节能 ENERGY CONSERVATION

辽宁省大气污染物污染特征分析与预测

孟祥禹¹ 高成康¹* 陈宗娇² 杨薇薇³

(1. 东北大学 国家环境保护生态工业重点实验室, 辽宁 沈阳 110819; 2. 辽宁省生态环境监测中心, 辽宁 沈阳 110161; 3. 辽宁省营口生态环境监测中心, 辽宁 营口 115000)

摘 要: 为了识别辽宁省大气污染物的分布特征以及简单预测 2021~2025 年沈阳市污染物污染浓度变化趋势,基于辽宁省 14 个城市 6 项污染物 $PM_{2.5}$ 、 SO_2 、 O_3 、 NO_2 、 PM_{10} 、 CO 的浓度监测结果,进行 k—means 聚类并利用灰色预测模型对沈阳市重点污染物浓度数值进行灰色预测。结果显示:在对污染物年均浓度聚类中,可将 14 个城市聚为 3 类。其中类 3 有 8 个城市,受本地源和扩散条件影响,各项污染物浓度均处于较高水平,整体空气质量最差;类 1 包括阜新市和朝阳市两个城市, NO_2 浓度降低(比类 3 低 30% 左右)明显,更多表现为受工业和散煤燃烧影响的 SO_2 污染和受外来源输送的 O_3 污染,整体空气质量次之;类 2 包括 4 个城市,各项污染物浓度水平相对较低,整体空气质量最好。污染物年均浓度空间分布大体呈现中部污染最严重、西部次之、东南部污染最轻的分布特征。根据灰色预测结果发现,在 2021~2025 年除 CO 与 O_3 浓度有所增加,其余污染物浓度均会以不同的降幅下降。沈阳市应加强对当地移动源排放的管控。

关键词:空气质量; 大气污染物; 聚类分析; 灰色预测

中图分类号: X51

文献标志码: A

文章编号: 1004-7948 (2024) 02-0081-04

doi: 10.3969/j.issn.1004-7948.2024.02.023

引言

空气污染问题日益受到人们广泛关注 $^{[1]}$ 。空气污染物主要包括 PM、 NO_x 、 SO_2 、CO、 O_3 和有机污染物 $^{[2]}$ 。影响污染物扩散的因素通常包括气象、地形条件等,气象条件一般包括大气温度、气压、风速和相对湿度等 $^{[3]}$ 。

ZHANG^[4]等基于因子分析和聚类分析,对我国 74个城市的主要大气污染物进行了识别,同时也有不少的学者在京津冀、长三角等城市群进行了研究^[5-6]。在较大尺度上也有基于单个特定污染物的研究^[7],但很少有基于一个省份的城市群污染物浓度进行系统分析与预测的研究。

影响辽宁省整体空气质量的主要污染物为颗粒物和 臭氧,其中细颗粒物浓度超过国家标准^[8-11],其他污染物 也存在不同程度的超标现象。文中重点分析2020年辽宁 省14个城市的大气污染物分布特征、主要污染类型以及 区域划分,对年均污染物浓度数值分布进行具体分析。 以沈阳市为例,对6项污染物浓度数值进行灰色预测, 为辽宁省城市空气质量污染治理提供参考。

1 数据来源与研究方法

1.1 研究区域与数据

数据源自辽宁省生态环境监测中心,包括 2020 年辽宁省 14 个城市和沈阳市 2016~2020 年 6 项大气污染物 $(PM_{25}, SO_2, O_3, NO_2, PM_{10}$ 和 CO)的日均浓度值,分别

为 SO_2 日平均浓度($\mu g/m^3$)、 NO_2 日平均浓度($\mu g/m^3$)、CO 日均值第95 百分数浓度($m g/m^3$)、 O_3 日最大 8 h 第 90 百分数浓度($\mu g/m^3$)、 $PM_{2.5}$ 日均浓度($\mu g/m^3$)、 PM_{10} 日均浓度($\mu g/m^3$)。

1.2 研究方法

研究采用k-means 对数据聚类,设定空间中k个点为聚类中心,对最靠近聚类中心的对象归类。通过迭代的方法,逐次更新各聚类中心的值,直至得到最好的聚类结果[12]。聚类分析能够充分地显示污染物的空间分布特征,也可以分析区域间的污染特征,进而解释不同区域间的联系与区别。文中利用 SPSS 软件进行 k-means 聚类。在污染物浓度数值灰色预测过程中,考虑 GM(1,1)模型模拟及精度不稳定等原因[13],采用 DGM(1,1)模型对沈阳市6种污染物浓度数值进行预测。

设X⁽⁰⁾为非负序列。

$$X^{(0)} = \left[X^{(0)}(1), X^{(0)}(2), \cdots X^{(0)}(n) \right] \tag{1}$$

其一次累加生成序列为:

$$X^{(1)} = \left[X^{(1)}(1), X^{(1)}(2), \dots X^{(1)}(n) \right]$$
 (2)

$$X^{(1)}(k) = \sum_{i=1}^{k} X^{(1)}(i), k = 1, 2, \dots, n$$
 (3)

一阶单变量灰色预测模型,即DGM(1,1)模型为:

$$X^{(1)}(k+1) = \beta_1 X^{(1)}(k) + \beta_2 \tag{4}$$

作者简介: 孟祥禹(1995—), 男, 硕士在读, 研究方向为区域污染源解析。

通信作者: 高成康(1977-), 女,教授,研究方向为流程工业的环境系统研究与工业区域污染源解析。

基金项目: 国家自然科学基金(项目编号: 41871212); 中央高校重点科学研究引导项目(项目编号: N2025008)

收稿日期: 2023-05-29

引用本文: 孟祥禹,高成康,陈宗娇,等. 辽宁省大气污染物污染特征分析与预测[J]. 节能, 2024, 43(2): 81-84.

节能 ENERGY CONSERVATION

NO.02 2024

2 聚类结果及分析

对辽宁省14个城市的6项污染物年均浓度数值进行Z-score标准化,利用SPSS软件进行k-means聚类。通过聚类将14个城市聚为3类。类1包含朝阳市和阜新市;类2包含大连市、丹东市、盘锦市和铁岭市;类3包含沈阳市、鞍山市、抚顺市、本溪市、锦州市、营口市、辽阳市和葫芦岛市。年均聚类中心分布如图1所示。

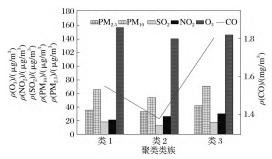


图1 年均聚类中心分布

由图1可知,类3空气质量最差,污染物质量浓度整体处于较高水平(除 O_3 外)。其中, PM_{10} 质量浓度高达70.62 μ g/m³, $PM_{2.5}$ 质量浓度达到42.00 μ g/m³,高于我国国家环境空气质量二级标准。3类聚类中心的 O_3 的质量

浓度数值几乎持平。类1空气质量次之,其中 SO_2 质量浓度数值较类3几乎持平, O_3 质量浓度升高约7%,其余浓度较类3均略低, NO_2 低30%左右, $PM_{2.5}$ 降低15%,更多表现为受工业和散煤燃烧影响的 SO_2 污染以及受外来源输送的 O_3 污染。类2污染物质量浓度相对较低,空气质量最好,其中 NO_2 较类1高24%,其余均较类1略低, $PM_{2.5}$ 降低6%, PM_{10} 降低18%,CO降低11%, O_3 降低11%, SO_2 降低29%,此类城市更多表现为受交通源影响的 NO_3 污染。

2020年辽宁省6项污染物年均质量浓度空间分布大体呈现中部污染最严重,西部次之,东南部污染较轻。这是由于辽宁东西两侧是山地丘陵,中部为辽河平原,呈马蹄形向渤海倾斜,中部城市群密集,重工业较多,燃煤、秸秆等污染排放量较大;辽宁省东南部临海,大气污染物扩散较好,海洋对空气有净化作用,重工业较少。

3 辽宁省大气污染季节性变化特征

辽宁省14个城市六项污染物的月均质量浓度变化情况如图2所示。除 O_3 外,其余各污染物浓度整体呈现夏季低、冬季高的U形分布趋势,而 O_3 随季节呈现倒U形分布趋势。

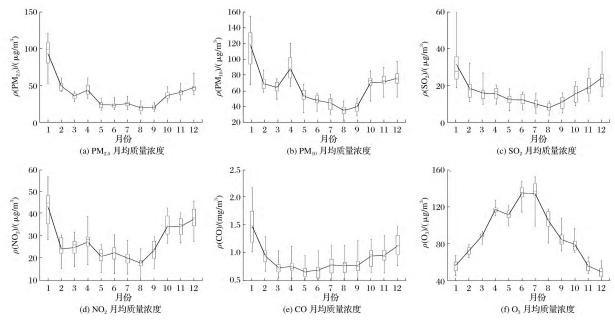


图2 辽宁省14个城市六项污染物的月均质量浓度变化情况

各城市的 PM_{2.5}、PM₁₀、SO₂、NO₂和 CO 质量浓度差异均在1月最大,在6月、7月和8月较小。其中,PM_{2.5}最大差异为67.29 μg/m³,最高值(120.29 μg/m³)出现在辽阳市,最低值(53.00 μg/m³)出现在丹东市。辽阳市地处辽宁省污染严重的中部地区,大量重工业的污染排放和采暖期大量化石燃料的燃烧,导致污染物浓度较高。丹东市位于辽宁省东南沿海地区,地理位置优越,距离中部城市群较远,城市重工业较少,且有良好的大气扩散条件,使得污染物浓度较低。SO₂最大差异为40.61 μg/m³,最高值出现在葫芦岛市(59.55 μg/m³),最低值出现在大连

市(18.94 µg/m³)。NO₂最大差异为28.36 µg/m³,最高值出现在沈阳市(56.25 µg/m³),最低值出现在阜新市(28.16 µg/m³)。鞍山市和沈阳市的CO和NO₂排放量在1月较为相近,均处于较高水平,原因主要是鞍山市为铁城市,CO排放量大,且两个城市地处辽宁省中部,交通发达,燃料机动车污染物排放也是原因之一。夏季大气污染扩散条件较好,湿沉降作用较强,使得PM、NO₂、SO₂和CO污染物的质量浓度较低,而O₃是由前体物(NOҳ、VOCS)在光化学反应下产生的二次污染物,受光照强度影响较大,因此O₃质量浓度在夏季达到最高,在冬季最低。

NO.02 2024

83

节能 ENERGY CONSERVATION

4 灰色预测结果及分析

模型的性能只有通过特定的误差检验,其对数据未来发展变化的预测才具有意义。进行DGM(1,1)预测时,主要考虑平均相对误差、关联度、小概率误差和后验差4项指标。

平均相对误差为:

$$\varepsilon(avg) = \frac{1}{n-1} \sum_{k=2}^{n} \left| \frac{\hat{X}^{(0)}(k) - X^{(0)}(k)}{\hat{X}^{(0)}(k)} \right| \times 100\%$$
 (5)

小概率误差P为:

$$q(k) = X^{(0)}(k) - \hat{X}^{(0)}(k)$$
 (6)

$$P = \{ |q(k) - \bar{q}(k)| < 0.6745S_2 \}$$
 (7)

关联度 r 为:

$$\Delta(k) = |X^{(0)}(k) - \hat{X}^{(0)}(k)| \tag{8}$$

$$r = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \frac{\Delta(k)_{\min} + 0.5\Delta(k)_{\max}}{\Delta(k) + 0.5\Delta(k)_{\max}}$$
(9)

后验差C为:

$$S_1^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left[X^{(0)}(k) - \bar{X}^{(0)}(k) \right]^2$$
 (10)

$$S_2^2 = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \left[q(k) - \bar{q}(k) \right]^2$$
 (11)

$$C = \frac{S_2}{S_1} \tag{12}$$

根据各项指标的值对 DGM(1,1)模型进行评价性分析,精度满足二级标准即可进行 DGM(1,1)模型预测。 DGM(1,1)模型的精度等级如表1所示。

表1 DGM(1,1)模型的精度等级

等级	后验差	小概率误差	关联度	平均相对误差
一级	≤0.35	≥0.95	>0.9	< 0.01
二级	0.35 <c≤0.65< th=""><th>≥0.7</th><th>0.6~0.9</th><th>0.01~0.10</th></c≤0.65<>	≥0.7	0.6~0.9	0.01~0.10

基于2016~2020年沈阳市6项污染物年均浓度数值进行灰色预测,预测未来5年6项污染物浓度数值的变化趋势。建立6项污染物浓度数值的DGM(1,1)模型,具体模型的相关数据、后验差、小概率误差、模型公式等数据如表2和表3所示。

污染物	$\mathrm{PM}_{2.5}$	PM_{10}	SO_2
灰色模型	$X^{(0)}(k+1)=47.1977\times0.9495^k,$ (k=0,1,2)	$X^{(0)}(k+1)=79.610 8 \times 0.971 2^k,$ (k=0,1,2)	$X^{(0)}(k+1) = 32.806 \ 3 \times 0.799 \ 8^k,$ (k=0,1,2)
后验差	0.32	0.31	0.09
相对误差	0.050 0	0.030 0	0.040 0
小误差概率	1	1	1
关联度	0.66	0.73	0.60

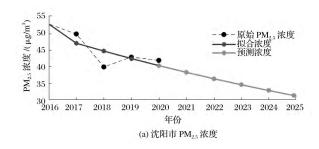
表 2 基于DGM(1,1)灰色预测结果及相关验证(PM_{25} 、 PM_{10} 、 SO_2)

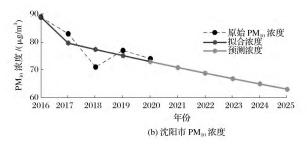
表 3	基于DGM(1.	1) 灰色. 预测	结果及相关	验证(NO	CO.	O_{\cdot}

污染物	NO_2	СО	O_3
灰色模型	$X^{(0)}(k+1) = 36.907 \ 4 \times 0.983 \ 5^k$ (k=0,1,2)	$X^{(0)}(k+1)=1.6846\times1.6607^{k}$ (k=0,1,2)	$X^{(0)}(k+1) = 150.719 6 \times 1.007 9^{k}$ (k=0, 1, 2)
后验差	0.13	0.41	0.35
相对误差	0.004 4	0.040 0	0.010 0
小误差概率	1	1	1
关联度	0.76	0.65	0.64

由表2和3可知,根据沈阳市6项污染物浓度数值建立的DGM(1,1)模型关联度均位于0.6~0.9之间,模拟精度为二级标准,可以用所构建的DGM(1,1)模型进行预测。

基于初始数据和 DGM(1,1)模型预测结果绘制 6 项污染物质量浓度数值变化的二维图,沈阳市污染物基于 DGM(1,1)模拟预测结果如图 3 所示。





NO.02 2024

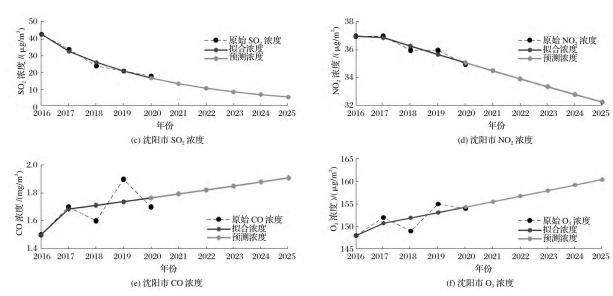


图 3 沈阳市污染物基于DGM(1.1)模拟预测结果

由图3可知,在2018年各项污染物的质量浓度数值 均发生转折且部分达到近5年最低值,原因是2018年的 气象条件良好。预测沈阳市未来5年PM25、PM10、SO2和 NO₂浓度仍然会呈现下降的趋势,而O₃、CO浓度呈现上 升的趋势。2020~2021年,沈阳市PM25质量浓度的年降 幅约为8.67%, 预测到2025年, PM25质量浓度的年降幅 仍有5.05%,降幅轻微下降;沈阳市PMu质量浓度在 2021年的降幅约为4.27%, 预测到2025年, PM10质量浓 度的年降幅降低至2.88%,降幅下降; SO。质量浓度到 2025年降幅变为0.02%,降幅基本不变; NO2的浓度数值 在2021年轻微下降,其降幅为1.65%,预测到2025年降 幅约为1.64%,降幅基本不变;CO浓度数值在2021年将 上升1.13%, 预测到2025年其上升的幅度约为1.60%, 因 此CO浓度整体处于加速上升的状态; O3浓度数值在 2021年有轻微上升,涨幅约为0.98%,预测到2025年, O3浓度数值涨幅仍有0.79%。移动源尾气大量排放是导 致CO、NO。增多的主要原因,因此今后在对大气污染处 理工作中, 沈阳市应进一步加强对移动源的管控, 实施 相应的举措以控制相应污染物污染;同时进一步加强对 光化学污染物的控制,合理降低其前体物的浓度,进而 控制O。浓度的增加。

5 结语

将辽宁省14个城市聚为3类,类3整体空气质量最 差,整体各污染物浓度处于最高水平,分布在辽宁省中 部的8个城市;类1城市群整体污染状况次之,分布在辽 宁省西部地区的2个城市,受工业、煤炭燃烧和外来源 O。影响明显; 类2城市群整体空气质量最好, 大部分城 市分布在辽宁省东南部, 更多表现为受海运船舶和陆路 交通源影响。通过分析辽宁省大气污染季节性特征发现, 除O₃外,其余各污染物浓度整体均呈现夏季低、冬季高 的分布趋势, O3在夏季浓度达到最大。基于2016~2020年 沈阳市6项污染物浓度数值预测2021~2025年各项污染物

浓度变化趋势,在未来5年 $PM_{2.5}$ 、 PM_{10} 、 SO_2 、 NO_2 浓度 整体呈现下降趋势,O₃、CO浓度整体呈现上升的趋势。 沈阳市应加强对当地移动源排放的管控。

参考文献

- [1] GAO H, JING C, WANG B, et al. A study of air pollution of city clusters[J]. Atmospheric Environment, 2011, 45(18): 3069-3077.
- [2] PURES J, SOUSA S, PEREIRA M, et al. Management of air quality monitoring using principal component and cluster analysis—Part II: CO, NO₂ and O₃[J]. Atmospheric Environment, 2008, 42(6): 1261-1274.
- [3] PANDEY B, AGRAWAL M, SINGH S. Assessment of air pollution around coal mining area: Emphasizing on spatial distributions, seasonal variations and heavy metals, using cluster and principal component analysis[J]. Atmospheric Pollution Research, 2014, 5(1): 79-86.
- [4] ZHANG J, ZHANG L Y, Du M, et al. Indentifying the major air pollutants base on factor and cluster analysis, a case study in 74 Chinese cities[J]. Atmospheric Environment, 2016, 144: 37-46.
- [5] GAO J, WANG K, WANG Y, et al. Temporal-spatial characteristics and source apportionment of PM2,5 as well as its associated chemical species in the Beijing-Tianjin-Hebei region of China [J]. Environmental Pollution, 2017, 233: 714-724.
- [6] ZHEN C, WANG S, JIANG J, et al. Long-term trend of haze pollution and impact of particulate matter in the Yangtze River Delta, China[J]. Environmental Pollution, 2013, 182: 101-110.
- [7] ZHAO X, DENG C, HUANG X, et al. Driving forces and the spatial patterns of industrial sulfur dioxide discharge in China[J]. Science of the Total Environment, 2017, 577(15): 279-288.
- [8] 李桂清,谢兵.浅谈沈阳市大气质量及污染防治战略对策[1].环境保 护科学,1995(4):61-64.
- [9] 马雁军,刘宁微,王扬锋,辽宁中部城市群大气污染分布及与气象因 子的相关分析[J]. 气象科技,2005(6):527-532.
- [10] 王英,金军,李令军,等.北京大气污染区域分布及变化趋势研究[J]. 中央民族大学学报:自然科学版,2008(1):59-65.
- [11] 马雁军,刘宁微,王扬锋,等.辽宁中部城市群大气环境研究进展[J]. 气象科技进展,2012,2(2):19-24.
- [12] 崔筱笛,郭民之,谭毅恒.全国环保重点城市空气质量状况的聚类分 析[I]. 绿色科技,2020(4):1-4.
- [13] 吴优,曾波,周文浩.基于DGM(1,1)模型的重庆市大气污染物浓度预 测分析与研究[J]. 重庆理工大学学报:社会科学,2021,35(2):50-58.