范 泽,李昕翼,米家媛,等.成都市气溶胶消光系数多变量解析 [J]. 中国环境科学, 2025,45(11):5941-5949.
Fan Z, Li X Y, Mi J Y, et al. Multivariate analysis of aerosol extinction coefficients in Chengdu City [J]. China Environmental Science, 2025,45(11):5941-5949.

成都市气溶胶消光系数多变量解析

范 泽[1,2],李昕翼[3],米家媛[4],李 娜[1,2],涂朝勇[1,2],倪长健[1,2*] (1.成都信息工程大学大气科学学院,四川 成都 610225；2.成都平原城市气象与环境四川省野外科学观测研究站,四川 成都 610225；3.成都市气象局,四川 成都 611130；4.吉林省气象信息网络中心,吉林 长春 130062)

摘要：基于成都市 2017 年 10~12 月逐时大气能见度和相对湿度观测资料,结合同时次黑碳(BC)、颗粒物(PM)以及二氧化氮(NO_2)质量浓度数据,利用相关性分析、方差膨胀因子法以及 GAM 模型分析了气溶胶消光系数对多因素变化的响应关系.结果表明:气溶胶消光系数的解释变量集包括 $\rho PM_{2.5}$、RH、$\rho BC/\rho PM_{2.5}$、$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$ 和 $\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$($\rho BC$、$\rho PM_1$、$\rho PM_{2.5}$ 和 ρPM_{10} 分别为 BC、PM_1、$PM_{2.5}$ 和 PM_{10} 的质量浓度),各解释变量与气溶胶消光系数均呈现出显著的非线性关系(通过 α=0.001 的显著性检验).相比于传统气溶胶消光系数双变量模型,以 $\rho PM_{2.5}$、RH、$\rho BC/\rho PM_{2.5}$、$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$ 和 $\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$ 为解释变量的气溶胶消光系数多变量 GAM 模型显著提升了对气溶胶消光系数的模拟效果,降低了气溶胶消光系数在高湿气象条件下的模拟偏差.对应轻微、轻度、中度和重度霾,GAM 模型的调整判定系数(R^2)分别为 0.659、0.683、0.738 和 0.938,决定系数(R^2)分别为 0.686、0.737、0.777 和 0.961,平均相对误差(MRE)分别为 0.091、0.041、0.071 和 0.016.上述成果揭示了气溶胶消光系数多因素影响的复杂性及其与霾强度变化的内在联系.

关键词：气溶胶消光系数；解释变量集；广义可加模型；霾；成都
中图分类号：X513 **文献标识码**：A **文章编号**：1000-6923(2025)11-5941-09

Multivariate analysis of aerosol extinction coefficients in Chengdu City. FAN Ze[1,2], LI Xin-yi[3], MI Jia-yuan[4], LI Na[1,2], TU Chao-yong[1,2], NI Chang-jian[1,2*] (1.College of Atmospheric Science, Chengdu University of Information Technology, Chengdu 610225, China；2.Chengdu Plain Urban Meteorology and Environment Observation and Research Station of Sichuan Province, Chengdu 610225, China；3.Chengdu Meteorological Bureau, Chengdu 611130, China；4.Jilin Meteorological Information Network Center, Changchun 130062, China). *China Environmental Science*, 2025,45(11)：5941~5949

Abstract：Using the hourly atmospheric visibility and relative humidity observations in Chengdu from October to December 2017, along with simultaneous data of black carbon (BC), particulate matter (PM), and nitrogen dioxide (NO_2) mass concentrations, the response of aerosol extinction coefficients to the changes of multiple factors was analyzed through correlation analysis, variance inflation factor analysis and the GAM model. The results revealed that the explanatory variable set for aerosol extinction coefficients included $\rho PM_{2.5}$, RH, $\rho BC/\rho PM_{2.5}$, $\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$, and $\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$ (where ρBC, ρPM_1, $\rho PM_{2.5}$, and ρPM_{10} represent the mass concentrations of BC, PM_1, $PM_{2.5}$, and PM_{10}, respectively). Each variable demonstrated a significant nonlinear relationship with aerosol extinction coefficients. Compared to traditional bivariate models, the multivariate GAM model incorporating $\rho PM_{2.5}$, RH, $\rho BC/\rho PM_{2.5}$, $\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$, and $\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$ as explanatory variables significantly improved simulation accuracy, particularly in reducing high-humidity-related biases. The adjusted R^2 values of the GAM models were 0.659, 0.683, 0.738, and 0.938 for slight, light, moderate, and heavy haze conditions, respectively. The coefficient of determination (R^2) values were 0.686, 0.737, 0.777, and 0.961, with mean relative errors (MRE) of 0.091, 0.041, 0.071, and 0.016. The above results revealed the complexity of the multifactorial influence of the aerosol extinction coefficient and its intrinsic relationship with the change of haze intensity.

Key words：aerosol extinction coefficient；explanatory variable dataset；GAM；haze；Chengdu

气溶胶消光系数是指光线在穿过单位长度的气溶胶时所减弱的程度,包括散射消光系数和吸收消光系数[1].作为表征气溶胶光学效应的参数,气溶胶消光系数不仅是环境空气质量优劣的表征,也是大气能见度反演以及大气辐射强迫研究的基础[2-3].

早在 1985 年,美国就实施了 IMPROVE 计划,该项目通过对颗粒物物理、化学和光学参数的长期监测,获得了不同化学组分的消光系数,为能见度的改善提供了基础支撑[4].研究发现[5-6],除化学组分外,颗粒物粒径分布也是大气消光能力的重要影响因子,

收稿日期：2025-03-06
基金项目：国家重点研发计划(2023YFC3709301);四川省科技教育联合基金项目(2024NSFSC1983)
* 责任作者, 教授, ncj1970@163.com

其中细粒子散射消光在大气能见度下降中占有主要地位.由于气溶胶中的硫酸盐、硝酸盐、铵盐和海盐等无机成分及部分有机物具有吸湿性,不同水汽条件下,其密度、质量、粒径、折射率等微物理参数都会发生变化,致使气溶胶粒子群宏观上的物理、化学及光学性质不断改变[7-9].研究表明[10-11],低湿气象条件下气溶胶消光系数的演化主要取决于颗粒物质量浓度的变化,高湿气象条件可促进硫氧化率和氮氧化率,显著提升二次气溶胶的占比,由此凸显气溶胶吸湿对气溶胶消光系数的贡献.上述分析表明,气溶胶消光系数与颗粒物的组分、质量浓度以及气溶胶吸湿增长密切相关,并呈现出复杂的非线性作用关系.

为了系统地评估气溶胶的消光作用,很多研究均尝试建立消光系数与气溶胶各主要化学组分质量浓度间的统计关联[12-13],其中规模最大的就是前述的 IMPROVE 计划.由于气溶胶粒径谱和结构形态的差异,仅仅依靠各化学组分质量浓度预测气溶胶散射系数,在适用性和准确性上都面临着困难[14-15].张智察等[16]将气溶胶等效复折射率和气溶胶粒径吸湿增长因子参数化方案进行耦合,提出了一种计算气溶胶消光系数的新方法,显著提升了成都地区大气能见度的模拟效果.Mie 散射理论虽为气溶胶消光系数计算提供了扎实的理论基础,但存在计算复杂以及计算参数获取难度大等弱点[17].陈一娜等[18]基于细颗粒物质量浓度和相对湿度对气溶胶消光系数的影响,提出了北京地区大气消光系数参数化方案.该方案在一定程度上平衡了计算精度和实用性,但在高湿和重污染条件下的模拟仍有较大的偏差,气溶胶结构和组分等解释因子的缺失可能是其中模拟不确定性的重要来源.

研究表明[19-20],气溶胶等效复折射率和气溶胶吸湿增长因子对颗粒物不同粒径占比以及黑碳老化非常敏感,这一认知为气溶胶消光系数的解析提供了新思路.本文着眼于气溶胶消光系数多因素影响的复杂性,提出并验证了气溶胶消光系数的解释变量集,构建了气溶胶消光系数的多变量广义相加模型(GAM),据此为大气能见度计算精度的提升提供技术支持.

1 资料和方法

1.1 资料处理

资料包括成都市 2017 年 10~12 月逐时大气能见度和相对湿度观测资料,以及同时次黑碳(BC)、颗粒物以及二氧化氮(NO_2)质量浓度数据.文献[21]给出了上述观测设备的参数、布设点位以及数据处理方法,获得的匹配样本合计 1221 个.根据《霾的观测和预报等级》(QX/T113-2010),将上述样本分为轻微霾、轻度霾、中度霾和重度霾,对应的样本量分别为 254 个、132 个、204 个和 43 个.

根据柯西密德(Koschmieder)定律,式(1)给出了利用大气能见度 V_H(km)反演 550nm 波长大气消光系数 K_{ext}(km^{-1})的关系式.

$$K_{ext} = 3.912/V_H \quad (1)$$

大气消光系数是气溶胶消光系数和气体分子消光系数之和,故可利用式(2)计算气溶胶消光系数.

$$K_{aer} = K_{ext} - K_{sg} - K_{ag} \quad (2)$$

式中:K_{aer} 为 550nm 波长处的气溶胶消光系数;K_{sg} 为干洁大气散射系数;K_{ag} 为气态污染物吸收系数;K_{sg} 和 K_{ag} 的计算方案参见文献[22].

1.2 研究方法

GAM 模型具有表征复杂非线性映射的能力,可以估算不同解释变量单一作用以及多种解释变量同时作用对气溶胶消光系数变化的影响效应,本文采用的 GAM 模型形式如下:

$$g(\mu) = \beta + s_1(X_1) + s_2(X_2) + \cdots + s_i(X_i) + \varepsilon \quad (3)$$

式中:$\mu = E(Y/X_1, X_2, X_3, \cdots X_P)$ 是气溶胶消光系数的期望值;$g(\mu)$为连接函数;$s_i(\ )$为表示响应变量和解释变量之间复杂非线性关系的平滑函数,包括样条平滑函数、局部回归平滑函数、自然立方样条函数等.本文采用样条平滑函数,X_i 为解释变量;β 为截距;ε 为残差.在此基础上,利用 gam.check()函数和线性回归法对模型进行检验.

2 结果与讨论

2.1 气溶胶消光系数解释变量集的确定

根据文献[23],550nm 波长处的气溶胶消光系数 K_{aer} 包括三个部分,见式(4).

$$K_{aer} = K_{sp} + K_{ap} + K_{sw} \quad (4)$$

式中:K_{sp}、K_{ap}、K_{sw} 分别为 550nm 波长处干气溶胶散射系数、干气溶胶吸收系数和气溶胶吸湿性消光系数.近年来,笔者团队围绕成都地区气溶胶吸湿性

开展了较为系统的研究,揭示了气溶胶吸湿性对气溶胶尺度比和组分的复杂依存关系.表1给出了K_{sp}、K_{ap}、K_{sw}各自的解释变量.基于表 1 的分析,初步构建了气溶胶消光系数的解释变量集,包括$\rho PM_{2.5}$、RH、ρBC、$\rho BC/\rho PM_{2.5}$、$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$和$\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$共 6 个变量.

表 1　K_{sp}、K_{ap}、K_{sw}的解释变量

Table 1　Explanatory variables of K_{sp}, K_{ap} and K_{sw}

K_{aer}的组分	解释变量	依据
K_{sp}	$\rho PM_{2.5}$、$\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$	参考文献[24−25]
K_{ap}	ρBC	参考文献[26]
K_{sw}	$\rho PM_{2.5}$、RH、ρBC、$\rho BC/\rho PM_{2.5}$、$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$、$\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$	参考文献[27−28]

注: ρPM_1、$\rho PM_{2.5}$和ρPM_{10}分别为PM_1、$PM_{2.5}$和PM_{10}的质量浓度,ρBC为黑碳质量浓度,RH为相对湿度.

为消除解释变量之间可能存在的多重共线性问题,在建模前应检验上述解释变量的独立性[29].依据文献[30],若相关系数的绝对值$|R|>0.7$,则说明对应解释变量间存在高度相关关系.由表 2 可知,$\rho PM_{2.5}$与ρBC的相关系数为 0.912,表明二者之间存在显著的相关性.由于$PM_{2.5}$的质量浓度是影响气溶胶散射消光系数的关键因子,且气溶胶散射消光系数在气溶胶消光系数中占比很高.综合考虑变量的重要性及变量之间的共线性,重新构建了气溶胶消光系数的解释变量集,包括 $\rho PM_{2.5}$、RH、$\rho BC/\rho PM_{2.5}$、$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$ 和 $\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$,新构建的解释变量集中各变量之间的相关系数为 0.079~0.460.需要强调的是,在剔除ρBC时,解释变量集中保留了ρBC的比值信息.

表 2　解释变量的相关系数矩阵

Table 2　Correlation coefficient matrix of explanatory variables

指标	ρBC	RH	$\rho BC/\rho PM_{2.5}$	$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$	$\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$
$\rho PM_{2.5}$	0.912	−0.079	−0.282	−0.456	0.460
ρBC		0.029	0.048	−0.398	0.393
RH			0.339	−0.122	0.131
$\rho BC\rho PM_{2.5}$				0.253	−0.267
$\rho PM_1\rho PM_{2.5}$					−0.187

容差表示某变量不能由模型中其他自变量解释的程度,容差越小说明该自变量与其他自变量的线性关系愈密切,容差的倒数为方差膨胀系数(VIF)[31].统计学研究认为[32],当 VIF 值大于 3 时,说明解释变量间存在严重的多重共线性问题,使所构建的模型参数估计不稳定.表 3 给出了新构建的解释变量集中各解释变量的容差和方差膨胀系数.由表 3 可见,剔除解释变量 ρBC 后,新解释变量集中各解释变量的容差为 0.613~0.766,VIF 为 1.306~1.630.另外,和文献[18]相比,本文确定的解释变量集除保留了 $\rho PM_{2.5}$ 和 RH 之外,还包含了表征气溶胶尺度比和组分的解释变量.因此,重构的气溶胶消光系数解释变量集更加全面地含纳了气溶胶消光系数的影响因素,揭示了气溶胶消光系数多因素影响的复杂性.

表 3　解释变量的多重共线性诊断结果

Table 3　Multicollinearity diagnosis of explanatory variables

解释变量	$\rho PM_{2.5}$	RH	$\rho BC/\rho PM_{2.5}$	$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$	$\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$
容差	0.613	0.766	0.726	0.718	0.704
VIF	1.630	1.306	1.378	1.393	1.420

注: VIF为方差膨胀系数.

2.2　气溶胶消光系数单变量 GAM 模型

利用 GAM 分别构建气溶胶消光系数与$\rho PM_{2.5}$、RH、$\rho BC/\rho PM_{2.5}$、$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$和$\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$的单变量 GAM 模型,结果见表 4.其中,解释变量对应的 F 统计值越大,其重要程度越高;P 值越小,其分析结果越显著;调整判定系数(R^2)为回归平方和与总离差平方和的比值,R^2 越接近 1($0\leqslant R^2\leqslant 1$)表示模型的回归效果越显著;方差解释率(IRV)值越大,模型拟合效果越佳.此外,解释变量的自由度可表明影响因素和响应变量之间的连接函数,自由度为 1 时两者呈线性关系,自由度大于 1 时两者呈非线性关系.

表 4　气溶胶消光系数单变量 GAM 模型拟合结果

Table 4　Fitting results of univariate GAM of aerosol extinction coefficient

变量	$\rho PM_{2.5}$	RH	$\rho BC/\rho PM_{2.5}$	$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$	$\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$
估计自由度	7.185	2.996	4.039	5.027	3.581
参考自由度	8.25	3.753	5.081	6.206	4.55
F 值	122.3	80.9	6.372	177.7	37.44
P 值	$<2\times10^{-16***}$	$<2\times10^{-16***}$	$7.64\times10^{-6***}$	$<2\times10^{-16***}$	$<2\times10^{-16***}$
R^2	0.452	0.199	0.0246	0.475	0.123
IRV	45.5%	20.1%	2.78%	47.7%	12.6%

注: R^2为调整后的判定系数; *、**和***分别表示通过α=0.05、α=0.01和α=0.001水平显著性检验,下同.

基于表 4 的分析可知,(1)$\rho PM_{2.5}$、RH、$\rho BC/\rho PM_{2.5}$、$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$和$\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$是气溶胶消光系数的解释变量(均通过 α=0.001 的显著性检验);(2)$\rho PM_{2.5}$、RH、$\rho BC/\rho PM_{2.5}$、$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$和$\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$的参考自由度均大于 1,即气溶胶消光系数与$\rho PM_{2.5}$、RH、$\rho BC/\rho PM_{2.5}$、$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$和$\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$均呈现出非线性关系.上述结果表明,除$\rho PM_{2.5}$和 RH 之外,$\rho BC/\rho PM_{2.5}$、$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$和$\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$也是影响气溶胶消光系数的重要因素,由此进一步确认了气溶胶消光系数的解释变量集.

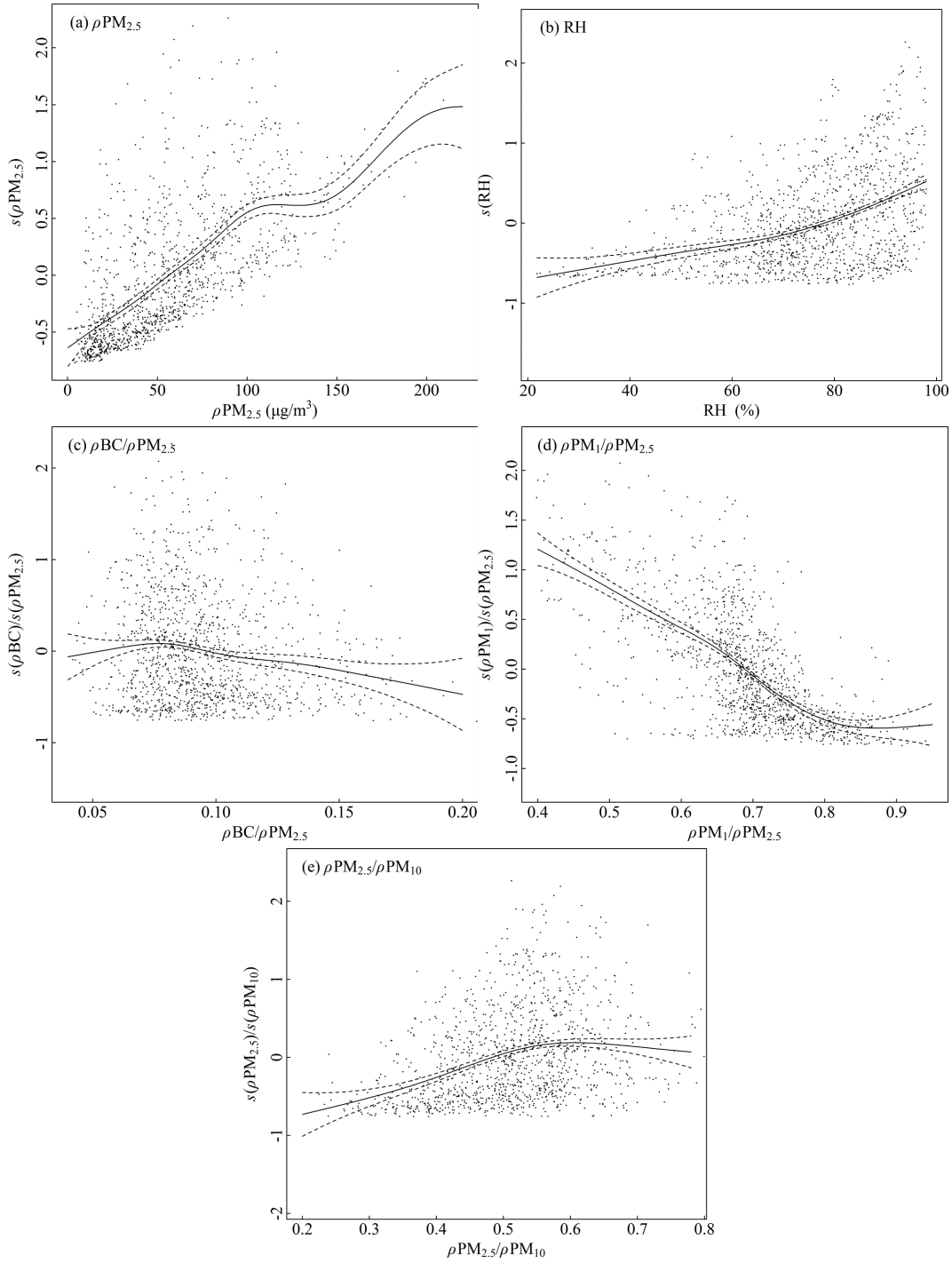


图 1 解释变量对气溶胶消光系数的影响

Fig.1 Effects of explanatory variables on the aerosol extinction coefficient

为展示气溶胶消光系数对多因素变化的非线性响应关系,分别绘制了$\rho PM_{2.5}$、RH、$\rho BC/\rho PM_{2.5}$、

$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$ 和 $\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$ 对气溶胶消光系数的影响曲线,见图 1.由图 1(a)可见,气溶胶消光系数与 $PM_{2.5}$ 之间呈现出正相关关系,在 $\rho PM_{2.5}$<100.0μg/m^3 的条件下,气溶胶消光系数随 $PM_{2.5}$ 的增加显著增大;当 $\rho PM_{2.5}$>100.0μg/m^3 后,气溶胶消光系数随 $PM_{2.5}$ 的增加趋于平缓;在 $\rho PM_{2.5}$>150.0μg/m^3 的条件下,气溶胶消光系数随 $PM_{2.5}$ 的增加上升趋势明显增强.由图 1(b)可见,气溶胶消光系数与 RH 之间也呈现出正相关关系,在 RH<80%的条件下,气溶胶消光系数随 RH 的增加呈现出弱上升趋势;在 RH>80%的条件下,气溶胶消光系数随 RH 的增加呈明显上升趋势.RH 为 80%是相对湿度对气溶胶消光系数影响的临界点,该临界点与刘新罡等[8]的研究结果基本一致.由图 1(c)可见,在 $\rho BC/\rho PM_{2.5}$<0.08 的条件下,气溶胶消光系数随 $\rho BC/\rho PM_{2.5}$ 的增加总体呈弱上升趋势;在 $\rho BC/\rho PM_{2.5}$>0.08 的条件下,气溶胶消光系数随 $\rho BC/\rho PM_{2.5}$ 的增加则呈下降趋势.统计结果表明,研究时段内 $\rho BC/\rho PM_{2.5}$ 为 0.094±0.024.因此,气溶胶消光系数随 $\rho BC/\rho PM_{2.5}$ 的增加呈下降趋势总体代表了 $\rho BC/\rho PM_{2.5}$ 对气溶胶消光系数的实际影响.研究发现[23],研究区气溶胶散射消光系数是气溶胶消光系数的主体,并与二次气溶胶的浓度密切相关,故 $\rho BC/\rho PM_{2.5}$ 的增加有利于气溶胶消光系数的降低.进一步研究指出[33],新鲜排放的黑碳气溶胶一般不具有吸湿性,但黑碳老化则能提升黑碳气溶胶的消光能力,这是 $\rho BC/\rho PM_{2.5}$ 影响气溶胶消光系数不确定性的重要来源.由图 1(d)可见,在 $\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$<0.83 的条件下,气溶胶消光系数随 $\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$ 的增加呈下降趋势;在 $\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$>0.83 的条件下,气溶胶消光系数随 $\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$ 的增加则呈现出上升趋势.由图 1(e)可见,在 $\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$<0.63 的条件下,气溶胶消光系数随 $\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$ 的增加呈明显上升趋势;在 $\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$>0.63 的条件下,气溶胶消光系数随 $\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$ 的增加的变化趋于平缓.气溶胶消光系数具有高维性和随机性等诸多复杂特征,图 1 分区段统计结果虽存在一定的不确定性,但客观反映了气溶胶消光系数与各变量之间的非线性关系,并为后续气溶胶消光系数多因素解析奠定基础.

2.3　气溶胶消光系数多变量 GAM 模型

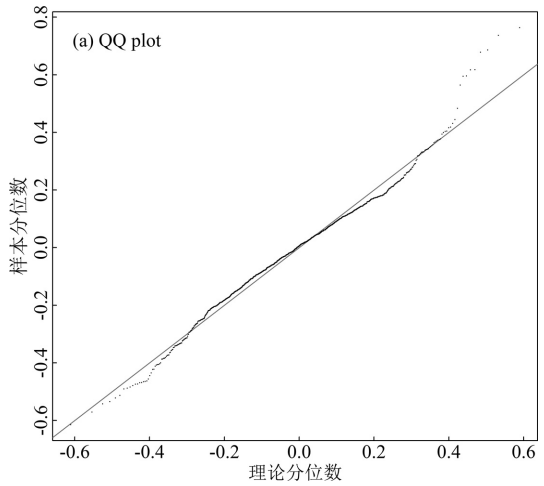
基于解释变量集进一步构建了气溶胶消光系数多变量 GAM 模型,见表 5.由表 5 可见:(1) $\rho PM_{2.5}$、RH、$\rho BC/\rho PM_{2.5}$、$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$ 和 $\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$ 与气溶胶消光系数具有极高的统计显著性,可用于解释气溶胶消光系数的复杂变化(通过 α=0.001 的显著性检验);(2)各变量对气溶胶消光系数的影响程度由高到低依次为 $\rho PM_{2.5}$>RH>$\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$>$\rho BC/\rho PM_{2.5}$>$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$,其中 $\rho PM_{2.5}$ 和 RH 的影响尤为显著;(3)气溶胶消光系数多变量 GAM 模型调整判定系数(R^2)为 0.908,方差解释率 IRV 为 93.7%,模型拟合效果较好.综上,气溶胶消光系数的变化受 $\rho PM_{2.5}$、RH、$\rho BC/\rho PM_{2.5}$、$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$ 和 $\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$ 多因素的协同影响,存在高维、非线性、不确定性和复杂性等特点.

表 5　气溶胶消光系数多变量 GAM 模型的拟合结果

Table 5　Fitting results of multivariate GAM of aerosol extinction coefficient

变量	$\rho PM_{2.5}$	RH	$\rho BC/\rho PM_{2.5}$	$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$	$\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$
估计自由度	7.483	8.767	6.279	6.935	8.580
参考自由度	8.458	8.983	7.471	8.064	10.447
F 值	628.343	571.259	29.593	9.695	42.483
P 值	$<2\times10^{-16***}$	$<2\times10^{-16***}$	$<2\times10^{-16***}$	$<2\times10^{-16***}$	$<2\times10^{-16***}$
R^2				0.908	
IRV				93.7%	

利用 gam.check()函数对 GAM 模型进行残差检验,评估气溶胶消光系数多变量 GAM 模型的拟合优度及其假设的适用性,见图 2.由图 2(a)可见,QQ 图中的散点基本位于 $y=x$ 直线上,可认为样本数据来自正态分布总体;由图 2(b)可见,残差在“0”附近的频率较高,且呈现出接近正态分布的趋势,进一步验证了气溶胶消光系数多变量 GAM 模型的可靠性.



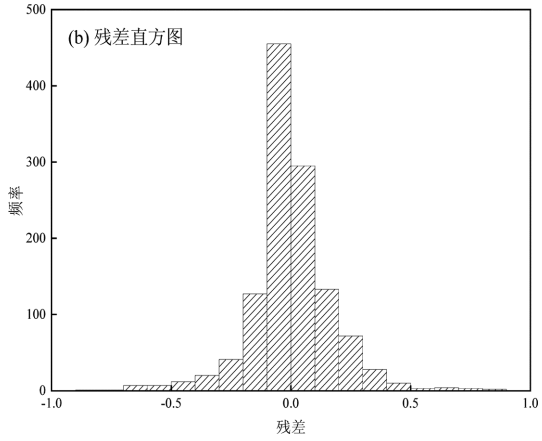


图 2 气溶胶消光系数多变量 GAM 模型残差检验结果

Fig.2 Residual test results of multivariate GAM model of aerosol extinction coefficient

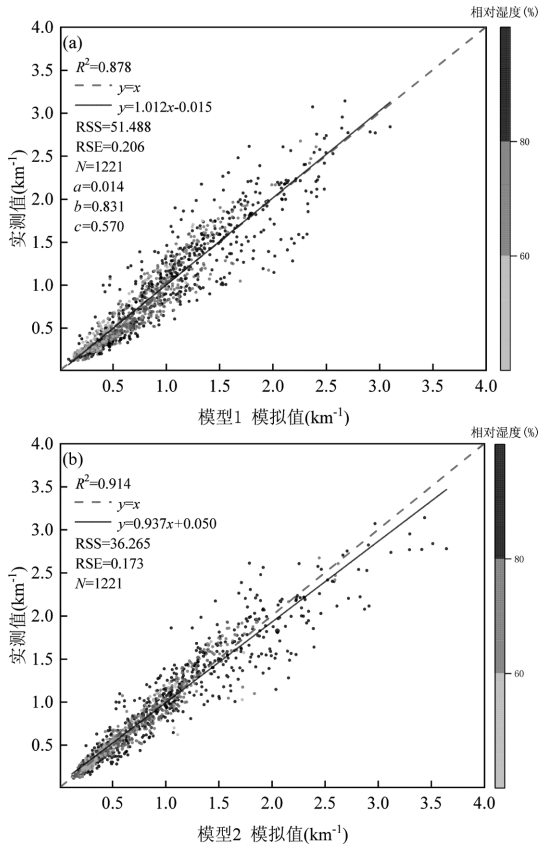


图 3 气溶胶消光系数模拟值和测量值的散点图

Fig.3 Scatter plot of simulated and measured aerosol extinction coefficient

a:模型 1; b: 模型 2

根据文献[18],气溶胶消光系数双变量回归模型见式(5).

$$K_{\mathrm{aer}} = a \cdot \mathrm{M}^{b} \times \left(1 - \mathrm{RH}/100\right)^{-c \times \mathrm{RH}/100} \quad (5)$$

式中:K_{aer} 为气溶胶消光系数($\mathrm{Mm^{-1}}$);M 为 $\rho\mathrm{PM}_{2.5}$($\mu\mathrm{g/m^3}$);RH 为相对湿度(%).为方便起见,将气溶胶消光系数双变量回归模型和气溶胶消光系数多变量($\rho\mathrm{PM}_{2.5}$、RH、$\rho\mathrm{BC}/\rho\mathrm{PM}_{2.5}$、$\rho\mathrm{PM}_1/\rho\mathrm{PM}_{2.5}$ 和 $\rho\mathrm{PM}_{2.5}/\rho\mathrm{PM}_{10}$)GAM 模型分别称为模型 1 和模型 2.由于模型拟合值和观测值为随机变量,故本文选用线性回归法(OLS)来评估气溶胶消光系数参数化模型和气溶胶消光系数多变量 GAM 模型的适用性,见图 3.由图 3 可见,模型 1 和模型 2 的决定系数(R^2)分别为 0.878 和 0.914,对应的残差平方和(RSS)分别为 51.488 和 36.265,残差标准误差(RSE)分别为 0.206 和 0.173.模型 1 和模型 2 拟合结果的对比表明,模型 2 除考虑 $\rho\mathrm{PM}_{2.5}$ 和 RH 对气溶胶消光系数的影响外,进一步引入了 $\rho\mathrm{BC}/\rho\mathrm{PM}_{2.5}$、$\rho\mathrm{PM}_1/\rho\mathrm{PM}_{2.5}$ 和 $\rho\mathrm{PM}_{2.5}/\rho\mathrm{PM}_{10}$ 等解释变量,基于新解释变量集的 GAM 模型显著提升了对气溶胶消光系数的解释能力,降低了气溶胶消光系数在高湿气象条件下的模拟偏差,为气溶胶消光系数的表征提供了方法论.

表 6 不同霾强度条件下气溶胶消光系数多变量 GAM 模型的拟合结果

Table 6 Fitting results of multivariate GAM model of aerosol extinction coefficient under different haze intensities

霾强度	平滑效应项	F	P	R^2	方差解释率 IRV
轻微	$\rho\mathrm{PM}_{2.5}$	91.119	$<2\times10^{-16}$***	0.659	68.7%
	RH	52.443	$<2\times10^{-16}$***		
	$\rho\mathrm{BC}/\rho\mathrm{PM}_{2.5}$	10.866	$<2\times10^{-16}$***		
	$\rho\mathrm{PM}_1/\rho\mathrm{PM}_{2.5}$	2.526	0.0192*		
	$\rho\mathrm{PM}_{2.5}/\rho\mathrm{PM}_{10}$	11.718	$<2\times10^{-16}$***		
轻度	$\rho\mathrm{PM}_{2.5}$	26.213	$<2\times10^{-16}$***	0.683	73.7%
	RH	13.647	$<2\times10^{-16}$***		
	$\rho\mathrm{BC}/\rho\mathrm{PM}_{2.5}$	3.547	0.00158**		
	$\rho\mathrm{PM}_1/\rho\mathrm{PM}_{2.5}$	11.699	$<2\times10^{-16}$***		
	$\rho\mathrm{PM}_{2.5}/\rho\mathrm{PM}_{10}$	12.197	2.17×10^{-7}***		
中度	$\rho\mathrm{PM}_{2.5}$	29.235	$<2\times10^{-16}$***	0.738	77.8%
	RH	38.132	$<2\times10^{-16}$***		
	$\rho\mathrm{BC}/\rho\mathrm{PM}_{2.5}$	10.866	$<2\times10^{-16}$***		
	$\rho\mathrm{PM}_1/\rho\mathrm{PM}_{2.5}$	2.079	0.0397*		
	$\rho\mathrm{PM}_{2.5}/\rho\mathrm{PM}_{10}$	7.334	$<2\times10^{-16}$***		
重度	$\rho\mathrm{PM}_{2.5}$	8.912	1.41×10^{-5}***	0.938	96.2%
	RH	43.558	$<2\times10^{-16}$***		
	$\rho\mathrm{BC}/\rho\mathrm{PM}_{2.5}$	8.285	0.00789**		
	$\rho\mathrm{PM}_1/\rho\mathrm{PM}_{2.5}$	4.059	0.00658**		
	$\rho\mathrm{PM}_{2.5}/\rho\mathrm{PM}_{10}$	5.576	0.00924**		

气溶胶理化过程及其与边界层的相互作用是霾天气多尺度过程的重要组成部分.将霾强度分为轻微霾、轻度霾、中度霾和重度霾,进一步探讨了气溶胶消光系数多变量 GAM 模型在不同霾强度条件

下的适用性,见表 6.由表 6 可见:(1)不同霾强度条件下，$\rho PM_{2.5}$、RH、$\rho BC/\rho PM_{2.5}$、$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$ 和 $\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$ 对气溶胶消光系数均有显著影响(通过 α=0.05 的显著性检验);(2)由 F 统计值可知,$\rho PM_{2.5}$、RH 是影响气溶胶消光系数最重要的两个变量，$\rho PM_{2.5}$ 相对于 RH 的重要性随霾强度的增加而降低,这与文献[11]的结论一致,凸显气溶胶吸湿对灰霾演化的重要作用;(3)由调整判定系数(R^2)可知,轻微、轻度、中度和重度霾强度条件下,多变量 GAM 模型的 R^2 分别为 0.659、0.683、0.738 和 0.938,表明多变量 GAM 模型的拟合效果随霾强度的增加逐渐提升;(4)由方差解释率(IRV)可知,轻微、轻度、中度和重度霾强度条件下,多变量 GAM 模型的 IRV 分别为 68.7%、73.7%、77.8%和 96.2%,表明多变量 GAM 模型的解释能力随霾强度的增加逐渐增强,这与文献[27−29]针对气溶胶吸湿性的研究结论一致,相关机制另文探讨.

采用压轴回归法(RMA)对不同霾强度条件下气溶胶消光系数多变量 GAM 模型的拟合效果进行评估,见图 4.由图 4 可见,在轻微、轻度、中度和重度霾强度条件下,模型的决定系数(R^2)分别为 0.686、0.737、0.777 和 0.961,平均相对误差(MRE)分别为 0.091、0.041、0.071 和 0.016,显示出气溶胶消光系数多变量 GAM 模型拟合精度随霾强度增强而提高的趋势.另外,采用 RMA 评估不同环境空气质量条件下气溶胶消光系数多变量 GAM 模型的拟合效果,优、良、轻度污染和中重度污染条件下,模型的决定系数(R^2)分别为 0.823、0.885、0.931 和 0.947,平均相对误差(MRE)分别为 0.283、0.172、0.084 和 0.083.这一结果进一步验证了气溶胶消光系数多变量 GAM 模型的适用性,明确了环境气象条件变化对该模型模拟效果的影响.

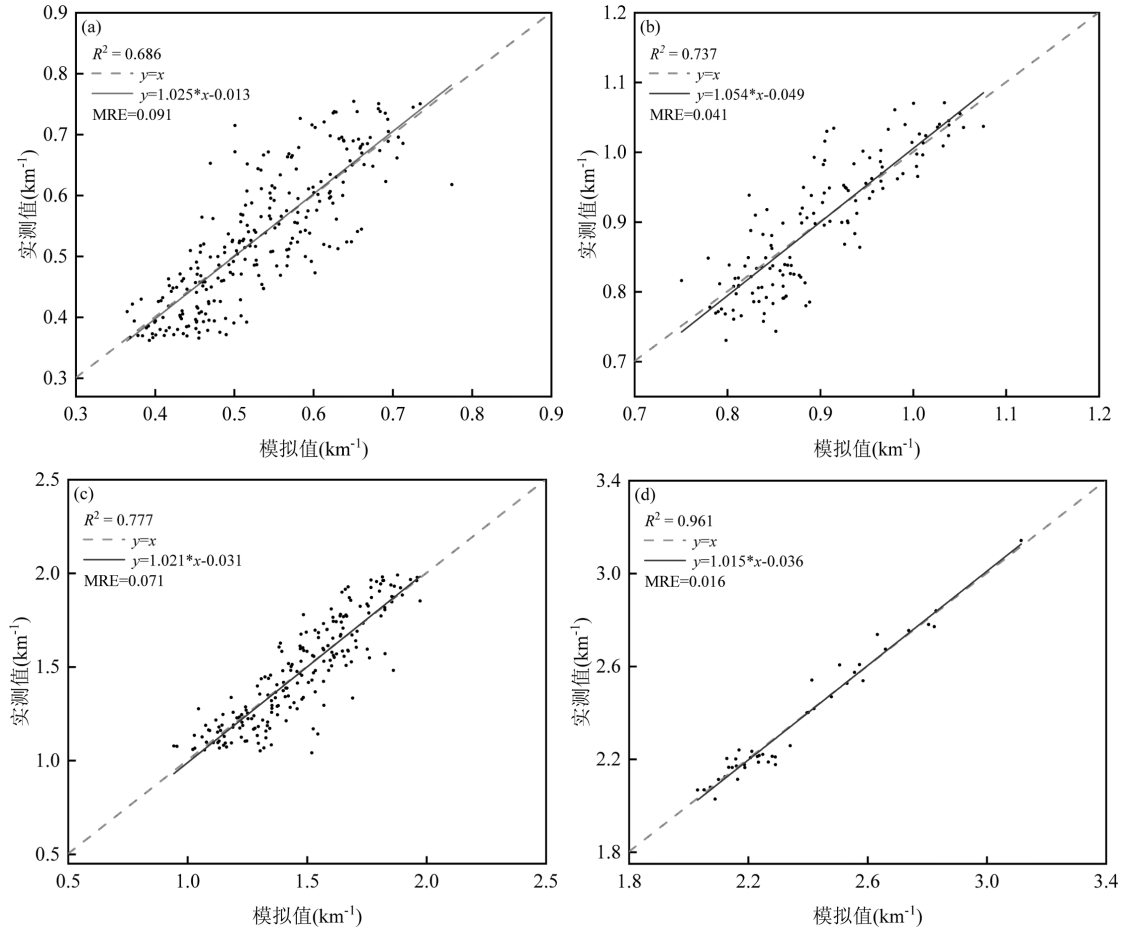


图 4　不同霾强度条件下气溶胶消光系数多变量 GAM 模型的检验结果

Fig.4　Test results of multivariate GAM model of aerosol extinction coefficients under different haze intensities

a:轻微; b:轻度; c:中度; d:重度

3 结论

3.1 $\rho PM_{2.5}$、RH、$\rho BC/\rho PM_{2.5}$、$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$ 和 $\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$ 共同构成了气溶胶消光系数的解释变量集,这表明除 $PM_{2.5}$ 质量浓度和相对湿度(RH)外,$\rho BC/\rho PM_{2.5}$、$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$ 和 $\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$ 也是气溶胶消光系数的重要影响因子,揭示了气溶胶消光系数多因素影响的复杂性.

3.2 GAM 模型具有表征复杂非线性映射的能力,以 $\rho PM_{2.5}$、RH、$\rho BC/\rho PM_{2.5}$、$\rho PM_1/\rho PM_{2.5}$ 和 $\rho PM_{2.5}/\rho PM_{10}$ 为解释变量的气溶胶消光系数多变量 GAM 模型显著降低了传统气溶胶消光系数双变量非线性回归模型的模拟偏差,GAM 模型为气溶胶消光系数多因素影响的数学表征提供了新途径.

3.3 灰霾的演化是气溶胶消光系数多变量 GAM 模型模拟不确定性的重要来源,GAM 模型对气溶胶消光系数的解释能力随霾强度的增加而增强.

参考文献:

[1] 张小曳.中国大气气溶胶及其气候效应的研究 [J]. 地球科学进展, 2007,(1):12-16.
Zhang X Y. Aerosol over China and their climate effect [J]. Advances In Earth Science, 2007,(1):12-16.

[2] 韦莲芳,杨复沫,谭吉华,等.大气气溶胶消光性质的研究进展 [J]. 环境化学, 2014,33(5):705-715.
Wei L F, Yang F M, Tan J H, et al. Research progress on aerosol extinction properties [J]. Environmental Chemistry, 2014,33(5):705-715.

[3] 李学彬,徐青山,魏合理,等.气溶胶消光系数与质量浓度的相关性研究 [J]. 光学学报, 2008,(9):1655-1658.
Li X B, Xu Q S, Wei H L, et al. Study on relationship between extinction coefficient and mass concentration [J]. Acta Optica Sinica, 2008,(9):1655-1658.

[4] Pitchford M, Maim W, Schichtel B, et al. Revised algorithm for estimating light extinction from IMPROVE particle speciation data [J]. Journal of the Air & Waste Management Association, 2007,57(11): 1326-1336.

[5] 姚婷婷,黄晓锋,何凌燕,等.深圳市冬季大气消光性质与细粒子化学组成的高时间分辨率观测和统计关系研究 [J]. 中国科学:化学, 2010,40(8):1163-1171.
Yao T T, Huang X F, He L Y, et al. High time resolution observation and statistical analysis of atmospheric light extinction properties and the chemical speciation of fine particulates [J]. Scientia Sinica Chimica, 2010,40(8):1163-1171.

[6] 宋 宇,唐孝炎,张远航,等.北京市大气能见度规律及下降原因 [J]. 环境科学研究, 2003,(2):10-12.
Song Y, Tang X Y, Zhang Y H, et al. The study of the status and degradation of visibility in Beijing [J]. Research of Environmental Sciences, 2003,(2):10-12.

[7] 张智察,倪长健,张城语,等.气溶胶粒径吸湿增长与散射吸湿增长的关系 [J]. 中国环境科学, 2020,40(12):5198-5204.
Zhang Z C, Ni C J, Zhang C Y, et al. Relationship between particle size hygroscopic growth and scattering hygroscopic growth [J]. China Environmental Science, 2020,40(12):5198-5204.

[8] 刘新罡,张远航.大气气溶胶吸湿性质国内外研究进展 [J]. 气候与环境研究, 2010,15(6):808-816.
Liu X G, Zhang Y H. Advances in research on aerosol hygroscopic properties at home and abroad [J]. Climatic and Environmental Research, 2010,15(6):808-816.

[9] Pilinis C, Seinfeld J H, Grosjean D. Water content of atmospheric aerosols [J]. Atmos. Environ., 1989,23:1601-1606.

[10] 刘 凡,谭钦文,江 霞,等.成都市冬季相对湿度对颗粒物浓度和大气能见度的影响 [J]. 环境科学, 2018,39(4):1466-1472.
Liu F, Tan Q W, Jiang X, et al. Effect of relative humidity on particulate matter concentration and visibility during winter in Chengdu [J]. Environmental Science, 2018,39(4):1466-1472.

[11] Chen J, Zhao C S, Ma N, et al. Aerosol hygroscopicity parameter derived from the light scattering enhancement factor measurements in the North China Plain [J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2014, 14(15):8105-8118.

[12] Xu J, Bergin M H, Yu X, et al. Measurement of aerosol chemical, physical and radiative properties in the Yangtze delta region of China [J]. Atmospheric Environment, 2002,36(2):161-173.

[13] Liu X G, Cheng Y F, Zhang Y H, et al. Influences of relative humidity and particle chemical composition on aerosol scattering properties during the 2006 PRD campaign [J]. Atmospheric Environment, 2008, 42(7):1525-1536.

[14] Cui H, Wang J, Liu T, et al. Spatial and seasonal patterns of dissolved organic matter hydrophobicity in Lake Taihu revealed by the aqueous two-phase system [J]. Science of the Total Environment, 2021,776.

[15] Lowenthal D H, Rogers C F, Saxena P, et al. Sensitivity of estimated light extinction coefficients to model assumptions and measurement errors [J]. Atmospheric Environment, 1995,29(7):751-766.

[16] 张智察,倪长健,赵军平,等.耦合气溶胶双参数化方案的大气能见度数值改进算法 [J]. 中国环境科学, 2021,41(11):5009-5018.
Zhang Z C, Ni C J, Zhao J P, et al. An improved numerical algorithm for simulating atmosphere visibility by coupling two aerosol parameterization schemes [J]. China Environmental Science, 2021, 41(11):5009-5018.

[17] Ma N, Zhao C S, Nowak A, et al. Aerosol optical properties in the North China Plain during HaChi campaign: an in-situ optical closure study [J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2011,11(12):5959-5973.

[18] 陈一娜,赵普生,何 迪,等.北京地区大气消光特征及参数化研究 [J]. 环境科学, 2015,36(10):3582-3589.
Chen Y N, Zhao P S, He D, et al. Characteristics and parameterization for atmospheric extinction coefficient in Beijing [J]. Environmental Science, 2015,36(10):3582-3589.

[19] 张智察,倪长健,汤津赢,等.“干”气溶胶等效复折射率与其质量浓度指标的相关性研究 [J]. 光学学报, 2019,39(5):17-24.

Zhang Z C, Ni C J, Tang J Y, et al. Correlation between equivalent complex refraction index of "dry" aerosol and its mass concentration index [J]. Acta Optica Sinica, 2019,39(5):17−24.

[20] 米家媛,李　娜,佟景哲,等.气溶胶粒径吸湿增长因子的机器学习模型 [J]. 中国环境科学, 2024,44(2):638−645.
Mi J Y, Li N, Tong J Z, et al. Machine learning models for aerosol particle size hygroscopic growth factor [J]. China Environmental Science, 2024,44(2):638−645.

[21] 佟景哲,倪长健,杜云松,等.成都气溶胶散射吸湿增长因子多变量影响分析 [J]. 生态与农村环境学报, 2022,38(5):636−644.
Tong J Z, Ni C J, Du Y S, et al. Impact analysis of multivariable of aerosol scattering hygroscopic growth factor in Chengdu [J]. Journal of Ecology and Rural Environment, 2022,38(5):636−644.

[22] Sloane C S, Wolff G T. Prediction of ambient light scattering using a physical model responsive to relative humidity: validation with measurements from Detroit [J]. Atmospheric Environment, 1985,19(4): 669−680.

[23] 杨寅山,倪长健,邓　也,等.成都市冬季大气消光系数及其组成的特征研究 [J]. 环境科学学报, 2019,39(5):1425−1432.
Yang Y S, Ni C J, Deng Y, et al. Characteristics of atmospheric extinction coefficient and its components in winter in Chengdu [J]. Acta Scientiae Circumstantiae, 2019,39(5):1425−1432.

[24] Cheng Y F, Eichler H, Wiedensohler A, et al. Mixing state of elemental carbon and non−light−absorbing aerosol components derived from in situ particle optical properties at Xinken in Pearl River Delta of China [J]. Journal of Geophysical Research−Atmospheres, 2006,111(D20).

[25] 刘新罡,张远航,曾立民,等.广州市大气能见度影响因子的贡献研究 [J]. 气候与环境研究, 2006,(6):733−738.
Liu X G, Zhang Y H, Zeng L M, et al. Research on the influential factor of visibility reduction in Guangzhou [J]. Climatic and Environmental Research, 2006,(6):733−738.

[26] 黄聪聪,马　嫣,郑　军.南京冬季气溶胶光学特性及黑碳光吸收增强效应 [J]. 环境科学, 2018,39(7):3057−3066.
Huang C C, Ma Y, Zheng J. Aerosol optical properties and light absorption enhancement of EC during wintertime in Nanjing [J]. Environmental Science, 2018,39(7):3057−3066.

[27] 佟景哲,米家媛,涂朝勇,等.霾过程黑碳对气溶胶散射吸湿增长的影响 [J]. 中国环境科学, 2024,44(9):4835−4843.
Tong J Z, Mi J Y, Tu C Y, et al. Black carbon during haze processes impact on aerosol scattering hygroscopic growth [J]. China Environmental Science, 2024,44(9):4835−4843.

[28] 佟景哲,倪长健,米家媛,等.气溶胶散射吸湿增长因子的BP神经网络模型 [J]. 环境工程, 2023,41(7):131−137.
Tong J Z, Ni C J, Mi J Y, et al. A BP neural network model of aerosol scattering hygroscopic growth factor [J]. Environmental Engineering, 2023,41(7):131−137.

[29] 米家媛,邓　也,李昕翼,等.霾过程气溶胶吸湿参数变化的多因素影响分析 [J]. 中国环境科学, 2025,45(3):1210−1217.
Mi J Y, Deng Y, Li X Y, et al. Multifactorial impact analysis of aerosol hygroscopic parameters during haze process [J]. China Environmental Science, 2025,45(3):1210−1217.

[30] Mukaka M M. A guide to appropriate use of correlation coefficient in medical research [J]. Malawi Medical Journal, 2012,24(3):69−71.

[31] 安俊琳,王跃思,朱　彬.主成分和回归分析方法在大气臭氧预报的应用—以北京夏季为例 [J]. 环境科学学报, 2010,30(6):1286−1294.
An J L, Wang Y S, Zhu B. Principal component and multiple regression analysis predicting ozone concentrations: Case study in summer in Beijing [J]. Acta Scientiae Circumstantiae, 2010,30(6): 1286−1294.

[32] Tu J, Xia Z, Wang H, et al. Temporal variations in surface ozone and its precursors and meteorological effects at an urban site in China [J]. Atmospheric Research, 2007,85(3/4):310−337.

[33] 谭天怡,郭　松,吴志军,等.老化过程对大气黑碳颗粒物性质及其气候效应的影响 [J]. 科学通报, 2020,65(36):4235−4250.
Tan T Y, Guo S, Wu Z J, et al. Impact of aging process on atmospheric black carbon aerosol properties and climate effects [J]. Chinese Science Bulletin, 2020,65(36):4235−4250.

作者简介：范　泽(2001−),女,吉林长春人,成都信息工程大学硕士研究生,主要从事大气物理学与大气环境方面研究.1040920134@qq.com.