

章鹏飞,王磊,赵含旭,等.基于离散格网的大气污染扩散模拟研究[J].环境科学与技术,2025,48(3):47-54. Zhang Pengfei, Wang Lei, Zhao Hanxu, et al. Research on atmospheric pollution dispersion simulation based on discrete grid[J]. Environmental Science & Technology, 2025, 48(3): 47-54.

基于离散格网的大气污染扩散模拟研究

章鹏飞, 王磊*, 赵含旭, 殷楠

(河南理工大学测绘与国土信息工程学院,河南 焦作 454003)

摘要:大气污染对人类健康和环境造成了严重的影响,了解、预测大气污染的传输和扩散过程至关重要。高斯扩散模型作为大气污染预测和评估的重要工具,能够较为准确地描述大气污染物的传输和扩散过程。然而,基于四边形网格的高斯模型由于其非各向同性导致计算复杂度较高,且模型存在许多限制,而六边形离散格网则提供了一种高效且精确的离散化方法。文章通过将六边形格网与高斯扩散模型结合,基于元胞自动机原理,实现对大气污染扩散的精确建模,并通过Cesium展示模拟结果。实验表明,建立的模型可以较好地模拟污染物的扩散状态,从而更好地理解和分析大气污染扩散的特征,为大气污染的预防与治理提供科学依据。

关键词:离散格网; 六边形; 大气污染; 高斯扩散模型; 元胞自动机

中图分类号:X51 文献标志码:A doi:10.19672/j.cnki.1003-6504.1700.24.338 文章编号:1003-6504(2025)03-0047-08

Research on Atmospheric Pollution Dispersion Simulation Based on Discrete Grid

ZHANG Pengfei, WANG Lei*, ZHAO Hanxu, YIN Nan

(School of Surveying and Land Information Engineering, Henan Polytechnic University, Jiaozuo 454003, China)

Abstract: Atmospheric pollution has a serious impact on human health and the environment, making it crucial to understand and predict the transport and diffusion processes of atmospheric pollutants. The Gaussian diffusion model serves as an important tool for predicting and assessing atmospheric pollution, accurately describing the transport and diffusion processes of pollutants. However, the Gaussian model based on rectangular grids has high computational complexity due to its non-isotropic nature and various limitations. In contrast, a hexagonal discrete grid offers an efficient and precise discretization method. By combining a hexagonal grid with a Gaussian diffusion model, accurate modeling of atmospheric pollution dispersion is achieved based on the principles of cellular automata, and the simulation results are displayed using Cesium. Experiments demonstrate that the established model can effectively simulate the diffusion state of pollutants, thereby enhancing the understanding and analysis of the characteristics of atmospheric pollution dispersion and providing a scientific basis for the prevention and control of air pollution.

Key words: discrete grid; hexagonal; atmospheric pollution; Gaussian diffusion model; cellular automata

近年来,随着工业化和城市化的快速发展,大气污染问题日益严重,给人类健康和环境带来了巨大的挑战。为了更好地应对大气污染问题,了解和预测污染物的影响范围、传播途径以及大气污染物的传输和扩散过程成为了研究的重点^[1,2]。大气扩散模拟主要是通过数学方法构建模型,综合考虑风向、风速、温度、地形等因素,模拟污染物在大气中的传播过程及污染物浓度^[3]。目前,主要的大气污染扩散模型有3种,分别是基于高斯理论的大气污染物扩散模型^[4]、

基于拉格朗日方法的大气污染物扩散模型^[5]和基于欧拉方法的大气污染物扩散模型^[6]。其中,高斯扩散模型是一种半经验式的扩散模型,它假设污染物在扩散的过程中符合正态分布,即在污染团的下风向浓度较高,与下风向成一定角度的位置则浓度较低。大量实验证明,高斯模型的模拟结果与实际污染物扩散的形态最为相似,且具有成熟的理论体系、计算简洁明确、计算量较小、对数据的敏感性低等特点,是应用最为广泛的模型^[7]。戴万瑞^[8]利用高斯模型模拟预测了京

兰水泥厂的污染物扩散。马迎斌^[9]、李禾珍^[10]分别利用高斯模型模拟预测了迁安市与惠州市的污染物扩散。这些研究表明,高斯模型在模拟有风点源污染物扩散方面具有良好的效果。

然而,传统的污染物扩散模型侧重于公式的表达和数据的计算,往往只能在稳态污染物排放和稳定风向条件下进行预测,而在具体的操作、可视化应用和实际决策制定方面存在一定的不足^[11,12]。六边形离散格网作为一种新型的离散化方法,具有计算效率高、模拟效果准确等特点,特别适合模拟区域地理特征的变化,其特殊的结构和几何特征使得模拟过程更加灵活和精细化,能够更好地捕捉污染物在大气中的传输和扩散过程。同时,六边形格网能够结合可视化技术,以直观的方式展示模拟结果,更好地理解和分析大气污染的传播过程,为环境保护决策和大气污染防治提供科学依据。因此,为提高模型的预测能力和应用的便捷性,通过将高斯扩散模型和六边形离散格网相结合,以模拟大气污染的扩散过程。

1 基于六边形格网的大气扩散模型

1.1 基于六边形离散格网的元胞自动机设计

六边形离散格网(hexagonal discrete grid)是一种用于空间离散化的网格系统,其结构由相邻的六边形单元组成,每个单元与6个邻接单元均为边邻近,具有各向同性的特点。这种网格类型相较于传统的矩形网格,具有更高的邻域覆盖率和均匀性,使得在处理复杂边界和不规则几何形状时能够减少边界效应和计算误差^[13]。六边形网格的等距性提供了更精确的模拟结果,广泛应用于计算流体力学、图像处理以及地理信息系统等领域^[14]。元胞自动机(cellular automata, CA)是一种离散模型,通过将空间划分为一个由规则排列的元胞组成的网格来研究复杂系统的行为。每个元胞在网格中可以处于有限的状态之一,并且其状态在离散的时间步骤中根据一组规则更新。元胞自动机的核心特征是其局部规则性,即每个元胞的状态变化仅依赖于其自身及其邻域内元胞的当前状态^[15-17]。

为充分利用六边形格网及元胞自动机的优势进行大气污染扩散模拟,本研究基于六边形格网设计了一种特殊类型的元胞自动机模型,元胞排列在一个六边形网格集合上,每个六边形元胞在离散的时间步骤中,根据其自身及其6个邻接元胞的状态,通过一组定义好的规则进行状态更新,避免了方形网格的各向异性问题,可以更好地模拟和分析各种复杂系统。图1所示为六边形元胞的邻居模型。

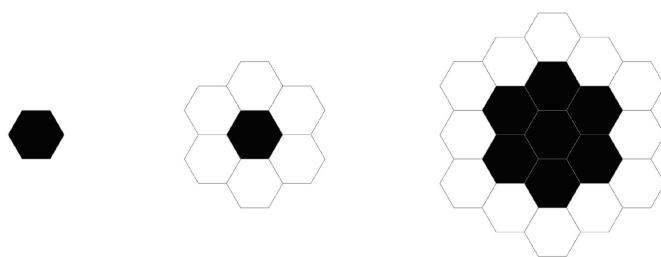


图1 六边形邻居模型
Fig.1 Hexagonal neighbor model

1.2 元胞状态及转移规则

研究以污染物浓度为元胞的状态变量,每个时刻的污染物浓度变化不仅受到该元胞邻近6个元胞浓度的影响,还受到风速、风向等环境因素的综合作用,研究利用高斯扩散模型计算污染源元胞向其周围邻居转移的浓度值。高斯扩散模型是描述扩散过程的经典工具,其核心公式(式(1))表明了在时间和空间上扩散物质浓度的变化规律:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\mu\pi\sigma_y\sigma_z} \times \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \times \left\{ \exp\left(-\frac{(z - h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z + h_e)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right\} \quad (1)$$

式中,C表示所求点的浓度增量,Q表示源强, μ 为风速,y和z分别表示距离风向轴线的横向和垂直距离(如图2所示), h_e 表示污染源的高度,由于本次模拟主要基于二维模型,因此将 h_e 设置为与z相等。 σ_y 和 σ_z 为扩散参数,表示湍流扩散运动的剧烈程度,其对模型结果有着重要的影响,一般可以现场测得,也可以通过经验公式(式(2),(3))得出,式中x为风向轴线上所求点与污染源之间的距离, γ_1 、 γ_2 、 α_1 、 α_2 分别由经验公式直接获取,大小与x和大气稳定度有关,大气稳定度受到风速的影响^[18]。

$$\sigma_y = \gamma_1 x^{\alpha_1} \quad (2)$$

$$\sigma_z = \gamma_2 x^{\alpha_2} \quad (3)$$

如图2所示,根据初始的污染源,运用高斯模型计算其向周围邻居的转移值。下一时刻将每个有值网格都看作一个污染源,分别利用高斯扩散模型计算每个有值元胞向其周围的转移值,元胞下一时刻的浓度值等于其自身的浓度值加上周围邻居元胞的转移值。由于六边形格网的各向同性特征,使其在各个方向上可采用相同的扩散模型,降低了因四边形各向异性带来的计算复杂度,能够更有效地模拟污染物在空间中的扩散过程。

在无风或者风速较小的情况下,大气气场的稳定性显著降低,从而导致污染物的扩散过程变得复杂且不稳定。在这种情况下,风速对污染物扩散的影响较小,预测其扩散状态的准确性受到限制。由于风速不足以提供稳定的气流,传统的高斯扩散模型无法建

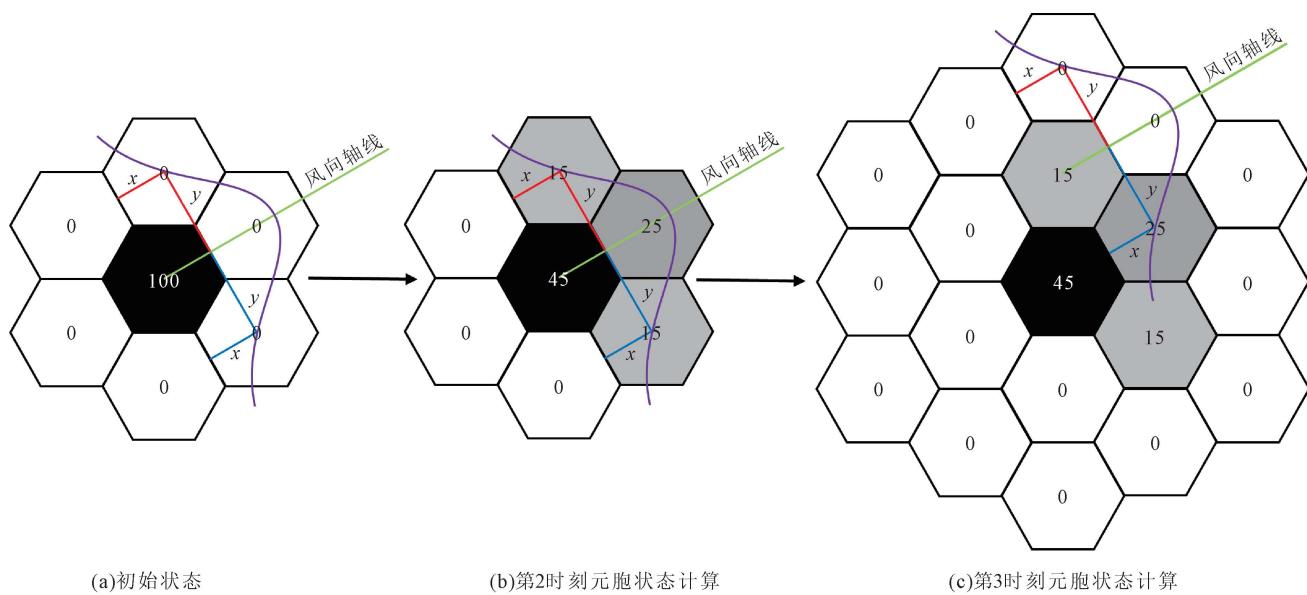


图2 有风状态转移
Fig.2 Wind state transition

立，导致无法有效模拟污染物的扩散行为。目前，针对无风或小风天气条件下的大气污染物扩散，大多数研究仍依赖于经验方法进行模拟。通常假设大气中

的污染物在水平各个方向上均匀扩散，并且扩散速率在所有方向上完全一致。基于此假设，扩散路径上的污染物浓度被认为呈现等概率分布，如图3所示。

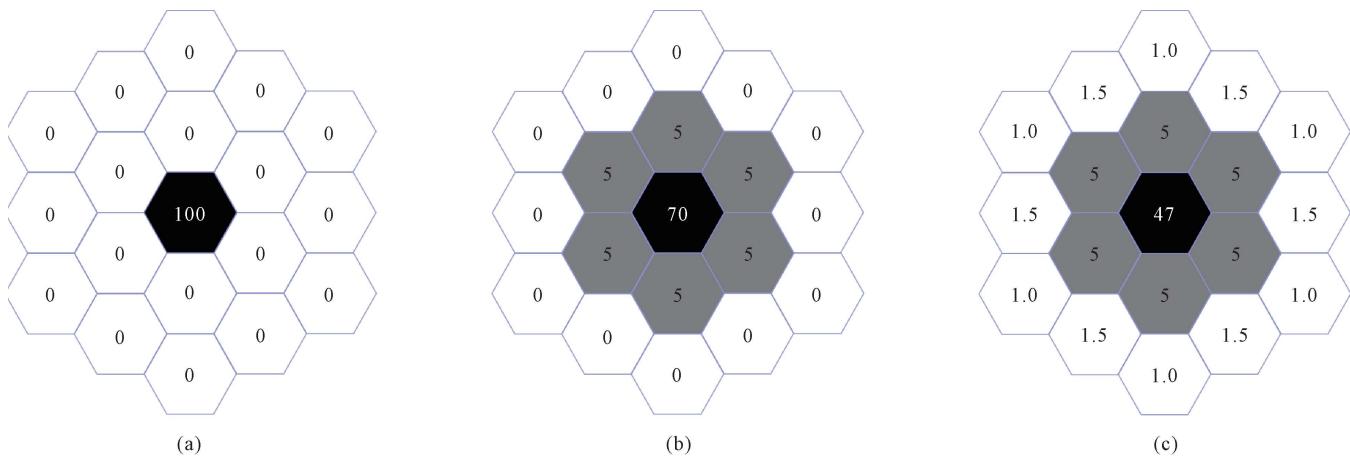


图3 无风状态转移
Fig.3 No-wind state transition

2 模型模拟与验证

为验证基于六边形格网的扩散模型的有效性,研究分别利用模拟数据和实测数据,通过开源三维GIS软件Cesium对污染物扩散过程进行模拟与可视化,通过不同的颜色表达不同的污染物浓度水平,以直观展示污染物的空间分布特征。

2.1 模拟数据实验

2.1.1 无风面源扩散模拟

根据无风状态下的转移规则,图4(a)~(c)展示了在无风条件下污染物扩散的模拟结果。在本次模拟中,设定污染源稳定排放,污染源的初始浓度为 $500 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 。随着时间的推移,污染物在环境中逐渐扩

散,形成了一个逐步扩大的污染团。污染物浓度在污染源中心处较高,而在远离中心的边界区域浓度则较低。这种分布趋势反映了污染物在扩散过程中逐渐稀释的特性,表明污染物浓度在中心区域显著高于边界区域,呈现出明显的浓度梯度。

2.1.2 有风面源持续扩散模拟

根据有风状态下的状态转移规则,图5展示了有风状态下,污染面源持续扩散的状态。在模拟中,设定污染源稳定排放,污染源的初始浓度为 $500 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 。风速设置为 3 m/s ,风向设定为西南。图5中(a)~(c)分别展示了在不同时间点的模型扩散状态。由图中可以看出,在污染源的下风向上,污染浓度较高,在距离较远的位置则污染物浓度逐渐较低,符合正态分布的效果。

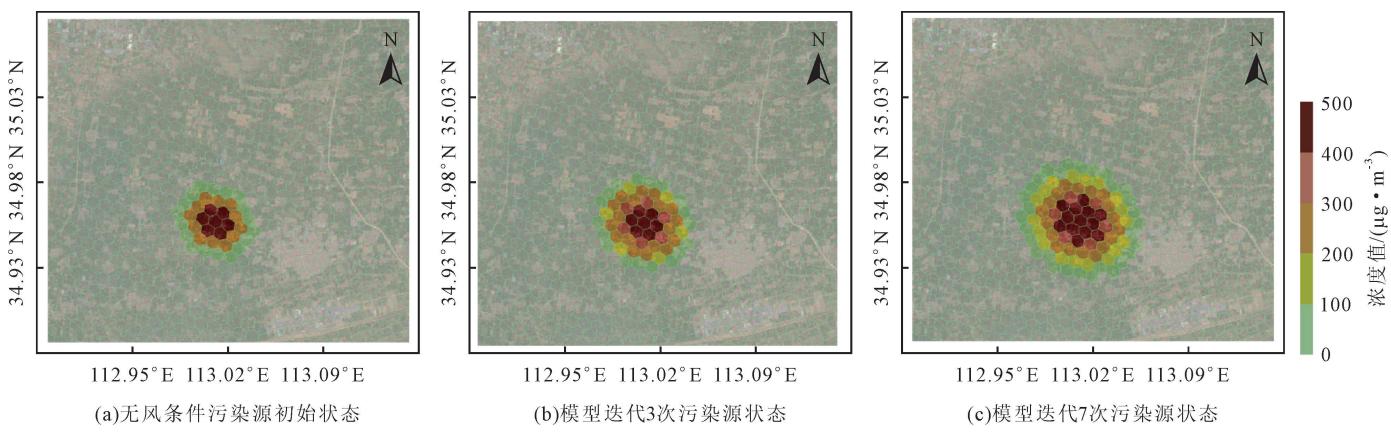


Fig.4 无风面源扩散模拟
Fig.4 No-wind surface source diffusion simulation

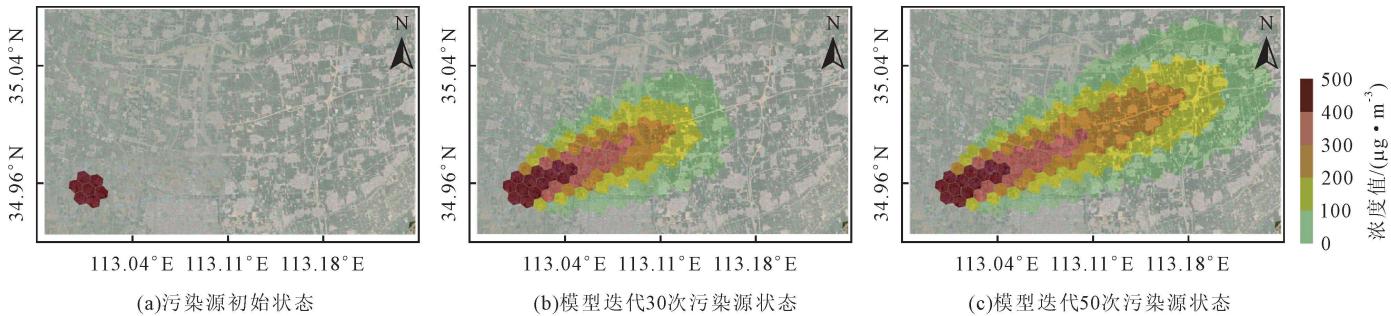


Fig.5 有风面源持续扩散模拟
Fig.5 Wind surface source continuous diffusion simulation

通过对对比图中数据,可以观察到以下现象:在污染源的下风向区域,污染物浓度显著较高。这一现象表明随着风的传播,污染物的浓度在下风向区域逐渐增加。随着与污染源距离的增加,污染物浓度逐渐降低,表现出明显的空间分布特征。此结果符合正态分布模型的预期,即污染物浓度呈现出从源头向外逐渐递减的趋势。这一分布模式在实际环境中具有重要的参考价值,有助于理解污染物的扩散行为及其对环境质量的潜在影响。

2.1.3 有风面源瞬时扩散模拟

在实际情况中,还会出现污染源移动的情况,污染源的浓度和位置不再恒定,而是随着时间、环境因素的影响,位置和浓度发生变化,即有风面源瞬时扩散。如图6(a)~(d)所示,设置污染源初始浓度为 $500 \mu\text{g}/\text{m}^3$,风速设置为 3 m/s ,风向设置为正南方向。在风速的影响下,污染源逐渐向北移动,并向周围扩散,变成一个范围更大但浓度逐渐变低的污染源。呈现出中心浓度高,四周浓度低的状态。

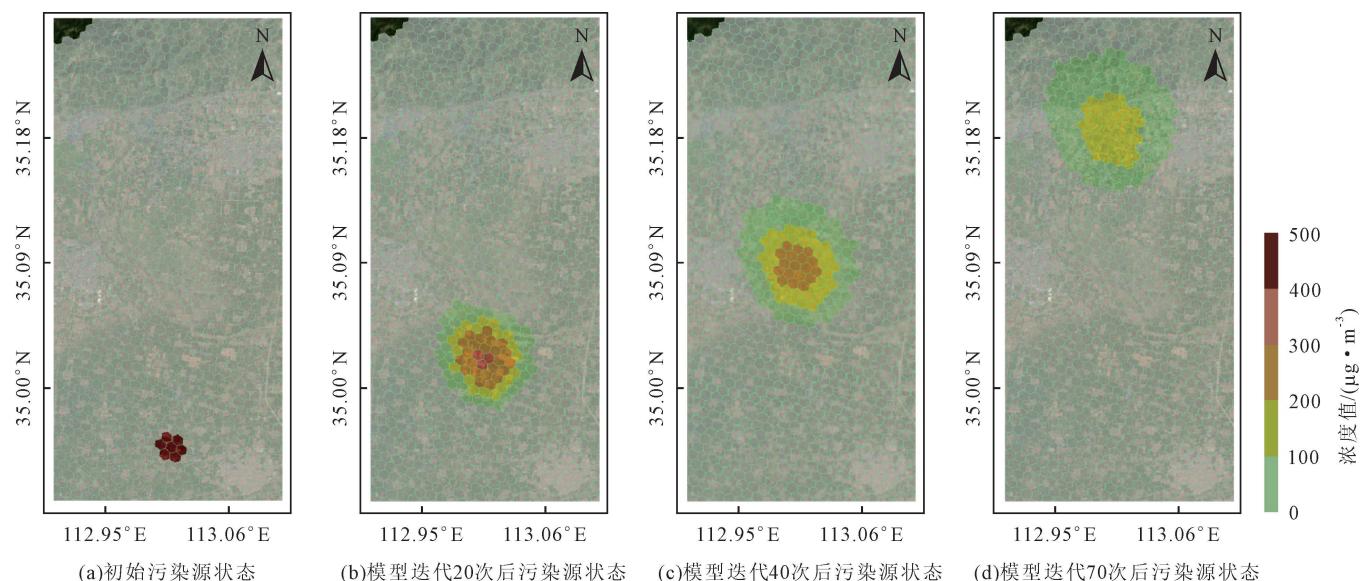


Fig.6 瞬时扩散模拟
Fig.6 Instantaneous diffusion simulation

2.2 实测数据验证

2.2.1 元胞空间划分及污染数据格网化

研究选取河南省焦作市为研究区域,首先根据H3六边形网格划分规则,将研究区划分为一系列的六边形

格网,如图7(b)所示。选取的大气污染数据为China High PM_{2.5} dataset (CHAP)^[19,20],同时利用中国气象局提供的风速和风向数据作为气象输入数据进行模型验证。从数据集中选取2022年3月6日焦作市的PM_{2.5}数

据作为初始数据,并采用样条函数法对数据进行插值,将浓度值映射至六边形格网,为每个六边形格网设定初始状态,如图7(c)所示。其中不同的颜色代表不同污染物浓度,直观展示了污染物在研究区的空间分布特征。

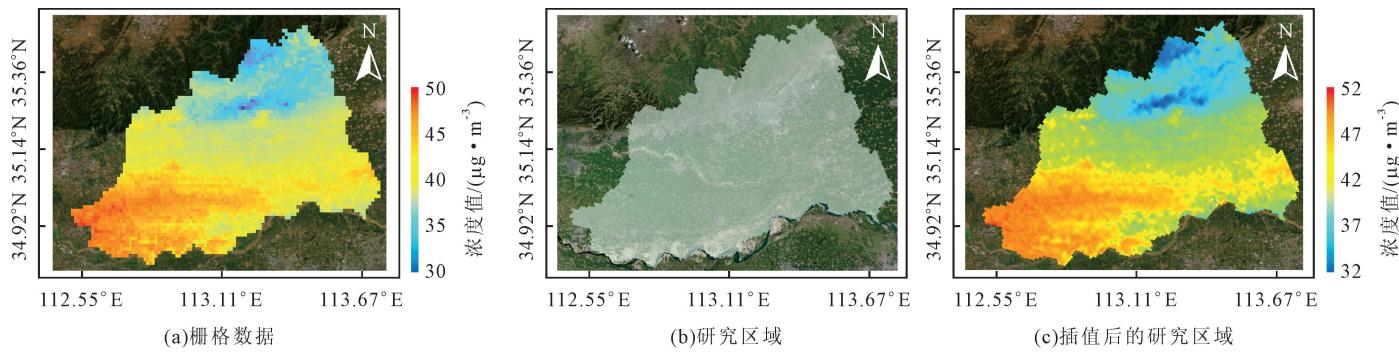


图7 研究区域元胞空间
Fig.7 Research area cellular space

2.2.2 扩散过程模拟与分析

根据中国气象局提供的风速和风向数据,当天的风向为正西,平均风速约为2.5 m/s。由于中小城市短时间的污染物排放量数据较难获取,因此,采用静风期的PM_{2.5}日均增加量作为研究区域当天的PM_{2.5}排放量^[21]。根据中国环境监测总站发布的数据,在2022年5月15日风速较大,污染物浓度呈下降趋势,紧随之后的16~19日,风速均较小。选取该时段平均每天的PM_{2.5}浓度增长量为本地源排放数据。同时,基于LandScan全球2022年1 km分辨率的人口数据集(图8),根据区域人口密度设定污染物排放^[22]。

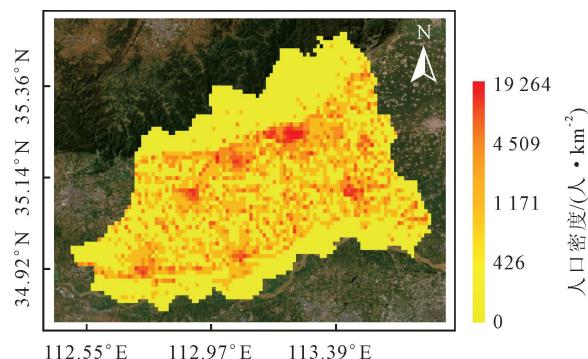


图8 人口密度
Fig.8 Population density

基于上述数据,利用1.2节所述模型进行污染物扩散模拟,分别采用基于四边形和六边形网格的模型进行预测,其中四边形和六边形的面积之比约为1:0.7。根据风速及格网间距,六边形模型确定迭代60次所用时间约为24 h,四边形模型确定迭代42次所用时间为24 h。

图9和图10分别是基于六边形和四边形网格的模型以预测2022年3月7日的PM_{2.5}浓度分布情况。并进行对比,其中六边形模型迭代20次、40次、60次的结果分别如图9(b)~(d)所示,四边形模型迭代14次、28次、

42次的结果如图10(b)~(d)所示。根据图示分析,可以观察到在风速的影响下,高污染团逐渐向下风方向移动,导致上风向的污染物浓度逐渐减少,下风向地区污染物浓度则逐渐增加。这一现象表明,风速和风向在污染物扩散和迁移中起着十分关键的作用。

为了验证模拟结果的可靠性,将3月7日的实测污染物浓度数据与模拟预测结果进行对比。图11(b)为基于六边形网格的3月7日实测污染物浓度的数据,图11(d)为基于四边形网格的3月7日实测污染物浓度的数据。由图11对比可以看出,模拟结果与实测数据在污染物浓度的空间分布和污染团的形态整体上基本一致,仅在局部细节存在一定差异。这也表明了研究模型在预测污染物扩散方面具有较好的准确性和可靠性。

为进一步分析模拟结果的精度,并对四边形模型的模拟结果与六边形模型的模拟结果进行对比,分别计算六边形网格和四边形网格实测数据与模拟结果的最大值、最小值、平均值、标准差等统计指标及模拟结果均方根误差,进行数据验证,结果如表1所示。此外,随机选取100个六边形单元(图12)和80个四边形单元(图13),分别以对应单元的实测浓度与模拟浓度构成2组数据,计算2组数据的相关性,并进行显著性检验。

由表1可以看出,六边形实测数据的最大值、最小值和平均值与模拟数据相差不大,且与四边形相比,数据准确度较高,特别是平均值和均方根误差2项参数,基于六边形网格的模型预测精度均高于四边形,表明基于六边形网格的模型在模拟结果在总体水平上的准确性。两组数据的皮尔逊相关系数为0.64,斯皮尔曼相关系数为0.70,且通过了95%显著性检验,表明二者具有显著的相关性,模拟结果能够较好地反映污染物的空间分布特征及变化趋势。

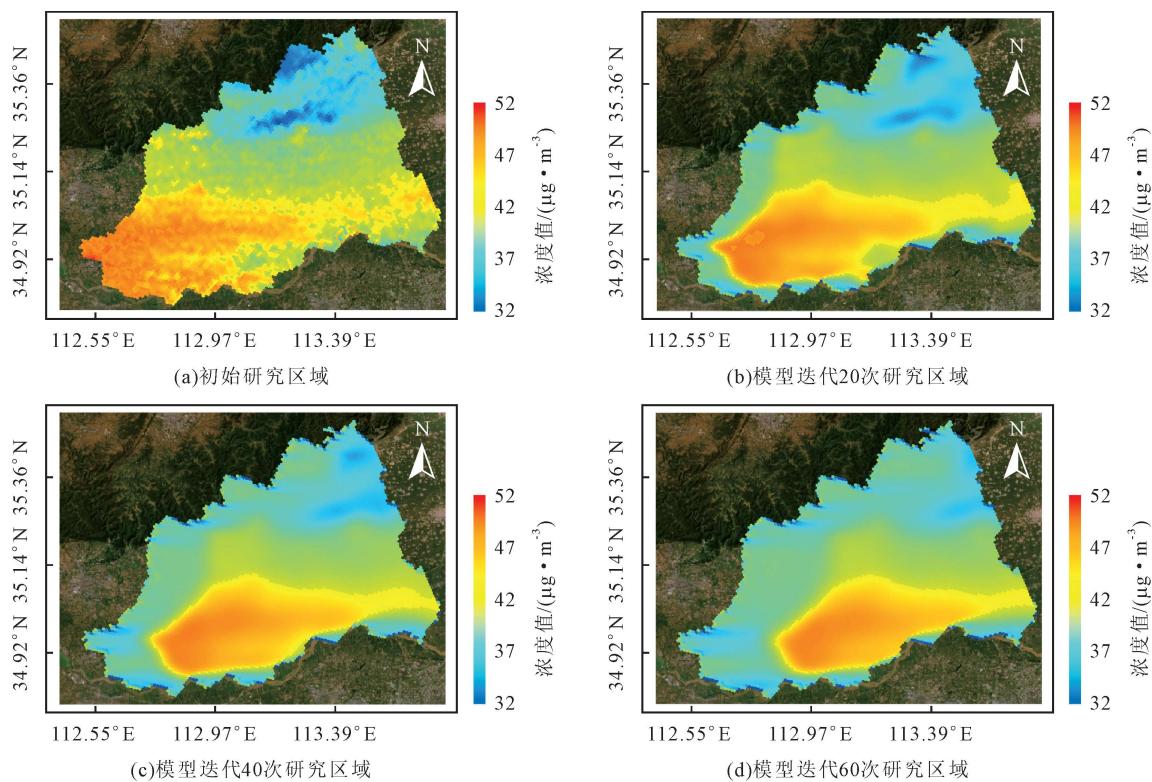


图9 六边形模型模拟
Fig.9 Hexagonal model simulation

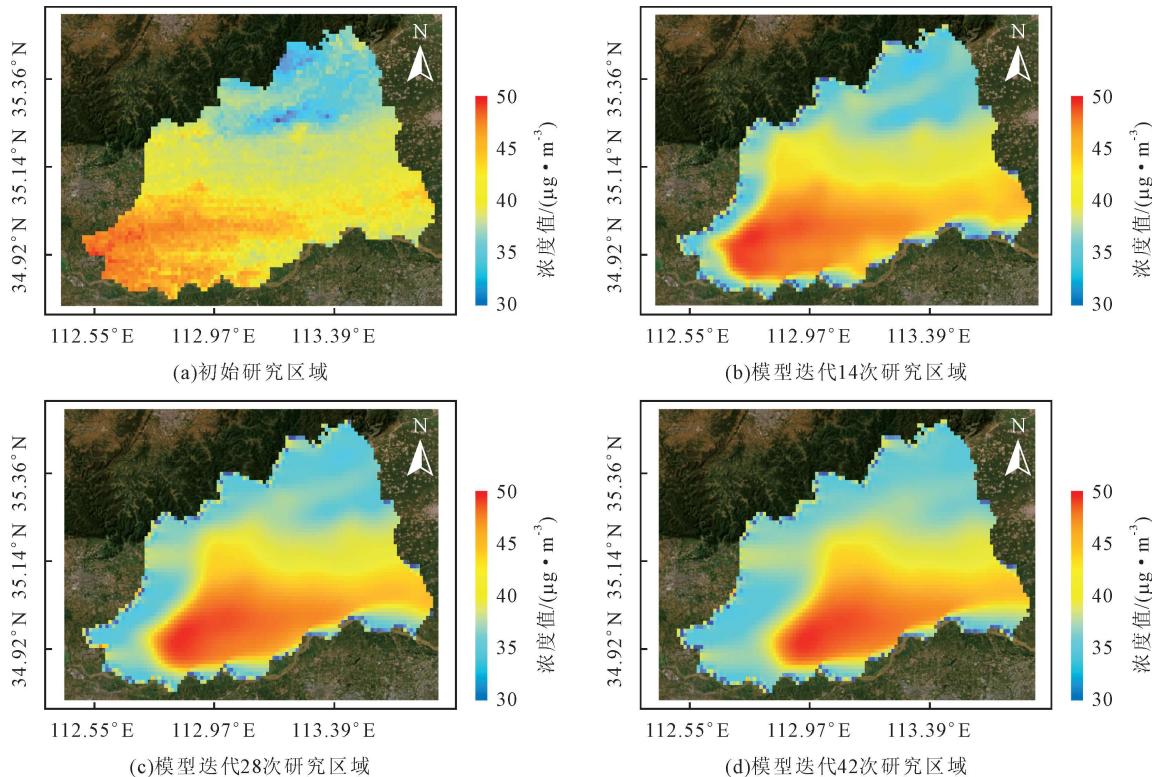


图10 四边形模型模拟
Fig.10 Quadrilateral model simulation

3 结论与展望

由于大气污染物扩散的复杂性和综合性特征,准确探知污染物的扩散状态常常面临挑战。因此研究结合元胞自动机、六边形离散格网和高斯扩散模型,

提出了一种综合污染物模拟分析框架,并基于Cesium平台进行模型的可视化分析。

(1)本研究模型能够有效模拟污染物的扩散过程,并为预测污染物在不同时刻的扩散状态提供科学依据。

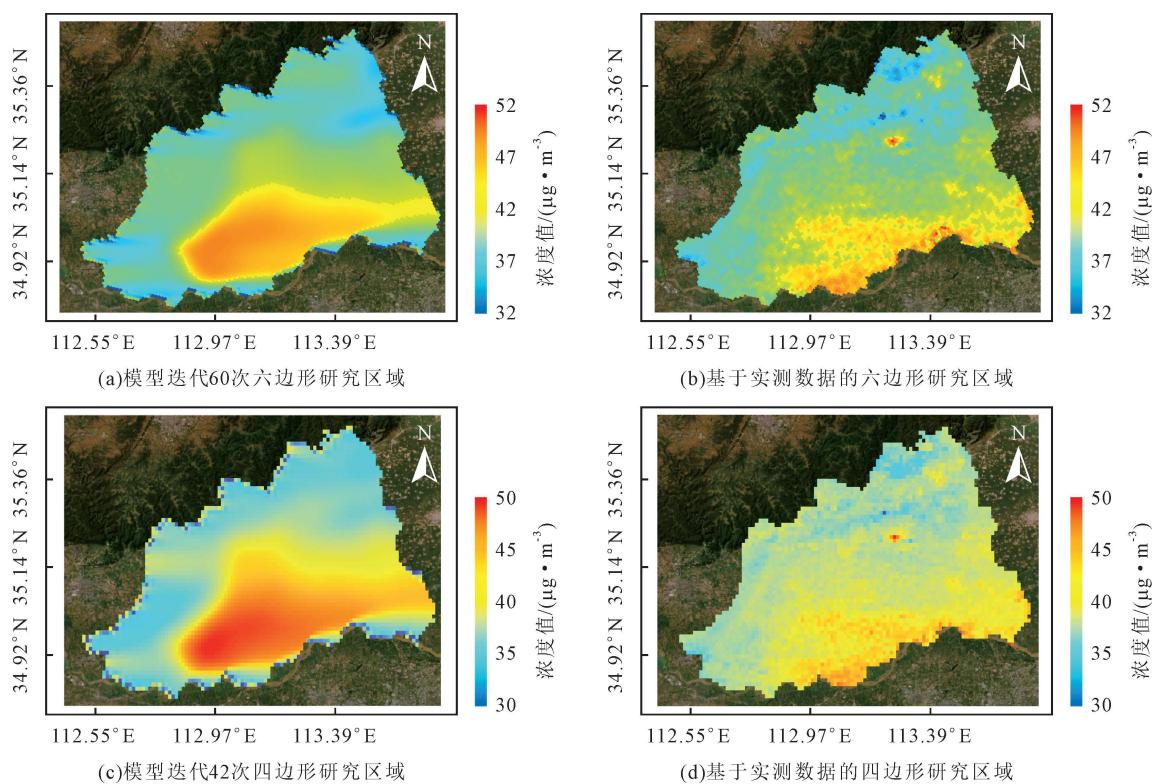


图11 模型验证
Fig.11 Model validation

表1 数据精度评价

Table 1 Data accuracy assessment

参数	六边形		四边形	
	实测数据/(μg·m⁻³)	模拟数据/(μg·m⁻³)	实测数据/(μg·m⁻³)	模拟数据/(μg·m⁻³)
最大值	51.5	47.5	51.3	47.0
最小值	34.9	33.0	33.5	32.0
平均值	43.7	42.0	43.7	40
标准差	1.9	3.0	1.9	3.3
皮尔逊相关系数		0.64		0.62
斯皮尔曼相关系数		0.70		0.67
均方根误差		2.66		2.88

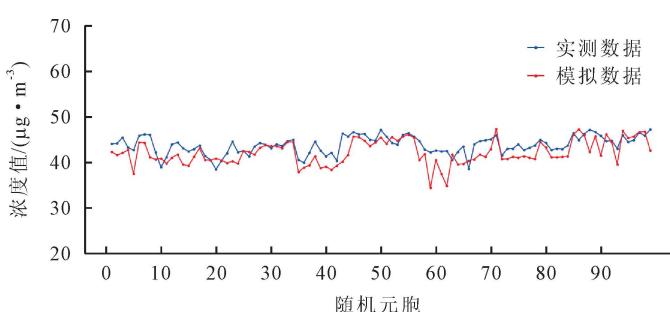


图12 六边形实测数据与模拟数据
Fig.12 Measured and simulated data for the hexagon

(2)本研究的六边形元胞自动机模型为污染物的空间分布提供了灵活且精确的模拟框架,通过细粒度的网格划分和局部规则的应用,能够精准捕捉污染物在不同区域的动态变化。

(3)通过Cesium平台结合六边形格网进行可视化分析,有效模拟了污染物在空气中的传播过程,并成功再现了污染物浓度的空间动态分布特征。

然而,由于在模拟过程中仅考虑了风向风速和地

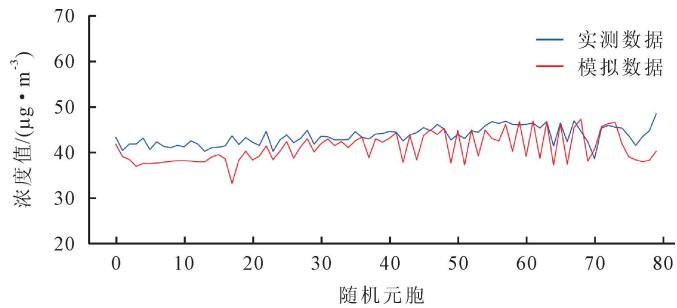


图13 四边形实测数据与模拟数据
Fig.13 Measured and simulated data for the quadrilateral

表反射等因素,实际的污染物运动状态还会受到垂直运动、地形特征以及污染物之间的相互作用等因素的综合影响。因此,研究的模型在实际运用过程中还存在一定的不足,这也是导致了模拟结果(图11(a))与实测数据(图11(b))之间还存在一定差距的原因。后续将在研究的基础上进一步优化模型参数,扩展模型的应用范围,并结合实际监测数据进行验证,以提高模型的精度和可靠性。

[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):376–381.
Chi Yanyan, Zhang Huiyuan. A review of the development and application of air pollutant dispersion models[J]. Environmental Pollution & Control, 2007,29(5):376–381.
- [2] 苑春莉,范世良,柴天昱,等. 大气扩散模型的研究进展[J]. 节能, 2016,35(10):14–18.
Yuan Chunli, Fan Shiliang, Chai Tianyu, et al. Research progress of atmospheric diffusion model[J]. Energy Conservation, 2016,35(10):14–18.
- [3] 李梅,杨冬偶,何望君. 大气扩散模型AERMOD与CALPUFF对比研究及展望[J]. 武汉大学学报:信息科学版, 2020,45(8):1245–1254.
- [4] 王汉青,刘镇铭,张斌,等. 大中尺度大气污染物扩散数值模拟研究进展[J]. 科学技术与工程, 2023,23(9):3605–3617.
Wang Hanqing, Liu Zhenming, Zhang Bin, et al. Progress of numerical simulation of large and medium-scale atmospheric pollutant diffusion[J]. Science Technology and Engineering, 2023,23(9):3605–3617.
- [5] 于潇萌,曹乐. 3种常见拉格朗日大气污染扩散模型的理论与应用研究[J]. 环境工程, 2020,38(9):145–153.
Yu Xiaomeng, Cao Le. A review of the Lagrangian diffusion model for atmospheric pollution[J]. Environmental Engineering, 2020,38(9):145–153.
- [6] 平措. 大气污染扩散长期模型的应用研究[D]. 天津:天津大学, 2006.
Ping Cuo. Application of Atmospheric Pollutant Long-term Diffusion Model[D]. Tianjin : Tianjin University, 2006.
- [7] 邬毅敏. 基于GIS的大气点源污染高斯烟羽扩散模拟研究[D]. 上海:华东师范大学, 2010.
Wu Yimin. Research on Simulation of Gaussian Plume Model of Atmosphere Dispersion Based on GIS[D]. Shanghai : East China Normal University, 2010.
- [8] 戴万瑞. 大气点源污染扩散模拟研究[D]. 武汉:武汉大学, 2018.
Dai Wanrui. Simulation Study on Diffusion of Atmospheric Point Source Pollution[D]. Wuhan : Wuhan University, 2018.
- [9] 马迎斌. 基于GIS的大气污染扩散模拟研究[D]. 阜新:辽宁工程技术大学, 2015.
Ma Yingbin. Study on Simulation of Air Pollution Diffusion Based on GIS[D]. Fuxin : Liaoning Technical University, 2015.
- [10] 李禾珍. 惠州市大气污染扩散模拟研究[D]. 长沙:中南大学, 2010.
Li Hezhen. Simulation Study on Air Pollution Diffusion in Huizhou City[D]. Changsha : Central South University, 2010.
- [11] 施加松. 基于全球立体网格的放射性污染大气扩散预测技术研究[D]. 北京:军事科学院, 2019.
Shi Jiasong. Research on Prediction Technology of Radioactive Pollution Atmospheric Diffusion Based on Global 3D Grid[D]. Beijing : Academy of Military Science, 2019.
- [12] 袁晶. 基于GIS的大气污染物扩散模拟系统设计与实现[D]. 天津:天津大学, 2016.
Yuan Jing. Design and Implementation of Air Pollutant Diffusion Simulation System Based on GIS[D]. Tianjin : Tianjin University, 2016.
- [13] Robertson C, Chaudhuri C, Hojati M, et al. An integrated environmental analytics system (IDEAS) based on a DGGS[J]. ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing, 2020,162:214–228.
- [14] 干嘉元. 基于全球离散格网的环境监测系统研究[D]. 上海:华东师范大学, 2008.
Gan Jiayuan. Research of Environment Monitoring System Based on Discrete Global Grids[D]. Shanghai : East China Normal University, 2008.
- [15] 韦宗明,艾娇燕,李修华,等. 基于元胞自动机的大气扩散模型及GIS可视化[J]. 环境工程学报, 2016,10(5):2527–2534.
Wei Zongming, Ai Jiaoyan, Li Xiuhua, et al. Air diffusion model and GIS visualization based on cellular automata[J]. Chinese Journal of Environmental Engineering, 2016,10(5):2527–2534.
- [16] Hernández Encinas L, Hoya White S, Martín del Rey A, et al. Modelling forest fire spread using hexagonal cellular automata[J]. Applied Mathematical Modelling, 2007, 31(6): 1213–1227.
- [17] 王信雷,芮小平,谢宜霖,等. 一种自适应时间步长的场地地表污染扩散元胞自动机仿真模型[J]. 地球信息科学学报, 2022,24(11):2071–2088.
Wang Xinlei, Rui Xiaoping, Xie Yilin, et al. A cellular automata simulation model of site surface pollution diffusion with adaptive time step[J]. Journal of Geo-information Science, 2022,24(11):2071–2088.
- [18] 程穆阳. 高斯模型在中小城市多点源大气扩散模拟中的应用研究[D]. 哈尔滨:哈尔滨师范大学, 2020.
- [19] Wei J, Li Z Q, Cribb M, et al. Improved 1 km resolution PM_{2.5} estimates across China using enhanced space-time extremely randomized trees[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2020,20(6):3273–3289.
- [20] Wei J, Li Z Q, Lyapustin A, et al. Reconstructing 1-km-resolution high-quality PM_{2.5} data records from 2000 to 2018 in China: spatiotemporal variations and policy implications [J]. Remote Sensing of Environment, 2021,252:112–136.
- [21] 钟雨桐,韦晶,郑月明,等. 基于静风期污染物的PM_{2.5}排放清单空间精细化方法[J]. 地球信息科学学报, 2021,23(11): 1971–1983.
- [22] Han S S, Sun B D. Impact of population density on PM_{2.5} concentrations: a case study in Shanghai, China[J]. Sustainability, 2019,11(7):1968.