

龚宇,李婷苑,沈劲,等.利用臭氧探空数据评估卫星及再分析资料在粤港澳地区的适用性[J].中国环境科学,2025,45(4):1858-1868.

Gong Y, Li T Y, Shen J, et al. Assess the applicability of satellite and reanalysis data in the Greater Bay Area based on ozonesonde measurements [J]. China Environmental Science, 2025,45(4):1858-1868.

利用臭氧探空数据评估卫星及再分析资料在粤港澳地区的适用性

龚宇^{1,2},李婷苑^{1,2*},沈劲³,陈靖扬^{1,2}(1.广东省生态气象中心(珠三角环境气象预报预警中心),广东 广州 510640; 2.广东省南岭森林大气环境与碳中和野外科学观测研究站,广东 广州 511443; 3.广东省生态环境监测中心,国家环境保护区域空气质量监测重点实验室,广东省环境保护大气二次污染研究重点实验室,广东 广州 510308)

摘要: 基于 2022~2023 年粤港澳地区臭氧(O₃)探空观测资料,分析 O₃ 浓度垂直分布特征变化趋势,并结合自组织映射神经网络(SOM)分型方法,评估了 Aqua 卫星大气红外探测器(AIRS)O₃ 垂直廓线产品以及 ERA5 再分析资料的 O₃ 垂直廓线产品在粤港澳地区的适用性.结果表明:①粤港澳地区 O₃ 垂直分布季节性差异较为显著,春夏秋冬呈单峰分布结构,峰区分别位于 700, 950 和 300hPa 附近,秋季呈双峰分布结构,峰区位于 925 和 400hPa 附近.站点间差异较小,广东省各站点与香港站点的 O₃ 廓线年平均偏差介于-3.2%~11.0%之间.②对流层内秋冬季 AIRS 和 ERA5 数据质量好于春夏季.850~200hPa,AIRS 和 ERA5 数据质量相对较好,各季节相对平均偏差(Rad)平均值分别介于 16.5%~25.8%和 15.1%~25.7%之间,相关系数(*r*)平均值分别介于 0.47~0.75 和 0.23~0.74 之间;而在 850hPa 以下,AIRS 和 ERA5 数据质量相对较差,AIRS 数据略好于 ERA5 数据,Rad 平均值分别为 31.6%和 40.9%,*r* 平均值分别为 0.34 和 -0.15.③将 O₃ 垂直分布分为 5 型,其中,AIRS 与 ERA5 资料在 1 型分布结构下数据质量最好,而在 2 型和 3 型分布结构下数据质量最差.1 型在秋冬季出现频率较高(分别为 43%和 61%),2 型和 3 型在夏季出现频率较高(共 66%),4 型和 5 型在春季出现频率较高(共 85%).

关键词: 粤港澳; 臭氧(O₃); 大气红外探测器(AIRS); ERA5; 评估; 自组织映射神经网络(SOM)

中图分类号: X511 文献标识码: A 文章编号: 1000-6923(2025)04-1858-11

Assess the applicability of satellite and reanalysis data in Guangdong-Hongkong-Macao regions based on ozonesonde measurements. GONG Yu^{1,2}, LI Ting-yuan^{1,2*}, SHEN Jin³, CHEN Jing-yang^{1,2} (1.Guangdong Ecological Meteorological Centre, Pearl River Delta Center for Environmental Meteorology Prediction and Warning, Guangzhou 510640, China; 2.Guangdong Provincial Observation and Research Station for Atmospheric Environment and Carbon Neutrality in Nanling Forests, Guangzhou 511443, China; 3.Key Laboratory of Regional Air Quality Monitoring, Guangdong Environmental Protection Key Laboratory of Secondary Air Pollution Research, Guangdong Ecological Environmental Monitoring Center, Guangzhou 510308, China). *China Environmental Science*, 2025,45(4): 1858~1868

Abstract: Based on the ozonesonde data in Guangdong, Hong Kong, and Macao regions from 2022 to 2023, the vertical distribution characteristics of O₃ concentration were analyzed, and the applicability of Aqua satellite AIRS O₃ vertical profile product and ERA5 reanalysis O₃ vertical profile product were evaluated by using self-organizing map neural network (SOM) method. The vertical distribution of O₃ in the Greater Bay Area exhibited significant seasonal variations. In spring, summer, and winter, the ozone vertical distribution displayed a unimodal structure, with peak concentrations located near 700, 950, and 300 hPa, respectively. In contrast, the vertical distribution in autumn showed a bimodal structure, with peaks near 925 and 400hPa. The vertical differences in O₃ between stations were relatively small, with deviations between Guangdong and Hong Kong stations ranging from -3.2% to 11.0%. The quality of AIRS and ERA5 data in autumn and winter within the troposphere was better than that in spring and summer. At 850~200hPa, both AIRS and ERA5 data showed relatively good quality, with seasonal relative average deviations (Rad) ranging from 16.5% to 25.8% for AIRS and 15.1% to 25.7% for ERA5. The average correlation coefficients (*r*) for the seasons ranged from 0.47 to 0.75 for AIRS and 0.23 to 0.74 for ERA5. Below 850 hPa, the quality of AIRS and ERA5 data was relatively bad, with average value of *r* were 0.34 and -0.15. The vertical distribution of O₃ was categorized into 5 types. Among these, the data quality of AIRS and ERA5 was best under the type 1 distribution structure, while it was worst under the type 2 and type 3 structures. Type 1 occurred more frequently in autumn (43%) and winter (61%), whereas type 2 and type 3 were more common in summer (66%).

收稿日期: 2024-10-08

基金项目: 广东省基础与应用基础研究基金项目(2023A15110536);广东省科技计划项目(2024B1212040006);广东省重点研发计划项目(2020B1111360003);中国气象局青年创新团队项目(CMA2023QN13);广东省气象局软科学项目(Z202304);广东省气象局科学技术研究项目(GRMC2022Q10)

* 责任作者, 高级工程师, l-tiny@163.com

Type 4 and type 5 occurred more frequently in spring (85%).

Key words: Guangdong-Hongkong-Macao regions; ozone (O_3); Atmospheric Infrared Sounder (AIRS); ERA5; assess; self-organizing map neural networks (SOM)

臭氧(O_3)和细颗粒物是对流层大气中的重要污染物,近年来随着大气污染综合治理力度的加大,国内 $PM_{2.5}$ 浓度总体呈下降趋势,各地空气质量大幅改善^[1-4].广东省 $PM_{2.5}$ 已多年达到世卫组织第二阶段标准,但是 O_3 浓度一直居高不下,自 2015 年起 O_3 取代颗粒物成为影响全省空气质量指数(AQI)达标率的最关键因素^[5-6],当前臭氧污染过程在珠江三角洲特大城市群频繁发生^[7-10].

O_3 作为一种高反应性温室气体,可通过辐射强迫影响气候,近地面高浓度 O_3 对植被作物的生长和人类健康都会构成威胁^[11-16].研究发现地表臭氧污染与对流层臭氧变化密切相关,粤港澳属热带和亚热带季风气候,同处于高空东、西风系交替影响过渡区,温带、热带各类天气活动频繁,影响着对流层内臭氧的形成、积累、沉积和输送,全面了解对流层 O_3 浓度垂直分布对于解析南方地区高臭氧污染过程成因具有重要意义^[17-20].当前, O_3 垂直浓度观测仪器被广泛应用于获取地面至平流层区域内的 O_3 浓度廓线,主要有探空气球、激光雷达平台(地基、机载、星载)、微波辐射计等^[21-26].其中,探空气球观测因其探测高度高、可靠性强、灵敏度和垂直分辨率高等优势,被广泛应用于 O_3 浓度垂直特征分析、传输机制研究以及对其他垂直探测资料验证^[27-32],但是由于 O_3 探空其成本较高且对气球放空地点选址苛刻等诸多因素,很难进行大面积布点观测.而卫星观测和再分析产品虽然垂直分辨率和灵敏度不及探空观测,但其具备数据获取便捷、覆盖全球等优势,弥补了 O_3 探空在时间和空间上不连续的缺陷,通常在没有探空站点的地区或探空观测数据缺失的时段,卫星和再分析产品往往是较为常用的 O_3 浓度垂直分布来源^[33-35].

尽管如此,借助卫星、再分析数据研究对流层臭氧仍存在固有的局限性,卫星数据因其测量技术和反演算法实现细节(例如光谱数据和算法模型参数的选择)会对反演结果产生较大影响^[36-38].Zhang 等^[39]利用北京地区探空数据评估多种卫星臭氧垂直廓线产品,结果表明卫星反演结果与臭氧探空廓

线整体较为接近,但均存在局部高度处差异较大的问题.再分析资料对于大气成分再分析数据集约束对流层臭氧变化的能力以及对不同数据来源对流层臭氧含量的差异性缺乏研究,影响数据质量^[40-41].Katragkou 等^[42]利用再分析资料对欧洲地面臭氧进行研究,发现近地面臭氧在冬季呈现负偏差,在暖季呈现正偏差.

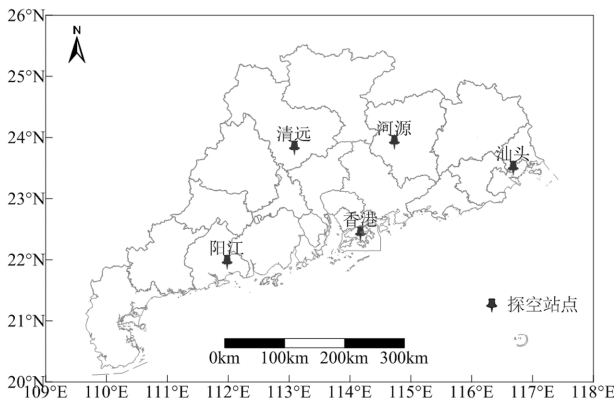
目前为止,卫星及再分析臭氧产品的评估研究多是针对欧洲地区^[43-44],中国区域由于缺乏较长序列垂直观测数据,相关评估工作仍较为稀缺,国内研究也多集中在中北部地区,在华南地区适用性评估尚未得到深入的探索.针对上述问题,本文借助粤港澳地区探空站点 O_3 浓度垂直资料对 Aqua 卫星大气红外探测器(AIRS) O_3 浓度垂直廓线产品、ERA5 再分析 O_3 浓度垂直廓线产品进行了比较,评估小时产品在 100hPa 以下各高度范围的探测效果,有助于更好了解 AIRS 和 ERA5 O_3 浓度垂直廓线产品在粤港澳地区的适用性,为完善粤港澳地区 O_3 三维监测、提高空气污染预报能力和制定空气质量政策提供支撑.

1 资料与方法

1.1 O_3 探空观测

探空观测是当前常用的高灵敏度、高分辨率 O_3 浓度垂直探测手段^[45],研究所使用的探空站点分别位于广东阳江、广东清远、广东河源、广东汕头和香港京士柏(图 1),所处位置基本等距分布于粤港澳四方位及中心区域.

各站点气球探测时间均在北京时间 12:00 时前后,探测高度可达 35km.广东省四站点 O_3 探空观测垂直分辨率约为 5m,各站点约 4d 开展一次探空观测;香港 O_3 探空垂直分辨率为 10m,约一周进行一次探空观测.选取 2022 年 10 月至 2023 年 10 月 5 个探空站点共 293 组探空数据,各站点详细数据情况见表 1.采用探空观测数据评估对流层内卫星和再分析数据在粤港澳地区的适用性,中国大陆对流层顶气压大概在 100hPa 附近^[46],因此设定对比高度范围为 1000~100hPa.

图1 粤港澳 O₃ 探空站点分布Fig.1 Distribution of O₃ sounding stations in Guangdong, Hong Kong, and Macao

审图号:GS(2020)4814

表1 粤港澳 O₃ 探空频次信息Table 1 O₃ sounding frequency in Guangdong, Hong Kong, and Macao

季节	香港	清远	河源	汕头	阳江	总量
春	14	17	21	18	19	89
夏	13	20	18	18	23	92
秋	12	23	16	11	18	80
冬	12	4	7	4	5	32
合计	51	64	62	51	65	293

1.2 卫星和再分析数据

AIRS(<https://disc.gsfc.nasa.gov/>)是太阳同步轨道卫星 Aqua 上的传感器之一,与高级微波探测装置(AMSU)和巴西湿度探测仪(HSB)相结合,共同构成了一个由可见光、红外和微波传感器组成的创新型大气探测组块,可提供大气温度、痕量气体以及地表和云特性的三维信息.研究使用第 7 版本的 3 级 AIRS O₃ 浓度垂直廓线产品,AIRS 使用地方时 13:30 的数据,水平分辨率为 1°×1°,垂直方向上从 1000~1hPa 共 24 层,其中 100hPa 高度以下共计 12 层(即 1000, 925, 850, 700, 600, 500, 400, 300, 250, 200, 150 和 100hPa),AIRS 卫星 O₃ 监测数据被广泛应用于各类痕量气体的月季尺度垂直分布特征变化分析,是目前科研业务常用的 O₃ 卫星产品之一^[47-48].

ERA5(<https://cds.climate.copernicus.eu/cdsapp#!>)再分析数据是欧洲中期天气预报中心(ECMWF)制作的第五代全球气候再分析数据集,可提供大气、海浪和陆地表面等参数的小时数据产品.ERA5 产品融合了许多 O₃ 卫星观测结果,其 O₃ 的分布格局和趋势较为可靠.本研究使用 ERA5 再分析数据集的 O₃

质量浓度小时数据产品,水平分辨率为 0.25°×0.25°,垂直方向上气压范围为 1000~1hPa,共计 37 层,其中 100hPa 高度以下共 27 层,为保持检验高度和观测时间的一致性,本研究使用北京时间 12:00 时的再分析数据结果,垂直浓度层选择与 AIRS 产品相对应的 12 层气压高度.

1.3 使用方法

(1)评估方法:以探空数据作为标准值,采用距离最近原则挑选与探空站点经纬度最近的卫星和再分析格点作为匹配点位,使用相对平均偏差(Rad)、相关系数(r)检验 AIRS 和 ERA5 产品的性能,计算方法如下:

$$\text{Rad} = \sum_{i=1}^n \frac{|Y_i - X_i|}{nX_i} \quad (1)$$

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}} \quad (2)$$

式中: Y_i 为被检验数据,即 AIRS 和 ERA5 O₃ 浓度数据, X_i 为探空数据, n 为数据总组数.Rad 值越小,表明被检验数据与探空数据间的 O₃ 浓度差越小.

(2)分型方法:在对 O₃ 浓度垂直结构分类时,采用自组织映射神经网络(SOM)聚类算法.与其他聚类算法相比,SOM 算法的优点是拓扑固定,聚类节点之间排列较为规则,即相似的节点距离较近,差异较大的节点距离较远^[49-50],SOM 代码源自 MATLAB SOM 工具箱,该工具箱可从芬兰赫尔辛基理工大学免费获得(<http://www.cis.hut.fi/projects/somtoolbox/>).与其他分型方法一样,SOM 分型也需要事先指定聚类数目,本研究使用链接网络概念来确定 O₃ 浓度垂直分布类型的数目范围^[51].

2 结果与讨论

2.1 O₃ 浓度垂直分布特征及对比评估

图 2 给出了各探空站点 O₃ 浓度四季及全年的垂直分布特征,可以看到,各站点 O₃ 浓度垂直分布特征的差异相对较小,站点间 O₃ 浓度分布一致性高,广东省四站点与香港站点 O₃ 浓度廓线年平均偏差分别为 11.0%(清远)、1.6%(河源)、0.6%(汕头)、-3.2%(阳江).在季节变化上 O₃ 浓度垂直分布差异性较为显著,冬春季 O₃ 浓度随高度升高而波动上升,O₃ 浓度垂直分布

呈单峰型.除清远外,春季各站点在 700hPa 附近存在峰区,峰区峰值介于 145~165 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 之间;冬季各站点峰区大约出现在 400~250hPa 之间,峰区峰值介于 120~145 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 之间.夏季 O_3 浓度垂直分布亦呈单峰型,850hPa 高度以下, O_3 浓度相对较高,清远站点峰区最为明显,峰区峰值出现在 950hPa 高度附近,各站点

峰值浓度差异较大,介于 75~140 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 之间;秋季 O_3 浓度垂直分布呈双峰型,与夏季相比,秋季 850hPa 以下 O_3 峰区更为明显,各站点峰区峰值均位于 925hPa 高度附近(峰值介于 95~125 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 之间),此外对流层上层 500~200hPa 也出现 O_3 峰区,峰区峰值均位于 400hPa 附近(峰值介于 125~150 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 之间).

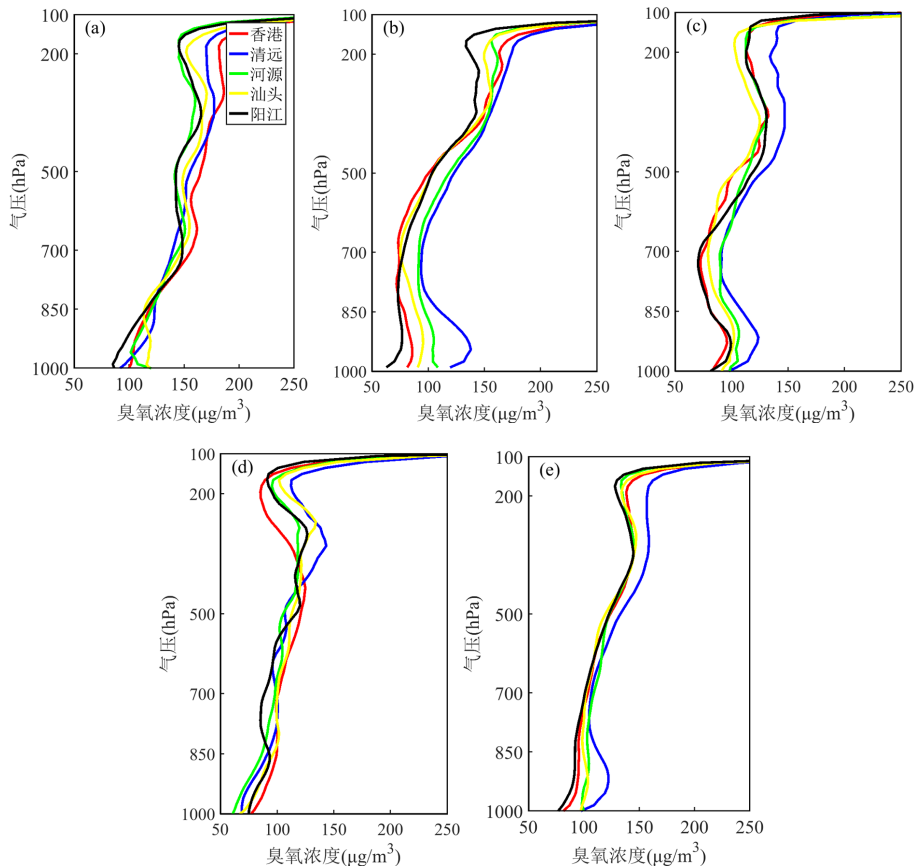


图2 各探空站点 O_3 季节性分布

Fig.2 Seasonal distribution of O_3 at sounding stations

(a)春季;(b)夏季;(c)秋季;(d)冬季;(e)全年

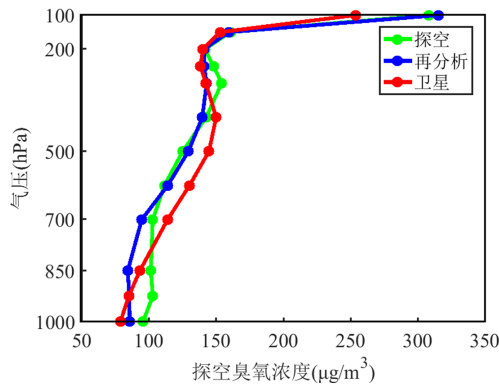


图3 O_3 探空和卫星 AIRS、再分析 ERA5 的平均 O_3 浓度廓线比较

Fig.3 Comparison of average O_3 concentration profiles between O_3 sounding and AIRS, ERA5

对比 AIRS、ERA5 与探空数据的差异,如图 3 所示为探空、卫星 AIRS 和再分析 ERA5 的平均 O_3 浓度廓线比较,AIRS 和 ERA5 数据在 850hPa 以下 O_3 浓度普遍偏低,700~300hPa,AIRS 始终呈现较大的 O_3 浓度值,而 ERA5 则与探空结果较为接近,从 300hPa 到对流层顶,AIRS 和 ERA5 的 O_3 浓度再次出现低估的情况,AIRS 资料的对比结果和 Zhang 等^[39]在北京探空站点得出的 AIRS 卫星资料与探空资料 O_3 浓度廓线对比结果一致.另外,从图 4 探空与对应时段 AIRS、ERA5 数据的对比散点图也可以看到, O_3 浓度小于 200 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 时,各组散点近似集中在浓度 1:1 轴附近,不存在明显偏斜倾向,但当 O_3 浓度大

于 $200\mu\text{g}/\text{m}^3$ 时,AIRS 数据出现明显低估情况,100hPa 以下所有时段所有高度累积有效数据共 2956 组,卫星遥感资料与探空资料的 Rad 值和 r 值分别为 24%和 0.77,总体略优于 ERA5 的再分析资料 (Rad=26%、 $r=0.75$).

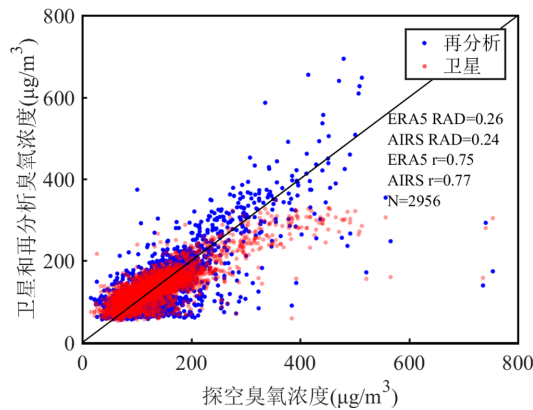


图4 探空与对应时段卫星 AIRS、再分析 ERA5 数据比对 (直线为浓度 1:1 轴)

Fig.4 Comparison of sounding data with AIRS and ERA5 data (the straight line represents the 1:1 concentration axis)

2.2 O₃ 垂直浓度时空对比评估

为进一步了解 AIRS、ERA5 各高度层 O₃ 浓度资料在不同季节下的数据质量,图 5 给出了不同季节下 AIRS、ERA5 与探空数据的比对结果.

可见,AIRS 和 ERA5 资料均在秋季 r 值较高、冬春季 Rad 值较小,850hPa 以上 r 平均值较高.与其余高度相比,850hPa 以下四个季节 AIRS、ERA5O₃ 资料与探空 O₃ 资料的偏差较大,相关性较小,Rad 平均值分别为 31.6%和 40.9%, r 平均值分别为 0.34 和 -0.15.850hPa 以下大气运动受地表动力热力影响较大,是湍流混合、对流活动的主要发生区域,O₃ 浓度受气象条件、前体物排放等诸多复杂因素影响,垂直分布形势多变,加之卫星遥感在近地面信号强度受限,导致产品适用性较差.对于 850~200hPa 高度,产品评估结果明显优于 850hPa 以下的评估结果,AIRS 和 ERA5 资料在秋冬季各高度层的表现相对优于春夏季,各季节 Rad 平均值分别介于 16.5%~25.8%和 15.1%~25.7%之间, r 平均值分别介于 0.47~0.75 和 0.23~0.74 之间.在对流层顶 (200~100hPa),整体上看 Rad 值有所增大相关性降低,观测资料在对流层顶适用性转差.此外,AIRS 资料与探空资料的 Rad 值在夏秋季 700~500hPa 高度

和秋冬季 200~100hPa 高度均出现明显偏高情况,但 r 值也对应较大,说明 AIRS 资料虽然与探空结果浓度值存在较大偏差,但仍可较好地表征 O₃ 浓度变化趋势.

再从 AIRS 与 ERA5O₃ 浓度廓线资料评估结果的差值比对来看(图 5c、5f,红色代表 AIRS 资料优于 ERA5 资料的区域,蓝色则 ERA5 资料较优),AIRS 资料略优于 ERA5 资料.850hPa 以下,AIRS 资料全面优于 ERA5 资料,AIRS 资料 Rad 值较小、 r 值较高.850hPa 以上,各季节产品优势评估相对复杂:春季 AIRS 资料整体较优,仅部分高度 Rad 值略高于 ERA5 资料;夏季 400~100hPa 高度,AIRS 资料偏差小相关性高,适用性优于 ERA5 资料,其余高度 AIRS 产品相关性高但偏差较大;秋冬季 600~200hPa 高度,ERA5 产品较优,其余高度 ERA5 产品虽偏差较小但相关性较低.

为了解产品在不同地区各高度层的适用性,图 6 给出了不同站点下 AIRS、ERA5 资料与探空资料的 Rad 值和 r 值垂直分布图.可以看到,AIRS 产品各站点 Rad 值在 11.0%~46.1%之间、 r 值在 0.09~0.88 之间,不同站点间偏差与相关性特征较为相似.各站点在 1000~900, 700~500, 200hPa 高度均出现 Rad 大值区,该范围内各站点 Rad 值在 20.7%~46.1%之间;800~350hPa 高度均为高相关性区域,该范围内各站点相关系数均在 0.5 以上.对于 ERA5 产品,研究时段内香港站点的评估结果较差,除 500~200hPa 数据质量相对一般外(Rad 值 13.0%~26.0%、 r 值 0.14~0.54),其余高度上 Rad 值在 30%以上, r 值接近 0.不同于香港站点,清远、河源、汕头、阳江 4 站点 ERA5 与探空的 Rad 值和 r 值分布特征则较为一致,850hPa 以下各站点 Rad 值较大, r 值较小,850hPa 以上除河源站点在 300hPa 相关性较小外,其余站点偏差小(Rad 值 10.5%~28.6%),相关性高(r 值 0.41~0.91).

进一步比对 AIRS 与 ERA5 评估结果差异(图 6c、6f),与季节对比结果相似,850hPa 以下,AIRS 产品全面优于 ERA5 产品,850hPa 以上各站点产品优势评估较为复杂.对于香港站点,850hPa 以上 AIRS 产品较优,而清远、河源、汕头、阳江站点 850hPa 以上总体呈现 Rad 值 ERA5 产品较小而相关性 AIRS 产品较高的情况.

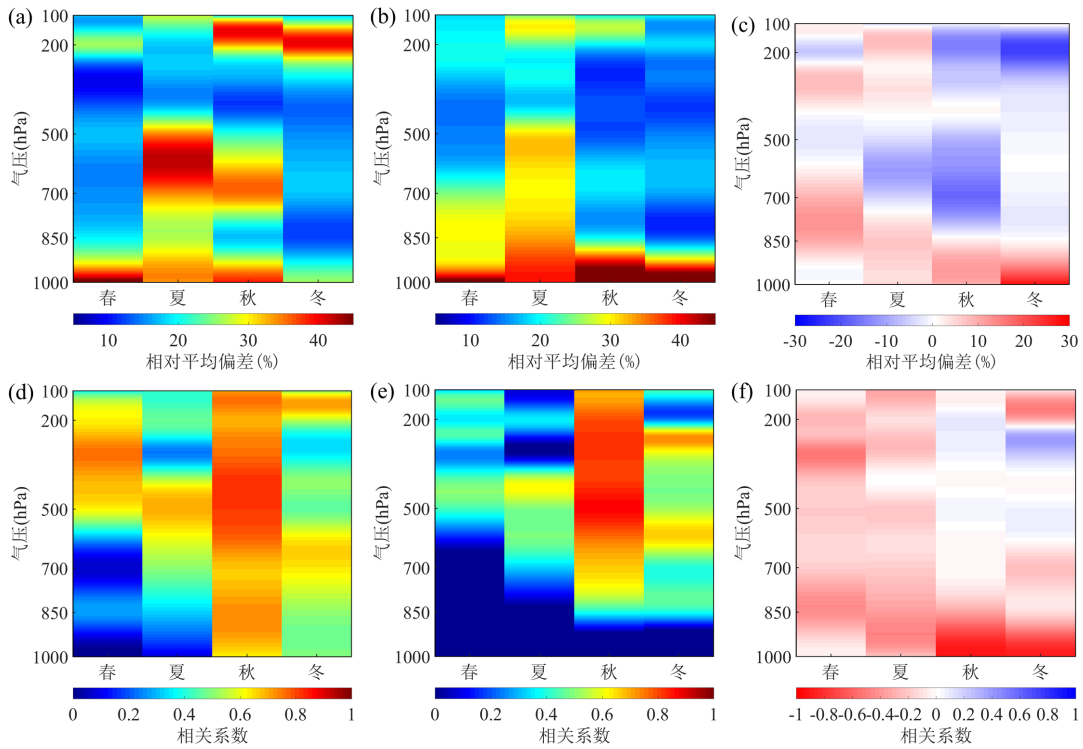


图 5 不同季节下 Rad 值和 r 值垂直分布

Fig.5 Vertical distribution of Rad and r in different seasons

(a)AIRS 与探空数据的 Rad 分布;(b)ERA5 与探空数据的 Rad 分布;(c)ERA5 与探空数据的 Rad 值减去 AIRS 与探空数据的 Rad 值;(d)AIRS 与探空数据的 r 值分布;(e)ERA5 与探空数据的 r 值分布;(f)ERA5 与探空数据的 r 值减去 AIRS 与探空数据的 r 值

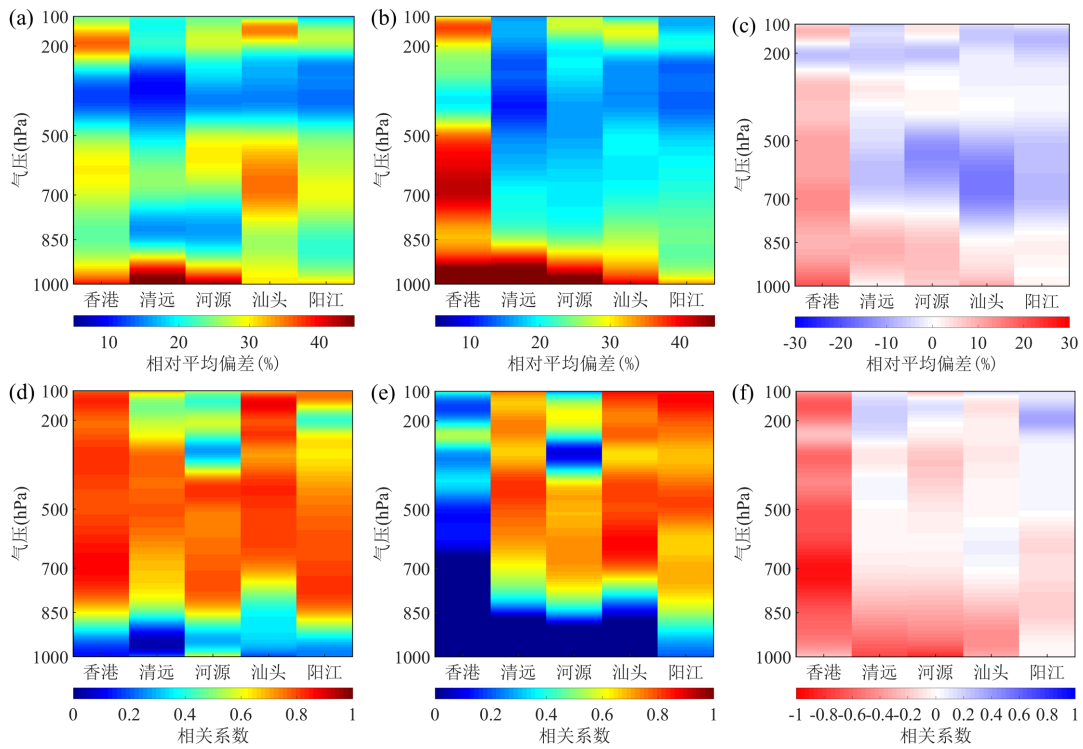


图 6 不同站点下 Rad 值和 r 值垂直分布

Fig.6 Vertical distribution of Rad and r at different stations

(a)AIRS 与探空数据的 Rad 值分布;(b)ERA5 与探空数据的 Rad 值分布;(c)ERA5 与探空数据的 Rad 值减去 AIRS 与探空数据的 Rad 值;(d)AIRS 与探空数据的 r 值分布;(e)ERA5 与探空数据的 r 值分布;(f)ERA5 与探空数据的 r 值减去 AIRS 与探空数据的 r 值

2.3 O₃ 垂直浓度分型对比评估

考虑到传统的按照季节、区域来分析 O₃ 浓度廓线产品的适用性,可能会掩盖一些特定 O₃ 浓度垂直分布结构下的产品适用性特征,而聚类技术则是对具有相似结构的 O₃ 浓度廓线进行分组,从而实现不同 O₃ 浓度垂直分布类型下的数据特征分析及相关产品对比评估.研究不同 O₃ 浓度垂直分布结构下 ERA5、AIRS 产品的适用效果,能够更加全面了解产品适用性特征及适用性差异的来源.

利用 SOM 分型算法对探空站点 O₃ 浓度垂直廓线数据进行分类,图 7 给出了各站点五种分布型下 O₃ 浓度廓线.结果表明,5 种 O₃ 浓度垂直分布型

出现频率分别在 13.8%~26.2%之间.按照 O₃ 浓度垂直分布特征,可将 1 型 2 型归为双峰型结构,4 型 5 型归为无峰结构,3 型为双峰型向无峰型的过度结构,其中双峰 1 型占比为 24.7%,峰区峰值位于 900hPa 和 400hPa 高度附近;双峰 2 型占比 18.7%,与双峰 1 型相比,低空 O₃ 峰区更加明显但峰值高度无明显变化,而高空峰区峰值高度则上移至 300hPa 附近;3 型为过度结构,双峰逐渐趋于平缓,占比为 16.6%;4 型 5 型占比分别为 13.8%和 26.2%,近地面至对流层顶,O₃ 浓度分布整体呈波动上升的特征,5 型相较于 4 型,整体浓度更高,近地面与对流层顶 O₃ 浓度差值更小.

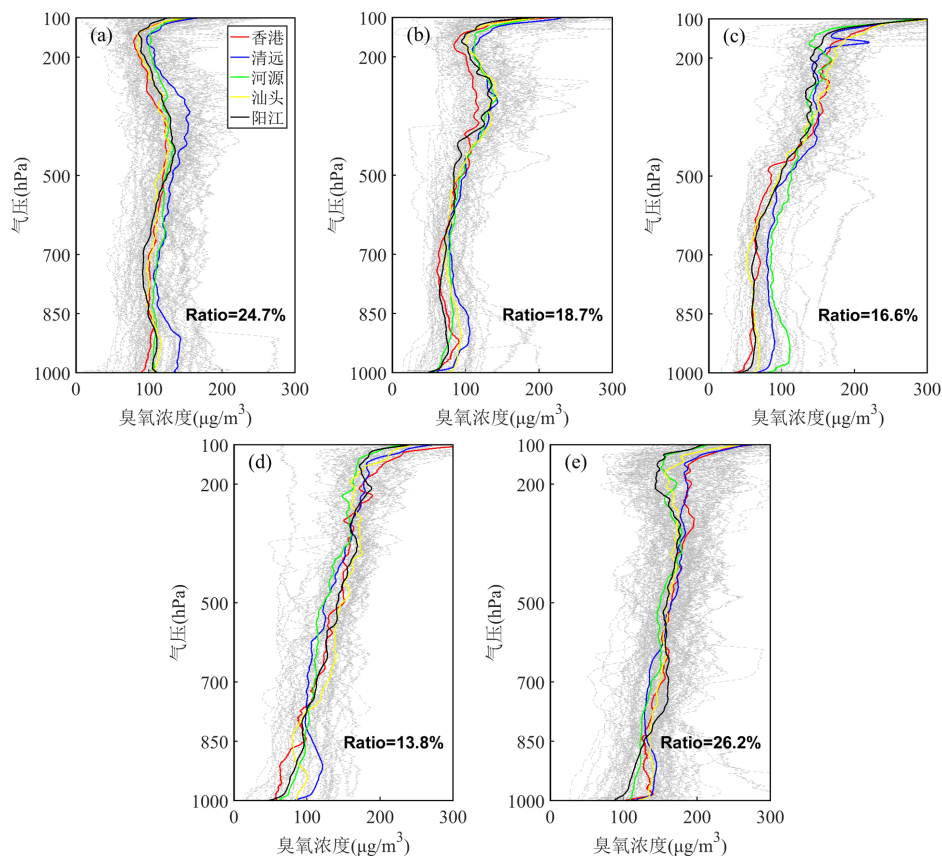


图7 基于 SOM 的 5 种 O₃ 浓度垂直分布类型

Fig.7 Five types of vertical distribution of O₃ concentration based on SOM

(a)1 型;(b)2 型;(c)3 型;(d)4 型;(e)5 型

结合各季节 O₃ 浓度垂直分布型出现频率(图 8)和不同垂直分布型下 AIRS、ERA5 与探空数据的比对结果(图 9)可见,在 200~100hPa 高度,5 种分布型下评估结果差异相对较小,而在 200hPa 高度以下,5 种分布型下的评估结果差异相对较大.200hPa 以下,1 型的评估结果优于其他分布型,Rad 平均值最小(分

别为 19.6%和 18.9%),*r* 平均值最高(分别为 0.58 和 0.38),主要出现在秋季和冬季,出现频率分别高达 43%和 61%;2 型和 3 型期间 ERA5 和 AIRS 产品评估结果则较其他垂直分布型态明显偏差,Rad 平均值均高于 30%,*r* 平均值均低于 0.22,这两种 O₃ 浓度垂直结构主要出现在夏季,总占比高达 66%.此外,2

型3型臭氧垂直分布结构在500~700hPa高度,AIRS数据Rad值显著偏高,而其他分布型并未出现该特征,2型3型主要出现在夏秋冬三季,且夏季1型廓线占比低,因此夏季700~500hPa出现Rad值异常偏高情况,秋季次之.4型和5型期间ERA5和AIRS产品

评估结果介于1型和2型之间,ERA5和AIRS产品在850hPa以下r值小、Rad值较大,4型在500~400hPa、5型在500~300hPa产品评估结果相对较好,这两种O₃浓度垂直结构主要出现在春季,总占比为85%.

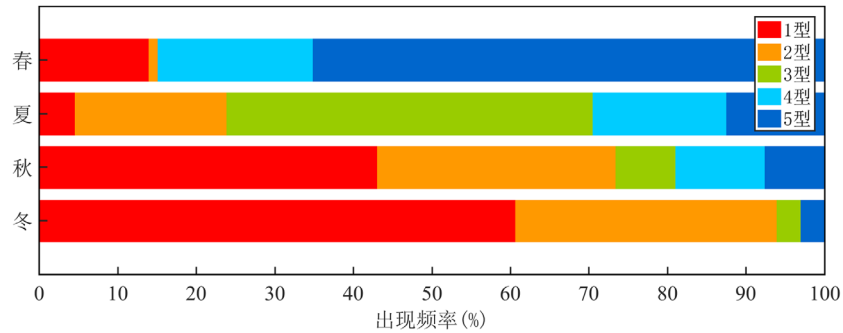


图8 不同季节下 O₃ 浓度垂直分布类型出现频率

Fig.8 Frequency of vertical distribution types of O₃ concentration in different seasons

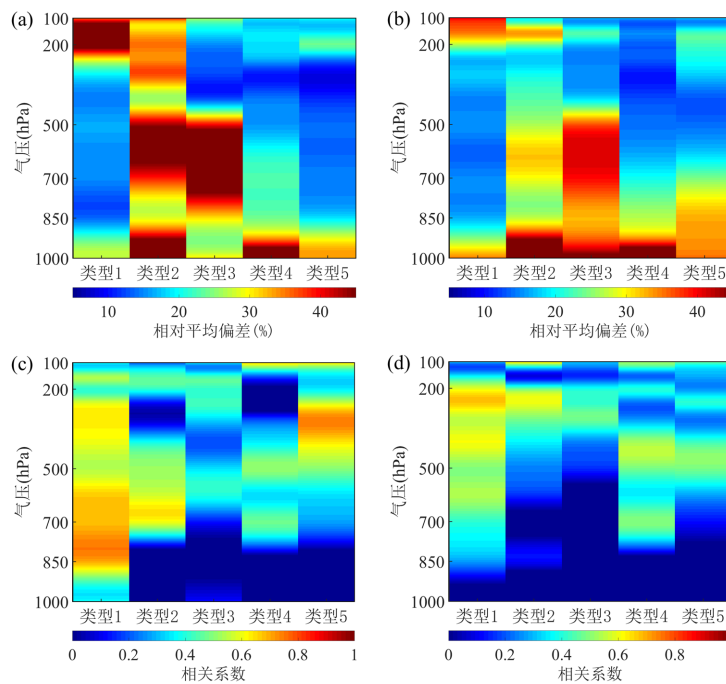


图9 不同 O₃ 浓度垂直分布型下 Rad 值和 r 值垂直分布

Fig.9 The Rad and r under different vertical distribution types of O₃ concentration

(a)AIRS 与探空数据的 Rad 值分布;(b)ERA5 与探空数据的 Rad 值分布;(c)AIRS 与探空数据的 r 值分布;(d)ERA5 与探空数据的 r 值分布

3 讨论

结合国内同类 O₃ 垂直分布特征和卫星再分析资料评估的研究成果,发现部分结论不仅仅适用于粤港澳地区.针对 O₃ 垂直分布特征研究,对比台北、厦门等地探空站点的 O₃ 分布特征^[20],广东福建等东

南部沿海省份同属东亚季风气候区,当地 O₃ 垂直浓度均呈现相似的分布模式;针对卫星再分析资料适用性评估,对比各地的评估结论^[38-39],卫星和再分析资料均存在局部高度处差异较大的共性问题,尤其在对流层低层区域,同时 AIRS 臭氧产品在北京地区 700~300hPa 高度也存在臭氧高估的情况,但整体都

与探空结果较为接近,总体来看 AIRS 和 ERA5 资料对于研究中国华南区域对流层内臭氧结构的时空变化还是有较好的参考意义。

4 结论

4.1 粤港澳探空站点 O₃ 浓度垂直分布季节性差异较为显著,春夏秋冬呈单峰分布结构,秋季呈双峰分布结构.各探空站点间 O₃ 浓度差异较小,清远、河源、汕头、阳江与香港站点探测时段 O₃ 廓线年平均偏差分别为 11.0%、1.6%、0.6%、-3.2%。

4.2 对流层内 AIRS、ERA5 与探空数据的 Rad 值为 24%和 26%,*r* 值为 0.77 和 0.75,总体上 AIRS 卫星资料略优于 ERA5 再分析资料.AIRS 和 ERA5 数据质量存在明显的季节差异,秋冬季评估结果优于春夏季.850hPa 以下,AIRS 和 ERA5 数据质量均较差,Rad 平均值分别为 31.6%和 40.9%,*r* 平均值分别为 0.34 和 -0.15,AIRS 产品优于 ERA5 产品.850~200hPa 产品评估结果明显优于 850hPa 以下的评估结果,各季节 Rad 平均值分别介于 16.5%~25.8%和 15.1%~25.7%之间,*r* 平均值分别介于 0.47~0.75 和 0.23~0.74 之间.200hPa 以上,两套数据的评估结果转差.整体上看,850hPa 以上 AIRS 与 ERA5 产品各有优势,AIRS 产品的相关系数高于 ERA5,但 AIRS 产品的 Rad 值较大。

4.3 利用 SOM 分型方法,将 O₃ 垂直分布分为 5 型,其中 1 型 2 型为双峰型结构,4 型 5 型归为无峰结构,3 型为双峰型向无峰型的过度结构,1~5 型占比分别为 24.7%、18.7%、16.6%、13.8%和 26.2%。在 200~100hPa,各分布型下 AIRS 与 ERA5 资料质量差异相对较小,而在 200hPa 以下,5 种分布型下的数据质量差异较大.200hPa 以下,AIRS 与 ERA5 资料在 1 型分布结构下 Rad 平均值最小(分别为 19.6%和 18.9%),*r* 平均值最高(分别为 0.58 和 0.38);2 型和 3 型分布结构则明显较差,Rad 平均值均高于 30%,*r* 平均值均低于 0.22.1 型主要出现在秋季和冬季,出现频率分别为 43%和 61%,2 型和 3 型主要出现在夏季,总占比为 66%,4 型和 5 型主要出现在春季,总占比为 85%。

参考文献:

- [1] 王金南,雷宇,宁淼.实施《大气污染防治行动计划》:向 PM_{2.5} 宣战 [J]. 环境保护, 2014,42(6):28-31.
Wang J N, Lei Y, Ning M. Implement action plan for air pollution prevention and control: Declare war on PM_{2.5} [J]. Environmental Protection, 2014,42(6):28-31.
- [2] Ding S, Wei Z W, Liu S L, et al. Uncovering the evolution of ozone pollution in China: A spatiotemporal characteristics reconstruction from 1980 to 2021 [J]. Atmospheric Research, 2024,307:107472.
- [3] 柴发合.我国大气污染治理历程回顾与展望 [J]. 环境与可持续发展, 2020,45(3):5-15.
Chai F H. Review and prospect on the atmospheric pollution control in China [J]. Environment and Sustainable Development, 2020,45(3): 5-15.
- [4] 生态环境部.2022 中国生态环境状况公报 [Z]. 北京:生态环境部, 2023.
Ministry of Ecology and Environment of People's Republic of China. 2022 Report on the state of China ecology and environment [Z]. Beijing: Ministry of Ecology and Environment of People's Republic of China, 2023.
- [5] 广东省生态环境厅.2023 广东省生态环境状况公报 [Z]. 广州:广东省生态环境厅, 2024.
Guangdong Provincial Department of ecology and environment. 2023 Report on the state of Guangdong provincial ecology and environment [Z]. Guangzhou: Guangdong Provincial Department of ecology and environment, 2024.
- [6] 陈多宏,沈劲,陈瑶瑶,等.2020 年珠三角 O₃ 污染特征及主要成因 [J]. 中国环境科学, 2022,42(11):5000-5007.
Chen, D H, Shen J, Chen Y Y, et al. Characteristics and main causes of ozone pollution in the Pearl River Delta in 2020 [J]. China Environmental Science, 2022,42(11):5000-5007.
- [7] Zhao K, Chen Y, Lian P, et al. Impact of stratospheric intrusions on surface ozone enhancement in Hong Kong in the lower troposphere: Implications for ozone control strategy [J]. Atmospheric Environment, 2024,329:120539.
- [8] 余锐,步巧利,陈辰,等.多尺度视角下广东臭氧时空分异特征及驱动因素 [J]. 中国环境科学, 2024,44(7):3601-3614.
Yu R, Bu Q L, Chen C, et al. Spatiotemporal variation characteristics and driving factors of near-surface ozone in Guangdong province from a multi-scale perspective [J]. China Environmental Science, 2024,44(7):3601-3614.
- [9] 周婕萍,袁斌,彭钰雯,等.珠三角冬季臭氧污染成因分析——以 2020 年 1 月一次污染过程为例 [J]. 中国环境科学, 2023,43(5): 2198-2209.
Zhou Jieping, Yuan Bin, Peng Yuwen, et al. Causes of ozone pollution in the Pearl River Delta in Winter - A case study of pollution process in January 2020 [J]. China Environmental Science, 2023,43(5):2198-2209.
- [10] 李婷苑,陈靖扬,翁佳烽,等.广东省臭氧污染天气型及其变化特征 [J]. 中国环境科学, 2022,42(5):2015-2024.
Li T Y, Chen J Y, Weng J F, et al. Ozone pollution synoptic patterns and their variation characteristics in Guangdong Province [J]. China Environmental Science, 2022,42(5):2015-2024.
- [11] Cao T, Wang H, Li L, et al. Fast spreading of surface ozone in both temporal and spatial scale in Pearl River Delta [J]. Journal of Environmental Sciences, 2024,137(3):540-552.
- [12] IPCC. Climate change 2021: The physical science basis. Contribution of working group I to the sixth assessment report of the

- intergovernmental panel on climate change [Z]. Cambridge: Cambridge University Press, 2021.
- [13] 周 骥,付世华,彭 丽,等.臭氧和 $PM_{2.5}$ 对慢阻肺死亡影响及气温修饰效应 [J]. 中国环境科学, 2021,41(12):5904–5911.
Zhou J, Fu S H, Peng Li, et al. Effect of ozone and $PM_{2.5}$ on chronic obstructive pulmonary disease deaths and the effect modification by the air temperature [J]. *Atmospheric Environment*, 2021,41(12): 5904–5911.
- [14] Enweasor C, Flayer C H, Haczk A. Ozone-induced oxidative stress, neutrophilic airway inflammation, and glucocorticoid resistance in Asthma [J]. *Frontiers in Immunology*, 2021,12:631092.
- [15] So R, Chen J, Stafoggia M, et al. Long-term exposure to elemental components of fine particulate matter and all-natural and cause-specific mortality in a Danish nationwide administrative cohort study [J]. *Environmental research*, 2023,224:115552.
- [16] Lefohn A S, Malley C S, Smith L, et al. Tropospheric ozone assessment report: Global ozone metrics for climate change, human health, and crop/ecosystem research [J]. *Elementa—science of the Anthropocene*, 2018,1:279–317.
- [17] Chen C, Li T T, Sun Q H, et al. Short-term exposure to ozone and cause-specific mortality risks and thresholds in China: Evidence from nationally representative data, 2013–2018 [J]. *Environment International*, 2023,17:107666.
- [18] Wang N, Wang H, Huang X, et al. Extreme weather exacerbates ozone pollution in the Pearl River Delta, China: role of natural processes [J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*. 2024,24(2):1559–1570.
- [19] Han H, Liu J, Yuan H, et al. Foreign influences on tropospheric ozone over East Asia through global atmospheric transport [J]. *Atmospheric Chemistry And Physics*, 2019,19(19):12495–12514.
- [20] Chen Z X, Xie Y C, Liu J, et al. Distinct seasonality in vertical variations of tropospheric ozone over coastal regions of southern China [J]. *Science of the Total Environment*, 2023,874:162423.
- [21] Zhang X D, Zhugu R Y, Jian X, et al. Associations of interannual variation in summer tropospheric ozone with the Western Pacific Subtropical High in China from 1999 to 2017 [J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2023,23(24):15629–15642.
- [22] Wang H, Ding K, Huang X, et al. Insight into ozone profile climatology over northeast China from aircraft measurement and numerical simulation [J]. *Science of the Total Environment*, 2021,785: 147308.
- [23] 戴 上,周呈祥,庞小兵,等.基于无人机观测研究杭州湾化工园区近地面层臭氧垂直廓线 [J]. 中国环境科学, 2022,42(6):2514–2522.
Dai S, Zhou C X, Pang X B, et al. Vertical profiles characteristics of near surface layer ozone in Shangyu Economic Development Zone of Hangzhou Bay based on unmanned aerial vehicle [J]. *Atmospheric Environment*, 2022,42(6):2514–2522.
- [24] Nevzorov A A, Nevzorov A V, Kravtsova, et al. Mobile Lidar for Sensing Tropospheric Ozone [J]. *Atmospheric and oceanic optics*, 2023,36(5):562–568.
- [25] Li D, Bian J C, Fan Q J. A deep stratospheric intrusion associated with an intense cut-off low event over East Asia [J]. *Science China Earth Sciences*, 2015,58(1):116–128.
- [26] Zhao F, Liu C, Hu Q, et al. High spatial resolution ozone profiles retrieved from the first Chinese [J]. *Engineering*, 2024,32(1):106–115.
- [27] Ancellet G, Godin-Beekmann S, Smit, et al. Homogenization of the observatoire de Haute provence electrochemical concentration cell (ECC) ozonesonde data record: comparison with lidar and satellite observations [J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2022,15(10): 3105–3120.
- [28] Christiansen A, Mickley L J, Liu J H, et al. Multidecadal increases in global tropospheric ozone derived from ozonesonde and surface site observations: can models reproduce ozone trends? [J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2022,22(22):14751–14782.
- [29] 陈 源,刘海磊,段民征,等.利用探空资料验证北京地区 OMPS 卫星臭氧产品 [J]. 遥感技术与应用, 2020,35(3):723–730.
Chen Y, Liu H L, Duan M Z, et al. Validation of ozone product by satellite OMPS with sounding measurements over Beijing [J]. *Remote Sensing Technology and Application*, 2022,35(3):723–730.
- [30] Zhang W, Zou Y, Zheng X D, et al. Characteristics of the vertical distribution of tropospheric ozone in late autumn at Yangjiang station in Pearl River Delta (PRD), China. Part I: Observed event [J]. *Atmospheric Environment*, 2021,244:117898.
- [31] Li T Y, Wu N G, Chen J Y, et al. Vertical exchange and cross-regional transport of lower-tropospheric ozone over Hong Kong [J]. *Atmospheric Research*, 2023,292:106877.
- [32] 杨景怡,田文寿,雒佳丽,等.利用探空观测评估北半球卫星及再分析对流层臭氧数据 [J]. 高原气象, 2025,44(1):95–109.
Yang J Y, Tian W S, Luo J L, et al. Evaluation of northern hemisphere satellite and reanalysis of tropospheric ozone data using sounding observations [J]. *Plateau Meteorology*, 2025,44(1):95–109.
- [33] Inness A, Ades M, Agustí P A, et al. The CAMS reanalysis of atmospheric composition [J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2019,19(6):3515–3556.
- [34] Pope R J, Kerridge B J, Richard S, et al. Investigation of spatial and temporal variability in lower tropospheric ozone from RAL Space UV–Vis satellite products [J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2023,23(23):14933–14947.
- [35] Chen Y P, Wang M Y, Yao Y J, et al. Research on the ozone formation sensitivity indicator of four urban agglomerations of China using Ozone Monitoring Instrument (OMI) satellite data and ground-based measurements [J]. *Science of the Total Environment*, 2023,869: 161679.
- [36] Liu C, Liu X, Chance K. The impact of using different ozone cross sections on ozone profile retrievals from OMI UV measurements [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2013,130:365–372.
- [37] Gaudel A, Cooper O R, Ancellet G, et al. Tropospheric ozone assessment report: present-day distribution and trends of tropospheric ozone relevant to climate and global atmospheric chemistry model evaluation [J]. *Elementa: Science of the Anthropocene*, 2018,6(1): 291–348.
- [38] Pennington E A, Osterman G B, Payne V H, et al. Quantifying biases in TROPES AIRS, CrIS, and joint AIRS+OMI tropospheric ozone products using ozonesondes [J]. *EGU sphere*, 2024:3701.
- [39] Zhang J Q, Xuan Y J, Bian J C, et al. Comparison between ozonesonde measurements and satellite retrievals over Beijing, China [J].

- Atmospheric and Oceanic Science Letters, 2024,17(1):100378.
- [40] Huijnen V, Miyazaki K, Flemming J, et al. An intercomparison of tropospheric ozone reanalysis products from CAMS, CAMS interim, TCR-1, and TCR-2 [J]. *Geoscientific Model Development*, 2020, 13(3):1513-1544.
- [41] Hu L, Jacob D J, Liu X, et al. Global budget of tropospheric ozone: Evaluating recent model advances with satellite (OMI), aircraft (IAGOS), and ozonesonde observations [J]. *Atmospheric Environment*, 2017,167:323-334.
- [42] Katragkou E, Zanis P, Tsikerdekis A, et al. Evaluation of near-surface ozone over Europe from the MACC reanalysis [J]. *Geoscientific Model Development*, 2015,8(7):2299-2314.
- [43] Gaudel A, Clark H, Thouret V, et al. On the use of MOZAIC-IAGOS data to assess the ability of the MACC reanalysis to reproduce the distribution of ozone and CO in the UTLS over Europe [J]. *Tellus B: Chemical and Physical Meteorology*, 2015,67(1):27955.
- [44] Georgoulias A K, Tsikerdekis A, Amiridis V, et al. A 3-D evaluation of the MACC reanalysis dust product over Europe, northern Africa and Middle East using CALIOP/CALIPSO dust satellite observations [J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2018,18(12):8601-8620.
- [45] Zeng Y S, Zhang J Q, Li D, et al. Vertical distribution of tropospheric ozone and its sources of precursors over Beijing: Results from ~ 20years of ozonesonde measurements based on clustering analysis [J]. *Atmospheric Research*, 2023,284:106610.
- [46] 周顺武,郑丹,秦亚兰,等.青藏高原与同纬度其他地区热带对流层顶气压变化特征的比较 [J]. *大气科学学报*, 2019,42(5):660-671.
- Zhou S W, Zheng D, Qin Y, et al. Comparison of pressure changes at the tropical tropopause between the Qinghai Tibet Plateau and other regions at the same latitude [J]. *Journal of Atmospheric Sciences*, 2019,42(5):660-671.
- [47] Wang H, Chai S, Tang X, et al. Verification of satellite ozone/temperature profile products and ozone effective height/temperature over Kunming, China [J]. *Science of the Total Environment*, 2019, 661(15):35-47.
- [48] 王润芳,马晓丹,赵天良,等.利用地面观测资料和 AIRS 卫星资料评估 MACC 再分析臭氧数据中国地区的适用性 [J]. *环境科学*, 2019, 40(10):4412-4422.
- Wang R F, Ma X D, Zhao T L, et al. Evaluation of MACC reanalysis ozone data over China using ground-based and AIRS satellite observations [J]. *Environmental Science*, 2019,40(10):4412-4422.
- [49] Li S, Liu Fang, Jiao L C, et al. Self-Supervised Self-Organizing Clustering Network: A Novel Unsupervised Representation Learning Method [J]. *IEEE transactions on neural networks and learning systems*, 2024,12:85806-85821.
- [50] Liao Z, Pan Y, Ma P, et al. Meteorological and chemical controls on surface ozone diurnal variability in Beijing: A clustering-based perspective [J]. *Atmospheric Environment*, 2023,295:119566.
- [51] Chattopadhyay R, Vintzileos A, Zhang C. A description of the Madden-Julian Oscillation based on a self-organizing map [J]. *Journal of Climate*, 2013,26(5):1716-1732.

作者简介: 龚宇(1996-),男,江苏南通人,工程师,硕士,主要从事环境气象研究.发表论文 7 篇.1691069764@qq.com.