

目次

2020~2021年新冠疫情期间南京市PM _{2.5} 化学组成与来源变化特征	华楠, 尚玥, 谢鸣捷	(593)
郑州市大气PM _{2.5} 中水溶性离子的污染特征及来源解析	张俊美, 陈仕霖, 王乾恒, 姚森, 杨书中	(602)
太原市PM _{2.5} 浓度的气象特征影响分析及预报	李明明, 王雁, 闫世明, 陈玲, 韩照宇	(611)
黄石市大气PM _{2.5} 中碳氮组分的污染特征及来源解析	王赐晔, 邓萌杰, 陈雨, 王祖武, 成海容	(626)
长三角地区典型PM _{2.5} 污染过程和跨区域传输对宁波污染贡献评估模拟	潘勇, 郑捷, 肖航	(634)
长三角地区2017~2020年非极性有机化合物组成特征及来源	吴长流, 曹芳, 贾小芳, 张煜烟, 谢添, 任磊, 章炎麟	(646)
北京城区不同组分PM _{2.5} 散射特性及来源分析	曹阳, 王陈婧, 景宽, 王琴, 刘保献, 安欣欣	(658)
排放和气象对疫情前后武汉不同类型点位大气污染物的影响	熊江荷, 孔少飞, 郑煌, 肖婉, 刘傲, 朱明铭	(670)
2019~2022年成都市春节期间烟花爆竹燃放对空气质量影响分析	冯小琼, 陈军辉, 尹寒梅, 徐雪梅	(680)
北京市城区秋季O ₃ 污染过程VOCs污染特征及反应活性	孙雪松, 张蕊, 王裕, 袁滕	(691)
郑州市多站点大气VOCs变化特征及源解析	王冰, 尹沙沙, 黄爱枝, 张栋, 卢轩, 张瑞芹	(699)
加油站油气处理装置VOCs化学组成及二次污染生成贡献	胡玮, 黄玉虎, 梁文俊, 刘明宇, 杨天昇, 任碧琪	(709)
长三角地区2017~2020年臭氧浓度时空分布与人群健康效益评估	程育恺, 戴海夏, 张蕴晖, 乔利平, 马英歌, 安静宇, 黄成	(719)
典型农药制造企业废气污染物排放特征及风险评估	翟增秀, 肖成德, 孟洁, 王静, 杨伟华, 李伟芳	(730)
黔西拖长江流域水化学演化特征及驱动因素	涂春霖, 杨润柏, 马一奇, 令狐昌卫, 赵瑞刚, 和成忠	(740)
高寒干旱区地表水与地下水水化学特征及转换关系:以大通河流域为例	易冰, 刘景涛, 吕晓立, 何伟, 朱亮, 张玉玺, 杨明楠	(752)
黄土高原沟壑区典型城郊流域地表水硝酸盐来源示踪	李欢玮, 赵广举, 李明, 穆兴民, 田鹏	(761)
长江中上游表层沉积物重金属形态分布特征及风险评价	张志永, 万成炎, 胡红青, 杨中华, 袁玉洁, 朱稳	(770)
鄱阳湖典型湿地土壤-植物系统重金属沿湖向富集及迁移转换特征分析	曹欢, 张华, 丁明军, 王鹏, 黄高翔, 彭翔, 秦琰, 杨越, 邹天娥, 徐欢, 黄鹏	(781)
石期河南南子流域地下水重金属来源解析及健康风险评价	付蓉洁, 辛存林, 于爽, 李笑	(796)
河北省某大型焦化厂地下水中多环芳烃的污染特点、源解析及生态风险评价	张千千, 邢锦兵, 王慧玮, 刘景涛, 陈玺	(807)
鄱阳湖流域生态环境动态评估及驱动因子分析	田智慧, 尹传鑫, 王晓蕾	(816)
底泥疏浚对太湖内源及底栖生物恢复的影响	张建华, 殷鹏, 张雷, 尹洪斌	(828)
金沙江底栖真核微生物地理分布特征及生态学机制	崔戈, 陈娟, 王沛芳, 王超, 王洵, 张波, 吴程	(839)
西安市景观湖泊水体细菌群落结构分析与代谢功能预测	王敏, 张雨桐, 黄晨, 任杰辉, 万甜, 程文	(847)
三峡水库蓄水对支流浮游植物功能群的影响及与资源利用效率的关系	赵璐, 欧阳添, 纪璐璐, 杨宋琪, 郑保海, 杜雨欣, 李玉鑫, 李佳欣, 施军琼, 吴忠兴	(857)
施肥和秸秆覆盖对成都平原区农田氮和磷流失的影响	王宏, 姚莉, 张奇, 林超文, 刘海涛, 罗付香, 王谢, 杨璇, 翟丽梅	(868)
O ₃ -SBBR联合工艺深度处理印染工业园生化尾水的效能和机制	罗新浩, 胡勇有, 陈元彩, 程建华, 姚颖, 钱原铭	(878)
低温下磁性载体MBBR系统微生物群落特征和功能预测分析	刘超, 李奇, 宋子洋, 胡鹏, 敬双怡, 李卫平	(889)
基于空间尺度效应的西南地区植被NPP影响因子探测	徐勇, 黄雯婷, 郑志威, 戴强玉, 李欣怡	(900)
基于MGWR的黄河流域土壤有机碳密度和影响因素分析	南富森, 李宗省, 张小平, 崔乔, 李玉辰, 熊雪婷, 杨雪杰, 杨安乐	(912)
土壤功能与环境因素在海拔梯度上的耦合关系:以梅里雪山为例	赵冬辉, 申聪聪, 张志明, 刘四义, 陈保冬, 孙东丽, 王继琛, 葛源	(924)
洞庭湖南缘农田土壤重金属特征及源解析	肖凯琦, 许安, 郭军, 李毅, 卢永兴, 邢新丽, 董好刚	(932)
南京城郊不同土地利用类型农业土壤多环芳烃污染特征及风险评价	张秀秀, 朱昌达, 王飞, 魏宇宸, 潘剑君	(944)
福州滨海地区菜地和果园土壤碳、氮、磷含量及其生态化学计量学特征	侯宁, 黑杰, 金强, 刘旭阳, 黄佳芳, 林少颖, 黄庄, 谢杨阳, 王维奇	(954)
铁修饰生物炭的制备及在砷污染土壤修复中的应用	韦婧, 刘映吟, 涂晨, 邓绍坡, 郝丹丹, 校亮, 毛萌	(965)
锰铝双氧化物改性生物炭减缓土壤重金属对黑麦草的毒性作用	林鹏程, 尹华, 刘晓菲, 刘航, 晏才雅, 戚鑫	(975)
田间施用锌肥对小麦籽粒镉累积的影响及施用风险	牛硕, 王天齐, 杨阳, 许群, 王美娥, 陈卫平	(984)
不同性质硅肥影响土壤生物有效态镉的主要元素	黄蕊, 魏维, 谢运河, 柳赛花, 陈豪宇, 彭华, 纪雄辉	(991)
不同外源硒在土壤中的有效性变化及其对小麦硒累积的影响	魏玮, 李平, 周志高, 王兴祥, 丁昌峰	(1003)
pH、钙和磷对砷在水稻土中溶解度的影响及表面络合机制解析	邓迎璇, 翁莉萍, 朱桂芬, 李永涛	(1012)
土壤中磺胺二甲嘧啶赋存对水稻生长的影响	章威, 王沛芳, 金秋彤, 胡斌	(1021)
江苏产区大蒜中邻苯二甲酸酯含量检测及溯源分析	王亚, 肖霞霞, 杨云, 冯发运, 宋立晓, 陈小龙, 孙星, 李勇, 曾晓萍, 马金骏, 余向阳	(1029)
河南省部分市售农用化肥中溶解性离子浓度及同位素组成	张东, 薛天, 秦勇, 刘运涛, 陈昊, 高振朋, 黄兴宇, 麻冰涓	(1040)
控氧热解过程中污染稻草生物炭的组分特性及其重金属累积特征	徐智, 郭朝晖, 徐锐, 肖细元, 谢慧民, 胡玉莲	(1051)
长期施肥对农牧交错带旱地土壤微生物多样性及群落结构的影响	高日平, 段玉, 张君, 任永峰, 梁俊梅, 景宇鹏, 赵沛义	(1063)
化肥减量配施有机肥对柠檬根际/非根际土壤细菌群落结构的影响	邓正昕, 高明, 王莹燕, 谢永红, 熊子怡, 王子芳	(1074)
秸秆还田下不同追氮量对麦田土壤真菌群落结构和生态网络的影响	靳海洋, 闫雅倩, 张德奇, 杨程, 岳俊芹, 李向东, 邵运辉, 方保停, 王汉芳, 秦峰	(1085)
粉垄耕作对耕地土壤细菌群落多样性及微生物网络结构的影响	夏皖豫, 陈彦云	(1095)
基于宏基因组学揭示咸水滴灌对棉田土壤微生物的影响	杜思焱, 陈静, 刘佳炜, 郭晓雯, 闵伟	(1104)
双碳约束下煤化工行业节能降碳减排协同	张鸿宇, 王媛, 郝成亮, 卢亚灵, 金玲, 连超, 蒋洪强, 吴立新, 曹东	(1120)
“双碳”目标下:中国CCUS发展现状、存在问题及建议	赵震宇, 姚舜, 杨朔鹏, 王小龙	(1128)
粉煤灰用于碳捕集、利用及封存的研究进展	姜龙, 何川, 李金晶	(1139)
中国秸秆资源的时空分布、利用现状与碳减排潜力	杨传文, 邢帆, 朱建康, 李荣华, 张增强	(1149)
污水处理过程N ₂ O排放:过程机制与控制策略	郝晓地, 杨振理, 于文波, 刘然彬	(1163)
市政污水厂典型A ² O工艺低碳运行的系统性评估	孟红旗, 李红霞, 赵爱平, 原建光, 张东	(1174)
城市污泥不同处理处置工艺路线碳排放比较	李哲坤, 张立秋, 杜子文, 封莉, 刘永泽	(1181)
基于群决策和层次分析法的长江中游地区农村污水处理技术评价及优选	刘璐, 张文强, 胡飞超, 庞阔, 郭亚丽, 张婷, 李敏	(1191)
《环境科学》征订启事(815)	《环境科学》征稿简则(846)	信息(856, 899, 1028)

太原市 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度的气象特征影响分析及预报

李明明, 王雁*, 闫世明, 陈玲, 韩照宇

(山西省气象科学研究所, 太原 030002)

摘要: 利用 2016~2020 年太原市污染物浓度资料、以及国家基准气象观测站的同期地面气象资料, 重点分析了太原市 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度的变化特征以及湿度、降水、风和混合层厚度等气象条件对 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度的影响, 同时探讨了污染物浓度变化的成因, 建立基于 LSTM 神经网络的 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度预报模型. 结果表明, 2016~2020 年太原市区冬季出现的重污染天数最多, 其中 2017 年冬季出现天数最多为 28 d, $\text{PM}_{2.5}$ 浓度总体呈现出秋冬季节高, 春夏季节低, 周末 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度高于工作日浓度, $\text{PM}_{2.5}$ 浓度日变化大致呈现双峰型分布, 分别出现在 09:00 左右和 23:00 至翌日 01:00. 除相对湿度和冬季气温外, 其余气象要素与 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度在四季均表现为负相关. 影响太原市区 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度升高的污染源主要位于其 NE-ENE-E 方向, 西北部地区的相对不明显. 汛期当达到中雨(降水量 ≥ 10 mm)以上级别的降水都对 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度降低有明显效果. 大气混合层高度增加对于 $\text{PM}_{2.5}$ 在垂直方向的扩散和稀释非常有利. 冬季强偏西北向气流, 相对湿度低, 地面处于高压控制, 混合层高度高, 属于最利于 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度降低的类簇. 采用 LSTM 模型建模, $\text{PM}_{2.5}$ 浓度预测的 R^2 高达 0.95, 显著优于传统树模型和线性回归模型 ($R^2 < 0.60$), 预测结果残差接近正态分布, 其中 84.2% 预测结果的绝对误差低于 $20 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, 模型的 MAE、MAPE 和 RMSE 分别为 38.17、17.19% 和 20.6.

关键词: 长短期记忆神经网络 (LSTM); 气象特征; 机器学习; $\text{PM}_{2.5}$ 浓度; 预报; k-均值聚类; 太原

中图分类号: X513 **文献标识码:** A **文章编号:** 0250-3301(2023)02-0611-15 **DOI:** 10.13227/j.hjxx.202203040

Meteorological Characteristics, Influence Analysis and Prediction of $\text{PM}_{2.5}$ Concentration in Taiyuan City

LI Ming-ming, WANG Yan*, YAN Shi-ming, CHEN Ling, HAN Zhao-yu

(Shanxi Province Institute of Meteorological Science, Taiyuan 030002, China)

Abstract: Based on the pollutant concentration data of Taiyuan City from 2016 to 2020 and the surface meteorological data of the national benchmark meteorological observation station in the same period, the variation characteristics of $\text{PM}_{2.5}$ concentration in Taiyuan City and the effects of meteorological conditions such as humidity, precipitation, wind, and mixing layer thickness on $\text{PM}_{2.5}$ concentration were analyzed. At the same time, the causes of pollutant concentration changes were discussed, and the $\text{PM}_{2.5}$ concentration prediction model based on the LSTM neural network was established. The results showed that the number of days of heavy pollution in Taiyuan City from 2016 to 2020 was the highest in winter, of which the maximum number of days in 2017 was 28 days. The $\text{PM}_{2.5}$ concentration was generally high in autumn and winter and low in spring and summer. The $\text{PM}_{2.5}$ concentration on weekends was higher than that on weekdays. The daily variation in $\text{PM}_{2.5}$ concentration roughly presented a bimodal distribution, which appeared around 09:00 and 23:00 to 01:00 the following day. Except for relative humidity and winter temperature, other air pressure, wind speed, and PM concentration showed negative correlations in the four seasons. The pollution sources affecting the increase in $\text{PM}_{2.5}$ concentration in Taiyuan City were mainly located in the NE-ENE-E direction, and the pollution in the northwest was not relatively apparent. In flood season, when the precipitation reached the level of moderate rain (rainfall ≥ 10 mm), it had an obvious effect on the reduction of $\text{PM}_{2.5}$ concentration. The increase in atmospheric mixing layer height was very beneficial to the diffusion and dilution of $\text{PM}_{2.5}$ in the vertical direction. The strong northwest air flow in winter, low relative humidity, high pressure control on the ground, and high height of the mixing layer belonged to the cluster most conducive to the reduction in $\text{PM}_{2.5}$ concentration. Using the LSTM model for modeling, the R^2 of $\text{PM}_{2.5}$ concentration prediction was as high as 0.95, which was significantly better than that of the traditional tree model and linear regression model ($R^2 < 0.60$). The residual of the prediction results was close to the normal distribution, of which the absolute error of 84.2% prediction results was less than $20 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, and the MAE, MAPE, and RMSE of the model were 38.17, 17.19%, and 20.6, respectively.

Key words: long short term memory (LSTM); meteorological characteristics; machine learning; $\text{PM}_{2.5}$ concentration; forecast; k-means clustering; Taiyuan

近年来,随着我国经济发展迅速,城市化速度逐步加快,山西地区空气重污染频发,逐渐由单一煤烟型污染向复合型污染转变^[1]. 而采暖期以 $\text{PM}_{2.5}$ 为首要污染物的重污染天气出现的频率呈逐步增加趋势^[2], $\text{PM}_{2.5}$ 由于其粒径小,影响大气环境进而危害到人体健康,已经成为大众关注的重点和学者们研究的热点^[3]. 众所周知, $\text{PM}_{2.5}$ 的浓度主要取决于排放源、大气的化学物理转化过程及复杂的地形条件等多种因素的交织影响. 某一特定区域的 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度则主要受该区域的排放源与当地的气象条件的影响,降水和风速对 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度去除效应很明显^[4~6].

$\text{PM}_{2.5}$ 浓度的变化与气象背景场有很大的关联,受到湿度、风和混合层厚度等气象条件以及长距离的沙尘输送等因素影响,不同地区的 $\text{PM}_{2.5}$ 污染气象成因也存在显著的地域差异^[7~12], 因此学者们也开展了一系列的相关研究,并根据气象条件相关性建立了一些线性回归预报模型^[13~15]. 但 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度的变化

收稿日期: 2022-03-04; 修订日期: 2022-05-11

基金项目: 山西省科技厅自然科学基金项目 (201901D111465); 山西省基础研究计划项目 (20210302124202)

作者简介: 李明明 (1980~), 男, 硕士, 高级工程师, 主要研究方向为环境气象预报, E-mail: qkslmm@126.com

* 通信作者, E-mail: qkswy@126.com

特征基本都是非线性的,所以普通的线性预报模型很难准确模拟 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度变化. 为此各国的学者研究开发了各种 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度非线性预测模型. 其中,利用最小二乘逼近来拟合的线性回归、时间序列回归和决策树回归的树模型等预测模型比较常用,为此学者们基于机器学习方法对一些地域的空气质量数值预报及 $\text{PM}_{2.5}$ 的数值模拟进行了优化研究^[16~20],并基于随机森林模型和支持向量机开展相关城市的空气质量浓度预测和空气质量分类预测研究^[21~33]. 随着人工智能的兴起,深度学习的神经网络模型在数据挖掘等相关领域具备良好的数据拟合效果. BP 神经网络等预报模型在对城市空间的 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度的预测方面也有很多的应用^[34~40].

太原市作为地处温带季风气候区的典型北方城市,无论从气候还是从地理特点来说都具有内陆城市典型的特征,有关太原市区 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度与不同季节的污染气象特征相关影响研究不多,而对于太原市区 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度预报也相对较少,且已有的多种预测模型在预测 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度时依然存在各自的一些局限性. 如普通的线性模型难以精确模拟 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度与多种影响因素之间的非线性关系;传统的神经网络模型不会关注上一时刻的信息如何用于下一时刻,每一次都只会关注当前时刻的处理,没有记忆功能^[41]. 而长短时记忆神经网络(LSTM)是一种特殊的循环神经网络(RNN),正好可以很好地解决长时依赖问题^[42]. 因此,本文主要基于气象观测数据和环境监测数据,分析太原市区 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度的变化特征以及,利用灰色关联分析模型分析太原市的气象要素与各污染物浓度之间的相近程度,选取风向、风速、相对湿度和混合层高度等气象要素和前一时次污染物浓度值作为特征因子,构建基于长短时记忆神经网络(long short term memory, LSTM)的 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度预测模型,并与3种机器学习模型的预测结果进行对比,表明 LSTM 模型更适合太原市区 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度预测. 该方法对了解典型内陆城市的污染气象特征及其成因,提高环境气象预报精度有一定的参考意义.

1 材料与方法

1.1 数据来源

太原市位于 $111.50^{\circ}\text{E} \sim 113.15^{\circ}\text{E}$, $37.45^{\circ}\text{N} \sim 38.42^{\circ}\text{N}$ 之间,处于山西省境中央,太原盆地的北端,华北地区黄河流域中部,西、北、东三面环山,中、南部为河谷平原,全市整个地形北高南低呈簸箕形. 太原市属北温带大陆性气候,夏季炎热多雨,冬季寒冷干燥. 年平均气温 9.5°C ,无霜期平均 202 d,年均降水量 456 mm. 太原由于其地形复杂多样,

海拔高度差异较大,海洋性气候对境内的影响,形成了北温带大陆性气候. 近年来,太原市大气污染较为严重^[43].

本研究使用的气象数据来自太原市小店区气象观测站(112.55°E , 37.75°N , 海拔 776.2 m),选用的气象要素包括:风向、风速、相对湿度、气压、气温及露点温度和降水量;使用的空气质量数据来自全国城市空气质量实时发布平台(<http://www.cnemc.cn/sss/>),监测项目为: PM_{10} 、 $\text{PM}_{2.5}$ 、 SO_2 、 NO_2 、CO 和 O_3 这6种污染物的浓度值,太原市共有6个环境空气质量监测站点(桃园、坞城、上兰、尖草坪、南寨和小店),见图1. 考虑到数据匹配性原则,本研究选取小店监测站点空气质量监测数据. 本研究时段为2015年1月1日至2020年12月31日小时监测值. 研究范围如图1,主要包括太原市尖草坪区、杏花岭区、万柏林区、迎泽区、晋源区和小店区这6个区.

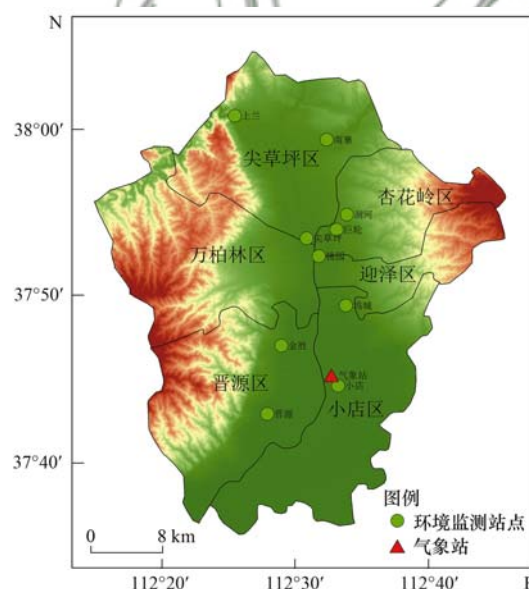


图1 太原市空气质量和气象监测点分布示意

Fig. 1 Distribution map of air quality and meteorological monitoring sites in Taiyuan City

1.2 研究方法

1.2.1 污染气象特征分析方法

本研究利用太原市城区监测站点 $\text{PM}_{2.5}$ 小时浓度监测值,求得日均浓度值,再根据 $\text{PM}_{2.5}$ 日均浓度值求得月均值、季均值和年均值. 其中按照北方城市的季节划分,将3~5月划分春季,6~8月划分夏季,9~11月划分秋季,12月及次年1~2月划分冬季. 空间插值用于将离散点的测量数据转换为连续的数据曲面,可以用来模拟研究区域内的污染物的浓度分布. 插值方法包括反距离加权平均插值法(IDW)、趋势面法、样条函数法和克

立格(Kriging)插值法等,本次空间分布采用克立格插值法。

1.2.2 大气混合层高度计算方法

大气混合层高度是反映污染物在铅直方向扩散的重要参数,也是影响大气污染物扩散的主要气象因子之一,本次大气混合层高度的计算方法采用罗氏(Nozaki)法。

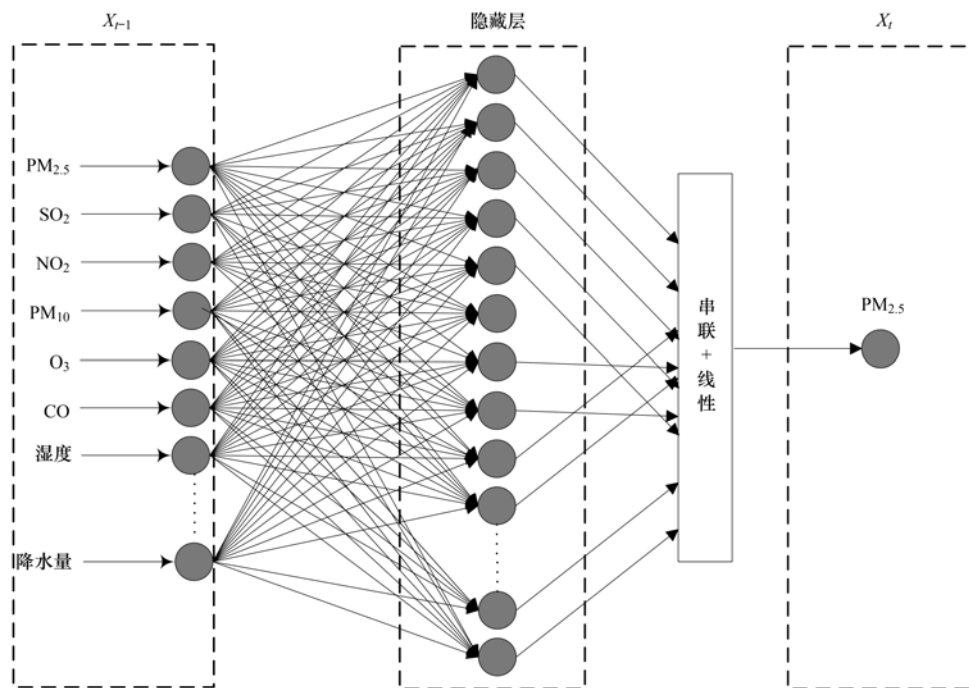
$$H = \left(\frac{121}{6} \right) (6 - P) (T - T_d) + \frac{0.169P(U_z + 0.257)}{12 f \ln(Z/Z_0)} \quad (1)$$

式中, H 为计算的大气混合层高度(m), $T - T_d$ 为温度露点差(°C), P 为 Pasquill 稳定度级别规定的取值,稳定度等级共 6 级,依次取值 1~6, U_z 为 Z 高度处所观测的平均风速($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$), f 为地转参数

(s^{-1}), Z_0 为地面粗糙度。

1.2.3 基于 LSTM 的 PM_{2.5} 浓度预测方法

选择影响 PM_{2.5} 浓度的各种环境和气象因素,采用 LSTM 神经网络预测下 1 h PM_{2.5} 浓度,模型主要依据前 3 h 的 6 种污染物浓度和气象因子来预测下 1 h 的 PM_{2.5} 浓度,具体网络模型的结构如图 2。本次 LSTM 网络设置了 1 层 LSTM 隐藏单元,共设置了 32 个神经元,通过向前操作,将前 1 h 的信息以记忆流的形态不断向后传递,影响每个新输入数据的处理和每个阶段的输出。输入层的输入数据包含 12 个特征(PM₁₀、PM_{2.5}、SO₂、NO₂、CO、O₃、风向、风速、相对湿度、气压、气温及露点温度和降水量),输出层是一个用于预测 PM_{2.5} 浓度的神经元。



X_{t-1} 表示 $t-1$ 时刻输入, X_t 表示 t 时刻输入

图 2 LSTM 模型预测流程

Fig. 2 Flow chart of LSTM model design

2 结果与讨论

2.1 2016~2020 年太原市城区空气质量概况

由图 3 可知:2016~2020 年太原市空气质量优、良天数大致呈现上升趋势,其中,空气质量为优的天数占比由 2016 年 10% 上升到 2020 年 16%,同比增加 6 个百分点;空气质量为良的天数占比一直保持在 60% 左右,其中 2018 年占比相对较低为 58%,2020 年占比相对较高为 64%;轻度污染的天数占比中 2018 年的占比相对较高为 28%,2020 年的占比相对较低为 15%;重污染(中度、重度及严重污染天气)天数近 5 年大致呈减少趋势,重污染

天数的占比 2016 年为 48 d(占比为 13%),2017 年为 40 d(占比为 12%),2018 年为 34 d(占比为 9.5%),2019 年为 28 d(占比为 7.5%),2020 年为 20 d(占比为 5%)。

2016~2020 年的重污染天数从季节来看,冬季出现的天数最多,其中 2017 年冬季出现天数最多为 28 d,2020 年最少为 16 d;秋季出现的天数次之,其中 2016 年秋季出现的天数最多为 21 d,2020 年较少为 4 d;春季出现的天数较少,其中 2018 年春季出现的天数最多为 12 d,2020 年春季未出现。夏季未出现重污染。

统计 2016~2020 年的首要污染物的占比情况

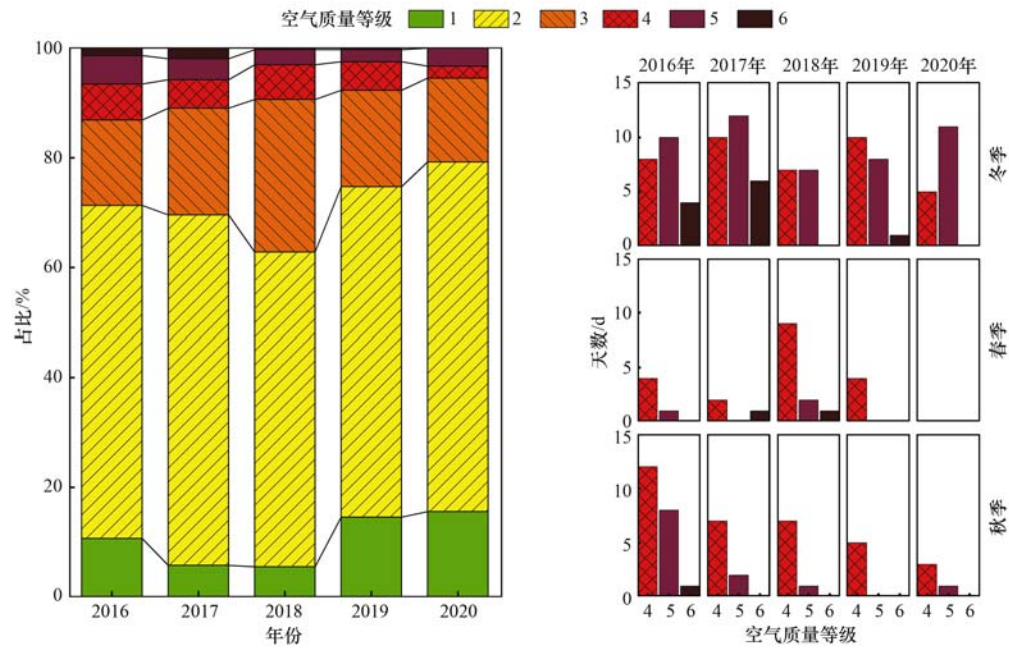


图3 2016~2020年太原市区不同PM_{2.5}污染等级的分布状况
Fig. 3 Distribution of PM_{2.5} pollution grades in Taiyuan City from 2016 to 2020

发现:随着空气质量等级的加重,PM_{2.5}作为首要污染物的占比增加得最快,其中重度和严重污染天气时占比达到90%左右,表明太原市的重污染天气主要以PM_{2.5}污染为主;首要污染物为PM₁₀的污染集中在良,轻度污染天气,此外在重污染(中度、重度及严重污染天气)时也有出现,但是占比相对较低,约为10%左右;首要污染物为O₃的污染集中在良,轻度污染和中度污染天气出现,主要是在轻度污染天气时占比较大,达到40%;其余的SO₂和NO₂作为首要污染物占比较低,均在10%以下.由图4可见,2016~2020年太原市区发生污染天气时首要污染物主要以PM_{2.5}为主.

本次重点分析以PM_{2.5}为首要污染物的变化情况(见图5),从年际分布来看,2016~2020年太原市区良和轻度污染天数逐渐增多,中度以上的重污

染天数逐渐减少,尤其是2020年没有出现严重污染天气,环比2019年减少了13 d.从月际分布来看,也大致呈U型分布,每年的12月和1月出现中度以上的重污染天数最多,分别为45 d和35 d.从季节分布来看,冬季出现中度以上的重污染天数最多,达到108 d,秋季次之为43 d,夏季最少.

2.2 太原市区PM_{2.5}浓度变化特征
2.2.1 太原市区PM_{2.5}浓度年变化特征
太原市城区2016~2020年PM_{2.5}浓度变化情况如表1所示.从中可见,2016~2020年太原市城区9个环境空气质量监测站PM_{2.5}浓度年均值总体上呈现出逐年减少的趋势, $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 平均值依次为:67.18、64.89、56.67、54.52和52.57 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 最高值出现在2017的晋源监测点为74.73 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$,最低值出现在2019的上兰监测点为38.46

表1 2016~2020年太原市区环境监测站点PM_{2.5}浓度年均值变化情况¹⁾/ $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$

Table 1 Environmental monitoring station PM_{2.5} annual mean change in Taiyuan City from 2016 to 2020/ $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$

站点	2016 年	2017 年	2018 年	2019 年	2020 年	均值
上兰	44.98 ± 50.59	45.63 ± 47.96	42.34 ± 39.22	38.46 ± 35.00	39.06 ± 33.64	42.09 ± 41.28
南寨	60.95 ± 54.72	58.32 ± 50.0	56.24 ± 43.57	55.95 ± 46.05	48.13 ± 41.90	55.92 ± 47.25
坞城	59.92 ± 57.87	67.39 ± 60.68	59.93 ± 45.76	55.24 ± 46.19	55.57 ± 47.19	59.61 ± 51.54
小店	72.50 ± 72.98	67.15 ± 61.55	61.66 ± 49.94	58.48 ± 50.43	60.58 ± 54.17	64.07 ± 57.81
尖草坪	66.09 ± 63.22	67.25 ± 55.65	59.55 ± 47.57	52.38 ± 43.84	50.92 ± 44.46	59.24 ± 50.95
巨轮	—	—	—	56.76 ± 45.01	54.05 ± 41.13	65.27 ± 57.74
晋源	69.36 ± 71.22	74.73 ± 72.37	71.47 ± 58.99	63.51 ± 61.27	58.11 ± 53.00	63.71 ± 59.55
桃园	66.57 ± 72.22	70.23 ± 66.98	60.11 ± 44.31	53.47 ± 45.56	51.29 ± 44.39	60.63 ± 56.13
金胜	72.26 ± 69.24	68.43 ± 68.46	60.69 ± 52.71	56.45 ± 50.02	55.45 ± 48.02	57.44 ± 51.84
均值	67.18 ± 66.08	64.89 ± 60.46	56.67 ± 46.85	54.52 ± 47.04	52.57 ± 45.32	

1) 数值为平均值 ± 标准差; 巨轮监测站为2019年后新增站点; “—”表示没有观测值

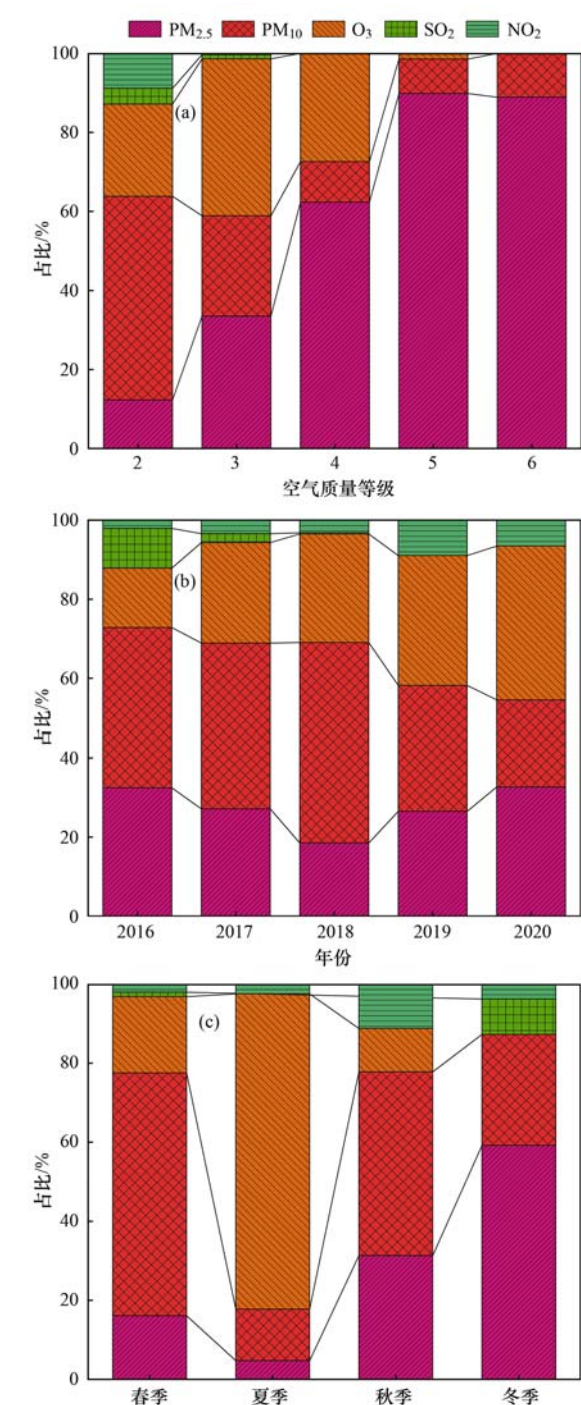


图4 2016~2020年太原市区首要污染物分布占比
Fig. 4 Distribution proportion of primary pollutants in Taiyuan City from 2016 to 2020

$\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$. 从地形特点来看,太原市区系舟山,东山和西山三面环山,中、南部为汾河谷地,整个地形北高南低,大致呈簸箕形,地形较为封闭,易出现逆温现象,不利于大气污染物扩散.上兰一直是作为清洁对照点的监测点,地处太原市西北边界,PM_{2.5}浓度年均值也是最低,南寨和金胜监测点离市中心相对较远,PM_{2.5}浓度年均值也相对较低.巨轮、小店及桃园监测点地处太原市中心区域,商业活动和人类活动相对密集,使得

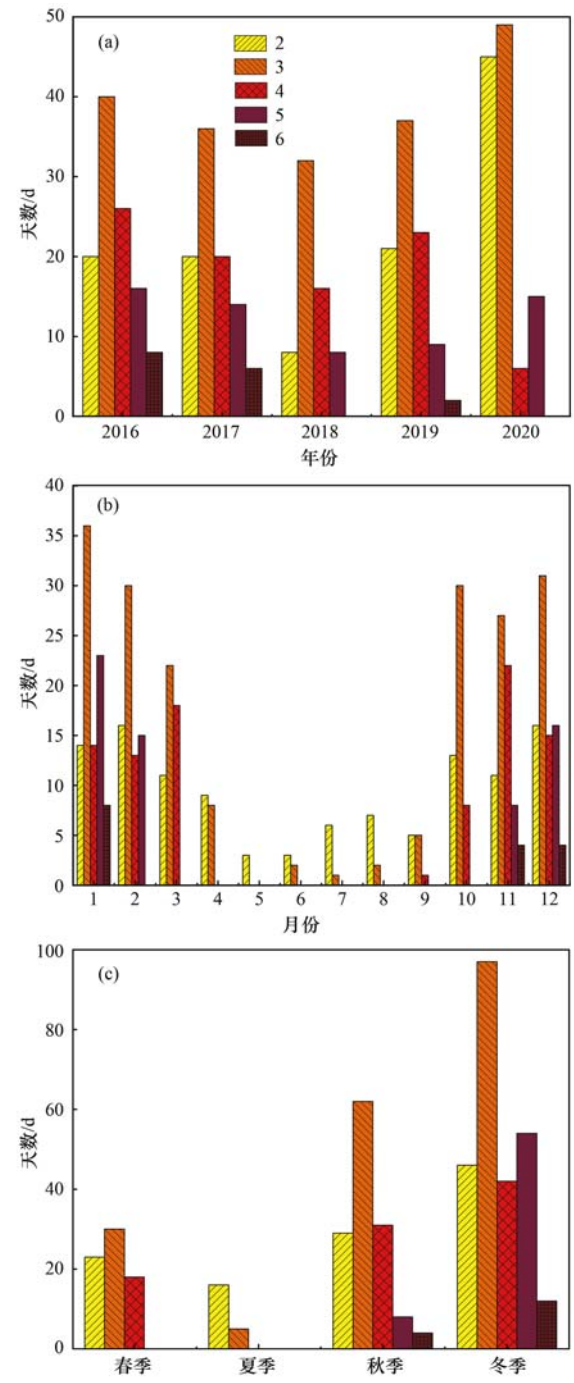


图5 2016~2020太原市区首要污染物为PM_{2.5}的不同空气质量等级的年际、月际和季节分布

Fig. 5 Interannual, monthly and seasonal distribution of different air quality levels with PM_{2.5} as the primary pollutant in Taiyuan City from 2016 to 2020

PM_{2.5}浓度年均值较高,尤其是小店作为中国的百强区,以及太原市南移西进的重点发展区域,使得近几年该区域污染影响也较为显著,巨轮和桃园地处于太原市老城区,商业密集和居民较多,污染相对也较为明显.晋源监测点尽管离市中心区域较远,但作为太原市著名的旅游景区人类活动也相对密集,使得该测点的PM_{2.5}浓度年均值也较高.

2.2.2 太原市区 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度月变化特征

由图6可见:太原市区2016~2020年 $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 的月变化大致呈现“U”型分布, $\text{PM}_{2.5}$ 月均值一般12月和1月达到最高值,其中2016年的12月的 $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 月均值最高,为 $142.85 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$,2017年1月和2020年1月的 $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 月均值最高,分别为 $130.23 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ 和 $112.21 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$; $\text{PM}_{2.5}$ 月均值一般8月达到最低值,其中2019和2020年 $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 月均值最低分别为 $26.64 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ 和 $27.39 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$.究其原因,主要是每年的12月和1月都是天气最为寒冷的阶段,月平均日照时数较少分别为173.1 h和177.9 h,地面能接收的太阳辐射也最少,分别为 $8.41 \text{ MJ}\cdot\text{m}^{-2}$ 和 $9.44 \text{ MJ}\cdot\text{m}^{-2}$,再加上寒潮到来,气温达到一年的最低值分别为 -9.4°C 和 -11.5°C ,此时的集中供热迎来最高峰,由此排放的各种大气污染物也达到高峰,并且这个时段静稳天气出现频率增多,伴随着逆温的强度和频率也增多,致使大气湍流减弱,大气污染物沉积在近地面无法扩散,能见度降低,形成冬季常见的雾、霾天气, $\text{PM}_{2.5}$ 浓度达到一年中最高值.2月一般处于每年的春节假期,工厂企业大多处于停产或半停产状态,使得各种大气污染物的排放有所降低,人类活动也相对较少,使得 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度略有所下降;进入3月后,大风天气逐渐开始增多,比较有利于大气污染物的扩散,因而使得 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度较前两个月有明显降低,但是大风也偶而会引发沙尘天气,也会使得 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度升高,如2018年3月 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度升高就是沙尘造成的;4月到10月为太原市城区的非采暖期,污染物排放相对减少,使得 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度开始逐步降低;11月初开始,又恢复

采暖供热,静稳天气开始增多,使得 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度又开始逐步升高.

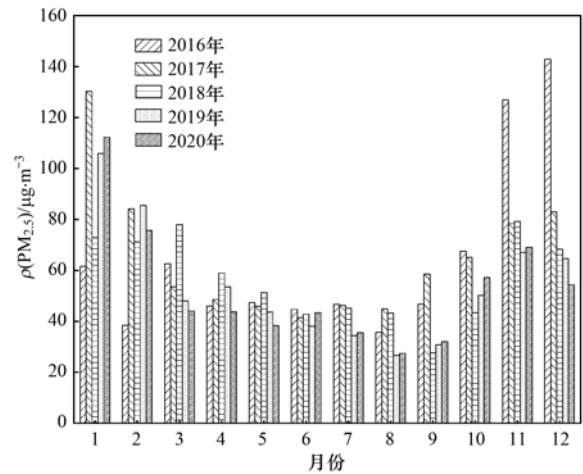


图6 2016~2020年太原市区各月 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度分布状况

Fig. 6 Monthly $\text{PM}_{2.5}$ concentration distribution in Taiyuan City from 2016 to 2020

2.2.3 太原市区 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度季节分布特征

细颗粒物 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度不仅随着时间表现出一定的规律性,而且深受地形条件、植被覆盖、人类活动强度、工业污染源排放以及城市汽车尾气排放等多种因素的影响.由图7可见,太原市区 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度从季节来看,总体呈现出冬季最高,夏季最低.究其原因:夏季太原市城区大气铅直方向扩散能力较强,有效抑制污染物的累积,此外水平向受到偏南季风的影响(见图8),降水增多,也可以进一步加快污染物的稀释沉降,使得 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度较低.冬季太原市城区采暖主要以燃煤为主,再叠加其他的大气污染物排放量较大,加上大气层结稳定,对流湍流相对较少,风速较低等导致静稳天气增多不利于污染物的扩

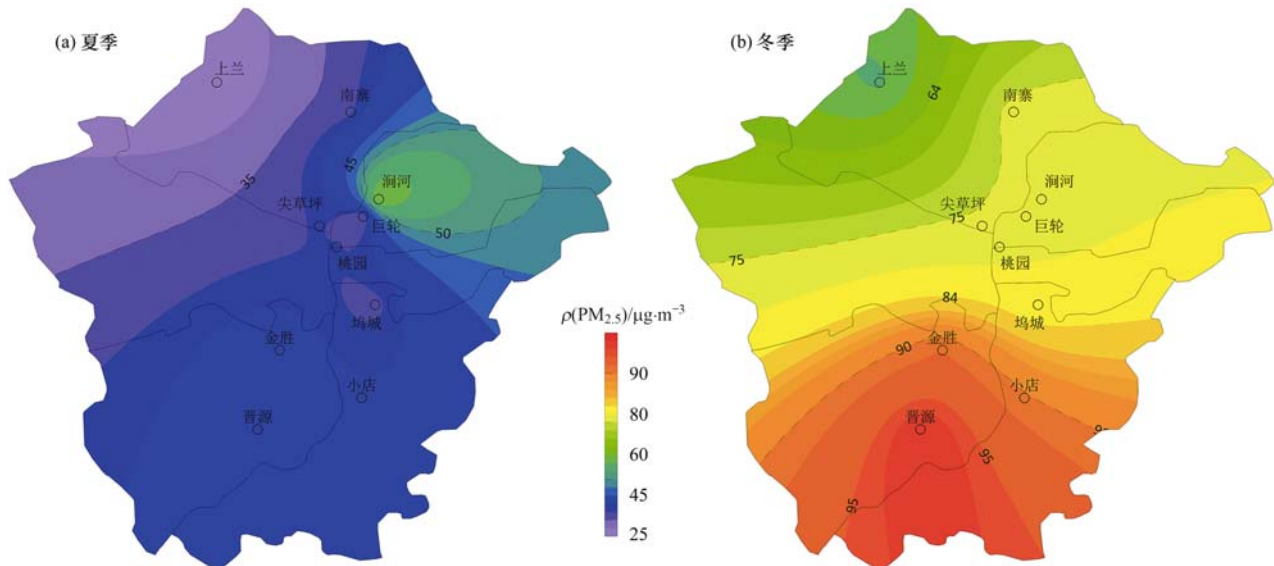


图7 2016~2020年太原市区 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度夏季和冬季分布情况

Fig. 7 Distribution of $\text{PM}_{2.5}$ concentration in summer and winter in Taiyuan City from 2016 to 2020

散,同时降水少不利于污染物的稀释沉降^[7]. 空间分布来看, $\text{PM}_{2.5}$ 浓度大致呈现出北低南高,由北向南逐渐升高的趋势,这也与太原市的南移西进的总体规划布局相关. $\text{PM}_{2.5}$ 浓度高值中心主要位于太原市西南部的晋源区和南部的小店区.

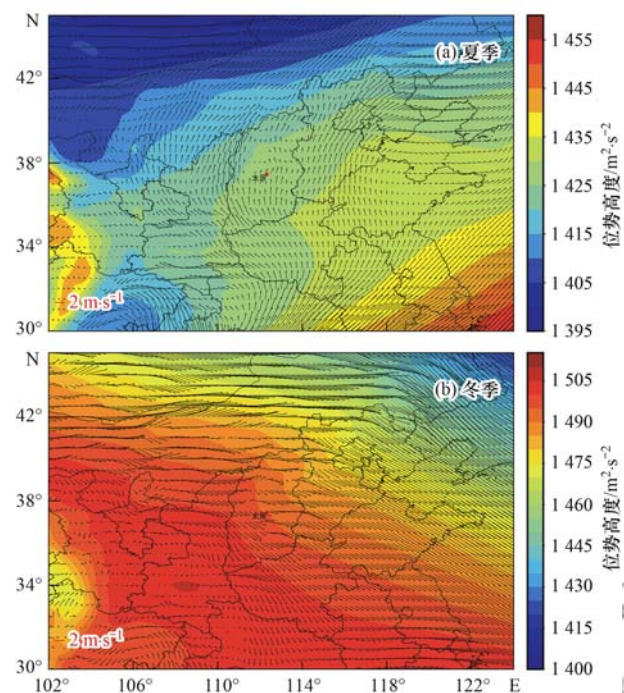


图8 2016~2020年850 hPa高度夏季和冬季大气流场

Fig. 8 Atmospheric flow field diagram of 850 hPa height in summer and winter from 2016 to 2020

2.2.4 太原市城区 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度周、日变化特征

许多大中型城市的空气污染物质量浓度变化趋势存在明显的周末效应.如北京市周末 $\text{PM}_{2.5}$ 平均浓度明显高于工作日浓度^[44].主要是由于在工作日和非工作日时段机动车出行量和人们的生产生活强度存在较大的差异,且污染物浓度的上升具有一定的滞后性^[45],这也使得 $\text{PM}_{2.5}$ 平均浓度在同一周内表现出不同的高低变化特征.由图9可以看出,太原市城区 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度的分布也具有较为明显的周末效应,周末(尤其是周六)的 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度明显高于工作日浓度.从不同季节和不同工作日的 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度日变化情况来看, $\text{PM}_{2.5}$ 浓度日变化大致呈现双峰型分布,第一个峰值都出现在09:00左右,之后随着太阳辐射加大,近地层空气受热上升,大气湍流逐渐加强,混合层高度也随之升高,大气扩散能力增强^[45], $\text{PM}_{2.5}$ 浓度开始逐步降低,17:00左右 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度降至日内最低值,23:00至翌日01:00出现日内的第2个峰.其中第一个 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度峰值在09:00左右,与太原市的交通早高峰时间基本重合,这主要是由于 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度升高也需要一个积累的时间,所以比早高峰时间稍微滞后1 h左右;夜间的第二个 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度峰值可

能与交通晚高峰排放的污染物进一步由逆温等气象条件造成的 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度累积有关^[46].

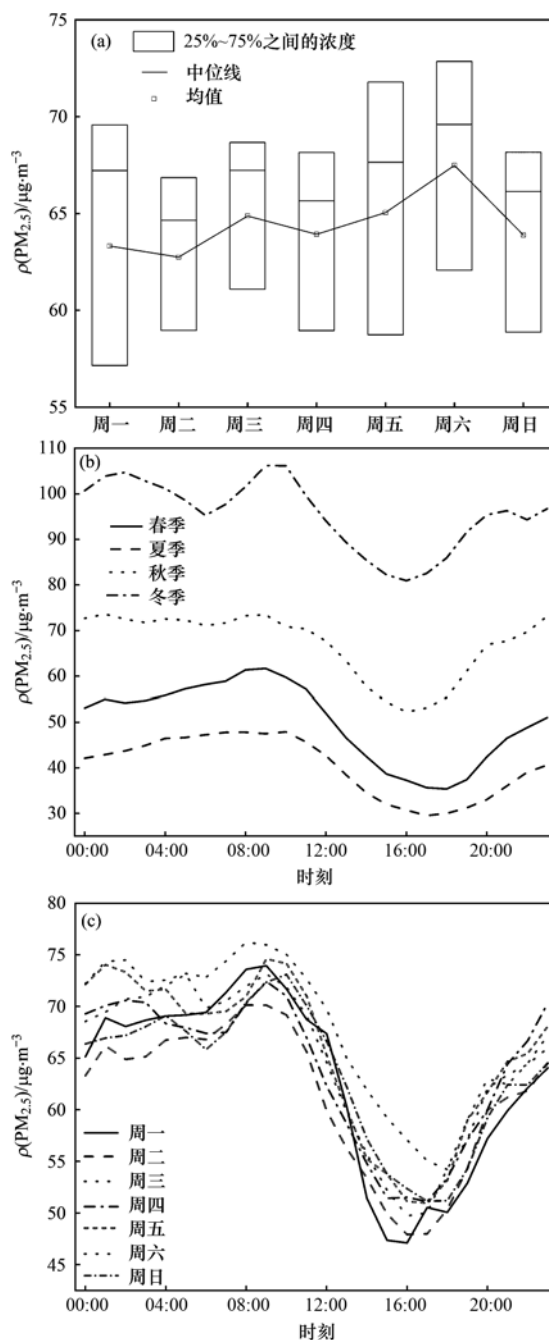


图9 2016~2020年太原市城区 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度周日变化情况

Fig. 9 Diurnal variation in $\text{PM}_{2.5}$ concentration in Taiyuan City from 2016 to 2020

2.3 太原市城区 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度与主要气象因子关系

2.3.1 主要气象因子与 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度相关性分析

表2给出近太原市城区四季 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度与主要气象因子的 Spearman 秩相关系数.气温与 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度在春季、夏季和秋季主要为负相关关系,冬季呈现正相关,可能是由于冬季气温升高,冷空气减弱,易形成逆温的稳定层结,从而造成污染物累积,使得 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度升高.

气压与 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度在4个季节均表现为负相关

关系,尤其是冬季呈现较为显著的负相关.可能由于冬季近地面一般受高压控制,尤其是冷锋过境,气压升高,使污染物水平扩散能力增强,从而降低了PM_{2.5}浓度,而且这与太原城区三面环山的地形有关,气压升高,促使污染物水平流动有关^[34].

相对湿度与PM_{2.5}浓度主要呈现正相关,尤其在秋冬季和春季都呈现显著正相关,原因可能是空气的相对湿度越大,其中的水滴越容易吸附颗粒污染物,从而使得PM_{2.5}浓度升高.

风速与PM_{2.5}浓度主要表现为负相关,尤其是冬季和秋季呈显著强负相关,原因主要是风速越大,越有利于污染物的水平扩散,从而降低PM_{2.5}浓度.

降水与PM_{2.5}浓度主要为负相关,尤其在春季、夏季和秋季都通过了0.05的显著性检验.因为降水可以稀释空气中的污染物,使其产生沉降,起到很好的空气净化器的作用.但是冬季的降水与PM_{2.5}浓度呈现弱的正相关,相关系数很小,原因可能是太原城区冬季降水较少,使得统计的样本量较少,少量的降水不仅达不到稀释污染物,而且产生的高湿度天气,反而诱发了污染物的吸附增长,加剧空气污染,造成PM_{2.5}浓度不降反升.这也与卢盛栋等^[43]的研究结论一致.

混合层高度与PM_{2.5}浓度主要为负相关,尤其在冬季和秋季都通过了0.05的显著性检验.因为混合层高度越高,越有利于污染物垂直方向的扩散.

表2 不同季节PM_{2.5}浓度与气象因素的Spearman秩相关系数¹⁾

Table 2 Spearman rank correlation coefficient between PM _{2.5} concentration and meteorological factors in different seasons				
	春季	夏季	秋季	冬季
气温	-0.152 *	-0.044 *	-0.277 *	0.014
气压	-0.059 *	-0.048 *	-0.009	-0.228 **
相对湿度	0.306 **	0.171 *	0.237 **	0.525 **
露点温度	0.210 **	0.223 **	-0.050 *	0.510 **
风向	-0.107 *	-0.023 *	-0.076	-0.199
风速	-0.146 *	-0.119 **	-0.191 **	-0.323 **
降水量	-0.034 *	-0.068 *	-0.051 *	0.011
混合层高度	-0.105 *	-0.022	-0.192 *	-0.247 *
通风量	-0.106 *	-0.107 *	-0.179 *	-0.250 *
自净能力	-0.106 *	-0.107 *	-0.179 *	-0.250 *

1) * 表示 $P < 0.05$, ** 表示 $P < 0.01$

2.3.2 相对湿度对PM_{2.5}浓度影响分析

相对湿度可以影响大气污染物的形态(气态、液态、半液态和固态等)转化以及大气污染之间的化学反应进程^[47],本文为了避免降雨等因素对相对湿度的影响,剔除了所有出现降水的数据,同时考虑到小时数据量过大(43 800条记录)不利于直观显示,故将小时相对湿度按照每隔2%等频分布的原则,均匀划分为50个相对湿度段,计算每个相对湿度段的PM_{2.5}浓度均值,然后将两者做线性相关拟合分析.由图10可见,春季气温逐渐回升,大风天数较多,相对湿度较低,随相对湿度的增加逐渐上升,相对湿度达到70%后,PM_{2.5}浓度保持相对稳定略有下

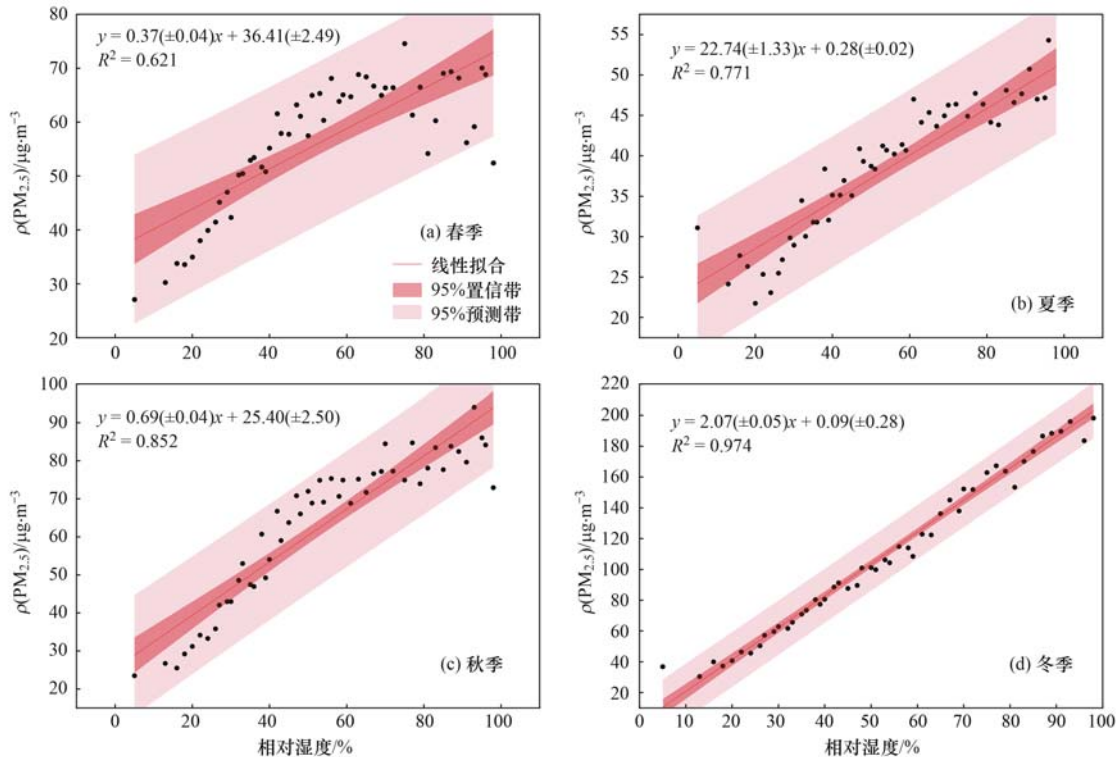


图10 2016~2020年太原市区不同相对湿度下PM_{2.5}浓度的变化特征

Fig. 10 Variation Characteristics of PM_{2.5} under different relative humidities in Taiyuan City from 2016 to 2020

降. 夏季来临后由于急剧升温, 降雨逐渐增多, 空气变得相对湿润, 相对湿度相对较高; $\text{PM}_{2.5}$ 浓度总体上随着相对湿度的增加而略有升高, 升高的幅度很小. 秋季气温开始逐渐降低, 天气凉爽, $\text{PM}_{2.5}$ 浓度总体上随着相对湿度的增加而逐渐升高, 尤其是相对湿度在 40%~60% 的区间内, $\text{PM}_{2.5}$ 浓度升高较为明显, $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 平均值约为 $71 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$. 冬季平均气温较低, 又处于采暖期, 研究区内的降雪天气相对较少, 相对湿度较低, $\text{PM}_{2.5}$ 浓度总体上随着相对湿度的增加升高显著, 当相对湿度在 90% 以上时, $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 平均值约为 $202 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, 说明此时大气污染物随着相对湿度升高, 使得大气中的细颗粒物吸湿增大、积聚增多, 而且不同污染物之间也容易产

生化学反应, 导致二次污染物的产生, 使得污染物的形态发生变化, 尤其当相对湿度较高时, 雾、霾等不利于空气扩散的天气进一步加重 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度.

2.3.3 风向风速对 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度影响分析

风速的大小可以影响大气污染物的迁移扩散程度, 风向可以反映大气污染物随着风向的迁移方向. 图 11 为 2016~2020 年 4 个不同季节太原市区不同风向风速下 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度的分布. 从中可见, 研究区春季主要以 NE-ENE 风为主, 在 ENE 风方向下且风速为 $6 \sim 8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时 $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 平均值最高, 为 $79.69 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, 在出现频率较少的 NE 和 ESE 风方向下且风速为 $7 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 左右时 $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 相对较高, 为 $73.96 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ 和 $70.23 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$.

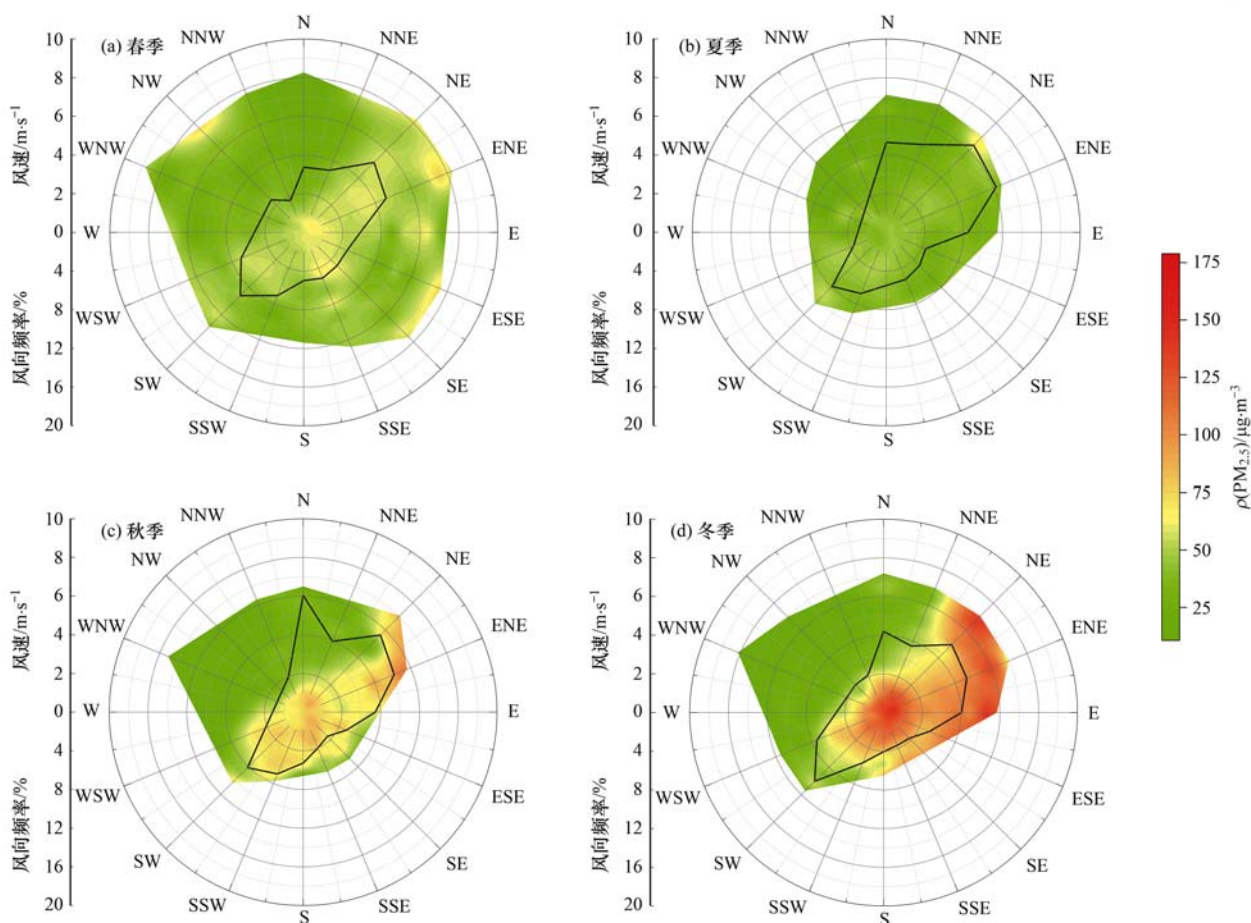


图 11 2016~2020 年太原市区 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度随风向风速的变化

Fig. 11 Variation in $\text{PM}_{2.5}$ with wind speed in Taiyuan City from 2016 to 2020

研究区夏季主要盛行 NE-ENE 风, 在 NE 风方向下且风速为 $6 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 左右时 $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 平均值最高, 为 $60.42 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$; 在风向频率较低的 SW 风方向下且风速为 $4 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 左右时 $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 平均值也较高, 为 $59.63 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$.

研究区秋季以 N 风和 NE-ENE 风出现频率最高, 在 ENE 风方向下且风速为 $5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 左右时

$\rho(\text{PM}_{2.5})$ 平均值最高为 $108.25 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, 此外在风向频率较低的 SSE 和 ESE 风方向下且风速为 $1 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 左右时 $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 平均值也较高, 为 $80.52 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ 和 $82.36 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$.

研究区冬季 NE-ENE 风出现频率最高, $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 平均值也是在 NE-ENE-E 风方向下且风速为 $6 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 左右时较高, 分别为 135.32 、 149.10 和

150.12 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$. 这可能是由于太原市区的东部和东北部分布有太原钢铁集团、太原二电厂等重工业企业,且该区域作为老城区人口较为密集,加之太原市东依太行山,南部为汾河谷地平原,使得高浓度的 $\text{PM}_{2.5}$ 气团经远距离输送后在山前汇聚^[36]. 综上分析可见影响太原市区 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度升高的污染源主要位于其NE-ENE-E方向,其次为SW方向,而位于西北部地区的相对不明显.

2.3.4 大气混合层高度对 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度影响分析

根据 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度的日变化特征分析大气混合层厚度与 $\text{PM}_{2.5}$ 日均浓度的相关关系. $\text{PM}_{2.5}$ 浓度与08:00混合层高度相关系数为-0.254,通过95%置信度检验,与14:00混合层高度相关系数为0.085,两者相关性较差,故选取08:00混合层高度对 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度进行分析.2016~2020年(由于2020年4月1日后不再进行总云、低云的观测,故无法计算混合层高度,本次大气混合层高度统计截止到2020年3月31日)太原市区08:00混合层高度为21~3092 m,平均高度为698 m.分析08:00不同混合层高度下 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度平均值可知(图12). $\text{PM}_{2.5}$ 浓度平均值随着大气混合层高度的增加呈现出逐渐下降趋势,且也表出明显的季节变化特征:冬季>秋季>春季>夏季.以冬季为例, $\text{PM}_{2.5}$ 浓度平均值随着大气混合层高度的增加下降趋势很明显,尤其是在混合层高度小于500 m时, $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 平均值由127.46 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ 下降为92.60 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$,下降率为27%,混合层高度到达1000 m以上时,下降率逐渐平缓.而且当大气混合层高度小于300 m时 $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 平均值为116.05 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$,当大气混合层高度大于2000 m时 $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 平均值为36.19 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$,后者相比前者

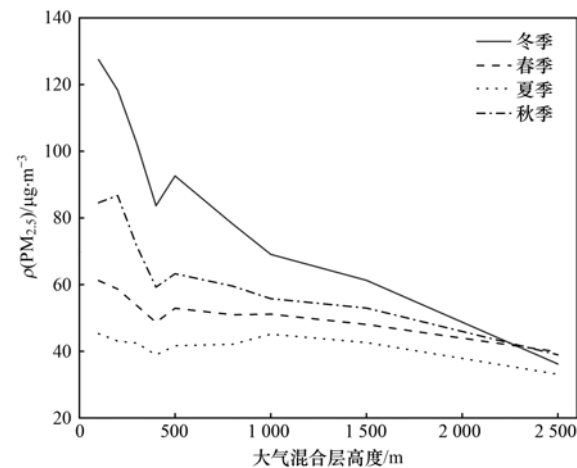


图12 2016~2020年太原市区 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度随大气混合层高度(08:00)的变化

Fig. 12 Variation in $\text{PM}_{2.5}$ with mixed layer height at eight o'clock in Taiyuan City from 2016 to 2020

低约68%. 总体上表明大气混合层高度增加对于 $\text{PM}_{2.5}$ 在垂直方向的扩散和稀释非常有利,可以大幅降低大气污染物的浓度.

2.3.5 降水对 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度影响分析

考虑到太原市的降水相对集中,而且主要集中在夏秋季节,故此次研究将每年6~10月作为汛期,其余1~5月和11~12月作为非汛期,分别统计汛期和非汛期 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度在有无降水时的不同等级的出现频率(表3).可以看出2016~2020年太原市区汛期在有无降水时,空气质量优和良出现频率分别为92.7%和88.1%,空气重污染出现频率分别为0.5%和2.7%;非汛期有无降水时,空气质量优和良出现频率分别为67.0%和61.8%,空气重污染出现频率分别为15.5%和17.9%;可见, $\text{PM}_{2.5}$ 浓度在有降水的汛期的出现频率要更低.这可能与太原市的气候特征有一定的关系,汛期印度洋的偏西南气流带来的气团产生的降水对污染物有一定的稀释作用,而且汛期降水较为频繁,也有利于进一步降低污染物浓度.非汛期降水对 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度也有一定影响,但降低幅度有限,这可能与太原市冬季的降水主要以小雪为主,降水量少,对污染物的冲刷和稀释作用有限,有时甚至由于小雪天气造成湿度增大,使得污染物吸湿增长,造成污染物浓度的增大.

表3 2016~2020年太原市汛期和非汛期不同等级 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度在有无降水时出现频率¹⁾/%

Table 3 Frequency of $\text{PM}_{2.5}$ concentration of different grades with and without precipitation in flood season and non-flood season in Taiyuan City from 2016 to 2020/%

$\rho(\text{PM}_{2.5})/\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$	汛期		非汛期	
	无降水	有降水	无降水	有降水
0~35	39.2	40.5	21.5	25.8
35~75	48.9	52.2	40.4	41.2
75~115	9.2	6.8	20.2	17.5
115~150	1.8	0.5	8.2	11.3
150~250	0.8	—	7.7	2.1
≥ 250	—	—	2.0	2.1
优良比例(合计)	88.1	92.7	61.8	67.0
重污染比例(合计)	2.7	0.5	17.9	15.5

1) “—”表示无观测值

表4 通过统计分析6种不同级别的降水量对 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度的减少效果(即前后2 d内 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度日均差占前一日 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度的比值).

(1) 非汛期 在无降水时, $\text{PM}_{2.5}$ 浓度变化率也呈现出正增长,且明显高于汛期;在有降水出现时, $\text{PM}_{2.5}$ 浓度变化率大致呈现减少趋势,相对汛期变化更为明显.其中,出现较小的降水(即 $1\text{ mm}\leq$ 降水量 $<10\text{ mm}$)以下对 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度的降低能力有限,但当

降雨达到中雨级别时对于 PM_{2.5} 浓度的降低有非常明显的效果. 这可能因为太原市非汛期的降水一般为偏弱降水, 降水量少, 而且降水多以层状降水为主, 一般发生在较为稳定大气层结中, 边界层湍流一般比较微弱, 这样不仅影响污染物的扩散稀释同时加大了空气的相对湿度, 使得气溶胶粒子进一步吸湿增长, PM_{2.5} 浓度不降反升.

(2) 汛期 在无降水时, PM_{2.5} 浓度变化率呈现出正增长, 但低于非汛期; 在有降水出现时, PM_{2.5}

浓度变化率呈现出明显的减少趋势, 而且随着降水量级的增大减少的幅度也增大, 当达到中雨 (即降水量 ≥ 10 mm) 以上的级别都对 PM_{2.5} 浓度降低有明显效果, 尤其是暴雨级别降低达到 50% 以上, 由于汛期 PM_{2.5} 浓度总体偏低, 到达一定低值后继续减少的空间较小, 所以在小雨以下的降水对于 PM_{2.5} 浓度降低效果有限, 但是强对流性的大到暴雨使得污染物在垂直方向湍流扩散加剧, 可以大大降低 PM_{2.5} 浓度.

表 4 2016 ~ 2020 年太原市汛期和非汛期不同降水量等级对 PM_{2.5} 浓度影响¹⁾
Table 4 Effects of different precipitation levels on PM concentration in flood season and non-flood season in Taiyuan City from 2016 to 2020

日降水量(R)/mm	汛期		非汛期	
	PM _{2.5} 变化率/%	$\rho(\text{PM}_{2.5})/\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$	PM _{2.5} 变化率/%	$\rho(\text{PM}_{2.5})/\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$
无降水(R=0)	15.65	46.13	23.13	76.56
微量降水(0<R<1)	20.98	47.35	11.80	75.08
小雨(1≤R<10)	5.33	41.20	12.03	71.51
中雨(10≤R<25)	-13.81	38.40	-13.39	52.88
大雨(25≤R<50)	-3.28	30.33	—	—
暴雨(50≤R<100)	-58.38	22.71	—	—

1) “—”表示无观测值

2.3.6 PM_{2.5} 浓度与气象因素 k-means 聚类结果分析
为综合考虑多种气象因素对 PM_{2.5} 浓度的影响, 本研究采用 k-means 聚类分析方法, 计算污染物及各个气象样本数据之间的欧氏距离, 找到样本数据之间潜在的类簇, 从而综合分析出多种气象要素和污染物浓度之间的关系. 本研究中 PM_{2.5} 浓度及其气象要素的最佳分类簇数为 4, 轮廓系数衡量同一簇中所有样本数据点之间的距离, 通过计算轮廓系数为 0.37.

聚类结果见表 5, 以冬季为例, 第 1 类: 较高温 (2.5℃)、低湿 (25%) 和高压 (933.93 hPa), 受西北风影响, 平均风速为 4.1 m·s⁻¹, $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 平均值为 51 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, 低于国家日均 PM_{2.5} 二级浓度限值 (75 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$), 高混合层高度 (1 450 m); 此聚类下的气象条件风速大, 且风向偏西北向, 湿度小, 地面处于高压控制, 混合层高度高, 使得 PM_{2.5} 浓度较低; 因此认为此聚类中的气象条件属于最利于 PM_{2.5} 浓度平均值降低的类簇; 第 2 类: 常温 (0.5℃)、低湿 (39%), 高压 (933.54 hPa), 主导风为东南风, 平均风速为 2.7 m·s⁻¹, $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 平均值为 75.7 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, 相对 1 类, 接近国家日均 PM_{2.5} 二级浓度限值 (75 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$), 较高的混合层高度 (860 m); 该类簇气象条件, 风速也较大, 偏东南风, 湿度较小, 地面相对高压控制, 混合层高度较高, 使得 PM_{2.5} 浓度较低; 因此认为此聚类中的气象条件属较利于 PM_{2.5} 浓度平均值降低的类簇; 第 3 类: 较低温

(-1.7℃)、湿度中等 (48%), 弱高压 (933.89 hPa), 主导风为偏南风, 平均风速为 1.7 m·s⁻¹, $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 平均值为 85.9 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, 超过国家日均 PM_{2.5} 二级浓度限值 (75 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$), 混合层高度较低 (415 m); 该类簇气象条件, 风速较小, 地面也处于弱高压控制, 盛行湿度中等的偏南气流, 使得 PM_{2.5} 浓度较高, 因此认为此聚类中的气象条件属较不利于 PM_{2.5} 浓度平均值降低的类簇; 第 4 类: 低温 (-3.4℃)、湿度较大 (56%), 弱高压 (933.07 hPa), 主导风为偏东南风, 平均风速为 1.1 m·s⁻¹, $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 平均值为 121.6 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, 远超过国家日均 PM_{2.5} 二级浓度限值 (75 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$), 混合层高度很低 (162 m); 该类簇气象条件, 风速小, 地面也处于弱高压控制, 盛行湿度中等的偏东南气流, 使得 PM_{2.5} 浓度较高, 因此认为此聚类中的气象条件属最不利于 PM_{2.5} 浓度平均值降低的类簇.

2.4 基于 LSTM 的 PM_{2.5} 浓度预报结果分析

2.4.1 LSTM 模型预测结果分析

从图 13 可见, LSTM 模型预测和观测散点呈现出向对角线集中分布的形态, 无论在 PM_{2.5} 浓度高浓度还是在低浓度区间, 都分布均匀, 说明该模型预测值和观测值较为一致, 对 PM_{2.5} 预测精度更高, 更接近实测值. LSTM 模型对 PM_{2.5} 浓度值的预测结果残差接近正态分布, 其中 84.2% 预测结果的绝对误差低于 20 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, 且有 60% 预测结果的误差在 10 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ 以内, 只有 0.8% 预测结果的误差大于 30

表 5 影响 PM_{2.5} 浓度气象要素的聚类均值分析¹⁾

Table 5 Cluster mean analysis of meteorological elements affecting PM _{2.5} concentration								
分类	$\rho(\text{PM}_{2.5})$ / $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$	气温/ $^{\circ}\text{C}$	气压 /hPa	相对湿度 /%	风向 /($^{\circ}$)	风速 / $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$	降水量 /mm	混合层高度 /m
1	51.0	2.5	933.93	25	200	4.1	0.003	1 450
2	75.7	0.5	933.54	39	155	2.7	0.017	860
3	85.9	-1.7	933.89	48	166	1.7	0.006	415
4	121.6	-3.4	933.07	56	140	1.1	0.001	162

1) 以冬季为例

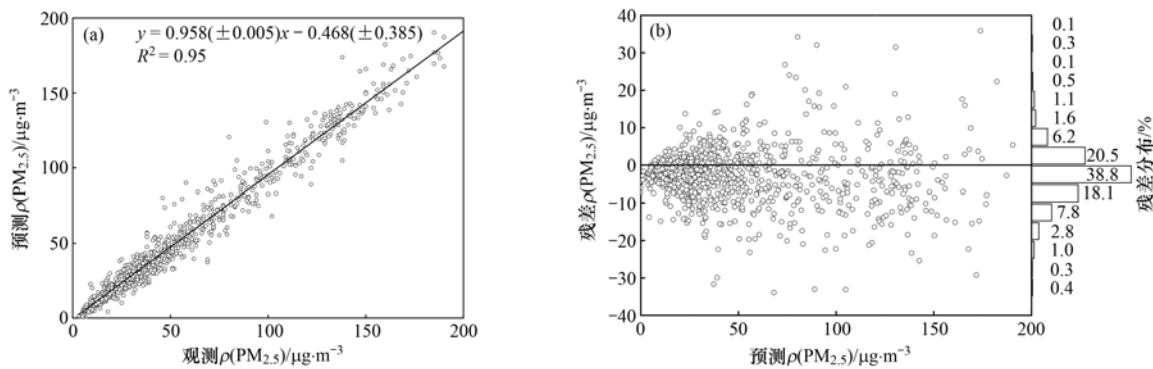


图 13 LSTM 模型预测值和观测值散点和残差分布

Fig. 13 Scatter and residual diagram of predicted and observed values of LSTM model

$\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$.

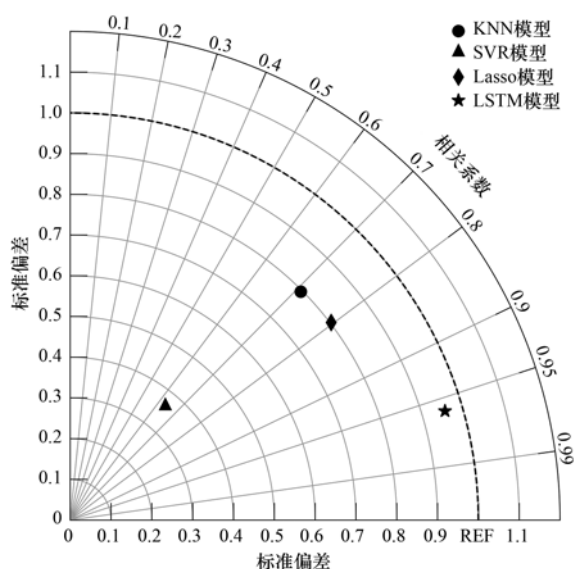
2.4.2 LSTM 模型与机器学习模型模拟指标对比分析

为了检验 LSTM 模型的精准预测性能,基于不包括日期属性特征和延迟序列属性特征的变量构建 3 种机器学习模型作为对比.包括 K 邻近回归模型(KNN)、套索回归模型(Lasso)和支持向量机模型(SVR).所有对比模型使用的训练数据及测试数据与 LSTM 模型都相同.通过分别计算上述 4 个模型预测值的评估指标,结果如表 6 所示. LSTM 模型的 MAE、MAPE 和 RMSE 分别为 38.17、17.19% 和 20.6,与 Lasso 模型相比,分别降低了

7.7%、5.1% 和 6.1%;相比于 SVR 预测模型的 MAE、MAPE 和 RMSE 分别降低了 23.1%、15.3% 和 29.9%;相比于 KNN 预测模型,LSTM 模型的 MAE、MAPE 和 RMSE 分别降低了 17.2%、19.8% 和 15.2%.结果显示,LSTM 模型在测试数据上具有相对较好地预测效果, R^2 达 0.95,显著优于 KNN 模型、Lasso 模型和 SVM 模型(R^2 均低于 0.70),由图 14 可见,4 种模型预测值与观测值的相关系数依次为 0.76、0.78、0.82 和 0.95,LSTM 模型的预测效果均好于 Lasso 模型、KNN 模型和 SVR 模型,各项评估指标也表明 LSTM 模型最佳.

表 6 4 种模型 PM_{2.5} 预测结果评估

Table 6 Evaluation of PM _{2.5} prediction results of four models					
参数	实况	模型			
		KNN	SVR	Lasso	LSTM
均值/ $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$	60.52	58.75	51.07	61.34	60.79
中值/ $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$	47.56	50.73	47.40	52.94	48.48
25% 分位数/ $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$	28.75	37.45	38.24	36.77	27.51
75% 分位数/ $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$	76.50	68.20	59.56	74.75	73.40
标准差 σ	47.96	34.91	18.65	37.78	46.15
中值偏差/ $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$		-1.77	-7.68	10.27	0.27
25% 分位数偏差/ $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$		3.17	-3.33	5.54	0.92
75% 分位数偏差/ $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$		8.7	0.79	-1.47	-1.24
均方根误差(RMSE)		30.65	37.08	26.74	20.60
平均绝对误差(MAE)		47.59	45.06	41.38	38.17
平均绝对百分比误差(MAPE)/%		20.75	22.34	18.11	17.19
决定系数(R^2)		0.59	0.40	0.68	0.95



参考点 REF 为观测值,预测值到原点的距离代表其相对于 REF 的标准差,预测值在图中方位角的余弦表示其与 REF 的相关系数

图 14 4 种模型预报结果(泰勒图)

Fig. 14 Taylor plot of PM_{2.5} by KNN, SVR, Lasso, and LSTM model

本文构建的 LSTM 预测模型对 PM_{2.5} 预测展现出了较好的性能,但是也存在一些不确定性。首先,PM_{2.5} 本身就是一种混合颗粒物,成分比较复杂,主要以有机物、硝酸盐、硫酸盐、铵盐构成的无机盐类及粉尘为主,如果能够获取本地的 PM_{2.5} 组成,将其加入到构建特征的数据集中,可能会进一步提高模型的预测精度。其次,本文主要是结合相关的高空和地面气象因素,没有考虑生态植被覆盖和地形条件等环境自身的要素特征构建数据集,因为生态环境的因素可能对 PM_{2.5} 有一定的吸附和缓解作用。再次,PM_{2.5} 深受人为污染源排放影响,冬季的集中供热采暖,秋季秸秆燃烧等许多人为因素都对 PM_{2.5} 浓度产生很大影响,在未来的建立预测模型的过程中,考虑获取更多的一些影响 PM_{2.5} 浓度的特征加入到模型的预测中,进一步改进模型的泛化能力,同时也考虑分季节建立不同的预测模型,可能可以更加有针对性预测不同的季节时段的 PM_{2.5} 浓度,从而可以进一步提高预测准确性。最后,该模型最多考虑了延迟 5d 的相关污染物浓度特征,缺乏对更长时序特征的提取,这会对模型的预测性能带来不确定的影响。

3 结论

(1) 2016 ~ 2020 年太原市区的重污染天数冬季出现的天数最多,其中 2017 年冬季出现天数最多为 28 d, PM_{2.5} 浓度一般 12 月和 1 月达到最高值,其中 2016 年的 12 月的 $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 月均值最高为

142.85 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, PM_{2.5} 浓度总体呈现出秋冬季节高,春夏季节低,周末 PM_{2.5} 浓度高于工作日浓度。PM_{2.5} 浓度日变化大致呈现双峰型分布,分别出现在 09:00 左右和 23:00 至翌日 01:00。

(2) 除相对湿度外和冬季气温外,其余气压和风速与 PM_{2.5} 浓度在四季均表现为负相关。影响太原市区 PM_{2.5} 浓度升高的污染源主要位于其 NE-ENE-E 方向,其次为 SW 方向,而位于西北部地区的相对不明显。非汛期出现较小的降水(即 $1\text{ mm} \leq \text{降水量} < 10\text{ mm}$) 以下对 PM_{2.5} 浓度的降低能力有限,但当降雨达到中雨级别时对于 PM_{2.5} 浓度的降低有非常明显的效果。汛期当达到中雨(即降水量 $\geq 10\text{ mm}$) 以上的级别的降水都对 PM_{2.5} 浓度降低有明显效果。PM_{2.5} 浓度随着大气混合层高度的增加呈现出逐渐下降趋势。

(3) 综合考虑多种气象因素对 PM_{2.5} 浓度的影响,k-means 聚类分析结果显示:冬季较高温(2.5°C)、低湿(25%)和高压(933.89 hPa),受西北风影响,平均风速为 $4.1\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, $\rho(\text{PM}_{2.5})$ 平均值为 $51\text{ }\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$,高混合层高度(1450 m);此聚类下的气象条件风速大,且风向偏西北向,湿度小,地面处于高压控制,混合层高度高,使得 PM_{2.5} 浓度较低,属于最利于 PM_{2.5} 浓度平均值降低的类簇。

(4) 采用 LSTM 模型建模,PM_{2.5} 浓度预测的 R^2 高达 0.95,显著优于传统树模型和线性回归模型($R^2 < 0.60$),预测结果残差接近正态分布,其中 84.2% 预测结果的绝对误差低于 $20\text{ }\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$,模型的 MAE、MAPE 和 RMSE 分别为 38.17、17.19% 和 20.6。

参考文献:

- [1] 唐孝炎,张远航,邵敏. 大气环境化学[M]. (第二版). 北京:高等教育出版社,2006.
- [2] 孙美根,韩志伟,雷孝恩. 城市空气污染预报方法简述[J]. 气候与环境研究,2001,6(1): 113-118.
Sun M G, Han Z W, Lei X E. Exposition of urban air pollution forecast methods [J]. Climatic and Environmental Research, 2001, 6(1): 113-118.
- [3] Zhang H Y, Cheng S Y, Yao S, et al. Multiple perspectives for modeling regional PM_{2.5} transport across cities in the Beijing-Tianjin-Hebei Region during haze episodes [J]. Atmospheric Environment, 2019, 212: 22-35.
- [4] 薛文博,王金南,杨金田,等. 国内外空气质量模型研究进展[J]. 环境与可持续发展,2013,38(3): 14-20.
Xue W B, Wang J N, Yang J T, et al. Domestic and foreign research progress of air quality model [J]. Environment and Sustainable Development, 2013, 38(3): 14-20.
- [5] 闫世明,王雁,郭伟,等. 太原市秋冬季大气污染特征和输送路径及潜在源区分析[J]. 环境科学,2019,40(11): 4801-4809.
Yan S M, Wang Y, Guo W, et al. Characteristics, transportation, pathways, and potential sources of air pollution

- during autumn and winter in Taiyuan [J]. *Environmental Science*, 2019, **40**(11): 4801-4809.
- [6] 裴坤宁, 高兴艾, 王淑敏, 等. 晋东南地区冬季 PM_{2.5} 污染输送路径分析[J]. *中国环境科学*, 2022, **42**(2): 557-567.
Pei K N, Gao X A, Wang S M, *et al.* Analysis of PM_{2.5} pollution transportation path in winter in southeast Shanxi province[J]. *China Environmental Science*, 2022, **42**(2): 557-567.
- [7] 王斌涛, 张强, 温肖宇, 等. 运城市 PM_{2.5} 时空分布特征和潜在源区季节分析[J]. *环境科学*, 2022, **43**(1): 74-84.
Wang Y T, Zhang Q, Wen X Y, *et al.* Spatiotemporal distribution and seasonal characteristics of regional transport of PM_{2.5} in Yuncheng city[J]. *Environmental Science*, 2022, **43**(1): 74-84.
- [8] 蔡子颖, 郝团, 韩素芹, 等. 2000~2020 年天津 PM_{2.5} 质量浓度演变及驱动因子分析[J]. *环境科学*, 2020, **43**(3): 1129-1139.
Cai Z Y, Hao J, Han S Q, *et al.* Analysis of change and driving factors of PM_{2.5} mass concentration in Tianjin from 2000 to 2020 [J]. *Environmental Science*, 2020, **43**(3): 1129-1139.
- [9] 潘晨, 康志明. 2001~2019 年气象条件对江苏省 PM_{2.5} 分布的影响[J]. *环境科学*, 2022, **43**(2): 649-662.
Pan C, Kang Z M. Impact of meteorological conditions on PM_{2.5} in Jiangsu province from 2001 to 2019 [J]. *Environmental Science*, 2022, **43**(2): 649-662.
- [10] 丁净, 唐颖潇, 郝天依, 等. 天津市冬季空气湿度对 PM_{2.5} 和能见度的影响[J]. *环境科学*, 2021, **42**(11): 5143-5151.
Ding J, Tang Y X, Hao T Y, *et al.* Impact of air humidity on PM_{2.5} mass concentration and visibility during winter in Tianjin [J]. *Environmental Science*, 2021, **42**(11): 5143-5151.
- [11] 蒋书凝, 孔少飞, 郑煌, 等. 武汉冬季大气 PM_{2.5} 小时分辨率源贡献识别及潜在影响域分析[J]. *环境科学*, 2022, **43**(1): 61-73.
Jiang S N, Kong S F, Zheng H, *et al.* Real-time source apportionment of PM_{2.5} and potential geographic origins of each source during winter in Wuhan [J]. *Environmental Science*, 2022, **43**(1): 61-73.
- [12] 黄小刚, 赵景波, 孙从建, 等. 汾渭平原 PM_{2.5} 空间分布的地形效应[J]. *环境科学*, 2021, **42**(10): 4582-4592.
Huang X G, Zhao J B, Sun C J, *et al.* Orographic influences on the spatial distribution of PM_{2.5} on the Fen-Wei plain [J]. *Environmental Science*, 2021, **42**(10): 4582-4592.
- [13] 杜勤博, 吴晓燕, 郑素帆, 等. 汕头市 PM_{2.5} 的气象要素影响分析及预报研究[J]. *气象与环境学报*, 2019, **35**(5): 70-77.
Du Q B, Wu X Y, Zheng S F, *et al.* Effects of meteorological conditions on PM_{2.5} pollution in Shantou and the PM_{2.5} prediction [J]. *Journal of Meteorology and Environment*, 2019, **35**(5): 70-77.
- [14] 姚青, 蔡子颖, 刘敬乐, 等. 气象条件对 2009-2018 年天津地区 PM_{2.5} 质量浓度的影响[J]. *环境科学学报*, 2020, **40**(1): 65-75.
Yao Q, Cai Z Y, Liu J L, *et al.* Effects of meteorological conditions on PM_{2.5} concentration in Tianjin from 2009 to 2018 [J]. *Acta Scientiae Circumstantiae*, 2020, **40**(1): 65-75.
- [15] 张玮, 郭胜利, 申付振, 等. 南京地区 PM_{2.5} 和 PM₁₀ 浓度分布特征及与相关气象条件的关系[J]. *科学技术与工程*, 2016, **16**(4): 124-129.
Zhang W, Guo S L, Shen F Z, *et al.* The relationship between the distribution characteristics of PM₁₀ and PM_{2.5} in Nanjing area and meteorological conditions [J]. *Science Technology and Engineering*, 2016, **16**(4): 124-129.
- [16] 李娟, 尉鹏, 戴学之, 等. 基于机器学习方法的西安市数值模拟优化研究[J]. *环境科学研究*, 2021, **34**(4): 872-881.
Li J, Wei P, Dai X Z, *et al.* Optimization of numerical simulation in Xi'an based on machine learning methods [J]. *Research of Environmental Sciences*, 2021, **34**(4): 872-881.
- [17] Xu M, Jin J B, Wang G Q, *et al.* Machine learning based bias correction for numerical chemical transport models [J]. *Atmospheric Environment*, 2021, **248**, doi: 10.1016/j.atmosenv.2020.118022.
- [18] 魏煜, 徐起翔, 赵金帅, 等. 基于机器学习算法的新冠疫情管控对河南省空气质量影响的模拟分析[J]. *环境科学*, 2021, **42**(9): 4126-4139.
Wei Y, Xu Q X, Zhao J S, *et al.* Simulation analysis of the impact of COVID-19 pandemic control on air quality in Henan province based on machine learning algorithm[J]. *Environmental Science*, 2021, **42**(9): 4126-4139.
- [19] 芦华, 谢旻, 吴钰, 等. 基于机器学习的成渝地区空气质量数值预报 PM_{2.5} 订正方法研究[J]. *环境科学学报*, 2020, **40**(12): 4419-4431.
Lu H, Xie M, Wu Z, *et al.* Adjusting PM_{2.5} prediction of the numerical air quality forecast model based on machine learning methods in Chengyu region [J]. *Acta Scientiae Circumstantiae*, 2020, **40**(12): 4419-4431.
- [20] Bhargava K, Kalnay E, Carton J A, *et al.* Estimation of systematic errors in the GFS using analysis increments [J]. *Journal of Geophysical Research*, 2018, **123**(3): 1626-1637.
- [21] 夏晓圣, 陈菁菁, 王佳佳, 等. 基于随机森林模型的中国 PM_{2.5} 浓度影响因素分析[J]. *环境科学*, 2020, **41**(5): 2057-2065.
Xia X S, Chen J J, Wang J J, *et al.* PM_{2.5} concentration influencing factors in China based on the random forest model [J]. *Environmental Science*, 2020, **41**(5): 2057-2065.
- [22] 杨瑞君, 赵楠, 凡耀峰, 等. 基于随机森林模型的城市空气质量评价[J]. *计算机工程与设计*, 2017, **38**(11): 3151-3156.
Yang R J, Zhao N, Fan Y F, *et al.* Evaluation of urban air quality based on random forests model [J]. *Computer Engineering and Design*, 2017, **38**(11): 3151-3156.
- [23] 杜续, 冯景瑜, 吕少卿, 等. 基于随机森林回归分析的 PM_{2.5} 浓度预测模型[J]. *电信科学*, 2017, **33**(7): 66-75.
Du X, Feng J Y, Lv S Q, *et al.* PM_{2.5} concentration prediction model based on random forest regression analysis [J]. *Telecommunications Science*, 2017, **33**(7): 66-75.
- [24] 林开春, 邵峰晶. 基于随机森林和神经网络的空气质量预测研究[J]. *青岛大学学报(工程技术版)*, 2018, **33**(2): 32-36.
Lin K C, Shao F J. Research on air quality prediction based on random forest and neural network [J]. *Journal of Qingdao University (Engineering & Technology Edition)*, 2018, **33**(2): 32-36.
- [25] 张志豪, 陈楠, 祝波, 等. 基于随机森林模型的武汉市城区大气 PM_{2.5} 来源解析[J]. *环境科学*, 2022, **43**(3): 1151-1158.
Zhang Z H, Chen N, Zhu B, *et al.* Source analysis of ambient PM_{2.5} in Wuhan city based on random forest Model [J]. *Environmental Science*, 2022, **43**(3): 1151-1158.
- [26] Lightstone S D, Moshary F, Gross B. Comparing CMAQ forecasts with a neural network forecast model for PM_{2.5} in New York[J]. *Atmosphere*, 2017, **8**(9), doi: 10.3390/atmos8090161.
- [27] Liu H, Yan G X, Duan Z, *et al.* Intelligent modeling strategies

- for forecasting air quality time series: a review[J]. *Applied Soft Computing*, 2021, **102**, doi: 10.1016/j.asoc.2020.106957.
- [28] 夏润, 张晓龙. 基于改进集成学习算法的在线空气质量预测[J]. *武汉科技大学学报*, 2019, **42**(1): 61-67.
- Xia R, Zhang X L. Online air quality prediction based on improved ensemble learning algorithm[J]. *Journal of Wuhan University of Science and Technology*, 2019, **42**(1): 61-67.
- [29] 郭飞, 谢立勇. 基于气象因素和改进支持向量机的空气质量指数预测[J]. *环境工程*, 2017, **35**(10): 151-155.
- Gou F, Xie L Y. Air quality index estimation method based on meteorological elements data and modified support vector machine[J]. *Environmental Engineering*, 2017, **35**(10): 151-155.
- [30] 陈菊芬, 李勇. 基于多模态支持向量回归的 PM_{2.5} 浓度预测[J]. *环境工程*, 2019, **37**(1): 122-126, 34.
- Chen J F, Li Y. Forecasting of PM_{2.5} concentration based on multimodal support vector regression[J]. *Environmental Engineering*, 2019, **37**(1): 122-126, 34.
- [31] 谢永华, 张鸣敏, 杨乐, 等. 基于支持向量机回归的城市 PM_{2.5} 浓度预测[J]. *计算机工程与设计*, 2015, **36**(11): 3106-3111.
- Xie Y H, Zhang M M, Yang L, *et al.* Predicting urban PM_{2.5} concentration in China using support vector regression[J]. *Computer Engineering and Design*, 2015, **36**(11): 3106-3111.
- [32] 南亚翔, 李红利, 修春波, 等. 基于卡尔曼滤波的空气质量指数预测方法[J]. *环境科学导刊*, 2016, **35**(3): 80-84.
- Nan Y X, Li H L, Xiu C B, *et al.* Prediction method of air quality index based on Kalman filtering fusion[J]. *Environmental Science Survey*, 2016, **35**(3): 80-84.
- [33] 刘炳春, 郑红梅, 张斌. 基于 IG-LASSO 模型的城市空气质量指数混合预测研究[J]. *环境科学与技术*, 2017, **40**(11): 144-148.
- Liu B C, Zheng H M, Zhang B. Hybrid forecasting of urban air quality index based on IG-LASSO model[J]. *Environmental Science & Technology*, 2017, **40**(11): 144-148.
- [34] 张琨, 王式功, 杜亮亮, 等. 基于 BP 神经网络的河北中南部空气质量预报研究[J]. *江西农业学报*, 2019, **31**(5): 96-102.
- Zhang J, Wang S G, Du L L, *et al.* Study on prediction of air quality in central and southern Hebei based on BP neural network[J]. *Acta Agriculturae Jiangxi*, 2019, **31**(5): 96-102.
- [35] 高愈霄, 汪巍, 黄永海, 等. 基于神经网络和数值模型的重点区域 PM_{2.5} 预报比较分析[J]. *环境科学*, 2022, **43**(2): 663-674.
- Gao Y X, Wang W, Huang Y H, *et al.* Comparison and analysis of PM_{2.5} forecast in key areas based on the neural network model and numerical model[J]. *Environmental Science*, 2022, **43**(2): 663-674.
- [36] 邱晨, 罗璟, 赵朝文, 等. 基于 BP 神经网络的空气质量模型分类预测研究[J]. *软件*, 2019, **40**(2): 129-132.
- Qiu C, Luo J, Zhao C W, *et al.* Classification and prediction of air quality model based on BP neural network[J]. *Computer Engineering & Software*, 2019, **40**(2): 129-132.
- [37] Cabaneros S M, Calautit J K, Hughes B R. A review of artificial neural network models for ambient air pollution prediction[J]. *Environmental Modelling & Software*, 2019, **119**: 285-304.
- [38] Wang W J, Yang S Q. Analysis and forecast of urban air quality based on BP neural network[J]. *International Journal of Advanced Network, Monitoring and Controls*, 2020, **5**(3): 57-64.
- [39] 瞿英, 王冕, 董文旭, 等. 基于 BP 神经网络的农田大气氨浓度预测[J]. *中国生态农业学报(中英文)*, 2019, **27**(4): 519-528.
- Qu Y, Wang M, Dong W X, *et al.* Prediction of atmospheric ammonia concentration in farmlands using BP neural network[J]. *Chinese Journal of Eco-Agriculture*, 2019, **27**(4): 519-528.
- [40] 梁泽, 王玥瑶, 岳远素, 等. 耦合遗传算法与 RBF 神经网络的 PM_{2.5} 浓度预测模型[J]. *中国环境科学*, 2020, **40**(2): 523-529.
- Liang Z, Wang Y Y, Yue Y W, *et al.* A coupling model of genetic algorithm and RBF neural network for the prediction of PM_{2.5} concentration[J]. *China Environmental Science*, 2020, **40**(2): 523-529.
- [41] 张春露, 白艳萍. 基于 TensorFlow 的 LSTM 模型在太原空气质量 AQI 指数预测中的应用[J]. *重庆理工大学学报(自然科学)*, 2018, **32**(8): 137-141.
- Zhang C L, Bai Y P. Application of LSTM prediction model based on tensor flow in Taiyuan air quality AQI index[J]. *Journal of Chongqing University of Technology (Natural Science)*, 2018, **32**(8): 137-141.
- [42] 何哲祥, 李雷. 一种基于小波变换和 LSTM 的大气污染物浓度预测模型[J]. *环境工程*, 2021, **39**(3): 111-119.
- He Z X, Li L. An air pollutant concentration prediction model based on wavelet transform and LSTM[J]. *Environmental Engineering*, 2021, **39**(3): 111-119.
- [43] 卢盛栋, 李芬, 蔡兆鑫, 等. 气象因子对太原地区空气质量的影响研究[J]. *沙漠与绿洲气象*, 2021, **15**(2): 98-105.
- Lu S D, Li F, Cai Z X, *et al.* The influence of meteorological factors on air quality in Taiyuan area[J]. *Desert and Oasis Meteorology*, 2021, **15**(2): 98-105.
- [44] 雷瑜, 张小玲, 唐宜西, 等. 北京城区 PM_{2.5} 及主要污染气体“周末效应”和“假日效应”研究[J]. *环境科学学报*, 2015, **35**(5): 1520-1528.
- Lei Y, Zhang X L, Tang Y X, *et al.* Holiday effects on PM_{2.5} and other major pollutants in Beijing[J]. *Acta Scientiae Circumstantiae*, 2015, **35**(5): 1520-1528.
- [45] 梅梅, 朱蓉, 孙朝阳. 京津冀及周边“2+26”城市秋冬季大气重污染气象条件及其气候特征研究[J]. *气候变化研究进展*, 2019, **15**(3): 270-281.
- Mei M, Zhu R, Sun C Y. Study on meteorological conditions for heavy air pollution and its climatic characteristics in “2+26” cities around Beijing-Tianjin-Hebei region in autumn and winter[J]. *Climate Change Research*, 2019, **15**(3): 270-281.
- [46] 邹旭东, 杨洪斌, 张云海, 等. 1951-2012 年沈阳市气象条件变化及其与空气污染的关系分析[J]. *生态环境学报*, 2015, **24**(1): 76-83.
- Zou X D, Yang H B, Zhang Y H, *et al.* Changes of meteorological factors in Shenyang city during 1951-2012 and its relationship with air pollution[J]. *Ecology and Environmental Sciences*, 2015, **24**(1): 76-83.
- [47] 卢盛栋, 赵桂香, 金磊, 等. 2018 年 10 月-2019 年 9 月太原大气能见度与相对湿度及 PM_{2.5} 浓度的关系研究[J]. *气象与环境科学*, 2021, **44**(5): 10-16.
- Lu S D, Zhao G X, Jin L, *et al.* Study on relationship of atmospheric visibility, PM_{2.5} concentration and relative humidity in Taiyuan from October 2018 to September 2019[J]. *Meteorological and Environmental Sciences*, 2021, **44**(5): 10-16.

CONTENTS

Variations in PM _{2.5} Composition and Sources During 2020-2021 COVID-19 Epidemic Periods in Nanjing	HUA Nan, SHANG Yue, XIE Ming-jie	(593)
Pollution Characteristics and Sources of Water-soluble Ions in PM _{2.5} in Zhengzhou City	ZHANG Jun-mei, CHEN Shi-lin, WANG Qian-heng, <i>et al.</i>	(602)
Meteorological Characteristics, Influence Analysis and Prediction of PM _{2.5} Concentration in Taiyuan City	LI Ming-ming, WANG Yan, YAN Shi-ming, <i>et al.</i>	(611)
Pollution Characteristics and Source Analysis of Carbon and Nitrogen Components in Ambient PM _{2.5} in Huangshi City	WANG Ci-mou, DENG Meng-jie, CHEN Yu, <i>et al.</i>	(626)
Simulation Evaluation of the Contribution of Typical PM _{2.5} Pollution and Trans-regional Transport to Ningbo Pollution in the Yangtze River Delta	PAN Yong, ZHENG Jie, XIAO Hang	(634)
Composition Characteristics and Sources of Non-polar Organic Compounds in PM _{2.5} in the Background Atmosphere of Yangtze River Delta	WU Chang-liu, CAO Fang, JIA Xiao-fang, <i>et al.</i>	(646)
Characteristics and Sources of PM _{2.5} and Its Light-scattering Properties with Different Chemical Compositions in Urban Area of Beijing	CAO Yang, WANG Chen-jing, JING Kuan, <i>et al.</i>	(658)
Impacts of Emission and Meteorological Conditions on Air Pollutants at Various Sites Around the COVID-19 Lockdown in Wuhan	XIONG Jiang-he, KONG Shao-fei, ZHENG Huang, <i>et al.</i>	(670)
Analysis of the Impact of Fireworks on Air Quality During the Spring Festival in Chengdu from 2019 to 2022	FENG Xiao-qiong, CHEN Jun-hui, YIN Han-mei, <i>et al.</i>	(680)
Ambient VOCs Characteristics and Reactivity During O ₃ Pollution in Autumn in Urban Beijing	SUN Xue-song, ZHANG Rui, WANG Yu, <i>et al.</i>	(691)
Variation Characteristics and Source Apportionment of Atmospheric VOCs at Multi-sites in Zhengzhou	WANG Bing, YIN Sha-sha, HUANG Ai-zhi, <i>et al.</i>	(699)
Chemical Composition of VOCs from Service Stations Vapor Processing Device and Associated Contributions to Secondary Pollution	HU Wei, HUANG Yu-hu, LIANG Wen-jun, <i>et al.</i>	(709)
Spatial and Temporal Distribution Characteristics of Ozone Concentration and Population Health Benefit Assessment in the Yangtze River Delta Region from 2017 to 2020	CHENG Yu-kai, DAI Hai-xia, ZHANG Yun-hui, <i>et al.</i>	(719)
Emission Characteristics and Risk Assessment of Gas Pollutants in Typical Pesticide Manufacturing Enterprises	ZHAI Zeng-xiu, XIAO Xian-de, MENG Jie, <i>et al.</i>	(730)
Characteristics and Driving Factors of Hydrochemical Evolution in Tuochangjiang River Basin, Western Guizhou Province	TU Chun-lin, YANG Run-bai, MA Yi-qi, <i>et al.</i>	(740)
Hydrochemical and Isotopic Evidence for Groundwater Conversion of Surface Water in Alpine Arid Areas: A Case Study of the Datong River Basin	YI Bing, LIU Jing-tao, LÜ Xiao-li, <i>et al.</i>	(752)
Identification of Nitrate Source of Surface Water in a Typical Peri-urban Watershed in the Tableland of the Loess Plateau, China	LI Huan-wei, ZHAO Guang-ju, LI Ming, <i>et al.</i>	(761)
Spatial Distribution and Risk Assessment of Heavy Metals in Surface Sediments from the Middle and Upper Reaches of the Yangtze River	ZHANG Zhi-yong, WAN Cheng-yan, HU Hong-qing, <i>et al.</i>	(770)
Enrichments, Migrations, and Conversions of Heavy Metal in the Soil/Sediment-Plant System Towards the Lake in Typical Poyang Lake Wetland	ZENG Huan, ZHANG Hua, DING Ming-jun, <i>et al.</i>	(781)
Analysis of Heavy Metal Sources in Groundwater and Assessment of Health Risks: An Example from the Southwest Sub-basin of the Shiqi River	FU Rong-jie, XIN Cun-lin, YU Shi, <i>et al.</i>	(796)
Analysis on Contamination Characteristics, Pollution Source Identification and Ecological Risk Assessment of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons of Groundwater in a Large Coking Plant Site of Province	ZHANG Qian-qian, XING Jin-bing, WANG Hui-wei, <i>et al.</i>	(807)
Dynamic Monitoring and Driving Factors Analysis of Ecological Environment Quality in Poyang Lake Basin	TIAN Zhi-hui, YIN Chuan-xin, WANG Xiao-lei	(816)
Effects of Sediment Dredging on the Reduction in Sediment Internal Loading of Lake Taihu and the Self-recovery Ability of Benthic Organism	ZHANG Jian-hua, YIN Peng, ZHANG Lei, <i>et al.</i>	(828)
Biogeographic Distribution Patterns and Ecological Mechanisms of Benthic Eukaryotic Microorganisms in Jinsha River	CUI Ge, CHEN Juan, WANG Pei-fang, <i>et al.</i>	(839)
Bacterial Community Structure and the Prediction of Metabolic Function in Landscape Lake Water in Xi'an	WANG Min, ZHANG Yu-tong, HUANG Chen, <i>et al.</i>	(847)
Impounding Impacts of the Three Gorges Reservoir on Phytoplankton Function Groups and Its Relationship with Resource Use Efficiency	ZHAO Lu, OUYANG Tian, JI Lu-lu, <i>et al.</i>	(857)
Effects of Fertilization and Straw Mulching on Nitrogen and Phosphorus Loss in Chengdu Plain	WANG Hong, YAO Li, ZHANG Qi, <i>et al.</i>	(868)
Efficiency and Mechanism of O ₃ -SBBR Combined Process for Advanced Treatment of Biochemical Effluent from Printing and Dyeing Industrial Park	LUO Xin-hao, HU Yong-you, CHEN Yuan-cai, <i>et al.</i>	(878)
Analysis of Microbial Community Characteristics and Function Prediction of MBBR with Magnetic Biocarriers at Low Temperature	LIU Chao, LI Qi, SONG Zi-yang, <i>et al.</i>	(889)
Detecting Influencing Factor of Vegetation NPP in Southwest China Based on Spatial Scale Effect	XU Yong, HUANG Wen-ting, ZHENG Zhi-wei, <i>et al.</i>	(900)
Spatial Distribution Characteristics and Influencing Factors of Soil Organic Carbon Density in Yellow River Basin Based on MGWR Model	NAN Fu-sen, LI Zong-xing, ZHANG Xiao-ping, <i>et al.</i>	(912)
Coupling Relationship Between Soil Functions and Environmental Factors Along an Altitudinal Gradient: A Case Study of the Meili Mountain	ZHAO Dong-hui, SHEN Cong-cong, ZHANG Zhi-ming, <i>et al.</i>	(924)
Characteristics and Source Analysis of Heavy Metals in Farmland Soil on the South of Dongting Lake	XIAO Kai-qi, XU An, GUO Jun, <i>et al.</i>	(932)
Pollution Characteristics and Risk Assessment of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Agricultural Soils of Different Land Use Types in Nanjing Suburbs	ZHANG Xiu-xiu, ZHU Chang-da, WANG Fei, <i>et al.</i>	(944)
Characteristics of Soil Carbon, Nitrogen, Phosphorus, and Ecological Stoichiometry in Vegetable Fields and Orchard in the Coastal Area of Fuzhou	HOU Ning, HEI Jie, JIN Qiang, <i>et al.</i>	(954)
Preparation of Iron-modified Biochar and Its Application in Arsenic Contaminated Soil Remediation	WEI Jing, LIU Yi-han, TU Chen, <i>et al.</i>	(965)
Mn/Al-layered Double Oxide-loaded Biochar Reduced the Toxic Effects of Heavy Metals on Ryegrass in Soil	LIN Peng-cheng, YIN Hua, LIU Xiao-fei, <i>et al.</i>	(975)
Effect of Zinc Fertilizer Application on Cadmium Accumulation in Wheat Grain and Its Application Risk	NIU Shuo, WANG Tian-qi, YANG Yang, <i>et al.</i>	(984)
Primary Factors Affecting Soil Bioavailable Cadmium and Arsenic by Different Properties of Silicon Fertilizer	HUANG Rui, WEI Wei, XIE Yun-he, <i>et al.</i>	(991)
Availability Changes in Different Exogenous Selenium Fertilizers in Soil and Their Effects on Selenium Accumulation in Wheat	WEI Wei, LI Ping, ZHOU Zhi-gao, <i>et al.</i>	(1003)
Effects of pH, Calcium, and Phosphate on the Solubility of Arsenic in Paddy Soil Based on Surface Complexation Modeling	DENG Ying-xuan, WENG Li-ping, ZHU Gui-fen, <i>et al.</i>	(1012)
Effects of Sulfamethazine in Soil on Rice Growth	ZHANG Wei, WANG Pei-fang, JIN Qiu-tong, <i>et al.</i>	(1021)
Determination and Traceability Analysis of Phthalic Acid Esters in Garlic (<i>Allium stipium</i> L.) from Jiangsu Province, China	WANG Ya, XIAO Xia-xia, YANG Yun, <i>et al.</i>	(1029)
Dissolved Ion Concentrations and Isotope Values in Agricultural Fertilizer Locally Applied in Henan Province	ZHANG Dong, XUE Tian, QIN Yong, <i>et al.</i>	(1040)
Component Properties and Heavy Metal Accumulation Characteristics of Contaminated Rice Straw Biochar During Oxygen-controlled Pyrolysis	XU Zhi, GUO Zhao-hui, XU Rui, <i>et al.</i>	(1051)
Effects of Long-term Fertilization on Soil Microbial Diversity and Community Structure in the Agro-pastoral Ecotone	GAO Ri-ping, DUAN Yu, ZHANG Jun, <i>et al.</i>	(1063)
Effects of Chemical Fertilizer Reduction Combined with Organic Fertilizer Application on Bacterial Community Structure in Rhizosphere/Non-Rhizosphere Soil of Lemon	DENG Zheng-xin, GAO Ming, WANG Ying-yan, <i>et al.</i>	(1074)
Effects of Different Topdressing Nitrogen Rates on Soil Fungal Community Structure and Ecological Network in Wheat Field Under Crop Residue Retention	JIN Hai-yang, YAN Ya-qian, ZHANG De-qi, <i>et al.</i>	(1085)
Effect of Deep Vertical Rotary Tillage on Soil Bacterial Community Diversity and Microbial Network Structure in Cultivated Land	XIA Wan-yu, CHEN Yan-yun	(1095)
Revealing the Effect of Saline Water Drip Irrigation on Soil Microorganisms in Cotton Fields Based on Metagenomics	DU Si-yao, CHEN Jing, LIU Jia-wei, <i>et al.</i>	(1104)
Coal-carbon-pollutant Coordinated Control of Coal Chemical Industry Under Carbon Peak and Carbon Neutrality Constraints	ZHANG Hong-yu, WANG Yuan, HAO Cheng-jiang, <i>et al.</i>	(1120)
Under Goals of Carbon Peaking and Carbon Neutrality: Status, Problems, and Suggestions of CCUS in China	ZHAO Zhen-yu, YAO Shun, YANG Shuo-peng, <i>et al.</i>	(1128)
Research Progress on CO ₂ Capture, Utilization, and Storage of Fly Ash	JIANG Long, HE Chuan, LI Jin-jing	(1139)
Temporal and Spatial Distribution, Utilization Status, and Carbon Emission Reduction Potential of Straw Resources in China	YANG Chuan-wen, XING Fan, ZHU Jian-chun, <i>et al.</i>	(1149)
N ₂ O Emission from the Processes of Wastewater Treatment: Mechanisms and Control Strategies	HAO Xiao-di, HONG Zhen-li, YU Wen-bo, <i>et al.</i>	(1163)
Systematic Evaluation of Low-carbon Operation of Typical A ² O Processes in Municipal Sewage Plant	MENG Hong-qi, LI Hong-xia, ZHAO Ai-ping, <i>et al.</i>	(1174)
Comparison of Carbon Emissions in Different Treatment and Disposal Process Routes of Municipal Sludge	LI Zhe-kun, ZHANG Li-qiu, DU Zi-wen, <i>et al.</i>	(1181)
Evaluation and Optimization of Rural Sewage Treatment Technologies in the Middle Reaches of the Yangtze River Based on Group Decision Making and Analytic Hierarchy Process	LIU Lu, ZHANG Wen-qiang, HU Fei-chao, <i>et al.</i>	(1191)