

史 凯 刘春琼 著

**Application of Fractal Methods
in Atmospheric Environment**

时间序列分形方法 在大气环境中的应用



化学工业出版社

**Application of Fractal Methods
in Atmospheric Environment**

时间序列分形方法 在大气环境中的应用

史 凯 刘春琼 著



化学工业出版社



中国城市大气污染近年来明显加重，已受到学术界以及媒体、公众的广泛关注。大气污染的时空演变也表现出复杂的非线性特征。本书主要介绍了分形理论概述、时间序列的分形方法、城市大气环境的非线性特征与非平稳性、城市大气污染演化的长期持续特征、DCCA 方法在大气环境中的应用、城市大气污染演化的多重分形特征等内容。

本书充分体现了非线性科学与大气污染研究的交叉融合，具有突出的学术特色和科学价值。全书结构严谨，数据翔实，从复杂性科学的角度为研究城市严重空气污染形成及演化动态提供新的研究思路和研究方法。

本书不仅可供环境科学与工程、大气污染防治等环保领域内的科研人员、技术人员和管理人员阅读，还可供高等学校环境科学与工程、化学、化工和能源等相关专业的师生参阅。

图书在版编目 (CIP) 数据
时间序列分形方法在大气环境中的应用/史凯，刘春
琼著. —北京：化学工业出版社，2019.2
ISBN 978-7-122-33410-7
I. ①时… II. ①史…②刘… III. ①时间序列分析-
应用-大气环境-研究 IV. ①X16
中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2018) 第 274124 号

责任编辑：卢萌萌 刘兴春	文字编辑：汲永臻
责任校对：宋 玮	装帧设计：史利平

出版发行：化学工业出版社（北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011）
印 刷：大厂聚鑫印刷有限责任公司
装 订：三河市宇新装订厂
787mm×1092mm 1/16 印张 11½ 字数 253 千字 2019 年 4 月北京第 1 版第 1 次印刷

购书咨询：010-64518888	售后服务：010-64518899
网 址：http://www.cip.com.cn	
凡购买本书，如有缺损质量问题，本社销售中心负责调换。	

定 价：85.00 元	版权所有 违者必究
-------------	-----------

前言

PREFACE

近年来我国区域空气污染明显加剧，重度灰霾事件频繁发生。城市大气污染问题已广泛引起科学界、政府部门和社会公众的高度关注，成为热门话题。在学术界，关于我国城市大气污染的研究内容，已从早期的定义、识别方法、浓度特征等，发展到单颗粒物理化学特性、光学性质、遥感研究、有机气溶胶毒理学，以及监测、预报预警等多学科、多方向的交叉领域。这些研究不仅提高了我们对严重大气污染发生机制的认识，还为大气污染科学防治指引了方向。近年来我国在治理大气污染方面投入巨大，也获得了显著成绩，但各大城市严重大气污染事件仍反复出现，这也表明大气污染的发生机制仍是现阶段研究的重点之一。2017年3月，李克强总理就批示设立专项资金，集中攻关雾霾形成机理与治理。这指示我们，需要新的科学思维和视角来研究大气污染的发生及演化。

在前期研究中，人们已注意到，空气污染演化过程同时也是一个动力过程，即使我们肉眼看到的是蓝天，但实际上各种导致大气污染发生的气体污染物都已存在并时刻发生着各种反应或相互作用，酝酿着下一波严重污染事件。研究中国重点城市严重空气污染的发生及时空演变的复杂性机制，进而对严重空气污染的发生进行更科学准确的预测、预警及风险评价，是当前十分重要和紧迫的研究课题，具有重要学术价值和实际意义。其中，建立更科学合理的理论和方法来研究复杂大气系统中重污染的发生及其演化动态，是该领域主要研究方向之一。然而，目前对于城市大气污染动力学演化机制方面的研究仍显不足，主要困难在于影响大气污染演化的诸多因素非常复杂多变且具有一定的不确定性，这给大气污染的预测，尤其是不利天气下高浓度污染的准确预测预报带来很大的困难。

随着计算机技术的发展，数值模拟已成为研究大气污染问题的重要手段。多年来，学者们基于大气物理、大气化学、气象学等方法提出了众多理论和模型用以研究、模拟和预测大气污染物的时空演化。这些模型中尽可能详尽地包含了各种大气污染物之间的相互作用以及污染物与气象因素之间的相互作用，如排放、对流、湍流、输运、冷凝、蒸发、凝聚、成核、沉降和多相化学反应等，物理意义明确，取得了实质的进展，但这些模式所涉及的计算参数众多、方程繁杂、参数估计工作巨大。同时，由于大气环境的复杂性，模型中许多过程并不明晰，比如大气化学中化学成分组成、反应速率、反应条件等存在较多不确定性因素。因此人们对大气污染物时间演化的动力过程并没有充分的认识。尽管基于各模型的理论和功能有较大差异，基于确定性还原论思维的污染模式实际上均暗含了这样一种基本假设：只要知道了所有影响因子及其相互作用机制，就可以

对大气颗粒物的时空演化做出确定性的预测。然而，大气环境系统是典型的复杂巨系统，其组成单元数目庞大，单元之间存在强烈的反馈与调节的非线性相互作用。对于这样的复杂系统，要穷尽涉及大气污染物的所有影响因素及其作用机制显然是不可能的，也没有必要。从复杂性理论来看，大气污染时间演化过程是开放、耗散的大气巨系统在人为污染作用下的复杂现象，其形成与演化既受到微观的物理、化学等机制的作用，同时也表现为宏观、整体性系统动力学的结果。但目前很少基于整体论的视角来研究大气污染物浓度长期时间演化的系统动力学总体特征，更不清楚宏观演化动态是否存在着典型的非线性规律。基于复杂性科学的理论和方法，从宏观、整体系统动力学的角度上来认识大气污染物浓度时间演化的复杂动力特征，有助于从新的角度来加深对大气污染的认识，进而提出新的大气污染预测方法。

非线性科学与方法本身也正是为解决自然界中广泛存在的复杂性而逐步发展而来。作者在攻读博士学位期间，在恩师艾南山教授指导下，尝试研究大气污染的非线性问题。多年以来，作者一直从事大气环境领域的研究，重点是将复杂性理论、分形方法、自组织临界动力学等非线性科学与方法引入大气环境领域，系统阐明空气污染演化的复杂非线性规律，在大气污染扩散累积宏观动力学、大气质量长期演化的涌现效应、大气污染预测基础等方面取得了大量有价值的研究成果，形成了较为完整的研究体系。本书中相当篇幅的内容反映了作者多年的研究成果，同时考虑到全书的系统性和完整性，收录了部分基础理论知识。

全书内容共分为7章。第1章主要介绍当前大气环境研究中引入复杂性理论的必要性；第2章介绍分形理论的基本概念；第3章介绍各种时间序列分形方法的具体算法和原理；第4章统计说明大气环境相关数据的非线性和非平稳性特征；第5章阐明大气污染演化过程中涌现的长期持续性效应，说明大气污染长期相关的内涵；第6章介绍互相作用的长期持续性效应及其在大气环境领域中的应用；第7章介绍大气环境的多重分形动力学研究。

本书是作者多年研究成果的结晶。本书的出版得到了化学工业出版社和吉首大学的大力支持。书中也融入了作者在吉首大学指导的多位研究生（李思川、黄毅、吴生虎、谢志辉等）的部分科研成果，他们也参与了本书各章的文字录入、校对等工作。在此一并表示感谢。

希望这本书对广大研究大气环境和复杂非线性理论的读者有参考价值，通过各种实例的启发，做出更好的创新性工作。

本书得到国家自然科学基金项目（41465010、41603128）、湖南省教育厅科学研究重点项目（16A172）、湖南省自然科学基金面上项目（2017JJ2219）的资助。同时本书的出版也得到生态旅游湖南省重点实验室和吉首大学生态学湖南省重点学科的大力资助，谨在此表达诚挚的谢意。

由于作者水平有限，书中疏漏之处在所难免，敬请读者批评指正。

著 者
2018年6月

目录

CONTENTS

第1章 绪论

1

- 1.1 ▶ 大气污染概述 1
- 1.2 ▶ 复杂性科学 2
 - 1.2.1 什么是复杂性 2
 - 1.2.2 复杂系统 3
- 1.3 ▶ 复杂性理论框架下的大气污染研究 4
 - 1.3.1 大气污染的复杂性特征 4
 - 1.3.2 大气污染复杂巨系统 5
 - 1.3.3 大气污染复杂系统的研究途径 6

第2章 分形理论概述

8

- 2.1 ▶ 分形概念的提出 8
 - 2.1.1 海岸线的长度问题 8
 - 2.1.2 Koch 曲线 11
 - 2.1.3 其他重要的分形结构 12
 - 2.1.4 分形的定义 17
- 2.2 ▶ 分形维数 17
 - 2.2.1 Hausdorff 维数 17
 - 2.2.2 规则分形的分维计算 19
 - 2.2.3 计盒维数 20
- 2.3 ▶ 多重分形的概念 22

第3章 时间序列的分形方法

26

- 3.1 ▶ 时间序列与 Hurst 效应 26
 - 3.1.1 时间序列 26

3.1.2 Hurst 效应	27
3.2 ▶ R/S 分析与长期持续性	27
3.3 ▶ 功率谱与 $1/f$ 噪声	29
3.4 ▶ 计盒维数	30
3.5 ▶ 多重分形计盒维数	31
3.6 ▶ 消除趋势波动分析 (DFA) 方法	33
3.7 ▶ 多重分形消除趋势波动分析 (MFDFA) 方法	34
3.8 ▶ 去趋势互相关分析 (DCCA) 方法	36
3.9 ▶ 多重分形去趋势互相关分析 (MFDCCA) 方法	37
3.10 ▶ 去趋势耦合相关分析 (CDFA) 方法	39

第 4 章 城市大气环境的非线性特征与非平稳性

42

4.1 ▶ 数据说明	42
4.2 ▶ 数据的非线性特征分析	47
4.2.1 研究数据	47
4.2.2 正态性检验	49
4.2.3 统计量检验	50
4.2.4 非平稳性检验	52

第 5 章 城市大气污染演化的长期持续特征

54

5.1 ▶ 城市空气质量状况的分形结构分析	54
5.1.1 研究数据与方法	54
5.1.2 研究结果与讨论	55
5.1.3 研究结论	59
5.2 ▶ 城市空气质量状况的长期持续性分析	59
5.2.1 研究数据和方法	60
5.2.2 研究结果和讨论	60
5.2.3 研究结论	68
5.3 ▶ 重度灰霾期间 PM_{10} 演化的分形特征及 DFA 分析	69
5.3.1 研究数据与方法	70

5.3.2	研究结果与讨论	70
5.3.3	研究结论	77
5.4	► 重度灰霾期间 NO_2 演化长期持续性特征的空间稳定性	77
5.4.1	研究数据和方法	78
5.4.2	研究结果与讨论	79
5.4.3	研究结论	81
5.5	► 灰霾消散前后 $\text{PM}_{2.5}$ 演化长期持续性特征的时间稳定性	82
5.5.1	研究数据和方法	82
5.5.2	研究结果与讨论	84
5.5.3	研究结论	88

第 6 章 DCCA 方法在大气环境中的应用

89

6.1	► 夏季阴雨天和晴天 O_3 与 NO_2 相互作用的时间尺度差异性分析	89
6.1.1	研究数据与方法	90
6.1.2	研究结果与讨论	91
6.1.3	研究结论	96
6.2	► 夏季和冬季近地层 O_3 与 NO_2 的长期互相关作用差异性分析	97
6.2.1	研究数据和方法	97
6.2.2	研究结果与讨论	98
6.2.3	研究结论	101
6.3	► 基于 DCCA 方法的成都市市区与周边城镇大气污染长程相关性分析	102
6.3.1	研究数据和方法	102
6.3.2	研究结果与讨论	103
6.3.3	研究结论	107
6.4	► 大气环境中 PM_{10} 对大气辐射环境的影响	107
6.4.1	研究数据和方法	108
6.4.2	研究结果与讨论	109
6.4.3	研究结论	112
6.5	► 大气中长期二噁英浓度变化与温度、降水和 PM_{10} 的相关性	112
6.5.1	研究数据和方法	113
6.5.2	研究结果与讨论	114
6.5.3	研究结论	116
6.6	► 城市尺度上交通拥堵与大气 NO_2 污染的关系研究	116

6.6.1	研究数据与方法	117
6.6.2	研究结果与讨论	120
6.6.3	研究结论	123

第7章 城市大气污染演化的多重分形特征 125

7.1	城市空气质量变化的多重分形分析	125
7.1.1	研究数据和方法	125
7.1.2	研究结果与讨论	126
7.1.3	研究结论	132
7.2	灰霾消散前后 PM_{10} 浓度大幅波动的多重分形分析	132
7.2.1	研究数据与方法	133
7.2.2	研究结果与讨论	134
7.2.3	研究结论	138
7.3	城市大气污染物时间演变分形动力学	138
7.3.1	研究数据和方法	139
7.3.2	研究结果与讨论	140
7.4	近地层 O_3 和 NO 、 NO_2 相互作用的多重分形分析	152
7.4.1	研究数据和方法	153
7.4.2	研究结果与讨论	153
7.4.3	研究结论	157
7.5	O_3 与前体物耦合作用的 CDFA 分析	158
7.5.1	研究数据和方法	159
7.5.2	研究结果与讨论	161
7.5.3	研究结论	165

参考文献 167

后记 175

第1章

绪论

1.1 大气污染概述

大气污染是我国各大城市面临的重大环境问题之一^[1]。严重大气污染事件频发，对人类健康和社会经济发展构成巨大威胁^[2,3]。城市大气污染问题长期以来受到公众、社会和科学界人士的高度关注。

根据 2016 年中国环境质量公报，2016 年全国 338 个地级及以上城市中，仅有 84 个城市环境空气质量达标，占城市总数的 24.9%；254 个城市环境空气质量超标，占 75.1%。其中，338 个城市发生重度污染 2464 天次、严重污染 784 天次，以 $PM_{2.5}$ 为首要污染物的天数占重度及以上污染天数的 80.3%，以 PM_{10} 为首要污染物的占 20.4%，以 O_3 为首要污染物的占 0.9%。

由于空气是人类赖以生存的基本环境要素，与人体的基础生命过程息息相关，因而严重大气污染的发生势必会危害人体健康。从人体接触空气的途径来看，通过呼吸道吸入大气污染物对人体造成的影响是最主要的。正常人吸入的空气经过鼻腔、咽部、喉头、气管、支气管、肺泡，最后经过肺泡毛细血管输送到人体各部位，维持人体机能的新陈代谢作用。一旦空气受到污染，整个呼吸系统各个环节均可能发生病变，发生支气管炎、哮喘、肺炎、肺气肿甚至肺癌等严重疾病。除了呼吸系统疾病之外，由于大气污染物在人体血液中的输送影响，也会造成各种心血管疾病的发生，比如高血压、冠心病、动脉硬化等。城市人群中癌症的多发，如肺癌等，也被认为与大气污染有着密切的关系^[2,3]。另外，城市空气污染还对交通、农业、林业、文物建筑、气候等造成严重影响^[1]。有学者评估认为，仅酸雨一项，导致我国每年经济损失就达到数百亿元^[1]。

鉴于我国严峻的大气污染态势，如何在发展经济的过程中改善大气环境质量，有效降低空气污染发生对人体健康造成的影响，不仅仅是科学工作者关注的科学问题，也是公众和社会普遍关心的切身问题。空气污染预测正是在这样的背景下产生的^[4~6]。所谓空气污染预测就是根据城市污染物排放情况以及气象条件、大气扩散状况、地理地貌等因素，来预测判断未来该地区的空气污染程度及对公众日常活动的影响和危害，并及

时做出预报。空气污染预测可以向社会和政府及时提供未来大气环境质量的状况,有利于及时采取针对性的措施来控制大气污染。特别是若预测有重污染事件出现时,可以通知有关工厂限产或控制车辆运行,提醒人们减少户外活动,以降低空气污染对身体造成的损害。

因此,深入认识城市大气污染形成及演化规律,揭示其发生的机理,将有助于发展更科学有效的空气质量预测方法,这对我国大气污染防治、环境管理及实现可持续发展具有重要的现实意义和理论价值。

1.2 复杂性科学

1.2.1 什么是复杂性

人类面临着政治、经济、社会、环境等各种各样复杂性问题的挑战时,纵观物理学、化学、生物学、医学、政治学、社会学、计算机科学等领域,研究者们都会思索这样一个问题:是否存在一个普遍理论能够帮助我们理解种类繁多的复杂现象?著名科学家钱学森在20世纪80年代曾经提出:“凡是在不能用还原论方法处理的,或不宜用还原论方法处理的问题,而要用或宜用新的科学方法处理的问题,都是复杂性问题”。复杂性(complexity)科学是一门极度概括的综合性学科,是近十几年发展起来的新兴交叉学科,在近年的国际学术研究中,被称为“21世纪的科学”^[7~10]。复杂性科学专门用于研究复杂现象和复杂系统,以寻找一般性规律。

一般而言,复杂性包括两个方面的内容:发展演化意义上的复杂性和存在意义上的复杂性。在演化意义上,复杂性是指当一个开放系统远离平衡态时,不可逆过程的非线性动力学机制所演化出的多样化“自组织”现象和混沌状态。既然远离平衡条件下的非线性动力学机制是导致事物复杂性的根本原因,认识复杂性的基本方法是阐明复杂性系统的动力学机制。存在意义上的复杂性是指事物具有层次结构,其中就包括时间尺度上、空间尺度上、功能上、组织形式上和相互作用上的层次结构。

复杂性科学的相关研究早在第一次世界大战开始就出现了,到20世纪80年代,国外的一些学术团体如圣菲研究所和乔治·梅森大学开始了复杂性的研究,并提倡新的思维方法,“复杂性科学”这门新的学科随之而发展。目前,关于“复杂性科学”的专著和文集也开始慢慢涌现,“复杂系统”“复杂性科学”等名词也逐渐流行起来,这反映出科学发展的一种趋势。近年来,随着复杂系统和复杂性的研究已上升到了一个新的台阶,许多不同领域的科学家开始广泛关注这门学科。关于复杂性问题,早在19世纪70年代在美国国会图书馆的入藏书目中,标题中就含有复杂性一词,其中包括:生物复杂性、生态复杂性、演化复杂性等。关于复杂性的研究已经囊括了各个领域,然而,什么是复杂性?关于复杂系统的定义也是各种各样,至今仍然没有一个精确的定义,其中有代表性的有:①复杂系统是动态非线性系统;②复杂系统是包含反馈环的系统;③复杂系统是包含多个行为主体具有层次结构的系统;④复杂系统是混沌系统;⑤复杂系统是任何人不能用传统理论和方法解释其行为的系统;⑥复杂系统是具有自适应能力的演化

系统。

复杂性科学主要包括：分形学、混沌学、耗散结构理论、超循环理论、突变论、协同论等内容。复杂性科学认为，世界从本质上是复杂的、非线性的、开放的系统，是事物的一种普遍的存在方式。普利高津指出，复杂性存在于一切层次，不同层次的复杂性既有差别，又有统一性，物理层次已经具备“最低限度的复杂性”，远离平衡态、非线性、不可逆过程是产生复杂性的根源。复杂性是一个开放的复杂系统，由于组分的数量和种类多，层级结构多，不确定因素多，导致系统在演化过程中和环境交互作用，呈现出复杂的动态行为特性和突现的整体特性。

目前，这一新兴学科吸引了来自不同领域的杰出科学家对其理论框架和研究方法的探索，并形成了各种各样的复杂系统的新概念和新理论。

1.2.2 复杂系统

复杂系统是相对于简单系统和线性系统而言的，一般而言，复杂系统指的是由许多组分组成的系统，而且各成分间存在非线性相互作用，即各个组分之间有许多相互作用不是简单的，从而使得整个系统表现出聚现特征^①。聚现特征是指仅仅单组分不可能获得系统的聚合特征，它是多组分非线性作用的结果，也是复杂系统“整体”大于所有单个组分的“总和”的根本原因。也就是说，即使已知组分的性质和它们相互作用的规律，也很难把整体的性质推断出来。

根据系统的组成结构特征，可以将系统分为三类：简单系统、随机系统、复杂系统。

(1) 简单系统

简单系统的特点是包含的变量数目较少，可以用较少的变量来描述。这种系统完全可以用经典力学规律去加以认识。简单系统可以精确预见，因而是可控的。

(2) 随机系统

随机系统的特征是元素和变量数很多，但变量之间的相互作用是微弱的，充满随机性。这类系统可以用统计的方法去分析。

(3) 复杂系统

复杂系统的特征是元素数目很多，且其间存在着强烈的相互作用。复杂系统也可能由各种小的系统组成，生态系统是复杂系统的一个最好的例子，它兼有简单系统和随机系统的各种特征。

复杂系统具有秩序与混沌的双重特点。一方面，复杂性系统表现出混沌、不可预测的特点，如鸟群、鱼群在捕食或躲避危险过程中表现出来的快速变化的聚集成群。另一方面，复杂系统具有潜在的结构模式和秩序，如生态系统的结构组成、河流山川的地形地貌、心肺气管的分岔结构、矿石的结晶构造等。一个复杂性系统的复杂行为并非出自该系统复杂的基本结构，而主要取决于系统内部许多单元和变量之间的相互作用方式。在分形理论中，各种分形图的结构相当复杂，表观上看来，结构层峦叠嶂，无穷缠绕，具有随机和复杂的特征，然而整体结构却杂而不乱，拥有自相似性的无穷嵌套结构，这一根本性的模式是可以认识的、确定的。

简单的数学分析方法不能处理复杂系统各组成单位之间的复杂非线性相互作用。这样,对于复杂系统内在模式的理解,需要利用基于“整体论”的非线性分析方法才能得以深入认识。

1.3 复杂性理论框架下的大气污染研究

1.3.1 大气污染的复杂性特征

空气污染在空间上既具有普遍性,又具有区域性,在时间上既表现无序的非稳定性,又存在有序的节律性和周期性。相关研究表明,空气污染具有非线性、不均匀性与差异性、多样性、随机性与可预测性、突变性与规律性、动态性、开放性等复杂性的特点。

(1) 非线性

线性在坐标轴上呈现一条直线;非线性是指用同样的方法描述一个复杂系统,其图像会是一条曲线。大气系统作为一个复杂的信息交流系统,污染物排入后其诸要素之间除了一个相互作用、互为因果的协同效应的逻辑确定性关系(线性关系)外,还存在一种人们无法根据现存原则对其进行客观、准确地描述和揭示其中必然的因果关系的非线性关系。非线性系统不满足叠加原理,整体作用大于部分作用之和。空气污染系统存在线性关系,但更多的是非线性关系。例如,突发性污染事故将导致极大的污染指数,但并不是所有极大污染指数都是由突发性污染事故造成,由此可见,污染指数的大小并非都是由当日排放的污染物量所引起,它们之间并不呈现清晰的因果线性关系。如果研究者试图用一种简单化、线性、确定的范式对空气污染进行描述,最终将不会得出理想的结论。

(2) 不均匀性与差异性

空气污染的不均匀性和差异性,不仅表现在空间分布方面,还表现在时间分布上。例如:在中国,由于北方重工业比较发达,因此其空气污染较南方严重。由于空气系统受气象的影响,具有明显的季节变化,从而空气污染在时间分布上表现了显著的差异性和不均匀性特点。

(3) 多样性

一般而言,无论是自然复杂系统,还是生物系统、经济系统等整体行为都具有多样性,这种多样性一方面是由于构成系统的各组成因素之间的相互作用;另一方面也包括各组成因素与环境之间的相互作用。相互作用的多样性导致了系统总体行为的多样性。系统性能的多样性决定了系统功能的多样性。由于自然环境差异极大,影响空气污染的各种自然条件,如气象、下垫面等,及社会条件不同,如主要产业结构,采取的环保政策等不同,空气污染具有多样性。

(4) 随机性与可预测性

空气污染的随机性源于空气污染的多样性、差异性及模糊性。由于地形地貌、气象、下垫面状况的随机性导致大气系统中污染物的时间演变的不确定性。污染物排入大

气系统中,其迁移和转化的过程与各种气象因素有关,如气温、气压、逆温等因素,还与复杂的地形地貌有关,如平坦的地形有利于污染物的扩散,而高山峡谷却不利于污染物的扩散。而这些气象因素等是随机的。因此,空气污染的不确定性主要源于大气系统的不确定性,而大气系统的不确定性也包括两个方面:气象的不确定性和下垫面的不确定性。

空气污染的可预测性是指空气污染的发生、发展过程具有规律性,并且是可以预测的,只是由于人类目前对空气污染演变特征与机制还不完全了解,不能准确把握任意时刻、任意地区各种空气污染的形成和发展过程,而某些或某一地区空气污染的发生对人类而言具有随机性。空气污染的随机性和可预测性是相对于人类的认识水平而言的,如果人类的科学技术已经发展到了一定水平,即对于各种空气污染的机理和过程都彻底了解,则可以对各种空气污染事件做出及时的预报。因此,为了实现对空气污染的预报,必须深入开展对空气污染机制和规律的研究。

(5) 突变性和规律性

污染物的排放是造成空气污染的直接原因。然而,为了经济的发展,污染物的排放是不可避免的,具有相当的突发性。因此,空气污染在一定程度上,在一定的时间尺度上,表现了突变性;另一方面,空气污染也具有一定的规律性,从各大省市的监测站所得数据显示,一般而言,在产业结构相同的情况下,平原地区的空气状况较山区好。另外,在冬季空气污染较夏季严重。因此,空气污染不仅具有突变性,而且具有规律性。

(6) 动态性

动态性是指系统不是静止的,而是时时刻刻运动着、发展着。例如,污染物排入大气后,由于气流的流动性,污染物在大气系统中不是静止不动的,而是随气流一起不断向各个方向进行迁移、扩散的。且影响污染物的各种气象因子也是在不断变化着的,如气温、风速、气压等。

(7) 开放性

系统具有开放性是指系统本身与系统周围的环境有物质的交换、能量的交换、信息的交换。由于具有这些交换,所以是开放的。开放性能使系统的各组分之间以及系统本身与环境之间相互作用,并能不断地向更好的适应环境的方向发展变化。污染物作为大气系统的一个子系统,和气象、下垫面、人类活动等诸多方面有密切的联系,使得空气污染具有开放性。开放的系统,是无法控制的系统,不仅系统内部表现出复杂性,而且系统外部也表现出复杂性。任何一个因素的变化,甚至一个偶然的事件都有可能对空气污染产生影响。

1.3.2 大气污染复杂巨系统

空气污染的发生、发展的整个过程都是空气污染发生系统内部和外部各要素之间相互联系的过程,也是它们之间的物质流、能量流和信息流相互作用的结果,它是人与自然关系的一种表现。致灾因子(污染源)、孕灾环境(大气系统)和承灾体(受害者)三者之间相互作用、相互联系、相互影响的结果,构成一个具有一定结构和功能特征的空气污染发生系统。该系统受到气象、地形、人类的约束和众多因素的影响,具有高维

性、复杂性、开放性和动态性等特点,因此,根据系统科学的观点,空气污染发生系统是一个动态复杂大系统。

如何了解空气污染复杂大系统的行为?传统的方法是自上而下的还原论方法,不可否认,还原论在研究一些系统的行为时是有效的,但在处理复杂系统时,却存在很大的局限性。例如,还原论要求独立的分析每个单元的行为,而在复杂系统中,由于各单元之间的关系很复杂,无法将某个单元与其他单元分离开独立的分析,单元间的关系或相互作用也难明确等。正是空气污染发生的复杂性,使得经典的理论和方法已不适合于日趋复杂化的空气污染系统的研究。必须应用复杂性理论,采用综合分析的方法,将各个学科结合起来,研究空气污染大系统中各种复杂现象和问题。

1.3.3 大气污染复杂系统的研究途径

研究中国重点城市严重空气污染的发生及时空演变的复杂性机制,进而对严重空气污染的发生进行更科学准确的预测、预警及风险评价,是当前十分重要和紧迫的研究课题,具有重要学术价值和实际意义。其中,建立更科学合理的理论和方法来研究复杂大气系统中重污染的发生机制及其演化动态,是该领域主要研究方向之一。

随着计算机技术的发展,数值模拟已成为研究大气污染问题的重要手段。长期以来,为了描述空气污染的发生及其演化动态,人们往往从微观细节的角度出发,尽可能多地研究每一种污染物的性质及其相互之间的化学反应机制和物理传输机制,建立空气污染动态的精确数学模型,利用计算机技术求解,从而达到空气污染动态模拟的目的。学者们基于大气物理、大气化学、气象学等方法提出了众多理论和模型用以研究、模拟和预测大气颗粒物的时空演化。这些模型中尽可能详尽地包含了各种大气污染物之间的相互作用以及污染物与气象因素之间的相互作用,如排放、对流、湍流、输运、冷凝、蒸发、凝聚、成核、沉降和多相化学反应等,物理意义明确,可以准确刻画短期空气污染系统动态过程,有的方法已经在实际空气污染预测中得到了应用,取得了较好的研究成果^[11~14]。

然而,这些模式所涉及的计算参数众多、方程繁杂、参数估计工作巨大。同时,由于大气环境的复杂性,模型中许多过程并不明晰,比如大气化学中化学成分组成、反应速率、反应条件等存在较多不确定性因素。因此人们对大气污染物时间演化的动力过程并没有得到满意的认识^[11~14]。尽管各模型基于的理论和功能有较大差异,基于确定性还原论思维的颗粒物污染模式实际上均暗含了这样一种基本假设:只要知道了所有影响因子及其相互作用机制,就可以对大气颗粒物的时空演化做出确定性的预测。然而,实际上,大气环境系统是典型的复杂巨系统,其组成单元数目庞大,单元之间存在强烈的反馈与调节的非线性相互作用。对于这样的复杂系统,要穷尽涉及空气污染的所有影响因素及其作用机制显然是不可能的,也没有必要。

从复杂性理论来看,大气污染时间演化过程是开放、耗散的大气巨系统在人为污染作用下的复杂现象,其形成与演化既受到微观的物理化学等机制的作用,同时也

表现为宏观、整体性系统动力学的结果。由于大气系统固有的混沌特性，使得人类迄今掌握的数学方法均无法对城市空气污染长期动态行为进行精确建模，空气污染模式也不可能在城市空气污染防治措施所要求的任意时间段内精确求解来全面描述其复杂动态特性。因此，需要另辟蹊径发展新的研究思路。基于复杂性科学的理论和方法，从宏观、整体上认识城市空气污染系统的演化过程，已成为城市大气环境基础研究的一个热点。本书试图在复杂性科学的分形理论的概念框架下研究大气污染演化特征。

第2章

分形理论概述

2.1 分形概念的提出

物理学所经历的 300 多年的发展中已经取得了极其巨大的成就，例如天体的运行、机械的构造、微观世界的理解等。物理学家认为这些都是物质的规则运动，因此这些问题可以用所谓的线性方程来描述，在数学上求解这些线性方程是比较容易的。即使存在某些非线性的因素，物理学家总可以采取某些特殊的方法，比如微扰等技术使其线性化，然后求解。物理学大厦的根基是线性的，但是自然界中普遍存在着另一类现象，例如湍流、机翼附近的空气运动、心电图、DNA 序列的排列、气候变化、股票波动、经济全球化等，这些事情都是非常复杂的不规则现象，本质上是非线性的，无法通过数学方程求解得到结果，物理学也从来没有弄懂过这类事情。分形的诞生和传播有助于描述和解决这类复杂的问题。

2.1.1 海岸线的长度问题

地理学上，地理单元的长度测量，是基本的问题。在 20 世纪 60 年代之前，人们理所当然地认为，一个国家海岸线的长度是完全确定的，其准确数值仅仅取决于测量的精度和误差而已。直到 1967 年，一位法国的数学家 Mandelbrot 在 *Science* 杂志上重新提出这个问题：“英国的海岸线有多长？”^[15]，他发现海岸线测量的问题比我们想象的要复杂得多。由于海水冲刷和陆地变迁，海岸都存在曲曲折折、大小不一的凹凸海湾，呈现出极其不规则的形状。图 2-1 展示了一张大自然中崎岖的海岸线的照片。

任何人，无论测量多么认真细致，都不可能得到唯一的答案，因为事实上根本就不会有准确的答案。英国的海岸线长度是不确定的！它完全取决于测量时所用的尺度。假如某个人乘坐飞机在一万米高空沿海岸线飞行并进行测量，由于高空不可能分辨出许多细小的海湾和海峡，所以测量得到的海岸线长度是有限的。为了提高精确度，又乘坐飞机在一千米高空沿海岸线飞行并进行测量，此时将会看清许多原来没有看到的细部，从而测量得到的海岸线长度将会大大增加，如此等等。图 2-2 表示测量标尺的变小，局部得到放大，将揭示出更多的不规则海岸特征。随着观测的角度不断接近海岸，采用的