《大气挥发性有机物高值区卫星遥感识别技术指南 (征求意见稿)》编制说明

《大气挥发性有机物高值区卫星遥感识别技术指南》 标准编制组

二〇二五年十一月

目 录

1	1 项目背景	1
	1.1 任务来源	1
	1.2 工作过程	1
2	2 标准制订的必要性分析	2
	2.1 环境形势的变化要求	2
	2.2 相关生态环境标准和环境保护工作的需要	3
3	3 国内外相关分析方法研究	4
	3.1 主要国家、地区及国际组织相关分析方法研究	4
	3.2 国内相关分析方法研究	5
	3.3 文献资料研究	6
	3.4 与本标准关系	7
4	4 标准制定的基本原则和技术路线	8
	4.1 标准制定的基本原则和技术路线	8
	4.2 标准制定的技术路线	8
5	5 标准主要技术内容	9
	5.1 标准适用范围	9
	5.1 标准适用范围5.2 标准结构框架	
		10
	5.2 标准结构框架	10
	5.2 标准结构框架 5.3 规范性引用文件	10 10
6	5.2 标准结构框架 5.3 规范性引用文件 5.4 术语定义	10 10 10
6	5.2 标准结构框架 5.3 规范性引用文件 5.4 术语定义 5.5 监测原理	
6	5.2 标准结构框架	
6	5.2 标准结构框架	
6	5. 2 标准结构框架	
6	5. 2 标准结构框架 5. 3 规范性引用文件 5. 4 术语定义 5. 5 监测原理 6 主要条文说明 6. 1 总则 6. 2 数据准备 6. 3 卫星遥感数据反演方法的确定	
	5. 2 标准结构框架 5. 3 规范性引用文件 5. 4 术语定义 5. 5 监测原理 6 主要条文说明 6. 1 总则 6. 2 数据准备 6. 3 卫星遥感数据反演方法的确定 6. 4 VOCs 高值区筛选	
7	5. 2 标准结构框架 5. 3 规范性引用文件 5. 4 术语定义 5. 5 监测原理 6 主要条文说明 6. 1 总则 6. 2 数据准备 6. 3 卫星遥感数据反演方法的确定 6. 4 VOCs 高值区筛选 6. 5 质量控制	

《大气挥发性有机物高值区卫星遥感识别技术指南(征求意见稿)》编制说明

1 项目背景

1.1 任务来源

为贯彻落实党中央、国务院关于坚决打赢打好蓝天保卫战的决策部署,2017年起,生态环境部创新建立监督帮扶工作机制,有效打通政策制定"最前一公里"和制度落实"最后一公里"。2018年6月,国务院印发《打赢蓝天保卫战三年行动计划》,明确挥发性有机化合物(Volatile Organic Compounds,VOCs)治理要求。2019年6月,生态环境部发布《重点行业挥发性有机物综合治理方案》,提出 VOCs 治理中存在源头控制力度不足、无组织排放问题突出、监测监控不到位等问题。

2020 年 5 月起,生态环境部启动夏季臭氧(O₃)污染防治调研评估工作,首次将 VOCs 卫星遥感高值区应用于监督帮扶。通过发挥卫星遥感数据和空间分析技术优势,向京津冀及周边地区、汾渭平原、苏皖鲁豫、长三角、珠三角等地区 80 余个城市推送 2 万余个 VOCs 高值区,精准指导地方监管整治 VOCs 污染高值问题,大幅提升现场执法效率,推动区域空气质量改善。同时构建 VOCs 高值区卫星遥感识别业务化运行体系,开拓遥感监测、地面核查与监管、远程和现场协同的管理模式,为科学监督和精准治理 VOCs 污染提供有力抓手。

为更好发挥卫星遥感对大气环境质量改善和执法监管工作的支撑作用,指导各地开展 VOCs遥感识别,2022年5月,生态环境部以《关于开展2021年度国家生态环境标准项目实施工作的通知》(环办法规函(2022)205号)形式下达了《大气挥发性有机物高值区卫星遥感筛选方法》项目,项目统一编号为2022-20。本标准由生态环境部生态环境执法局(以下简称执法局)组织制订,项目承担单位为生态环境部卫星环境应用中心(以下简称卫星中心),项目参与单位为山东省济南生态环境监测中心、成都市环境保护科学研究院和中国科学院空天信息创新研究院。

1.2 工作过程

2020年以来,生态环境部持续开展以遥感监测为主要技术手段之一的大气污染高值区远程监督帮扶。卫星中心在执法局的指导下,利用卫星遥感监测结果,选定 VOCs 高值区,为远程监督帮扶现场检查提供精准定位和技术支撑,有效提升 VOCs 高值区现场监管效率。同时,在工作过程中不断完善技术方法,进一步提升问题识别准确性。

(1) 标准立项

2022 年 6 月 13 日,根据《关于开展 2022 年度第二批国家生态环境标准项目实施工作的通知》(环办法规函(2022)205 号),按照《国家生态环境标准制修订工作最规则》(国环规法司(2020)4 号)有关要求,生态环境部将《大气挥发性有机物高值区卫星遥感筛选

方法》项目列入 2022 年度第二批国家生态环境标准管理项目。卫星中心接到项目任务后, 成立标准编制组。

(2) 标准草案编制

标准编制组总结前期 VOCs 卫星遥感高值区筛选经验成果,与地方、技术单位进行深入 交流,在充分总结梳理前期工作基础上,通过系统调研,分析国内外相关标准。结合文献资 料分析和基础研究,听取各方意见,逐步修改完善,形成《大气挥发性有机物高值区卫星遥 感筛选方法(草案)》及其编制说明。

(3) 标准开题论证

2025年3月19日,受执法局委托,生态环境部环境标准研究所组织召开本标准开题论证会,专家组听取标准编制单位关于标准草案和标准开题论证报告的汇报,经过质询、讨论,认为标准编制单位提供的材料齐全、内容完整,符合标准开题论证审查要求。标准编制单位对国内外相关标准及文献进行了充分调研,标准定位基本准确,技术路线合理可行。专家组通过该标准的开题论证,并提出具体建议:1、根据标准定位,进一步明确标准名称、适用范围,说明与走航等其他监测技术手段关系等;2、进一步完善标准术语与定义、技术路线等内容;3、按照《环境保护标准编制出版技术指南》(HJ 565-2010)要求编写标准文本和编制说明。编制组根据专家审查意见进行修改完善。

(4) 标准专家研讨

2025年4月21日,卫星中心组织召开内部专家研讨会,根据专家意见,进一步完善技术路线、结果验证等内容,形成《大气挥发性有机物高值区卫星遥感筛选方法(征求意见稿)》及其编制说明。

(5) 标准征求意见稿技术审查

2025年7月9日,受执法局委托,生态环境部环境标准研究所组织召开本标准征求意见稿技术审查会。审查委员会听取标准编制单位关于标准征求意见稿的主要技术内容、编制工作过程汇报,经质询、讨论,认为标准编制单位提供的材料齐全、内容完整;标准征求意见稿主要技术内容合理。审查委员会通过该标准征求意见稿的技术审查,并提出具体建议:1、标准名称修改为《大气挥发性有机物高值区卫星遥感识别技术指南》; 2、标准文本中补充 DOAS 操作原理等内容;3、编制说明中补充标准实施效果测算等内容;4、按照《环境保护标准编制出版技术指南》(HJ 565-2010)对标准文本和编制说明进行编辑性修改。会后编制组根据专家意见进一步修改完善标准公开征求意见稿和编制说明。

2 标准制订的必要性分析

2.1 环境形势的变化要求

当前阶段,我国面临细颗粒物($PM_{2.5}$)污染形势依然严峻和 O_3 污染日益凸显的双重压力。近地面 O_3 是由 NO_2 经大气光化学反应生成,并因 VOC_8 等物质而净积累(VOC_8 通过和 OH 反应生成 RO_2 自由基, RO_2 和 NO 反应,减少了被 NO 还原的 O_3 ,从而导致 O_3 的积累效应)的典型二次污染物,其显著升高多发生在夏季。近地面 O_3 已为导致部分城市空气

质量超标的首要因子,在京津冀及周边地区、长三角地区、汾渭平原等重点区域尤为突出,6月~9月 O3 超标天数占全国 70%左右。VOCs 作为 O3 生成的重要前体物,主要存在于企业原辅材料或产品中,大部分易燃易爆,部分属于有毒有害物质,加强 VOCs 治理是现阶段控制 O3 污染的有效途径,也是帮助企业实现节约资源、提高效益、减少安全隐患的有力手段[1]。在 VOCs 光化学反应过程中,甲醛(HCHO)是重要的中间产物,HCHO 和二氧化氮(NO2)的比值关系形成可以在一定程度上反映 VOCs 的空间分布。基于较为成熟的卫星遥感产品和卫星遥感对于区域 O3 生成机制的快速诊断优势,可利用高空间分辨率和高光谱分辨率的卫星遥感监测数据,获取 HCHO 浓度分布和变化情况,以发现 VOCs 污染排放异常的受影响区域。

2.2 相关生态环境标准和环境保护工作的需要

为了规范、有效利用卫星遥感技术进行 VOCs 监测,对全国各级生态环境部门管理人员、科研人员、监测人员等提供相应的技术指导,迫切需要制定 VOCs 卫星遥感监测标准。该规定通过对遥感数据源、遥感监测方法、产品制作等方面进行统一规定,确保监测产品更具规范性、科学性与权威性,从而为保质保量完成 VOCs 遥感监测工作,以及各类业务部门进行监测提供技术参考。因此,为满足 VOCs 卫星遥感监测应用技术建设与管理需要,编制符合我国国情、科学实用的《大气挥发性有机物高值区卫星遥感识别技术指南》十分必要。

大气挥发性有机物监测相关国家标准、行业标准、团体标准及地方标准,多侧重于对地 面固定污染源采用地面监测站、便携式仪器、移动走航车等方式开展监测识别。本方法创新 采用卫星遥感监测方法,与其他标准配套使用,作为对下列大气挥发性有机物监测标准的补 充与完善。

(一) 大气挥发性有机物监测相关国家标准

为贯彻《中华人民共和国环境保护法》和《中华人民共和国大气污染防治法》,防治大气污染,改善环境空气质量,2019年5月,生态环境部与国家市场监督管理总局联合发布《挥发性有机物无组织排放控制标准》(GB 37822-2019)、《制药工业大气污染物排放标准》(GB 37823-2019)和《涂料、油墨及胶粘剂工业大气污染物排放标准》(GB 37824-2019)等三项标准。其中规定了 VOCs 无组织排放的监测要求,包括走航监测的适用场景。主要涉及固定污染源废气监测领域,配套相关环境空气质量标准与污染物排放标准实施,支撑打赢蓝天保卫战。

(二) 大气挥发性有机物监测相关行业标准

《环境空气 挥发性有机物的应急测定 便携式气相色谱-质谱法》(HJ 1223-2021)适用于突发环境事件现场周边环境空气中甲苯等 52 种挥发性有机物的现场应急测定,其他挥发性有机物也可采用本方法进行定性分析和浓度估算。

《环境空气 65 种挥发性有机物的测定 罐采样/气相色谱-质谱法》(HJ 759-2023)规定了测定环境空气和无组织排放监控点空气中 65 种挥发性有机物的罐采样/气相色谱-质谱法。

《固定污染源废气 总烃、甲烷和非甲烷总烃的测定 便携式气相色谱-氢火焰离子化检测器法》(HJ 1332-2023)适用于固定污染源有组织排放废气中总烃、甲烷和非甲烷总烃的测定。

(三) 大气挥发性有机物监测相关地方标准

由上海、浙江、江苏三地市场监督管理局联合发布的《长三角生态绿色一体化发展示范 区挥发性有机物走航监测技术规范》(DB33T 310002-2021)规定了挥发性有机物走航监测 的方法概述、试剂或材料、仪器和设备、监测方法、结果计算与表示、质量保证与质量控制 等要求。

北京市地方标准《固定污染源废气挥发性有机物监测技术规范》(DB11/T 1484-2017)规定了固定污染源废气中挥发性有机物监测过程中的项目确定原则、分析方法选择、采样技术要求、安全防护、样品运输与保存、结果计算与表示、质量保证和质量控制要求等技术内容。

河南省地方标准《大气 VOCs 走航自动监测技术规范(征求意见稿)》规定了利用大气挥发性有机物走航监测技术同步测定挥发性有机物并显示空间分布的走航设备配置要求、监测要求、质量保证与控制、运行维护等内容。

安徽省于 2024 年 1 月发布地方标准《挥发性有机物走航监测技术规范》(DB34/T 4686-2024),厦门市于 2024 年 12 月发布地方标准《环境空气走航监测技术规范》(DB3502T 153-2024)。

(四) 大气挥发性有机物监测相关团体标准

中华环保联合会于 2025 年 8 月发布团体标准《T/ACEF 214—2025 工业园区挥发性有机物大气扩散模型溯源结果工程验证技术规范》,规定了工业园区挥发性有机物大气扩散模型溯源结果工程验证的总体要求、技术要求、评价方法、质量控制和验证报告等,适用于工业园区挥发性有机物大气扩散模型溯源结果工程验证。

3 国内外相关分析方法研究

卫星无法直接观测所有 VOCs 物种,而是通过观测甲醛(HCHO) 等作为"示踪物"来反演 VOCs 总量或反应活性。HCHO 是许多 VOCs(尤其是烯烃、芳香烃)在大气中氧化生成的关键中间产物,其高值区通常意味着 VOCs 排放活跃。因此,VOCs 高值区直接标识了 O3生成的主要"原料"供应地。O3的生成不仅取决于 VOCs 的多少,更取决于 VOCs 和 NOx 的比例关系。在 VOCs 控制区,VOCs 浓度是 O3生成速率的限制因素。因此,VOCs 高值区与 O3污染高值区在时空上呈现出强烈的正相关性,在此类区域减排 VOCs 对控制 O3最有效。在 NOx 控制区,O3生成对 NOx 更敏感。

VOCs 卫星遥感高值区为识别 O3污染的潜在热点和制定精准的污染防治策略提供了至 关重要的空间信息。在实际应用中,需结合 NOx 协同观测和气象条件进行综合分析,卫星 优势在于能同时、大范围地提供这些关键参数,从而帮助我们更科学地诊断 O3污染的成因。

3.1 主要国家、地区及国际组织相关分析方法研究

国外学者对于大气环境中 VOCs 减排机制的研究较为充分,但未对大气挥发性有机化合物高值区给出明确定义,在 VOCs 高值区的卫星遥感监测技术方面探讨较少。

单纯依靠降低单一前体物不一定会使 O₃浓度降低^[2-3]。O₃浓度与 NOx、VOCs 浓度呈现

高度的非线性关系,依据经验动力学模拟方法,通过绘制 EKMA 曲线,可以判断不同 VOC s 和 NOx 浓度下 O_3 生成情况,分析 O_3 生成敏感性。有学者 O_3 对活性有机气体(reactive organic gases,ROG)和 NOx 排放量减少的敏感性与模拟的总活性氮(NOy)之间存在一致关联,在 NOy 浓度超过阈值(O_2 5ppb)的地方,ROG 控制对 O_3 的减少最有效,而在 NOy 浓度低于该阈值的地方,NOx 控制更有效;NOy 水平解释了不同地点 O_3 敏感性的大部分差异,并为比较不同模型预测的敏感性提供了基础。国外学者 O_3 敏感性的大部分差异,并为比较不同模型预测的敏感性提供了基础。国外学者 O_3 数感性有大部分差异,并为比较不同模型预测的敏感性提供了基础。国外学者 O_3 数感性有大部分差异,并为比较不同模型预测的敏感性提供了基础。国外学者 O_3 数据性

VOCs 是 O₃ 和二次有机气溶胶形成的重要前体物,其高值区的精准识别对大气污染治理至关重要^[5]。近年来,基于 HCHO/NO₂ 比值的方法在 O₃ 生成潜力分析中取得了重要进展。这一方法通过反映局地光化学反应机制,广泛应用于识别 VOCs 主导的 O₃ 生成敏感区^[6]。未来发展趋势包括多维数据融合、基于机器学习的高值区识别模型的应用,以及在线监测技术的自动化和实时化升级^[7]。这些创新有助于克服传统监测方法在高活性物种识别和区域污染管控中的局限性,为科学制定精准的大气污染防控政策提供技术支撑。综上,基于 HCH O/NO₂ 比值的 VOCs 高值区识别方法不仅对区域 O₃ 污染的评估具有重要意义,还为深入研究大气光化学机制和优化污染控制策略指明了方向^[8]。

20世纪70年代美国开始VOCs控制。在发展过程中相继颁布了《国家环境政策法》、《清洁空气法》^[9]、《清洁空气州际法规》和《国家环境空气质量标准》^[10]等,同时采取多层次管理手段进行VOCs管控^[11]。美国使用空气质量光化学模型来量化O₃生成敏感性指数FNR对O₃生成的影响,HCHO/NO₂比值通常用作过渡状态,其比值范围为(1.0,2.0)^[12]。O₃生成敏感性指数(Formaldehyde-to-Nitrogen Dioxide Ratio,FNR)的阈值是基于美国环境背景下的模型模拟。然而,实际情况中,不同地区的O₃前体物排放、气象条件和地形等因素存在差异;因此,FNR的阈值存在地区差异。需要根据我国的区域特点重新评估和调整阈值,以更准确地掌握O₃形成机制。这种定制策略将有助于制定更有效的挥发性有机化合物和NOx减排策略,以解决O₃污染问题^[13]。美国针对VOCs涉及的不同行业均制定了以最佳实用技术为依据的行业标准^[14],如大家电、船舶制造和汽车等大型涂装行业的VOCs排放标准,而且对金属线圈和标签等小型涂装行业也制定了相应的VOCs排放标准。

3.2 国内相关分析方法研究

2011年国务院转发的《关于推进大气污染联防联控工作改善区域空气质量的指导意见》,将 VOCs 列为继 SO₂、NO₂和 PM₁₀以后重点防控的大气污染物; 2012年环保部公布的《重点区域大气污染防治"十二五"规划》首次明确提出减少 VOCs 排放的目标; 2013年9月国务院发布的《大气污染防治行动计划》(又称"大气国十条")提出要对 VOCs 的重点排放行业进行综合整治。生态环境部于 2015年3月发布《生态环境状况评价技术规范》,2014年1月17日发布《城市大气挥发性有机化合物(VOCs)监测技术指南》(环办函〔2014〕66号)。

经过几十年的快速发展,国内的遥感技术已经广泛应用于大气环境遥感监测等诸多领域。 国内学者[15]基于 MODIS、OMI 等卫星遥感数据,利用灰霾像元识别及统计、地理加权回归 (geographically weighted regression,GWR)、差分光学吸收光谱(differential optical absorption spectroscopy,DOAS)和主成分分析(Principal Component Analysis,PCA)等方法,开展灰霾面积、细颗粒物(PM2.5)、NO2和 SO2等大气污染物浓度反演,并计算多次重污染天气中各项污染物浓度均值,通过区域空气重污染高发指数公式计算提取重污染高发地区,最后结合高空间分辨率影像划定污染企业疑似聚集区,作为重点关注区域。京津冀及周边地区的大气环境热点网格研究中[16],学者在卫星遥感反演获取区域灰霾天数、PM2.5、NO2和 SO2浓度等大气环境四项遥感监测因子的基础上,首先利用分形求和模型确定了研究区域四项指标的背景值和标准值,然后根据臭氧风险与空气质量指数计算方式提出大气环境遥感综合污染指数,提取了大气环境热点网格。HCHO/NO2比值的监测依赖于多种技术,包括卫星遥感、在线设备等,在珠三角、长三角等地区研究已揭示高值区的时空分布特征与区域敏感性差异[17-18]。

3.3 文献资料研究

当前关于 VOCs 高值区卫星遥感识别的技术标准规范体系薄弱。首先,VOCs 污染排放 溯源是提升 VOCs 精准管控的关键环节,但总体上依靠固定点位溯源成本高、效率低。如利用传统布点、手工采样方式,通过气相色谱和质谱联用仪检测大气挥发性有机物种类及其分布情况,耗时耗力且效率较低。由于仅仅依靠单一的污染物浓度不能全面反应实际的空气污染状况,其浓度高值区也不能表示该区域一定存在大气固定污染源。其次,VOCs 行业排放标准都是针对企业工艺排气制订的标准,少有针对 VOCs 排放溯源相关的标准。如学者[19] 梳理了我国十项涉及 VOCs 的国家排放控制标准,与美国、欧盟^[20,21]以及我国台湾地区^[22]相比,无论是在管控的行业还是管控的项目上,都有一定差距,已不能满足当前环境管理的需要。北京、上海和浙江等相继出台了一些地方标准,对 VOCs 控制进行了深入探索。VOCs 大气污染物排放标准体系分为综合类、特定污染物类、特定污染设施和工艺类以及行业类标准四部分,共二十余项标准,几乎没有 VOCs 高值区卫星遥感识别方面的标准规范。

卫星遥感技术是当前开展 O_3 污染溯源的重要技术手段之一。卫星遥感相对于地面监测站,具有探测范围大、获取数据周期短、受地面限制少、信息量大等优点,能够对大气环境污染进行大范围、长期、动态、连续监测,是大气环境污染监测十分重要的手段之一[15]。学者 $[^{23}]$ 利用哨兵-5P 卫星数据,结合企业清单、用电数据、历史污染源检查问题等数据,通过RFM 模型综合挖掘识别 O_3 生成高值区。

卫星遥感观测大气中 HCHO 柱浓度可有效指示 VOCs 时空分布变化。大气中 VOCs 主要包括生物源和人为源。在生物源方面,学者(2003)[25]利用全球 O3 监测实验(GOME)卫星测量的 HCHO 柱浓度数据来反演异戊二烯排放,结果表明 GOME 卫星观测的 HCHO 柱浓度与当前对异戊二烯排放的理解大致一致,表明卫星观测可以作为自上而下的约束,减少异戊二烯排放清单的不确定性。有学者[29]采用松弛涡度积累和梯度技术在江西省亚热带人工林冠层上测量了植物挥发性有机物的排放通量,同步测量了气象参数、太阳辐射等,基于冠层尺度 BVOCs 排放经验模式和测量数据,计算了亚热带人工林 BVOCs 的排放通量。结果表明亚热带森林 HCHO 柱浓度表现出显著的季节变化,夏季高、冬季低,与 BVOCs 的排放特征基本一致。结合分析卫星测量的 HCHO 柱浓度月平均数据,发现亚热带人工林 BVOCs

排放通量与 HCHO 柱浓度月均值之间存在良好的线性关系,可为获取大范围 BVOCs 排放通 量提供一种新方法,也为卫星数据的广泛应用提供了借鉴。研究指出(2006)^[26]"HCHO 是 VOCs 在大气中氧化的高产率产物,可以通过卫星太阳背散射仪器作为柱积分进行测量。 这种测量方法可以提供全球范围内的 VOCs 排放的自上而下的约束。"表明 HCHO 柱浓度 可以作为异戊二烯排放的有效代理,尤其是在生长季节。在人为源方面,研究表明卫星观测 HCHO 柱浓度对人为源 VOCs 排放有重要指示作用。学者(2024)^[24]整合了 TROPOMI (TROPOspheric Monitoring Instrument) HCHO 柱浓度、VIIRS (Visible Infrared Imaging Radiometer Suite Day) 夜间灯光辐射数据、EDGAR (Emissions Database for Global Atmospheric Research)排放数据库和 GEOS-Chem (Goddard Earth Observing System -Chemistry Model)模型数据,通过线性模型监测全球非甲烷挥发性有机物(Non-Methane Volatile Organic Compounds, NMVOCs) 排放,结果表明 TROPOMI HCHO 柱浓度数据能够 有效指示人为 NMVOCs 排放,为全球空气质量和环境可持续发展评估提供了重要参考。研 究(2021)^[28]指出大气中的 HCHO 主要来源于 VOCs 的光化学氧化过程,尤其是对于高活 性的 VOCs, 其氧化产物中 HCHO 的产率较高。例如, 烷烃、烯烃等 VOCs 在大气中与羟 基自由基(OH)等氧化剂发生反应,生成 HCHO 等产物。HCHO 浓度与 VOCs 的总反应性 之间存在显著相关性,尤其是在中午和下午时段相关性更为明显。这表明 HCHO 浓度在很 大程度上依赖于 VOCs 氧化过程,尤其是在高 VOCs 条件下,HCHO 浓度主要由 VOCs 的 氧化决定。

综上所述,卫星观测的 HCHO 柱浓度可以作为 VOCs 排放的一个有效指标,用于研究大范围区域内的 VOCs 排放特征及其对大气化学过程的影响。Paul (2003) [27]等人的研究中,介绍了一种利用卫星观测的 HCHO 柱浓度数据来推导挥发性有机化合物(VOC)排放的方法,并将其应用于 1996年7月北美地区的全球 O3 监测实验(GOME)卫星数据。陈良富(2019) [30]等人的研究中也提到,受人为活动影响,中国东部多数地区大气中 VOCs 代表物 HCHO 的浓度在 2005 年~2016年呈持续增长趋势。高超(2019) [31]等人的研究中对总挥发性有机物(TVOCs) 排放量和 OMI 卫星反演获取的 HCHO 柱浓度之间的关系进行了初步探讨,结果表明 TVOCs 和 HCHO 柱浓度存在一定相关性,但二者均在"胡焕庸线"两侧呈现显著差异,高值区分布于该线东侧。

3.4 与本标准关系

国际上广泛应用的 VOCs 卫星遥感监测产品,未明确卫星遥感高值区定义,未针对研究区域明确划定高值区范围,无法满足我国生态环境管理中精准治污的要求,与重点区域空气质量改善工作要求还有一定差距,无法满足 VOCs 高值区监管的实际需要。目前国内外相关标准仅关注大空间尺度高值区域,虽然开展了遥感识别方法的梳理,但极少数标准提出 VOCs 高值区的具体识别技术规范。

本标准根据生态环境领域对 VOCs 高值区监管的业务需求,针对卫星遥感获取的 VOCs,包含 HCHO、 NO_2 等 O_3 前体物,结合土地利用类型数据、高分辨率卫星影像等筛选 VOCs 卫星遥感高值区,通过所划定的重点关注区域,准确定位大气污染源聚集区,为环境执法提供技术支撑,促进"精准治污、科学治污、依法治污"。

本标准采用的 VOCs 高值区遥感识别方法,是在充分调研国内外相关研究进展的基础上,结合监督帮扶实际应用场景和成效,通过综合对比,筛选和构建的相对成熟且准确性高的方法。该方法也在实践过程中不断进行改进,达到了在行业部门推广应用的标准。

4 标准制定的基本原则和技术路线

4.1 标准制定的基本原则和技术路线

4.1.1 适用性、可操作性原则

本标准内容与我国现行的 VOCs 监测相关法规标准的内容相协调,与污染防治和空气质量改善的目标相配套,与环境保护的现状相符合,具有普适性;技术方法流程清晰,具有可操作性,能够为环境监测及管理等相关业务部门进行工业区 VOCs 排放的监测评估、治理与监督执法提供技术参考。

4.1.2 科学性、先进性原则

本标准在编制过程中应积极借鉴和利用国内外相关研究成果,运用可靠的原理、成熟先进的技术和科学的方法,保证制定的标准具有科学性和先进性。

4.1.3 经济技术可行性原则

本标准采用的技术方法经济可行,确保按照该标准开展工业区 VOCs 卫星遥感监测时,涉及到的卫星遥感数据源易获取、要求明确、方法可行、流程清晰,监测成本较低、经济可行。

4.2 标准制定的技术路线

本标准制定的技术路线,具体如图 1 所示。技术路线包括成立编制组、资料收集与调研、编制草案进行开题论证、公开征求意见、技术审查、行政审查的技术流程。

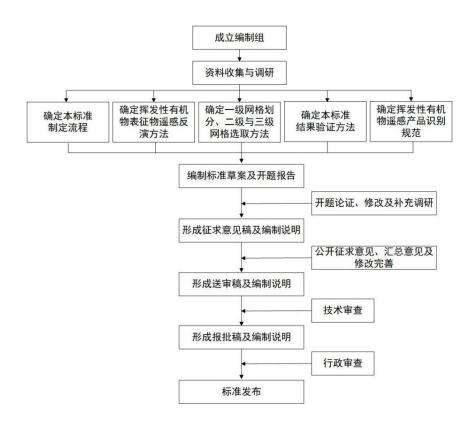


图 1 VOCs 高值区卫星遥感识别技术指南制定路线图

5 标准主要技术内容

5.1 标准适用范围

本标准规定了利用卫星遥感技术识别大气挥发性有机物高值区的方法,包括数据准备、 臭氧前体物卫星遥感反演、VOCs 高值区筛选技术流程和质量控制等相关内容。

本标准适用于各级生态环境部门选取 VOCs 管控重点区域,为实地执法核查、无人机和 走航观测等提供参考。

大气挥发性有机物监测、监管是生态环境部门的业务之一,综合考虑监测的时间分辨率、空间分辨率、精度要求及遥感监测技术可行性。本标准所用输入数据包括高光谱卫星遥感数据、高分辨率卫星影像资料和土地利用类型数据。其中,高光谱卫星遥感数据的波段应包括0.3μm~0.46μm 附近的紫外波段,光谱分辨率优于0.5nm;高分辨率卫星影像资料应为最近1年内覆盖全区域的优于2m分辨率多光谱卫星影像数据,至少包括0.45μm 附近的蓝波段、0.55μm 附近的绿波段和0.66μm 附近的红波段;土地利用类型数据定义执行依据《土地利用现状分类》(GB/T 21010-2017),采用最近3年内官方(如土地利用10米分辨率数据集)发布的高质量土地利用类型数据,空间分辨率优于1km。

采用高光谱卫星遥感数据通过 DOAS 算法进行反演获取,或采用官方发布的权威高质量 HCHO 和 NO₂ 柱浓度产品。如通过国产高分五号 02 星搭载的 EMI 载荷、欧空局官方网站 Sentinel-5 TROPOMI 传感器、GEO-KOMPSAT-2B 卫星搭载的地球静止环境监测光谱仪

(GEMS) 等反演得到对流层 HCHO 和 NO2浓度产品。

5.2 标准结构框架

本标准内容主要包括适用范围、规范性引用文件、术语和定义、总则、识别方法、质量 控制和附录 7 个部分,具体见表 1。

表 1 《大气挥发性有机物高值区卫星遥感识别技术指南》标准架构

标准内容	详细内容
1 适用范围	概述了本标准的编制内容和适用范围。
2 规范性引用文件	介绍了本标准中引用的标准、规范等。
3 术语和定义	规定了5个术语,包括挥发性有机物、柱浓度等。
4 总则	规定了 VOCs 高值区卫星遥感监测流程。
- NEGLAND	规定了数据准备、臭氧前体物卫星遥感数据反演、VOCs 高值
5 识别方法	区选取等步骤。
6 质量控制	本标准中高值区卫星遥感监测的数据检查、结果验证。
附录 A 差分光学吸收光谱技术	介绍了差分光学吸收光谱技术基本原理、技术路线。
附录 B 大气挥发性有机化合物卫星遥感	担果了1000 全体区工具项或均均均1000
识别技术流程	提供了VOCs 高值区卫星遥感识别流程及示例。
附录C大气挥发性有机物高值区清单统计	世界 Z V O C 文体区 B M 主
表	提供了 VOCs 高值区属性表。
注:表格。	

5.3 规范性引用文件

GB/T 21010-2017, GB 37822-2019 涵盖本标准部分术语和内容, 因此, 作为规范性引用文件。

5.4 术语定义

本部分为执行本标准制定的专门术语和对容易引起歧义的名词进行定义。

5.4.1 挥发性有机物 volatile organic compounds (VOCs)

参与大气光化学反应的有机化合物,或者根据有关规定确定的有机化合物。引自 GB 37822-2019。这是中国当前对 VOCs 的权威定义,适用于大气污染防治和排放管控领域。类似定义也出现在生态环境部发布的《重点行业挥发性有机物综合治理方案》(2019 年)等政策文件中,均沿用 GB 37822-2019 的标准表述。

国际上对 VOCs 的定义略有差异,美国环境保护署(U.S. EPA)发布的《清洁空气法》(Clean Air Act)对挥发性有机化合物(VOCs)的定义基于其光化学活性(即能促进地面 O_3 和烟雾形成)和物理特性,具体如下:"除 CO、 CO_2 、 H_2CO_3 、金属碳化物或碳酸盐、

碳酸铵外,任何参与大气光化学反应的含碳化合物。"美国联邦法规(40 CFR Part 51)进一步细化 VOCs 的判定标准,物理特性:在标准条件下(20°C),蒸气压 \geq 0.1 mmHg(约0.13 hPa),或沸点 \leq 250°C。

5.4.2 柱浓度 column density

气体(如 NO_2 或 HCHO 等)在单位面积<u>从地表</u>到大气层项柱体内所含的分子数,量纲为 $molecule/cm^2$ 。

本标准柱浓度特指对流层柱浓度,即单位面积<u>从地表到</u>对流层顶柱体内所含的分子数。 该定义由指南编制组给出。

5.4.3 臭氧前体物 ozone precursors

指大气环境中能参与大气光化学反应促进 O_3 生成的物质,主要包括氮氧化物(NOx)、挥发性有机物(VOCs)等。

本标准以卫星监测对流层 NO_2 和 HCHO 分别作为 NO_X 和 VOCs 排放的指示要素。该定义由指南编制组给出。

5.4.4 VOCs 高值区 VOCs high value area

指卫星遥感监测人为源 VOCs 排放异常引起 VOCs 或臭氧浓度升高的网格区域。该定义由指南编制组给出。

5.4.5 差分光学吸收光谱技术 differential optical absorption spectroscopy (DOAS)

通过气体分子在紫外光到可见光波段的特征吸收结构来定量分析大气层的痕量气体柱浓度的技术。

该定义参考《环境光学与技术》[51]第二章。

5.5 监测原理

大气中 VOCs 和 NOx 对太阳光谱具有不同的吸收特性,根据朗伯比定律可采用差分吸收光谱技术反演获取大气中的 NO₂ 和 HCHO 柱浓度。卫星遥感监测 HCHO 柱浓度的空间分布对 VOCs 排放具有重要的指示作用,且 HCHO 柱浓度和 NO₂ 柱浓度比值是一种有效的光化学作用指示剂,可以诊断 O₃ 生成敏感性和识别前体物主导类型,当 HCHO/NO₂比值较低时,臭氧的光化学反应生成一般受 VOCs 控制。

根据卫星遥感 HCHO 柱浓度和 HCHO/NO₂比值空间分布可以筛选出 VOCs 排放较高且臭氧生成受 VOCs 控制或者 VOCs 和 NOx 共同控制的区域,再结合高分辨率卫星影像识别筛选人为源排放主导的网格,最终识别出 VOCs 高值区。

5.5.1 HCHO 作为 VOCs 指示物

HCHO 因其显著的光化学关联性、可探测性及对 VOCs 氧化过程的代表性,成为卫星遥感中 VOCs 的理想指示物,广泛应用于全球和区域尺度的大气污染及生态研究。在大气环

境卫星遥感监测中,选取 HCHO 作为 VOCs 的表征物种,主要基于以下几个原因:

(1) HCHO 是 VOCs 氧化的关键中间产物

HCHO 是许多 VOCs (尤其是异戊二烯、烯烃等) 在大气中光化学氧化的主要中间产物。例如:植被排放的主要 VOCs 异戊二烯的氧化路径中,HCHO 是重要中间体。甲烷、乙烯等 VOCs 的氧化也会生成 HCHO。因此,HCHO 的浓度可以间接反映 VOCs 的整体活性及其光化学反应强度。

(2) 卫星遥感探测的可行性

光谱特征明显: HCHO 在紫外-可见光波段(约 340 nm)有较强的吸收,容易被卫星传感器捕捉。背景浓度低: 相比其他 VOCs,HCHO 的自然本底浓度较低,人为或生物源排放的信号更容易被识别。HCHO 的来源分析发现人为源所能贡献的 HCHO 远高于自然源。寿命适中: HCHO 的大气寿命约为几小时至一天,既能反映区域污染特征,又不会因扩散过度稀释。

(3) 与 VOCs 排放源的关联性

生物源 VOCs: 植被排放的异戊二烯是 HCHO 的主要前体物,卫星 HCHO 数据可用于监测森林等生态系统的 VOCs 释放。人为源 VOCs: 工业、交通等排放的烯烃和芳香烃也会生成 HCHO,尤其在城市区域,HCHO 高值常与人为污染相关。

(4) 对 O₃ 和二次污染的指示作用

HCHO 是 O_3 生成的关键前体物之一,其浓度与光化学污染密切相关,如夏季 O_3 污染。通过 HCHO 与 NO_2 的比值,可以判断 O_3 生成对 VOC_8 或 NO_8 的敏感性(即 O_3 生成控制区)。

(5) 技术替代的局限性

直接监测所有 VOCs 物种需要高分辨率光谱或原位测量,而卫星遥感难以实现。HCHO 作为"集成信号",提供了技术上可行的替代方案。

5.5.2 HCHO/NO2比值是诊断 03生成敏感性的关键参数

开展 HCHO 与 NOx 协同控制是有效削减夏季 O₃ 污染强度的重要策略。HCHO 的空间分布在一定程度上可用作 VOCs 空间分布的替代指标,而 HCHO/NO₂比值则是诊断 O₃ 生成敏感性和识别前体物主导类型的关键参数。在 VOCs 控制敏感区,NOx 浓度的下降可能引起 VOCs 浓度上升或使 O₃ 生成对其不敏感,因此通过减少 VOCs 排放可以更高效地降低 O₃ 浓度;而在 NOx 控制敏感区,通过削减 NOx 排放则可显著抑制 O₃ 的生成。可以采用遥感技术确定区域受控指标,然后有针对性地采取 NOx 控制措施或 VOCs 减排,实现科学地降低 O₃ 污染。

遥感技术的应用为区域尺度 O_3 生成机制和前体物控制策略的精确诊断提供了重要支撑。与 O_3 前体物相关的卫星遥感产品主要包括 NO_2 、HCHO 和乙二醛(CHOCHO)。卫星遥感可以在大空间范围内连续、动态获取 O_3 、 NO_2 和 HCHO 浓度。因此,针对 VOC_3 企业监管,利用卫星遥感获取 O_3 和 HCHO 浓度较高,且 O_3 生成受 VOC_3 控制或 VOC_3 和 VOC_3

6 主要条文说明

6.1 总则

总则部分规定了本标准数据源的选择及标准指定的技术路线。

数据源包括高光谱卫星遥感数据、高分辨率卫星影像和土地利用现状分类数据。其中,高光谱卫星遥感数据应包括 0.3μm~0.46μm 附近的紫外波段,光谱分辨率优于 0.5nm;高分辨率卫星影像应为最近 1 年内覆盖监测区域的真彩色遥感影像,至少包括 0.45μm 附近的蓝波段、0.55μm 附近的绿波段和 0.66μm 附近的红波段,空间分辨率优于 2m;土地利用现状分类和编码应遵照 GB/T 21010-2017 第 5 章表 1 规定执行。

本标准制定了 VOCs 高值区卫星遥感识别工作流程,主要包括数据准备、VOCs 高值区筛选和质量控制等流程,具体如图 2 所示。

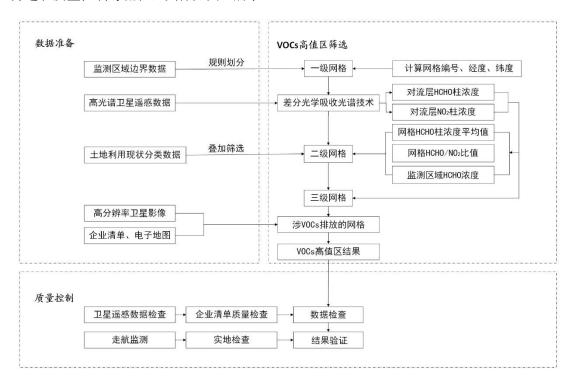


图 2 VOCs 高值区卫星遥感识别技术路线图

6.2 数据准备

根据卫星遥感 HCHO 和 NO₂ 的监测原理, 考虑到目前环境管理对 HCHO 和 NO₂ 监测的分辨率、时效性的需求以及当前卫星遥感发展的现状, 本标准选择极轨卫星的紫外波段进行对流层 HCHO 和 NO₂ 柱浓度的遥感监测工作, 根据卫星遥感监测结果和高分遥感影像筛选 VOCs 高值区。

卫星传感器应具有覆盖 NO_2 和 HCHO 吸收窗口的 $0.3\sim0.46\mu m$ 附近的紫外波段和可见光波段,光谱分辨率优于 0.5nm,主要用于 NO_2 和 HCHO 柱浓度遥感反演。

土地利用现状分类数据采用最近3年内官方发布的高质量土地利用类型数据,空间分辨

率优于 1km, 主要用于二级网格的初步筛选。

高分辨率卫星影像应采用最近1年内覆盖监测区域的无云真彩色遥感影像,空间分辨率优于2m,主要用于VOCs高值区下垫面研判。

企业清单应包括企业名称、地理坐标等信息,或从电子地图中获取企业污染源信息,主要用于研判 VOCs 高值区中是否含有涉 VOCs 人为排放来源。

6.3 卫星遥感数据反演方法的确定

本标准的监测方法是在文献调研、方法实验与应用实践的基础上确定的,主要是为了保 证《大气挥发性有机物高值区卫星遥感识别技术指南(征求意见稿)》中采用方法的科学性、 有效性。大气中的气体成分都具有各自独特的光谱吸收结构,利用紫外、可见光高光谱分辨 率星载遥感仪器可以获取气体的光谱信息。 DOAS 技术是目前常用的大气污染监测方式,该 技术是利用不同气体分子在大气中的光谱吸收特性差异,根据辐射传输及光谱学原理,反演 获得样品或环境中的目标气体浓度。利用该技术可获得大气污染物中的多种成分及其浓度, 如 SO₂、O₃、BrO、HCHO、NO₂等在紫外可见光谱波段有强吸收的微量、痕量气体。基于 DOAS 技术反演大气中污染物的浓度主要有以下优势: (1) 监测目标种类广。DOAS 技术 由于是利用不同气体分子对光谱的吸收特性不同,即具有独立的光谱识别"指纹",利用相 关的数学物理方法可分离出目标气体的信息,且常见的大气污染物如 NO2、SO2、挥发性有 机物等多种气体在 DOAS 技术适用的紫外可见波段均有特征吸收,因此可利用同种方式监 测多种目标气体浓度。(2)监测灵敏度高。该方法因采用非接触式的光学测量方式,不需 进行样品采集和二次产物识别,而这也避免了外源性误差引入和样品采集不充分等缺点,同 时因其监测响应时间短,可实时获取污染浓度,防止因获取浓度的响应时间长导致目标物的 沉积和转化。(3)高时空分辨率的连续监测。该监测技术由于利用光学方法获得污染气体 浓度,不需进行气体采样,使其响应时间大大缩短,具有较高的时间分辨率,同时可根据观 测光路的不同获得不同方位上的气体浓度,也具有较高的空间分辨特性。(4)适用平台广 且稳定性强。该技术主要利用光谱分析方法,而光谱采集主要依赖于光学仪器设备。经校准 及封装后的光学仪器设备相对于化学反应等间接监测方式具有较高的稳定性。此外因其是具 有稳定特性的监测手段,可移植到多种观测平台。如地基多轴 MAX-DOAS 系统、车载观 测系统,以及机载和星载等平台,可实现天地空一体化多平台的立体观测,具有广泛的应用 场景和巨大价值。因此,本指南选用 DOAS 方法从卫星遥感数据中反演获取对流层 HCHO、 NO2柱浓度信息。

经过几十年来不断的应用和发展,DOAS 技术已成为环境监测、大气探测、大气化学循环、气体化学反应机制研究等方面的一个重要而有力的工具。根据采用光源的不同,DOAS 系统可以分为主动 DOAS 系统和被动 DOAS 系统两大类。选用各种人造光源作为光源的为主动 DOAS 系统,以自然光作为光源的则为被动 DOAS 系统。在实际的应用中,针对近地面污染气体或低层大气中痕量气体的监测及腔内大气化学的反应动力学研究等,一般采用主动 DOAS 系统;而测量对流层和平流层大气中的痕量气体、研究污染物排放通量、研究大尺度污染物浓度变化时,则选用被动 DOAS 系统。本标准采用方法为被动 DOAS 系统。

6.3.1 朗伯-比尔(Lambert-Beer) 定律

在介质中传输的一束辐射,会因它与物质的相互作用而减弱。如果介质中任意某个位置的辐射强度 $I(\lambda)$ 在其传播方向上通过 ds 厚度后强度变为 $I(\lambda)+dI(\lambda)$,则有:

$$dI(\lambda) = -I(\lambda)\sigma(\lambda)C(s)ds \tag{1}$$

式中: C(s) ——物质的浓度;

 $\sigma(\lambda)$ ——辐射波长 λ 处的总消光截面。

由于辐射强度的减弱是由物质的吸收和物质对辐射的散射所引起的,因此 $\sigma(\lambda)$ 等于物质的吸收与散射截面之和。

假设在 $\mathbf{s}=\mathbf{0}$ 处的入射强度为 $I_0(\lambda)$,则在经过距离 L 后,其出射强度可由式(1)积分得到

$$I(\lambda) = I_0 \exp[-\int_0^L \sigma(\lambda)C(s)ds]$$
(2)

这就是朗伯-比尔(Lambert-Beer)定律。

6.3.2 散射现象

在实际大气中消光除了分子的吸收,还有散射现象。主要的散射过程是由于气体分子造成的瑞利(Rayleigh)散射和拉曼(Raman)散射,还有气溶胶颗粒和云滴或冰粒造成的米氏(Mie)散射等:

a) 瑞利散射

瑞利散射发生在光与小尺寸 (相对于入射光波长) 物质相互作用时。物理过程描述如下: 电磁辐射感应了极化粒子中偶极子 (如空气分子),使其在固定方向产生振荡,而振荡的偶极子产生了平面偏正的电磁波,即散射波。在 DOAS 技术领域中可以把瑞利散射看作吸收过程,,其消光系数可以表示为 $\varepsilon_R(\lambda) = \sigma_R(\lambda) \cdot C_{air}$,其中 $\sigma_R(\lambda) = \sigma_{R0} \lambda^4 (\sigma_{R0} \approx 4.4 \times 10^{-16} \, \mathrm{cm}^2 \cdot nm^4)$ 。

b) 米氏散射

当粒子尺度可与辐射波长相比拟时,散射过程变得非常复杂。1908 年,古斯塔夫·米(Gustav Mie)给出了均匀球状粒子散射问题的精确解,常称为米氏散射。烟、尘、霾、雾对太阳光的散射即为此类,所以也称为粗粒散射。在 DOAS 中米氏散射类似于瑞利散射,也可以近似地认为是吸收过程,吸收系数为 $\varepsilon_M(\lambda) = \varepsilon_{M0} \cdot \lambda^{-n} (0 < n < 4)$ 。

c) 拉曼散射

当入射光照射到散射分子上时,光子与分子互相碰撞而发生散射现象。散射过程有两种:一种是弹性散射,即在散射过程中光子与分子不发生能量交换,所以散射光的频率保持不变,这就是瑞利散射;另一种是非弹性散射,即在散射过程中光子与分子之间发生了能量交换,光子发射或吸收了能量,因而散射光的频率变化,这就是拉曼散射,但其对光强的减弱作用影响很小,所以在 DOAS 中忽略。

6.3.3 差分光学吸收光谱分析法

结合上面说到的实际大气中气体分子吸收、瑞利散射和米氏散射的消光作用,代人式(2),得

$$I(\lambda) = I_0(\lambda) \exp\left\{-\int_0^L \left[\sum_{j=1}^n \sigma_j(\lambda)C_j(s) + \varepsilon_M(\lambda) + \varepsilon_R(\lambda)\right] ds\right\}$$
(3)

式中: $\sigma_i(\lambda)$ ——所测第 j 种气体的分子吸收截面, cm^2 ·molecule⁻¹;

 $C_i(s)$ ——第 i 种气体在 s 位置处的浓度;

N——所测气体的种类数;

 $\varepsilon_{M}(\lambda)$ ——米氏散射的消光系数;

 $\varepsilon_{R}(\lambda)$ ——瑞利散射的消光系数。

如果认为在 0~L 距离内 Ci(s)是均一的话,即与位置 s 无关,则式(3)可以写为

$$I(\lambda) = I_0(\lambda) \exp\left\{-L \cdot \left[\sum_{j=1}^n \sigma_j(\lambda)C_j + \sigma_{R0}(\lambda)\lambda^{-4}C_{air} + \varepsilon_{M0}\lambda^{-n}\right]\right\}$$
(4)

式中: $\sigma_i(\lambda)$ — 第 i 种气体的分子吸收截面;

$$\sigma_{R0} \approx 4.4 \times 10^{-16} cm^2 \cdot nm^4;$$

C_{air}——空气分子密度(在 20 ℃、1atm 的情况下, 其值为 2.4×10¹⁹cm⁻³)。

辐射波长为 300 nm 时,由于瑞利散射和米氏散射导致的消光通常分别为 1.3×10^{-6} cm⁻¹ 和($1\sim10$)× 10^{-6} cm⁻¹。

但是朗伯-比尔定律不能直接用于实际大气测量中,这主要是由于对于一段宽带光谱的 消光过程,普通方法要将大气中各种散射过程和分子吸收区分开来几乎不可能。差分光学吸 收光谱分析法解决了这个问题。

$$\sigma_i = \sigma_i^b + \sigma_i' \tag{5}$$

式中: σ_{i}^{b} ——对于第 j 种痕量气体的宽状结构光谱(即"慢变化"部分);

 $\sigma_{i}^{'}$ ——对于第 j 种痕量气体的差分光学吸收截面(即"快变化"部分),其反映了窄带光谱结构。

通过上面介绍可以看到,瑞利散射和米氏散射的吸收截面都是随着波长 λ 做"慢变化"的,在光谱分析中可以通过滤除"慢变化"部分只考虑 σ_i 去除来自瑞利散射和米氏散射的干扰。所以式(3)可以写成下式

$$I(\lambda) = I_0(\lambda) \exp \left\{ -\left[\sum_{j=1}^n \left\langle \sigma_j^b(\lambda) + \sigma_j^{'}(\lambda) \right\rangle C_j + \varepsilon_R(\lambda) + \varepsilon_M(\lambda) \right] L \right\}$$
(6)

6.3.4 朗伯-比尔定律变换

对于使用自然光源的被动 DOAS 技术来说,一个显著的特点就是大气中痕量气体吸收 光程 L 的不确定性,所以这里要对朗伯-比尔定律进行相对应的变换:

$$I(\lambda) = I_0(\lambda) \exp\left\{-\left[\sum_{j=1}^n \left\langle \sigma_j^b(\lambda) + \sigma_j^{'}(\lambda) \right\rangle C_j + \varepsilon_R(\lambda) + \varepsilon_M(\lambda)\right] ds\right\}$$
(7)

式中: $I(\lambda)$ ——入射光强;

 $I_0(\lambda)$ ——没有吸收时的太阳辐射强度;

 $\sigma_j^b(\lambda)$ ——对于第 j 种痕量气体,辐射波长 λ 处的宽状结构光谱(即"慢变化"部分);

 $\sigma'_{j}(\lambda)$ ——对于第 j 种痕量气体,辐射波长 λ 处的差分光学吸收截面(即"快变化" 部分),其反映了窄带光谱结构, cm^2 ·molecule⁻¹;

 C_i ——第 j 种痕量气体的浓度;

 $\varepsilon_{\scriptscriptstyle R}(\lambda)$ ——瑞利(Rayleigh)散射的消光系数;

 $\varepsilon_{M}(\lambda)$ ——米氏散射的吸收系数;

ds ——介质中某个位置的入射光强 $I(\lambda)$ 在其传播方向通过 ds 厚度。

将式 (1) 中所有"慢变化"部分" $\sigma_i^b(\lambda)$ 、 $\varepsilon_R(\lambda)$ 和 $\varepsilon_M(\lambda)$ 合并写作 $I_0'(\lambda)$,则有

$$I(\lambda) = I_0'(\lambda) \exp\left\{-\int \left[\sum_{j=1}^n \sigma_j'(\lambda) C_j ds\right]\right\}$$
 (8)

令 $Cs_j = \int C_j(s)ds$,则式(8)可以写为

$$\frac{I(\lambda)}{I_0'(\lambda)} = \exp\left[-\sum \sigma_j'(\lambda)Cs_j\right]$$
 (9)

那么,差分光学密度D'就可以写作

$$D' = \ln \frac{I_0'(\lambda)}{I(\lambda)} = \sum \sigma_j'(\lambda) Cs_j$$
 (10)

6.3.5 整层斜柱浓度反演

接下来的反演算法和主动 DOAS 算法类似,所以在某种意义上被动 DOAS 算法和主动 DOAS 算法在光谱的反演方面是相似的。式(10)也可以简单写作

$$Cs = D'(\lambda, \sigma') / \sigma'(\lambda) \tag{11}$$

式中: *Cs* ——斜柱浓度(slant column density, SCD),即痕量气体浓度沿光路的积分浓度,molecule·cm⁻²。

DOAS 方法可以用于太阳直射光谱测量和散射光谱测量的反演,对于直射光谱可以直接用式(11)计算得到斜柱浓度,如果用太阳散射光测量,还需要进行一些假设。对于测量散射辐射,观测的强度 I_{suct} 事实上是无穷个不同光路的平均值

$$I_{sact} = \sum_{k} I_{k} = I_{0} \sum_{k} \exp(-\sigma \cdot Cs_{k})$$
 (12)

式中: I_{k} ——沿第 k 条光路到达观测者的光强;

Csk——第 k 条光路上的斜柱浓度, molecule·cm⁻²。

根据朗伯-比尔定律和式(12),光学密度 D_{sact} 可以表示为

$$Dsact = -\ln \left[\frac{I_{sact}(\lambda, \sigma)}{I_0(\lambda, \sigma)} \right] = -\ln \sum_{k} \exp(-\sigma \cdot Cs_k) \neq \sum_{k} \ln[\exp(-\sigma)Cs_k] \quad (13)$$

式(13)表示了 $Dsact \neq \sigma \cdot \overline{Cs}$, \overline{Cs} 是不同光路上斜柱浓度的平均值。所以对于散射光的测量来说,光学密度不能表示为吸收截面和平均斜柱浓度的乘积。但是对于弱吸收体来说,式(13)中 $\ln[\exp(-\sigma)Cs_k$ 可以按照先对指数函数进行泰勒展开取前两项,再对对数函数进行泰勒展开,可以近似从 Dsact 得到 \overline{Cs} ,也就是在利用太阳散射光测量大气痕量气体时,可以近似使用式(13)和前面的反演方法计算。有学者指出,在散射辐射测量的情况下,吸收截面和测量的光学密度之间是非线性的,DOAS 方法只有在吸收截面和测量的光学密度之间是线性的时候才能成立。但由于 DOAS 测量的通常都是弱吸收体,经过近似后 DOAS 方法适用于散射辐射的测量,即不同光程斜柱浓度的平均值 \overline{Cs} 可以通过式(14)得到,计算方法和常规 DOAS 测量的计算方法相同。这里要指出的是,本文下面的叙述中所用 Cs 即为 \overline{Cs} 。但在被动 DOAS 实际计算时需要对下面介绍的夫琅和费 (Fraunhofer)线和林 (Ring) 效应进行校正,这也是所有适用太阳散射光的被动 DOAS 测量所共同面临的问题。

a) 夫琅和费结构

几乎所有的被动 DOAS 仪器都直接或间接地将太阳作为它们主要的光源。地基、球载或星载太阳散射光 DOAS 测量和直射太阳光测量不得不考虑太阳光谱特殊形状。太阳辐射可以近似认为是一个 T≈5800K 的黑体辐射,色球层的光谱是连续光谱(T=5800K 的普朗克函数描述)且最大强度出现在 500nm 处。普朗克函数将发射的单色强度与发射物质的温度和频率联系起来,如下式所示:

$$B_{\lambda}(T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5 (e^{hc}/^{k\lambda T} - 1)}$$
 (14)

式中: T——绝对温度;

h——普朗克常量,通常由实验确定,h=(6.6260755±0.0000040) \times 10-34J•s:

c---光速;

k——玻耳兹曼常量,通常由实验确定, $k=(1.380658\pm0.000012)\times10^{-23}$ J/K。

被动 DOAS 测量得到的光谱中夫琅和费结构占了主要部分,为了计算地球大气中较弱的痕量气体吸收结构(光学密度 10⁻³,较夫琅和费线小 30%),因此在 DOAS 分析过程中 夫琅和费线必须要仔细地去除。在涉及的被动 DOAS 计算中,取较小太阳天顶角(solar zenith angle,SZA)并且相对"干净"的测量光谱作为式(4)中的 I_0 ',这条光谱有时也称作夫琅和费参考谱(Fraunhofer reference spectrum,FRS)。但是由于无论怎么选取这条 FRS,光谱中仍然包含了痕量气体的吸收,所以计算得到的结果应该称为差分斜柱浓度(differential slant column density,dSCD)。 dCs 表示了光谱 I 的斜柱浓度和夫琅和费参考谱的 I_0 中的斜柱浓度的差,见式(15)。

$$dCs(\theta, a) = Cs(\theta, a) - C_{EBS}$$
(15)

b) Ring 效应

Grainger 和 Ring 于 1961 年发现观测的天顶散射光的太阳夫琅和费线的强度依赖于光在大气中的路径,在较大 SZA 下测得的夫琅和费线的强度要比在较小 SZA 下测得的弱,这个现象就是所谓的"Ring 效应"。人们对 Ring 效应进行了很多的思索,像转动和振动拉曼散射过程、气溶胶荧光等都曾被作为一种解释。转动拉曼散射现在被认为是引发 Ring 效应最有可能的原因。

虽然 Ring 效应引发的光学密度变化仅有百分之几的量级,但这也明显地影响了 DOAS 的散射光测量,因此需要有一种非常精确的校正方式。在散射光谱计算时一条叫作 Ring 的参考谱作为一种吸收气体的吸收截面被包含在拟合过程中。DOAS 探测器测量到的散射光强度 I_{meas} 可以看作是弹性散射 I_{elas} (瑞利散射 I_{ray} 和米氏散射 I_{Mie})与非弹性散射(拉曼散射 I_{Ram})的和,写作

$$I_{meas} = I_{Rav} + I_{Mie} + I_{Ram} = I_{elas} + I_{Ram}$$
 (16)

式中: I_{meas} ——DOAS 探测器测量到的散射光强度;

 I_{rav} ——瑞丽散射;

 I_{Mie} ——米氏散射;

 I_{Ram} ——拉曼散射;

 I_{elas} ——弹性散射。

对于 DOAS 算法,对测量光谱取对数,并且 $I_{\it Ram} << I_{\it elas}$,所以有下式

$$\ln I_{meas} = \ln (I_{elas} + I_{Ram}) = \ln I_{elas} + \ln \left(1 + \frac{I_{Ram}}{I_{elas}}\right) \approx \ln I_{elas} + \frac{I_{Ram}}{I_{elas}}$$
(17)

$$I_{Ring} = \frac{I_{Ram}}{I_{alar}} \tag{18}$$

式中: I_{Ring} ——Ring 的光谱计算式。

这条光谱通常叫做 Ring 光谱。在计算时通常把 Ring 光谱包含在拟合过程中,来校正 Ring 效应。

6.3.6 计算 AMF

根据待反演像元的太阳天顶角、卫星天顶角、相对方位角、地表反照率、地表大气压(从GFS、ECMWF等数值模式模拟分析产品中获取)和参考波长等6个参数,结合AMF查找

表选择最邻近的节点进行线性插值计算获取 AMF。

表 2 大气质量因子查找表参数节点设置

参数	参数节点的 数量	网格值		
太阳天顶角(°)	11	0, 15, 30, 40, 45, 50, 55, 60, 65, 70, 80		
卫星天顶角(°)	9	0, 20, 30, 35, 40, 45, 50, 55, 60		
相对方位角(°)	13	0, 30, 40, 50, 60, 80, 100, 120, 130, 140, 150, 160, 180		
地表反照率	14	0, 0.01, 0.03, 0.05, 0.07, 0.09, 0.12, 0.13, 0.15, 0.2, 0.3, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0		
地表大气压(hPa)	11	0, 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700, 800, 900, 1000		
波长 (nm)	410, 420, 430, 440, 450, 460, 470, 480			

6.3.7 计算垂直柱浓度

根据公式(19),结合反演的 SCD 与计算的 AMF 获取 VCD,即对应位置的 NO_2 或 HCHO 柱浓度。

$$VCD = \frac{SCD}{AMF}$$
 (19)

式中: VCD——垂直柱浓度, molecule·cm⁻²;

SCD——斜柱浓度, molecule·cm⁻²;

AMF——大气质量因子,无量纲。

6.3.8 平流层影响扣除

利用 TM5-MP (Tracer Model, 5th generation-Massively Parallel)等大气化学模型模拟获取平流层 NO2或者 HCHO 浓度,从卫星遥感反演的垂直柱浓度扣除平流层影响即为对流层柱浓度。

6.4 VOCs 高值区筛选

6.4.1 臭氧前体物指示值(HCHO/NO2比值)确定方法

广泛应用的 O₃ 生成敏感性评估研究方法分为光化学模型法和指示剂法两大类[32]。

光化学模型法有经验动力学模拟法、基于观测数据输入的模型、基于排放清单约束的模型等。经验动力学建模法(Empirical Kinetic Modeling Approach,EKMA),由不同的 NOx 和 VOCs 初始浓度情景对应 O₃ 的生成浓度或生成速率绘制成 EKMA 等值线,使用基于观测的模型或基于排放的模型都可模拟这些控制情景。基于观测数据输入的模型(Observation-Based Model,OBM),通过输入气态污染物和气象条件的测量值模拟 O₃ 生成过程,OBM 不依赖源排放清单数据,使用观测数据约束可避免排放清单不确定性带来的误差。基于排放清单约束的模型(Emission Inventory-Constrained Model,EICM)通过输入VOCs 和 NOx 的排放清单模拟 O₃ 生成过程,能够突破时空限制,可在不受观测数据的限制条件下大范围研究 O₃ 生成敏感性。

指示剂法具体有 VOCs/NOx 比值法、 O_3 生成效率法、 $PH_2O_2/PHNO_3$ 比值法、HCHO/NO2 比值法。直接使用反应性加权 VOCs/NOx 比值判断 O_3 生成敏感性的概念由学者 (33) 在 1992 年首次提出,该方法较为简单快捷,但只能代表瞬时 O_3 化学;考虑不到区域污染物的扩散;同时忽略了不同 VOCs 物种之间的活性差异。因此,只适用于粗略诊断区域 O_3 生成敏感性的研究。学者 (34) 1987 年首次提出利用 O_3 生成效率(OPE)作为估算 O_3 生成量的指标,定义其计算式为 $OPE=\triangle O_3/\triangle NO_2$,即每生成一个 NO_2 分子所生成的 O_3 分子数。OPE 既可以直接用于 O_3 生成量的计算,又可用于快速诊断 O_3 生成敏感性,还可作为模型灵敏性参数调整的参考,便于利用观测数据验证模型模拟结果 (35) 。但 OPE 同样也有局限性,历年来 OPE 的计算式普遍只表达了化学过程,而没有表达 O_3 沉积的影响 (36),缺乏对 O_3 生成过程中的复杂氧化反应的考虑,导致其评估 O_3 及其前体物之间复杂的非线性关系时存在不确定性。学者 (37) 首次提出将 (37) 计 (37)

相关学者^{[12][39]}分别将 HCHO/NO₂(FNR)指示剂应用到全球 O_3 监测实验仪(GOME)和 O_3 监测仪器(OMI)卫星数据分析中。 O_3 的形成机制与 VOCs 与 NOx 的比值密切相关,通过确定 HCHO/NO₂ 比值的阈值来确定 O_3 生成的敏感性。不同的 FNR 比值范围表示三种形成机制: VOC 控制、VOC 与 NOx 协同控制和 NOx 控制。经过实际应用验证, FNR 指标判断 O_3 生成敏感性的结果可靠,可以反映对流层 O_3 生成敏感性的长期演变,可用于宏观范围内 O_3 生成敏感区的划分^[40]。

FNR 计算公式如下:

$$FNR = \frac{c(HCHO)}{c(NO_2)} \tag{20}$$

式中: FNR——HCHO/NO2比值, 无量纲;

- c(HCHO)——HCHO 柱浓度, molecule·cm⁻²;
- c (NO₂) ——NO₂柱浓度, molecule·cm⁻²。

目前,最广泛应用的 FNR 阈值^[12]为,当 FNR<1 时,O₃ 生成属于 VOCs 控制;当 FNR >2 时,O₃ 生成属于 NOx 控制;当 1 < FNR < 2 时,O₃ 生成属于协同控制。研究表明,FNR 阈值应根据区域差异调整,广泛应用的阈值划分^[12]不适用于我国。研究人员^[41-44]采用 OMI FNR 指标对中国 O₃ 敏感性进行了长期大规模表征,从东部到中部经济发达、人口密集地区的 O₃ 生成在空间上倾向于 VOCs 控制区,人口稀少的西部地区倾向于 NOx 控制区。此外,O₃ 生成的敏感性在不同季节有不同的主要控制因素,FNR 有季节周期规律,夏季 O₃、HCHO浓度和 FNR 值较大,冬季 NO₂浓度较大。实际应用中,FNR 取值范围可参考下表。

表 3 不同地区 FNR 参考值

亚索豆材	III 郊 11→ FN	FNR 阈值范围		
研究区域	研究时段	VOCs 控制区	协同控制区	NOx 控制区
	2015~2020	FNR<2	_	

泰州市、秦岭和新津县	$2018 \sim 2019$	FNR < 0.55	0.55 < FNR < 1.0	FNR>1.0
全国区域	$2016 \sim 2019$	FNR < 2.3	2.3 <fnr<4.2< td=""><td>FNR>4.2</td></fnr<4.2<>	FNR>4.2
全国区域	$2016 \sim 2018$	FNR<1.64	1.64 <fnr<2.52< td=""><td>FNR>2.52</td></fnr<2.52<>	FNR>2.52
全国区域	2013~2021	FNR < 2.2	2.2 <fnr<3.2< td=""><td>FNR>3.2</td></fnr<3.2<>	FNR>3.2
京津冀、长三角、珠三角和成渝地区	$2014 \sim 2016$	FNR<0.69	0.69 <fnr<2.15< td=""><td>FNR>2.15</td></fnr<2.15<>	FNR>2.15

例如,京津冀地区的 O₃ 形成阶段主要为协同控制和 NOx 控制,VOCs 控制区主要分布在城市群地区,协同控制区主要集中在城市扩张地区,非城市地区主要受 NOx 控制^[45]。学者^[46]基于 CMAQ 模型计算的 FNR 指标评估了河南省 O₃ 生成敏感性区域,并利用该指标对河南省进行敏感性区域划分。结合 2015~2022 年河南省国控站监测数据,采用 Temp 法、Night 法、5th 法以及 CMAQ-Night 法,评估了各分区冷暖季 O₃ 区域背景浓度及其演变趋势。学者^[47]利用 Models-3/CMAQ 模式系统,对北京市 2010 年 6~8 月逐日的 O₃ 前体物控制区进行 5 种类型的划分,使用各类控制区在研究期间出现的频率表征北京夏季 O₃ 控制区空间分布的总体特征。我国 O₃ 生成敏感性的时空分布呈现以下特性:在经济发达、人口密集的城市(如京津冀、长江三角洲、珠江三角洲和成渝地区)O₃ 生成主要受 VOCs 控制,而郊区及农村地区,则多为 NOx 控制区或协同控制区。

6.4.2 一级网格划分

获取待监测区域矢量范围,将整个待监测地区按照目标高值区大小(例如 1km×1km、3km×3km等)进行划分。高值区一般最小为 1km×1km,主要有两方面原因,一是由于一些大型企业占地面积较大,根据监管需求,需保证高值区内排放相关污染物企业数量不小于 1;二是目前气态污染物卫星遥感数据空间分辨率一般大于等于 1km×1km。

对划分好的每个区域网格添加属性值,即一级网格,一级网格必须包含以下属性值:

- a) 属性 1: 网格编号,按照省、市、县、序号的顺序进行编号,如:省_市_县_0001;
- b)属性 2: 网格中心经度地理坐标,用小数度数表示,精确到小数点后六位,如 116.253001;
- c)属性3:网格中心纬度地理坐标,用小数度数表示,精确到小数点后六位,如38.079002;
- d) 属性 4: 监测时间。

6.4.3 二级网格选取

首先进行土地利用类型初筛,一级网格叠加土地利用现状分类数据,剔除掉耕地、林地等非人为源排放区域的一级网格,保留包括商服用地、工矿仓储用地等人为源区域的一级网格。

然后添加污染特征属性,根据从高光谱卫星遥感数据反演获取的 HCHO、NO₂ 柱浓度,选取监测时段内 HCHO、NO₂ 柱浓度,计算 HCHO/NO₂ 比值作为臭氧前体物指示值,统计每个二级网格的 HCHO 柱浓度和臭氧前体物指示值平均值以及监测区域 HCHO 平均值,添加以下 3 个属性值:

- a) 属性 5: 网格内 HCHO 柱浓度平均值;
- b) 属性 6: 网格内 HCHO/NO2 比值平均值;
- c) 属性 7: 监测区域 HCHO 平均值。

6.4.4 三级网格选取

在二级网格的基础上, 筛选出同时满足以下三个条件的网格作为三级网格:

- a) 网格 O_3 前体物指示值(HCHO/N O_2 比值)小于 M,M 值依据不同城市观测或模拟结果设定,一般情况下可采用 4.2 作为参考值,详见表 3。
- b) 网格 HCHO 浓度大于网格周边区域 5km×5km 区域内 HCHO 浓度均值与标准差之和。 根据中心极限定理,多个独立统计量的和的平均值,符合正态分布。根据正态分布的性质, 结合概率密度函数:
 - 1) 函数曲线下 68.26%的面积在平均数左右的一个标准差范围内;
 - 2) 95.45%的面积在平均数左右两个标准差的范围内;
 - 3)99.73%的面积在平均数左右二个标准差的范围内:
 - 4) 99.99%的面积在平均数左右四个标准差的范围内;
 - c) 网格 HCHO 浓度大于监测区域 HCHO 浓度均值。

6.4.5 VOCs 高值区筛选

在三级网格的基础上,结合高分辨率卫星影像、企业清单或电子地图等数据,筛选出包含有涉 VOCs 排放企业的三级网格作为 VOCs 高值区。

6.5 质量控制

6.5.1 卫星遥感数据检查

卫星遥感数据检查主要包括条带噪声比例、卫星遥感产品精度、土地利用类型产品精度三部分内容。

(一)条带噪声比例

遥感数据的核心价值在于其能够准确反映地物的光谱和辐射信息。条带噪声是一种系统性误差,会引入无法通过简单统计去除的偏差,导致反演结果不可靠;大多数条带噪声去除算法(如矩匹配、滤波、优化模型等)在处理轻度到中度的条带噪声时效果最好。当噪声比例过高(例如超过10%~20%)时,算法可能无法准确区分噪声和真实的地物信号,且去噪过程可能会过度平滑图像,损失宝贵的细节信息(如边缘、纹理)。

对于卫星数据地面处理系统而言,需要一个明确、可操作的质量控制指标来对海量数据进行自动筛选和分级。5%提供了一个清晰的、可计算的二进制判断标准。许多数据分发机构会根据数据质量对产品进行分级,低噪声水平是生成高质量等级产品的必要条件。在统计学中,5%是一个常用的显著性水平(α=0.05)。将噪声控制在5%以下,可以理解为确保信号的"真实性"和"可靠性"远高于噪声的干扰水平,使得基于数据的科学结论具有较高的置信度。一些气态污染物反演算法,如哨兵5号在噪声计算与三波段反演时,基于VIIRS同步观测进行了严格的云过滤,仅保留云覆盖<0.05%的完全无云像素^[48]。

因此,将输入数据的噪声水平限定在较低范围内(如<5%)是保证去噪算法有效、可靠运行的前提;在选取卫星遥感气态污染物数据时,可保留云覆盖<0.05%的完全无云像素。

(二)卫星遥感产品精度

卫星遥感监测的 HCHO 和 NO₂ 柱浓度产品对 VOCs 高值区筛选至关重要。经过调研国内外同类卫星遥感产品的精度,哨兵-5p TROPOMI L2_HCHO 数据产品^[49](NDACC FTIR 和 NDACC MAX-DOAS)以及 OMI QA4ECV 甲醛卫星数据一致。偏差估计在清洁区域为正(30%以内),在污染区域为负(-30%以内)。对平流层 NO₂ 柱进行分析,并将其与 NDACC 网络的地面天顶散射幕光 DOAS 测量结果(ZSL-DOAS)进行了比较;将对流层 NO₂ 柱浓度与基于地面的多轴差分吸收光谱测量(MAX-DOAS)进行比较;总 NO₂ 柱浓度与 PGN 网络 Pandora 光谱仪的地面直射测量结果进行对比。根据欧空局官方发布数据显示,哨兵-5p TROPOMI L2_NO₂ 数据(对流层、平流层和总柱浓度)总体上与相关的地面测量(NDACC MAX-DOAS,NDACC ZSL-DOAS,和 PGN 太阳直射 DOAS)以及 OMI QA4ECV NO₂ 卫星数据一致。离线数据对流层 NO₂ 偏差在 32%以内,对流层 NO₂ 偏差在 3%以内,总柱浓度偏差在 8%以内,满足 NO₂ 柱浓度产品精度优于 80%的要求。

因此,在VOCs高值筛选工作前,综合考虑科学性和可行性要求卫星遥感反演HCHO柱浓度产品精度优于70%,NO₂柱浓度产品精度优于80%。

(三) 土地利用类型产品精度

官方土地利用/土地覆盖(Land Use/Land Cover,LULC)数据包括但不限于以下3种, 建议选择官方发布的高精度产品。

由中国科学院资源环境科学数据平台(RESDP)发布的多时期土地利用土地覆盖遥感监测数据集(CNLUCC),数据主要源自美国Landsat系列卫星的TM/ETM+/OLI影像,时间跨度通常每5年一期,自1970年代以来共11期: 1980、1990、1995、2000、2005、2008、2010、2013、2015、2018、2020和2023年。采用二级分类系统,共分为6个一级类和25个二级类。一级分为耕地、林地、草地、水域、建设用地和未利用土地,二级在一级基础上进一步分为25个类型。空间分辨率为30米×30米,一级类分类精度大于90%。

由自然资源部发布的第三次全国国土调查数据(2017年~2020年),数据综合运用了更高分辨率的卫星影像(如国产高分系列、Pleiades、WorldView等)、航空影像、甚至实地调查。采用《国土空间调查、规划、用途管制用地用海分类指南》分类系统,共分为24个一级类和106种二级类。空间分辨率优于1米,分类精度大于95%,经过多重人工核查。

由武汉大学团队发布的中国30米年度土地覆盖数据集(CLCD)^[50],拥有1985年至今的年度数据,时间连续性较好。基于Landsat系列(MSS、TM、7、8、9)影像数据,构建时空特征,结合随机森林分类器得到分类结果,并提出一种包含时空滤波和逻辑推理的后处理方法进一步提高CLCD的时空一致性,基于5463个目视解译样本并通过人机交互,CLCD的总体精度达80%。

6.5.2 企业清单质量检查

针对企业清单数据完整性和真实性,确保企业清单中的企业名称、坐标、排放污染物类型等基础信息完整,同时修正清单中坐标缺失和位置偏差较大的数据,避免地理位置偏离原

因造成的 VOCs 高值区误判。

6.5.3 结果验证

卫星遥感识别 VOCs 高值区后,定期结合实地检查、走航移动监测等方式对高值区进行核查验证,排查企业污染排放和治理问题,如高值区内发现问题企业则判定该高值区识别准确。当 VOCs 高值区识别准确率超过 70%时,可认为该 VOCs 高值区遥感识别技术合理可行,保证卫星遥感筛选 VOCs 高值区技术和参数合理可靠。

7 对实施本标准的建议

本标准通过构建 VOCs 高值区卫星遥感识别方法、技术流程和质量控制等,可以为规范 VOCs 高值区卫星遥感识别和监管工作提供数据基础。各地也有开展地方 VOCs 高值区监管 治理的迫切需求,建议尽快征求意见并发布实施。

为保证本标准的有效实施,建议生态环境部门加强 VOCs 高值区卫星遥感识别的技术培训,保障 VOCs 高值区卫星遥感识别结果的准确性和可靠性,促进标准在科研以及其它领域的应用。随着环境管理要求及技术的不断发展,适时对标准进行修订,不断扩展监测内容,制定针对不同卫星遥感数据源的技术规范,不断推动、深化标准工作。

8 参考文献

- [1] 生态环境部. 2020 年挥发性有机物治理攻坚方案 [A/OL].(2020-06-24)[2022-04-22].http://www.mee.gov.cn/xxgk2018/xxgk/xxgk03/202006/t 20200624 785827.html.
- [2] CLEVELAND W S, GRAEDELTE, KLEINERB, et al.Sunday and workday variations inphotochemical air pollutants in New Jersey and New York[J]. Science, 1974, 186: 1037-1038.
- [3] MILFORD J.B, GAO D.F, SILLMANS, et al. Total reactive nitrogen (NOy) as an in dicator of the sensitivity of ozone to reductions in hydrocarbon and NOx emissions[J]. Journal of Geophysical Research Atmospheres, 1994, 99 (D2): 3533.
- [4] Luecken D J, Yarwood G, Hutzell W T. Multipollutant modeling of ozone, reactive n itrogen and HAPs across the continental US with CMAQ-CB6[J]. Atmospheric environ ment, 2019, 201: 62-72.
- [5] Li, Y., Shao, M., & Lu, S. (2015). Review on Technologies of Ambient Volatile Orga nic Compounds Measurement. Environmental Monitoring in China, 31(4), 1-7.
- [6] Song H, Zhao W, Yang X, et al. Ozone Sensitivity Analysis and Ozone Formation Regimes Division in the Beijing Tianjin Hebei Region Based on Satellite Remote S ensing Data[J]. Atmosphere, 2023, 14(11):
- [7] Hu Q, Ji X, Hong Q, et al. Vertical Evolution of Ozone Formation Sensitivity Based

- on Synchronous Vertical Observations of Ozone and Proxies for Its Precursors: Implications for Ozone Pollution Prevention Strategies.[J]. Environmental science & technology, 2024.
- [8] Jian Xu, Zhuo Zhang, Lanlan Rao, Yapeng Wang, Husi Letu, Chong Shi, Gegen Tana, Wenyu Wang, Songyan Zhu, Shuanghui Liu, et al. Remote Sensing of Tropospheric O zone from Space: Progress and Challenges. J Remote Sens. 2024;4:0178.DOI:10.34133/r emotesensing.0178.
- [9] 美国环保署(US Environmental Protection Agency, EPA), 1990 年《清洁空气法(Clean Air Act)》修正案
- [10] 美国环保署(US Environmental Protection Agency, EPA), 2006 年《国家环境空气质量标准(National Ambient Air Quality Standards, NAAQS)》[11] Duncan, B.N.; Yoshida, Y.; Olson, J.R.; Sillman, S.; Martin, R.V.; Lamsal, L.; Hu, Y.; Pickering, K. E.; Retscher, C.; Allen, D.J.; et al. Application of OMI observations to a space-based indicator of NOx and VOC controls on surface ozone formation. Atmos.Environ. 2010, 44, 2213 2223. [CrossRef]
- [12] Cheng, L.J.; Wang, S.A.; Gong, Z.Y.; Li, H.; Yang, Q. Spatial and seasonal variation and regionalization of ozone concentrations in China. China Environ. Sci. 2017, 37, 4003 - 4012.
- [13] 杨员,张新民,徐立荣,等.美国大气挥发性有机物控制历程及对中国的启示[J].环境科学与管理,2015,40(01):1-4.
- [14] Zhao J G, Yang L X, Chen X S,et al. Study of American Regulations and Technolog ies for VOCs Control in Coating Industry [J].Paint & Coatings Industry,2012,42(2):44-48.
- [15] 马鹏飞, 厉青, 陈辉等. 京津冀及周边地区大气污染防治重点关注区域遥感综合分析[J]. 遥感技术与应用, 2019, 34 (2): 404-411.MaPengfei, LiQing, ChenHui, et al. Remote Sensing Synthetic Analysis of Key Areas of Air Pollution in Beijing-Tianjin-Hebei(BT H) and Its Surrounding Area[J]. Remote Sensing Technology and Application, 2019, 3 4 (2): 404-411.[DOI:10.11873/j.issn.1004-0323.2019.2.0404]
- [16] 陈辉, 王桥, 厉青等. 大气环境热点网格遥感筛选方法研究[J].中国环境科学, 2018, 38 (7):10.DOI:CNKI:SUN:ZGHJ.0.2018-07-010.
- [17] Lu, C.; Li, Q.; Xing, C.; Hu, Q.; Tan, W.; Lin, J.; Zhang, Z.; Tang, Z.; Cheng, J.; Chen, A.; et al. Identification of O3 Sensitivity to Secondary HCHO and NO2 Measur ed by MAX-DOAS in Four Cities in China. Remote Sens. 2024, 16, 662. https://doi.or g/10.3390/rs16040662
- [18] Jie R, Fangfang G, Shaodong X. Diagnosing ozone NOx VOC sensitivity and revealing causes of ozone increases in China based on 2013 2021 satellite retrievals[J]. At mospheric Chemistry and Physics, 2022, 22(22):15035-15047.
- [19] 江梅, 张国宁, 邹兰, 等. 挥发性有机污染物排放控制标准体系的建立与完善[J].环境科

- 学, 2013, 34(12): 4751-4755.DOI:10.13227/j.hjkx.2013.12.032.
- [20] 郭逸飞, 宋云, 孙晓峰, 等. 国外 VOCs 污染防治政策体系借鉴, 环境保护, 2012, (13): 75-77
- [21] 修光利, 张萍, 黄雪娟, 等. 工业气态有机污染物排放标准体系研究, 化学世界, 2009, (增刊): 256-259.
- [22] 栾志强, 王喜芹, 郑雅楠, 等. 台湾地区 VOCs 污染控制法规、政策和标准, 环境科学, 2011, 32(12):3491-3500.
- [23] 卓俊玲,朱珊娴,隆重等. 基于卫星数据识别臭氧生成高值区的方法及其应用[J]. 环境工程技术学报, 2022, 12(6): 2039-2048.
- [24] Pu, D., Zhu, L., Shen, H. et al. Integrated satellite observations unravel the re lationship between urbanization and anthropogenic non-methane volatile organic compo und emissions globally. npj Clim Atmos Sci 7, 125 (2024). https://doi.org/10.1038/s4161 2-024-00683-5
- [25] Dorian S. Abbot, Paul I. Palmer, Randall V. Martin, Kelly V. Chance, Daniel J. Jac ob, Alex Guenther. Seasonal and interannual variability of North American isoprene e missions as determined by formaldehyde column measurements from space. GEOPHY SICAL RESEARCH LETTERS (2003). https://doi.org/10.1029/2003GL017336
- [26] Dylan B. Millet, Daniel J. Jacob, Solène Turquety, Rynda C. Hudman, Shiliang Wu, Alan Fried, James Walega, Brian G. Heikes, Donald R. Blake, Hanwant B. Singh, Bruce E. Anderson, Antony D. Clarke. Formaldehyde distribution over North America: Implications for satellite retrievals of formaldehyde columns and isoprene emission. J RG:A(2006). https://doi.org/10.1029/2005JD006853
- [27] Paul I. Palmer, Daniel J. Jacob, Arlene M. Fiore, Randall V. Martin, Kelly Chance, Thomas P. Kurosu. Mapping isoprene emissions over North America using formaldehy de column observations from space. JGR:A(2003). https://doi.org/10.1029/2002JD00215
- [28] Qianqian Hong, Cheng Liu, Qihou Hu, Yanli Zhang, Chengzhi Xing, Wenjing Su, Xiangguang Ji, Shaoxuan Xiao, Evaluating the feasibility of formaldehyde derived fr om hyperspectral remote sensing as a proxy for volatile organic compounds, Atmosph eric Research, Volume 264, 2021, 105777, ISSN 0169-8095.
- [29] 白建辉, 郝楠. 亚热带森林植物挥发性有机物 (BVOCs) 排放通量与大气甲醛之间的关系[J]. 生态环境学报, 2018, 27(06): 991-999.DOI:10.16258/j.cnki.1674-5906.2018.06.001.
- [30] 陈良富, 王雅鹏, 张欣欣, 等. 面向区域二次污染风险控制的臭氧及其前体物卫星遥感监测[J]. 环境监控与预警, 2019, 11(05):13-21.
- [31] 高超, 张学磊, 修艾军, 等. 中国生物源挥发性有机物(BVOCs)时空排放特征研究[J]. 环境科学学报, 2019, 39(12):4140-4151.DOI:10.13671/j.hjkxxb.2019.0243.
- [32] 钟博闻,周俊,王燕,等. 我国臭氧生成敏感性研究进展[J].中国环境科学,2024,44(12):6 522-6537.

- [33] Chameides W, Fehsenfeld F, Rodgers M, et al. Ozone precursor relationships in the ambient atmosphere [J]. Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 1992,97(D5): 6037-6055.
- [34] Liu S C, Trainer M, Fehsenfeld F, et al. Ozone production in the rural troposphere and the implications for regional and global ozone distributions [J]. Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 1987, 92(D4):4191-4207.
- [35] 徐晓斌, 葛宝珠, 林伟立. 臭氧生成效率 (OPE) 相关研究进展[J]. 地球科学进展, 20 09, 24(8): 845-853.
- [36] 张晓, 鲍晓磊, 赵江伟, 等. 基于观测数据的石家庄交通干线附近臭氧光化学敏感性分析[J]. 环境科学学报, 2021, 41(12): 5047-5054.
- [37] Sillman S. The relation between ozone, NOx and hydrocarbons in urban and polluted rural environments [J]. Atmospheric Environment, 1999,33(12):1821-1845.
- [38] Zhang Y J, Zhao Y C, Li J, et al. Modeling ozone source apportionment and performing sensitivity analysis in summer on the North China Plain [J]. Atmosphere, 2020,11(09):992.
- [39] Martin R, Parrish D, Ryerson T, et al. Evaluation of GOME satellite measure ments of tropospheric NO2 and HCHO using regional data from aircraft ca mpaigns in the southeastern United States [J]. Journal of Geophysical Researc h: Atmospheres, 2004,109(D24).
- [40] Witte J, Duncan B, Douglass A, et al. The unique OMI HCHO/NO2 feature during t he 2008 Beijing Olympics: Implications for ozone production sensitivity[J]. Atmosphe ric environment, 2011,45(18):3103-3111.
- [41] Du X H, Tang W, Cheng M M, et al. Modeling of spatial and temporal variations of ozone-NOx-VOC sensitivity based on photochemical indicators in China [J]. Journal of Environmental Sciences, 2022,114: 454-464.
- [42] Wang W N, Van Der A R, Ding J Y, et al. Spatial and temporal changes of the o zone sensitivity in China based on satellite and ground-based observations [J]. Atmos pheric Chemistry and Physics, 2021,21(9): 7253-7269.
- [43] Ren J, Guo F F, Xie S D. Diagnosing ozone-NOx-VOC sensitivity and revealing cau ses of ozone increases in China based on 2013~2021 satellite retrievals [J]. Atmosph eric Chemistry and Physics, 2022, 22(22):15035-15047.
- [44] Chen Y P, Wang M Y, Yao Y J, et al. Research on the ozone formation sensitivity i ndicator 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.
- [45] Song, H.; Zhao, W.; Yang, X.; Hou, W.; Chen, L.; Ma, P. Ozone Sensitivity Analysis and Ozone Formation Regimes Division in the Beijing-Tianjin-Hebei Region Based on Satellite Remote Sensing Data. Atmosphere 2023, 14, 1637. https://doi.org/10.3390/

atmos14111637

- [46] 罗乐, 董张森, 徐起翔, 王克, 苏方成, 张瑞芹. 河南省不同前体物控制区臭氧背景浓度特征与驱动因素[J]. 中国环境科学.
- [47] 聂滕,李璇,王雪松,邵敏,张远航.北京市夏季臭氧前体物控制区的分布特征[J].北京大学学报(自然科学版),2014,50 (03):557-564.
- [48] TROPOMI ATBD of thetotal and troposphericNO2 data products
- [49] De Smedt, I. et al. Algorithm theoretical baseline for formaldehyde retrievals from S5P TROPOMI and from the QA4ECV project Atmos. Meas. Tech., 11, 2395-2426 (201 8) doi:10.5194/amt-11-2395-2018
- [50] Yang jie, Huang Xin*. 30 m annual land cover and its dynamics in China from 1990 to 2019.Earth System Sciene Data, 2021, Accepted for publication.
- [51] 刘文清.《环境光学与技术》[M].合肥:安徽科学技术出版社, 2020.12.

附件 VOCs 高值区实地核查验证结果

1 VOCs 高值区实地核查准确率

2022 年以来,根据推送的高值区线索,实地核查问题企业准确率在70%以上(表1)。

序号	年份	推送高值区数量	完成检查企业数	存在问题企业数	问题率
1	2022	7847	11376	8994	79.06%
2	2023	6060	1842	1578	85.67%
3	2024	7250	488	363	74.39%
4	2025	3690	412	328	79.61%

表 1 2022 年以来 VOCs 高值区实地核查准确率统计表

2 2024 年实地核查验证示例

2024 年监督帮扶中利用多源卫星遥感数据锁定污染物排放重点区域,采用时间序列、空间异常等统计方法识别污染高值区,并结合地图 POI 和高清影像研判高值区信度,优化污染高值区遥感识别技术方法,为 108 个帮扶城市筛选 HCHO、 NO_2 、 O_3 、 SO_2 、CO、 $PM_{2.5}$ 、 PM_{10} 等 7 类高值区。

2024年夏季共推送高值区任务 807个,完成现场检查 768个,其中问题企业 482个,剔除未生产、长期停产等因素,问题企业比例 80.60%。其中现场帮扶阶段共完成现场检查任务 651个,发现问题企业 412个,剔除未生产、长期停产等因素,问题企业比例 86.01%。远程帮扶阶段查出问题企业 70个,问题企业比例 60.34%。

(一) VOCs 高值区核查示例

在 HCHO 污染物高值区内分布有 X 省 X 市塑料制品产业集群,现场检查发现治污设施不正常运行。现场检查共发现问题企业 12 家,均为塑料制品厂。其中 6 家出现光催化处理设施不正常使用或损坏问题,4 家出现活性炭未进行更换问题(图 1、图 2)。

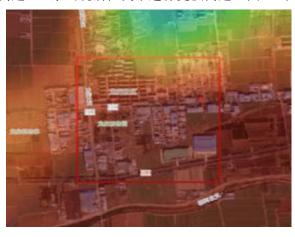


图 1 VOCs 高值区污染物浓度遥感监测分布图



图 2 光催化处理设施不正常运行(左)活性炭长期未更换(右)

(二)NO2高值区核查示例

在 NO_2 污染物高值区内分布有 X 省 X 市铝业制品产业集群,现场检查发现治污设施不正常运行、数据造假。现场检查共发现问题企业 13 家,均为铝业制品厂。其中 7 家出现管道破损、设有冷风口等废气未处理排放问题,4 家出现监控数据造假问题(图 3 、图 4)。



图 3 NO₂高值区污染物浓度遥感监测分布图



图 4 废气收集、排放管道破损(左)监控数据造假(右)