

目次

“大气十条”实施期间南京市PM_{2.5}化学组成与来源的演变特征 陈培林, 郭蓉, 王勤耕 (1)

河南省北部区域霾污染过程中城市和农村点位PM_{2.5}组分差异 王申博, 王玲玲, 范相阁, 王楠, 马双良, 张瑞芹 (11)

廊坊市秋冬季大气细颗粒物污染特征及来源解析 朱淑贞, 佟洁, 鲍丰, 孙浩 (20)

天津市采暖季不同气团来向PM_{2.5}中重金属污染特征及健康风险评价 李立伟, 邓小文, 肖致美, 元洁, 杨宁, 郭小龙, 白宇 (30)

基于多属性决策方法的太原市冬季街道尘土中潜在有害元素关键来源解析 邓文博, 刘文娟 (38)

北京市PM_{2.5}-O₃复合污染数值响应解析 刘添强 (48)

长三角区域人为源挥发性有机物高分辨率排放清单 田俊杰, 丁祥, 安静宇, 李旻, 王鑫, 黄成 (58)

南京北郊工业乡村混合区秋季边界层VOCs垂直分布特征 王泰, 朱彬, 施双双, 安俊琳, 唐贵谦, 徐家平 (66)

广西柳城县VOCs组分特征、来源及其对臭氧生成的敏感性 吴影, 莫招育, 吴琴琴, 陆嘉晖, 毛敬英, 陈雪梅, 粟少丽, 覃纹, 刘慧琳, 韦敏 (75)

城市臭氧污染特征与高影响气象因子:以苏州为例 何琰, 林惠娟, 曹舒娅, 宋璟璐, 孙伟, 熊宇 (85)

华北平原周县人为源氨排放清单及分布特征 康嘉慧, 孟凡磊, 刘学军, 许稳 (94)

WRF模式最优参数化方案在不同空气质量模式的应用 杨景朝, 蒋兴文, 伯鑫, 王刚, 冯勇 (104)

西安市春季生物气溶胶的分布特征和健康影响 魏军强, 杨柳, 沈振兴, 王秀茹 (118)

青岛近海不同天气下生物气溶胶中细菌浓度及存活率分布特征 魏文淑, 祁建华, 常成 (127)

中国沉积物多环芳烃的时空分布及驱动因子 黄柱良, 蔡家伟, 王儒威 (138)

长江口近岸地区抗生素抗性基因与微生物群落分布特征 徐秋鸿, 刘曙光, 娄厦, Larisa Dorzhieva Radnaeva, Elena Nikitina, Makhinov Aleksei Nikolavich, Araruna José Tavares, 金宇辰, 李鑫 (158)

人类活动影响下的高原湿地四环素类抗生素抗性基因赋存与微生物群落共线性 秦荣, 喻庆国, 刘振亚, 王行 (169)

我国东南地区饮用水源地多种农药的赋存特征及健康风险评估 何姝, 董慧峰, 任南琪 (180)

珠海市中部主要供水水库沉积物重金属时空分布与风险评价 王思瑞, 张坤锋, 昌盛, 张茉莉, 付青 (189)

苏州水网地区河道底泥的重金属分布特征与污染风险 郑敏慧, 白冬锐, 张涛, 陈坦, 王洪涛, 杨婷, 张冰, 金军 (198)

长三角典型城郊流域生物可降解性有机质的分布及影响因素 吴文雨, 马菁晨, 杨磊, 李敏, 唐剑锋 (210)

过水性湖泊水质长期演变趋势及驱动因素:以骆马湖为例 黄雪滢, 高鸣远, 王金东, 王明明, 陈思恩, 龚志军, 王腊春, 蔡永久 (219)

渭河微塑料污染现状与风险评价 山泽萱, 张妍, 张成前, 时鹏, 张鑫 (231)

不同颜色聚碳酸酯塑料对附着藻类生长和群落结构的影响 王梦雪, 尹思成, 王振方, 陈锦贤, 张玮, 王丽卿 (243)

苦草叶表附和浮游细菌群落多样性格局及其影响因素 张梅婷, 刘晋仙, 苏嘉贺, 柴宝峰 (252)

基于16S rRNA测序技术的青藏高原河流细菌群落多样性 璩伟卿, 张博美, 黄雪, 任泽, 高红凯 (262)

基于eDNA的硅藻群落时空异质性及生态健康评价 姜山, 张颜, 李飞龙, 张效伟 (272)

三峡库区澎溪河河段间水华程度差异及其机制 罗晓佼, 张妍, 黄伟, 胡鹏飞, 谭炳圆, 张磊 (282)

自然降雨下蔬菜土壤侵蚀及氮素流失特征 宁嘉丽, 黄艳芬, 李桂芳, 陈钊柱, 王坚桦 (293)

绿色、蓝色和蓝-绿屋顶径流水质特征 章孙逊, 张守红, 闫婧, 王恺, 杨航, 王任重, 张文龙, 李华林 (303)

基于地理探测器的山西省2000~2020年NPP时空变化特征及驱动力分析 邵嘉豪, 李晶, 闫星光, 马天跃, 张瑞 (312)

2000~2020年西南地区植被NDVI时空变化及驱动机制探究 徐勇, 戴强玉, 黄雯婷, 盘钰春, 郑志威, 郭振东 (323)

青海湖周边地区表层土壤重金属含量和抗性基因丰度及相关性 胡石磊, 瞿剑里, 章丽, 赵美蓉 (336)

四川盆地典型农耕地土壤重金属含量、污染及其影响因素 刘属灵, 吴梅, 刘志远, 刘双燕, 刘永林, 赵家宇, 刘怡 (347)

宁夏引黄灌区农田土壤重金属生态风险评价及来源解析 陈林, 马琨, 马建军, 王金保, 李虹, 贾彪, 倪细炉, 马进福, 梁翔宇 (356)

铜冶炼场周边土壤重金属污染特征与风险评价 彭驰, 刘旭, 周子若, 姜智超, 郭朝晖, 肖细元 (367)

西南地区典型土壤酸化特征及其与重金属形态活性的耦合关系 凌云, 刘汉燧, 张小婷, 魏世强 (376)

外源Cd在不同类型土壤中的稳定化特征 王港, 余海英, 黄化刚, 张路, 左洪菊 (387)

基于有效硒的富硒土壤阈值及有效硒的影响因素 王莹, 马彦斌, 王泽晶 (395)

基于成土母质分区的土壤-作物系统重金属累积特征与健康风险评价 陈子万, 许晶, 侯召雷, 彭敏, 杨帆, 陈杰, 徐永强, 杨树云, 李家云, 于林松 (405)

贵州省旱地土壤和玉米As含量特征及其种植安全性评估 黄凤艳, 周浪, 宋波, 虎瑞, 吴勇, 王佛鹏, 张云霞 (415)

象草与苦楝/构树间作修复矿区重金属污染土壤潜力 王小慧, 肖细元, 郭朝晖, 彭驰, 王小燕 (426)

1株高耐性肠杆菌的筛选及对镉、砷同步钝化 尹雪斐, 刘玉玲, 伍德, 黄蔚铭, 张朴心, 铁柏清 (436)

黄土陵区人工刺槐林土壤有机碳矿化特征及其与有机碳组分的关系 朱玉帆, 刘伟超, 李佳欣, 苏玉博, 简俊楠, 杨改河, 任成杰, 冯永忠, 任广鑫, 王晓娇, 韩新辉 (444)

设施农业土壤磷素累积迁移转化及影响因素 方兵, 陈林, 王阳, 祝亚飞, 王瑞, 宋桂芳, 刘俊, 杨斌, 张世文 (452)

优化秸秆管理提高玉米农田碳氮效率与经济效益 王良, 钱欣, 高英波, 张慧, 刘开昌, 陈国庆, 李宗新 (463)

缓控释肥深施对黏性土壤麦田氮素去向的影响 侯朋福, 薛利祥, 袁文胜, 曹帅, 刘颖多, 薛利红, 杨林章 (473)

黄河下游冲积平原轮作休耕农田土壤真菌群落结构与功能 南镇武, 刘柱, 孟维伟, 代红翠, 徐杰, 王娜, 刘灵艳, 王旭清, 刘开昌 (482)

红壤区退化林地表土真菌群落结构对土壤改良措施的响应 管鸿智, 黄荣珍, 王金平, 朱丽琴, 邹显花, 姬绍晖, 林丽靖, 房焕英, 杨梦佳, 廖迎春 (494)

半干旱-亚湿润干旱沙区樟子松根内真菌群落结构和功能时空动态特征 赵珮杉, 郭米山, 高广磊, 丁国栋, 张英, 任悦 (502)

基于QMEC分析的青藏高原不同类型冰川前缘地土壤微生物功能潜力 张洁洁, Anders Priemé, 陈显轲, 周汉昌, 张沁唯, 庄绪亮, 秦翔, 庄国强, 马安周 (512)

中国主粮作物生物炭产量效应的Meta分析 于滨杭, 姬建梅, 王丽学, 刘静, 高欢, 刘丹 (520)

生物炭影响抗生素在土壤中环境行为的Meta分析 李经涵, 张建强, 夏丽琼, 郑世界, 杨红薇, 何杨 (531)

不同农作物秸秆原料制备生物炭特性及重金属浸出行为 李家康, 邱春生, 赵佳奇, 王晨晨, 刘楠楠, 王栋, 王少坡, 孙力平 (540)

中国县城碳排放时空演变与异质性 宋苑震, 曾坚, 王森, 梁晨 (549)

近20年重庆市主城区碳排放的时空动态演进及其重心迁移 向书江, 杨春梅, 谢雨琦, 王丹, 王子芳, 高明 (560)

中国1991~2018年突发环境事件时空特征及影响因素 余光辉, 王非凡, 刘贤赵, 李文慧, 向云波 (572)

季铵盐抗菌剂在环境中的迁移转化行为及其毒性效应 张利兰, 覃存立, 钱瑶, 易美玲 (583)

《环境科学》征订启事(29) 《环境科学》征稿简则(57) 信息(443, 481, 530)

城市臭氧污染特征与高影响气象因子:以苏州为例

何琰¹, 林惠娟^{1*}, 曹舒娅¹, 宋璟璐², 孙伟¹, 熊宇³

(1. 江苏省苏州市气象局, 苏州 215131; 2. 西安利物浦大学设计学院城市规划与设计系, 苏州 215131; 3. 江苏省苏州环境监测中心, 苏州 215131)

摘要:近年来城市臭氧(O₃)污染问题日益突出,影响O₃污染的关键气象因子尚不明确,因此分析典型城市——苏州的O₃污染特征,探究O₃污染的高影响气象因子,对该区域大气污染防治具有重要意义。基于苏州环境监测中心2015~2020年4~9月逐小时O₃浓度数据及同期气象观测资料,应用相关分析和机器学习方法对其开展相关分析研究。结果表明:①6年间O₃污染高发季,O₃污染超标率均达20%以上,O₃污染日数和以O₃为首要污染物的污染日数占比均逐年上升,O₃污染问题日益凸显;②O₃浓度存在单峰日变化特点,谷值出现在07:00前后,峰值出现在15:00~16:00;其与气温和太阳辐射能的日内变化趋势较一致,但其浓度峰值出现时刻又滞后于二者。2017年和2019年O₃有典型的“周末效应”,周末较高的太阳辐射度对O₃浓度升高有明显的正相关作用。O₃浓度和污染超标率的月变化呈双峰型特征;③O₃污染的发生受到多种气象条件的影响,日照时数在7h以上,气温在30℃附近,太阳辐射度在350~440 kW·m⁻²之间,相对湿度在50%~75%之间,O₃污染日数达最多,且强度达最强。当偏东风风速小于1.5 m·s⁻¹时,或西南风风速小于3.5 m·s⁻¹时,易发生O₃中度污染;④运用机器学习方法构建的最优O₃浓度预测模型对4、5、7和9月O₃浓度有较好的预测能力,当O₃浓度超过200 μg·m⁻³时,预报值存在一定程度的低估和平滑,太阳辐射能对于O₃浓度的影响最为明显,相对湿度影响次之,而气温和风重要性低于前二者。

关键词:臭氧(O₃); 污染特征; 太阳辐射; 相关性分析; 机器学习; 预测模型

中图分类号: X515 文献标识码: A 文章编号: 0250-3301(2023)01-0085-09 DOI: 10.13227/j.hjlx.202202191

Characteristics of Ozone Pollution and High-impact Meteorological Factors in Urban Cities: A Case of Suzhou

HE Yan¹, LIN Hui-juan^{1*}, CAO Shu-ya¹, SONG Jing-lu², SUN Wei¹, XIONG Yu³

(1. Suzhou Meteorological Bureau of Jiangsu Province, Suzhou 215131, China; 2. Department of Urban Planning and Design, Design School, Xi'an Jiaotong-Liverpool University, Suzhou 215131, China; 3. Suzhou Environmental Monitoring Center of Jiangsu Province, Suzhou 215131, China)

Abstract: The problem of urban ozone (O₃) pollution has become prominent in recent years. However, the meteorological factors associated with O₃ pollution remain unclear. Analyzing the characteristics of O₃ pollution in Suzhou, as a typical urban city, and exploring the high-impact meteorological factors with O₃ pollution are crucial to the prevention and control of air pollution in this region. This study used correlation analysis and machine learning methods to analyze the variation in O₃ concentration and the relationship between meteorological driving factors in Suzhou based on the O₃ concentration data provided by Suzhou Environmental Monitoring Center and the contemporaneous meteorological observation data in Suzhou from April to September in 2015 to 2020. The results showed that: ① O₃ pollution exceeding the standard rate was more than 20% in ozone seasons during the past six years; further, pollution days of O₃ and the number of pollution days of O₃ as the primary pollutant increased yearly. Evidently, the problem of O₃ pollution has become increasingly prominent. ② The diurnal variations in O₃ were unimodal with the valley point at 07:00 and the highest peak between 15:00 and 16:00. Similar trends were found in diurnal variations of both air temperature and solar radiation, but the daily highest peak came earlier than that of O₃. The results also showed an apparent weekend effect of O₃ concentration in 2017 and 2019 and a significant correlation between O₃ concentration and solar irradiance during the week. In addition, the monthly variation in O₃ concentration and pollution exceeding the standard rate was bimodal. ③ The occurrence of ozone pollution was affected by various meteorological conditions. The maximum number of days appeared when daily sunshine hours lasted longer than 7 hours, with a daily maximum air temperature around 30°C, solar irradiance ranging from 350 to 440 kW·m⁻², and relative humidity ranging from 50% to 75%, at which time the intensity of pollution was the strongest. When the wind speed of easterly wind was less than 1.5 m·s⁻¹, or the wind speed of southwest wind was less than 3.5 m·s⁻¹, moderate ozone pollution occurred. ④ An optimal prediction model of O₃ concentration was established based on machine learning, which had good predictive ability for O₃ concentration in April, May, July, and September but did not perform well when O₃ concentration exceeded 200 μg·m⁻³. Meanwhile, it was found that solar radiation had the most obvious effect on O₃ concentration, followed by relative humidity, whereas the temperature and wind were less important than the former two factors.

Key words: O₃ concentration; pollution characteristics; solar radiation; correlation analysis; machine learning; prediction model

自2013年国务院颁布《大气污染防治行动计划》以来,我国大气颗粒物(PM_{2.5})污染逐步得到了有效的控制^[1],然而,大气光化学污染问题日益凸显,臭氧(O₃)污染一跃成为当今大气污染防治面临的新挑战^[2,3],也是造成我国区域大气复合污染的重要因素之一。尤其在经济发达且人口众多的城市地区,当近地面O₃超过自然水平时,会对人体健康、

生态系统和气候变化等方面产生显著的影响^[4]。

大气污染源排放是影响空气质量的决定性因

收稿日期: 2022-02-25; 修订日期: 2022-04-21

基金项目: 江苏省气象局青年基金项目(KQ202125); 苏州市科技计划项目(SS201933); 中国气象局预报员专项项目(CMAYBY2020-049)

作者简介: 何琰(1989~),女,硕士,工程师,主要研究方向为城市臭氧污染和防治, E-mail: mhymeathy@163.com

* 通信作者, E-mail: lhj_linda@163.com

素,王雪梅等^[5]研究发现广州地区近地层 O_3 的分布与地面源排放的分布有非常好的对应关系,且对流层低层 O_3 的日变化幅度较大.除此之外,局地的气象条件则是影响空气质量的关键因素,直接或间接地影响大气污染物的化学反应、传输、扩散和沉降等过程^[6,7].国内外诸多研究均表明:静稳、高温和低湿都是诱发 O_3 污染的重要气象因素^[8], O_3 易在白天有利的气象条件下形成和积累,高空残余层中的 O_3 也可在夜间随盛行风远距离输送^[9,10].Ding 等^[11]研究指出午夜到中午的离岸风将 O_3 前体物从内陆和沿海地区吹到海洋上空,下午海风则将含有 O_3 的气团吹回岸上,在 13:00 ~ 14:00 之间形成 O_3 浓度高值.Chen 等^[12]研究发现气象要素对 O_3 的影响存在季节性的差异,春秋两季,气温是我国 O_3 浓度变化的主导因子,而相对湿度主要影响南方城市的 O_3 浓度.Pu 等^[13]研究发现 2013 年长三角的极端高温热浪事件导致了该地区同时期的 O_3 浓度出现了显著的增加.刘建等^[14]研究指出珠三角地区在 20 ~ 40 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ 的 NO_2 浓度范围,高于 27℃ 的气温,低于 55% 的相对湿度以及受偏西风控制下,易发生光化学污染.Li 等^[15]对杭州城郊 O_3 形成成因研究中发现,杭州城区的 O_3 浓度受到前体物排放和局地气象条件的影响比郊区和农村更大,高浓度的前体物排放配合较高的气温、较低的相对湿度和偏东气流时,易出现城区的 O_3 污染事件.目前,我国 O_3 污染的敏感区大致呈现城市和近郊区为 VOCs 敏感区、城镇和农村地区为 NO_x 敏感区或过渡区的特征^[16,17].目前,大城市 O_3 形成的化学机制仍十分复杂,以往研究主要通过传统统计方法和数值模拟方法,近年来,机器学习成为多个领域科学研究的热点,该方法也逐步被应用于大气环境分析中.利用机器学习对大气环境进行分析可以完全发挥其优势,利用其对非线性数据较好的逼近能力直接输出污染物浓度,能较好地对特定城市的空气质量进行预测^[18].蔡旺华^[19]使用机器学习的极限梯度提升(XGBoost)算法,针对厦门市 4 个监测点分别建立预测模型以预测未来 24 h 空气中 O_3 的浓度;丁愨等^[20]基于决策树算法构建的 O_3 预测均可较好地模拟和分析徐州地区的 O_3 浓度变化特征,但对于 O_3 极大值时刻模值明显偏低;王馨陆等^[21]采用多元线性回归、BP 神经网络和随机森林算法,建立成都市夏季(4 ~ 8 月) O_3 及冬季(11 月至次年 2 月) $\text{PM}_{2.5}$ 污染潜势模型,其中,多元线性回归模型和随机森林模型分别对 O_3 和 $\text{PM}_{2.5}$ 表现出相对最佳的预报性能.基于机器学习的预报方法一

方面更好地利用了气象因子与大气污染物之间的非线性关系,从而获得较为准确的预报模型,另一方面对于气象因子的重要性判别也可更好地做出分析和判别.

苏州地处长三角城市群中东部,是长三角经济一体化重要组成部分.近年,随着经济和城市化进程的快速推进,大气环境问题成为公众关注焦点,春夏季的 O_3 污染问题尤为突出.尽管 O_3 污染特征及其与气象因子关系分析已有较多研究,但不同地区的 O_3 浓度和局地气象要素具有较强的相关性^[22,23],而对于 2013 年大气防治行动以来,长三角地区典型城市——苏州地区的 O_3 污染特征发生怎样的变化,尚不清楚.此外,过去的研究往往侧重气温、日照、风和相对湿度等气象因子对 O_3 浓度的影响,而较少评估太阳辐射对 O_3 的直接影响效应.过去的统计研究发现长三角典型城市群的 O_3 污染主要集中在 4 ~ 9 月,3 月和 10 月 O_3 污染发生次数较少^[24].因此本研究应用 2015 ~ 2020 年的 4 ~ 9 月苏州 O_3 监测数据、常规气象要素观测资料和 2016 ~ 2020 年的 4 ~ 9 月太阳辐射数据,分析讨论了苏州近地面 O_3 超标特征、“周末效应”和日变化规律,深入评估了 O_3 高影响气象因子的重要性.利用机器学习方法构建和分析了本地区拟合度较好的 O_3 浓度预测模型,进一步验证影响 O_3 浓度变化的气象因子重要性.本研究为认识 2013 年以来长三角典型城市 O_3 污染状况提供了有力依据,以期为开展 O_3 预测提供有益的探索,并为长三角地区 O_3 污染防治和大气防污减排提供参考.

1 材料与方法

1.1 数据来源

本文以 O_3 高发季 4 ~ 9 月为主要研究时段,选取了 2015 ~ 2020 年的 4 ~ 9 月苏州地区环境监测中心 8 个国控点的 O_3 小时监测数据(图 1).本文 O_3 污染日判别和 O_3 日浓度数据分析均基于日内连续 8 h 的 O_3 浓度平均值 [$O_3\text{MDA1}$ (O_3 小时浓度)] 的最大值 [即 $O_3\text{MDA8}$, $\rho(O_3-8\text{h})$].文中 O_3 浓度月平均值指一个日历月内 $\rho(O_3-8\text{h})$ 算数平均值, O_3 浓度年平均值指一个历年内 $\rho(O_3-8\text{h})$ 算数平均值.为了分析不同气象条件对 O_3 的影响,采用了同期的苏州气象观测站(120°34'E,31°25'N)数据(图 1),包括气温、气压、相对湿度、2 m 平均风向风速和日照时数.本文所用的太阳辐射度小时数据由苏州东山气象站(120°26'E,31°04'N)FS-S6 总辐射传感器观测所得,该传感器是一种应用于太阳辐射观测

的短波总辐射传感器,它符合最新的 ISO 和 WMO 标准的“一级”表技术指标. 由于 2015 年无完整辐射监测数据,因此数据选取时段仅为 2016 ~ 2020 年的 4 ~ 9 月,该数据可代表苏州地区整体太阳辐射能的变化特征.

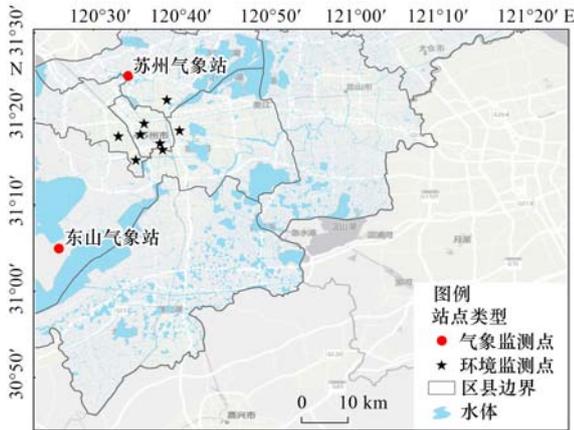


图 1 苏州空气质量监测和气象站点分布

Fig. 1 Air quality and meteorological monitoring station in Suzhou

1.2 分析方法

O_3 日污染评价方法根据环保部发布的《环境空气质量标准》(GB 3095-2012)^[25], $\rho(O_3-8h)$ 大于 $160 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, 即为 O_3 污染. 根据《环境空气质量指数(AQI)技术规定》(试行)(HJ 633-2012)^[26] 分析 O_3 污染等级,环境监测数据依据《环境空气质量自动监测技术规范》(HJ/T 193-2005)^[27] 定期校准和质控.

采用 Pearson 和 Spearman 相关性分析方法,分析气象因子与 O_3 浓度平均值的相关关系,并分别采用传统统计方法(包括普通线性回归拟合和多元线性回归拟合)和机器学习方法(CART 分类回归树拟合、CHAIT 卡方自交交互侦测决策树拟合)^[28] 构建 O_3 浓度预测经验模型,对比择优选取最优 O_3 浓度预测模型.

表 1 2015 ~ 2020 年苏州 O_3 污染高发季 O_3 不同污染等级天数和污染超标率¹⁾

Table 1 Number of days at different O_3 pollution levels and the pollution rate in Suzhou during O_3 seasons from 2015 to 2020

项目	2015 年	2016 年	2017 年	2018 年	2019 年	2020 年
优	50	68	48	69	60	47
良	81	76	86	67	77	97
轻度污染	46	39	43	42	38	36
中度污染	6	0	6	5	8	3
污染总日数/d	52	39	49	47	46	39
污染超标率/%	28.4	21.3	26.8	25.7	25.1	21.3

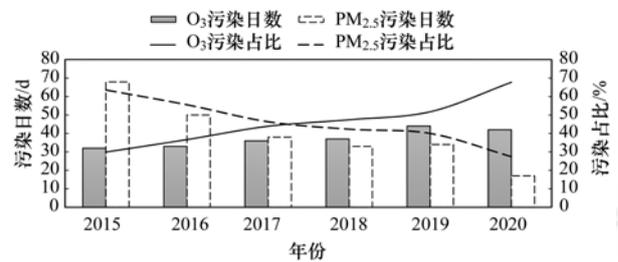
1) 统计结果仅基于 $\rho(O_3-8h)$; 污染超标率表示污染日数与高发季总日数(183 d)的比值

2015 ~ 2020 年苏州 O_3 污染高发季逐年 $\rho(O_3-8h)$ 变化情况见表 2. $\rho(O_3-8h)$ 年平均值范围在 $116 \sim 130 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ 之间,6 年间仅小幅波动. 近 6 年间

2 结果与讨论

2.1 O_3 污染概况

分析苏州市 2015 ~ 2020 年全年大气环境污染期间,首要污染物分别为 O_3 和 $PM_{2.5}$ 的日数见图 2, 近 6 年来 $PM_{2.5}$ 污染日数和以 $PM_{2.5}$ 为首要污染物的污染日数占比逐年降低,而 O_3 污染日数和以 O_3 为首要污染物的污染日数占比均呈逐年上升趋势,以 O_3 为首要污染物的污染日数占比从 2015 年的 29.9% 逐步上升至 2020 年的 67.7%. 表明近 6 年苏州市大气环境污染已转化成以 O_3 为首的光化学污染,该地区的 O_3 污染问题日益凸显.



污染占比表示不同首要污染物的污染日数与总环境污染日数的比值;日首要污染物仅以污染物种类浓度计算的 IAQI 最大值来确定

图 2 2015 ~ 2020 年苏州逐年 O_3 和 $PM_{2.5}$ 污染日数和污染占比

Fig. 2 O_3 and $PM_{2.5}$ pollution days and pollution percentage from 2015 to 2020 in Suzhou

不同年份 O_3 污染高发季(4 ~ 9 月) O_3 污染情况见表 1, 6 年间略有起伏, O_3 污染超标率均在 20% 以上,污染日数最高出现在 2015 年,为 52 d,污染超标率达 28.4%,次高年为 2017 年,污染超标率为 26.8%. 2016 年和 2020 年污染日数最少,均为 39 d,污染超标率为 21.3%. 这可能与 2016 年和 2020 年梅汛期长且梅雨量显著偏多有关. 梅雨季期间阴雨寡照,太阳辐射弱,光化学反应不强烈,因此使得 O_3 高发季污染日数减少^[29].

$\rho(O_3-8h)$ -90per 均高于 $180 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, 达到 O_3 污染级别,其中,最高值为 $192 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, 出现在 2015 年和 2019 年.

表 2 2015 ~ 2020 年苏州 O₃ 污染高发季 O₃ 浓度年平均均值¹⁾/μg·m⁻³Table 2 Annual mean O₃ concentration during O₃ seasons in Suzhou from 2015 to 2020/μg·m⁻³

污染物要素	2015 年	2016 年	2017 年	2018 年	2019 年	2020 年
$\rho(\text{O}_3\text{-8h})$	130	116	129	122	127	129
$\rho(\text{O}_3\text{-8h})\text{-90per}$	192	183	185	182	192	184

1)90per 表示第 90 百分位数

2.2 O₃ 污染高发季浓度变化特征

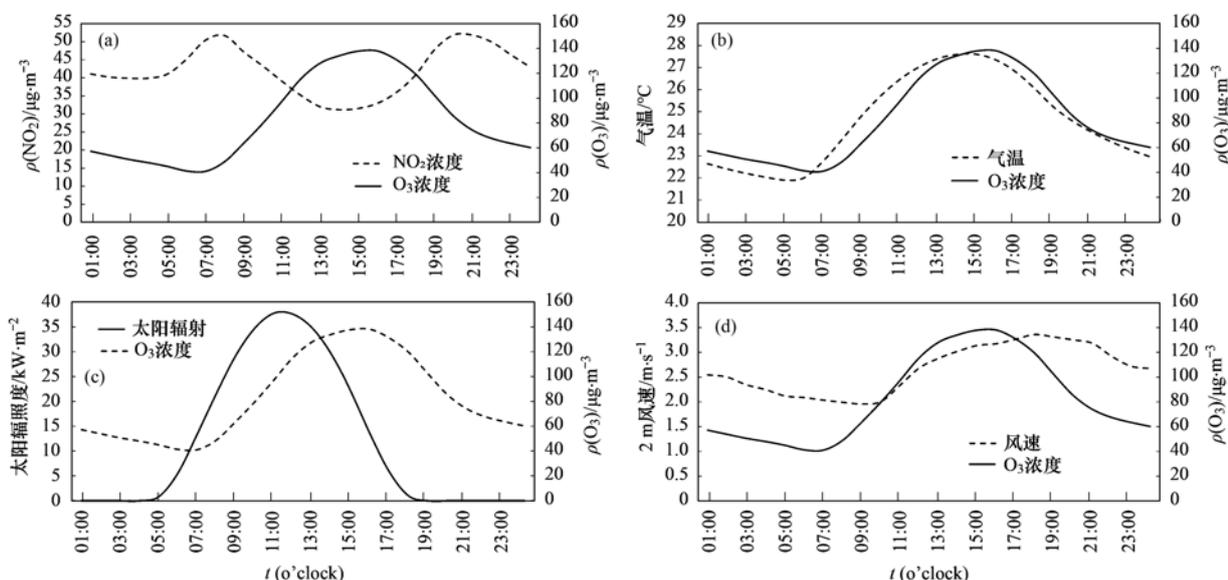
2.2.1 日变化

从 2015 ~ 2020 年 O₃ 污染高发季各要素浓度日变化曲线可以发现[图 3(a)],NO₂ 和 O₃ 浓度日内变化有很大的负相关性,O₃ 浓度在 07:00 前后出现浓度谷值,而 NO₂ 则在 07:00 ~ 08:00 出现峰值,主要由于早高峰机动车排放大量 NO,其与 O₃ 发生化学反应后,消耗了一部分近地面的 O₃ 和生成 NO₂. 当日出后伴随太阳辐射加强,对流混合加强,随着混合层的生长,残余层中的 O₃ 被带入混合层中,导致下风向地区近地面 O₃ 浓度迅速增加^[30],同时,白天太阳辐射条件好,光化学反应增强,更利于在 15:00 ~ 17:00 出现 O₃ 浓度峰值. 相反,由于光解作用,NO₂ 大量被消耗则出现浓度谷值,傍晚到夜间由于晚高峰机动车排放大量的氮氧化物,NO₂ 浓度增高,呈现日内“双峰型”特点. O₃ 浓度与气温和太阳辐射能存在一定的正相关性,日变化趋势较一致,但其浓度峰值出现时刻又滞后于二者[图 3(b)和 3(c)],太阳辐射度受太阳高度角变化影响,常年在 12:00 前后达到峰值,在一定的太阳辐射和气温条件下发生剧烈的光化学反应,即将 NO₂ 分解产生的自由氧原子与氧气结合,形成 O₃. 因此,O₃ 浓度峰值一般

晚于太阳辐射度峰值 3 ~ 4 h、晚于日最高气温 1 h 后出现. 随着太阳落山后太阳辐射能逐渐减少,光化学反应速率降低. 另外,地表风也存在一定的日变化[图 3(b)],09:00 ~ 10:00 风速最小,此阶段 O₃ 浓度增长速度最快,中午前后地表风风速开始增大,O₃ 浓度逐渐达峰值,但增加速度趋于平缓,17:00 起到上半夜,地表风风速仍维持较高水平,O₃ 浓度在 15:00 ~ 17:00 达峰值后则逐步降低. 可见,大气稳定度对 O₃ 浓度的累积影响较大. 同时,还发现强对流天气的发生,对 O₃ 浓度日变化有明显影响,将在后期研究中进一步解释分析.

2.2.2 周变化

图 4 给出了 2016 ~ 2020 年苏州 O₃ 污染高发季年平均太阳辐射度和 O₃ 浓度的周变化情况. 分析发现,2017 年和 2019 年出现周末 O₃ 浓度高于工作日的现象,周日达最高浓度[图 4(b)]. 与上海^[31]等城市的研究现象较一致,存在周末 NO_x 浓度减少而 O₃ 浓度反而增加的现象,即典型的“周末效应”^[32]. 同时,2017 年周末的太阳辐射度明显高于工作日,2019 年周末的太阳辐射度与工作日接近[图 4(a)]. 较高的太阳辐射度对臭氧浓度升高有明显的正相关作用,而工作日人为活动强造成颗粒物浓度



$\rho(\text{O}_3)$ 表示 O₃MDA1 浓度

图 3 苏州 O₃ 污染高发季 O₃ 浓度与不同要素日变化

Fig. 3 Diurnal variation in O₃ concentration and different elements during O₃ seasons in Suzhou

高,进而影响大气透光度和太阳辐射条件,导致 O_3 浓度低. 2016 年和 2018 年周末的太阳辐照度均明显低于工作日[图 4(a)],苏州周末 O_3 浓度较工作日低,与南京等城市的研究有共同的现象,其原因可能与 NO_2/NO 比值以及 O_3 的累积速率密切相关^[33]. 另外,2020 年 O_3 浓度周内波动较大, O_3 浓度峰值出现在星期三.

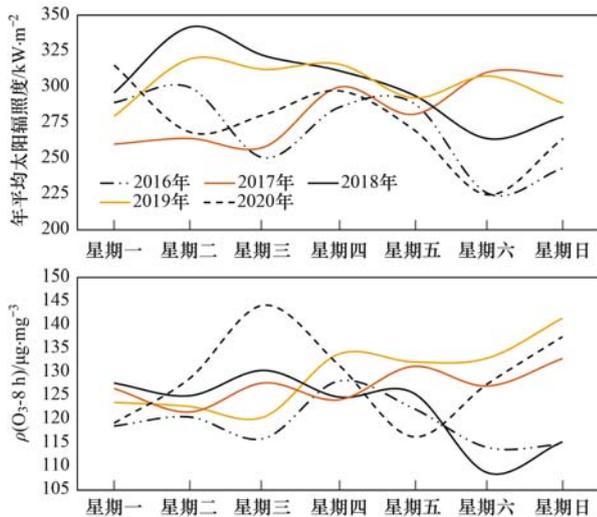


图 4 苏州 O_3 污染高发季年平均太阳辐照度和 O_3 浓度周变化

Fig. 4 Variations in annual mean solar irradiance and O_3 concentration in weeks during O_3 seasons in Suzhou

2.2.3 月变化

从 2015 ~ 2020 年苏州 O_3 污染高发季 O_3 浓度月平均值趋势看(图 5),不同月份 $\rho(O_3)$ 平均值在 $120 \sim 137 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ 之间,整体变化略有起伏,春季 4 月增长阶段,到 5 月达到峰值,6 月和 7 月有所下降,8 月再次出现峰值,9 月浓度降低,呈双峰型变化特征. O_3 污染超标率的月变化特征基本类似,在 5 月出现峰值,达到 32.8%,苏州常年 5 月出现低压大风次数最多,一方面,由于近地面的风速增加,使得大气湍流活动增强,大气边界层高度增大,上下层 O_3 混合,有利于增加近地层 O_3 浓度,另一方面,低压前部的偏南大风更利于白天气温

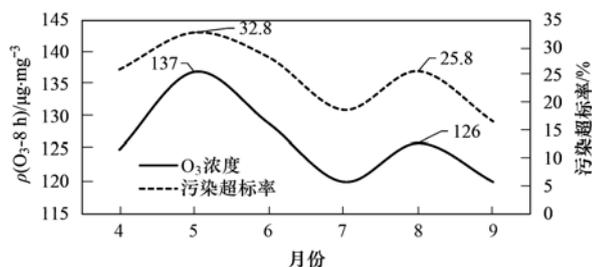


图 5 苏州 O_3 污染高发季 O_3 浓度月平均值和污染超标率趋势变化

Fig. 5 Trends of monthly O_3 concentration and pollution rate in different months during O_3 seasons in Suzhou

的升高,因此 5 月更有利于出现 O_3 超标. 6 月和 7 月呈下降趋势,6 月和 7 月多处梅雨季,梅雨期间阴雨寡照,太阳辐射弱,光化学反应不强烈^[29],8 月苏州进入盛夏后,太阳辐射能明显增强,导致 O_3 污染超标率升至 25.8%,达第二次峰值. 7 月和 9 月出现谷值.

2.3 气象关键因子对 O_3 浓度影响分析

已有研究发现, O_3 浓度高低变化与气象条件密切相关^[34,35],在有利的气象条件下 O_3 容易形成和积累^[36]. 下面通过对 2016 ~ 2020 年 O_3 污染高发季的逐日太阳辐照度、气温、日照时数、相对湿度、前一日 O_3 浓度和风速与 O_3 浓度的相关性分析发现(表 3),太阳辐照度、气温、日照时数和前一日 O_3 浓度均与 O_3 浓度呈现明显的正相关关系,相对湿度和风速呈现负相关关系;其中,日辐照度与 O_3 浓度相关系数最大,相关系数为 0.659 (Pearson) 和 0.646 (Spearman),表明太阳辐射对 O_3 变化有更明显更直接的影响;相对湿度与当日 O_3 浓度相关系数为 -0.589 (Pearson) 和 -0.611 (Spearman),相关性程度次之;日照时数与 O_3 浓度也有紧密关系,与 O_3 浓度的相关系数为 0.517 (Pearson) 和 0.534 (Spearman);气温、风速与 O_3 浓度的相关性较上述气象因子略差一些. 上述各气象因子均满足 99% 的置信区间的显著相关,表明以上气象因子与 O_3 均相关性显著,对于 O_3 形成和变化有一定影响.

表 3 2016 ~ 2020 年 O_3 污染高发季主要气象因子与 O_3 浓度的相关系数¹⁾

Table 3 Correlation coefficients between O_3 concentration and major meteorological factors during O_3 seasons from 2016 to 2020

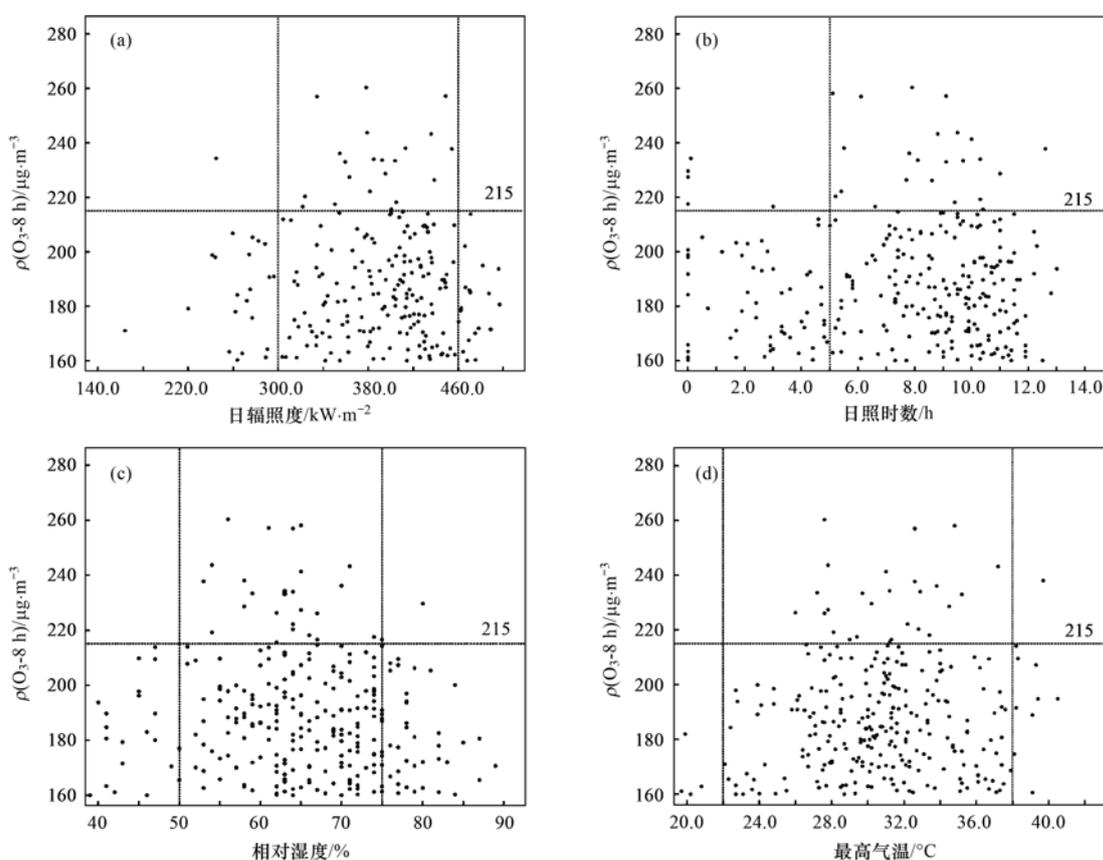
气象因子	$\rho(O_3-8h)$	
	Pearson 相关系数	Spearman 相关系数
日辐照度	0.659 **	0.646 **
气温	0.333 **	0.329 **
日照时数	0.517 **	0.534 **
相对湿度	-0.589 **	-0.611 **
前一日 $\rho(O_3-8h)$	0.475 **	0.456 **
风速	-0.227 **	-0.207 **

1) ** 表示在置信度(双测)为 0.01 时,相关性是显著的

为进一步讨论 O_3 污染与气象因子的关系,本文挑选了 2015 ~ 2020 年苏州 O_3 污染高发季的 272 个污染日[即 $\rho(O_3-8h) > 160 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$] 进行重点分析. 结果表明,太阳辐照度、日照时数、相对湿度和气温不同, O_3 浓度变化呈现不同的特点,由图 6(a) 可知,日辐照度达 $150 \text{ kW}\cdot\text{m}^{-2}$ 时, O_3 即有可能出现污染,但总体在轻度污染;当日辐照度在 $300 \sim 460 \text{ kW}\cdot\text{m}^{-2}$ 之间时, O_3 浓度随太阳辐射能的增加而升

高, O_3 污染强度也有所加强, 出现中度污染, 且最高浓度达 $260.4 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, 其中, 当日辐照度在 $350 \sim 440 \text{ kW}\cdot\text{m}^{-2}$ 之间, O_3 污染发生频次最多; 当日辐照度超过 $460 \text{ kW}\cdot\text{m}^{-2}$ 时, 出现 O_3 污染频次有所降低, 基本以轻度污染为主. 由图 6(b) 可知, 日照时数即使仅 0 h (阴天), O_3 也存在污染, 当日日照时数低于 5 h, O_3 污染大多集中在轻度污染, 仅个别时候出现中度污染, 然而, 当日日照时数大于 5 h, 尤其是 7 h (晴天) 以上, O_3 污染发生频次增多, 且强度也增强, 更易出现中度污染. 由图 6(c) 可知, 当相对湿度达 40%, O_3 易出现污染, 相对湿度在 50% ~ 75% 之间

O_3 污染频次明显增多, 同时污染强度也有所增强, 有 23d O_3 浓度达中度污染, 其中相对湿度在 55% ~ 65% 范围之内, O_3 污染最高浓度可达 $250 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ 以上, 而当相对湿度大于 80% 时, O_3 污染强度又趋于减弱, 当发生污染时多数为轻度污染. 由图 6(d) 可知, 最高气温在 20°C 以上, 则易出现 O_3 污染, 日最高气温在 $22 \sim 26^\circ\text{C}$ 范围内以及超过 38°C 的高温情况下, 以轻度污染为主; 而当最高气温在 $26 \sim 38^\circ\text{C}$ 范围时, O_3 出现污染概率明显增多, 污染等级升高, 其中, 最高气温在 $28 \sim 35^\circ\text{C}$ 之间, 出现 O_3 中度污染过程明显增多.



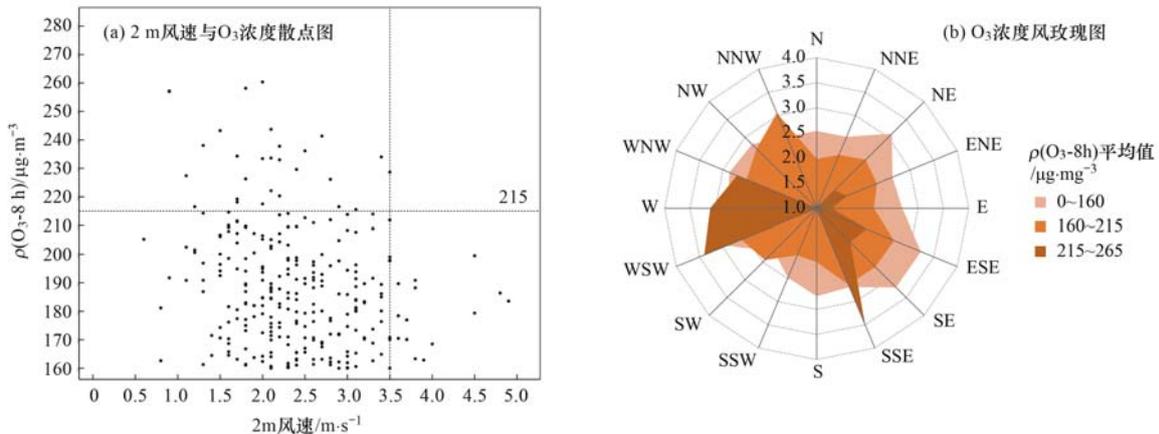
$\rho(O_3-8h) > 215 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ 即 O_3 中度污染, 纵虚线为 O_3 污染下不同气象要素的阈值范围

图 6 O_3 污染情况下不同气象因子与 O_3 浓度散点分布

Fig. 6 Scatter distribution of O_3 concentration distribution with different meteorological factors under O_3 pollution

相关性分析发现风速和 O_3 浓度呈负相关关系, 即风速越大, 出现 O_3 污染的次数越少. 图 7(a) 分析可知, 当风速大于 $3.5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时, 整体 O_3 浓度趋于下降, 仅为轻度污染等级, 而当小风静稳 (小于 $2.5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$) 时, 则有利于 O_3 污染的发生. 由于近地面的风场对污染物输送具有重要的影响, 不同的风向决定了污染物输送的不同来源, 下面进一步分析风向和风速对 O_3 变化的共同影响. 图 7(b) 分析可知, O_3 污染高发季内, 当风速小于 $2.5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, 无论何风向, 均易出现 O_3 污染现象, 其中, 偏东风风速小于

$1.5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时, O_3 可达中度污染等级. 此外, 当受西到西南风或南到东南风控制时, 风速范围可扩大至 $0 \sim 3.5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, 也易发生 O_3 中度污染 [即 $\rho(O_3-8h) > 215 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$]; 这与以下原因有关: 一是由于偏南气流影响时, 白天气温明显上升, 当光照和水汽条件适宜, 光化学反应速率明显加快, 有利于高浓度 O_3 的产生; 二是研究表明东南和西南偏南方向的气团造成的污染物输送对苏南地区的臭氧浓度影响较大^[37,38]; 因此本地产生和短距离输送叠加导致苏州地区易发生 O_3 污染现象.



(a) 2 m 风速与 O₃ 浓度散点图, $\rho(O_3-8h) > 215 \mu g \cdot m^{-3}$ 即 O₃ 中度污染, 纵虚线为 O₃ 不同级别污染 2 m 风速的阈值范围; (b) O₃ 浓度风玫瑰图, 虚线上数值表示风速, 单位 $m \cdot s^{-1}$

图 7 O₃ 污染情况下风向风速与 O₃ 浓度分布

Fig. 7 Distribution diagram of O₃ concentration with wind direction and speed under O₃ pollution

2.4 基于关键气象因子构建 O₃ 经验预测方程

为进一步了解各气象因子与 O₃ 浓度的定量关系, 下面采用传统统计方法 (包括普通线性回归拟合、多元线性回归拟合) 和机器学习方法 (CART 或 CRT 分类回归树拟合、CHAIT 卡方自交互侦测决策树拟合), 将 2016 ~ 2020 年 O₃ 高发季的 895 个数据样本天数中的前 1 日 $\rho(O_3-8h)$ 浓度、最高气温、日总辐照度、相对湿度、日

照时数和 2 m 风速作为主要影响因子, 构建 O₃ 浓度预测模型. 通过不同误差范围内预测值个数占总预测值个例数的百分比分析, 对比 4 种预测模型的误差 (表 4), 可以发现 CART 分类回归树预测值和实况值误差在 20% 的个数占比为 59.3%, 误差在 30% 的个数占比为 78.1%, 误差在 40% 的个数占比为 87.8%, 优于其他预测模型.

表 4 不同 O₃ 浓度预测模型下预测值和实况值误差占比¹⁾/%

Table 4 Percentage of error between predicted value and actual value under different O₃ concentration prediction models

预测和实况误差	普通线性回归模型	CHAIT 分类拟合预测模型	CART 分类拟合预测模型	多元线性回归模型
20	45.8	45.8	59.3	57.9
30	64.2	76.4	78.1	76.4
40	72.5	85.3	87.8	85.4

1) 统计结果为不同误差范围内预测值个数与总预测值个数的比值

通过最优模型 (CART) O₃ 浓度预测模型中各要素的正态化重要性分析发现 (图略), 日总辐照度为最重要的气象驱动因子, 重要性占比达 100%, 其次是相对湿度和日照时数, 重要性占比分别为 83.1% 和 59.6%, 而影响重要性最低的是 2 m 风速, 重要性占比仅 8.2%. 也进一步验证了太阳辐射能对于 O₃ 浓度的影响最为明显和相对湿度影响效应次之的结论, 原因是太阳辐射强, 日照时间长, 非常有利于光化学反应, 使得 O₃ 形成、浓度升高; 当相对湿度较高时, 水汽光化学分解可以产生较多的活性基, 与 O₃ 或单原子氧反应, 使得 O₃ 浓度降低^[39]. 而气温的重要性比太阳辐射、相对湿度低, 这点与以往研究结论不同, 究其原因可能是, 气温高低变化除了与太阳辐射有关系, 同时还与气团冷暖平流作用、周边地理环境和下垫面类型有关系, 对 O₃ 变化影响不如太阳辐射因子直接. 基于最优模型 (CART) O₃ 浓

度预测模型, 本文还对不同月份 O₃ 实况监测值和预测值做了拟合曲线分析 (图略), 发现该模型对各月低浓度预报较好, 而 $\rho(O_3-8h)$ 超过 $200 \mu g \cdot m^{-3}$ 时, 则预报值均存在低估和平滑现象. 同时在该预测模型下, 对不同月份的预测值与实况值做了拟合度分析 (表 5), 结果表明, 4、5、7 和 9 月拟合度均达 0.6 以上, 其中 7 月拟合度最高, 达 0.957, 其次是 4 月和 5 月, 6 月拟合度较低, 仅 0.344. 综上可知该模型对 4、5、7 和 9 月的 O₃ 浓度有较好的预测能力, 为

表 5 4~9 月 CART 臭氧浓度预测模型拟合度¹⁾

Table 5 Fitting degree under CART O₃ concentration prediction model from April to September

月份	4	5	6	7	8	9
拟合度	0.635	0.612	0.344	0.957	0.466	0.605

1) 拟合度: $R^2 = 1 - (RSS/TSS)$, 其中, 残差平方和 (RSS) = $\sum (y_i - y^*)^2$, 总平方和 (TSS) = $\sum (y_i - \bar{y})^2$, 式中, y_i 为实况值, y^* 为预测值, \bar{y} 为实况平均值

进一步开展 O₃ 预测研究提供了有益的尝试。

3 结论

(1)近6年来 O₃ 污染高发季, O₃ 污染超标率均达20%以上,其中2015年 O₃ 污染日数最高,且污染超标率最高,达28.4%;6年间, O₃ 污染日数和以 O₃ 为首要污染物的污染日数占比均呈逐年上升趋势,以 O₃ 为首要污染物的污染日数占比从2015年的29.9%逐步上升至2020年的67.7%;表明苏州市 O₃ 污染问题日益凸显。

(2)O₃ 存在单峰日变化特点,谷值出现在7:00前后,峰值出现在15:00~16:00。NO₂ 作为其光化学反应的前体物之一,存在双峰特征, O₃ 浓度与气温和太阳辐射能的日内变化趋势一致,但其浓度峰值出现时刻又滞后于二者,地表风对 O₃ 的累积影响较大。2017年和2019年 O₃ 有典型的“周末效应”,周末较高的太阳辐射度对臭氧浓度升高有明显的正相关作用。O₃ 浓度和污染超标率在4月处于增长阶段,到5月达峰值,6月和7月有所下降,8月再次出现峰值,9月浓度降低,呈双峰变化特征。

(3)太阳辐照度、气温、日照时数和前一日 O₃ 浓度均与 O₃ 浓度呈明显的正相关关系,相对湿度和风速呈负相关关系。其中,日辐照度与 O₃ 浓度相关系数最大,为0.659(Pearson)和0.646(Spearman);表明太阳辐射对 O₃ 变化有更明显更直接的影响;相对湿度与 O₃ 浓度相关系数次之,为-0.589(Pearson)和-0.611(Spearman);O₃ 浓度与日照时数也有紧密关系,相关系数为0.517(Pearson)和0.534(Spearman);另外,气温、风速与 O₃ 浓度的相关性较上述气象因子略差。

(4)O₃ 污染高发季, O₃ 污染的发生主要受到多种气象条件的影响,其中,日照时数7h以上,气温在30℃附近,太阳辐照度在350~440 kW·m⁻²之间,相对湿度在50%~75%之间, O₃ 污染日数达最多,浓度值达最高,强度也达最强。当小风静稳时(风速小于2.5 m·s⁻¹),易出现 O₃ 污染,其中,当偏东风风速小于1.5 m·s⁻¹时, O₃ 可达中度污染等级。此外,当受西到西南风或南到东南风控制时,风速范围扩大至0~3.5 m·s⁻¹之间,也易发生 O₃ 中度污染。

(5)运用机器学习方法构建了最优 O₃ 浓度预测模型(CART预测模型),该预测模型中,日辐照度为最重要的气象驱动因子,相对湿度影响次之,而气温的重要性比太阳辐射、相对湿度低。最优 O₃ 浓度预测模型对4、5、7和9月的 O₃ 浓度有较好的预测能力,当 O₃ 浓度超过200 μg·m⁻³时,预报值存在一定程度的低估和平滑。

参考文献:

- [1] Chen X S, Wang Z F, Li J, *et al.* Simulation on different response characteristics of aerosol particle number concentration and mass concentration to emission changes over mainland China [J]. *Science of the Total Environment*, 2018, **643**: 692-703.
- [2] Madaniyazi L, Nagashima T, Guo Y M, *et al.* Projecting ozone-related mortality in East China [J]. *Environment International*, 2016, **92-93**: 165-172.
- [3] Lu X, Hong J Y, Zhang L, *et al.* Severe surface ozone pollution in China: a global perspective [J]. *Environmental Science & Technology Letters*, 2018, **5**(8): 487-494.
- [4] Wang T, Xue L K, Brimblecombe Peter, *et al.* Ozone pollution in China: a review of concentrations, meteorological influences, chemical precursors, and effects [J]. *Science of the Total Environment*, 2017, **575**: 1582-1596.
- [5] 王雪梅,符春,梁桂雄. 城市区域臭氧浓度变化的研究[J]. *环境科学研究*, 2001, **14**(5): 1-3, 19.
Wang X M, Fu C, Liang G X. Study on the ozone concentration in urban areas [J]. *Research of Environmental Sciences*, 2001, **14**(5): 1-3, 19.
- [6] Elminir H K. Dependence of urban air pollutants on meteorology [J]. *Science of the Total Environment*, 2005, **350**(1-3): 225-237.
- [7] Liao H, Chang W Y, Yang Y. Climatic effects of air pollutants over China: a review [J]. *Advances in Atmospheric Sciences*, 2015, **32**(1): 115-139.
- [8] He J J, Gong S L, Yu Y, *et al.* Air pollution characteristics and their relation to meteorological conditions during 2014-2015 in major Chinese cities [J]. *Environmental Pollution*, 2017, **223**: 484-496.
- [9] Hu J, Li Y C, Zhao T L, *et al.* An important mechanism of regional O₃ transport for summer smog over the Yangtze River Delta in eastern China [J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2018, **18**(22): 16239-16251.
- [10] Xu Z N, Huang X, Nie W, *et al.* Impact of biomass burning and vertical mixing of residual-layer aged plumes on ozone in the Yangtze River Delta, China: a tethered-balloon measurement and modeling study of a multiday ozone episode [J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2018, **123**(20): 11786-11803.
- [11] Ding A J, Wang T, Zhao M, *et al.* Simulation of sea-land breezes and a discussion of their implications on the transport of air pollution during a multi-day ozone episode in the Pearl River Delta of China [J]. *Atmospheric Environment*, 2004, **38**(39): 6737-6750.
- [12] Chen Z, Li R, Chen D, *et al.* Understanding the causal influence of major meteorological factors on ground ozone concentrations across China [J]. *Journal of Cleaner Production*, 2020, **242**, doi: 10.1016/j.jclepro.2019.118498.
- [13] Pu X, Wang T J, Huang X, *et al.* Enhanced surface ozone during the heat wave of 2013 in Yangtze River Delta region, China [J]. *Science of the Total Environment*, 2017, **603-604**: 807-816.
- [14] 刘建,吴兑,范绍佳,等. 前体物与气象因子对珠江三角洲臭氧污染的影响[J]. *中国环境科学*, 2017, **37**(3): 813-820.
Liu J, Wu D, Fan S J, *et al.* Impacts of precursors and meteorological factors on ozone pollution in Pearl River Delta [J]. *China Environmental Science*, 2017, **37**(3): 813-820.
- [15] Li K W, Chen L H, Ying F, *et al.* Meteorological and chemical impacts on ozone formation: a case study in Hangzhou, China [J]. *Atmospheric Research*, 2017, **196**: 40-52.

- [16] 中国环境科学学会臭氧污染控制专业委员会. 中国大气臭氧污染防治蓝皮书(2020年)[R]. 南京:中国环境科学学会, 臭氧污染控制专业委员会, 2020.
- [17] 韩婷婷, 李颖若, 邱雨露, 等. 上甸子区域背景站 VOCs 污染特征及其对臭氧生成贡献[J]. 环境科学, 2020, **41**(6): 2586-2595.
Han T T, Li Y R, Qiu Y L, *et al.* Characteristics of VOCs and their roles in ozone formation at a regional background site in Beijing, China [J]. *Environmental Science*, 2020, **41**(6): 2586-2595.
- [18] 朱晏民, 徐爱兰, 孙强. 基于深度学习的空气质量预报方法新进展[J]. 中国环境监测, 2020, **36**(3): 10-18.
Zhu Y M, Xu A L, Sun Q. New progress for air quality forecasting methods based on deep learning [J]. *Environmental Monitoring in China*, 2020, **36**(3): 10-18.
- [19] 蔡旺华. 运用机器学习方法预测空气中臭氧浓度[J]. 中国环境管理, 2018, **10**(2): 78-84.
Cai W H. Using machine learning method for predicting the concentration of ozone in the air [J]. *Chinese Journal of Environmental Management*, 2018, **10**(2): 78-84.
- [20] 丁慷, 陈报章, 王瑾, 等. 基于决策树的统计预报模型在臭氧浓度时空分布预测中的应用研究[J]. 环境科学学报, 2018, **38**(8): 3229-3242.
Ding S, Chen B Z, Wang J, *et al.* An applied research of decision-tree based statistical model in forecasting the spatial-temporal distribution of O₃ [J]. *Acta Scientiae Circumstantiae*, 2018, **38**(8): 3229-3242.
- [21] 王馨陆, 黄冉, 张雯娟, 等. 基于机器学习方法的臭氧和 PM_{2.5} 污染潜势预报模型——以成都市为例[J]. 北京大学学报(自然科学版), 2021, **57**(5): 938-950.
Wang X L, Huang R, Zhang W X, *et al.* Forecasting ozone and PM_{2.5} pollution potentials using machine learning algorithms: a case study in Chengdu [J]. *Acta Scientiarum Naturalium Universitatis Pekinensis*, 2021, **57**(5): 938-950.
- [22] Zhao W, Fan S J, Guo H, *et al.* Assessing the impact of local meteorological variables on surface ozone in Hong Kong during 2000–2015 using quantile and multiple line regression models [J]. *Atmospheric Environment*, 2016, **144**: 182-193.
- [23] 吴进, 李琛, 马志强, 等. 基于天气分型的上甸子大气本底站臭氧污染气象条件[J]. 环境科学, 2020, **41**(11): 4864-4873.
Wu J, Li C, Ma Z Q, *et al.* Influence of meteorological conditions on ozone pollution at Shangdianzi station based on weather classification [J]. *Environmental Science*, 2020, **41**(11): 4864-4873.
- [24] 何超, 慕航, 杨璐, 等. 中国暖季近地面臭氧浓度空间格局演变及主要气象驱动因素[J]. 环境科学, 2021, **42**(9): 4168-4179.
He C, Mu H, Yang L, *et al.* Spatial variation of surface ozone concentration during the warm season and its meteorological driving factors in China [J]. *Environmental Science*, 2021, **42**(9): 4168-4179.
- [25] GB 3095-2012, 环境空气质量标准[S].
- [26] HJ 633-2012, 环境空气质量指数(AQI)技术规定(试行)[S].
- [27] HJ/T 193-2005, 环境空气质量自动监测技术规范[S].
- [28] Meng Z Y. Ground ozone level prediction using machine learning [J]. *Journal of Software Engineering and Applications*, 2019, **12**(10): 423-431.
- [29] 钱悦, 许彬, 夏玲君, 等. 2016~2019年江西省臭氧污染特征与气象因子影响分析[J]. 环境科学, 2021, **42**(5): 2190-2201.
- [30] Qian Y, Xu B, Xia L J, *et al.* Characteristics of ozone pollution and relationships with meteorological factors in Jiangxi province [J]. *Environmental Science*, 2021, **42**(5): 2190-2201.
- [31] 林莉文, 卞建春, 李丹, 等. 北京城区大气混合层内臭氧垂直结构特征的初步分析——基于臭氧探空[J]. 地球物理学报, 2018, **61**(7): 2667-2678.
Lin L W, Bian J C, Li D, *et al.* Preliminary analysis on vertical distribution of ozone in the mixing layer over urban Beijing based on ozonesonde data [J]. *Chinese Journal of Geophysics*, **61**(7): 2667-2678.
- [32] 唐文苑, 赵春生, 耿福海, 等. 上海地区臭氧周末效应研究[J]. 中国科学 D 辑: 地球科学, 2009, **39**(1): 99-105.
Tang W Y, Zhao C S, Geng F H, *et al.* Study of ozone “weekend effect” in Shanghai [J]. *Science in China Series D: Earth Sciences*, 2008, **51**(9): 1354-1360.
- [33] 石玉珍, 徐永福, 王庚辰, 等. 北京市夏季 O₃、NO_x 等污染物“周末效应”研究[J]. 环境科学, 2009, **30**(10): 2832-2838.
Shi Y Z, Xu Y F, Wang G C, *et al.* Study of the “weekend effect” of O₃, NO_x and other pollutants in summer of Beijing [J]. *Environmental Science*, 2009, **30**(10): 2832-2838.
- [34] 王俊秀, 安俊琳, 邵平, 等. 南京北郊大气臭氧周末效应特征分析[J]. 环境科学, 2017, **38**(6): 2256-2263.
Wang J X, An J L, Shao P, *et al.* Characteristic study on the “weekend effect” of atmospheric O₃ in northern suburb of Nanjing [J]. *Environmental Science*, 2017, **38**(6): 2256-2263.
- [35] 严文莲, 刘端阳, 康志明, 等. 江苏臭氧污染特征及其与气象因子的关系[J]. 气象科学, 2019, **39**(4): 477-487.
Yan W L, Liu D Y, Kang Z M, *et al.* The characteristics of ozone pollution and its relationship with meteorological factors in Jiangsu [J]. *Journal of the Meteorological Sciences*, 2019, **39**(4): 477-487.
- [36] 符传博, 徐文帅, 丹利, 等. 2015~2020年海南省臭氧时空变化及其成因分析[J]. 环境科学, 2022, **43**(2): 675-685.
Fu C B, Xu W S, Dan L, *et al.* Temporal and spatial variations in ozone and its causes over Hainan province from 2015 to 2020 [J]. *Environmental Science*, 2022, **43**(2): 675-685.
- [37] 张瑞欣, 陈强, 夏佳琦, 等. 乌海市夏季臭氧污染特征及基于过程分析的成因探究[J]. 环境科学, 2021, **42**(9): 4180-4190.
Zhang R X, Chen Q, Xia J Q, *et al.* Exploring characteristics and causes of summer ozone pollution based on process analysis in Wuhai [J]. *Environmental Science*, 2021, **42**(9): 4180-4190.
- [38] 谢放尖, 陆晓波, 杨峰, 等. 2017年春夏期间南京地区臭氧污染输送影响及潜在源区[J]. 环境科学, 2021, **42**(1): 88-96.
Xie F J, Lu X B, Yang F, *et al.* Transport influence and potential sources of ozone pollution for Nanjing during spring and summer in 2017 [J]. *Environmental Science*, **42**(1): 88-96.
- [39] 何涛, 乔利平, 徐圃青, 等. 常州市臭氧污染传输路径和潜在源区[J]. 中国环境监测, 2017, **33**(4): 77-83.
He T, Qiao L P, Xu P Q, *et al.* Study of transport pathways and potential sources of ozone pollution in Changzhou [J]. *Environmental Monitoring in China*, 2017, **33**(4): 77-83.
- [40] 谈建国, 陆国良, 耿福海, 等. 上海夏季近地面臭氧浓度及其相关气象因子的分析和预报[J]. 热带气象学报, 2007, **23**(5): 515-520.
Tan J G, Lu G L, Geng F H, *et al.* Analysis and prediction of surface O₃ concentration and related meteorological factors in summertime in urban area of Shanghai [J]. *Journal of Tropical Meteorology*, 2007, **23**(5): 515-520.

CONTENTS

Evolution of PM _{2.5} Chemical Composition and Sources in Nanjing During the Implementation of the APPCAP	CHEN Pei-lin, GUO Rong, WANG Qin-geng (1)
Differences in PM _{2.5} Components Between Urban and Rural Sites During Heavy Haze Event in Northern Henan Province	WANG Shen-bo, WANG Ling-ling, FAN Xiang-ge, <i>et al.</i> (11)
Characteristics and Source Apportionment of Atmospheric Fine Particles in Langfang in Autumn and Winter	ZHU Shu-zhen, TONG Jie, BAO Feng, <i>et al.</i> (20)
Pollution Characteristics and Health Risk Assessment of Heavy Metals in PM _{2.5} of Different Air Masses During Heating Season in Tianjin	LI Li-wei, DENG Xiao-wen, XIAO Zhi-mei, <i>et al.</i> (30)
Analysis of Critical Source of Potentially Harmful Elements in Urban Road Dust During Winter in Taiyuan Based on Multiple Attribute Decision Making Method	DENG Wen-bo, LIU Wen-juan (38)
Numerical Response Analysis of PM _{2.5} -O ₃ Compound Pollution in Beijing	LIU Tian-qiang (48)
High-resolution Emission Inventory of Reactive Volatile Organic Compounds from Anthropogenic Sources in the Yangtze River Delta Region	TIAN Jun-jie, DING Xiang, AN Jing-yu, <i>et al.</i> (58)
Vertical Distribution Characteristics of Boundary Layer Volatile Organic Compounds in Autumn in the Mixed Industrial and Rural Areas over the Northern Suburb of Nanjing	WANG Tai, ZHU Bin, SHI Shuang-shuang, <i>et al.</i> (66)
Characterization of Ambient Volatile Organic Compounds, Source Apportionment, and the Ozone-NO _x -VOC Sensitivities in Liucheng County, Guangxi	WU Ying, MO Zhao-yu, WU Qin-qin, <i>et al.</i> (75)
Characteristics of Ozone Pollution and High-impact Meteorological Factors in Urban Cities: A Case of Suzhou	HE Yan, LIN Hui-juan, CAO Shu-ya, <i>et al.</i> (85)
Emission Inventory and Distribution Characteristics of Anthropogenic Ammonia in Quzhou County, North China Plain	KANG Jia-hui, MENG Fan-lei, LIU Xue-jun, <i>et al.</i> (94)
Application of WRF Optimal Parameterization Scheme for Different Air Quality Models	YANG Jing-chao, JIANG Xing-wen, BO Xin, <i>et al.</i> (104)
Distribution Characteristics and Health Effects of Bioaerosols in Spring over Xi'an City	WEI Jun-qiang, YANG Liu, SHEN Zhen-xing, <i>et al.</i> (118)
Distribution of Bacterial Concentration and Viability in Atmospheric Bioaerosols Under Different Weather Conditions in the Coastal Region of Qingdao	WEI Wen-shu, QI Jian-hua, CHANG Cheng (127)
Spatiotemporal Distribution and Driving Factors of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) in Inland Sediments of China	HUANG Zhu-liang, CAI Jia-wei, WANG Ru-wei (138)
Distributions of Antibiotic Resistance Genes and Microbial Communities in the Nearshore Area of the Yangtze River Estuary	XU Qiu-hong, LIU Shu-guang, LOU Sha, <i>et al.</i> (158)
Co-occurrence of Tetracycline Antibiotic Resistance Genes and Microbial Communities in Plateau Wetlands Under the Influence of Human Activities	QIN Rong, YU Qing-guo, LIU Zhen-ya, <i>et al.</i> (169)
Occurrence and Health Risk Assessment of Multiple Pesticides in Drinking Water Sources of Southeast China	HE Shu, DONG Hui-yu, REN Nan-qi (180)
Spatiotemporal Distribution and Pollution Risk Assessment of Heavy Metals in Sediments of Main Water Supply Reservoirs in Central Zhuhai City	WANG En-rui, ZHANG Kun-feng, CHANG Sheng, <i>et al.</i> (189)
Distribution Characteristics and Pollution Risk of Heavy Metals in River Sediment of Suzhou Water Network Area, China	ZHENG Min-hui, BAI Dong-rui, ZHANG Tao, <i>et al.</i> (198)
Distribution of Biodegradable Dissolved Organic Matter and Its Affecting Factors in a Typical Peri-urban Watershed in Yangtze River Delta	WU Wen-yu, MA Jing-sheng, YANG Lei, <i>et al.</i> (210)
Long-term Succession Patterns and Driving Factors of Water Quality in a Flood-pulse System Lake: A Case Study of Lake Luoma, Jiangsu Province	HUANG Xue-ying, GAO Ming-yuan, WANG Jin-dong, <i>et al.</i> (219)
Microplastic Pollution Status and Ecological Risk Evaluation in Weihe River	SHAN Ze-xuan, ZHANG Yan, ZHANG Cheng-qian, <i>et al.</i> (231)
Effects of Different Colored Polycarbonate Plastics on Growth and Community Structure of Periphytic Algae	WANG Meng-xue, YIN Si-cheng, WANG Zhen-fang, <i>et al.</i> (243)
Diversity Patterns and Influencing Factors of Epibiotic in <i>Vallisneria natans</i> and Planktonic Bacteria Communities	ZHANG Mei-ting, LIU Jin-xian, SU Jia-he, <i>et al.</i> (252)
Bacterial Community and Diversity of River Ecosystems on the Qinghai-Tibet Plateau Based on 16S rRNA Gene Sequencing	QU Wei-qing, ZHANG Bo-mei, HUANG Xue, <i>et al.</i> (262)
Spatial and Temporal Heterogeneity and Ecological Health Evaluation of Diatom Community Based on eDNA	JIANG Shan, ZHANG Yan, LI Fei-long, <i>et al.</i> (272)
Severity Differences and Mechanisms of Algal Blooms Among Sections in Pengxi River of the Three Gorges Reservoir	LUO Xiao-jiao, ZHANG Xing, HUANG Wei, <i>et al.</i> (282)
Characteristics of Soil Erosion and Nitrogen Loss in Vegetable Field Under Natural Rainfall	NING Jia-li, HUANG Yan-hui, LI Gui-fang, <i>et al.</i> (293)
Effects of Green, Blue, and Blue-green Roofs on Runoff Quality	ZHANG Sun-xun, ZHANG Shou-hong, YAN Jing, <i>et al.</i> (303)
Analysis of Spatiotemporal Variation Characteristics and Driving Forces of NPP in Shanxi Province from 2000 to 2020 Based on Geodetector	SHAO Jia-hao, LI Jing, YAN Xing-guang, <i>et al.</i> (312)
Spatio-temporal Variation in Vegetation Cover and Its Driving Mechanism Exploration in Southwest China from 2000 to 2020	XU Yong, DAI Qiang-yu, HUANG Wen-ting, <i>et al.</i> (323)
Heavy Metal Content and Resistance Gene Abundance and Related Properties in the Surface Soil around Qinghai Lake	HU Shi-lei, QU Jian-li, ZHANG Li, <i>et al.</i> (336)
Soil Heavy Metal Content, Pollution, and Influencing Factors in Typical Farming Area of Sichuan Basin	LIU Shu-ling, WU Mei, LIU Zhi-yuan, <i>et al.</i> (347)
Risk Assessment and Sources of Heavy Metals in Farmland Soils of Yellow River Irrigation Area of Ningxia	CHEN Lin, MA Kun, MA Jian-jun, <i>et al.</i> (356)
Characteristics and Risk Assessment of Heavy Metals in the Soil Around Copper Smelting Sites	PENG Chi, LIU Xu, ZHOU Zi-ruo, <i>et al.</i> (367)
Characteristics of Typical Soil Acidification and Effects of Heavy Metal Speciation and Availability in Southwest China	LING Yun, LIU Han-yi, ZHANG Xiao-ting, <i>et al.</i> (376)
Stabilization Characteristics of Exogenous Cd in Different Types of Soil	WANG Gang, YU Hai-ying, HUANG Hua-gang, <i>et al.</i> (387)
Threshold of Se-rich Soil Based on Available-Se and Influencing Factors of Available-Se	WANG Ying, MA Yan-bin, WANG Ze-jing (395)
Accumulation Characteristics and Health Risk Assessment of Heavy Metals in Soil-Crop System Based on Soil Parent Material Zoning	CHEN Zi-wan, XU Jing, HOU Zhao-lei, <i>et al.</i> (405)
Characteristics and Planting Safety Assessment of As Content in Dryland Soil and Maize in Guizhou Province	HUANG Feng-yan, ZHOU Lang, SONG Bo, <i>et al.</i> (415)
Potential of Intercropping <i>Pennisetum purpureum</i> Schum with <i>Melia azedarach</i> L. and <i>Broussonetia papyrifera</i> for Phytoremediation of Heavy-metal Contaminated Soil around Mining Areas	WANG Xiao-hui, XIAO Xi-yuan, GUO Zhao-hui, <i>et al.</i> (426)
Inactivation of Cd and As by an <i>Enterobacter</i> Isolated from Cd and As Contaminated Farmland Soil	YIN Xue-fei, LIU Yu-ling, WU De, <i>et al.</i> (436)
Mineralization Characteristics of Soil Organic Carbon and Its Relationship with Organic Carbon Components in Artificial <i>Robinia pseudoacacia</i> Forest in Loess Hilly Region	ZHU Yu-fan, LIU Wei-chao, LI Jia-xin, <i>et al.</i> (444)
Accumulation, Migration, and Transformation of Soil Phosphorus in Facility Agriculture and Its Influencing Factors	FANG Bing, CHEN Lin, WANG Yang, <i>et al.</i> (452)
Optimizing Straw Management to Enhance Carbon and Nitrogen Efficiency and Economic Benefit of Wheat-Maize Double Cropping System	WANG Liang, QIAN Xin, GAO Ying-bo, <i>et al.</i> (463)
Effect of Deep Fertilization with Slow/Controlled Release Fertilizer on N Fate in Clayey Soil Wheat Field	HOU Peng-fu, XUE Li-xiang, YUAN Wen-sheng, <i>et al.</i> (473)
Structure and Function of Soil Fungal Community in Rotation Fallow Farmland in Alluvial Plain of Lower Yellow River	NAN Zhen-wu, LIU Zhu, MENG Wei-wei, <i>et al.</i> (482)
Response of Topsoil Fungal Community Structure to Soil Improvement Measures in Degraded Forest of Red Soil Region	GUAN Hong-zhi, HUANG Rong-zhen, WANG Jin-ping, <i>et al.</i> (494)
Temporal and Spatial Variations in Root-associated Fungi Associated with <i>Pinus sylvestris</i> var. <i>mongolica</i> in the Semi-arid and Dry Sub-humid Desertified Regions of Northern China	ZHAO Pei-shan, GUO Mi-shan, GAO Guang-lei, <i>et al.</i> (502)
QMEC-based Analysis of the Soil Microbial Functional Potentials across Different Tibetan Plateau Glacier Forelands	ZHANG Jie-jie, Anders Priemé, CHEN Xian-ke, <i>et al.</i> (512)
Meta Analysis on Yield Effect of Biochar for Staple Crops in China	YU Bin-hang, JI Jian-mei, WANG Li-xue, <i>et al.</i> (520)
Effects of Biochar on Antibiotic Environmental Behaviors in Soil: A Meta-analysis	LI Jing-han, ZHANG Jian-qiang, XIA Li-qiong, <i>et al.</i> (531)
Properties of Biochars Prepared from Different Crop Straws and Leaching Behavior of Heavy Metals	LI Jia-kang, QIU Chun-sheng, ZHAO Jia-qi, <i>et al.</i> (540)
Spatial-temporal Evolution and Heterogeneity of Carbon Emissions at County-level in China	SONG Yuan-zhen, ZENG Jian, WANG Sen, <i>et al.</i> (549)
Spatiotemporal Dynamic Evolution and Gravity Center Migration of Carbon Emissions in the Main Urban Area of Chongqing over the Past 20 Years	XIANG Shu-jiang, YANG Chun-mei, XIE Yu-qi, <i>et al.</i> (560)
Spatiotemporal Characteristics and Influencing Factors of Environment Emergency Incident in China from 1991 to 2018	YU Guang-hui, WANG Fei-fan, LIU Xian-zhao, <i>et al.</i> (572)
Migration, Transformation, and Toxicity of Quaternary Ammonium Antimicrobial Agents in the Environment	ZHANG Li-jan, QIN Cun-li, QIAN Yao, <i>et al.</i> (583)