

# T/SHAEPI

上海市环境保护产业协会团体标准

T/SHAEPI 0\*\*—2025

---

## 平流层臭氧侵入识别技术指南

Technical Guidelines for Identification of Stratospheric Ozone Intrusion

(征求意见稿)

2025 - - 发布

2025- - 实施

---

上海市环境保护产业协会 发布

## 目录

前 言 .....	4
1 适用范围 .....	5
2 规范性引用文件 .....	5
3 术语和定义 .....	5
4. 数据来源与预处理 .....	6
4.1 卫星遥感数据 .....	6
4.2 地面观测数据 .....	6
4.3 位涡再分析数据 .....	7
5. 臭氧垂直廓线与近地面臭氧浓度反演 .....	7
5.1 最优估计法反演臭氧垂直廓线 .....	7
5.2 机器学习反演近地面臭氧浓度 .....	8
6. 平流层臭氧侵入识别方法 .....	8
6.1 位涡 .....	8
6.2 垂直廓线和近地面臭氧浓度特征 .....	9
6.3 天空地一体化综合判定 .....	9
7. 质量控制 .....	9
7.1 数据质量控制 .....	10
7.2 反演结果质量评估 .....	10
7.3 判定识别结果验证 .....	10

## 前 言

为贯彻《中华人民共和国环境保护法》《中华人民共和国大气污染防治法》，防治生态环境污染，改善生态环境质量，规范和指导平流层臭氧侵入识别工作，制定本标准。

本标准规定了平流层臭氧侵入识别的方法、结果验证、质量控制等内容。

本标准的附录A为资料性附录。

本标准为首次发布。

本文件由生态环境部卫星环境应用中心提出。

本文件由上海市环境保护产业协会归口。

本文件主要起草单位：生态环境部卫星环境应用中心、中国科学技术大学、中国科学院空天信息创新研究院、上海市环境监测中心、山东省济南生态环境监测中心、广西壮族自治区生态环境监测中心、上海卫星工程研究所、中国科学院合肥物质科学研究院。

本标准于202□年□□月□□日批准。

本标准自202□年□□月□□日起实施。

# 平流层臭氧侵入识别技术指南

## 1 适用范围

本标准规定了平流层臭氧侵入识别源技术指南的术语和定义、技术方法、结果验证、质量控制等内容。

本标准适用于陆地区域平流层臭氧侵入识别工作，适用于用于近地面臭氧污染的溯源工作。

## 2 规范性引用文件

本标准引用了下列文件或其中的条款。凡是注明日期的引用文件，仅注日期的版本适用于本标准。凡是未注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本标准。

GB 3095-2012	环境空气质量标准及修改单
HJ 663	环境空气质量评价技术规范（试行）
HJ 633	环境空气质量指数（AQI）技术规定（试行）
HJ 818	环境空气气态污染物（SO <sub>2</sub> 、NO <sub>2</sub> 、O <sub>3</sub> 、CO）连续自动监测系统运行和质控技术规范

规范

## 3 术语和定义

下列术语和定义适用于本标准。

### 3.1

**平流层臭氧侵入事件** Stratospheric Ozone Intrusion Event

指平流层空气动力沉降至对流层并导致其所携带的高浓度臭氧到达地面的事件。

### 3.2

**位势涡度** Potential Vorticity

简称位涡，描述气体速度场旋度与气体位势（厚度或高度）间关系的物理量，单位PVU（1PVU =  $10^{-6} \text{m}^2 \cdot \text{K} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{kg}^{-1}$ ）。对绝热、无摩擦的干空气而言，其位涡守恒，为一常数。

### 3.2

**像元臭氧浓度** pixel ozone concentration

卫星观测1个像元范围内的近地面大气臭氧平均质量浓度，计量单位为 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 。

### 3.3

**大气成分垂直廓线** vertical profile of atmospheric components

卫星观测1个像元所覆盖的地面区域内，大气中某一成分（如臭氧、CO、H<sub>2</sub>O）的体积混合比随垂直高度（或气压层）的分布曲线或数据序列，计量单位为ppbv。

### 3.5

**行星边界层高度** planetary boundary layer height (PBLH)

行星边界层也称摩擦层或大气边界层，是对流层的最下层，一般自地面到1 km~2 km 高度；行星边界层高度是指从地面到行星边界层顶的高度，表示污染物在垂直方向能被热力湍流所扩散的范围。

### 3.6

#### 最优估计法

基于贝叶斯理论，通过构建目标函数和选择寻优策略，在先验误差协方差矩阵和观测噪声协方差矩阵的限定下，以迭代的形式逐步逼近真值的反演方法。

### 3.7

#### 机器学习

一类让计算机通过数据学习模式并进行预测的算法，包括但不限于神经网络、支持向量机等。

## 4. 数据来源与预处理

### 4.1 卫星遥感数据

#### 4.1.1 数据源选择

选用具备臭氧、CO、H<sub>2</sub>O 等气体探测能力的卫星数据，如搭载高光谱红外探测器（如 AIRS、CrIS、GIIRS等）、紫外 / 可见高光谱探测器（如 TROPOMI、EMI等）的卫星。确保卫星数据的时空分辨率、精度满足识别需求，数据覆盖区域包含目标区域。

#### 4.1.2 数据下载与格式转换

按照卫星数据发布机构提供的下载工具和接口，获取原始卫星数据。将原始数据格式（如 HDF、NetCDF 等）转换为便于后续处理的通用格式，确保数据完整性和正确性。

#### 4.1.3 数据预处理

- 辐射校正与辐射定标：根据卫星传感器的波段参数和定标参数，对观测辐射值进行校正，消除传感器响应差异，将卫星传感器观测 DN 值转换为表观反射率。
- 几何校正：纠正卫星图像因地球曲率、卫星姿态等因素引起的几何变形，使图像中各像元的地理位置与实际地理坐标精确对应。
- 云检测与剔除：利用云检测算法（如基于反射率、亮温等阈值的方法）识别并剔除云污染像元，确保用于反演的卫星数据为晴空条件下的数据。

### 4.2 地面观测数据

#### 4.2.1 数据源选择

收集地面空气质量监测站点、地面臭氧激光雷达监测站点、探空站等的观测数据。地面空气质量监测站点应具备高精度的臭氧浓度监测仪器，且符合相关监测规范。探空站数据应包含温度、湿度、气压等气象要素以及臭氧浓度（若有），用于提供近地面和垂直方向的参考数据。

#### 4.2.2 数据质量控制

对地面观测数据进行质量控制，剔除异常值和错误数据。检查数据的完整性，对于缺失数据，根据实际情况进行插值或补充（如利用邻近站点数据、时间序列模型等）。

### 4.3 位涡再分析数据

#### 4.3.1 数据源选择

采用国际权威气象机构发布的位涡再分析数据，如欧洲中期天气预报中心（ECMWF）的第五代大气再分析数据 ERA5 再分析数据、美国国家环境预报中心（NCEP）的再分析数据等。

#### 4.3.2 数据下载与格式处理

从相应气象机构的数据下载平台获取位涡再分析数据，将数据格式转换为与其他数据一致的格式，便于后续数据融合和分析。

## 5. 臭氧垂直廓线与近地面臭氧浓度反演

利用卫星遥感数据，采用最优估计法反演臭氧垂直廓线和柱浓度；利用机器学习方法融合地面空气质量监测站点数据、再分析数据和卫星数据，反演获取目标区域陆地像元的近地面臭氧浓度，卫星遥感反演流程如下：



图 1 卫星遥感反演臭氧廓线和近地面臭氧浓度技术流程图

### 5.1 最优估计法反演臭氧垂直廓线

#### 5.1.1 辐射传输模型选择

根据卫星观测波段和目标气体特性，选择合适的辐射传输模型，如 SCIATRAN、VLIDORT 等。这些模型能够模拟大气中辐射传输过程，包括气体吸收、散射等，为最优估计法提供正向模拟基础。

#### 5.1.2 先验信息确定

确定臭氧的先验廓线和先验误差协方差矩阵。基于 ERA5 气象再分析资料和臭氧探空数据等历史观测数据，采用聚类分析方法生成区域化先验廓线。先验误差协方差矩阵反映先验信息的不确定性，根据不同高度层和气体的特性进行设定。

### 5.1.3 反演迭代过程

将卫星观测辐射值作为输入，利用最优估计法构建代价函数。通过迭代计算，不断调整反演的气体垂直廓线，使得模拟辐射值与观测辐射值之间的差异最小化。在迭代过程中，利用权重函数和更新公式，逐步逼近真实的垂直廓线，直至代价函数收敛到最小值，得到最优的气体垂直廓线反演结果。

## 5.2 机器学习反演近地面臭氧浓度

### 5.2.1 特征变量

从卫星遥感数据、地面观测数据以及气象再分析数据中提取对近地面臭氧浓度反演敏感的特征变量。这些特征变量建议包括但不限于：

- 再分析数据：NCEP 再分析数据集的臭氧混合比 ( $O_3MR$ )、总臭氧 ( $TOZONE$ )、四层抬升指数 ( $4LFTX$ ) 等特征变量，时间分辨率为小时级，空间分辨率为  $0.25^\circ \times 0.25^\circ$ ；以及 ERA5 中的 2m 温度、地面气压等变量，用于分析气象因素对臭氧污染事件的影响。
- 地面监测数据：地面空气质量监测站点的小时级  $O_3$  和  $NO_2$  浓度数据。
- 卫星数据：Sentinel-5P 卫星对流层监测仪 (TROPOMI) 或国产卫星 (GF-5、DQ-1 等) 大气痕量气体差分吸收光谱仪 EMI 反演的对流层  $NO_2$  和  $HCHO$  柱浓度数据；航天飞机雷达地形测绘任务 (SRTM) 的数字高程模型 (DEM) 数据 (空间分辨率 1km)；中等分辨率成像光谱仪 (MODIS) 的归一化植被指数 (NDVI)、增强植被指数 (EVI) 及土地覆盖数据 (NDVI 和 EVI 分辨率 1km，土地覆盖数据分辨率 500m)。

### 5.2.2 机器学习模型构建与训练

利用机器学习模型，如决策树集成、卷积神经网络等，将提取的特征变量和对应的已知近地面臭氧浓度数据 (如地面观测数据、高精度再分析数据等) 作为训练样本，对机器学习模型进行训练。在训练过程中，调整模型参数，使模型能够准确学习特征变量与目标变量之间的关系，提高反演精度。

## 6. 平流层臭氧侵入识别方法

综合位涡再分析提供的大气动力信息、卫星遥感提供的大尺度空间信息和地面观测提供的高精度近地面信息，采用天空地一体化的定量判定体系开展平流层臭氧侵入识别。

### 6.1 位涡

#### 6.1.1 位涡计算与分析

利用位涡再分析数据，计算研究区域的位涡分布。在位涡守恒条件下，追踪位涡高值区 (通常与平流层空气相关) 的移动轨迹。若位涡高值区向下延伸至对流层，且与反演得到的臭氧垂直廓线中异常高值区在空间和时间上具有一致性，则可作为平流层臭氧侵入的重要证据。

### 6.1.2 位涡阈值确定

根据研究区域的气候特征和历史数据，确定用于判定平流层臭氧侵入的位涡阈值。当某一区域的位涡值超过该阈值，且持续时间达到一定时长时，判定该区域可能发生平流层臭氧侵入事件。阈值的确定需要通过大量的历史数据验证和敏感性分析，确保其准确性和可靠性。对于平原地区，位涡阈值可以 1PVU 下探至 700hPa 作为参考；对于高海拔地区（海拔 $\geq$ 2500 米），位涡阈值可以 2PVU 下探至 200hPa 以下作为参考。

## 6.2 垂直廓线和近地面臭氧浓度特征

### 6.2.1 臭氧垂直廓线特征分析

分析反演得到的臭氧垂直廓线，识别平流层臭氧侵入的特征。典型特征包括在对流层中上部出现臭氧浓度异常高值区，且该高值区与平流层臭氧浓度分布具有垂直连续性。对比不同季节、不同年份的臭氧垂直廓线，确定该区域臭氧浓度是否超出正常范围，判断是否存在平流层臭氧侵入现象。对于平原地区，以 100-500 hPa 各气压层臭氧浓度 $\geq$ 75ppb 作为参考阈值；对于高海拔地区（海拔 $\geq$ 2500 米），以 100-300 hPa 各气压层臭氧浓度 $\geq$ 75ppb 作为参考阈值。

### 6.2.2 与 CO、RH 廓线的联合分析

结合 CO 和 H<sub>2</sub>O 垂直廓线信息，进一步验证平流层臭氧侵入。在平流层臭氧侵入事件中，CO 和 H<sub>2</sub>O 的垂直分布也可能受到影响，出现与臭氧侵入相关的异常变化。平流层空气中 CO 浓度和相对湿度较低，若在对流层中上部观测到 CO 浓度及相对湿度异常降低，且与臭氧浓度异常升高区域重合，可能指示平流层空气的侵入。对于平原地区，以 100-500 hPa 各气压层 CO 浓度 $\leq$ 110ppb、RH $\leq$ 35% 作为参考阈值；对于高海拔地区（海拔 $\geq$ 2500 米），以 100-300 hPa 各气压层 CO 浓度 $\leq$ 110ppb、RH $\leq$ 35% 作为参考阈值。

### 6.2.3 近地面臭氧浓度阈值

以近地面臭氧浓度 $\geq$ 150 $\mu$ g/m<sup>3</sup> 作为平流层臭氧侵入的近地面判定阈值（参考《环境空气质量标准》（GB 3095-2012）中臭氧 8 小时平均二级标准限值（160 $\mu$ g/m<sup>3</sup>），取略低阈值以提高预警敏感性）。

### 6.2.4 后向轨迹分析辅助判定

开展后向轨迹分析（如采用 HYSPLIT 模型）以辅助验证平流层臭氧侵入。以反演识别的臭氧廓线异常高值区为核心，设定轨迹起始高度（参考平流层—对流层边界，通常约为 200hPa），轨迹时长 $\geq$ 72h，可直观地确定气团在水平、垂直方向上的平流和扩散过程，识别气团移动轨迹。若模拟结果显示源于自由对流层的下沉气团最终降至近地面，可进一步佐证平流层空气下沉传输过程，辅助排除对流层本地高臭氧污染导致的假阳性判定，提升识别准确性。

## 6.3 天空地一体化综合判定

将基于位涡分析的识别结果与基于垂直廓线和近地面臭氧浓度特征的识别结果进行综合。通过多源数据的相互印证和补充，提高平流层臭氧侵入判定的准确性和可靠性。

## 7. 质量控制

## 7.1 数据质量控制

在整个数据处理和反演过程中，持续进行数据质量控制。在进行卫星遥感数据预处理前，避免有噪声条带的数据参与后续处理，同时，要保证相应的几何定位数据质量，确保地理位置的几何配准精度在一个像元之内。

对卫星遥感反演数据、地面观测数据和再分析数据，定期检查数据的完整性、准确性和一致性。对于异常数据，及时进行标识和处理，如剔除、修复或补充。建立数据质量监控日志，记录数据质量问题及处理措施。

## 7.2 反演结果质量评估

### 7.2.1 与独立观测数据对比

利用独立的观测数据（如其他卫星观测、地面加密观测等）对反演得到的臭氧、CO、H<sub>2</sub>O 垂直廓线和近地面臭氧浓度进行验证。计算对比数据之间的误差指标，如平均绝对误差（MAE）、均方根误差（RMSE）、平均绝对百分误差（MAPE）等，评估反演结果的准确性。

### 7.2.2 不确定性分析

对反演结果进行不确定性分析，评估反演过程中由于数据误差、模型不确定性等因素导致的结果不确定性。统计反演结果的离散程度，确定反演结果的置信区间。在平流层臭氧侵入判定中，考虑反演结果的不确定性对判定准确性的影响，确保判定结果的可靠性。

## 7.3 判定识别结果验证

对平流层臭氧侵入判定识别结果进行验证。通过与历史事件记录、其他模式模拟研究成果对比，以及实地观测验证（如有），评估判定识别方法的准确性和可靠性。对于误判和漏判的情况，分析原因，改进判定识别算法和流程，不断提高平流层臭氧侵入天空地一体化定量判定识别技术的性能。