

《平流层臭氧侵入技术指南》（试行）
（征求意见稿）编制说明

《平流层臭氧侵入技术指南（试行）
（征求意见稿）》编制组
二〇二五年十月

一、项目背景

（一）任务来源

随着大气环境问题日益受到关注，近地面臭氧污染已成为影响空气质量和公众健康的重要因素。平流层臭氧侵入作为近地面臭氧浓度异常升高的关键诱因之一，其精准识别对臭氧污染防治具有重要意义。

当前，传统平流层臭氧侵入监测依赖地面站点观测，存在覆盖范围有限、时空分辨率低等问题；近地面臭氧浓度估算也多采用数值模拟方法，受初始场和参数化方案影响较大，精度难以满足精细化管理需求。机器学习技术凭借强大的数据拟合与非线性映射能力，为近地面臭氧浓度反演提供了新路径；卫星遥感技术则可实现大范围、高时空分辨率的大气臭氧垂直分布观测，为平流层臭氧侵入识别提供了数据支撑。

然而，目前国内尚无针对平流层臭氧侵入监测的统一技术规范，侵入识别的技术流程、参数选择、质量控制等环节缺乏标准指引，导致监测数据可比性差、成果应用受限。为填补这一空白，规范技术方法，提升平流层臭氧侵入监测与评估的科学性、准确性，特制定本团体标准。

本标准由生态环境部卫星环境应用中心提出，经上海市环境保护产业协会批准立项，立项编号为 ，项目名称为“平流层臭氧侵入识别技术指南”。

（二）工作过程

为支撑本技术指南编制，前期起草团队系统开展了基础调研与实地监测工作：一方面总结了国内不同省市平原地区（如华北、长三角区域）及高原地区（西藏自治区、青海省部分地市）的历史平流层臭氧侵入事件，梳理不同地形条件下入侵事件的特征规律；另一方面于2023年5月21日至31日赴西藏阿里地区开展臭氧污染专项调研，期间采用臭氧激光雷达、无人机、苏玛罐、小微站等多种监测设备，对该高海拔地区的臭氧污染状况及潜在平流层侵入信号进行了初步监测，为标准中地形适配性参数设定提供了实测数据支撑。

标准立项流程方面，起草团队于2024年10月向上海市环境保护产业协会提出本标准的制定申请，同年10月31日协会组织召开立项专家评审会，经专家论证通过后，上海市环境保护产业协会正式批准本标准立项。目前标准处于技术指南文稿撰写阶段，撰写工作周期为2024年11月至2025年9月。

二、标准制订的必要性分析

（一）响应国家臭氧污染防治政策，支撑环境管理决策的必然选择

《中华人民共和国大气污染防治法》明确要求“加强对臭氧等二次污染物的监测、预警和防控”；《“十四五”大气环境质量改善规划》提出“深化臭氧污染成因与来源解析，提升精准防控水平”。平流层臭氧侵入作为近地面臭氧异常升高的重要来源（部分区域春季侵入贡献占比可达30%以上），其识别与量化是臭氧污染溯源的关键环节。目前，各级生态环境部门在制定防控政策时，因缺乏统一的侵入监测技术方法，难以精准识别平流层臭氧侵入事件，导致防控措施针对性不足。本标准的制定可为管理部门提供标准化的监测工具，助力精准识别臭氧污染来源，支撑差异化防控政策制定。

（二）解决传统监测技术局限性，满足精细化监测需求的迫切要求

传统平流层臭氧侵入监测以地面站点观测、探空观测和模式模拟法为主，存在显著技术局限：地面站点仅能获取单点近地面臭氧浓度，难以反映区域尺度侵入的空间分布特征；探空观测成本高、频次低（多数站点每日仅 1-2 次），无法捕捉短时、突发性侵入事件。模式模拟方法虽可辅助还原入侵传输过程，但对观测数据依赖高，需大量同化数据支撑且参数设置差异大，难以作为大范围、快速识别的核心手段。同时，近地面臭氧浓度反演技术缺乏统一规范，不同研究机构采用的机器学习算法、特征变量选择差异显著，无法为跨区域污染联防联控提供一致数据支撑。本标准通过明确技术流程与参数阈值，可有效解决上述问题，满足精细化监测需求。

（三）规范行业技术应用，提升数据可比性的关键举措

当前国内平流层臭氧侵入监测领域存在“技术碎片化”问题：科研机构多基于自有数据和算法开展研究，识别方法涵盖阈值法、轨迹分析法、模式模拟法等，但各方法的参数设定（如臭氧浓度阈值、轨迹时长）无统一标准。此外，机器学习反演模型的验证指标不统一，数据质量难以评估。本标准通过规范数据选择、方法流程、质量控制与验证要求，可有效提升不同机构、不同区域监测数据的可比性，推动行业技术应用从“碎片化”向“标准化”转变。

（四）填补国内技术空白，对接国际先进方法的重要途径

国际上已形成较为成熟的平流层臭氧侵入监测技术体系。美国国家环境环保局（EPA）已经将平流层臭氧侵入定义为“例外事件”（Stratospheric Ozone Intrusion Exceptional Events, SOIEE），并于 2018 年发布了《平流层臭氧入侵异常事件演示准备指南》（以下简称《指南》）。在平流层臭氧侵入对流层的识别方法方面，《指南》中主要通过平流层臭氧标志物来识别，例如，低 CO、低 RH、高 IPV、高 PT。而国内尚未有针对该领域的国家标准或行业标准。本标准借鉴国际先进经验，结合国内大气环境特点优化技术参数，可填补国内技术空白，推动我国平流层臭氧监测技术与国际接轨。

三、国内外相关分析方法

（一）国外相关分析方法

国外依托多种监测手段和模式方法，已针对“平流层臭氧侵入例外事件”形成了一套完整的判定指标体系及规范的业务化流程。在识别技术方面，美国采用“侵入自由对流层—传输至近地面—影响量化”的三级逻辑展开，且根据事件受人为污染影响程度将 SOIEE 分为两类，判定要求各有侧重。其中，类型 I 事件发生时近地面臭氧受人为排放影响较小，光化学反应有利或不利条件下均可能出现，判定时仅需从每类指标中选取 1 项或 1-2 项作为依据；类型 II 事件多发生在光化学反应有利季节，需重点区分平流层侵入与人为源排放的叠加影响，判定时要求所有指标均需达标，且需增加多模型配置的轨迹模拟等更严谨的验证手段。具体来看，在侵入自由对流层识别环节，主要依托卫星和地面观测获取水汽分布、臭氧柱总量、CO 柱总量等数据，结合等熵位涡、位温、对流层顶高度等气象参数，捕捉平流层空气“高臭氧、低水汽、低 CO、高位涡”的典型特征；在传输至近地面识别环节，通过无线测风仪分析温度—露点垂直分布以判断干燥空气高度，利用探空气球、激光雷达获取臭氧垂直廓线，同时结合 HYSPLIT 后向轨迹模拟气团传输路径，部分案例还会采用 GEOS-Chem 等模式模拟高空与地面臭氧浓度的关联；在影响量化环节，优先采用 RAQMS、WACCM 等空气质量模型，通过平流层臭氧示踪剂（O₃S）追踪传输过程——O₃S 在平

流层时与臭氧浓度一致，进入对流层后仅受动力传输影响，据此评估侵入对近地面臭氧的贡献，同时认可多模式集合分析以降低单一模型误差，且不强制统一量化工具，仅要求明确侵入与臭氧超标间的因果关系。

业务化运行上，美国有标准化 SOIEE 流程：地方初判臭氧超标可能为 SOIEE 后申请并标识数据，EPA 60 天内定性判型，地方提交材料后经 EPA 120 天初审、30 天公众征询，EPA 12 个月内终审，通过则全量剔除数据，EPA 还提供在线工具与平台提升效率。实践应用中，美国 SOIEE 案例多在西部高海拔区，地方仅在事件期臭氧浓度居年度前四位时积极申请，类型 II 事件因判定复杂正式扣除案例少，已有研究验证了低海拔人为源影响区的识别可行性。

（二）国内相关分析方法

国内在平流层臭氧侵入识别领域已形成多技术融合的研究体系，卫星遥感技术应用较为广泛，生态环境部卫星环境应用中心等机构利用热红外和紫外高光谱卫星，获取臭氧浓度、相对湿度等垂直廓线数据，结合位涡剖面分析构建识别判据，在辽宁、河北、浙江等区域的案例研究中验证了卫星遥感对入侵事件的监测有效性。

识别方法以多技术协同为核心，阈值法通过组合臭氧浓度、湿度等参数构建判据，利用不同气象条件下平流层空气“高位涡、低湿度”的特征实现初步识别；轨迹分析法普遍采用 HYSPLIT 模型，通过追踪空气质点后向轨迹及起源高度判断入侵来源，在乌鲁木齐、太原等区域的臭氧污染溯源中得到应用，可有效区分本地排放与外来传输贡献；中科院团队通过观测与模拟结合，发现东北冷涡影响下华北地区对流层出现异常臭氧垂直结构，量化得出平流层入侵对中层臭氧浓度的短期增幅显著，另有研究通过拉格朗日模拟等方法，评估得出平流层入侵对华北、华东近地面臭氧的贡献率均超过 15%。

模式模拟方面，国内多采用 WRF-Chem、NAQPMS、WACCM 等模型开展区域尺度研究，重点用于入侵过程还原与贡献量化，但尚未形成统一的参数设置规范，不同研究的技术方案差异较大。近地面臭氧浓度反演则以机器学习算法为主，通过整合卫星、再分析与地面监测数据提升反演精度，为入侵事件的地面响应分析提供支撑。

现有研究仍存在明显缺口：卫星遥感与位涡数据的协同识别流程缺乏标准化，不同机构的技术方法差异导致结果可比性不足；阈值参数的地形适配性研究有待深化，高海拔与平原地区的统一判据易产生误判。

四、标准编制原则

1. **科学性原则**：严格遵循大气物理规律与数据反演原理，以“天空地一体化”为核心技术框架，整合卫星遥感（空间覆盖）、地面观测（高精度验证）、再分析数据（动力支撑），确保最优估计法反演臭氧垂直廓线、分地形位涡阈值设定等技术环节的科学性；同时结合机器学习算法的泛化能力与解释性，平衡模型精度与物理意义，避免纯数据驱动的偏差。

2. **实用性原则**：充分适配国内监测机构技术条件与数据可得性，如卫星数据优先选择公开可获取的 AIRS、OMI、TROPOMI、ERA5 及国产 GF-5、DQ-1 及风云卫星产品，地面数据兼容国家环境空气质量自动监测网数据格式；针对平原与高海拔地区（ ≥ 2500 米）的大气边界层差异，分别设定位涡、臭氧浓度等阈值，确保技术方法在不同地形区域均能落地应用；操作流程细化至数据格式转换、模型参数，降低应用门槛。

3. **协调性原则**：紧密衔接《环境空气质量标准》（GB 3095-2012）中臭氧 8 小时平均二级标准（ $160\mu\text{g}/\text{m}^3$ ），将近地面臭氧侵入判定阈值设定为 $150\mu\text{g}/\text{m}^3$ （略低阈值以提升预警敏感性）；与现行《卫星遥感细颗粒物（PM_{2.5}）监测技术指南》（HJ 1264—2022）的通用预处理流程保持一致，该指南明确要求卫星数据需完成辐射校正、几何校正、云剔除等基础处理步

骤，本标准在此基础上补充臭氧廓线反演的专项技术要求，形成“通用基础+专项深化”的协调体系。

4. **前瞻性原则：**预留技术拓展空间，如在臭氧垂直廓线反演中提及国产卫星数据（如风云卫星 GHIRS）的适配性，在机器学习模型中纳入卷积神经网络（CNN）处理空间特征的潜力；识别方法中保留轨迹分析法与机器学习辅助识别的兼容接口，可随未来高分辨率卫星（如 Sentinel-5P 后续卫星）数据应用进一步优化阈值参数。

五、标准主要内容及确定依据

（一）标准主要内容

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（SO₂、NO₂、O₃、CO）连续自动监测系统运行和质控技术规范

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（ $1\text{PVU} = 10^{-6}\text{m}^2\cdot\text{K}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{kg}^{-1}$ ）。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、H₂O）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、H₂O 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、GHIRS 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

1. 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。
2. 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。
3. 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）识别并剔除非云污染像元，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：

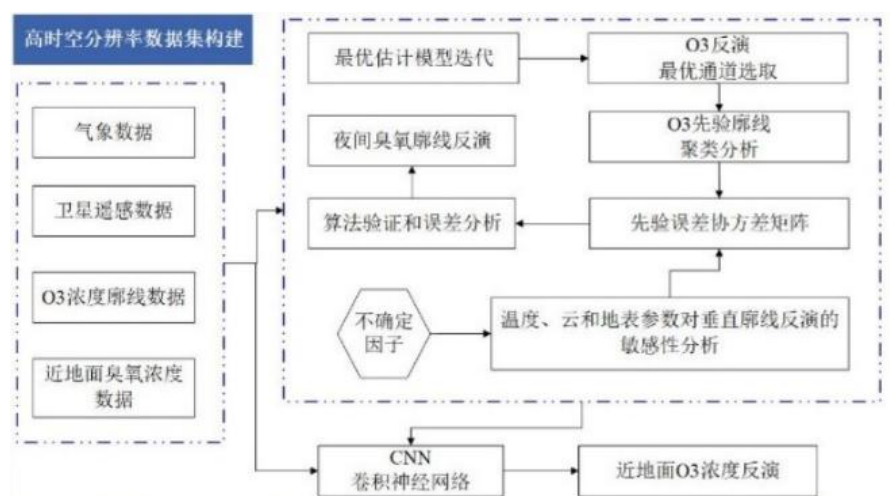


图 1 卫星遥感反演臭氧廓线和近地面臭氧浓度技术流程图

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：

4. 再分析数据：NCEP 再分析数据集的臭氧混合比（O₃MR）、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°×0.25°；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。

5. 地面监测数据：地面空气质量监测站点的小时级 O₃和 NO₂浓度数据。

6. 卫星数据：Sentinel-5P 卫星搭载的对流层监测仪（TROPOMI）或国产卫星（GF-5、DQ-1 等）搭载的大气痕量气体差分吸收光谱仪（EMI）反演的对流层 NO₂和甲醛（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 基于位涡分析的认识

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 基于垂直廓线和近地面臭氧浓度特征的识别

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 H₂O 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 H₂O 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 μ g/m³ 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 μ g/m³），取略低阈值以提高预警敏感性）。

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、H₂O 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。

（二）标准主要确定依据

本标准核心内容对应指南第 5 章“臭氧垂直廓线与近地面臭氧浓度反演”、第 6 章“平流层臭氧侵入识别方法”，结合指南第 4 章“数据来源与预处理”的技术支撑要求，具体内容及确定依据如下：

1. 臭氧垂直廓线与近地面臭氧浓度反演

（1）最优估计法反演臭氧垂直廓线

- **辐射传输模型选择：**明确采用 SCIATRAN、VLIDORT 模型，用于模拟大气辐射传输过程（气体吸收、散射）。

确定依据：指南 5.1.1 规定“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”，SCIATRAN 支持紫外 - 红外多波段模拟，适配 TROPOMI（紫外 / 可见）、AIRS（红外）等多类型卫星传感器；VLIDORT 在气溶胶散射校正方面精度优势显著，可减少云残留、气溶胶对臭氧廓线反演的干扰，两者均为国际大气遥感领域主流模型，国内多家科研机构（如中科院空天院）已形成成熟应用案例。

- **先验信息确定：**采用聚类分析方法，基于 ERA5 气象再分析资料与臭氧探空数据生成区域化先验廓线；先验误差协方差矩阵按高度层设定（平流层区域误差系数低于对流层，因平流层臭氧分布更稳定）。

确定依据：指南 5.1.2 要求“基于历史观测数据生成区域化先验廓线”，ERA5 数据时空分辨率（ $0.25^{\circ}\times 0.25^{\circ}$ 、小时级）可满足区域尺度先验信息构建需求，结合地面探空数据（如 WOUDC 探空网）可修正再分析数据的系统偏差；聚类分析可区分不同气候区（如华北温带、华南亚热带）的臭氧垂直分布特征，避免采用统一先验廓线导致的反演偏差。

- **反演迭代过程：**以卫星观测辐射值为输入，构建代价函数（模拟与观测辐射值的残差平方和），通过迭代调整臭氧垂直廓线，直至代价函数收敛（收敛阈值设为残差变化 $< 1\%$ ）；迭代中引入权重函数，强化对流层中上部（平流层 - 对流层交换关键区域）的反演敏感性。

确定依据：指南 5.1.3 规定“通过迭代计算逼近真实垂直廓线”，权重函数的引入可解决传统最优估计法对平流层 - 对流层边界反演敏感性不足的问题——该区域是臭氧侵入的核心传输层，强化其敏感性可提升后续侵入识别的准确性。

（2）机器学习反演近地面臭氧浓度

- **特征变量筛选：**按指南 5.2.1 要求，明确特征变量分为三类：

- a. 再分析数据：NCEP 的臭氧混合比（ O_3MR ）、总臭氧（ $TOZONE$ ）、四层抬升指数（ $4LFTX$ ，反映大气稳定性），ERA5 的 2m 温度（影响臭氧生成速率）、地面气压（影响污染物垂直扩散）；

- b. 地面监测数据：小时级 O_3 、 NO_2 浓度（ NO_2 是臭氧前体物，反映本地生成贡献）；

- c. 卫星数据：TROPOMI 的对流层 NO_2 、HCHO 柱浓度（HCHO 反映 VOCs 水平，VOCs 与 NO_x 共同影响臭氧生成），SRTM 的 DEM 数据（影响地形抬升气流），MODIS 的 NDVI/EVI（反映植被吸收 NO_x 能力）、土地覆盖数据（如城市用地占比反映人为排放强度）。

确定依据：上述变量均经敏感性分析验证—— O_3MR 、 $TOZONE$ 直接关联臭氧背景浓度， $4LFTX$ 通过影响垂直扩散间接影响近地面浓度； NO_2 、HCHO 分别代表 NO_x 、VOCs 前体物水平，是区分“本地生成”与“外部侵入”的关键；DEM、土地覆盖数据可量化地形与下垫面对气象条件的调制作用。

- **机器学习模型构建：**推荐决策树集成（如随机森林、XGBoost）、卷积神经网络（CNN），其中决策树集成常用于常规区域反演，CNN 常用于复杂下垫面（如城乡交错带）反演（可捕捉空间异质性）。

确定依据：指南 5.2.2 提及“决策树集成、卷积神经网络”，决策树集成对非线性关系拟合能力强，且可解释性优于深度学习（便于追溯反演偏差来源）；CNN 擅长处理空间关联特征，适用于城乡交错带（土地覆盖类型复杂，臭氧浓度空间变异大）。

2. 平流层臭氧侵入识别方法

（1）基于位涡分析识别

- **位涡计算与分析：**采用 ERA5 位涡再分析数据，计算潜在温度 320K 层面（平流层—对流层边界典型高度）的位涡分布；通过追踪位涡高值区移动轨迹，判断是否存在向下延伸至对流的特征（即平流层空气下沉），且需与臭氧垂直廓线高值区时空匹配。

确定依据：位涡是保守物理量，平流层空气位涡显著高于对流层，其向下延伸是臭氧侵入的动力标志；潜在温度 320K 层面接近中纬度地区对流层顶高度，是位涡变化最显著的层位；时空匹配要求可排除“位涡高值但无臭氧传输”的假阳性情况。

- **分地形位涡阈值：**按指南 6.1.2 规定，平原地区（海拔 <2500 米）阈值为“1PVU 下探至 700hPa”，高海拔地区（海拔 ≥2500 米）阈值为“2PVU 下探至 200hPa 以下”。

确定依据：参考国内典型侵入事件，平原地区识别阈值基于辽宁省朝阳市、河北省石家庄市和浙江省杭州市历史平流层臭氧侵入事件综合分析得到判识，高海拔地区识别阈值基于西藏自治区和青海省部分高原地市历史平流层臭氧侵入事件综合分析，结合在阿里地区开展的臭氧污染专项监测实验得到；经文献调研，同纬度高原地区对流层顶高度高于平原地区，青藏高原等高海拔地区对流层顶高度较高，通常以 2PVU 作为动力对流层顶（约 14-16km，对应 200hPa 左右），故提高位涡阈值（2PVU）并降低下探气压层（200hPa 以下）。

（2）基于垂直廓线与近地面浓度特征的识别

- **臭氧垂直廓线阈值：**分地形设定：平原地区 100-500hPa 各气压层臭氧浓度 ≥75ppb，高海拔地区 100-300hPa 各气压层 ≥75ppb。
- **CO 与 RH 廓线协同验证：**按指南 6.2.2 要求，平原地区 100-500hPa、高海拔地区 100-300hPa 需满足：CO 浓度 ≤110ppb、RH ≤35%。
- **近地面臭氧浓度阈值：**设定近地面臭氧浓度 ≥150 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ （小时级），参考 GB 3095-2012 中臭氧 8 小时平均二级标准（160 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ），取略低阈值以提高预警敏感性。

确定依据：同位涡分析类似，参考国内典型侵入事件，平原地区识别阈值基于辽宁省朝阳市、河北省石家庄市和浙江省杭州市历史平流层臭氧侵入事件综合分析得到判识，高海拔地区识别阈值基于西藏自治区和青海省部分高原地市历史平流层臭氧侵入事件综合分析得到。高海拔地区对流层顶高度较高，臭氧侵入主要集中在 100-300hPa，且地表气压较低，故限定该气压层；平原地区侵入传输路径更长，需覆盖 100-500hPa。平流层空气因无地面排放源，CO 浓度显著低于对流层（对流层通常 > 120ppb），且因水汽凝结少，RH 显著低于对流层（对流层通常 > 40%）；设定 CO ≤110ppb、RH ≤35% 可有效排除“对流层高臭氧污染”（如本地光化学反应生成，伴随高 CO、高 RH）的干扰。臭氧侵入会导致近地面浓度短期突升，150 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 阈值既接近国家标准（避免过度预警），又能提前捕捉超标风险（较 160 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 阈值可提前 4-6h 预警）。

（3）天空地一体化综合判定（指南 6.4）

- **判定逻辑：**采用“三级递进验证”：一级验证（动力条件）：满足位涡阈值；二级验证（成分特征）：满足臭氧 + CO + RH 廓线阈值；三级验证（地面响应）：满足近地面浓度阈值 + 时间关联；三级均满足则判定为侵入事件，结合后向轨迹分析（如 HYSPLIT）辅助判定。

确定依据：该逻辑体现“天空地一体化”——位涡反映“天”（大气动力），廓线反映“空”（卫星观测），地面浓度反映“地”（地面响应），三者协同可避免单一数据的局限性；后向轨迹分析作为补充，可解决高海拔地区位涡阈值易受地形干扰的问题。

（4）识别结果应用

规定识别结果用于三类场景：①侵入事件时空图谱绘制（如月度 / 季度侵入频次、影响范围）；②侵入强度分级（接近地面浓度增幅分为轻度：15%-25%、中度：25%-35%、重

度：>35%）；③侵入贡献量化（公式：贡献占比 = （侵入期间近地面浓度 - 非侵入期间背景浓度）/ 侵入期间近地面浓度 × 100%），其中背景浓度采用同期非侵入日的浓度均值。

确定依据：时空图谱可支撑区域防控政策制定（如侵入高发区需加强气象预警）；强度分级可匹配不同应急响应等级（如重度侵入需启动区域联防）；贡献量化公式可区分“侵入贡献”与“本地生成贡献”，为精准减排提供依据。

六、与现行相关法律、法规、标准的关系

本标准符合《中华人民共和国大气污染防治法》《“十四五”大气环境质量改善规划》等法律法规与政策文件中关于臭氧污染防治、环境监测技术规范的要求，无抵触内容。

与现行标准的协调关系如下：

1. 与《环境空气质量标准》（GB 3095-2012）：本标准规定的近地面臭氧浓度反演精度（如日尺度 $RMSE \leq 20 \mu g/m^3$ ），可确保反演结果满足该标准中臭氧浓度评价的技术需求，为标准实施提供数据支撑。

2. 与《环境空气质量监测技术规范》（HJ 664-2013）：该规范主要规定地面站点监测方法，本标准补充了卫星遥感与机器学习的技术手段，形成“地面 + 卫星 + 模型”的立体化监测体系，二者相辅相成。

本标准不替代现行国家标准、行业标准，而是在其基础上，针对平流层臭氧侵入监测的特殊需求，提供更具体、更具操作性的技术指引，完善大气环境监测技术标准体系。

七、专利涉及情况

本标准未涉及任何专利技术与知识产权问题。标准中推荐的机器学习算法（如 RF、XGBoost、SVM）、卫星数据（如 OMI/MLS/ERA5 数据）、识别方法（如位涡阈值法、多廓线协同法）均为公开通用技术或免费获取资源（如 AIRS 数据通过 NASA 官网免费获取，ERA5 数据通过 ECMWF 官网免费获取），无专利授权或使用限制，可确保标准的广泛推广与应用。

八、预期效果

1. 环境管理层面：为各级生态环境部门提供标准化的平流层臭氧侵入监测工具，助力臭氧污染来源解析，支撑差异化防控政策制定，提升臭氧污染防治效率。

2. 技术支撑层面：规范平流层臭氧侵入识别的技术流程，统一数据选择、参数阈值、质量控制与验证要求，提升不同机构的监测数据可比性，避免“数据打架”问题，为跨区域污染联防联控提供一致的数据基础。

3. 行业发展层面：引导科研机构、监测企业聚焦技术创新（如高分辨率卫星数据（高分五号）与位涡阈值法的结合、深度学习模型在侵入识别中的应用），推动大气环境监测技术从“单一参数”向“多参数协同”、从“经验驱动”向“数据 - 物理联合驱动”升级，促进行业技术专业化、规范化发展。

4. 公众健康层面：通过精准识别平流层臭氧侵入的时空范围与强度，可为公众健康风险评估提供数据支持，助力提升空气质量预警与健康防护能力。

九、其他需要说明的事项

无特殊需要说明的事项。