

附件 2

环境空气臭氧污染来源解析技术指南（试行）

（征求意见稿）

第一章 总 则

1.1 编制目的

为坚决打赢蓝天保卫战，增强环境空气臭氧污染防治工作的科学性、针对性和有效性，根据《中华人民共和国环境保护法》《中华人民共和国大气污染防治法》《环境空气质量标准》（GB 3095-2012）及其他相关法律、法规、标准、文件的要求，编制《环境空气臭氧来源解析技术指南（试行）》（以下简称指南）。

1.2 适用范围

本指南规定了开展环境空气臭氧污染来源解析工作的主要技术方法、技术流程、工作内容、技术要求、质量管理等内容。

本指南适用于指导城市及区域开展环境空气臭氧污染成因分析与来源解析工作。

1.3 编制依据

《中华人民共和国环境保护法》

《中华人民共和国大气污染防治法》

《国务院办公厅转发环境保护部等部门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》（国办发〔2010〕33号）

《“十三五”生态环境保护规划》（国发〔2016〕65号）

《“十三五”挥发性有机物污染防治工作方案》（环大气〔2017〕121号）

《大气挥发性有机物源排放清单编制技术指南》（试行）（环境保护部公告2014年第55号）

《2018年重点地区环境空气挥发性有机物监测方案》（环办监测函〔2017〕2024号）

《环境空气臭氧前体有机物手工监测技术要求（试行）》（环办监测函〔2018〕240号）

GB 3095-2012 环境空气质量标准

HJ 644-2013 环境空气 挥发性有机物的测定 吸附管采样-热脱附/气相色谱-质谱法

HJ 645-2013 环境空气 挥发性卤代烃的测定 活性炭吸附-二硫化碳解吸-气相色谱法

HJ 654-2013 环境空气气态污染物（SO₂、NO₂、O₃、CO）连续自动监测系统技术要求及检测方法

HJ 664-2013 环境空气质量监测点位布设技术规范（试行）

HJ 683-2014 环境空气 醛、酮类化合物的测定 高效液相色谱法

HJ 759-2015 环境空气 挥发性有机物的测定 罐采样/气相色谱-质谱法

当上述文件和标准被修订时，使用其最新版本。

1.4 术语与定义

下列术语与定义适用于本指南。

环境空气臭氧污染：人为源排放的臭氧前体物参与对流层大气光化学反应而造成的近地面臭氧（O₃）浓度增高的现象。

臭氧前体物：指大气环境中参与大气光化学反应生成臭氧的空气污染物，主要包括氮氧化物（NO_x）、挥发性有机物（VOCs）和一氧化碳（CO）。

臭氧前体物排放源：向大气环境中排放臭氧前体物的排放源，包括天然源和人为源。

环境受体：受到大气污染物污染的环境空气统称环境受体，简称受体。

臭氧来源解析：通过观测和数学模型方法定性或定量识别城市与区域环境空气中臭氧污染的成因与来源。

基于空气质量模型的来源解析方法（以下简称模型法）：以不同尺度数值模式方法定量描述臭氧前体物从排放到生成臭氧所经历的大气物理化学过程，定量估算不同地区和不同类别污染源排放对环境空气中臭氧及其前体物形成贡献的技术方法。

基于观测的臭氧成因与 VOCs 来源解析方法（以下简称观测法）：根据臭氧与前体物观测数据，采用数据分析和模型方法判断臭氧形成的敏感性，并利用受体模型定量解析各 VOCs 污染源类对臭氧及其前体物形成贡献的技术方法。

1.5 指导原则

(1) 科学实用原则：在环境空气臭氧污染成因机理和来源解析方法科学研究的基础上，增强臭氧污染来源解析工作的规范性、可操作性。

(2) 因地制宜原则：各地根据自身污染特征、基本条件和污染防治目标，结合社会发展水平与技术可行性，科学选择适合当地实际的臭氧污染来源解析技术方法。

(3) 标本兼顾原则：既要满足城市与区域环境空气质量达标的长期需求，又要服务于臭氧重污染过程中臭氧污染来源的快速识别、预警与应急控制措施制定。

(4) 协同控制原则：各地根据当地臭氧及细颗粒物（PM_{2.5}）的控制重点，科学评估不同控制措施的协同效应和相互影响。

1.6 组织编制单位

本指南由生态环境部科技标准司组织，中国环境科学研究院、北京大学、中国科学院合肥物质科学研究院、暨南大学、华北电力大学、北京市环境保护监测中心、北京林业大学等单位起草编制。

第二章 环境空气臭氧污染来源解析工作目标与技术方法

2.1 工作目标

环境空气臭氧污染来源解析的工作目标包括：

(1) 阐明环境空气臭氧污染状况与成因，判断长期和重污染时段的污染物排放以及气象因素、大气化学反应、沉降等大气物理化学过程对臭氧污染的影响。

(2) 明确本地与外地传输对臭氧污染形成的贡献，判断环境空气臭氧污染形成的NO_x与VOCs敏感性以及敏感性的时空变化规律。

(3) 明确本地和外地需要重点控制的NO_x污染源；确认对臭氧污染形成贡献显著的优势VOCs组分，定量解析各VOCs排放源类对VOCs的

贡献与分担率，指明需要控制的 VOCs 重点排放区域和重点控制污染源。

2.2 技术方法

环境空气臭氧污染来源解析技术路线主要包括臭氧及其前体物污染特征分析、臭氧前体物排放清单编制、来源解析技术方法选择、解析结果分析评估等，具体见附图 1。

本指南规定了基于模型和观测的环境空气臭氧污染成因与来源解析技术方法，两种方法的适用性及必备条件见表 1，各地应根据自身条件合理选择。

表 1 环境空气臭氧来源解析技术方法的适用性

技术方法	适用性	必备条件
模型法	定量识别臭氧污染的本地和区域来源，可预测；确定臭氧形成的敏感性；定量解析本地和区域臭氧前体物各类排放源对臭氧生成的贡献，定量给出贡献值与分担率。	建立与空气质量模型要求相适应的高时间和空间分辨率的排放源清单、气象要素场。
观测法	识别臭氧污染的本地和区域来源；确定臭氧与其前体物之间的敏感性；识别对臭氧贡献显著的优势 VOCs 组分和 VOCs 主要排放源；定量解析各 VOCs 排放源类对臭氧生成潜势的贡献值与分担率。	臭氧前体物监测技术和 VOCs 来源解析技术要求高。需要开展臭氧及其前体物，以及所有含活性氧化合物 (NO _y)、PAN、H ₂ O ₂ 、HONO、HNO ₃ 等化学指示剂的同步观测。监测数据质量保证与质量控制需要满足高水平要求。

第三章 臭氧及其前体物污染特征分析

3.1 工作流程

收集与臭氧及其前体物污染特征研究相关的数据资料，进行城市与区域环境空气臭氧污染特征及其与气象因素的关联性分析，明确环境空气臭氧污染状况与特征。

3.2 城市与区域臭氧及其前体物污染状况与特征分析

3.2.1 城市与区域臭氧污染状况与特征分析

收集城市或区域内空气质量监测站点 SO_2 、 CO 、 NO_2 、 PM_{10} 、 $\text{PM}_{2.5}$ 、 O_3 长期监测数据。统计分析城市与区域环境空气臭氧污染浓度水平与超标情况（包括超标倍数、超标时段、超标时长等）、时间与空间变化特征、以及臭氧污染对环境空气质量的影响。分析臭氧及其前体物的浓度时间序列与其他常规空气污染物的关联性，及不同站点发生臭氧污染的时间差异，判断臭氧污染发生的区域性。

3.2.2 城市与区域臭氧及其前体物时空特征分析

在上述数据资料的基础上，收集光化学组分观测数据及相关科研观测站点的臭氧及 NO 、 NO_2 、 VOCs 等前体物观测数据，并开展必要的典型站点和区域背景站补充观测工作。

基于不同监测站点的臭氧及 NO_x 、 VOCs 浓度数据，分析区域环境受体中的臭氧和前体物浓度分布；结合气象条件，分析城市与区域环境受体中臭氧及其前体物浓度空间变化及时间变化情况，分析臭氧及其前体物浓度空间分布特征；采用后向轨迹分析、主因子分析法等方法，分析区域环境受体中臭氧的区域传输和本地生成贡献。

3.3 城市与区域臭氧污染气象因素分析

3.3.1 长期臭氧污染气象特征分析

收集城市与区域代表性站点 3 年地面气象数据及气候资料，分析近三年气象条件与多年平均（如近 10 年）气象条件平均状态差异，包括平均风速、平均温度、降水日、云量（多云天）、季风爆发时间及春、夏连续降水（如梅雨）持续时间状况（与平均年差异）、天气

系统活动情况、台风及热带风暴出现次数，总结近三年臭氧污染发生情况的差异与气象条件变化的关系。

3.3.2 臭氧污染过程气象条件分析

收集区域代表性站点臭氧重污染期间不低于每天4次气象资料，包括风速、风向、环境温度、气压、湿度、降水、云量及辐射数据（太阳辐射、紫外辐射）等，如有必要，应开展有关气象因素的观测。

针对臭氧污染过程，收集一天4次地面、850hpa、700hpa、500hpa气象场，气压场、温度场、湿度场和降水分布等数据，分析臭氧污染过程的天气形势及演变。

收集相应时段的探空数据和大气边界层观测资料，如有必要，应开展补充观测，获得至少一个代表性点位不同高度大气边界层气象参数的观测，包括气压、风速、风向、温度、湿度，以获得不同时间段边界层高度，虚位温垂直廓线、莫宁-奥布霍夫长度、摩擦速度等大气边界层参数。

分析臭氧污染期间风向、风速、温度、降水量、云量的时间变化特征和大气边界层变化特征。分析海陆风、山谷风等局地环流影响；分析可能出现的夜间急流。

根据臭氧监测资料和历史气象资料，统计臭氧污染日的气象条件，总结臭氧污染发生的典型气象条件，分析不同的气象因素对环境中臭氧生成的影响，为臭氧污染来源解析提供背景资料。

有条件的地区可采用中尺度气象模拟，分析臭氧重污染形成的天气形势和污染气象特征。

第四章 模型法

4.1 工作流程

利用空气质量模型对臭氧污染过程进行模拟，需要准备模型使用的污染源排放清单（包括人为源和天然源），以及通过中尺度气象模型模拟得出的气象参数，技术方法流程见附图 2。

4.2 空气质量模型选择

利用三维网格化区域空气质量模型进行来源解析，模型应包含平流输送、扩散、化学反应机理、清除等影响臭氧生成的大气物理化学过程，此类模型也应能够开展臭氧源解析和敏感性分析。

4.3 模型源清单

模型源清单应包括 SO_2 、 NO_x 、 CO 、 NH_3 、 BC 、 OC 、 PM_{10} 、 $\text{PM}_{2.5}$ 、分物种 VOCs 等组分，时间分辨率不低于 1 小时，能够反映各类排放源季、月、日、小时变化规律，并根据空气质量模型使用的化学机理对清单中的 VOCs 物种进行分配。

4.4 空气质量模型的模拟计算

根据选定的空气质量模型要求，输入相应分辨率的地形、下垫面特征及环境参数。模拟网格水平空间分辨率：研究全国范围内臭氧，网格分辨率不低于 $45\text{km} \times 45\text{km}$ ；研究省际间跨区域或省级范围，推荐使用多层嵌套模拟，水平嵌套网格内层分辨率不低于 $15\text{km} \times 15\text{km}$ ；研究市级及以下范围，推荐使用多层嵌套模拟，水平嵌套网格内层分辨率不低于 $5\text{km} \times 5\text{km}$ ；模拟时间分辨率不低于 1 小时。利用中尺度气象模式为空气质量模型提供三维气象要素场（水平方向

嵌套网格分辨率与污染源排放清单一致，垂直方向边界层内分层不少于 10 层)。利用大气污染物环境背景值或实际监测资料作为模型运算初始条件，模型外层网格污染物浓度模拟结果作为内层网格的边界条件。收集模拟区域内各类监测数据进行模型结果校验，模拟小时浓度需要与模拟网格相对应的监测点位小时浓度监测值进行比对，一般来说，比对结果相关系数不低于 0.6，偏差和误差在 0.5 之内。

4.5 空气质量模型的模拟输出

4.5.1 区域本地贡献分析

通过模型可以分析本地生成和外部传输臭氧前体物与臭氧的占比，获得各地区各类污染源排放对受体点环境臭氧浓度的贡献。源区的划分：在模拟区域内划分不同的区域（比如以行政单位区县、市、省）作为示踪源区；源类的划分：将模式使用的排放清单细分不同的污染源类型（比如：工业、民用、交通等）进行示踪；受体点位选择：选择分析不同源区或源类贡献影响的网格作为受体点（一般选择监测点位所在的模型网格）。

4.5.2 敏感性分析

敏感性分析可以识别出排放、传输、扩散及化学反应等模型输入参数对臭氧生成影响的敏感性，从而得到控制臭氧生成的关键因子。通常情况下，利用敏感性分析计算出臭氧浓度与前体物排放间的敏感因子，评估臭氧对前体物排放源削减的有效性：如果 dO_3/dNO_x 为正值且大于 $dO_3/dVOCs$ ，说明该地区是 NO_x 控制区，减排 NO_x 更有利于降低臭氧的浓度；反之，如果 dO_3/dNO_x 为负值，说明该地区是 $VOCs$

控制区，需要通过减排 VOCs 排放来降低该地区的臭氧浓度；当得到环境中臭氧浓度与其生成前体物排放之间的定量关系后，还可以以此为依据开展减排效果评估。

4.5.3 减排情景分析

空气质量模型可以通过输入人为削减前体物 NO_x 或 VOCs 的排放量的排放清单，经过模拟得出不同前体物排放量下的臭氧浓度，并与基础排放情形下的臭氧模拟浓度进行对比，从而评估不同削减情景对环境中臭氧控制的效果。

第五章 观测法

5.1 工作流程

基于观测的臭氧污染成因与 VOCs 来源解析方法主要包含臭氧及其前体物监测、臭氧及其前体物污染特征分析、臭氧生成敏感性分析和 VOCs 来源解析等，具体见附图 3。

5.2 臭氧及其前体物观测

结合城市与区域环境空气臭氧污染情况、研究目标及环境管理需求等制定规范可行的臭氧及其前体物监测工作方案，明确观测项目及方法、点位布设、监测时间及频次、质量保证与质量控制要求等，并做好组织实施计划与保障。

5.2.1 观测项目及方法

观测项目为影响环境空气臭氧浓度的各种因子，主要包括 O_3 、 NO/NO_2 、VOCs，以及气象因子（风速、风向、环境温度、气压、湿度、降

水等)与太阳辐射强度,有条件的城市或者区域可增加测量NO_y、PAN、H₂O₂、HONO、HNO₃等。VOCs进行分物种监测,以C₂-C₁₂的56种非甲烷总烃(PAMS)为目标化合物,各地也可根据地区污染排放特点及技术能力,增加萜烯类、α/β蒎烯、醛酮类、含氮有机物、卤代烃等VOCs物种。

O₃、NO/NO₂等常规气态污染物根据《环境空气气态污染物(SO₂、NO₂、O₃、CO)连续自动监测系统技术要求及检测方法》(HJ 654-2013)进行连续自动监测。

VOCs观测方法可根据条件选择离线分析方法和在线分析方法。离线方法适合于多点位网格化布点,了解臭氧前体物VOCs的空间分布。在线方法适用于了解臭氧前体物VOCs的变化特征、污染过程变化和长期变化趋势。各地可根据需要及条件选择VOCs的观测方法。

VOCs离线观测方法参考《环境空气挥发性有机物的测定罐采样-气相色谱-质谱法》(HJ 759-2015)、《空气醛、酮类化合物的测定高效液相色谱法》(HJ 683-2014)、《环境空气挥发性有机物的测定吸附管采样-热脱附-气相色谱-质谱法》(HJ 644-2013)、《环境空气挥发性卤代烃的测定活性炭吸附-二硫化碳解吸-气相色谱法》(HJ 645-2013)及美国EPA T014/15等。采样过程和分析过程严格执行质量保证/质量控制措施。

VOCs在线观测应选择具有预浓缩处理的气相色谱法或气相色谱-质谱法,观测过程严格执行质量保证/质量控制措施。

NO_y、PAN、H₂O₂、HONO、HNO₃和太阳辐射强度等一般采用连续自动监测,严格按照仪器相应标准操作规程进行。

5.2.2 点位布设

依据《环境空气质量监测点位布设技术规范(试行)》(HJ 664-2013)的相关要求布设受体观测点,观测点的选择应根据环境条件和污染状况进

行合理布设，根据设备情况和研究需求可选择多观测点或特定地点的观测。按照臭氧污染的空间分布规律通常可设置 4 类观测点，包含上风向和背景特征监测点、臭氧前体物浓度排放高值监测点、臭氧浓度高值监测点与下风向监测点，形成全面监控臭氧分布及变化的监测网。在条件不具备时，至少要布设臭氧前体物排放高值和臭氧浓度高值监测点位。同时综合考虑功能分布、人口密度、臭氧前体物污染排放类型及强度等，优先选择国家或省市级环境空气质量监测点。

5.2.3 监测时间及频次

环境受体的观测时间及频次依据 O_3 及其前体物浓度、前体物排放的季节性变化特征及气象因素确定，在臭氧典型污染过程进行加密观测。VOCs 手工监测的数据量要符合 VOCs 受体模型来源解析的要求。

O_3 、 NO/NO_2 及 VOCs 连续自动观测时间分辨率不低于 1h。VOCs 的离线观测时间应具有代表性，覆盖典型臭氧污染高发季，例如春夏或夏秋季。观测方案可参考《2018 年重点地区环境空气挥发性有机物监测方案》（环办监测函〔2017〕2024 号），也可以根据具体的观测需求确定。一般臭氧污染季节的采样时间不少于一个污染过程（7-10 天），VOCs 离线观测（如罐采样）可选择瞬时采样和限流阀累积采样。单个 VOCs 样品采集通常要考虑光化学反应的影响（如选择排放高、光化学反应弱、光化学反应强的时段采样）、传输和背景浓度的影响（如根据气象因子、昼夜混合层高度等，以及气团光化学龄等确定采样时间）；VOCs 样品采样时长可根据当地臭氧污染情况而定，可以选择在 6h 及以内；臭氧重污染过程加密采样期间，可加大采样频次，单个 VOCs 样品采样时长可选择在 3h 及以内。

5.3 基于观测的臭氧敏感性分析方法

基于观测的臭氧生成敏感性分析方法包括相对增量反应性方法、经验

动力学模拟方法和光化学指示剂比值法：

5.3.1 相对增量反应性 (Relative Incremental Reactivity, RIR)

将受体点观测到的臭氧及其前体物浓度、气象参数、光学参数等输入基于观测的模型 (Observation-based Model, OBM) 模拟大气化学过程，利用模型计算各前体物的 RIR，通过 RIR 的正负取值判断各前体物对臭氧生成的影响。

5.3.2 经验动力学模拟方法 (EKMA 曲线方法)

通过绘制 EKMA 曲线，判断不同 VOCs 和 NO_x 浓度下臭氧生成情况，分析臭氧生成的敏感性。在 EKMA 曲线上确定 VOCs 和 NO_x 的脊线比值，与观测中获得的比例进行比较。如观测的 VOCs/NO_x 比值大于脊线比值，可判断 O₃ 生成过程受到 NO_x 控制；如观测的 VOCs/NO_x 比值小于脊线比值，可判断 O₃ 生成过程受到 VOCs 控制。

5.3.3 光化学指示剂比值

将光化学反应中某些特定的产物或中间体的比值 (如 H₂O₂/HNO₃ 比值、H₂O₂/NO_z 比值 (NO_z=NO_y-NO_x)、基于卫星遥感的 HCHO/NO₂ 比值等) 与臭氧生成敏感性相关联，通过对这些产物或中间体开展外场观测来判断臭氧生成机制。

5.4 VOCs 来源分析

针对臭氧污染 VOCs 前体物的控制，应根据环境受体 VOCs 观测结果开展臭氧生成关键 VOCs 前体物识别、VOCs 来源解析工作，结合 VOCs 重点污染识别，确定重点控制 VOCs 物种与污染源。

5.4.1 臭氧生成关键 VOCs 前体物识别

通过臭氧生成潜势 (Ozone Formation Potentials, OFP) 来表征不同 VOCs 组分生成臭氧的潜能。OFP 的计算采用某 VOCs 物种的大气环境浓

度与其最大增量反应活性的乘积：

$$OFP_i = [VOCs]_i \times MIR_i$$

其中， OFP_i 表示化合物 i 的 O_3 生成贡献， $[VOCs]_i$ 表示观测到的物种 i 的浓度； MIR_i 表示在不同的 VOC/ NO_x 的比值下单位 VOC 物种 i 浓度的增加最大可产生的 O_3 浓度，单位为 $g O_3/g VOCs$ 。不同化合物在不同的 VOC/ NO_x 的比值下 MIR 值可通过查阅相关文献获取。

通过对比不同 VOCs 组分的 OFP ，选取 OFP 较大的 VOCs 化合物为关键 VOCs 前体物。

5.4.2 基于受体模型的 VOCs 来源解析技术方法

受体模型法是基于受体点 VOCs 组分观测数据和各排放源的 VOCs 化学组成信息（源成份谱）来定量解析排放源行业贡献率的方法，其不依赖详细的排放源强信息和气象资料。受体模型主要包括化学质量平衡模型（CMB）和因子分析类模型（PMF、PCA/MLR、UNMIX、ME2等）。国内外广泛应用的是正交矩阵因子分析（PMF）模型和 CMB 模型。

（1）正交矩阵因子分析（PMF）模型

根据长时间序列的受体化学组分数据集进行 VOCs 来源解析，不需要源类样品采集，提取的因子是数学意义的指标，通过源类特征的化学组成信息进一步识别实际的 VOCs 源类。可选用的模型有 U. S. EPA PMF5.0 等。

选择环境空气浓度较大、观测数据相对完善、来源指示性强的 VOCs 物种（原则上不少于 20 种 VOCs 物种）开展 VOCs 源解析工作。PMF 分析过程中，有效受体样品数量符合 PMF 运行要求。

所有有效分析的化学成分纳入模型进行拟合；低于分析方法检出限的化学成分，采用 1/2 检出限作为输入参数。

对于光化学污染特征明显的地区，应考虑光化学反应对 PMF 解析的影响，建议依据活性对拟合组分进行筛选或对 VOCs 消耗进行校正后结合源模型技术方法进行来源解析。

(2) 化学质量平衡模型 (CMB) 模型

CMB 是源解析受体模型中的一种，基本原理是质量守恒，即环境空气中的 VOCs 各组分浓度即为每一类源排放的 VOCs 含量与其贡献的乘积的线性加和。可选用的 CMB 模型软件有 CMB8.2。

根据源识别的结果或该地区的 VOCs 排放清单，选择参与拟合的源类；各源类的源谱优先选择当地采集的源类样品分析数据；对于光化学污染特征明显的城市，应考虑光化学反应对 VOCs 来源解析的影响，建议依据活性对拟合组分进行筛选或对 VOCs 消耗进行校正后结合源模型技术方法进行解析。

根据 VOCs 源类化学组成特征选择参与拟合的化学成分，所选拟合计算的化学成分数量不少于源类数量；拟合结果必须满足模型要求的各项诊断指标。

5.4.3 基于敏感前体物来源解析的 O₃ 来源解析技术方法

通过 OFP 来表征不同 VOCs 排放源排放的臭氧前体物生成臭氧的潜能，进而分析不同排放源对环境空气中 O₃ 的潜在贡献，确定重点 VOCs 控制源。具体计算方法见 6.4 节。

第六章 臭氧前体物源排放清单要求与特征分析

6.1 人为源前体物源排放清单编制要求

臭氧前体物源排放清单应包括 NO_x 和 VOCs 排放源清单。前体物源排放清单编制应尽量通过实地调研和测试获得当地主要行业的活动水平和本地化排放因子，排放清单应包含多化学组分（SO₂、NO_x、CO、NH₃、BC、OC、PM₁₀、PM_{2.5}、总 VOCs 等），鼓励有条件的地方在大气 VOCs 源排放清单基础上建立分物种的大气 VOCs 源排放清单。

(1) 活动水平数据选取原则

优先采用实地调查的方式获取。无法开展活动水平调查时，可采用环境统计和污染源普查数据中获取相应信息。调研数据包括统计数据、行业报告、政府公报等公开发布数据；估算数据包括表观消费量、时间序列法、线性回归法计算得到数据等。

(2) 排放因子数据选取原则

优先本土实测并验证可信的排放系数以及国家制定的排放标准限值；无本土数据或排放标准限值的情况下参考国外参考文献或排放系数数据库数据，需要考虑与我国技术水平是否吻合，如不吻合，参考《工业污染源产排污系数手册》提供的我国相应部门工艺、规模等信息对其进行修正；以上方法均不可采用的情况下应用模型估算或物料衡算法。NO/NO₂ 和 VOCs 的分物种清单或源谱可参考成熟的源排放成分谱或开展实测。

(3) 对于有可能提供详细的分物种源排放清单的城市，建议根据空气质量模式气相化学机理，将清单中的 VOCs 污染物物种按模式

反应机理分配到真实存在的单一物种或根据化学键或分子结构组合的模式机理代表物种（如 NO、NO₂）以及活性较强 VOCs 的物种（如甲醛、乙醛、丙酮、甲醇、甲酸、乙酸、乙二醛、甲基乙二醛、联乙酰、苯酚、甲酚、硝基苯酚、芳香醛、甲基丙烯醛、甲基乙烯基酮、甲烷、乙烯、异戊二烯、乙炔、苯等）。

6.2 天然源 VOCs 排放清单

采用模型计算的方法进行天然源 VOCs 排放量的估算，可以选择目前国际上较通用的 MEGAN（Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature）、BEIS（Biogenic Emission Estimates）、G93 模型。在数据的选择上采用符合当地实际情况，且时间尺度上尽可能相近的数据。天然源 VOCs 排放给出排放量的逐时变化，并反映排放的季节变化特征。

植被类型数据采用二类调查资料结合遥感影像解译来获取；排放因子的获取方法包括实测法和光温模型估算法。排放因子获取方法优先采用实测法，如无法得到实测数据，则采用光温模型估算法。实测法利用某一树种排放 VOCs 浓度差和植物枝叶生物量干重来计算该树种 VOCs 排放因子。具体方法包括动态顶空法、静态箱法、叶片尺度法等，其中动态顶空法是目前广泛应用的测量活体植物排放 VOCs 的方法。

6.3 源排放清单的评估与验证

排放清单的不确定性评估方法分为定性评估、半定量评估和定量评估三类，本指南应用定量评估方法识别排放清单不确定性的关键源。

6.4 前体物排放特征分析

根据 VOCs 来源解析的结果，进一步评估臭氧来源。根据每一个来源因子对各 VOCs 组分浓度的贡献及该组分的最大增量反应活性（MIR），计算该来源的臭氧生成潜势，进而计算各类源对臭氧生成潜势的贡献。

$$OFP_i = \sum_j [VOC]_{i,j} \times MIR_j$$

OFP_i 即第 i 个源的臭氧生成潜势， $[VOC]_{i,j}$ 是第 i 个源中物种 j 的浓度， MIR_j 是物种 j 的 MIR。

第七章 源解析结果表述

环境空气臭氧污染来源解析工作可以明确城市与区域臭氧污染成因与前体物控制重点，其结果表述要求如下：

（1）阐明臭氧浓度的时空分布规律，结合源强变化和主要污染源分布情况分析臭氧污染的时空演变特征。

（2）分析高浓度臭氧形成的主要大气物理化学过程，估算典型臭氧污染过程中各主要臭氧生成前体物排放源对环境空气臭氧的贡献值，诊断典型臭氧污染过程的来源贡献。

（3）研判臭氧与其前体物排放的敏感性，诊断臭氧污染成因，用于判断臭氧污染前体物控制方向。

（4）估算本地和外地不同类别前体物污染源对臭氧环境浓度的贡献，明确臭氧及其前体物本地贡献与外地贡献（占比），包括区域

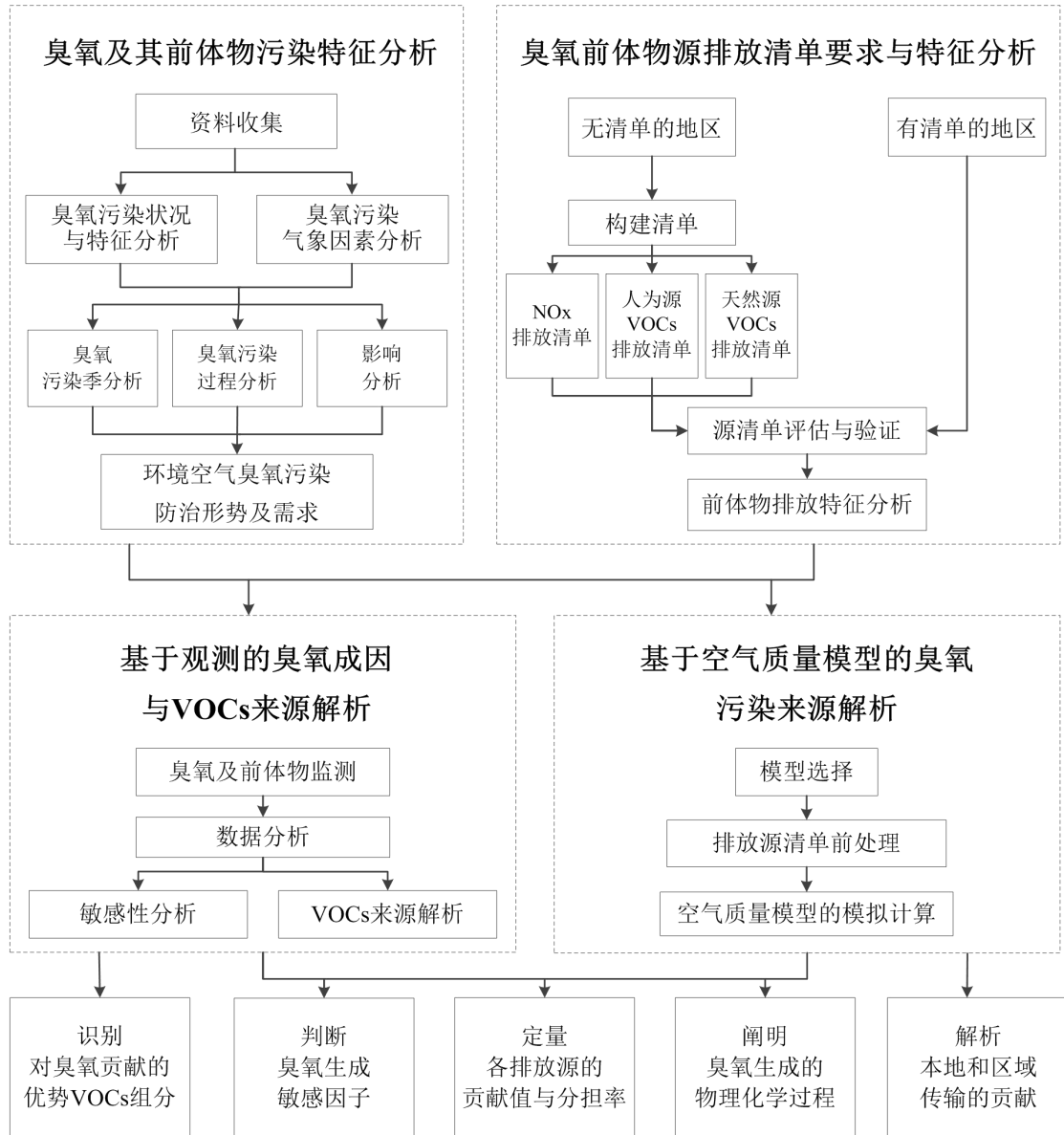
内各城市的相互贡献，以及城市内各区县的相互贡献。

(5) 确定环境空气中 NO_x 重点控制污染源与 NO_x 排放源类的控制目标。

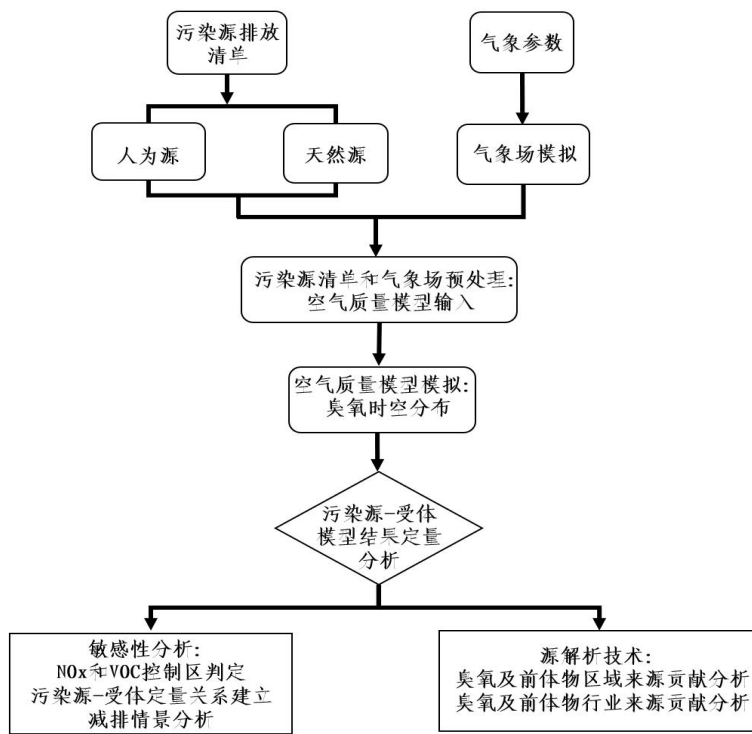
(6) 阐明环境空气中不同种类 VOCs 的浓度水平与时空分布特性，确定 VOCs 重点控制物种、重点控制行业与重点控制源，明确 VOCs 排放源类的控制目标。

附录

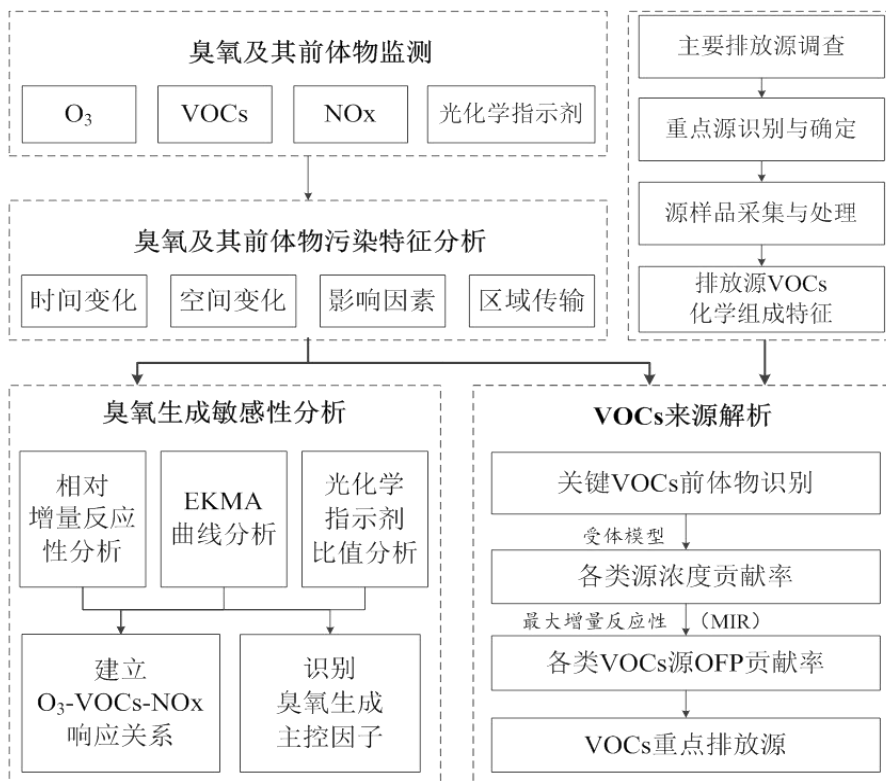
一、环境空气臭氧来源解析技术路线及各方法技术流程



附图 1 环境空气臭氧污染来源解析技术路线图



附图2 基于空气质量模型来源解析技术流程



附图3 基于观测数据的臭氧来源解析方法的技术流程

二、环境空气臭氧污染来源解析技术报告编写大纲(参考)

第一章 绪论

- 1.1 工作背景与工作过程
- 1.2 研究目标
- 1.3 研究区域
- 1.4 研究内容
- 1.5 技术路线

第二章 研究区域社会经济发展与大气污染物排放分析

- 2.1 研究区域自然条件及气象特征
- 2.2 研究区域社会经济发展情况
- 2.3 研究区域能源消费变化情况
- 2.4 大气污染物排放特征分析
- 2.5 小结

第三章 研究区域大气污染特征分析

- 3.1 环境空气质量现状
- 3.2 研究时段空气污染物浓度水平与变化特征
- 3.3 研究时段臭氧污染特征分析
- 3.4 小结

第四章 环境空气臭氧来源解析技术方法介绍

- 4.1 源解析技术方法的选择
- 4.2 模型原理
- 4.3 综合来源解析方法

第五章 臭氧前体物排放清单构建

- 5.1 氮氧化物源排放特征分析
- 5.2 氮氧化物重点源识别
- 5.3 人为源挥发性有机化合物源排放特征分析
- 5.4 天然源挥发性有机化合物排放总量估算
- 5.5 不同类别挥发性有机化合物排放源对臭氧的贡献
- 5.6 小结

第六章 挥发性有机物观测与组分分析

- 6.1 挥发性有机物污染源样品的采集
- 6.2 环境受体挥发性有机物样品的采集
- 6.3 挥发性有机物样品的组分分析

第七章 基于观测的臭氧来源解析

- 7.1 臭氧形成敏感性分析
- 7.2 臭氧区域传输贡献分析
- 7.3 氮氧化物重点污染源分析
- 7.4 受体挥发性有机化合物特征分析
- 7.5 受体挥发性有机化合物来源及对臭氧形成贡献分析
- 7.6 挥发性有机化合物重点污染源分析
- 7.7 小结

第八章 基于空气质量模型的臭氧来源解析

- 8.1 臭氧形成敏感性分析
- 8.2 臭氧及其前体物区域来源分析
- 8.3 臭氧及其前体物本地行业来源分析
- 8.4 小结

第九章 环境空气臭氧来源解析结果

9.1 不同季节来源解析结果

9.2 综合源解析结果

9.3 环境空气臭氧污染的主要来源分析

9.4 小结

第十章 研究区域环境空气臭氧成因分析及防治对策

三、相关基础数据

VOCs 物种最大增量反应活性 (MIR) 值* (单位: g O₃/g VOC)

序号	中文名	MIR	序号	中文名	MIR
1	乙烯	8.88	30	3-甲基己烷	1.50
2	乙炔	0.95	31	2,2,4-三甲基戊烷	1.20
3	乙烷	0.26	32	正庚烷	0.97
4	丙烯	11.57	33	甲基环己烷	1.56
5	丙烷	0.46	34	2,3,4-三甲基戊烷	0.95
6	异丁烷	1.18	35	2-甲基庚烷	0.97
7	正丁烯	9.57	36	甲苯	3.93
8	正丁烷	1.08	37	3-甲基庚烷	1.12
9	顺-2-丁烯	14.26	38	正辛烷	0.80
10	反-2-丁烯	15.20	39	对二甲苯	5.78
11	异戊烷	1.36	40	乙苯	2.96
12	1-戊烯	7.07	41	间二甲苯	9.73
13	正戊烷	1.22	42	正壬烷	0.68
14	反-2-戊烯	10.47	43	苯乙烯	1.66
15	2-甲基 1,3-丁二烯	10.48	44	邻二甲苯	7.58
16	顺-2-戊烯	10.28	45	异丙苯	2.45
17	2,2-二甲基丁烷	1.11	46	正丙苯	1.96

序号	中文名	MIR	序号	中文名	MIR
18	环戊烷	2.24	47	1-乙基-2-甲基苯	5.54
19	2,3-二甲基丁烷	0.90	48	1-乙基-3-甲基苯	7.39
20	2-甲基戊烷	1.40	49	1,3,5-三甲苯	11.75
21	3-甲基戊烷	1.69	50	对乙基甲苯	4.39
22	1-己烯	5.35	51	癸烷	0.59
23	正己烷	1.14	52	1,2,4-三甲苯	8.83
24	2,4-二甲基戊烷	1.46	53	1,2,3-三甲苯	11.94
25	甲基环戊烷	2.05	54	1,3-二乙基苯	7.08
26	苯	0.69	55	对二乙苯	5.43
27	环己烷	1.14	56	十一烷	0.52
28	2-甲基己烷	1.09	57	十二烷	0.47
29	2,3-二甲基戊烷	1.25			

*备注：数据来自于 Carter W P L. REACTIVITY ESTIMATES FOR SELECTED CONSUMER PRODUCT COMPOUNDS[J]. 2008.