

湖州近地面臭氧浓度精细化预报方法研究

邱吉东 尹浩 周之栩 奚雷

(湖州市气象局, 313000)

qjd1991@qq.com

摘要: 本文分析了湖州臭氧浓度的日变化和季节变化特征, 以及臭氧浓度与气温、相对湿度、风速和降雨量之间的相关关系, 运用 BP 神经网络建立了湖州臭氧浓度预报模型, 结合智能网格提供的逐小时气象要素预报, 实现了湖州臭氧 48 小时内逐小时浓度预报, 经检验, 24 小时预报与实况相关性为 0.707, 均方根误差为 41.35, 24 到 48 小时相关性为 0.686, 均方根误差 43.05。

关键词: 臭氧浓度; 精细化预报; 气象因子; BP 神经网络;

0 引言

自湖州启动大气治理工作以来, 空气质量逐年改善, 2017 年 PM_{2.5} 浓度较 2013 年下降了 43.2%, 但空气质量优良率提升幅度仅为 16.4%。据湖州市环境空气质量监测资料分析, 影响湖州空气优良率提升最突出的因素是臭氧超标, 2013 年以来, 在 6 个监测要素中, 除了臭氧以外的其它 5 个要素均有不同幅度的下降, 而臭氧不降反升, 2017 年臭氧浓度较 2013 年反而上升了 15.3%。随着 PM_{2.5} 浓度的逐渐下降, 臭氧污染问题日益突出, 臭氧作为首要污染物的天数整体呈现上升趋势, 由 2013 年的 100 天上升至 2017 年的 158 天, 占比由 27% 上升至 43%, 而且从 2016 年起臭氧作为首要污染物的天数已经超过 PM_{2.5}。臭氧已经逐步成为影响湖州市空气质量优良率的主要因素, 臭氧污染已成为影响湖州生态文明城市形象、影响地区经济发展和影响人民生活水平等负面效应的重要因素。

因此, 分析气象要素与臭氧的关系和规律, 研究湖州市近地面臭氧浓度的精细化预报方法, 提高臭氧浓度预报精度, 是更好地控制臭氧浓度的必然要求, 是建立有效的臭氧污染预警机制、降低臭氧超标对人体及其它生物造成损害的基本前提^[1]。本文利用湖州大气成分监测站臭氧观测资料和湖州国家基本气象站气象观测资料分析, 揭示湖州近地面臭氧浓度变化特征及其与气象因子相关关系, 并建立臭氧精细化预报模型尝试对近地面臭氧浓度进行预报。

1 国内外研究

国外学者对于臭氧的关注和研究早于中国, 在气象因子对臭氧浓度变化的影响方面也做了深入的研究。Nair 等提出地面臭氧浓度的升高与较高的温度和较低的相对湿度有重要关系, 风向和风速的大小将影响到地面臭氧浓度的变化^[2]; C.Duenas 等利用在西班牙的一个海滨城市观测的臭氧浓度数据, 通过建立一个夏季日臭氧浓度与气象参数的回归方程来分析气象要素与臭氧浓度变化的关系^[3]。唐孝炎、张远航等自 90 年代就开始相继研究了不同类型城市臭氧的变化规律及相关影响因素^{[4][5]}; 徐家骝等进行了气象因子对近地面臭氧影响的研究, 提出了大风速对臭氧浓度的重要作用, 并指出温度对近地面臭氧浓度的形成也起到一定的影响^[6]; 陈世俭等研究发现, 近地面臭氧浓度会随着气温的升高而升高; 而湿度增大和降水增多又会降低臭氧浓度^[7]。

2 资料

本文研究所使用的臭氧观测资料为位于湖州城西水厂 (120° 11'E, 30° 86'N) 的大气成分监测站的臭氧浓度数据, 时间为 2014 年 10 月 16 日至 2018 年 12 月 31 日, 时间分辨率为 1h, 经剔除错误和缺测数据, 共可用数据 32984 小时, 用于分析和建模, 以及 2019 年 6 月 11 日至 9 月 30 日, 共计 2181 小时数据用于模型的验证。气象资料来自于湖州国家基本气象站, 包括气温、相对湿度、风速与降水量资料, 观测时间与臭氧观测资料相对应。

3 结果分析

3.1 臭氧浓度的变化特征

李洪权等详细分析了湖州 2013-2015 年的臭氧浓度变化特征及臭氧浓度与五种污染物 (PM_{2.5}、

PM10、NO₂、CO 和 SO₂) 的相关性^[8]。图 1 为湖州臭氧日平均浓度在 2014 年 10 月至 2018 年 12 月的变化，可以看到臭氧浓度呈现明显的季节变化，夏季的浓度最大，春季与秋季大致相当，冬季的浓度最小；臭氧浓度在一天中呈现单峰型变化规律，在 7 时左右出现最小值，在 15 时左右出现最大值，这与之前的研究没有发生大的变化。

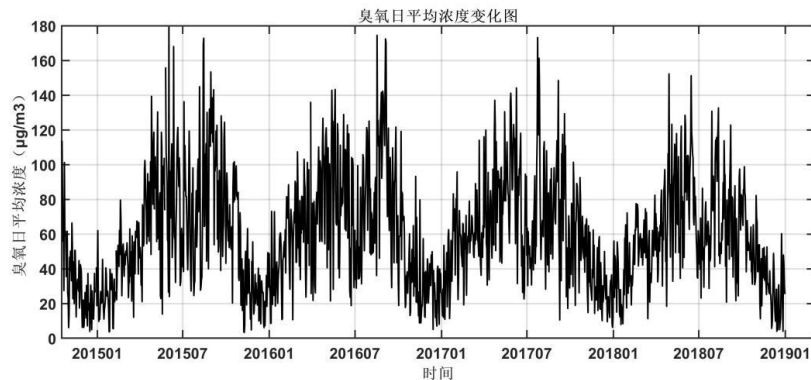


图 1 湖州臭氧日平均浓度变化图

从臭氧月平均浓度变化曲线（图 2）可以看到，臭氧小时平均浓度的月均分布呈双峰型分布趋势。臭氧平均浓度的最高值出现在 5 月和 8 月，分别为 83.35µg/m³ 和 84.84µg/m³，最低值出现在 12 月份，为 22.51µg/m³，高浓度主要集中在 4-9 月份，浓度均保持在 60µg/m³ 以上。季节平均而言，臭氧小时平均浓度呈现了秋季逐渐降低，冬季达到最低，春季升高，夏季达到最高的季节性变化特点。

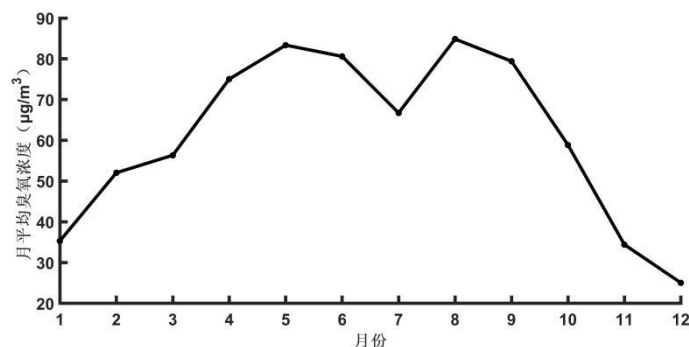


图 2 湖州臭氧 2014 年 10 月-2018 年 12 月月平均浓度变化图

研究发现湖州臭氧小时平均浓度具有明显的日变化特征，由图 3 可见臭氧小时平均浓度的日变化在 24.08-110.13µg/m³ 范围内呈现明显的单峰型分布，其中 7 时最低、16 时最高。臭氧浓度在 6-7 时左右出现一天中的最低值，7 时以后随着太阳紫外线的增强，臭氧的浓度逐渐升高，在下午的 13 -16 时出现明显的峰值，随后臭氧浓度逐渐下降。

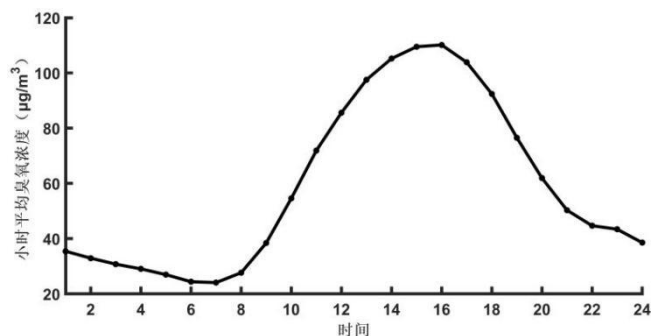


图 3 湖州臭氧 2014 年 10 月-2018 年 12 日日平均浓度变化图

从臭氧浓度的季节性变化和日变化可以看出，臭氧浓度与气温具有非常大的关联性，同时根据国内外的研究进展，本文选用气温、相对湿度、风速与降水量资料作为臭氧浓度预报的变量。从图 4a 中可以看出，臭氧浓度与气温有明显的正相关，在夏季高温时节，臭氧浓度的最大值可以达到 $300\mu\text{g}/\text{m}^3$ 以上，而在冬季低温时节臭氧浓度基本都在 $100\mu\text{g}/\text{m}^3$ 以下，这与臭氧浓度的季节性变化特征是吻合的。

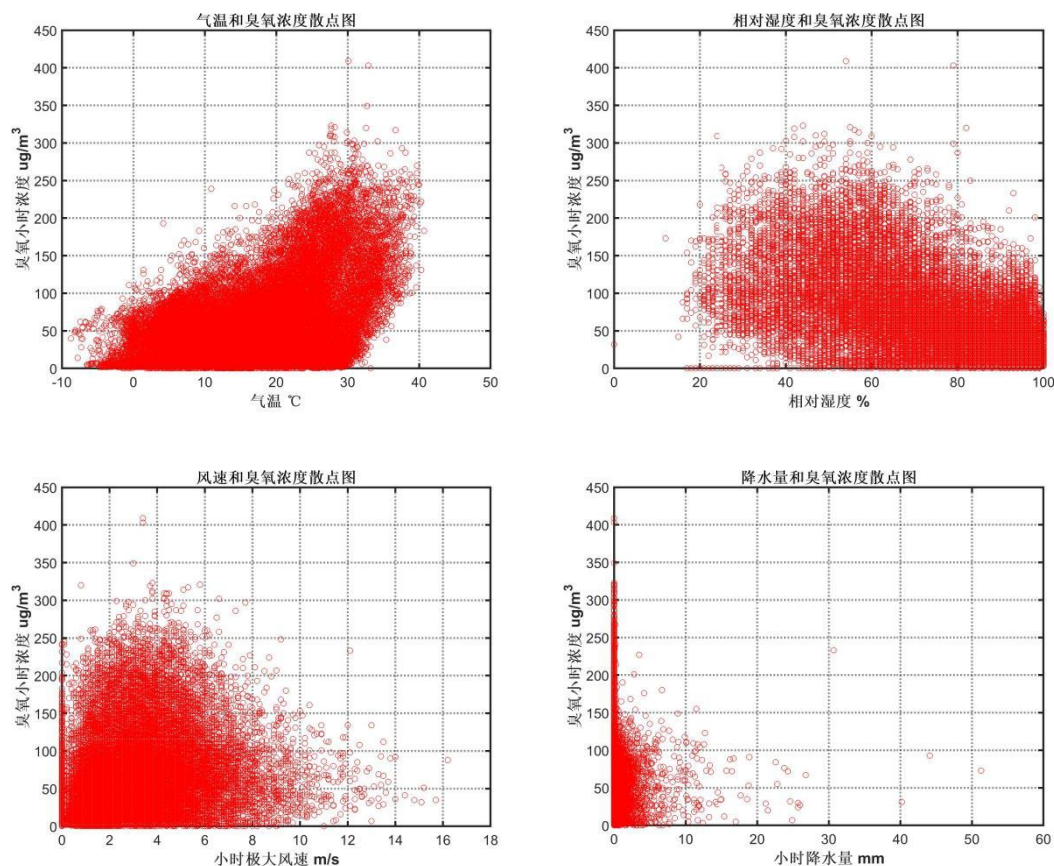


图 4 各气象要素与臭氧浓度散点分布图
(a.温度 b.相对湿度 c.风速 d.降水量)

图 4b 反映了臭氧浓度与相对湿度的关系，臭氧浓度超过 $200\mu\text{g}/\text{m}^3$ 的样本主要分布在相对湿度低于 80% 的区间里，在相对湿度超过 80% 的区间中，臭氧浓度的高值出现明显的回落，在相对湿度接近或达到 100% 时，臭氧浓度的最大值低于 $100\mu\text{g}/\text{m}^3$ 。

图 4c 是风速和臭氧浓度的散点图，当风速在 0 到 4m/s 的区间内时，臭氧浓度的最大值在不断升高，且高浓度的密度也都在增加，当风速超过 4m/s 后，臭氧浓度的最大值随风速的增加是不断减小的，这与徐家骝提出的大风速对臭氧浓度的重要作用不相符。

表 1 为降雨时和无降雨时臭氧小时浓度的统计表，从表中可以看到，在降雨时臭氧浓度是明显偏小的，同时降雨时臭氧浓度的最大值为 $267\mu\text{g}/\text{m}^3$ ，与无降雨时的最大值 $409\mu\text{g}/\text{m}^3$ 相去甚远。同时，图 4d 也反映了降雨量对臭氧浓度变化的影响，在降雨量增加时，臭氧浓度呈现出下降的趋势。臭氧浓度与降雨量的关系从侧面解释了臭氧浓度月平均变化曲线中 6-7 月为何会出现下降趋势，因为 6-7 月份正值江南梅雨季节，受降水影响，臭氧浓度的上升受到一定抑制。

表 1 有无降雨时臭氧浓度的统计分析表

	样本数 (个)	平均值 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	中间值 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	最大值 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
降雨时	4279	46.44	43	267
无降雨时	28705	61.14	48	409

3.2 臭氧浓度预报方法

3.2.1 臭氧浓度预报方法的建立

目前多种方法被应用在臭氧浓度预报中,如主成分分析法、统计回归法、数值模式方法等,这些方法在不同地区的具体研究中都取得了一定的效果,本文则采用了人工神经网络方法。从 3.1 中可知,臭氧浓度和多个因子具有相关关系,且多数为非线性关系,而人工神经网络方法的特点就是处理多因子复杂非线性关系问题,且人工神经网络具有运行速度快,处理效率高的优势。

本文中选用了气温、相对湿度、风速和降水量作为影响臭氧浓度的变量,同时为约束臭氧浓度预报发散度,加入了预报时间(月份、小时)、当月历史平均浓度、该小时历史平均浓度作为自变量。本文使用 BP 神经网络算法作为预报方法建立的基础算法, BP 神经网络算法不需要事前揭示因子间映射关系的数学方程。

通过 MATLAB 软件中神经网络工具箱,建立 BP 神经网络算法,8 个输入变量,10 层隐藏层,并使用贝叶斯回归方法进行拟合,32984 个对应样本,其中 80% 用作模型训练,10% 用作验证,10% 用做测试。如图所示,该方法的训练相关性 0.843,测试相关性 0.835。

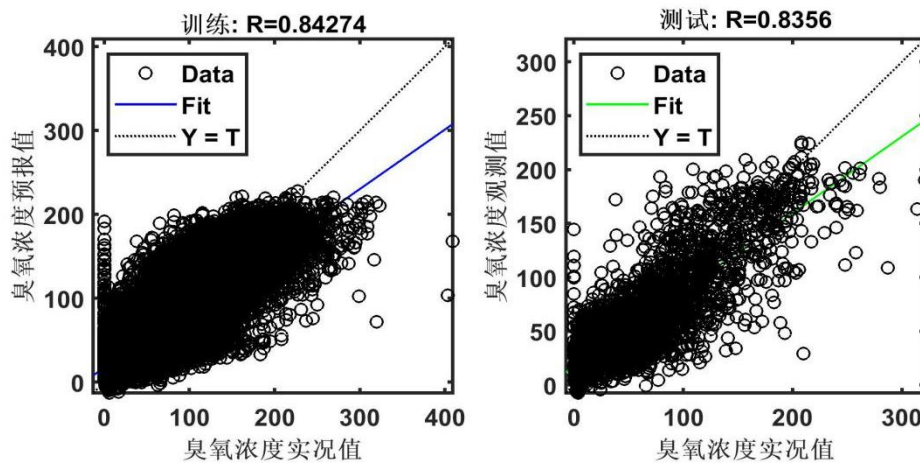


图 5 人工神经网络训练和测试效果图

3.2.2 臭氧浓度预报方法的验证和讨论

本研究将 4.2.1 中通过人工神经网络得到的臭氧浓度预报模型于 2019 年 6 月初投入试预报,每日通过智能网格预报平台中下载 48 小时内逐小时气温、相对湿度、风速和降雨量预报,对未来 48 小时逐小时臭氧浓度进行预报。

图 6 为 2019 年 6 月 11 日至 9 月 30 日 24 小时预报和 24-48 小时预报与实况的对比图,24 小时内预报的相关性为 0.707,均方根误差为 41.35,24-48 小时内预报的相关性为 0.686,均方根误差为 43.05,相较于 24 小时内预报的质量有所下降。当实况值接近于 0 时,预报值偏高明显,在 $0-100\mu\text{g}/\text{m}^3$ 间变化。

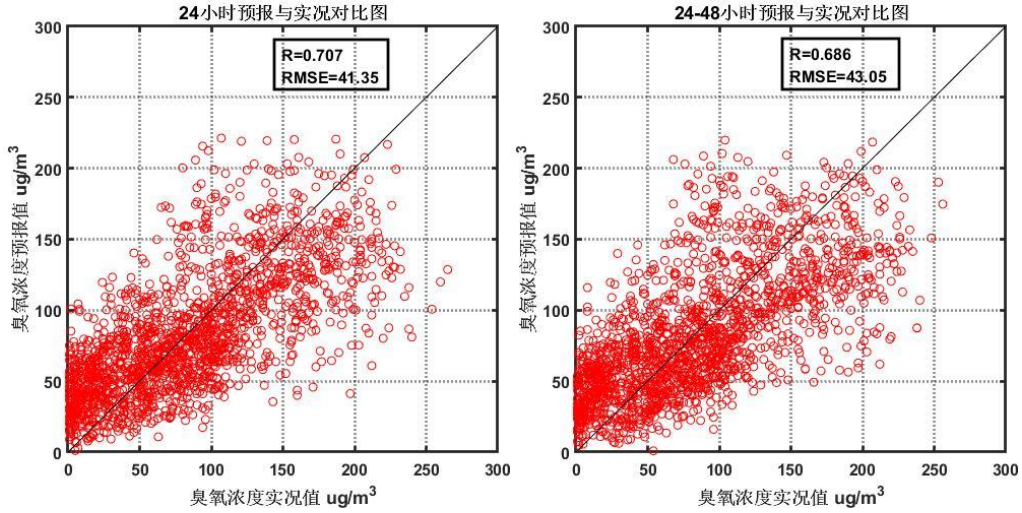


图6 预报与实况对比散点图 (a.24 小时内预报 b.24-48 小时内预报)

在6月12日至9月30日期间湖州经历了梅雨期、高温以及台风的影响，从预报与实况的折线图（图7）可以看到，总的来说，臭氧浓度预报可以反映出每日臭氧浓度的变化。图8反映了6月17日至25日预报与实况的对比，其中18日湖州普降暴雨，湖州站雨量61.9毫米，6月18日臭氧浓度一直处于较低水平，而预报的浓度则偏高（图8a），这可能与无法模拟出强降雨时的低值有关；20-21日湖州普降大到暴雨，湖州站20日雨量46.5毫米，21日雨量86毫米，臭氧浓度亦是出现异常的波动，尽管预报模型反映出了异常（图8a），当时在高低值和趋势上还是有一定的偏差。

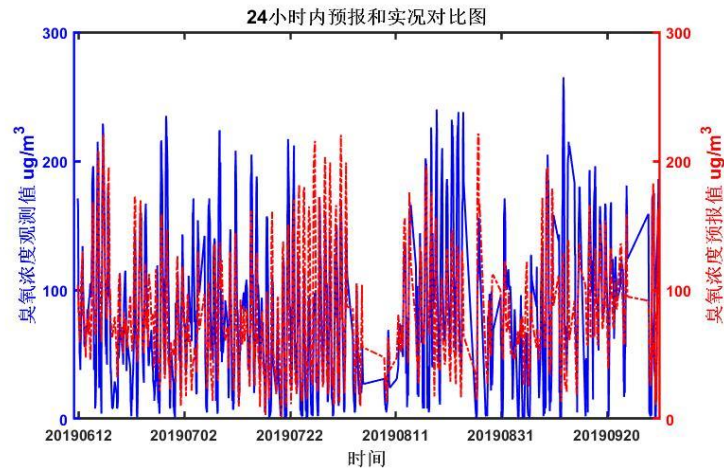


图7 2019年6月12日至9月30日24小时预报与实况对比图

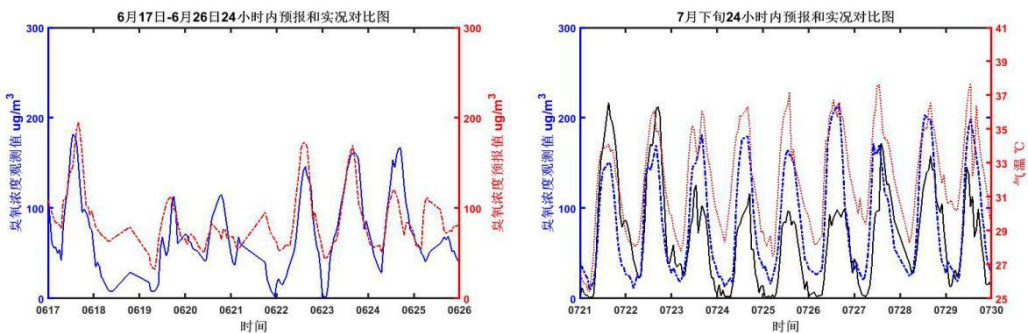


图8 6月17-6月26日 (a) 和7月下旬24小时臭氧浓度预报与实况对比图

在7月下旬梅雨期结束后，湖州出现连续高温晴热天气，极端最高气温37.7℃，平均气温31.9℃；臭

氧的预报值较实况出现明显的偏大，同时 25-26 日的预报在天气形势变化不大的情况下出现较大波动，在查找输入数据后发现，26 日的午后风速预报在 4-6m/s，而 25 日的预报在 3m/s 左右，在温度条件充分的情况下，在预报模型中风速对预报值起到了关键作用，实际上由于副热带高压控制，该时段湖州以静稳天气为主，风速小，臭氧的前置污染物混合困难，抑制了臭氧的生成；27 日气象因子的实况相似，但是臭氧浓度预报值又大幅回落，其原因在于智能网格预报了 27 日有降水出现，在预报模型中降水将会降低臭氧浓度预报。

4 小结

本文分析了湖州臭氧浓度的日变化和季节变化特征，以及臭氧浓度与气温、相对湿度、风速和降雨量之间的相关关系，运用 BP 神经网络建立了湖州臭氧浓度预报模型，结合智能网格提供的逐小时气象要素预报，实现了湖州臭氧 48 小时内逐小时浓度预报。

(1) 臭氧浓度呈现明显的季节变化，夏季的浓度最大，春季与秋季大致相当，冬季的浓度最小；臭氧浓度在一天中呈现单峰型变化规律，在 7 时左右出现最小值，在 15 时左右出现最大值；

(2) 臭氧的生成受到气温、相对湿度、风速和降雨量等气象因子的制约，高温有利于臭氧的生成；相对湿度的增加不利于臭氧的生成；4m/s 左右的风速对臭氧的生成有促进左右；降水对臭氧的生产又存在着抑制作用。由于臭氧的生成是复杂的光化学反应的结果，气象因子对臭氧浓度高低的具体量化共享还有待于深层次的研究；

(3) 运用 BP 神经网络算法建立的臭氧浓度预报模型，实行了湖州臭氧浓度 48 小时内逐小时精细化预报，24 小时内的预报相关性达到 0.707，24 小时至 48 小时预报相关性为 0.686，基本实现了臭氧浓度预报业务化需求；

(4) 臭氧浓度预报模型目前受到气象要素预报准确性的限制，在夏季的检验中存在低值偏大的系统误差有待于解决，同时需要在冬季及春秋季节做进一步检验和改进。

参考文献：

1. 张建磊. 上海市近地层臭氧浓度时间序列混沌预报模式研究[D]. 华东师范大学, 2007.
2. Nair P R, Chand D, Lal S, et al. Temporal variations in surface ozone at Thumba (8.6°N, 77°E)-a tropical coastal site in India[J]. Atmospheric Environment, 2002, 36(4):603-610.
3. Duenas C, M.C Fernández, et al. Assessment of ozone variations and meteorological effects in an urban area in the Mediterranean Coast[J]. Science of the Total Environment, 2002, 299(1-3):97-113.
4. 唐孝炎. 大气环境化学[M]. 北京高等教育出版社, 1990:60-70
5. 张远航,邵可声,唐孝炎,等. 中国城市光化学烟雾污染研究[J]. 北京大学学报(自然科学版), 1998, 34(2).
6. 徐家骝,朱毓秀.气象因子对近地面臭氧污染影响的研究[J].大气科学, 1994, 18(6): 751-757.
7. 陈世俭,童俊超,Kazuhiko K,等. 气象因子对近地面层臭氧质量浓度的影响[J]. 华中师范大学学报:自然科学版, 2005, 39(2): 273-277.
8. 李洪权,杨咏钢,陈中赞,等. 湖州近地面臭氧浓度变化特征分析[J]. 科技通报, 2019(2).

作者简介:

邱吉东, 1991 年 8 月出生, 湖州市气象台助理工程师, 擅长环境气象预报, 594128478@qq.com