人为排放之外的自然PM2.5源。
- 地面观测与同化产品: 开放空气质量平台OpenAQ聚合了全球数百个监测站点的实时PM2.5观测数据 7。尽管不是排放数据,但可作为模型模拟的验证参考。NASA等机构的全球同化/再分析产品(如 GEOS-CF、MERRA-2、CAMS再分析EAC4等)提供了全球PM2.5浓度场 8 ,可用于边界条件和初始 场。
- **气象再分析数据**:全球污染扩散模拟还需气象场驱动。自由可获取的再分析数据集如ECMWF的ERA5提供逐小时全球风场、温度等气象要素 ⁹ ;美国NCEP/NCAR再分析、GFS分析资料等也可用于拉格朗日粒子模型的风场输入。

2. 模型可行性评估及可用工具

- 高斯烟羽模型适用于稳定均匀流场下的连续点源短距离(典型数公里量级)扩散,核心假设在于下风向浓度分布服从高斯分布 ¹⁰ 。标准的稳态烟羽公式(如EPA AERMOD、ISC模型等)只能在相对匀质条件下使用,并且距离风源不远时有效 ¹⁰ 。在全球尺度(复杂气象、地形多变)下,单纯高斯模型难以准确模拟大范围传输。
- · 拉格朗日粒子模型能追踪污染物随大气风场长距离传输的过程,通过追踪大量虚拟颗粒粒子并叠加湍流 扩散效果来模拟非稳态扩散。典型模型如FLEXPART ¹¹、HYSPLIT ¹²等已被证明可用于从局地到全球 尺度的运输过程。其中,FLEXPART作为开源的拉格朗日模型,可处理从几十米到全球尺度的扩散问题 ¹¹;HYSPLIT是NOAA提供的混合拉格朗日/欧拉模式,也支持全球范围的轨迹和扩散模拟 ¹²。
- · 资源与工具推荐:对于全球尺度模拟,可考虑使用成熟的大气化学传输模型和粒子模式。开源模型如 FLEXPART(Fortran/Python)和HYSPLIT(Fortran,可使用GUI或命令行)均可免费使用。若需更复 杂化学作用,可采用GEOS-Chem、WRF-Chem等全球/区域化学输运模式。对于MATLAB用户,可借助 MATLAB内置或第三方工具箱(如Mapping Toolbox进行地理绘图,File Exchange上的 gaussianPlume 函数等)自行实现简化模型。驱动风场数据可使用ECMWF ERA5或NCEP再分析资料。在实现上,可通 过MATLAB调用外部模型(如利用系统命令运行HYSPLIT),也可直接在MATLAB中编程实现简化的拉格 朗日随机行走或高斯分布算法。

3. MATLAB中模拟指导

• 拉格朗日粒子模型: 首先读取或构造风场数据(如经纬度网格上的风速 u,v),以及设定污染源点坐标和排放强度。然后在MATLAB中生成大量表示污染物的虚拟粒子,每个粒子随着时间步长 dt 按平均风

场平移,并添加湍流扩散的随机位移(可用正态分布随机数实现)。可简化为二维平面处理(忽略地球曲率),或在经纬度坐标下小步长移动,并对粒子越界进行处理。这样可以模拟污染物在24小时内的输送和扩散轨迹。

4. 模型示例与结果展示

模型初始化与污染源设置

```
% 定义污染源参数 sourceLon = [100, 120]; % 污染源经度(可设置多个源) sourceLat = [30, 10]; % 污染源纬度 Q = [1.0, 0.5]; % 每个源的排放速率 (kg/s) % 定义模拟时间和步长 T_end = 24*3600; dt = 600; % 模拟24小时,以秒为单位,步长10分钟
```

拉格朗日粒子扩散模拟(示例)

```
% 粒子数目与初始化位置(所有粒子初始均位于源点处)
numP = 10000;
%将粒子分配到不同源(均匀分配示例)
particles = zeros(numP,2);
for i=1:length(sourceLon)
 idx = (1 + (i-1)*numP/length(sourceLon)) : (i*numP/length(sourceLon));
 particles(idx,:) = repmat([sourceLon(i), sourceLat(i)], numP/length(sourceLon), 1);
end
% 简化假设: 使用常量风场 (可改为读取ERA5等数据)
u = 5; v = 0; % 水平风速 (m/s)
         % 粒子水平扩散系数 (m^2/s)
K = 10;
for t = 0:dt:T_end
 % 粒子随机行走: 平均位移 + 湍流扩散
 particles(:,1) = particles(:,1) + u*dt/1000 + sqrt(2*K*dt)*randn(numP,1)/1000;
 particles(:,2) = particles(:,2) + v^*dt/1000 + sqrt(2^*K^*dt)^*randn(numP,1)/1000;
% 粒子模拟结束, particles(:,1)为经度, (:,2)为纬度
```

以上代码示例使用简化的恒定风场和扩散系数,粒子位置单位以千米为例。实际应用中,可替换风速 u,v 为读入的网格风场,并根据高度层或地形进行改进;也可使用更精细的随机过程模拟垂直扩散和沉降等效应。

高斯烟羽模型模拟(示例)

```
%设置单个点源参数
Q0=1.0; %排放强度 (kg/s)
u0=5.0; %风速 (m/s)
H=50; %烟羽有效释放高度 (m)
%计算扩散参数 (简化常数或经验公式)
sig_y=500; sig_z=200;
%构建网格 (单位m)
[x,y]=meshgrid(0:1000:50000, -20000:1000:20000);
%计算浓度分布 (假设z=0地面浓度)
C=(Q0./(2*pi*u0*sig_y*sig_z)) ...
.* exp(-y.^2/(2*sig_y^2)) * (exp(-(H).^2/(2*sig_z^2))+exp(-(H).^2/(2*sig_z^2)));
% C是网格点浓度 (kg/m^3),可转为μg/m^3等
```

上述代码在二维网格上计算了高斯烟羽模型的地面浓度分布。可以绘制\$C\$的二维图像或轮廓,观察随距离减弱的规律。多源情形下,可对每个源分别计算浓度并叠加。

模拟结果可视化

```
% 示例: 绘制拉格朗日粒子终点分布(散点图)
figure; worldmap('World');
load coastlines
plotm(coastlat, coastlon, 'k'); % 绘制海岸线
scatterm(particles(:,2), particles(:,1), 2, 'filled'); % 粒子位置 (lat, lon)
title('拉格朗日粒子模拟污染物分布');
% 示例: 绘制高斯模型浓度场
figure; surf(x/1000, y/1000, C, 'EdgeColor', 'none');
xlabel('下风向距离 (km)'); ylabel('横向距离 (km)'); zlabel('浓度');
title('高斯烟羽地面浓度分布');
colorbar; view(2); % 俯视图
```

可用 worldmap 、 plotm 等函数在地图上标出粒子位置或等浓度线; 也可使用 mesh 、 surf 等绘制浓度场平面图。MATLAB支持将这些图像输出为动画(利用 getframe 和 VideoWriter)展示污染物随时间传播过程。

模拟数据输出

```
% 假设我们要输出拉格朗日粒子最终位置的表格
T = table(particles(:,1), particles(:,2), 'VariableNames', {'Longitude','Latitude'});
writetable(T, 'particle_endpoints.csv');
% 输出高斯模型浓度场为CSV
[idx_i, idx_j] = meshgrid(1:size(C,1), 1:size(C,2));
lon_vals = x(:); lat_vals = y(:);
conc_vals = C(:);
T2 = table(lon_vals, lat_vals, conc_vals, 'VariableNames', {'X_m','Y_m','Concentration'});
writetable(T2, 'gaussian_concentration.csv');
```

上例使用 writetable 将模拟结果保存为CSV格式表格: 粒子模拟保存经纬度坐标,高斯模型保存网格坐标和浓度值。可根据需要输出不同字段的CSV文件,方便后续分析和可视化。

参考文献:	全球排放数据库如EDGAR	(含PM2.5排放) 1	2	CAMS	排放清单	<u>4</u> 3	、G	FEDク	と源排放数	牧据等
6 提供了模	拟所需的排放输入;Open	AQ提供全球PM2.5监	则数据	7;	Lagrang	ian樽	型	(如F	LEXPART	
11 、HYSPL	IT 12) 和高斯模型在应用	范围和假设上各有特点	点,需	酌情选	择。 10	12	11	3	8	

1 EDGAR - The Emissions Database for Global Atmospheric Research

https://edgar.jrc.ec.europa.eu/dataset_ap50

2 EDGAR - The Emissions Database for Global Atmospheric Research

https://edgar.jrc.ec.europa.eu/emissions_data_and_maps

3 4 5 CAMS global emission inventories

https://ads. atmosphere. copernicus. eu/datasets/cams-global-emission-inventories? tab=overview

6 ESSDD - Global high-resolution fire-sourced PM2.5 concentrations for 2000–2023

https://essd.copernicus.org/preprints/essd-2024-414/

7 OpenAQ

https://openaq.org/

8 NASA SVS | Particulate Matter (PM) 2.5

https://svs.gsfc.nasa.gov/5151/

9 ECMWF Reanalysis v5 | ECMWF

https://www.ecmwf.int/en/forecasts/dataset/ecmwf-reanalysis-v5

10 Microsoft Word - cover3

https://apsi.tech/material/modeling/IntroductiontoGaussianPlumeModels.pdf

11 GMD - The Lagrangian particle dispersion model FLEXPART version 10.4

https://gmd.copernicus.org/articles/12/4955/2019/

12 HYSPLIT - Air Resources Laboratory

https://www.arl.noaa.gov/hysplit/