



上海理工大学

UNIVERSITY OF SHANGHAI FOR SCIENCE AND TECHNOLOGY

UNIVERSITY OF SHANGHAI FOR SCIENCE AND TECHNOLOGY

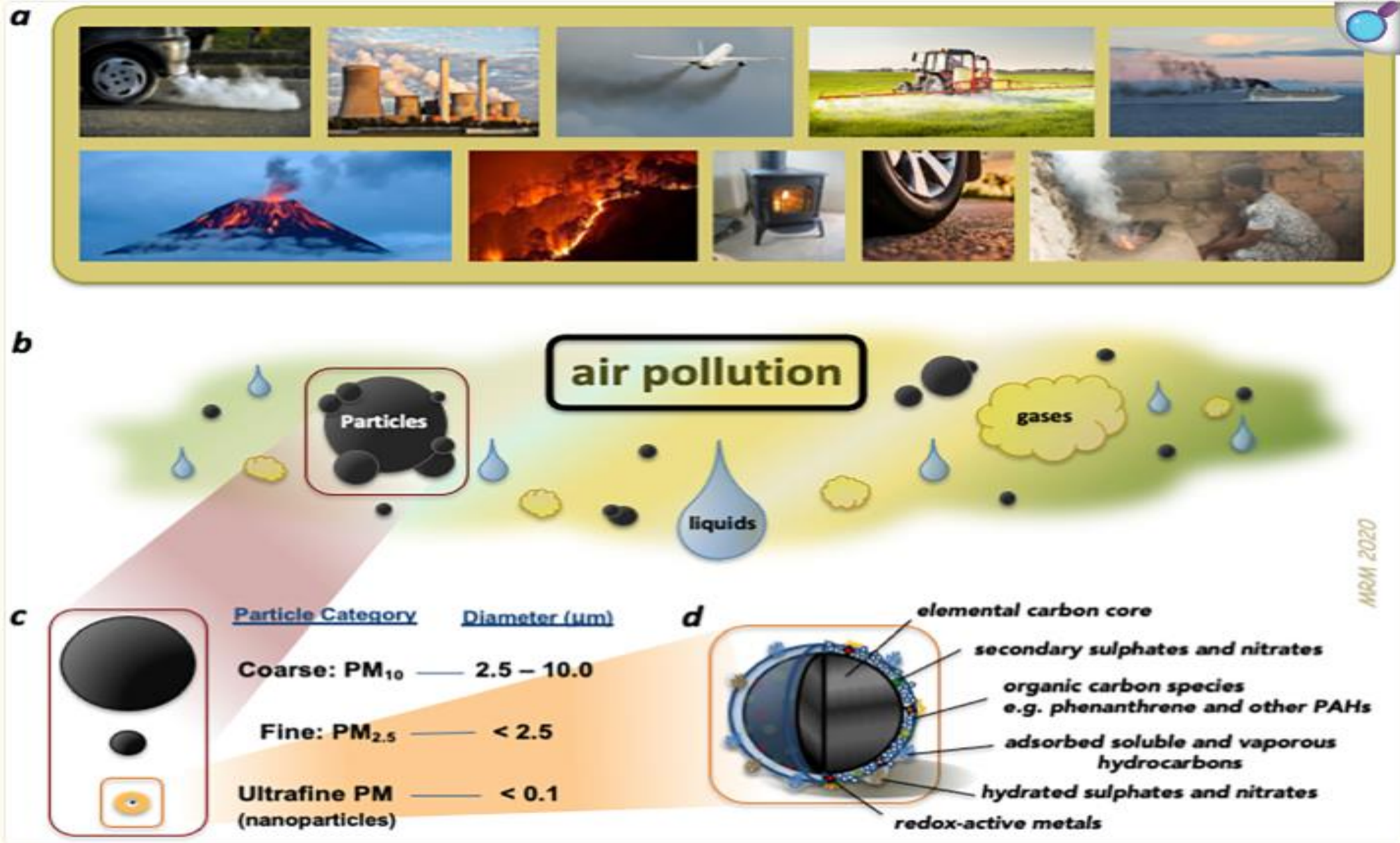
机器学习辅助大气污染及暴露估算

张宏亮

上海理工大学 环境与建筑学院



大气污染

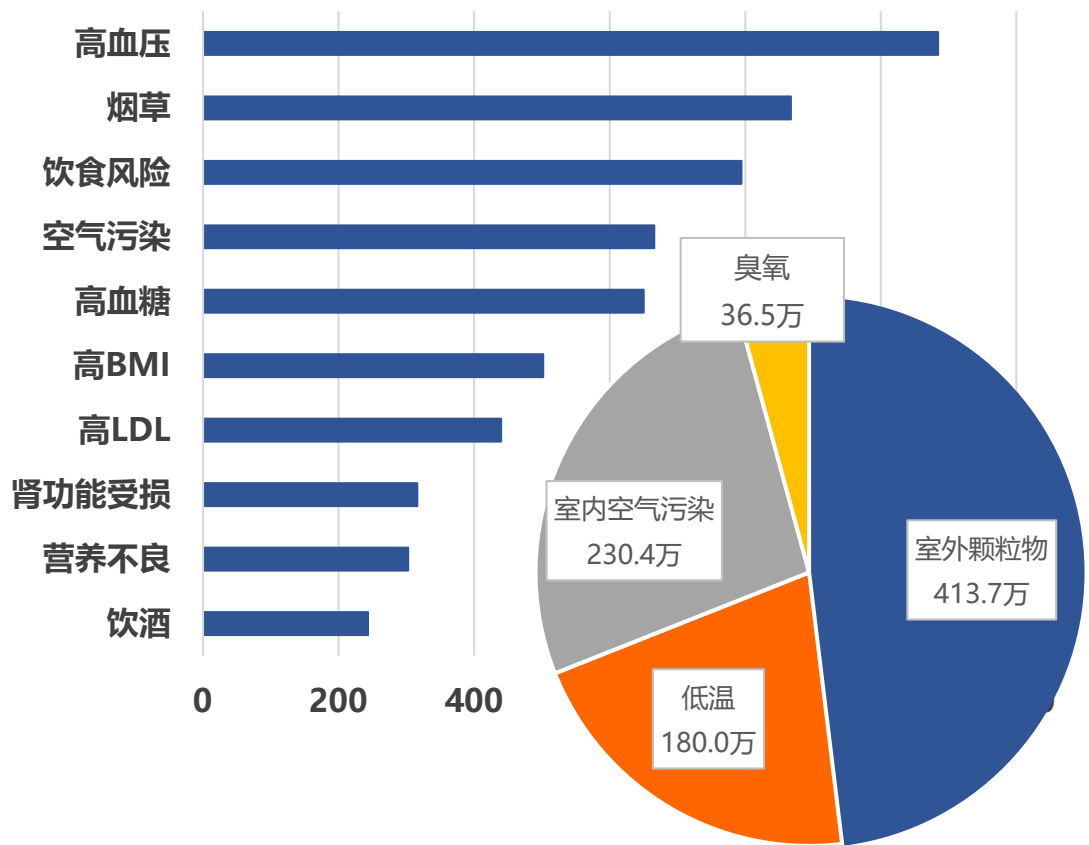




大气污染健康影响

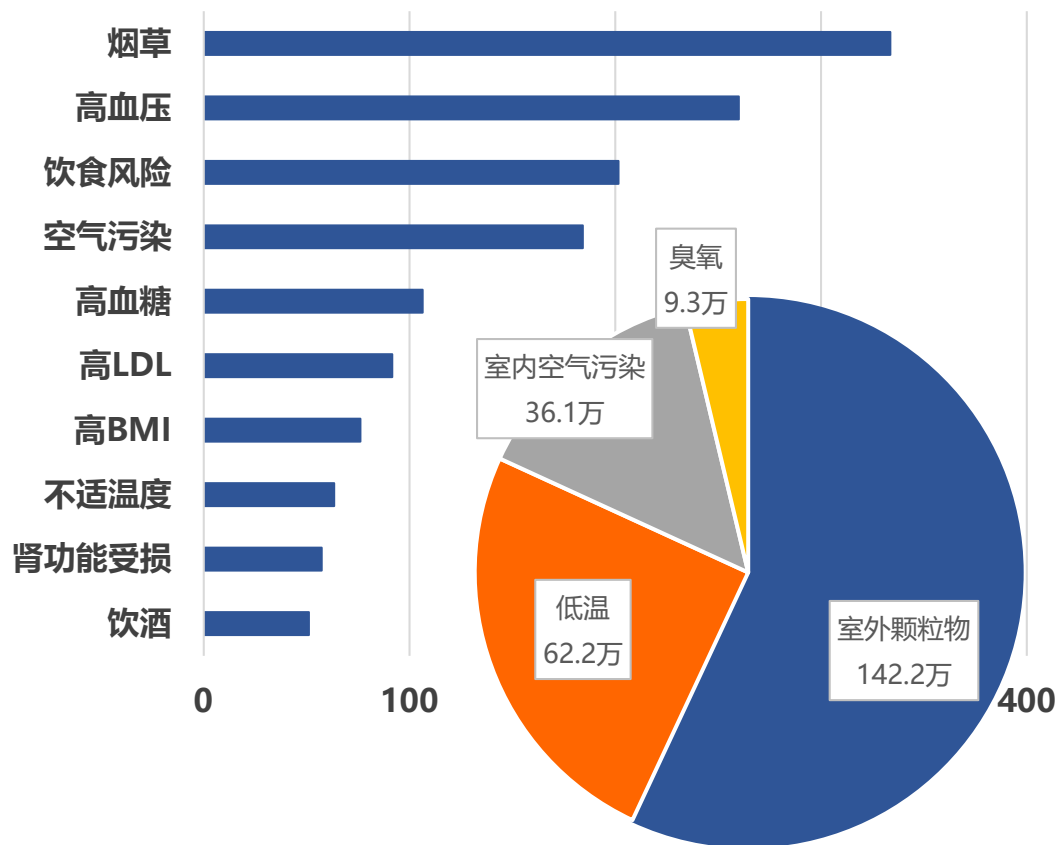
2019 全球前十致死危险因素

归因死亡人数 (万)



2019 我国前十致死危险因素

归因死亡人数 (万)



GBD, Lancet, 2020



暴露评估是研究关键

研究路径

- 空气污染监测与建模
 - (监测站 / 遥感 / 数值模式 / AI)
- 污染物暴露评估
 - (核心环节)
- 人群健康数据整合
 - (住院 / 队列 / 临床检测)
- 统计与因果分析
 - (时间序列 / C-R / 贝叶斯)
- 结果解读与政策建议
- (高风险人群 / 干预措施)

暴露评估

- 高精度：
 - 空间 < 1 km, 时间 ≤ 1 小时
- 多污染物联合：
 - PM_{2.5}、O₃、NO₂、SO₂ 等
- 个体化暴露：
 - 结合活动轨迹与可穿戴设备
- 室内外整合：
 - 考虑生活/工作环境差异
- 减少误差：
 - 提升健康风险估计可靠性
- 人工智能 + 遥感 + 传感器革新暴露评估方法



暴露估算方法

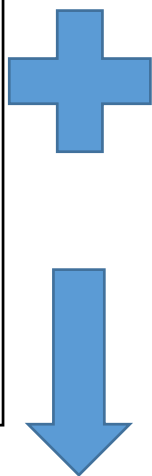
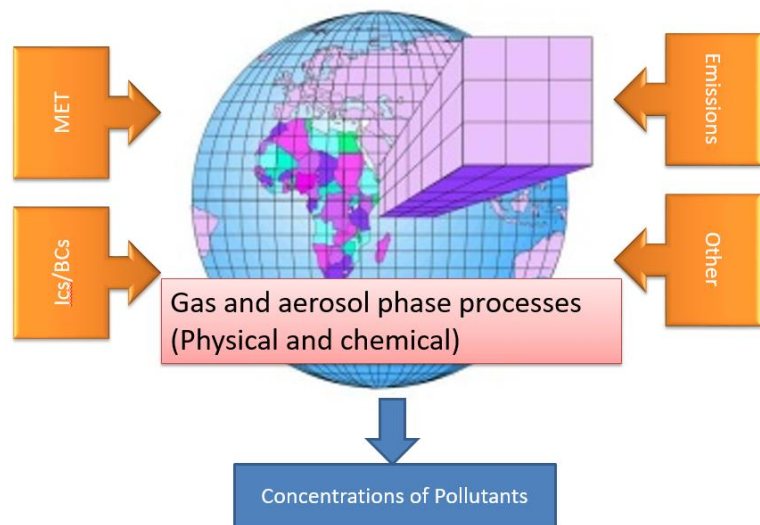
方法	优点	局限性
固定监测站	数据连续、长期记录，易获取	空间覆盖有限，不能反映个体差异
个体可穿戴监测	精细到个人，反映真实暴露	样本量小，成本高，设备依从性问题
卫星遥感反演	覆盖范围广，可跨区域比较	垂直分辨率不足，受云和气溶胶干扰
化学传输模型	多污染物同时模拟，可探究来源	依赖排放清单，计算量大，模型不确定性
人工智能	融合多源数据，精度可高，适应性强	需高质量训练数据，黑箱问题，外推性有限



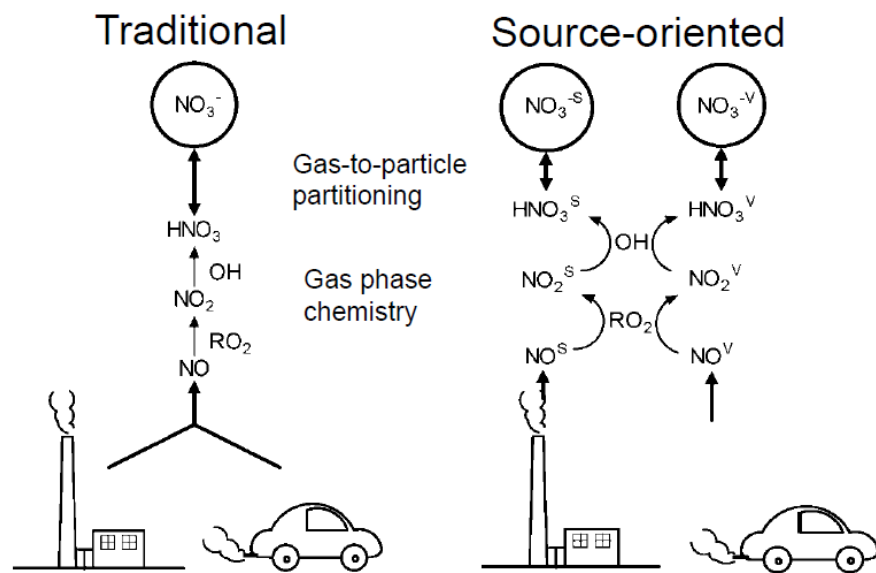
化学传输模型

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \underbrace{-\frac{\partial(u_i C)}{\partial x_i}}_{\text{Advection}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_i \frac{\partial C}{\partial x_i} \right)}_{\text{Turbulent Diffusion}} + \underbrace{R}_{\text{Reaction}} + \underbrace{S}_{\text{Emission}} - \underbrace{L}_{\text{Removal}} \quad i=1,2,3$$

传统空气质量模型



反应示踪物技术

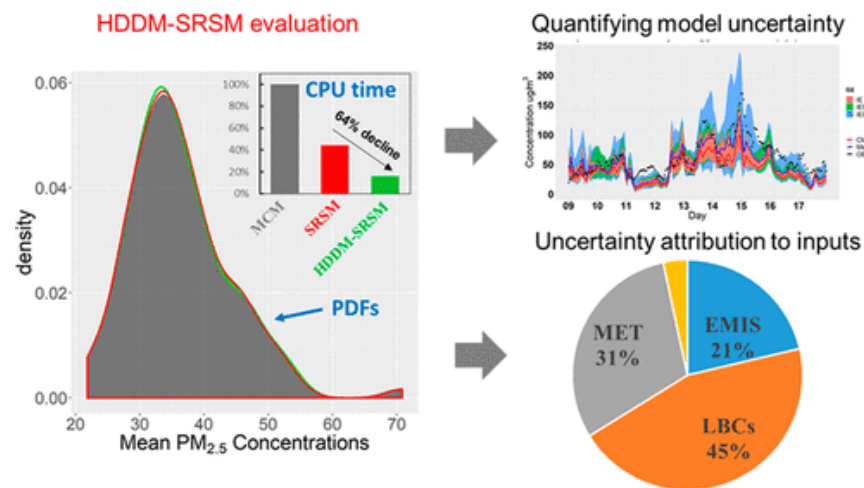


不同来源对污染物的贡献：时空分布，一次污染物，二次污染物、区域贡献、行业贡献



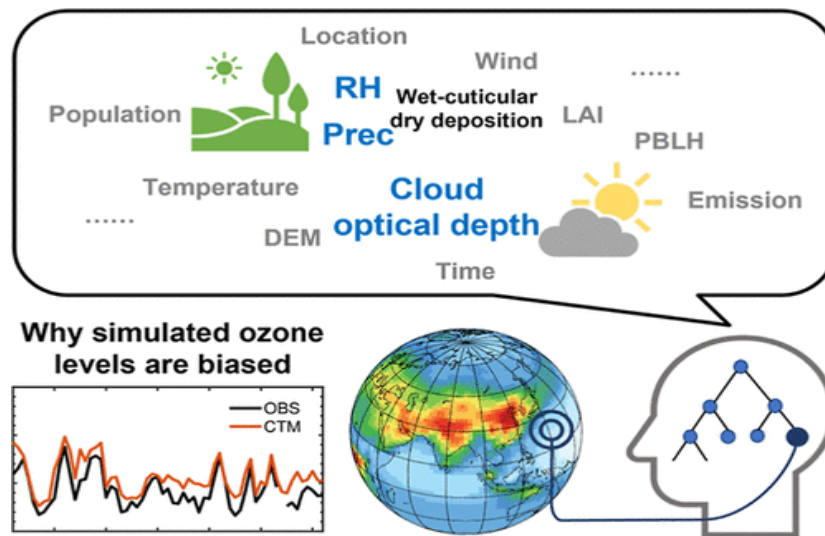
化学传输模型

- 模拟过程：不清楚的化学过程、简化的过程
- 模拟输入：气象场、排放清单、初始和边界条件
- 模拟结果：观测对比
- 模拟精度：全球-区域-城市
- 模拟需求：计算资源需求大



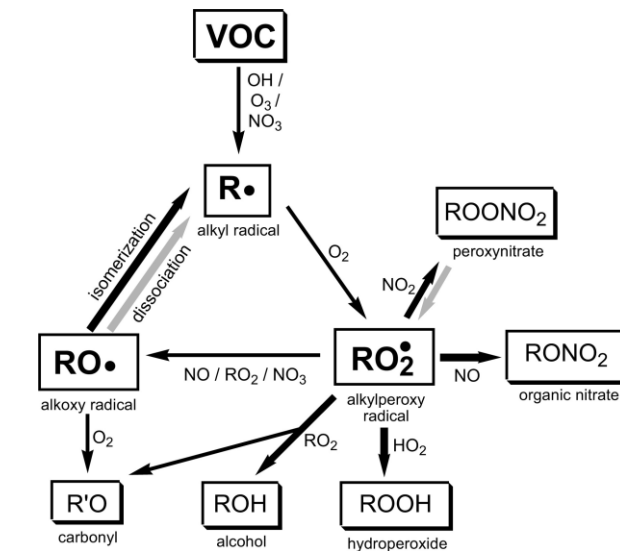
气象，排放和横向边界条件对 $PM_{2.5}$ 模拟偏差的贡献

Environ. Sci. Technol. 2019, 53, 6, 3110–3118



湿度，云光学厚度对 O_3 模拟偏差大

Environ. Sci. Technol. 2021, 55, 8, 4483–4493



一般挥发性有机化合物大气氧化的简化机制

[doi:10.1016/j.atmosenv.2008.01.003](https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2008.01.003)

所有模型都是不准确的，一些模型是有用的



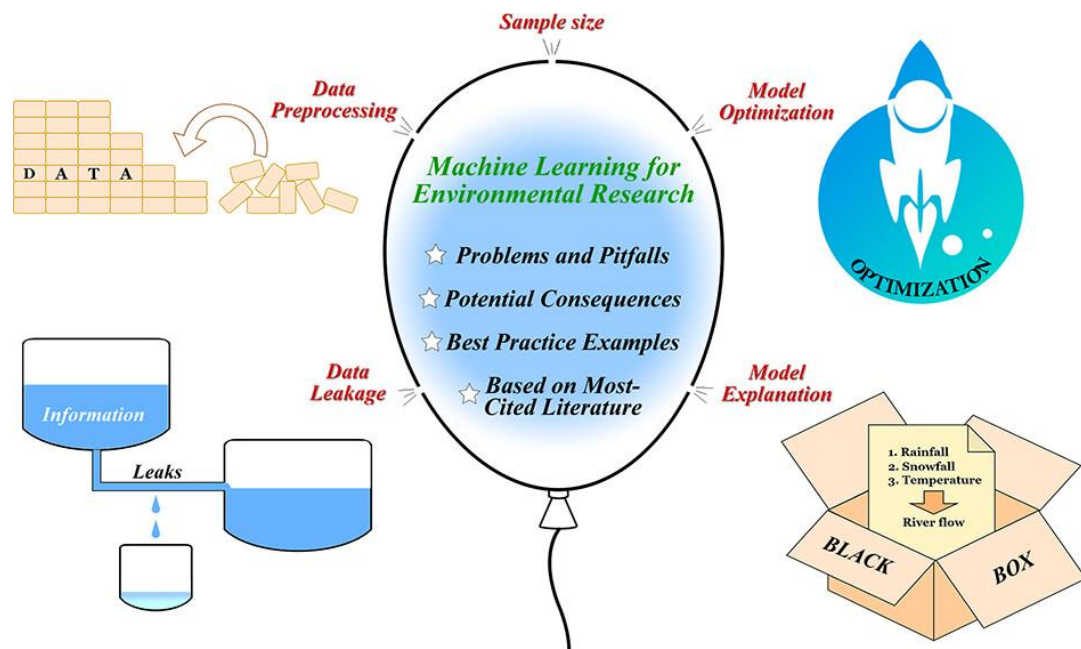
人工智能、大数据、机器学习？

AI4Science

➤ 人工智能并不新鲜

➤ 大数据+人工智能时代

- 模拟，卫星，地表观测，实验室测量数据大量增加（气象再分析数据量级达PB级以上）
- 机器学习和深度学习算法快速发展
- GPU等算力的大幅提升



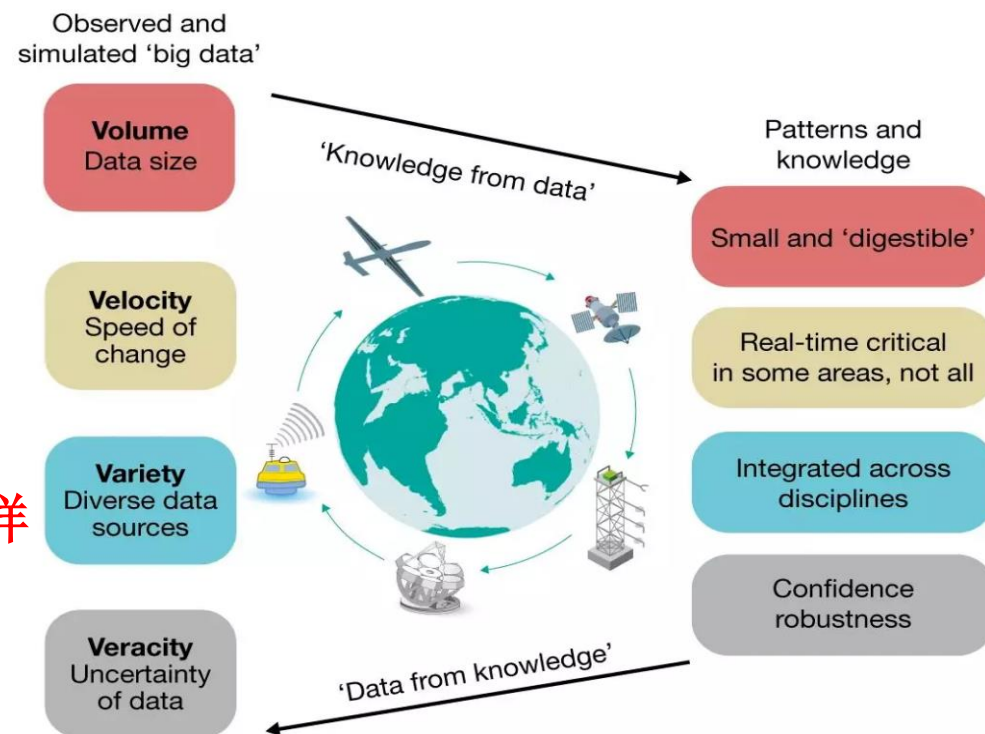
<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.est.3c00026>

体积大

更新快

数据源多样

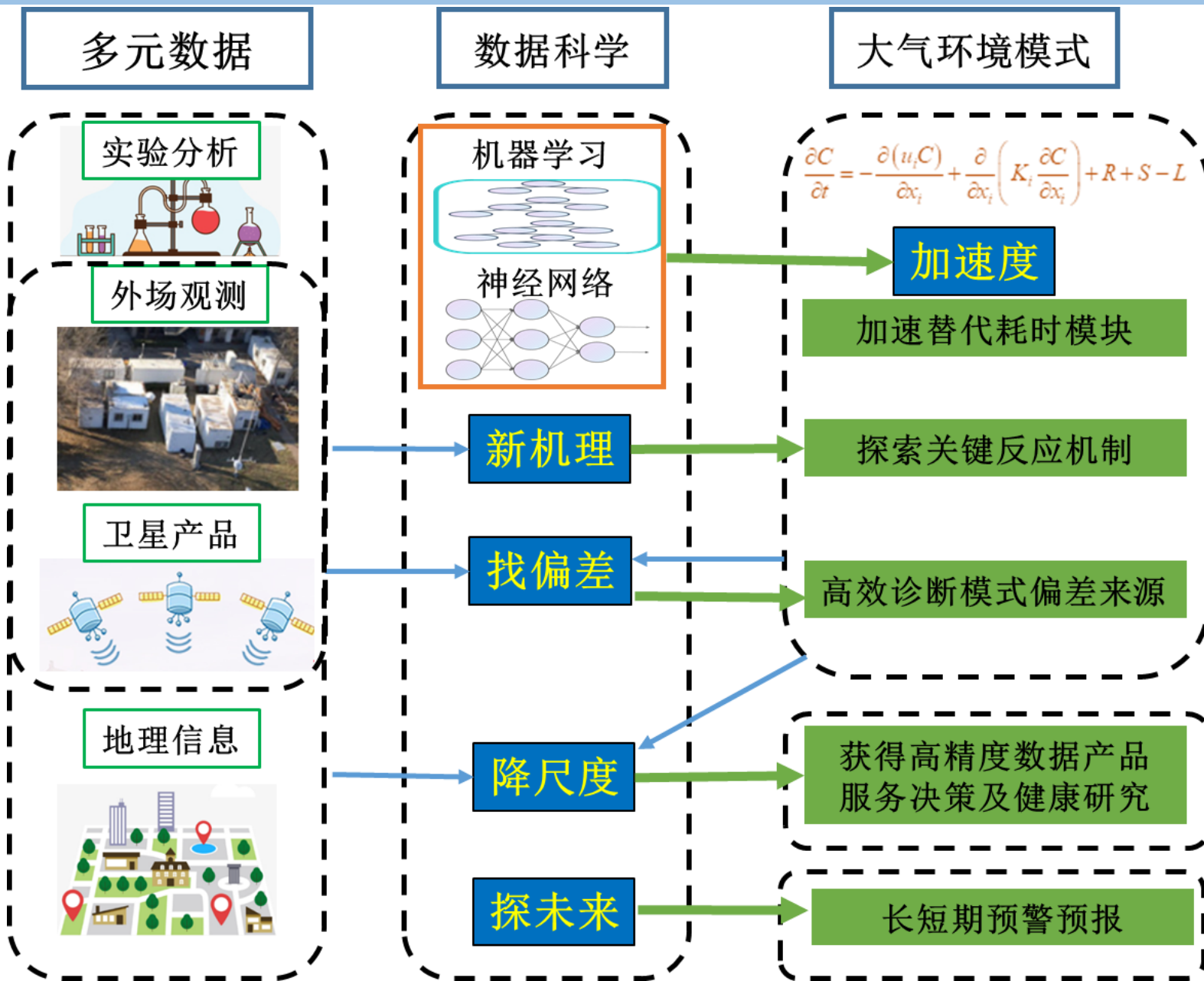
不确定性



Markus R, **Nature** 2019



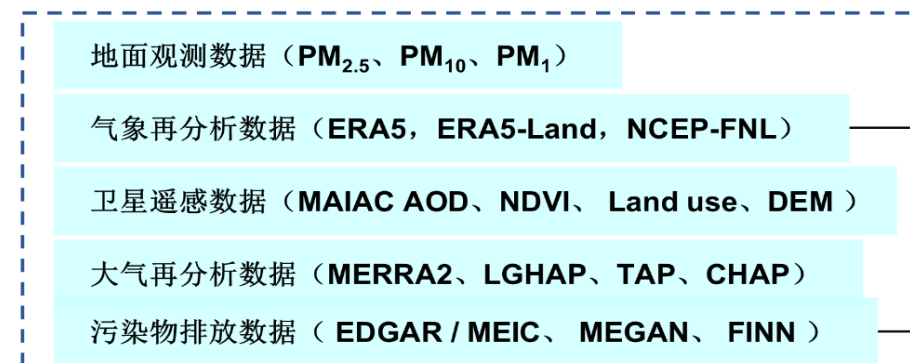
人工智能辅助数值模拟



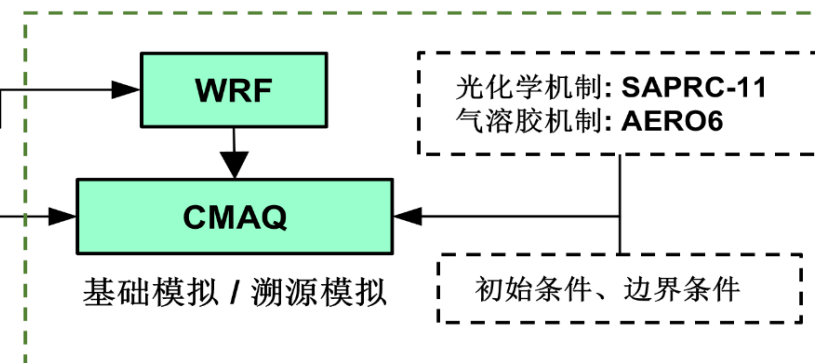


系列尝试（王帅）

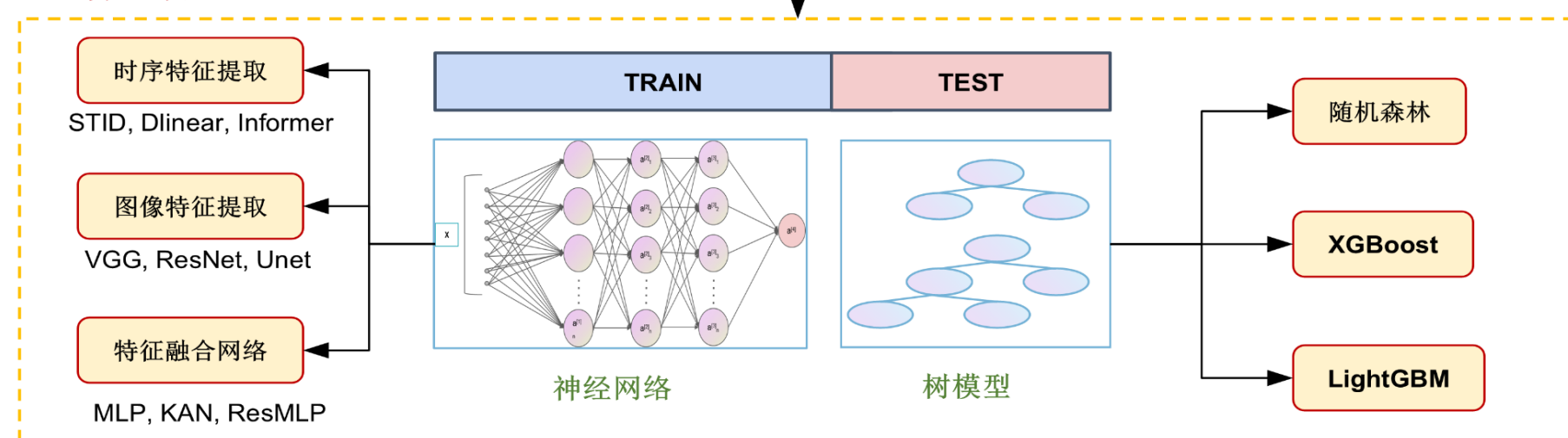
1. 多源数据集



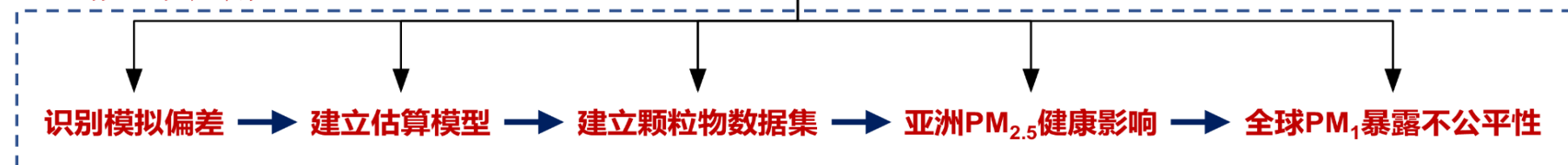
2. 数值模式模拟



3. AI算法改进

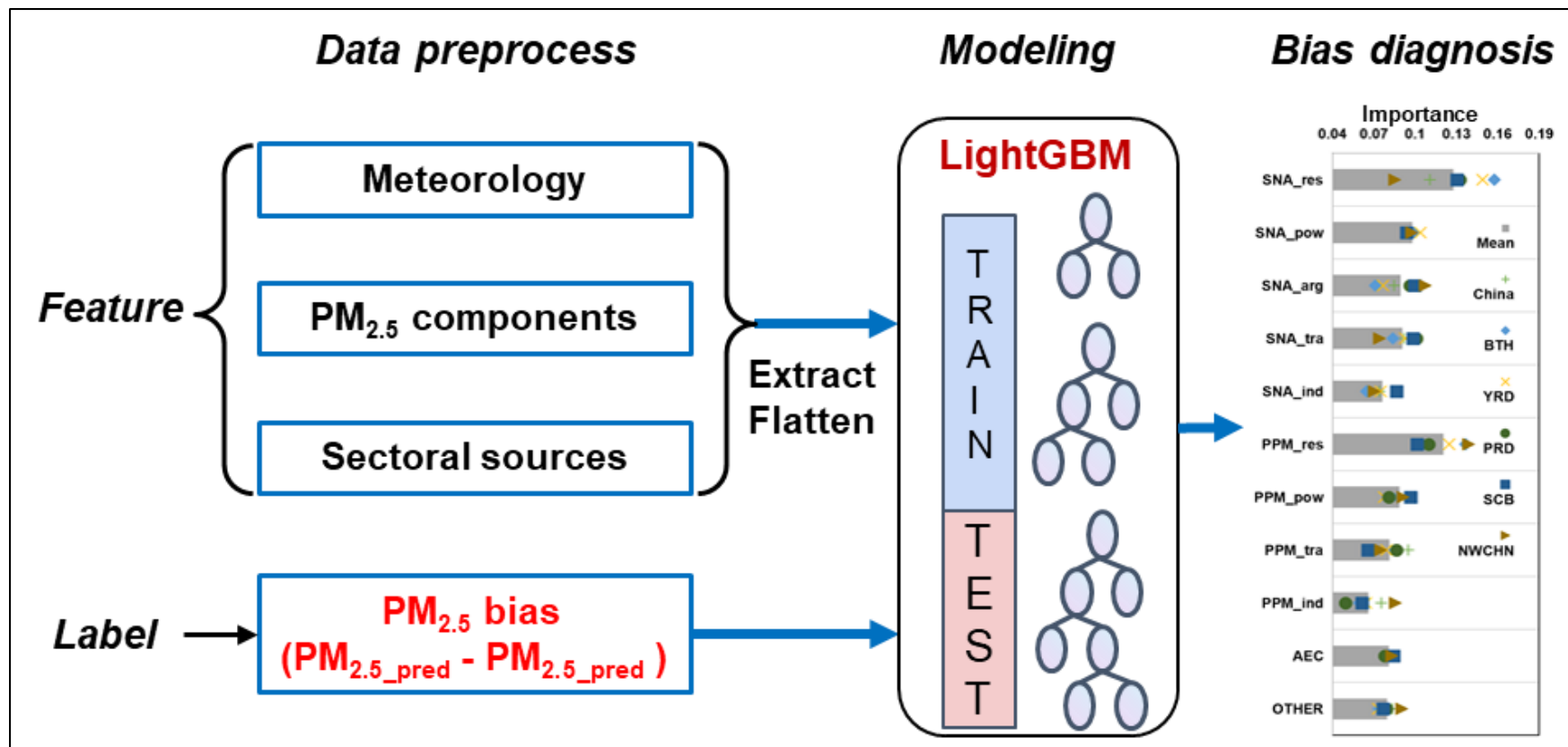


4. AI推理和应用

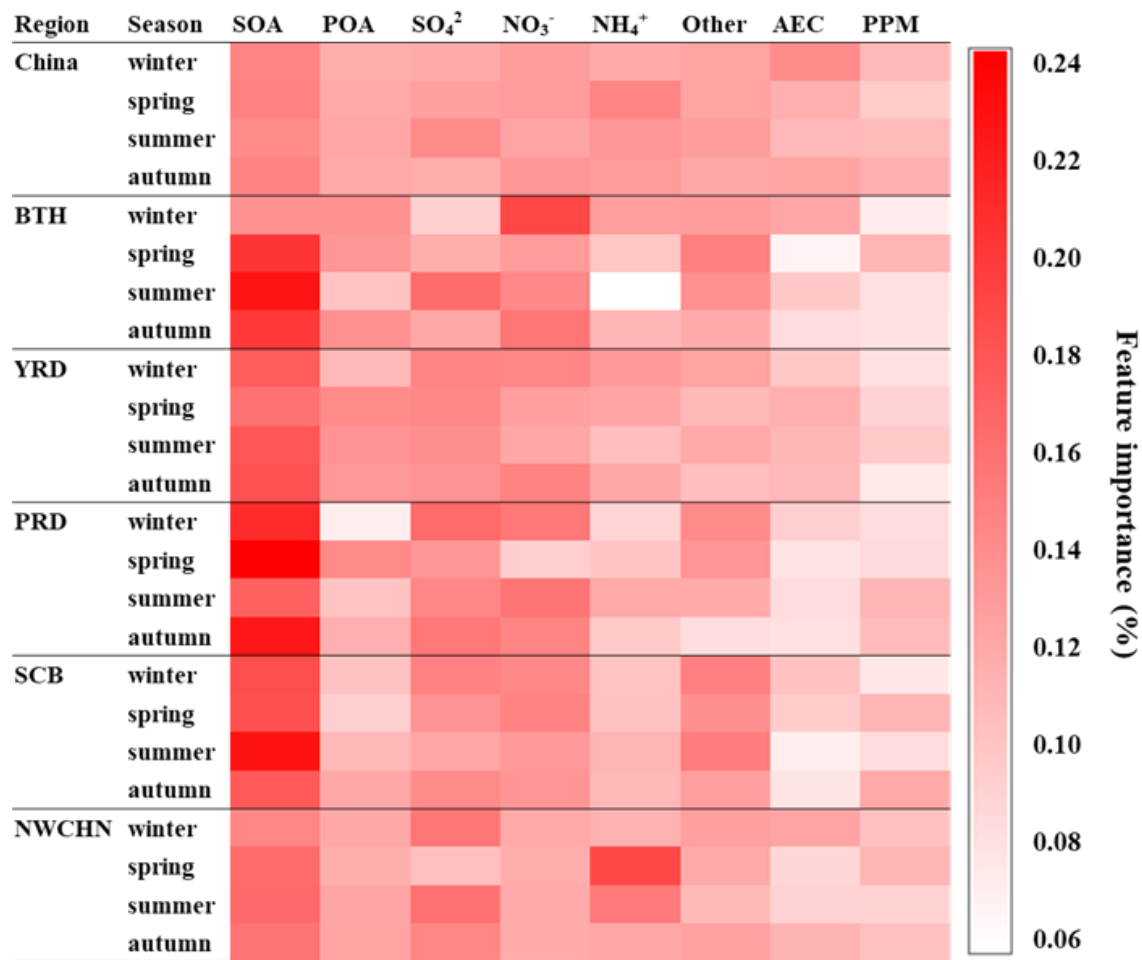




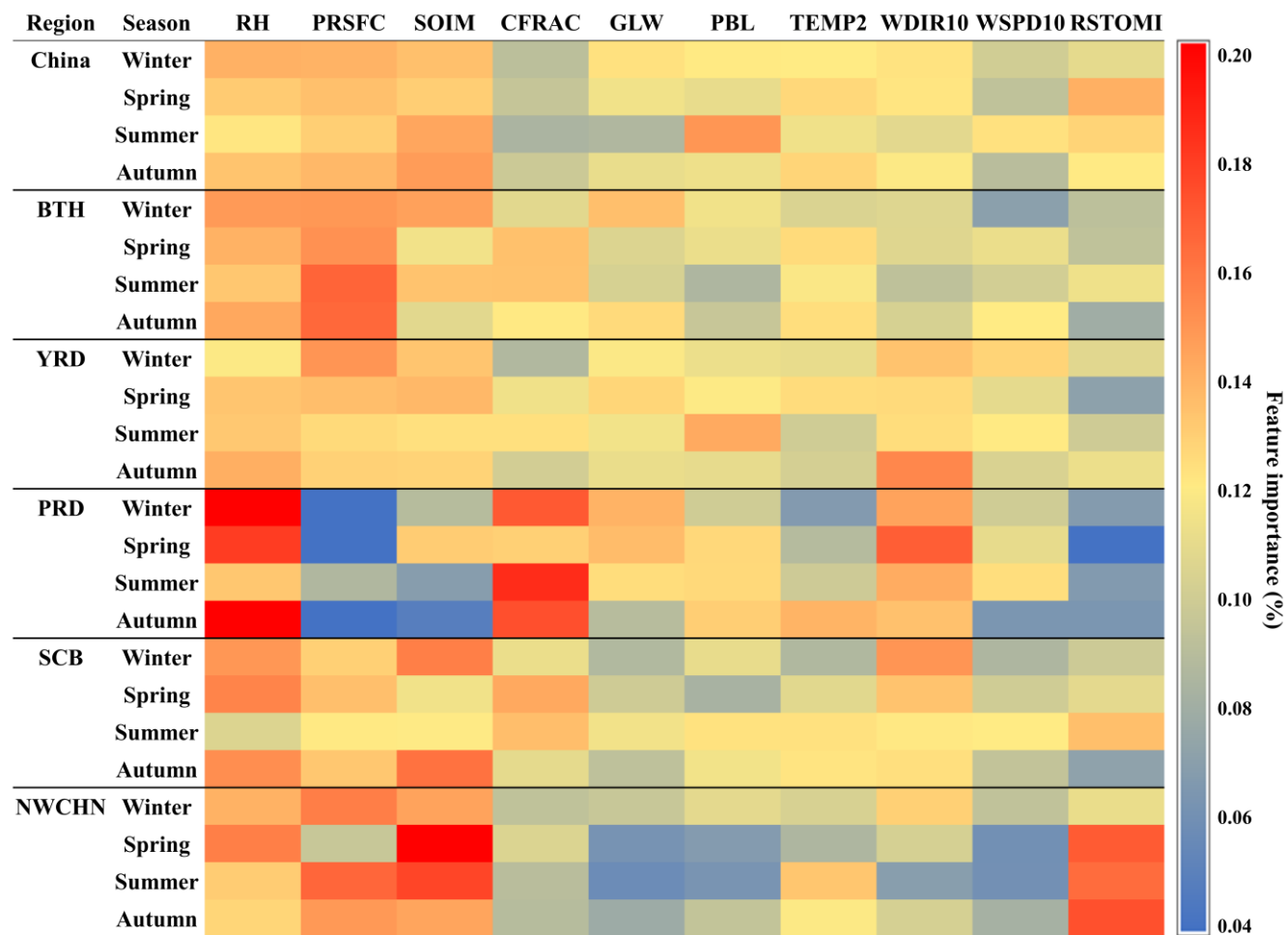
模拟偏差识别



- 使用**lightGBM**模型（一种基于树的ML方法）来诊断CMAQ模拟地表PM_{2.5}浓度偏差
- 溯源式CMAQ模型用来追踪PM_{2.5}的行业排放源
- 研究区域：中国；时间范围：2019年全年
- 排放清单：**MEIC2019**；气象：**WRF v4.1 (FNL)**

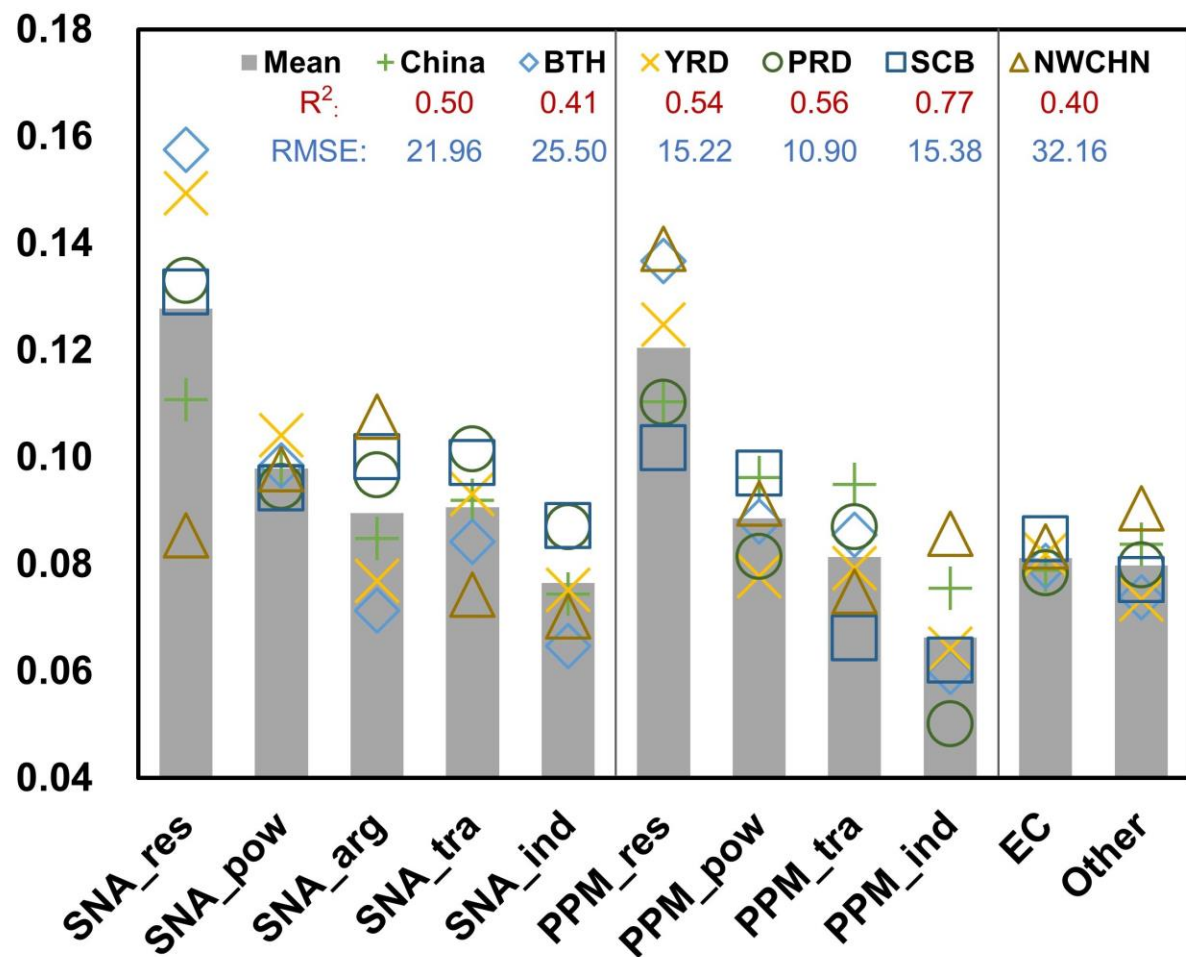


CMAQ模拟偏差的贡献（相对重要性%）



- 在BTH地区，表面压力和相对湿度对模拟偏差的贡献最大
----- WRF模拟的不确定性（湿度 RMSE为20.38%）
- 在珠三角地区：相对湿度、云量、风速-----气溶胶对气象的反馈作用
- 在西北地区，土壤表面湿度和气孔导度-----沙尘气溶胶
- 干燥天气下，模拟低估更严重-----干沉降方案不足

- 在PM_{2.5}成分中，SOA对不同地区和季节的PM_{2.5}模拟偏差的贡献最大



各地区和季节的源排放对CMAQ模拟偏差的贡献（相对重要性%）

Region	PM _{2.5_res}	PM _{2.5_pow}	PM _{2.5_tra}	PM _{2.5_arg}	PM _{2.5_ind}	EC	Other
BTH	0.20	0.16	0.14	0.13	0.10	0.14	0.12
China	0.16	0.16	0.14	0.14	0.13	0.13	0.14
FWP	0.18	0.18	0.13	0.12	0.12	0.14	0.14
NWCHN	0.18	0.15	0.12	0.15	0.13	0.13	0.14
PRD	0.17	0.14	0.14	0.13	0.13	0.14	0.15
SCB	0.16	0.15	0.16	0.14	0.12	0.13	0.13
YRD	0.18	0.16	0.15	0.13	0.12	0.14	0.12

行业来源对CMAQ模拟偏差的贡献（%）

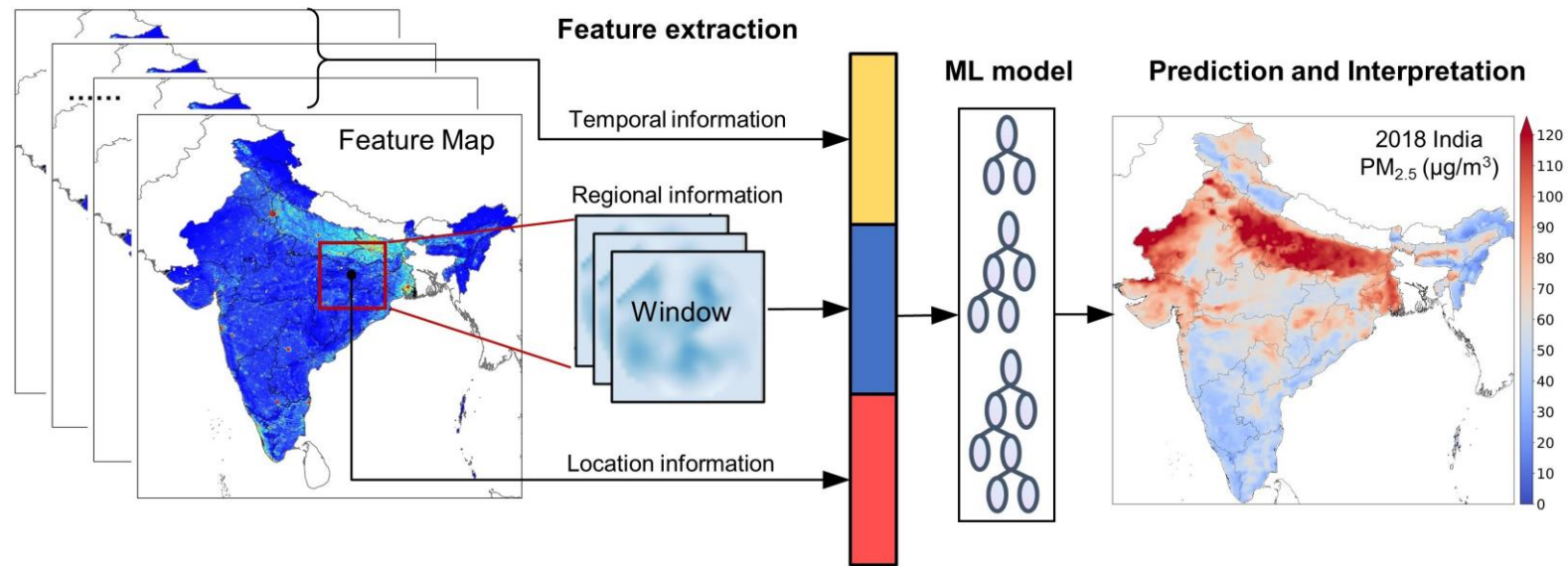
- 来自居民部门的PPM和SNA对PM_{2.5}模拟偏差的贡献最大。用不同行业来源的PM_{2.5}总浓度建立模型时，也得到了同样的结论。



多数据源建模+改进

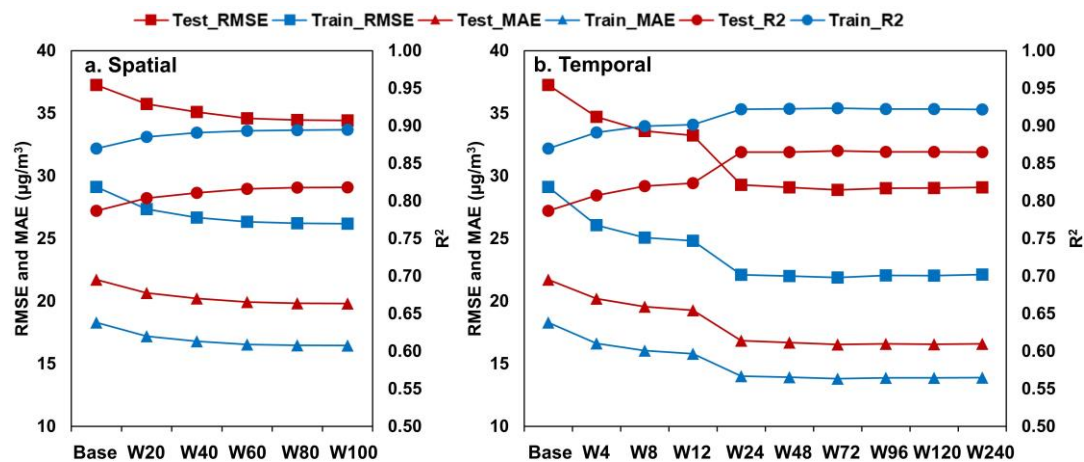
提取区域和时间特征，改进机器学习对印度小时颗粒物浓度建模

关注高污染地区：印度

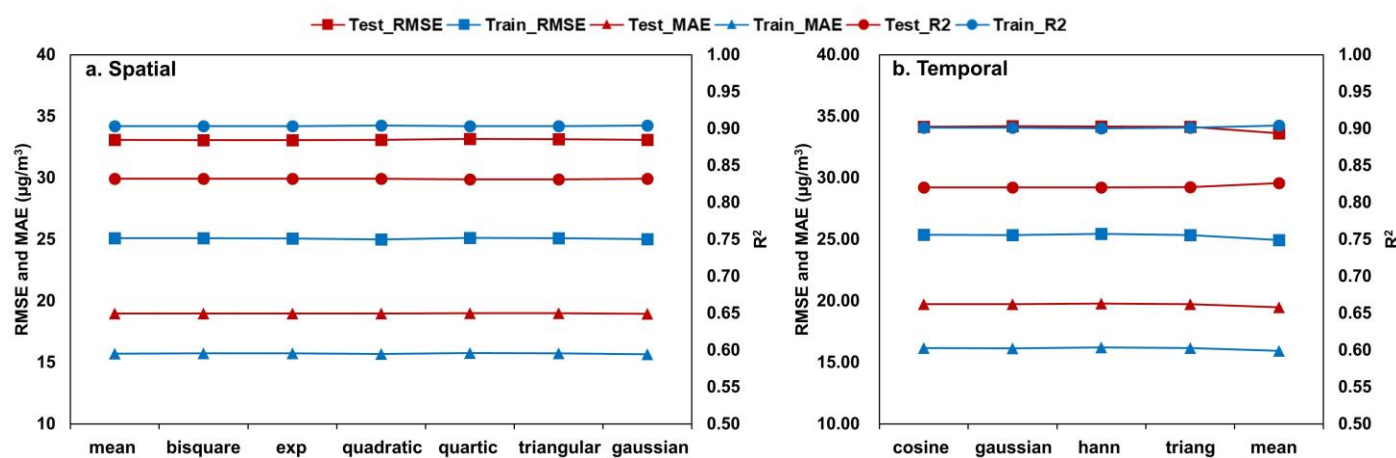


空间特征提取：地理加权法—距离越近权重越大

时间特征提取：滚动加权法—过去一段时间平均



时空加权窗口大小敏感性测试



时空加权核函数敏感性测试

In submission

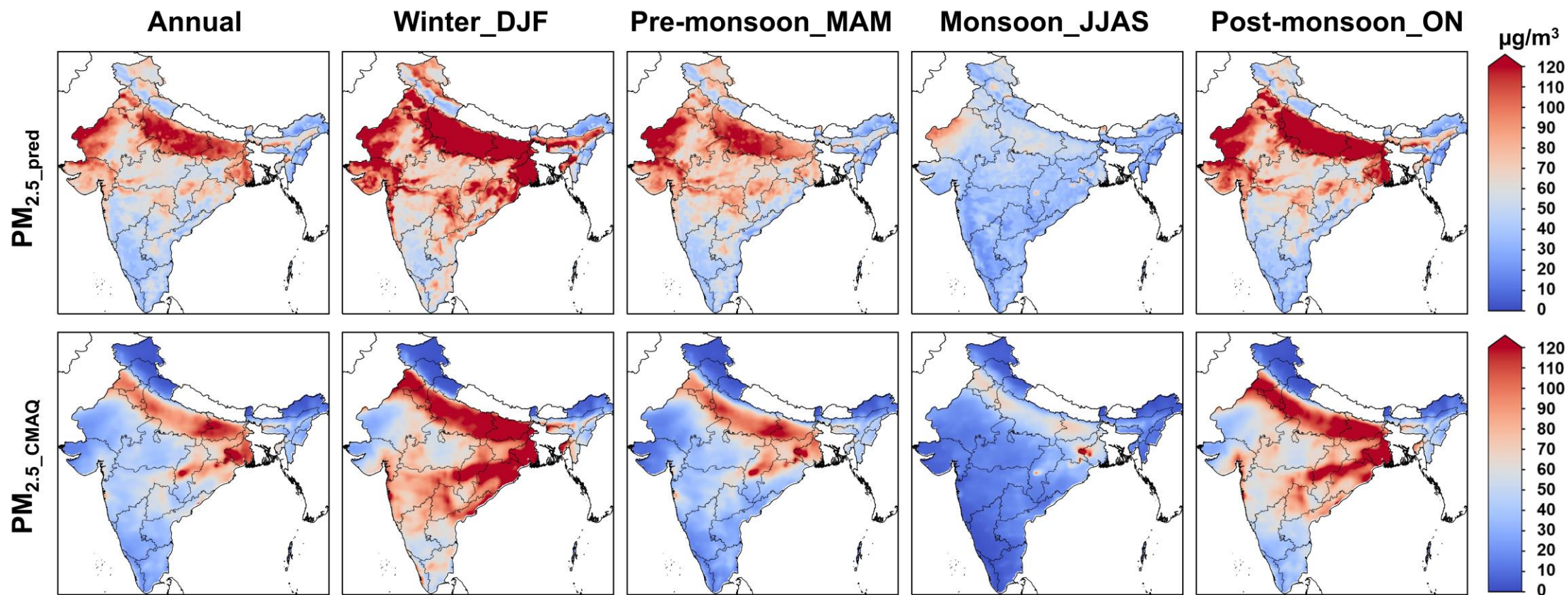
建模改进——时空特征提取

Spec	Type	R ²		RMSE (μg/m ³)		MAE (μg/m ³)	
		Test	Train	Test	Train	Test	Train
PM _{2.5}	Original	0.79	0.87	37.27	29.13	21.72	18.31
	Spatial	0.80	0.89	35.73	27.35	20.65	17.20
	Temporal	0.82	0.90	34.09	25.75	19.85	16.40
	Spatio-temporal	0.83	0.90	33.53	24.88	19.45	15.92
PM ₁₀	Original	0.81	0.89	63.27	48.87	40.69	33.41
	Spatial	0.82	0.90	61.62	46.79	39.41	31.94
	Temporal	0.83	0.91	59.80	44.09	38.25	30.41
	Spatio-temporal	0.84	0.92	58.38	42.23	37.21	29.28

时空特征的加入提高了模型表现

PM_{2.5}估算的R², RMSE, and MAE 分别提高了0.04, -3.74 μg/m³, and -2.27 μg/m³

建模改进——时空特征提取



空间分布与CMAQ模拟结果相似，但机器学习模型捕捉到了印度西部沙尘地区的高PM_{2.5}浓度

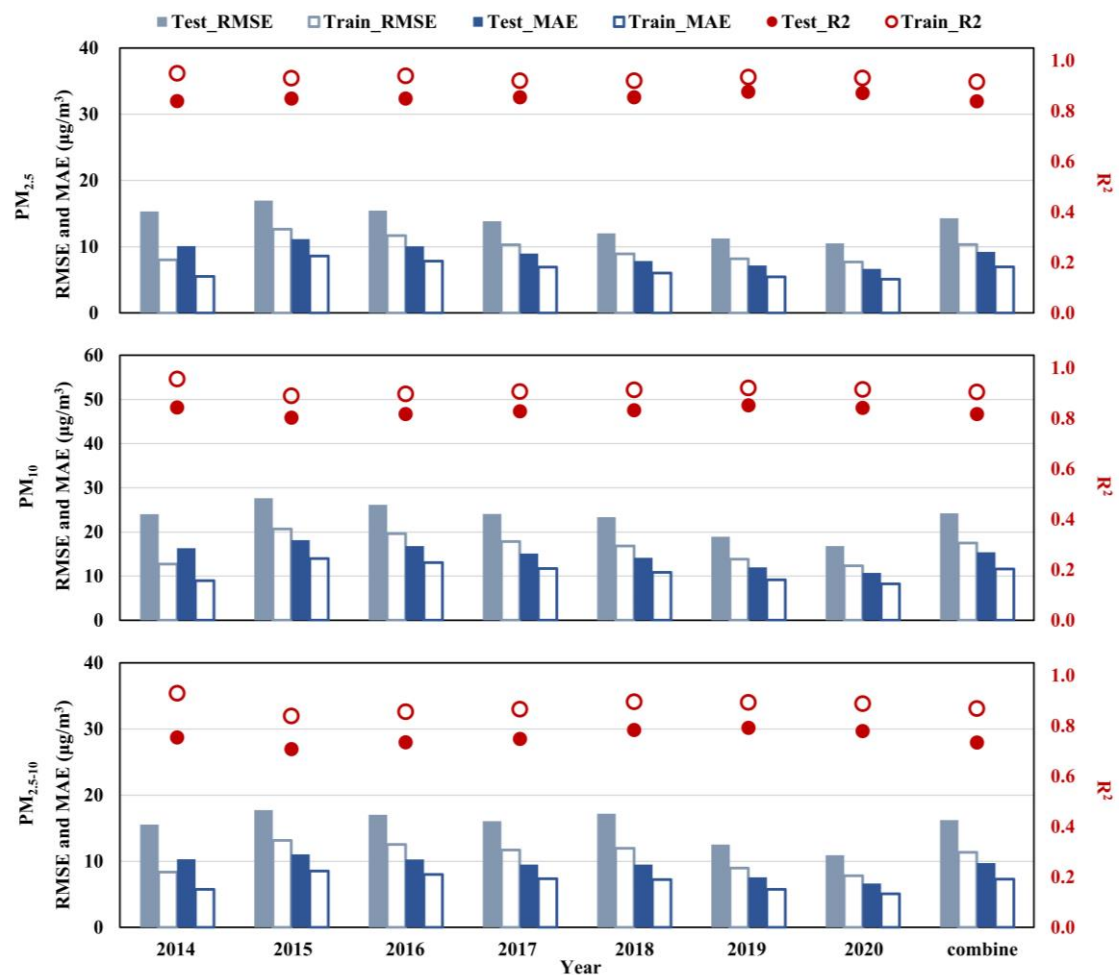


长期数据集

中国2000-2020年长期颗粒物浓度数据集：利用气象再分析数据、卫星遥感产品、CMAQ模式结果、土地利用等数据，基于lightGBM模型，先填补AOD的缺失数据，然后对三种粒径段的颗粒物浓度进行估算（ $PM_{2.5}$, PM_{10} , 和 $PM_{2.5-10}$ ）

不同统计模型之间训练和测试对比

Model	Fit time	R ²		RMSE ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)		MAE ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	
		Test	Train	Test	Train	Test	Train
MLR	1.00	0.49	0.49	24.22	24.22	14.98	14.98
PolyR	37.16	0.64	0.64	20.31	20.16	12.59	12.52
ERTs	223.54	0.72	0.77	17.98	16.09	10.45	9.27
RF	1330.70	0.77	0.85	16.11	13.12	9.21	7.20
XGB	1175.64	0.83	1.00	13.91	0.00	8.00	0.00
LGB	26.24	0.83	0.88	13.85	11.51	8.70	7.83

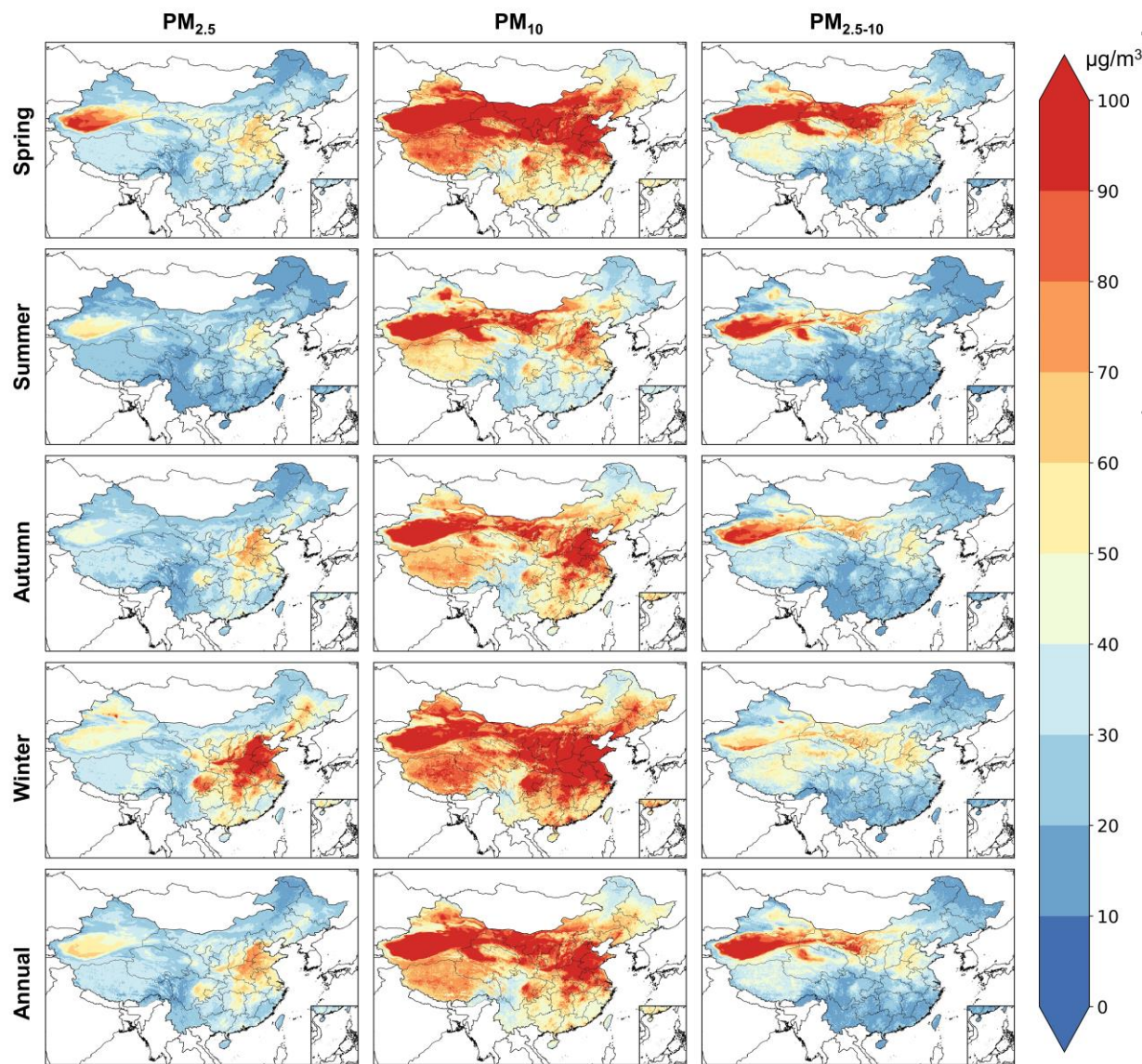


$PM_{2.5}$, PM_{10} , 和 $PM_{2.5-10}$ 2014-2020年模型训练和测试结果 (out-of-sample)

- Out-of-sample验证结果： $PM_{2.5}$, PM_{10} , 和 $PM_{2.5-10}$ 模型准确，训练和测试误差的差异较小 (delta R^2 : 0.07-0.12; delta RMSE: 4-6.7 $\mu\text{g}/\text{m}^3$)。
- LightGBM和XGBoost具有相似的测试误差，但是前者过拟合情况更轻，并且速度更快；



长期数据集



Species	Region	Spring	Summer	Autumn	Winter	Annual
PM _{2.5}	China	35.28 ± 3.17	25.07 ± 2.93	31.19 ± 3.89	43.95 ± 3.61	33.87 ± 7.68
	BTH	48.78 ± 5.40	39.70 ± 6.71	52.48 ± 7.42	77.30 ± 7.50	54.57 ± 15.52
	YRD	45.27 ± 4.78	32.22 ± 5.38	43.91 ± 6.54	67.78 ± 8.59	47.29 ± 14.43
	PRD	30.19 ± 3.26	19.90 ± 3.04	35.99 ± 6.49	46.64 ± 7.05	33.18 ± 11.03
	SCB	38.92 ± 7.16	27.83 ± 4.84	36.32 ± 7.11	61.43 ± 9.33	41.13 ± 14.4
	NWCHN	49.26 ± 8.37	33.05 ± 4.61	30.67 ± 3.46	37.68 ± 3.24	37.67 ± 8.90

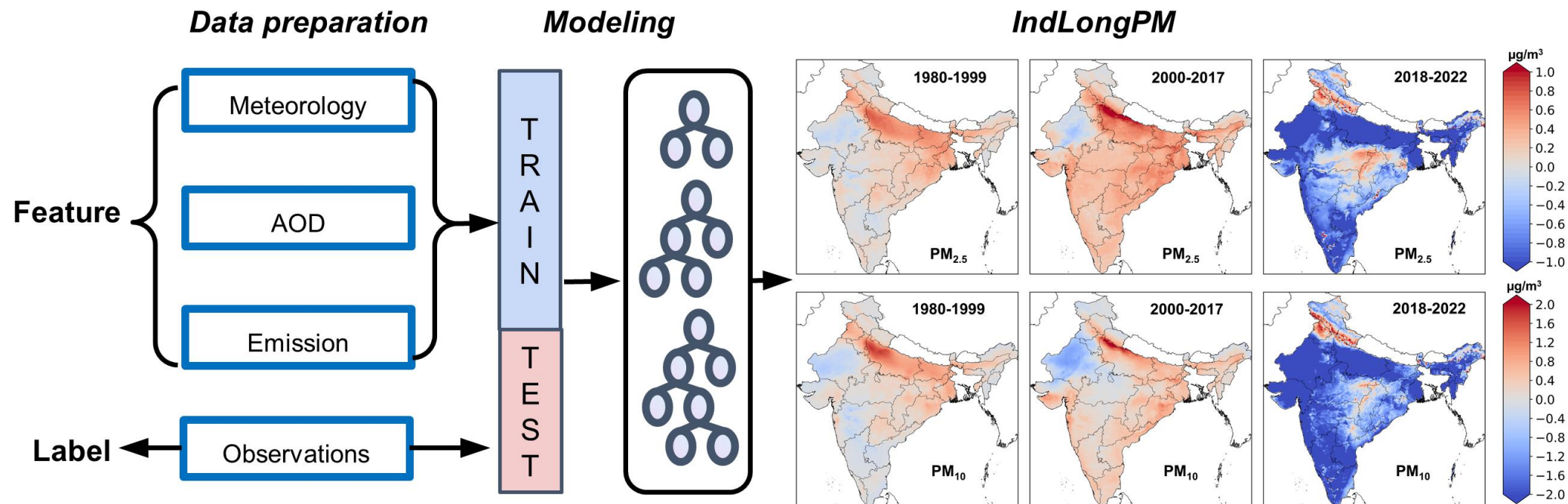
2000年至2020年中国三种粒径段颗粒物浓度季节均值，及其空间分布（10 km）：

- 春季西北大部分地区PM₁₀和PM_{2.5-10}浓度较高可能与频繁的沙尘事件有关；
- 冬季京津冀地区PM_{2.5}浓度较高，可能与污染物排放、不利的气象因素和独特的地形条件有关。



长期数据集

印度1980-2022年长期颗粒物浓度数据集：PM_{2.5}和 PM₁₀



- Machine learning model: **LightGBM**
- Meteorology: **ERA5-Land**; Emission: **MERRA2**
- Cross-validation: **out-of-sample CV, out-of-site CV, out-of-year CV.**
- Train set: 2018-2022; test set: 202301-202306.**
- Mortality estimation: 2000-2019 (**GBD 2019**)

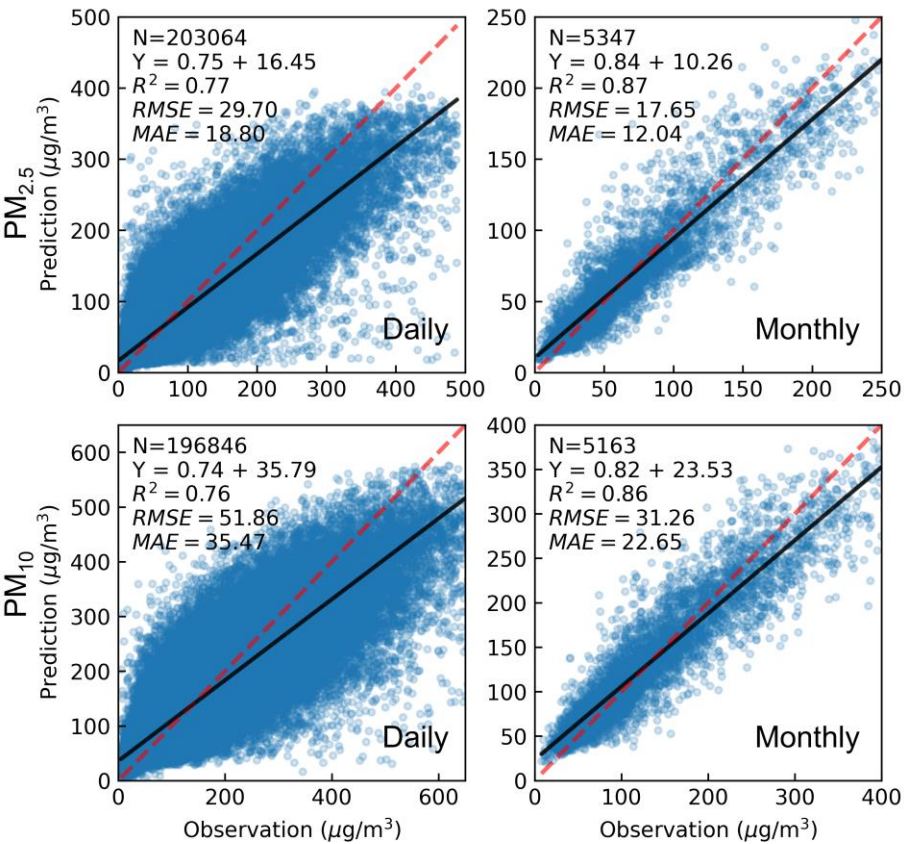
Data description	IndLongPM dataset
Data type	Gridded
File format	NetCDF
Specie	PM _{2.5} , PM ₁₀
Spatial reference	WGS 84
Horizontal resolution	0.1° × 0.1° (≈ 10 km × 10 km)
Horizontal coverage	India, [60° E, 100° E], [5.0° N, 40.0° N]
Temporal coverage	1980-2022

印度1980-2022年长期颗粒物浓度数据集：PM_{2.5}和 PM₁₀

Training and testing results of out-of-sample CV, out-of-site CV, and out-of-year CV for daily PM_{2.5} and PM₁₀ (2018-2022). RSME and MAE unit: µg/m³.

Spec	Type	R²		RMSE (µg/m³)		MAE (µg/m³)	
		Test	Train	Test	Train	Test	Train
PM _{2.5}	out-of-sample	0.77	0.79	29.57	28.51	18.76	18.25
	out-of-site	0.70	0.79	31.73	27.90	20.32	17.78
	out-of-year	0.66	0.79	35.35	27.61	21.54	17.61
PM ₁₀	out-of-sample	0.76	0.77	51.63	50.11	35.42	34.52
	out-of-site	0.65	0.77	57.37	49.42	39.92	33.94
	out-of-year	0.66	0.78	60.65	49.06	40.74	33.72

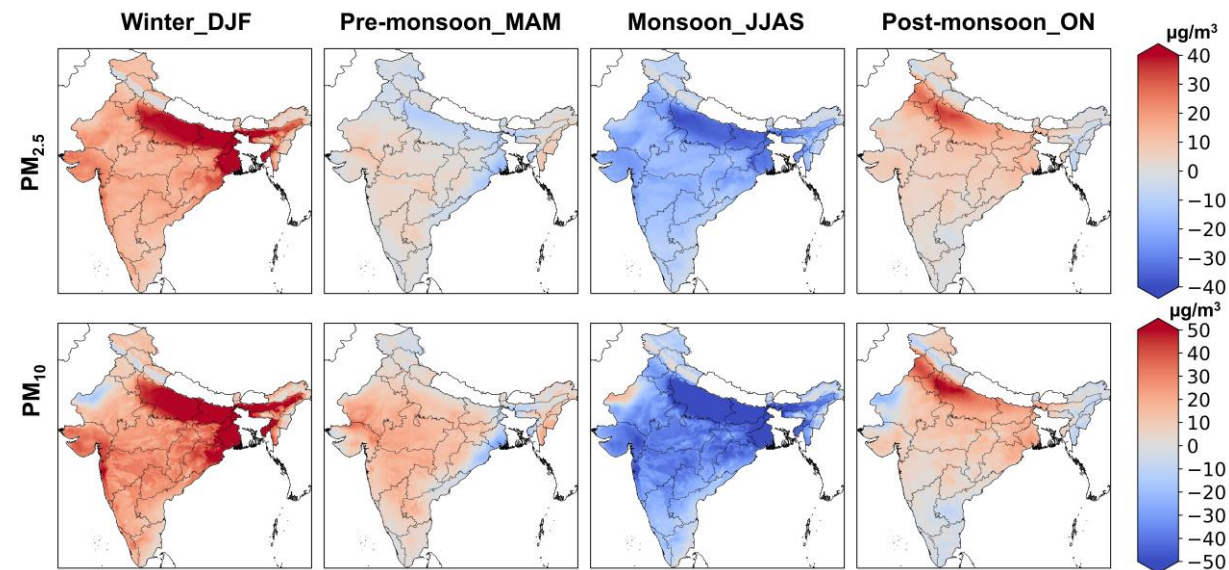
模型显示出良好的准确性，对于每日 PM_{2.5} 和 PM₁₀，样本外 CV R² 分别为 0.77 和 0.76，RMSE 分别为 29.57 和 51.63 µg/m³。



Comparison between observations and predictions of out-of-sample CV for daily and monthly PM_{2.5} and PM₁₀. Dashed lines denote 1:1 line. Solid lines denote linear regression fitting. The sample numbers (N), linear regression function, R², RMSE, and MAE are also shown. Units of RMSE and MAE are µg/m³.

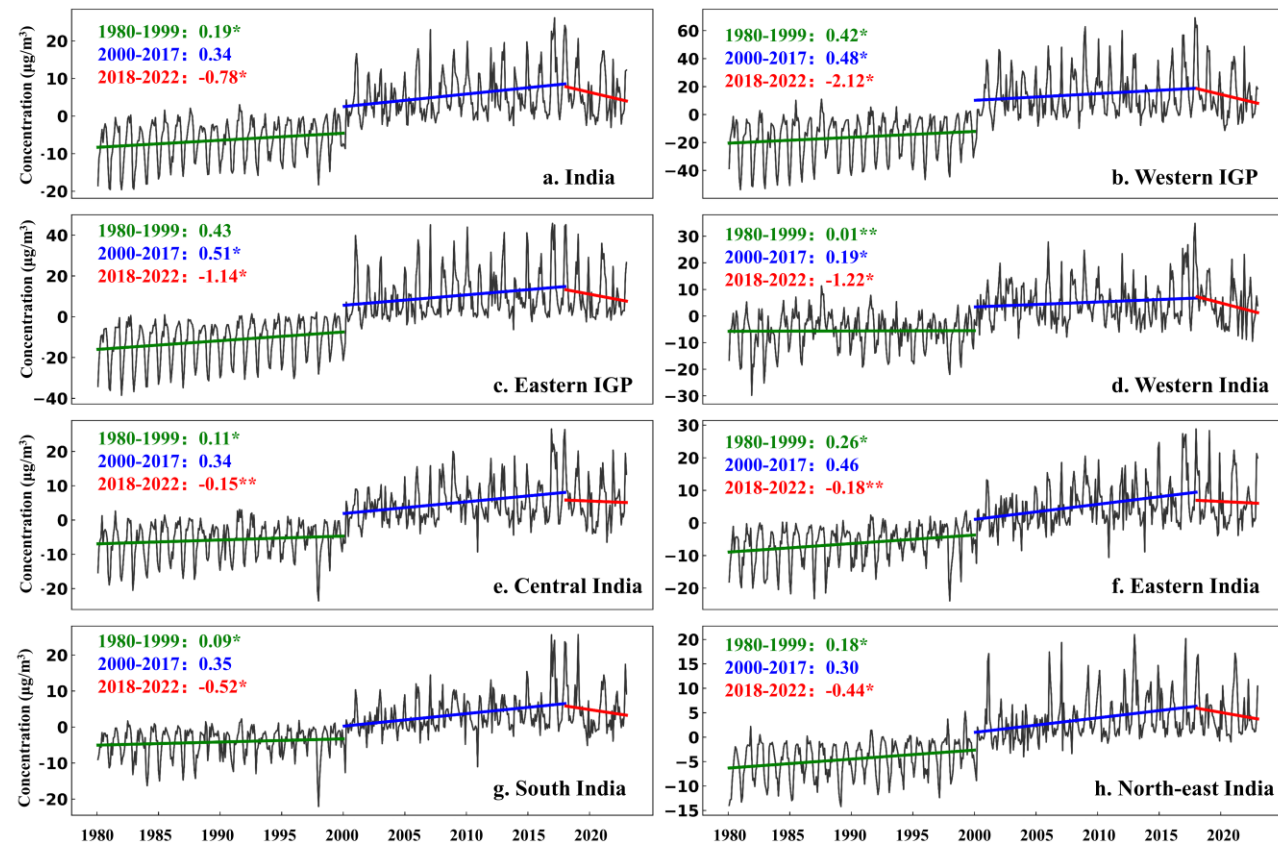
长期数据集建立—印度

印度1980-2022年长期颗粒物浓度数据集：PM_{2.5}和 PM₁₀



Spatial patterns of seasonal PM_{2.5} and PM₁₀ anomalies (the difference between seasonal mean and annual mean) in India during 1980-2022.

- 高浓度：
冬季，印度恒河平原
- 低浓度：
雨季，印度南部

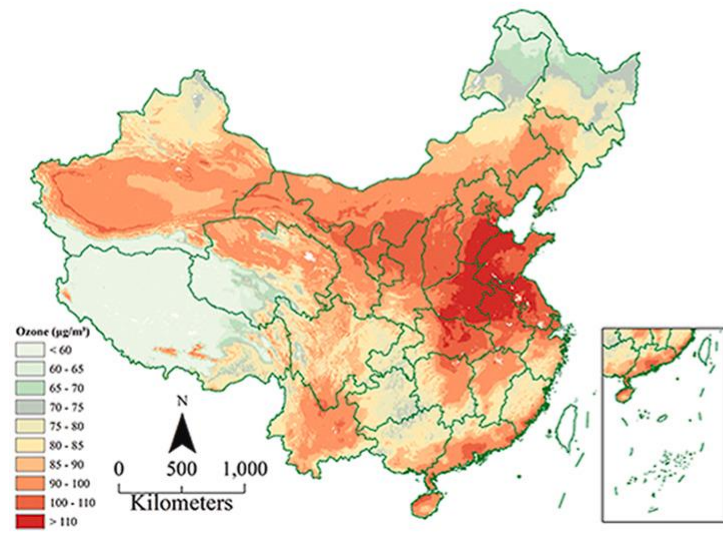


- 1980-1999：PM_{2.5}浓度缓慢增加
- 2000-2017：快速增加
- 2018-2022：快速下降

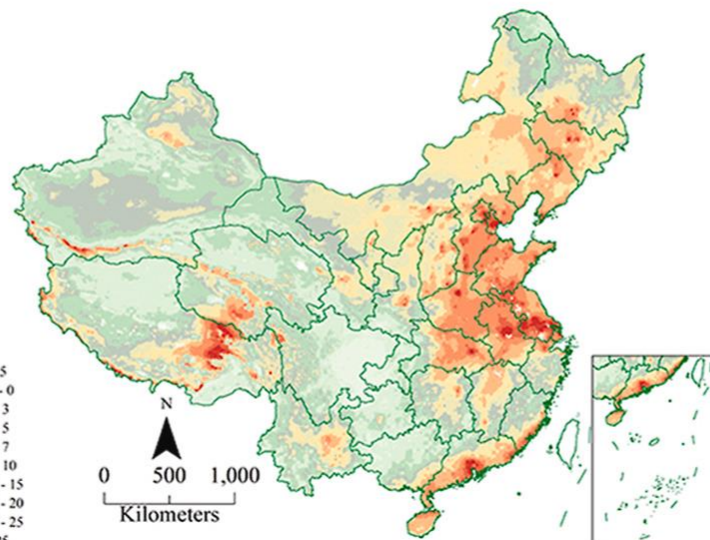


O₃和NO₂

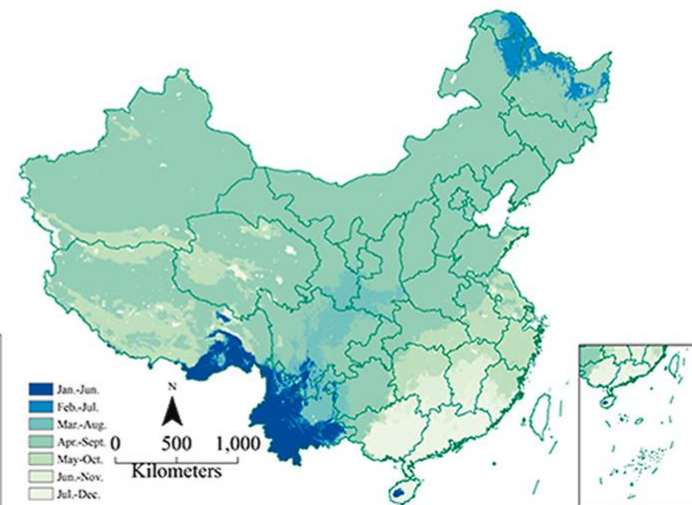
The annual mean MDA8 ozone concentrations in 2019



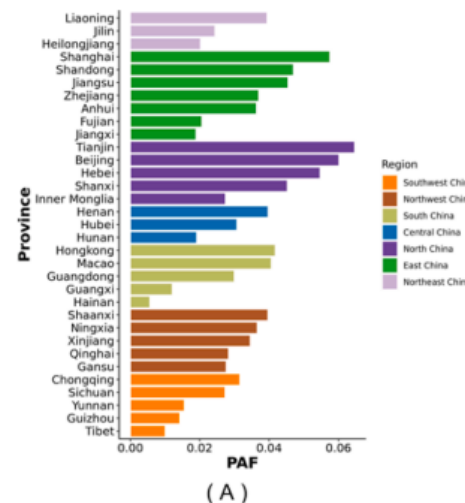
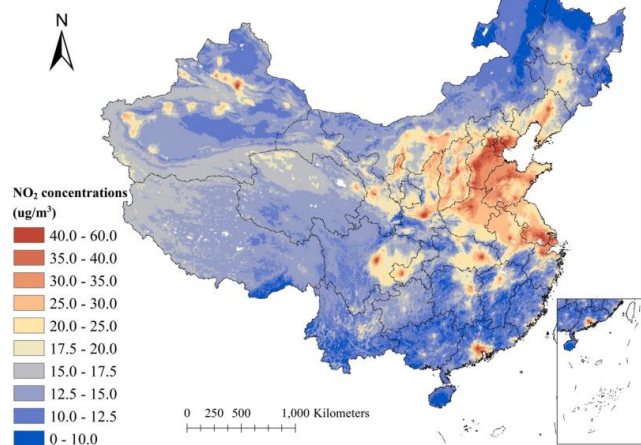
Change rates of annual mean MDA8 ozone concentrations from 2013 to 2019



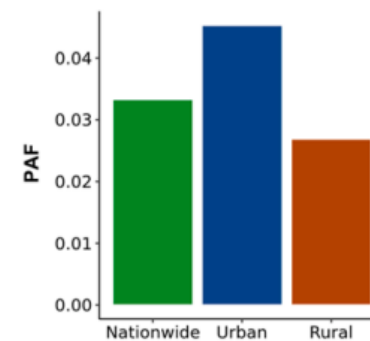
The spatial distribution of ozone peak season with different months in 2019



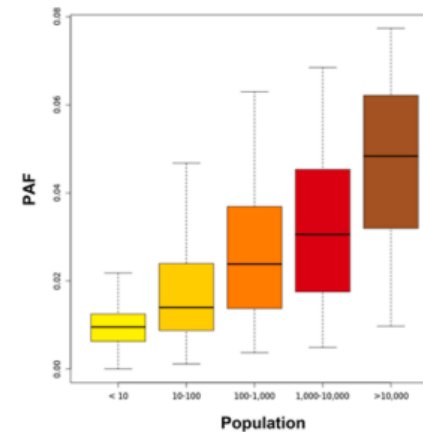
(B)



(A)



(B)



(C)

Meng et al., EP

Li et al., EI

Fig. 4. Distribution of population attributable fraction for NO₂ long-term exposure in 2019. (A) Among provinces; (B) between urban and rural areas; and (C) in different population.



PM₁全球分布

基于4D树模型的全球PM₁浓度估算

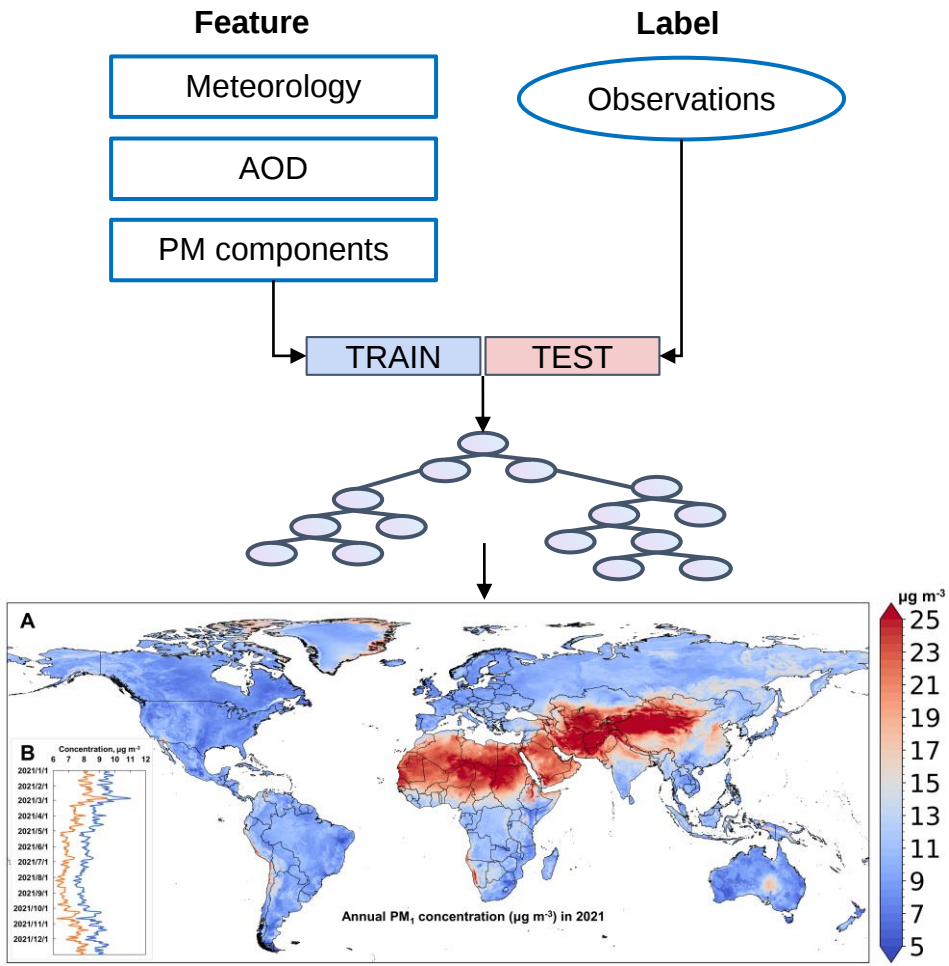
Data sources OpenAQ and ERA5+MERRA2

Type	Variable	Description	Spatial Resolution
ERA5	SSRD	Surface solar radiation	0.1° × 0.1°
	EVAP	Evaporation	0.1° × 0.1°
	TEMP2	2m air temperature	0.1° × 0.1°
	DEWP2	2m dewpoint temperature	0.1° × 0.1°
	SP	Surface pressure	0.1° × 0.1°
	TPREC	Total precipitation	0.1° × 0.1°
	UWIND10	10m u component of wind	0.1° × 0.1°
	VWIND10	10m v component of wind	0.1° × 0.1°
	BLH	Boundary layer height	0.25° × 0.25°
	TCLLOUD	Total cloud cover	0.25° × 0.25°
MERRA2	BCSMASS	Black Carbon	0.5 ° × 0.625 °
	OCSMASS	Organic Carbon	0.5 ° × 0.625 °
	DUSMASS25	Dust– PM _{2.5}	0.5 ° × 0.625 °
	DUSMASS	Dust	0.5 ° × 0.625 °
	SO2SSMASS	sulfur dioxide (SO ₂)	0.5 ° × 0.625 °
	SO4SSMASS	Sulfate	0.5 ° × 0.625 °
	TOTEXTTAU	Total Aerosol Extinction	0.5 ° × 0.625 °

Disparities in global PM₁ exposure:

- 划分了四个等级的目标值：L1>=10 μg m⁻³ , L2 =20 μg m⁻³, L3=30 μg m⁻³, L4=40 μg m⁻³ 。
- 短期暴露风险的计算方法：计算一年中每日PM₁浓度超过标准值的天数比例；
- 长期暴露风险的计算方法：计算年PM₁浓度超过目标值的区域比例

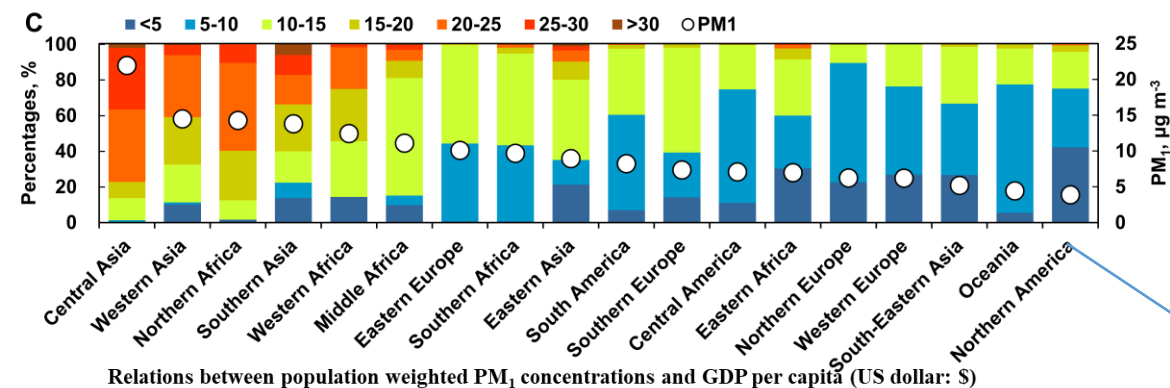
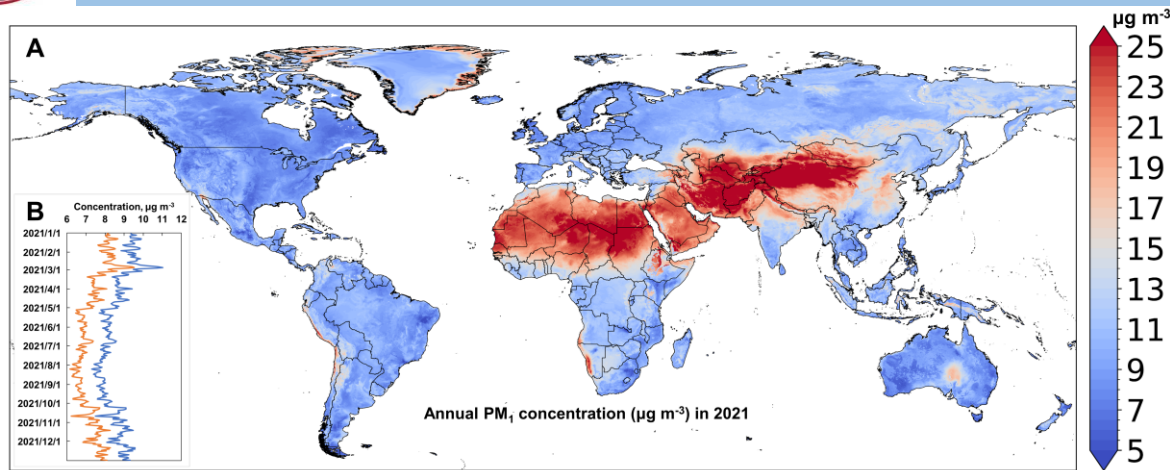
Flow Chart



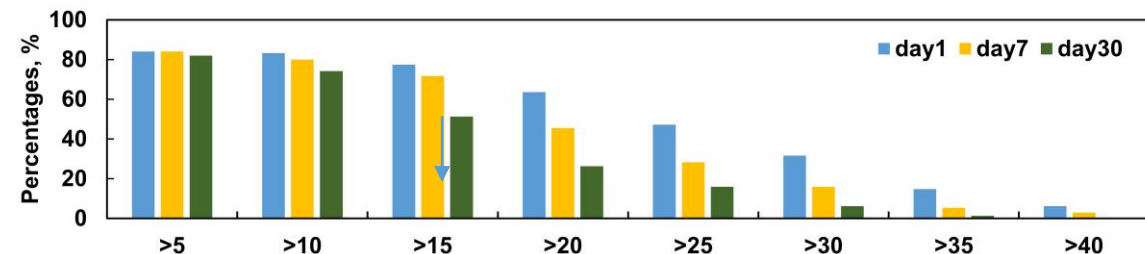
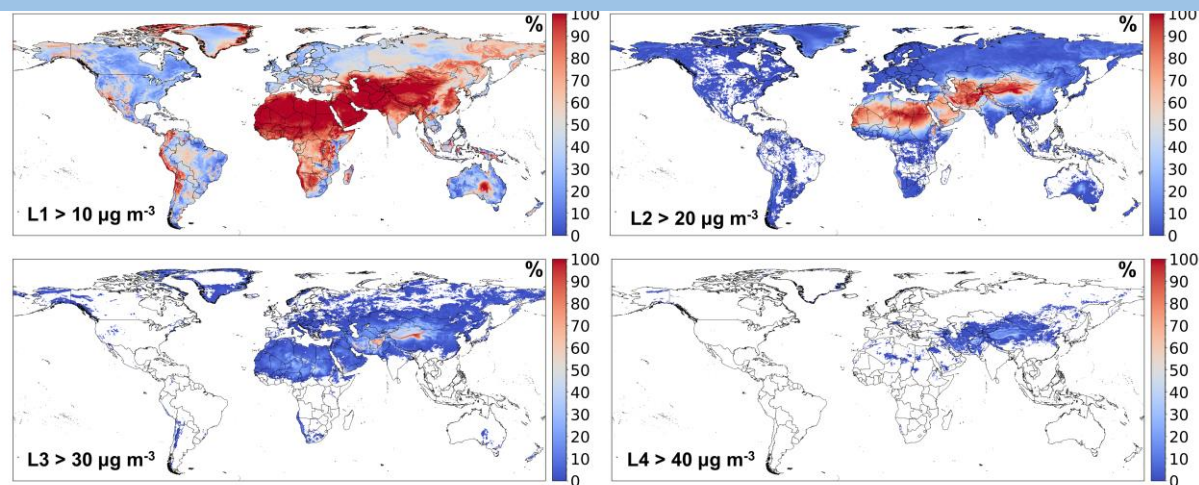
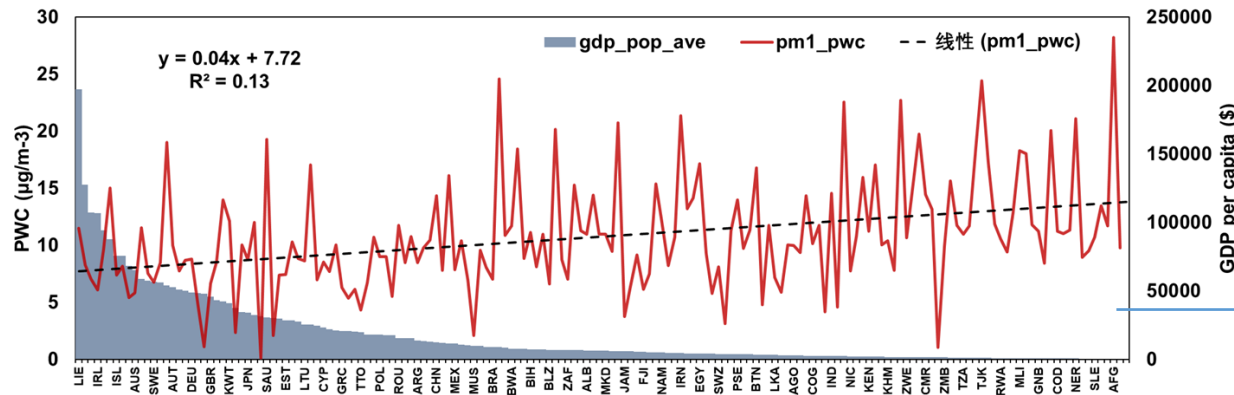
in preparation



PM₁全球分布



Relations between population weighted PM₁ concentrations and GDP per capita (US dollar: \$)



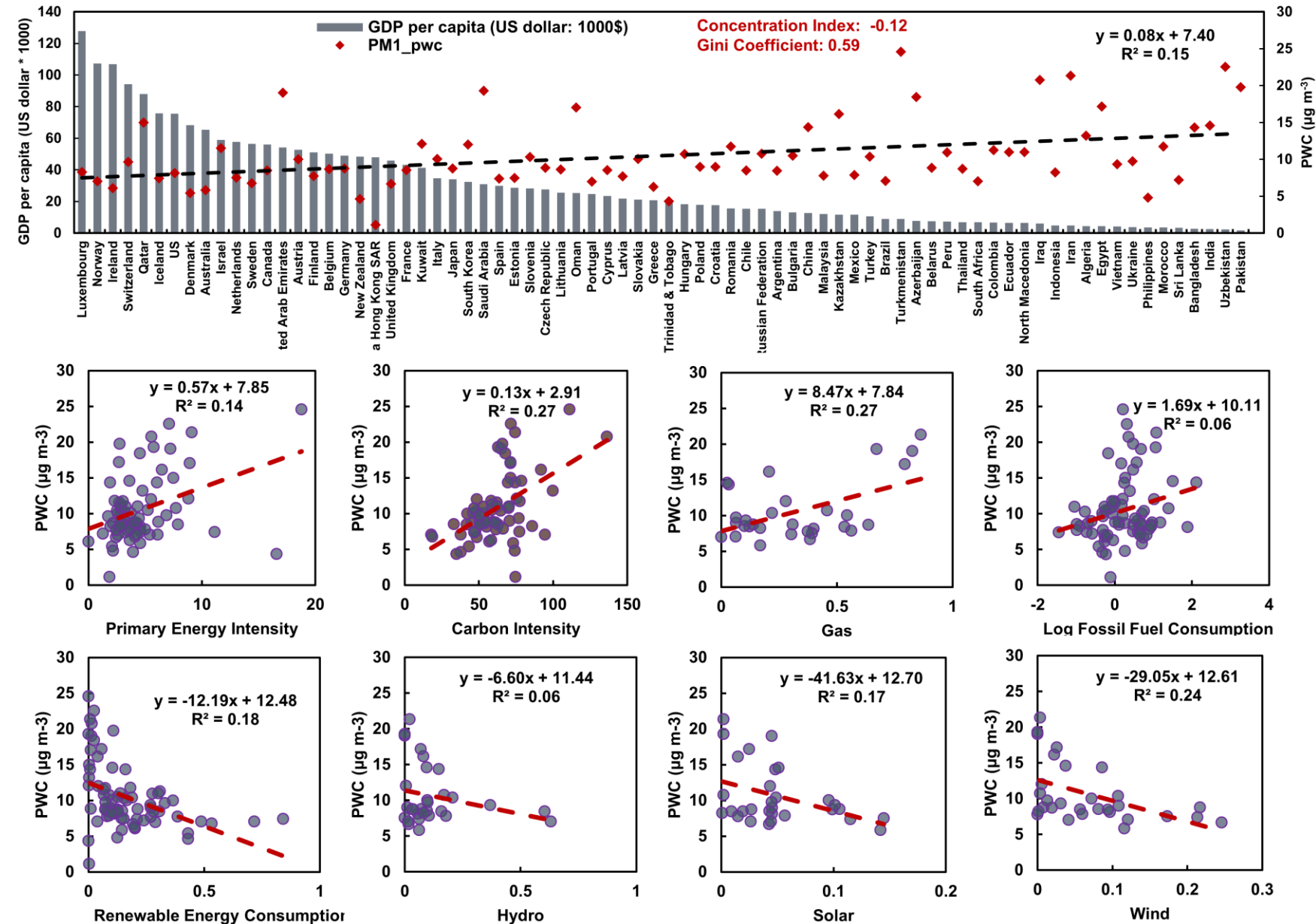
短期暴露风险: 2021 年全球分别有 77%、71% 和 51% 的人至少有一天、一周和一个月暴露在不健康的 PM₁ (> 15 µg m⁻³) 中。

长期暴露风险: 2021 年中亚 98% 的地区, 北非 98% 的地区, 南亚 79% 的地区暴露在不健康的 PM₁ (年均浓度 > 10 µg m⁻³) 中, 而北美仅 25% 的地区, 澳大利亚仅 22% 的地区, 西欧仅 23% 的地区暴露在不健康的 PM₁ (年均浓度 > 10 µg m⁻³) 中。

在全球范围内, 经济水平与人口加权 PM₁ 浓度呈负相关; 经济发展水平低的国家和地区 PM₁ 暴露水平更高



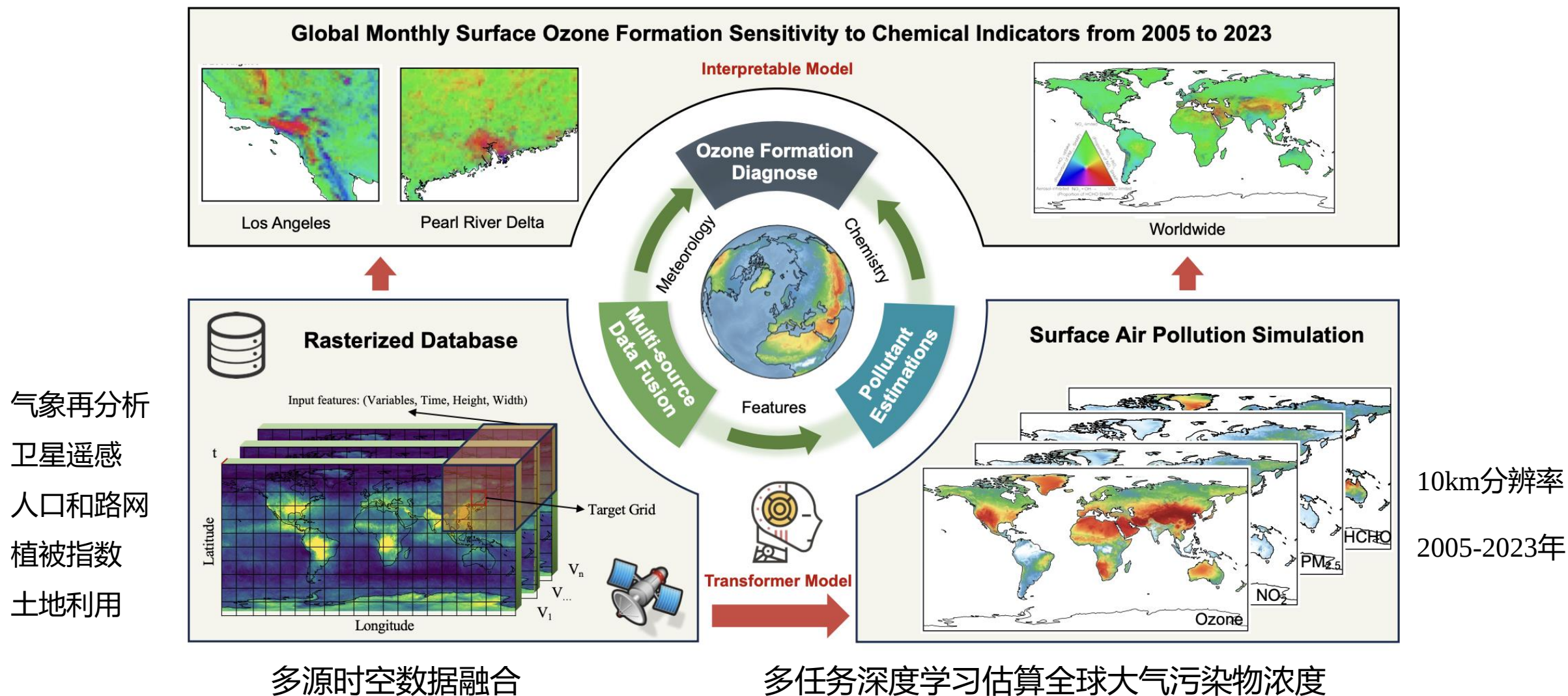
PM₁ disparities



1. 在全球范围内，经济水平与人口加权 PM₁ 浓度呈负相关；基尼系数为 0.59，集中指数为-0.12；
2. 经济发展水平低的国家和地区 PM₁暴露水平更高；
3. 与一次能源相关的指标，如碳强度、天然气发电比例和化石燃料消耗量与 PWC 呈正相；
4. 水力、太阳能和风能等清洁能源与 PWC 呈负相关。

全球NO_x-VOCs-O₃-PM_{2.5}

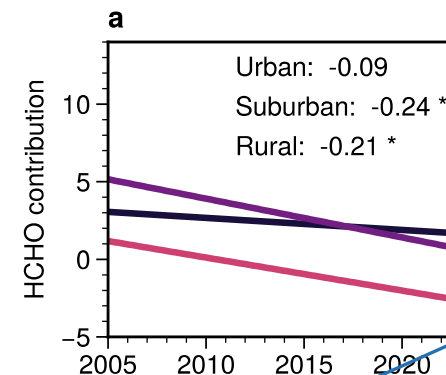
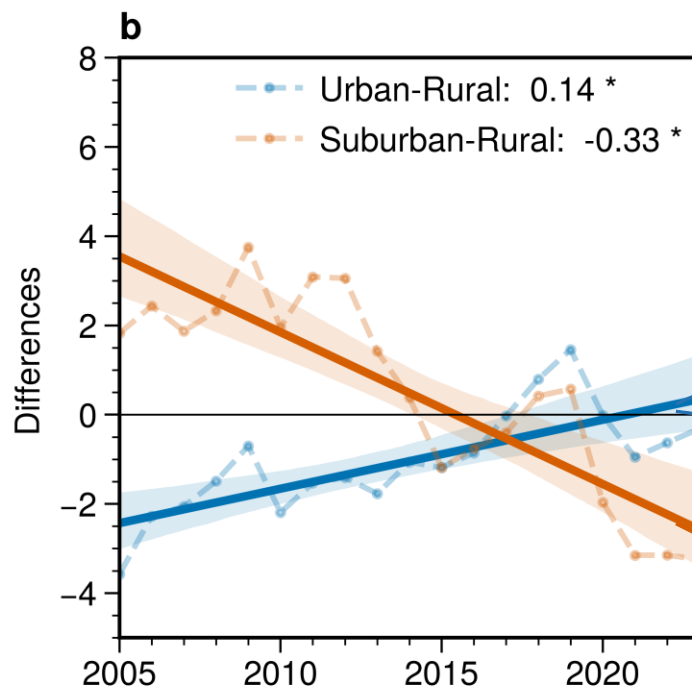
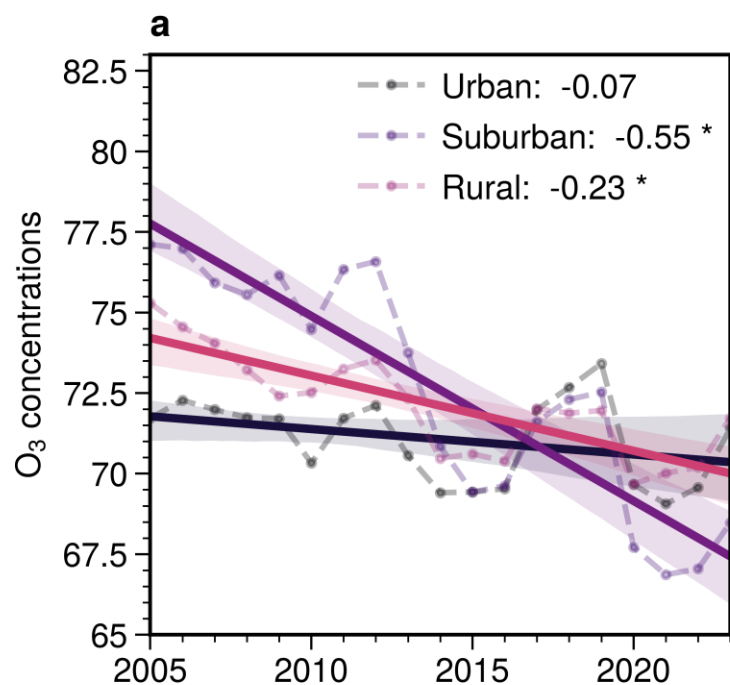
可解释机器学习诊断臭氧对VOCs (HCHO)、NO_x (NO₂)和气溶胶(PM_{2.5})的敏感性



in preparation

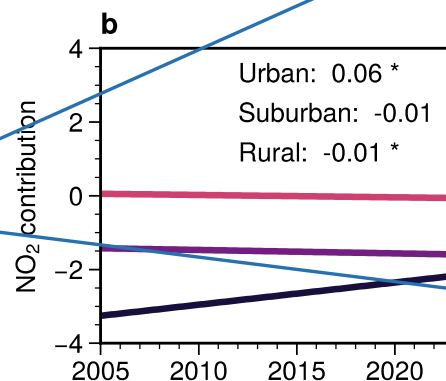
全球臭氧城乡差异的时空变化趋势

由于农村地区臭氧的下降幅度更大，导致城乡差异不断缩小



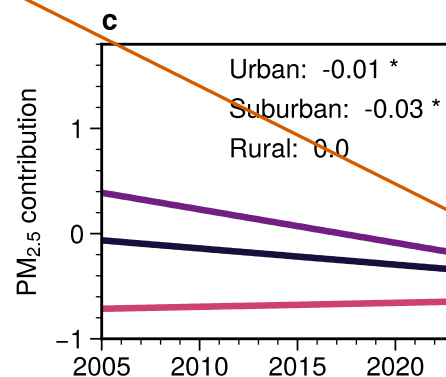
农村HCHO抑制效应增强

0.13 $\mu\text{g m}^{-3} \text{ yr}^{-1}$ *



城市NO₂抑制效应减弱

0.07 $\mu\text{g m}^{-3} \text{ yr}^{-1}$ *



郊区颗粒物抑制效应增强

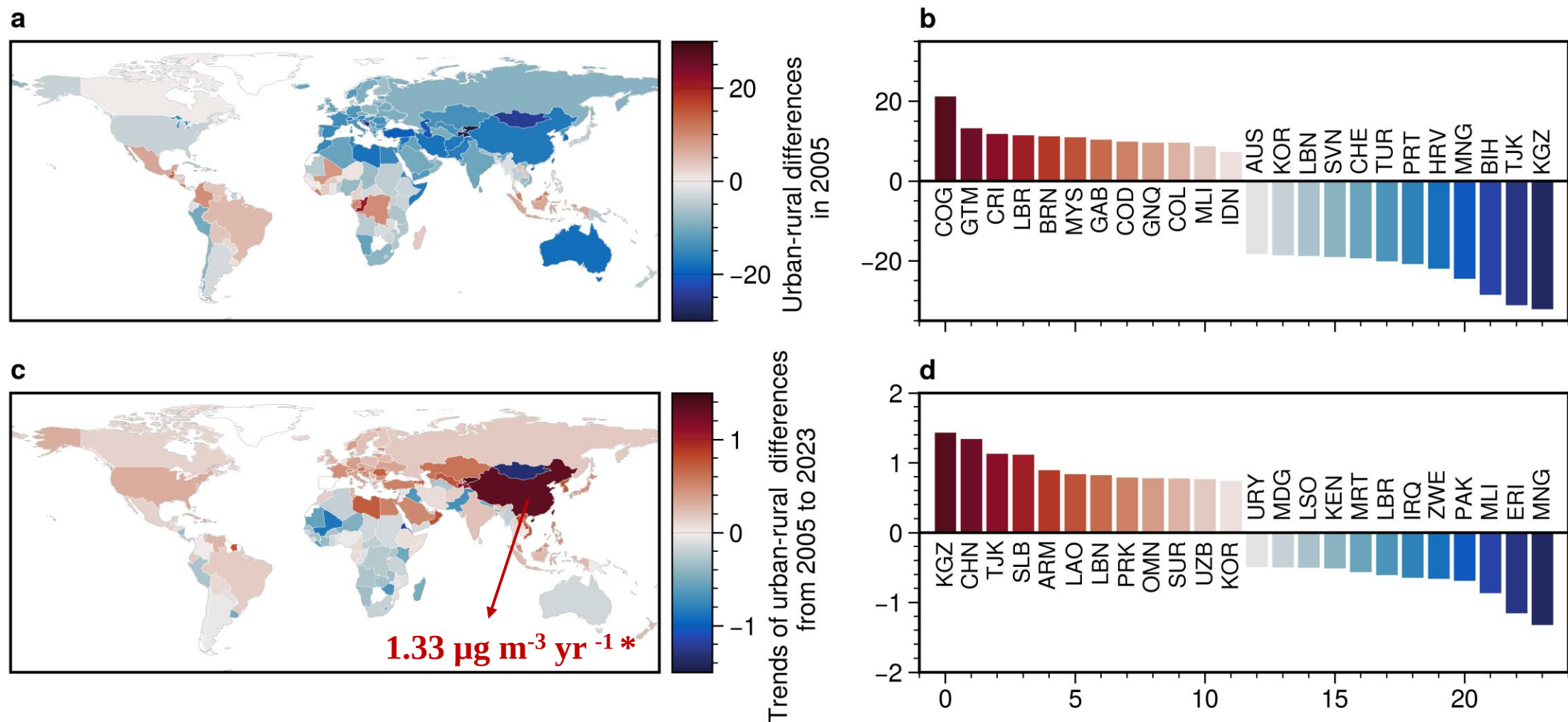
-0.03 $\mu\text{g m}^{-3} \text{ yr}^{-1}$ *

2005年臭氧：郊区 > 农村 > 城市

2023年臭氧：农村 > 城市 > 郊区

in preparation

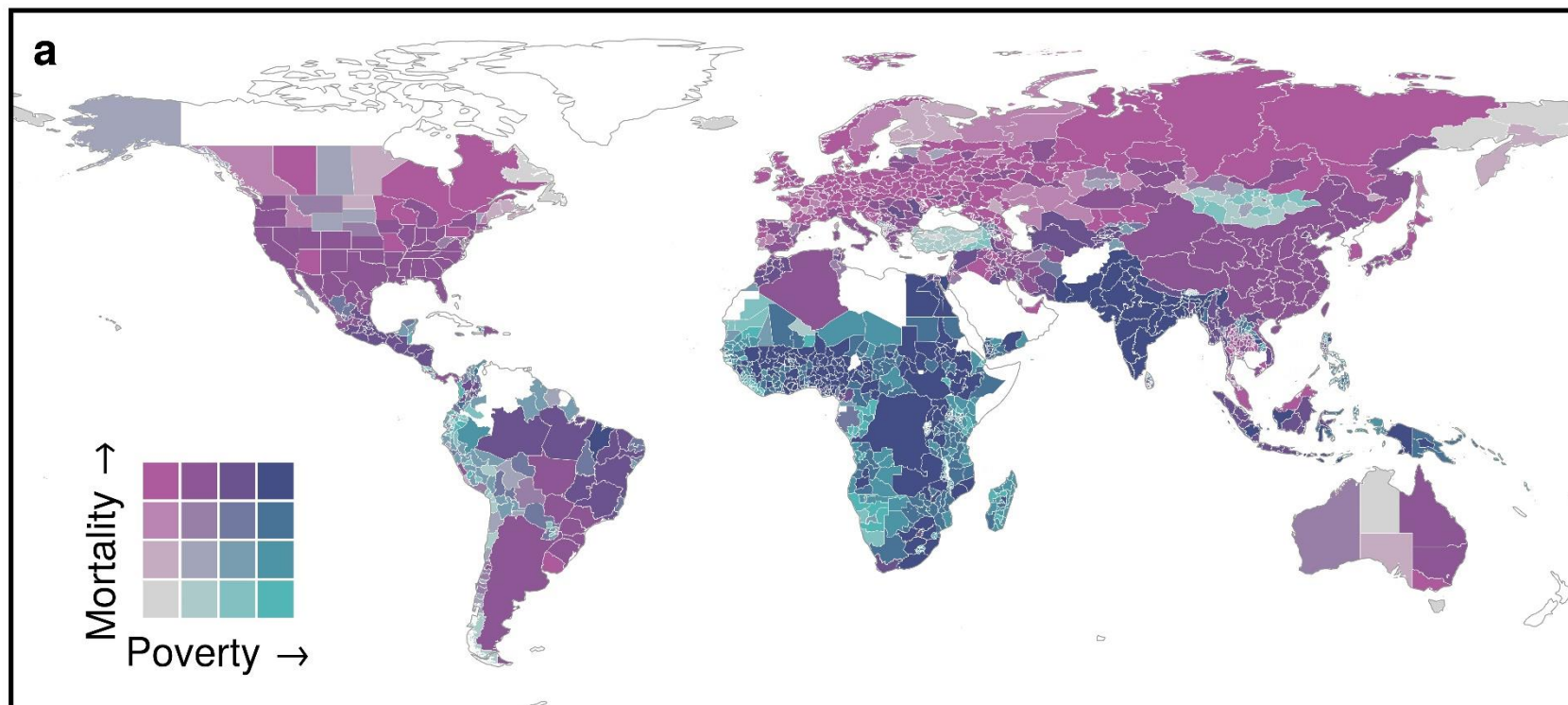
国家尺度臭氧城乡差异的时空变化趋势



- 2005年，超过75%的国家城市臭氧低于农村
- 2005-2023年，超过60%的国家臭氧城乡差异呈增加趋势

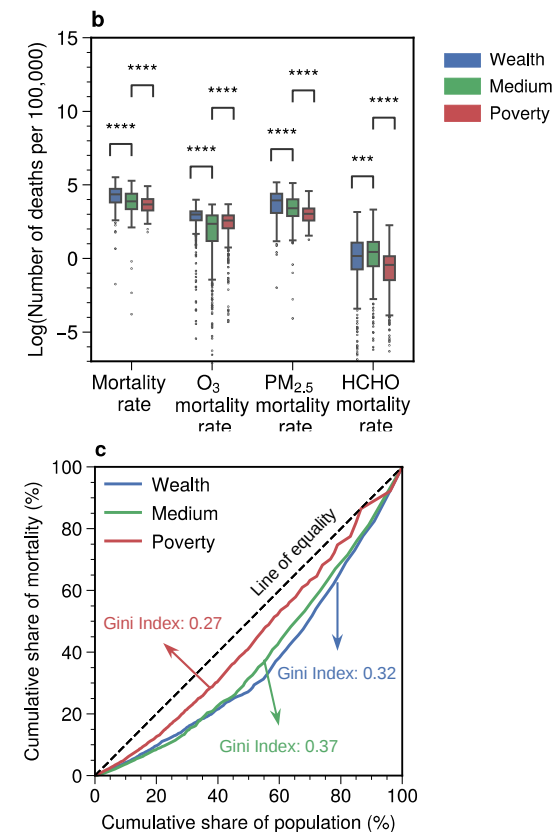
大气污染物过早死亡的社会经济不平等效应

社会经济加剧了空气污染不平等，南亚和非洲低收入群体的二次污染物暴露死亡脆弱性更高
贫困率更低的富裕国家的归因于长期污染物暴露的总过早死亡率更高，且内部不平等性更高



贫困和大气污染过早死亡的关联

Poverty: 2017年国际价格下，生活在消费或人均收入低于3.65美元贫困线家庭的人口占地区总人口的百分比

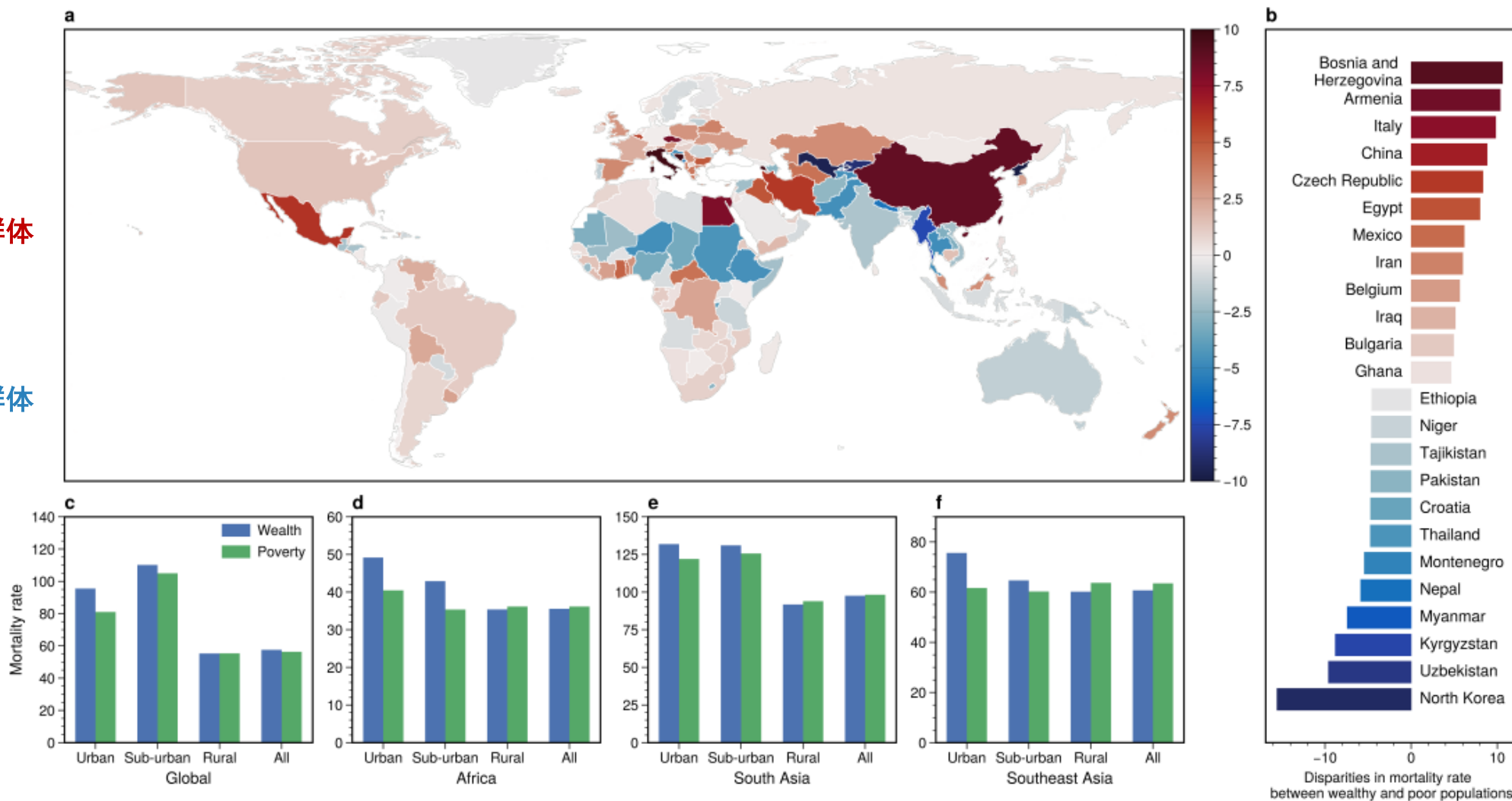


全球健康负担分布呈现双重异质性

高收入国家内部呈现逆社会经济梯度，即社会经济优势群体承受更显著的污染暴露疾病负担
欠发达地区结构性贫困持续强化着底层民众的健康负担与营养不良复合危机

红色：
富裕群体 > 贫困群体
(过早死亡率)

蓝色：
贫困群体 > 富裕群体
(过早死亡率)





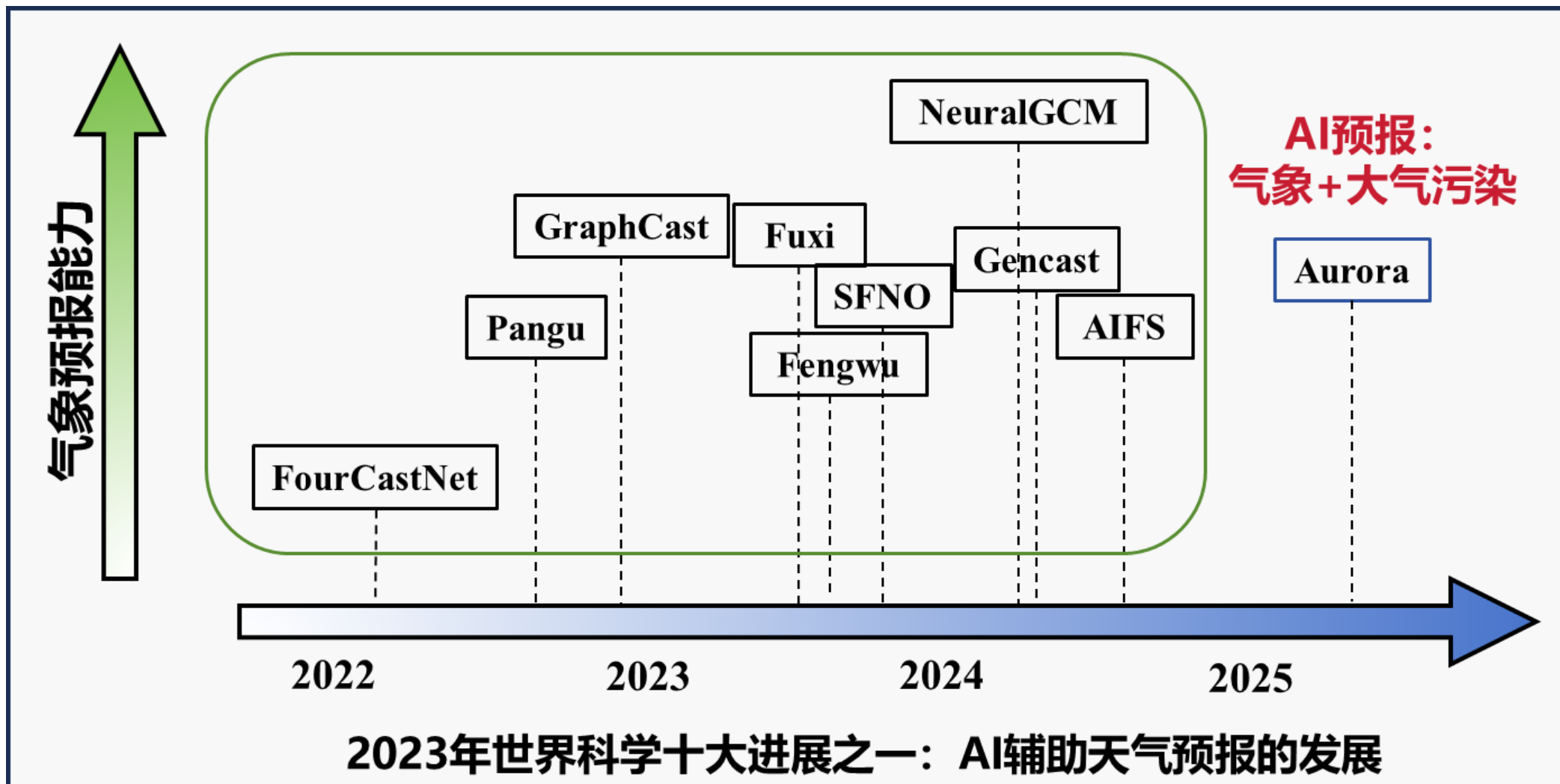
更有价值的是什么？

- 人工智能辅助数值模拟
 - 更准确的污染物浓度
 - 不等于更准确的暴露
 - 室内室外、人的移动
- 人工智能替代数值模拟
- 数值模拟辅助人工智能



第二阶段：人工智能替代化学传输模型

基于人工智能的气象预报获突破性进展，给大气污染智能预报带来机遇

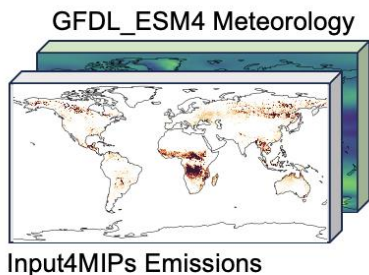




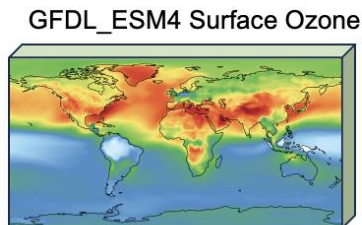
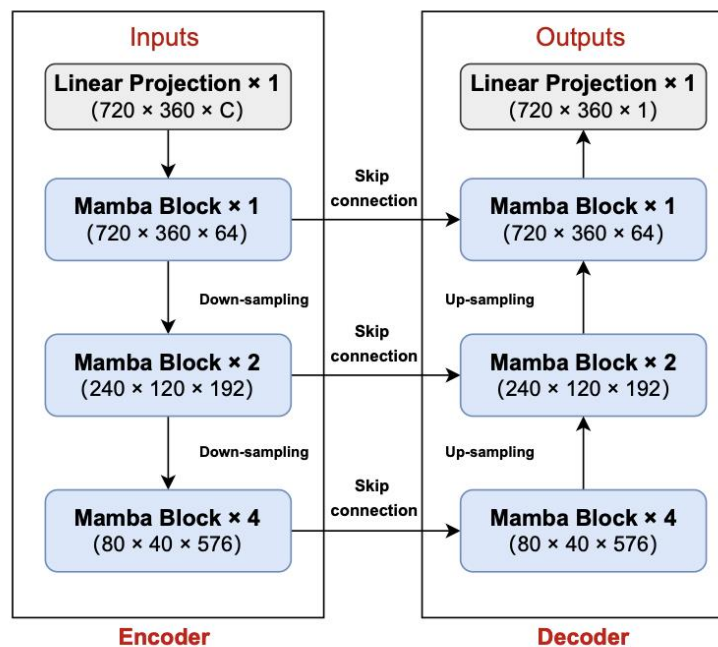
深度学习模拟并归因排放-浓度响应关系

Pre-training

Step1: Pre-training deep learning model on historical simulations of the climate-chemistry model

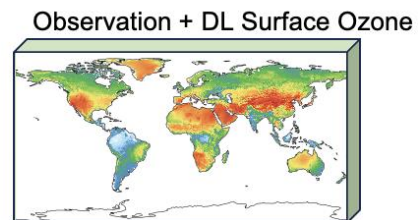
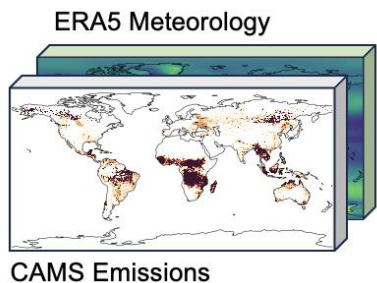


Mamba-based Emission-Concentration Response Model



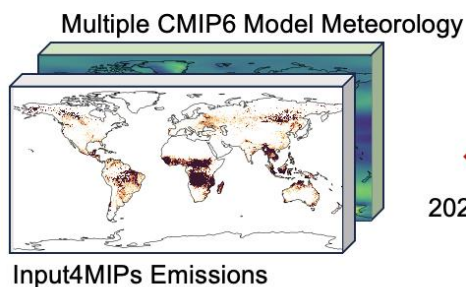
Fine-tuning

Step2: Fine-tuning on reanalyze data



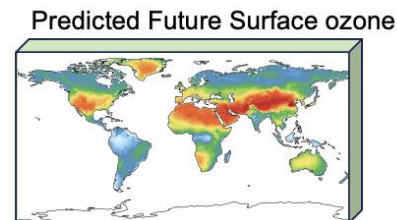
Prediction and Attribution

Step3: Predicting of future ozone and revealing the contribution of biomass combustion



Integrated Gradients Interpretable approach

SSP119, SSP126, SSP245, SSP370, SSP585



in preparation



深度学习预测未来碳中和路径下PM_{2.5}源贡献

模型训练

MEIC排放清单

PM_{2.5}、PM₁₀、NH₃、NO_x、BC、OC、SO₂、CO、NMVOC

WRF气象

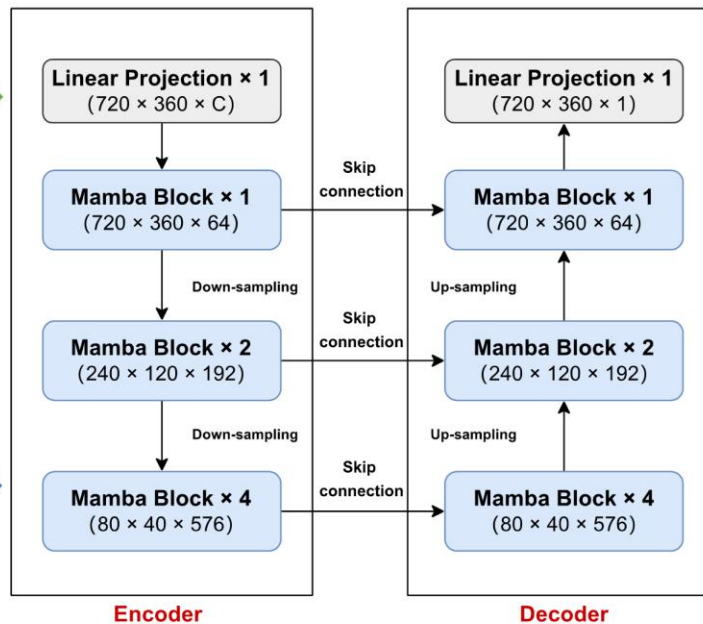
气象因子：风速、风向、降水、温度、湿度等

预测 + 分析

DPEC排放清单

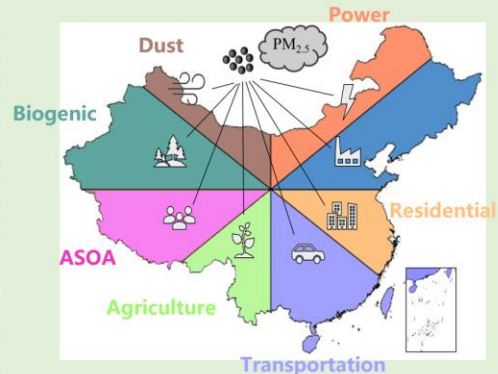
CMIP6未来气象
SSP情景

Mamba-Unet 排放-浓度响应模型



- 1、未来PM_{2.5}源贡献的时空变化
- 2、未来PM_{2.5}源贡献的健康效益
- 3、气候变化对PM_{2.5}源贡献的影响分析

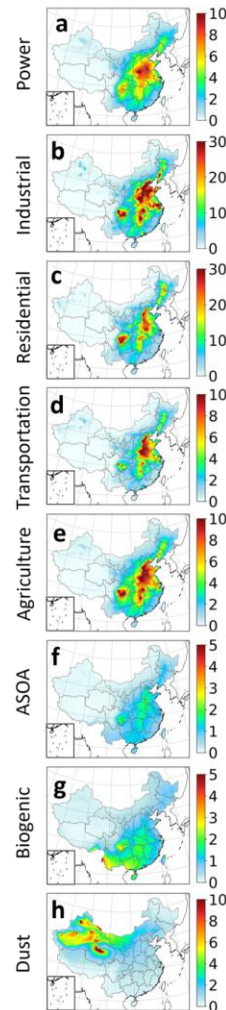
CMAQ-PM_{2.5}源贡献



深度学习-PM_{2.5}源贡献

来源：工业、居民、交通、能源、农业、SOA...

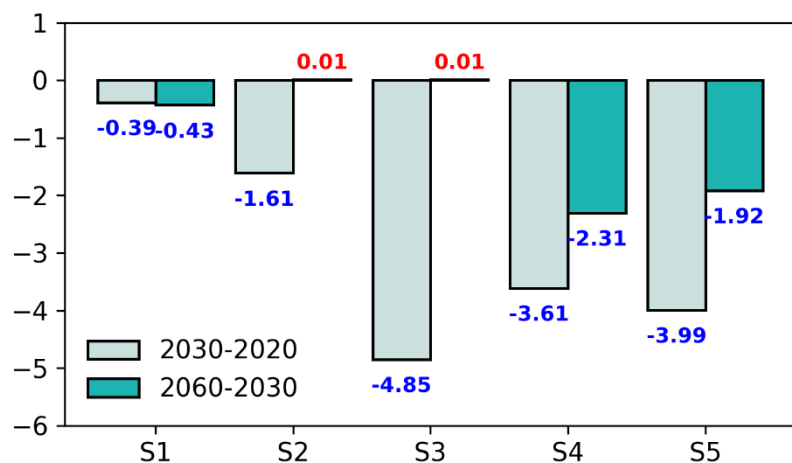
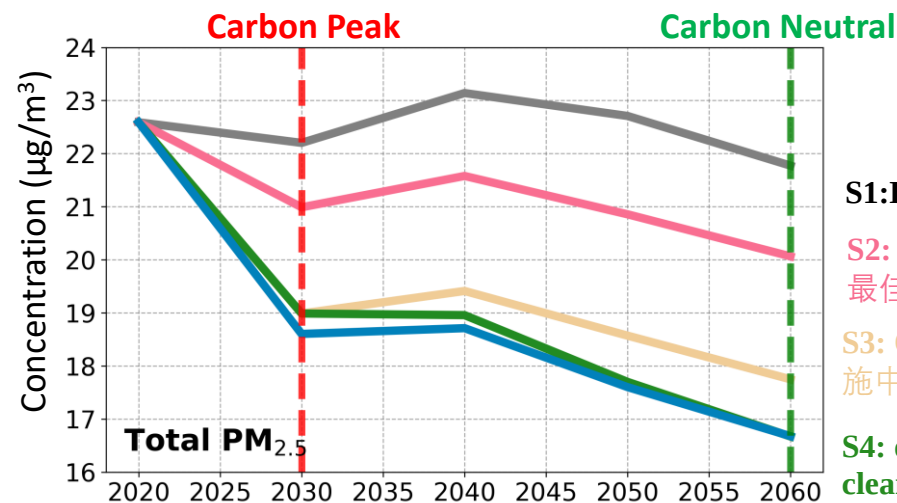
多套排放情景组合



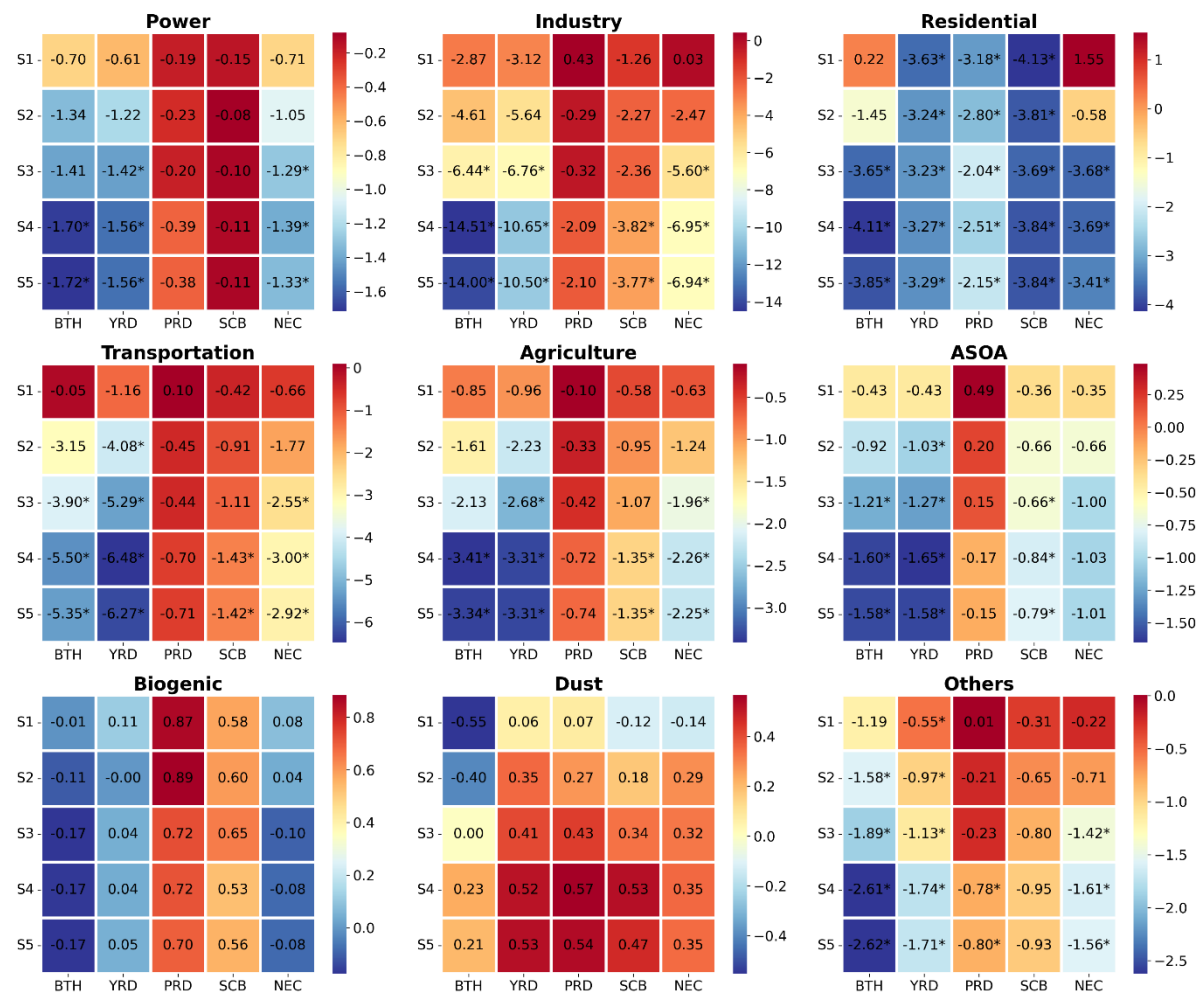
in preparation



PM_{2.5}源贡献的变化趋势



碳中和情景下全国PM_{2.5}的变化



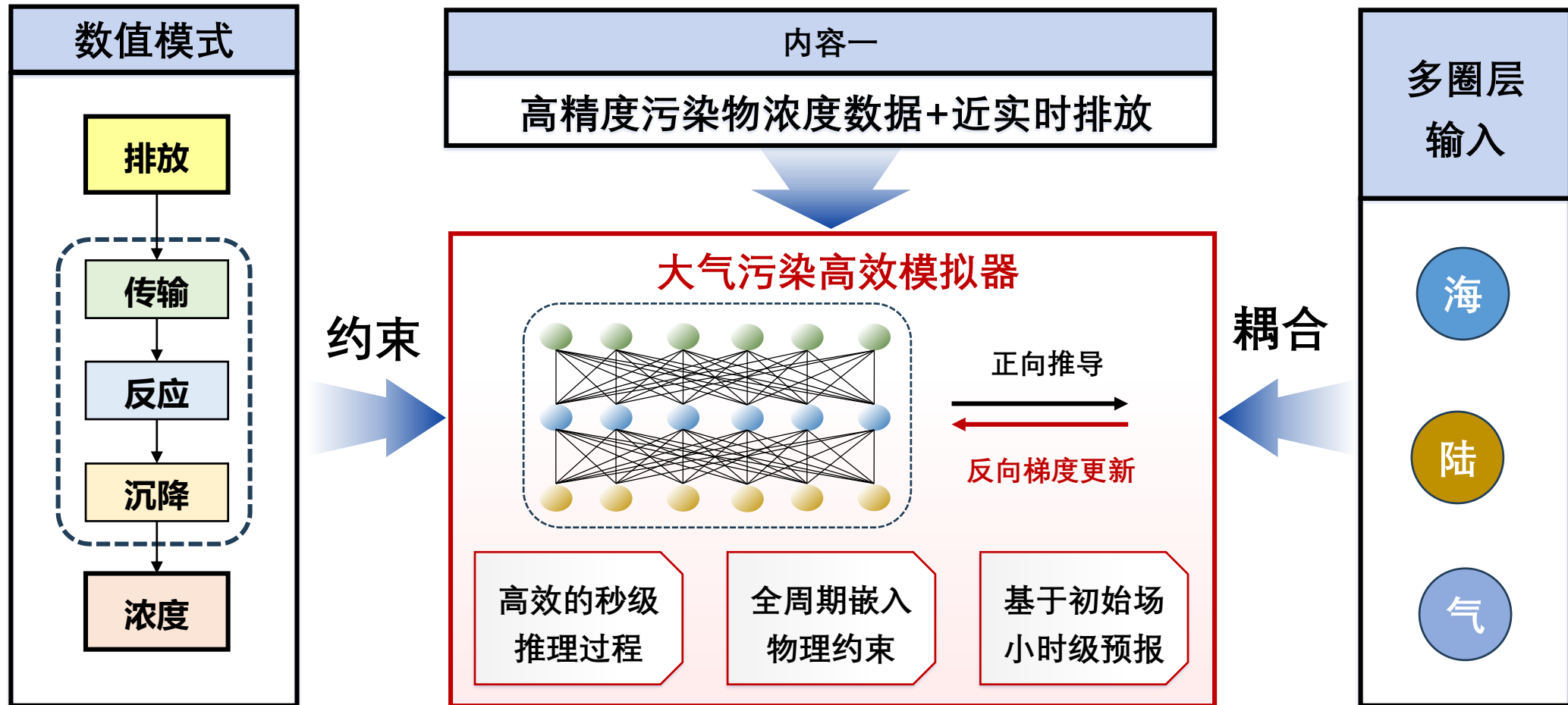
碳中和情景下区域PM_{2.5}的变化趋势

in preparation



第三阶段：数值模拟辅助人工智能

深度学习驱动的高效精准数据模型





未来：数据驱动+大预言交互模型

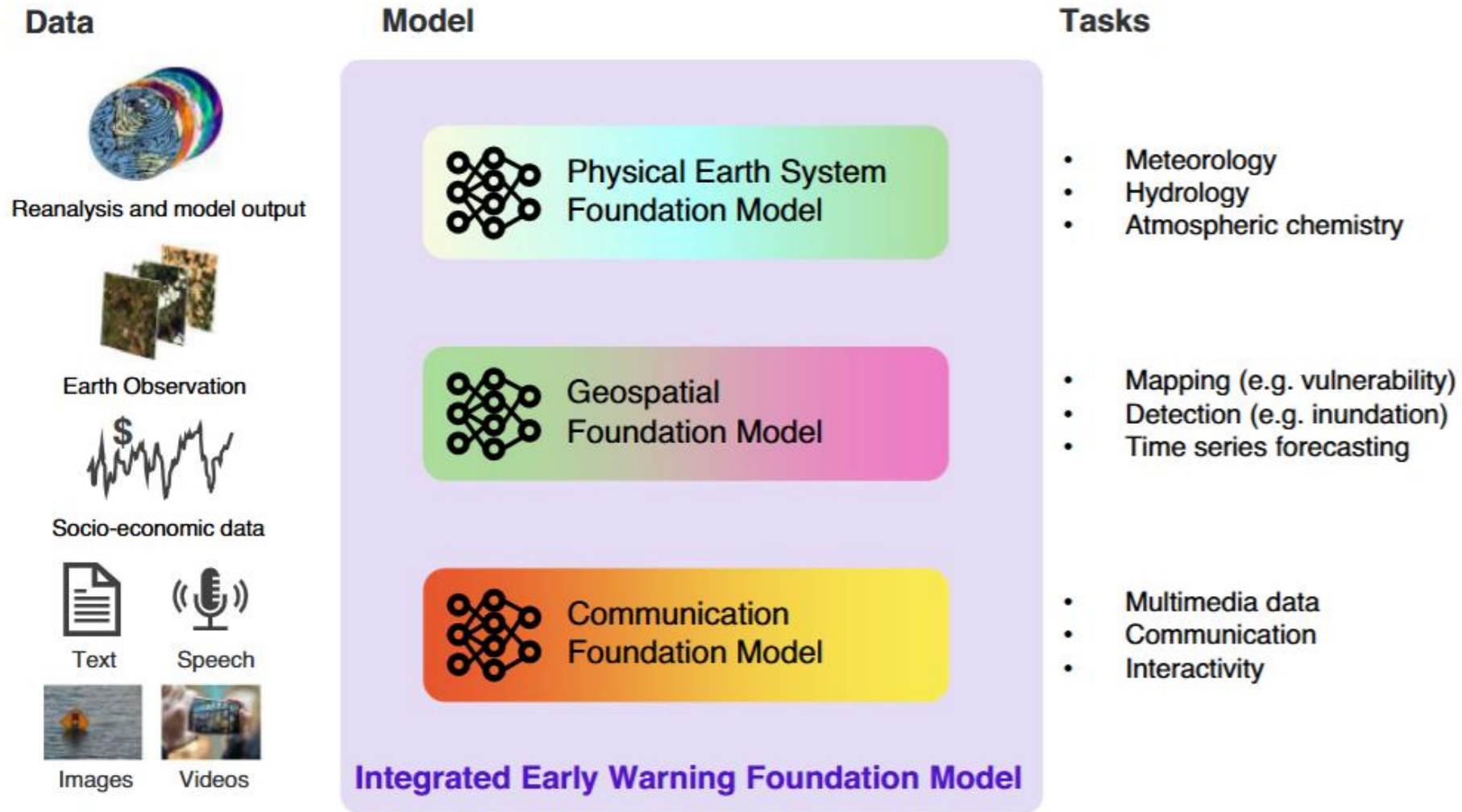


Fig. 3 | Vision for an Integrated Early Warning Foundation Model. Integration of currently developed foundation models into a modular Early Warning Foundation Model (center) allowing for ingestion of diverse data (left) and for addressing prediction and communication tasks (right).

INTELLIGENT CLIMATE and ECO-ENVIRONMENT

Bridging AI, Climate Science and Environmental Health



RENHE ZHANG

Fudan University, China

• Committee co-chair



DREW SHINDELL

Duke University,
United States

• Committee co-chair



HONGLIANG ZHANG

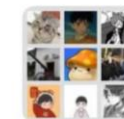
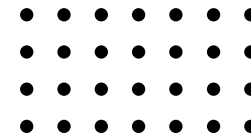
University of Shanghai for
Science and Technology, China

• Editor-in-Chief

- *First Issue Published in 2026*
- *Open Access Fee Waived*
- *Free editing service for invited articles*
- *Annual outstanding papers will be awarded certificates and bonuses*
- *Free promotion for published papers*



<https://www.keaipublishing.com/en/journals/intelligent-climate-and-eco-environment/>



群聊: ICEE 作者群



该二维码7天内(9月4日前)有效, 重新进入将更新

2025

VOL.1 2026

谢谢!



ACES Group

School of Environment and Architecture
Shanghai University for Science and Technology
Email: zhanghl@usst.edu.cn

ACES课题组

上海理工大学
环境与建筑学院
zhanghl@usst.edu.cn