

2025年长三角空气质量管理研讨会

多模态数据驱动的空气污染AI预报模型及应用

Zhixin Geng, Xu Fan, Xiqiao Lu, **Yan Zhang**, Guangyuan Yu, **Yuewu Li**,
Cheng Huang, Qian Wang, Weichun Ma, Qi Yu, Libo Wu, **Hao Li**

¹复旦大学

²上海科学智能研究院

³上海市环境监测中心

时间：2025年8月29日



PART 1

研究背景



PART 2

模型构建及应用



PART 3

模型性能检验

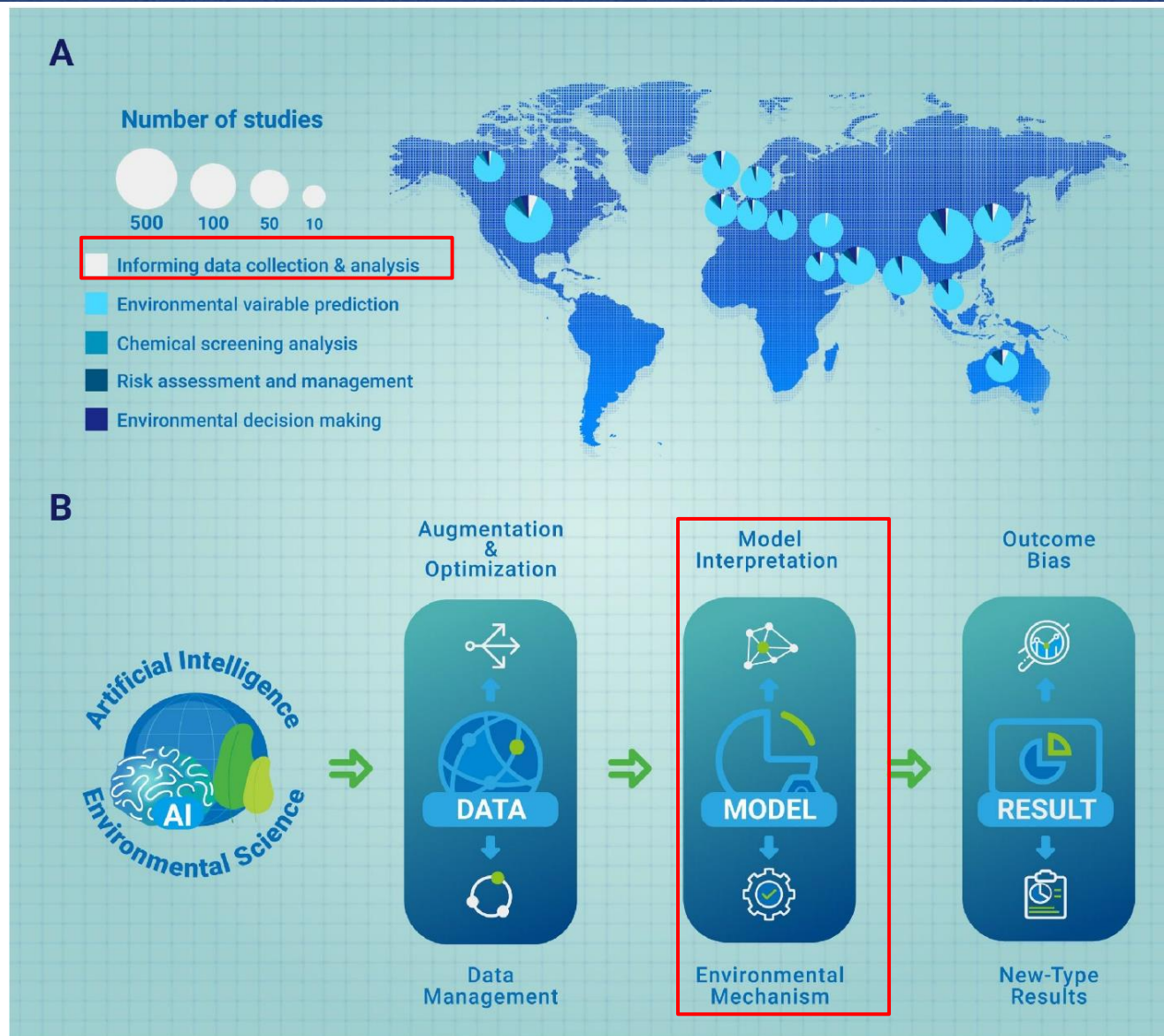


PART 4

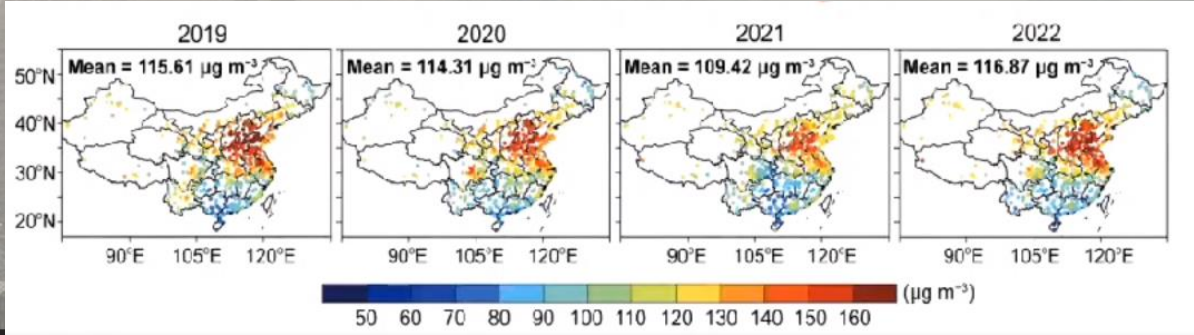
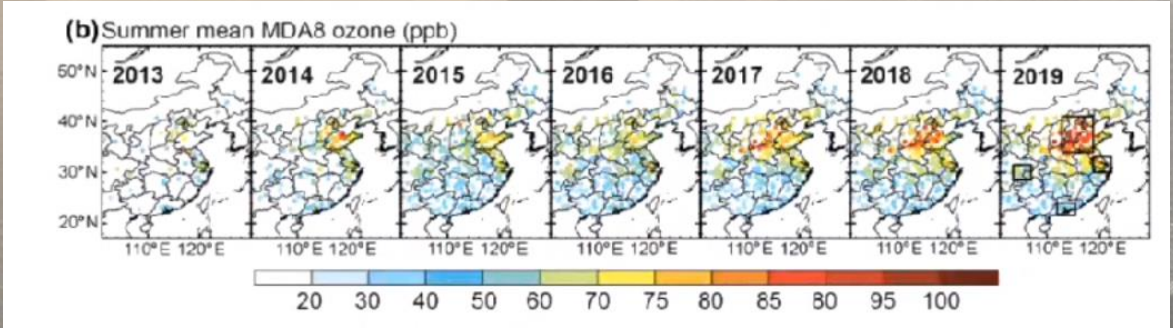
问题和挑战

AI技术浪潮正在对环境科学领域产生巨大的影响

Wang et al., The Innovation Geoscience, 2023



空气污染的形势与挑战，智能预报意义重大



AI system can predict air pollution before it happens

指数		浓度		范围		开始时间		结束时间		搜索	导出
序号	日期	PM _{2.5}	PM ₁₀	O ₃	SO ₂	NO ₂	CO	实时指数	质量评价	首要污染物	
1	2025-06-09	19	19	35	6	29	15	35	优	-	
2	2025-06-08	18	13	48	6	23	13	48	优	-	
3	2025-06-07	32	41	33	6	35	15	41	优	-	
4	2025-06-06	28	42	109	7	22	13	109	轻度污染	O ₃	
5	2025-06-05	30	37	130	8	35	13	130	轻度污染	O ₃	
6	2025-06-04	62	50	162	7	34	18	162	中度污染	O ₃	
7	2025-06-03	36	36	106	7	24	18	106	轻度污染	O ₃	
8	2025-06-02	15	13	53	5	20	15	53	良	O ₃	
9	2025-06-01	15	14	83	5	12	13	83	良	O ₃	



空气质量预测模型的发展

空气质量预测模型

机制驱动模型
基于物理化学机理，考虑复杂的过程变化

优点 物理化过程提供可靠的解释
更适合高精度和高置信度的预测场景

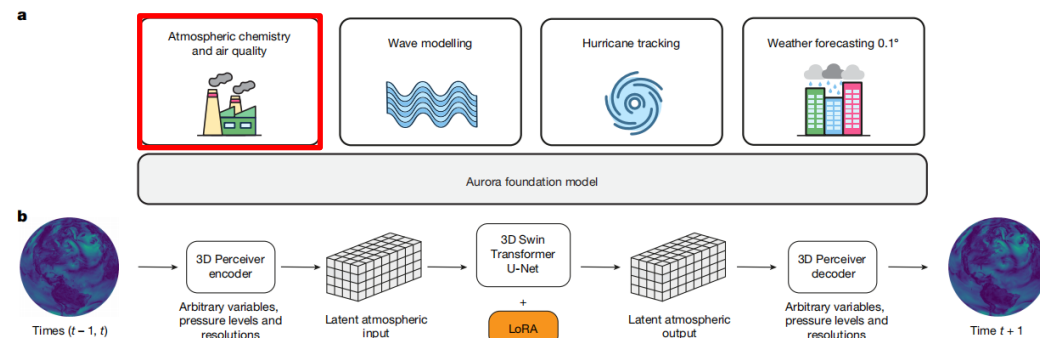
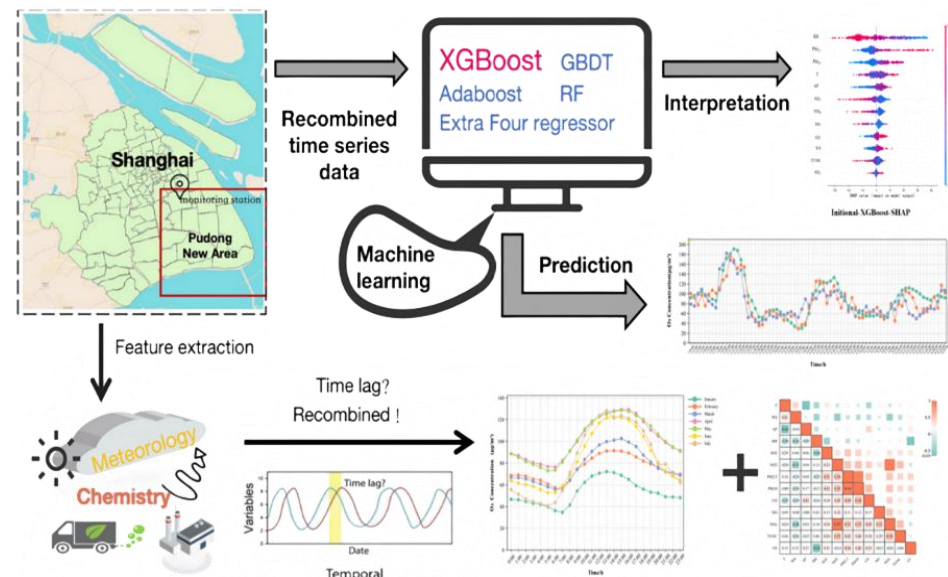
缺点 需要大量的理论知识和先验信息，以及复杂且计算要求高的计算

数据驱动模型
基于统计和机器学习技术，无需了解具体理化过程

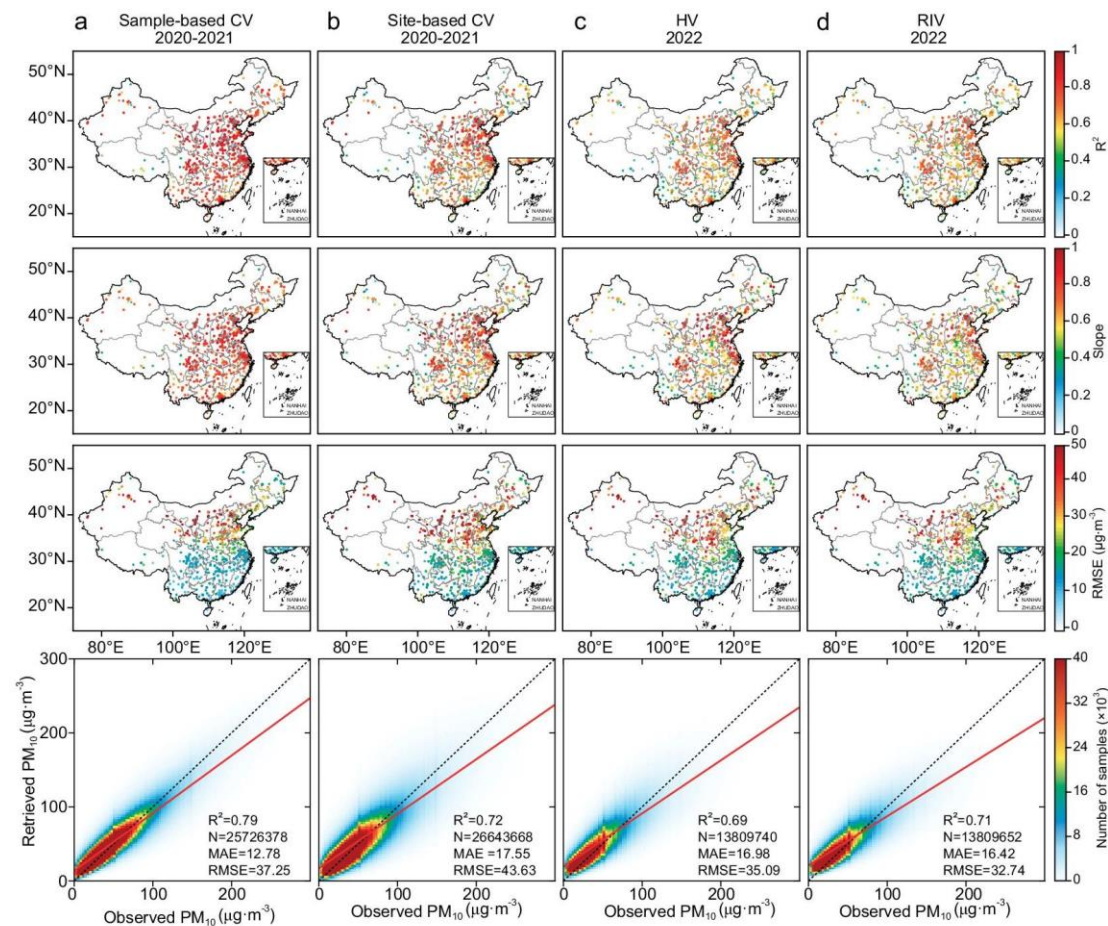
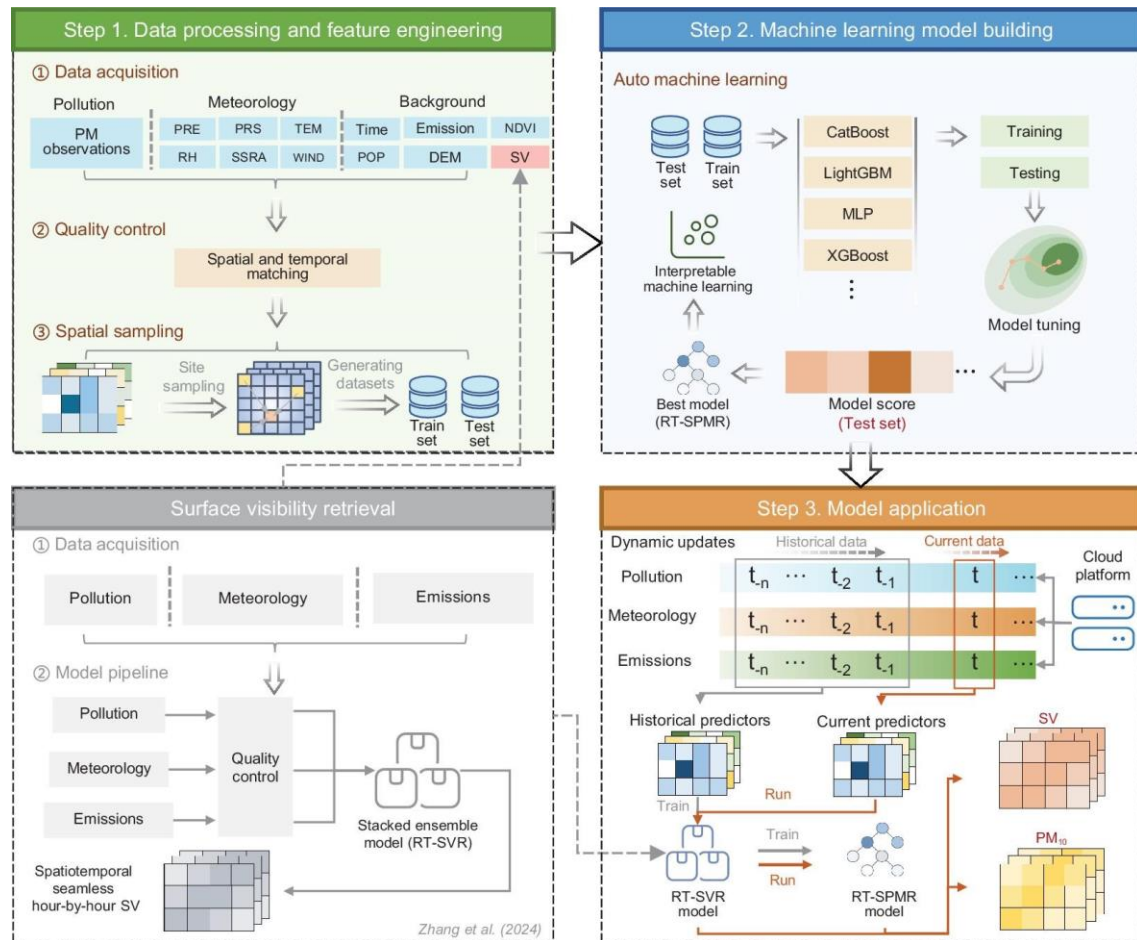
优点 可以捕捉影响空气质量的多个因素之间的复杂非线性关系适用于大规模和非线性问题

缺点 会受到过度拟合的影响缺乏物理化学解释性

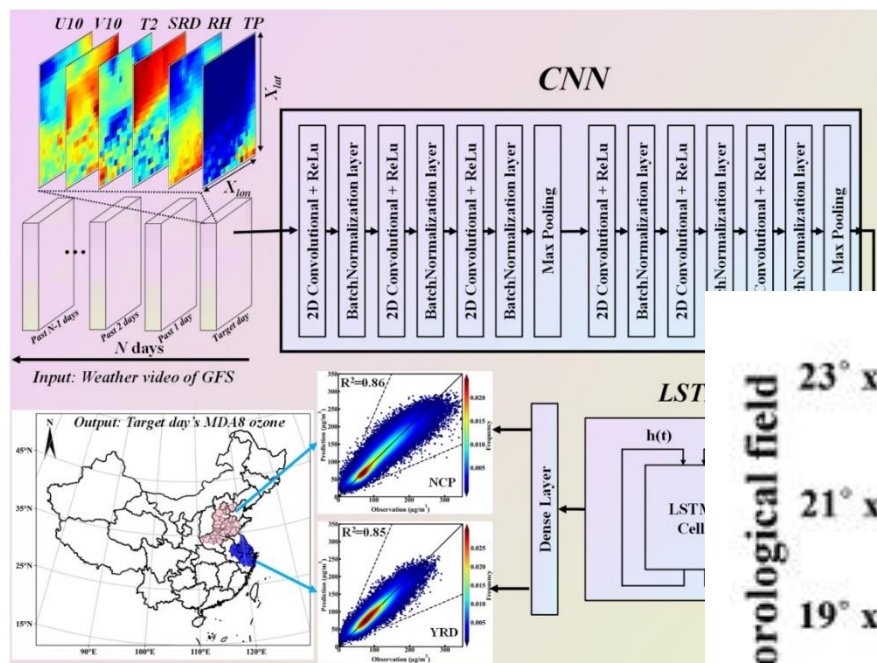
✓ AI技术的发展为大气环境精准预警提供了可能



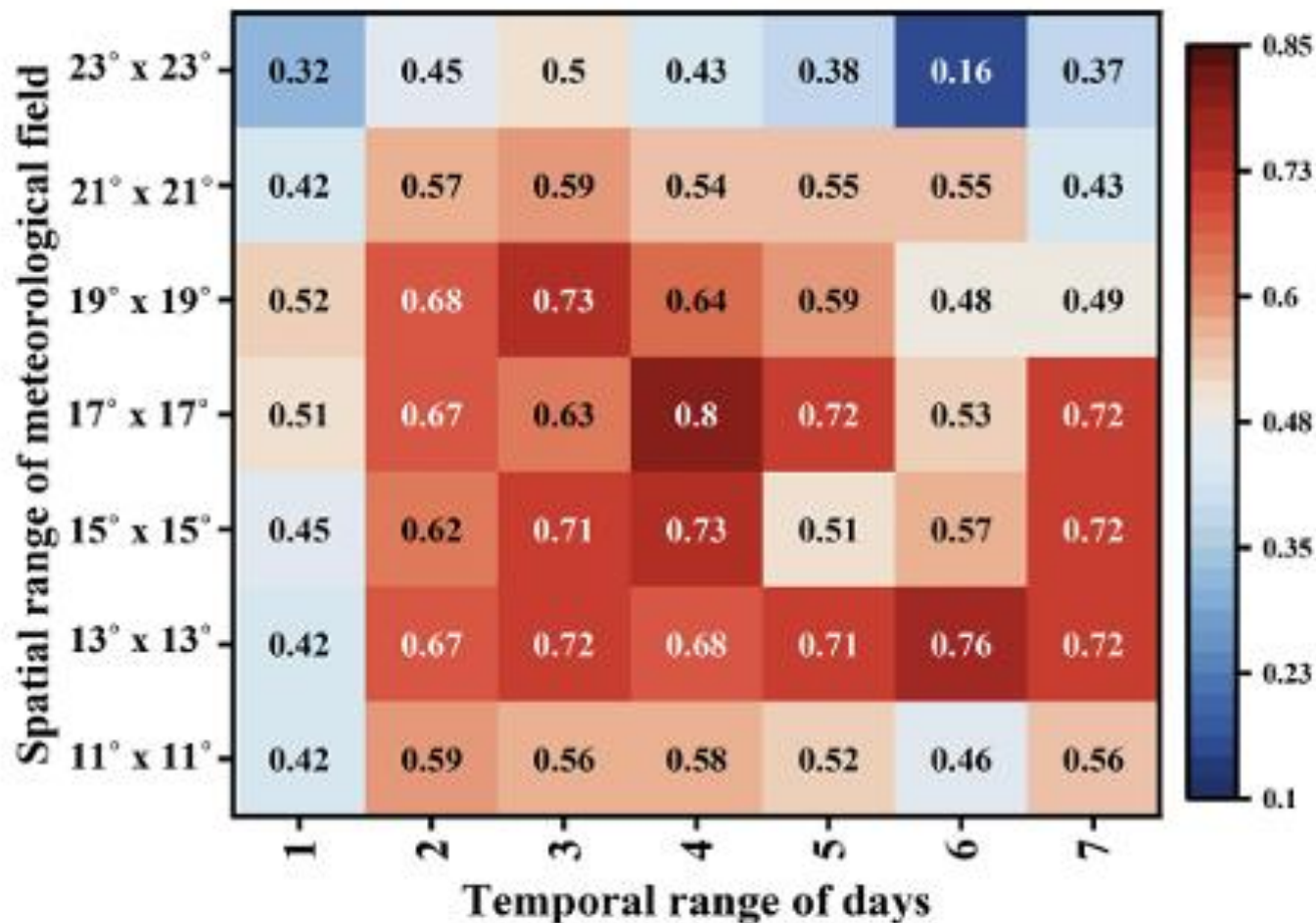
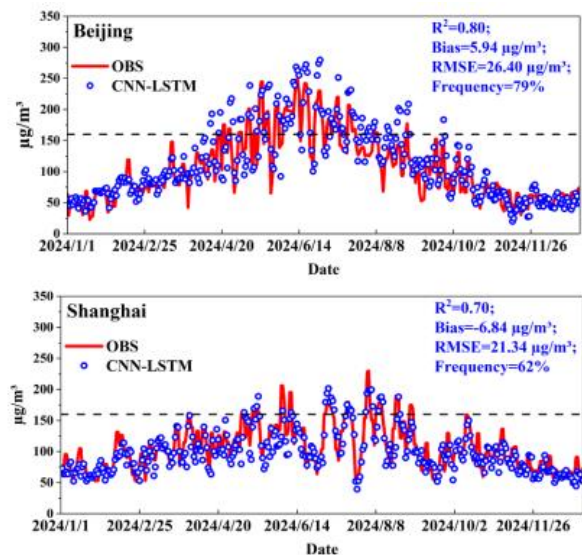
基于机器学习和卫星观测数据反演填补24小时周期内无缝实时PM₁₀浓度



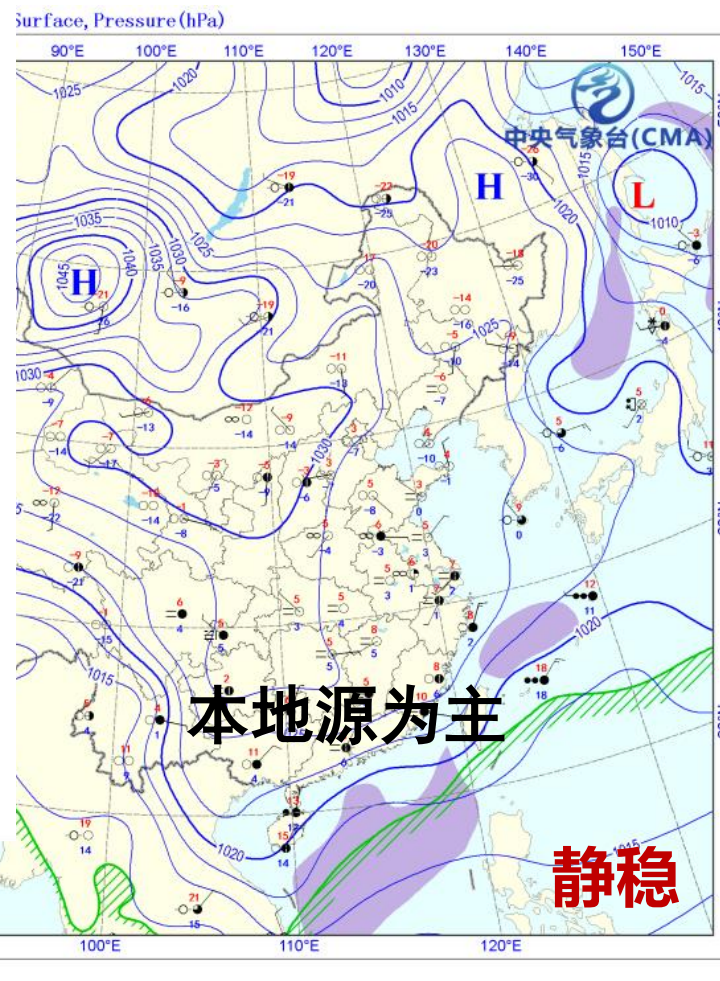
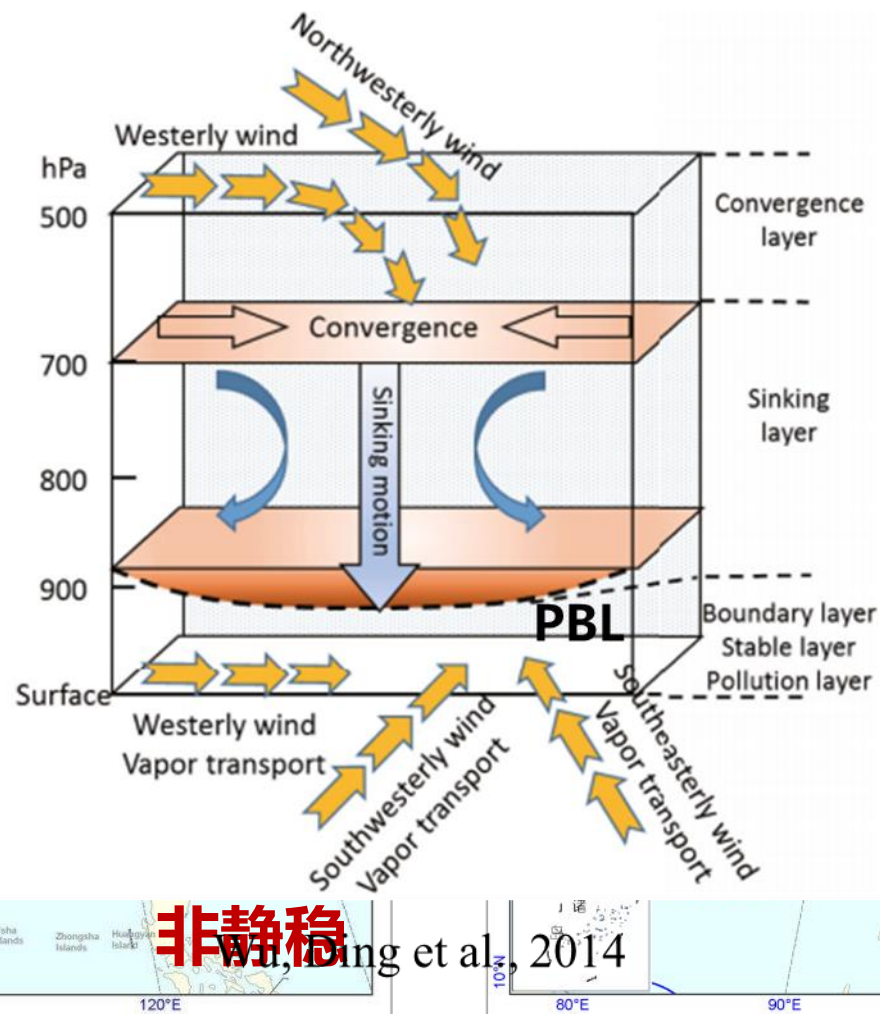
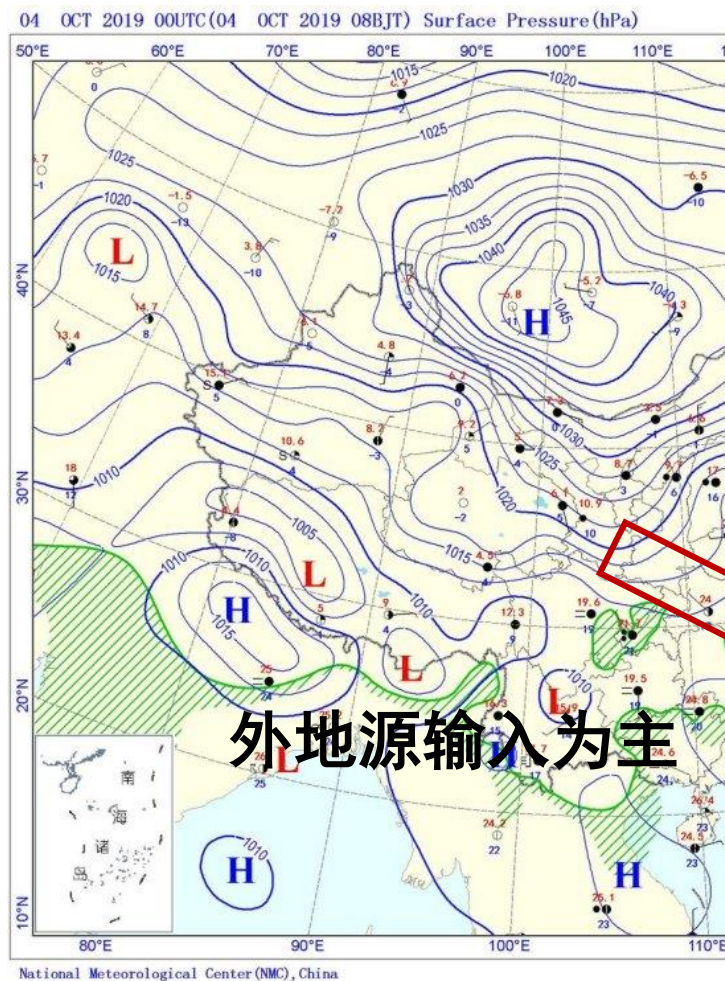
审图号: GS京(2024)2484号



基于气象预报数据和CNN-LSTM框架，建立了多尺度天气过程与臭氧浓度**日际**变化的精准映射模型,可在不同场景下预测臭氧浓度和高浓度污染事件。



天气形势为空气污染提供“驱动力”场



天气形势对空气污染事件起着重要作用



多尺度大气污染源排放提供“物质”场

污染源排放对空气污染事件起着“根本”作用

全球尺度

- 全球性大气物理化学过程研究、污染物长距离传输、地球大气-生态圈循环过程以及气候问题
- 主要关注温室气体、臭氧前体物、含碳气溶胶以及其他持久性污染物
- 主要“自上而下”，大的排放部门
- 典型分辨率0.5°

国家尺度

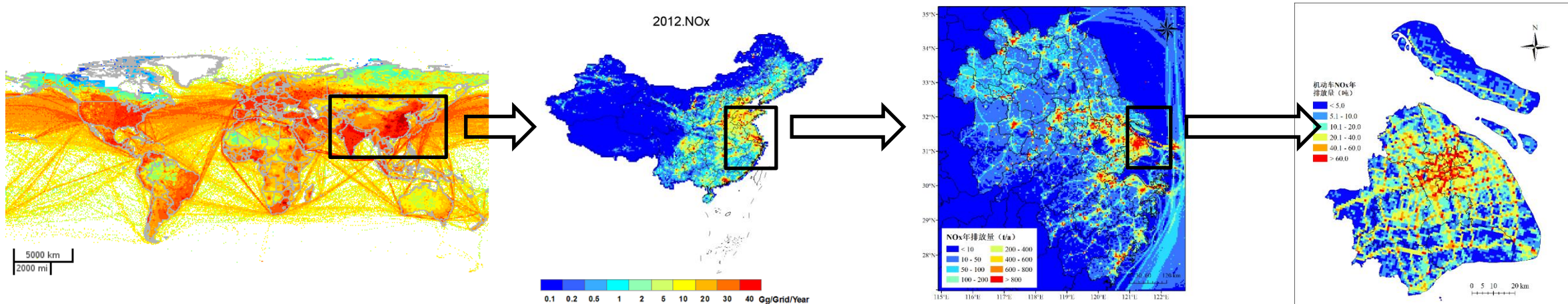
- 解决国家总量控制和空气质量宏观管理
- 致酸物质SO₂和NO_x、臭氧前体物NO_x和VOCs，颗粒物及其他污染物
- 以“自上而下”为主，大的排放部门
- 典型分辨率36km

区域尺度

- 污染物在区域大气环境中转化、迁移及传输机制，服务于区域空气质量预报预警及控制对策制定
- 基本覆盖主要大气污染物
- 以“自下而上”为主，“自上而下”为辅，排放行业较为丰富，并关注排放的时间、空间和化学物中特征
- 典型分辨率4km

城市尺度

- 服务于城市空气质量管理，污染防治措施制定
- 基本覆盖主要大气污染物
- 主要是“自下而上”，部分可达到排放设备
- 典型分辨率1km



- 结合傅立叶神经算子与ViT架构, 构建**首个0.25°分辨率中期预报模型**
- 预测精度在短期内超越IFS

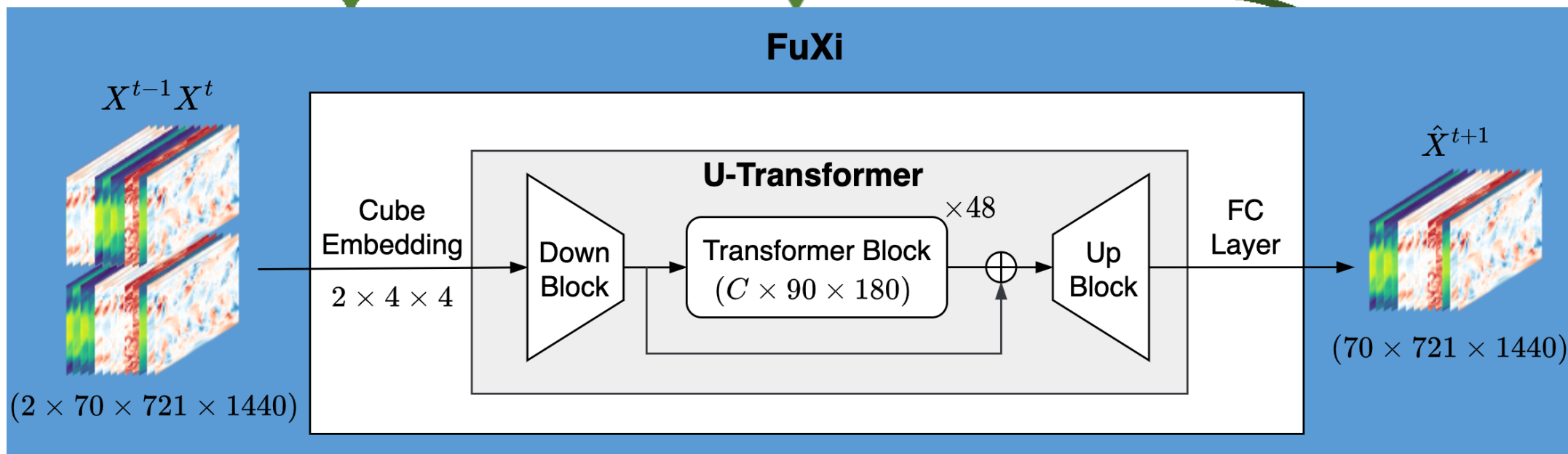
FourCastNet
2022.02

- 采用基于正二十面体网格的Encoder-Processor-Decoder架构
- 将垂直层增加至37层

GraphCast
2022.12

- 基于U-Transformer架构, 并采用微调级联模型
- 首个提供15天的全球预报的AI模型**

Fuxi
2023.06



2024.07

- 传统物理建模与AI技术相结合, 解决了传统**大气环流模型**在应对复杂气候问题时的局限性

2024.06

- 在**不到一分钟内提供高达10天**的精确天气和空气污染预报

2023.07

- 整合数据、物理驱动方法, 实现**精确极端降水临近预报**

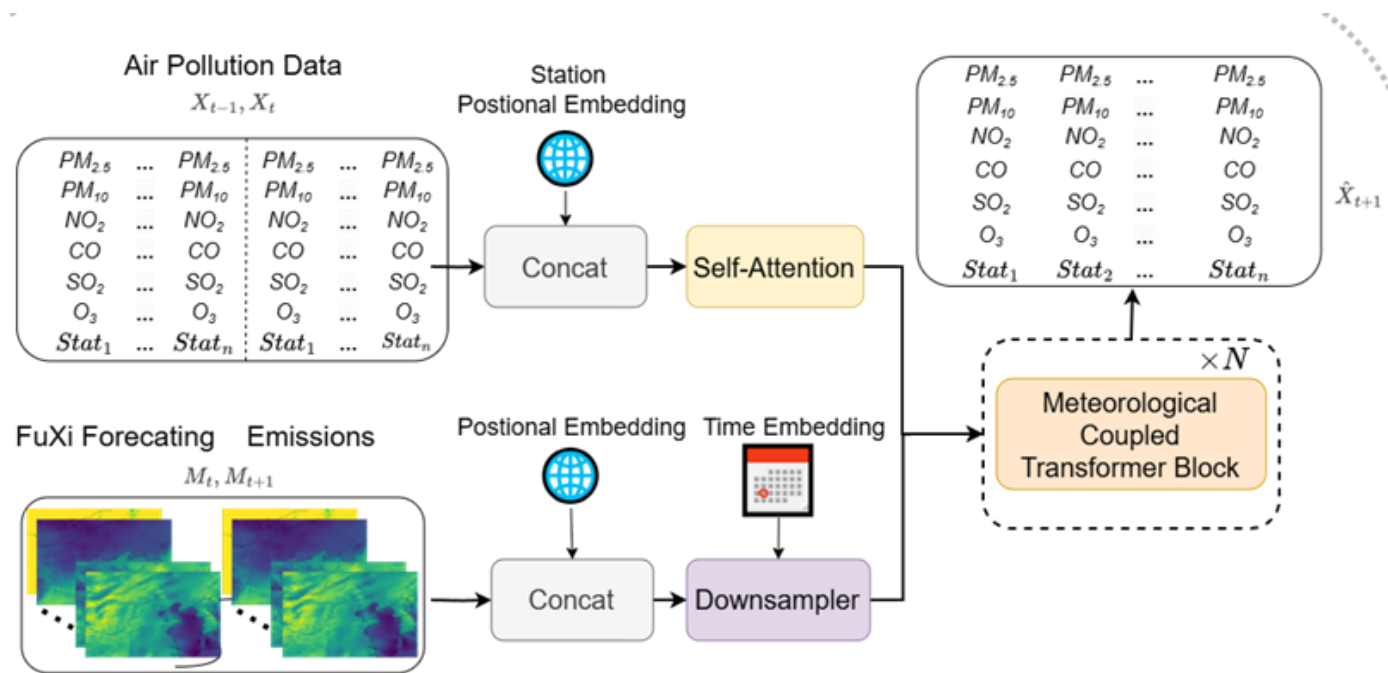
模型构建思路

模型方案设计主要分为**三个模块**：

1. 站点污染物处理模块
2. 气象要素和排放清单处理模块
3. 特征融合模块

建模中通过Attention方式将站点信息和气象排放要素进行特征融合，最终将站点污染物作为单独的Token，**一次性**可以给出单时次**多站点**的预报。

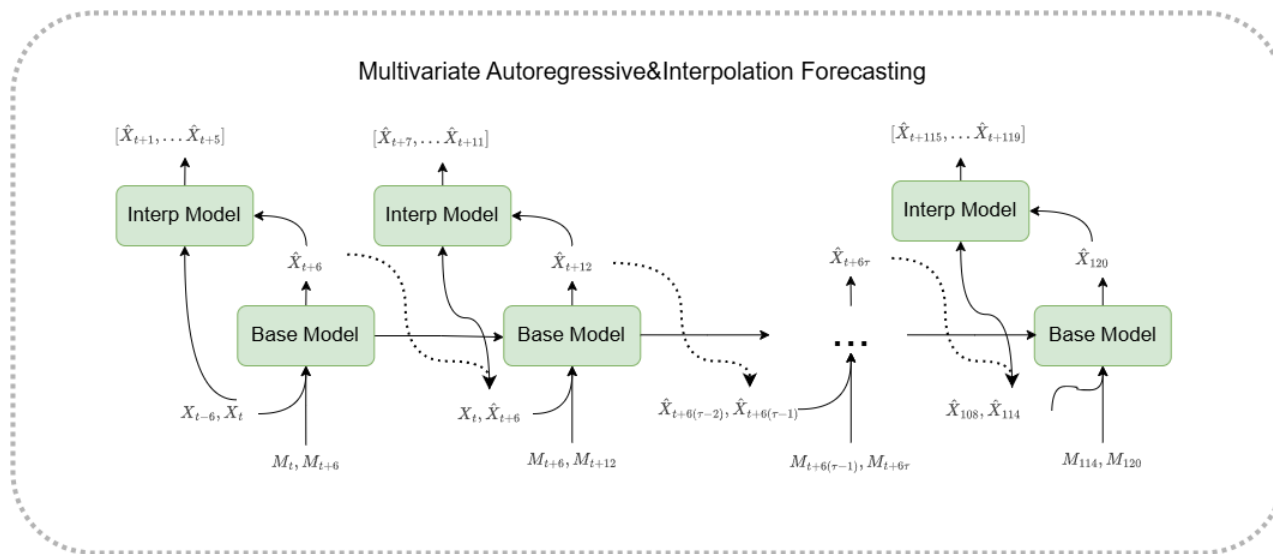
FuXi-AIR: “气象-排放-污染物”耦合的AI预报模型



模型架构图

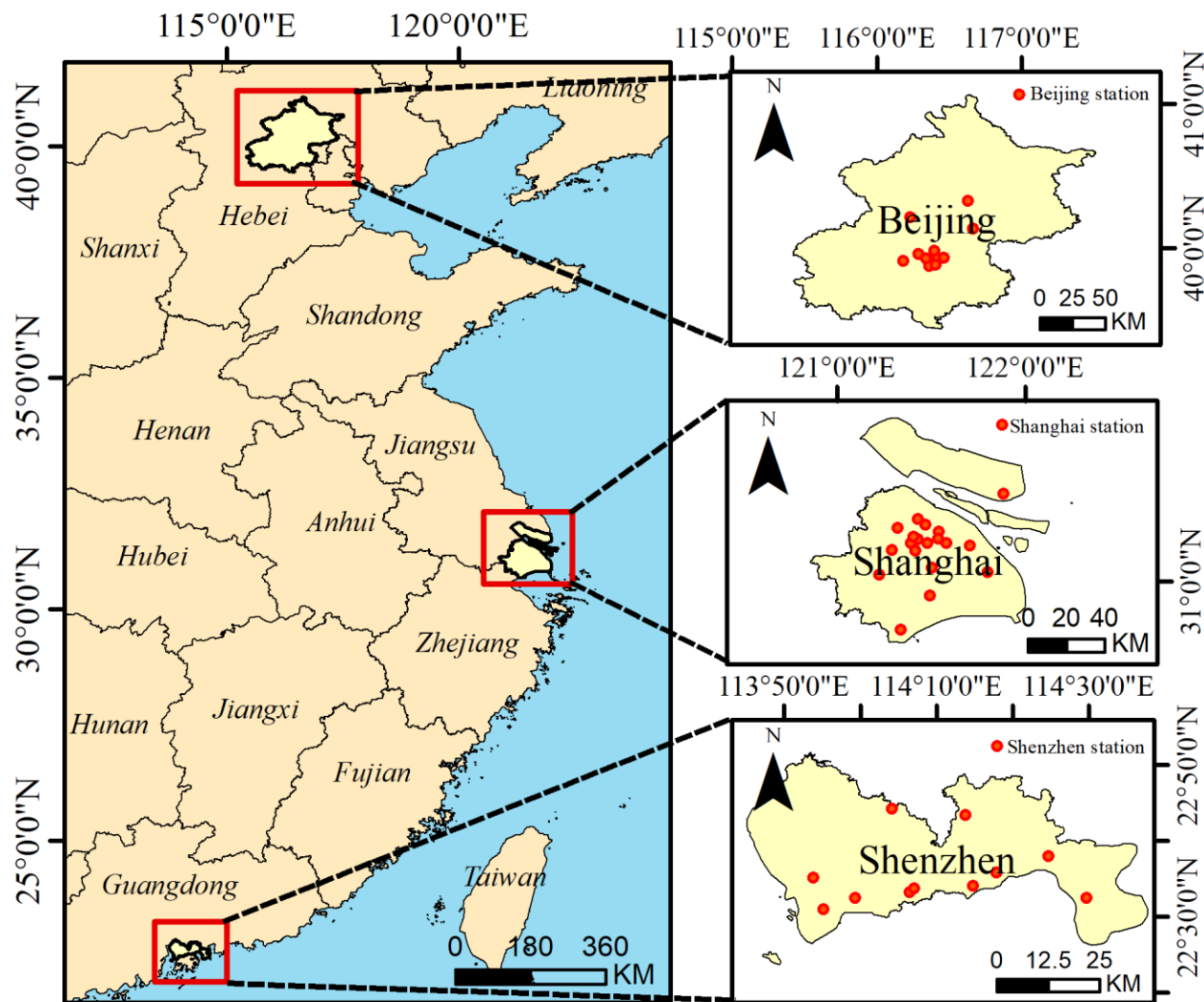
插帧模型:

为降低模型对输入数据的依赖性，基础预测模型的输入仅包含 X_{t-6} 和 X_t 两个时次，并基于自回归策略进行预测，生成6小时分辨率的未来72小时污染物浓度预报（共12个时间步，steps）。在此基础上，插帧模型进一步对6小时模型的输出进行细化预测，补充中间5个小时的数据，以提高小时级预测的准确性。

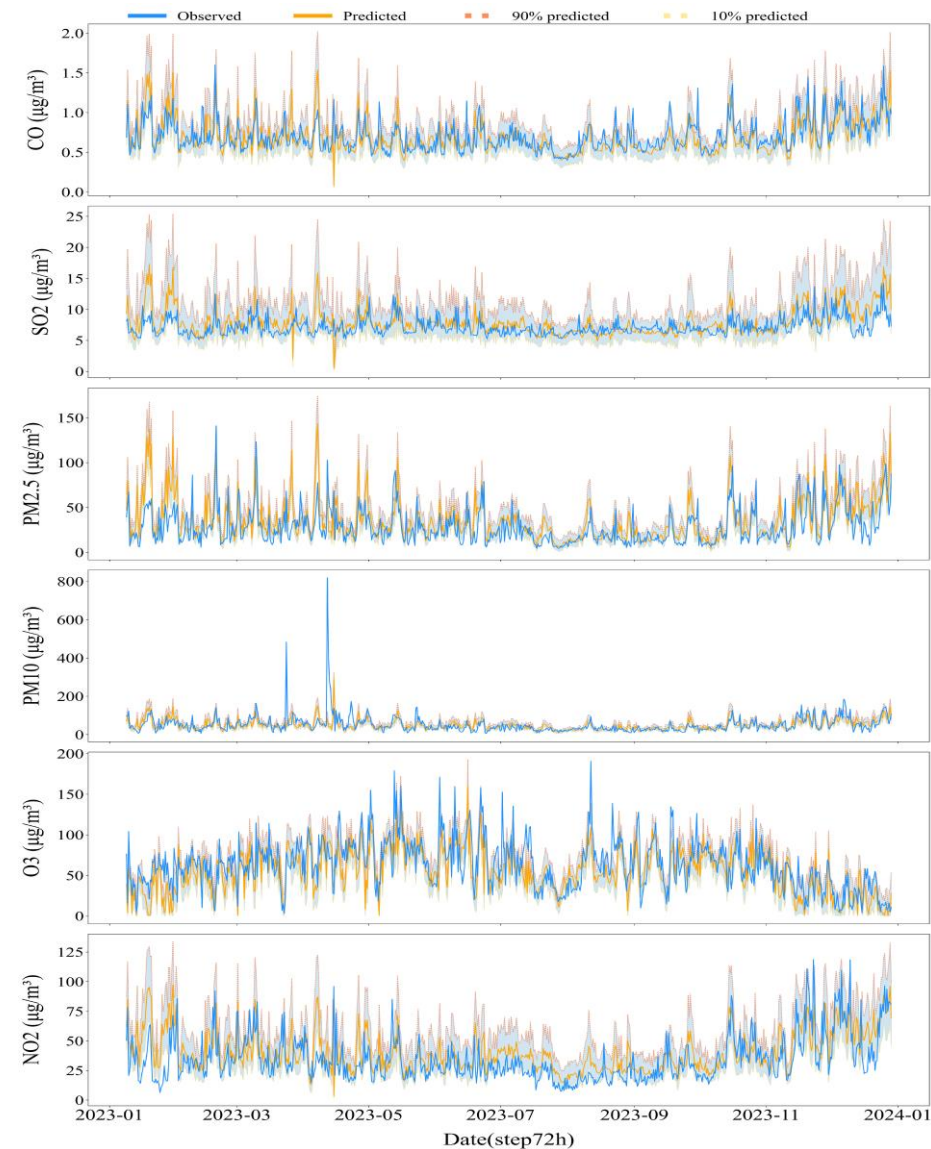


概率预报:

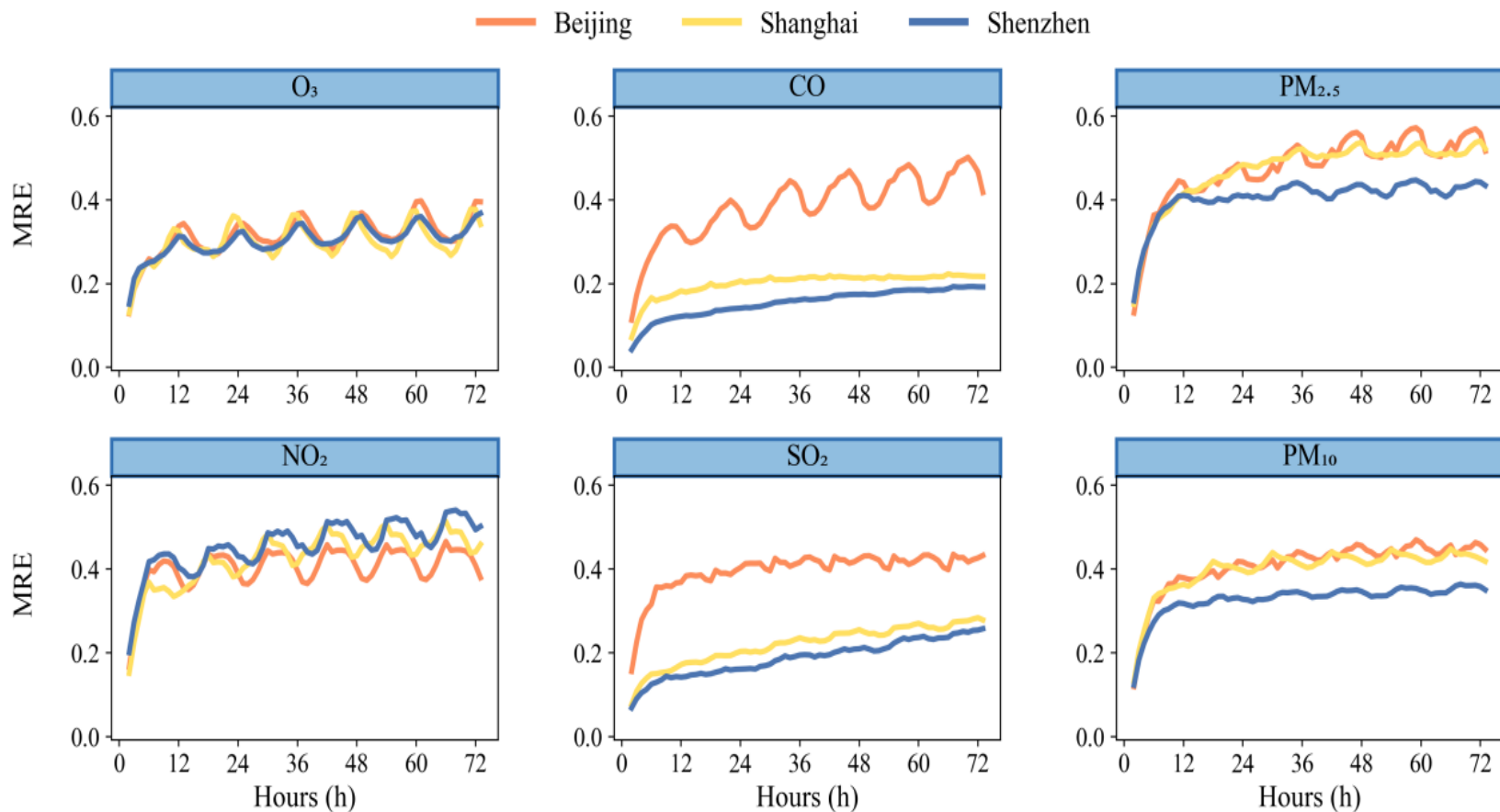
为了有效地学习和优化不同百分位数的预测，我们引入了**分位数损失函数 (Quantile Loss)**。相比于传统的均方误差 (MSE) 或平均绝对误差 (MAE)，分位数损失能够针对不同的污染水平进行非对称优化，使模型能够在不同分位点上学习污染物浓度的变化规律，从而提高对极端污染事件的敏感性，并增强预报的稳定性和可靠性。



Study area and site distribution map



Comparison of Shanghai's 72-hour weather forecast results



模型在不同城市间表现出良好的泛化性，其中 **O₃** 的跨城市差异最小；北京在 SO₂、PM_{2.5} 和 PM₁₀ 上MRE相对较高，上海次之，而深圳 PM_{2.5} RMSEavg 仅为 9.68 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ，体现出模型在低变异性条件下的稳健性及对城市尺度污染动力学的刻画能力。

数据集选择对建模影响的系统评估测试

1. 探究清单和气象条件对建模的影响

2. 六组消融实验结果对比

3. PM_{2.5}和O₃等污染过程预报效果对比分析

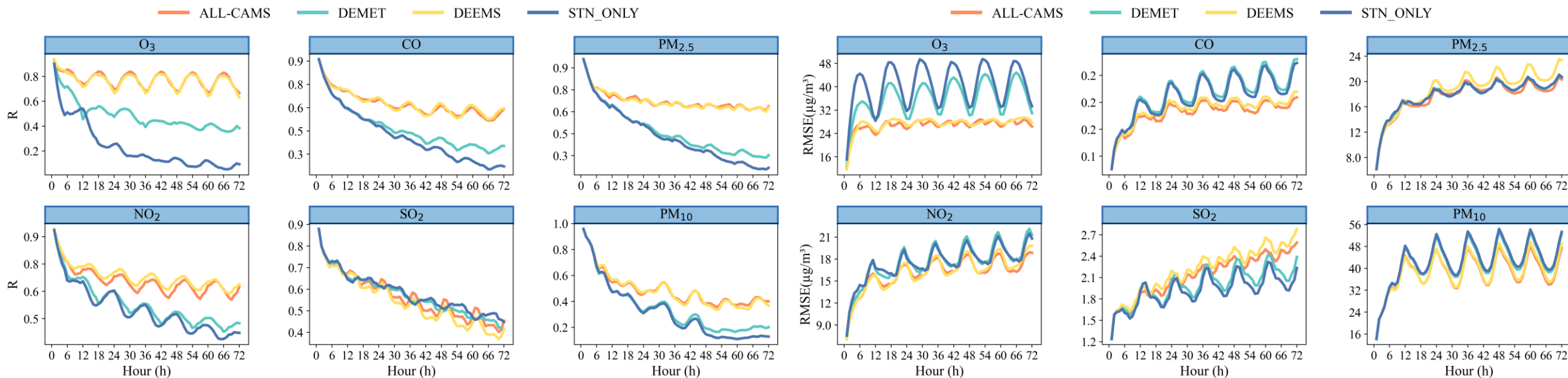
Table 1. Statistical summary of six ablation experiment groups

Exp. ID	Description	Data Types
a	All data included (ALL-CAMS)	CAMS, ERA5, FuXi, station pollutant data
b	All data included (ALL-MEIC)	MEIC, ERA5, FuXi, station pollutant data
c	Excluding meteorological data (DEMET-CAMS)	CAMS, station pollutant data
d	Excluding meteorological data (DEMET-MEIC)	MEIC, station pollutant data
e	Excluding emission inventory data (DEEMS)	ERA5, FuXi, station pollutant data
f	Only station pollutant data (STN_ONLY)	Station pollutant data

✓ CAMS-GLOB-ANT:

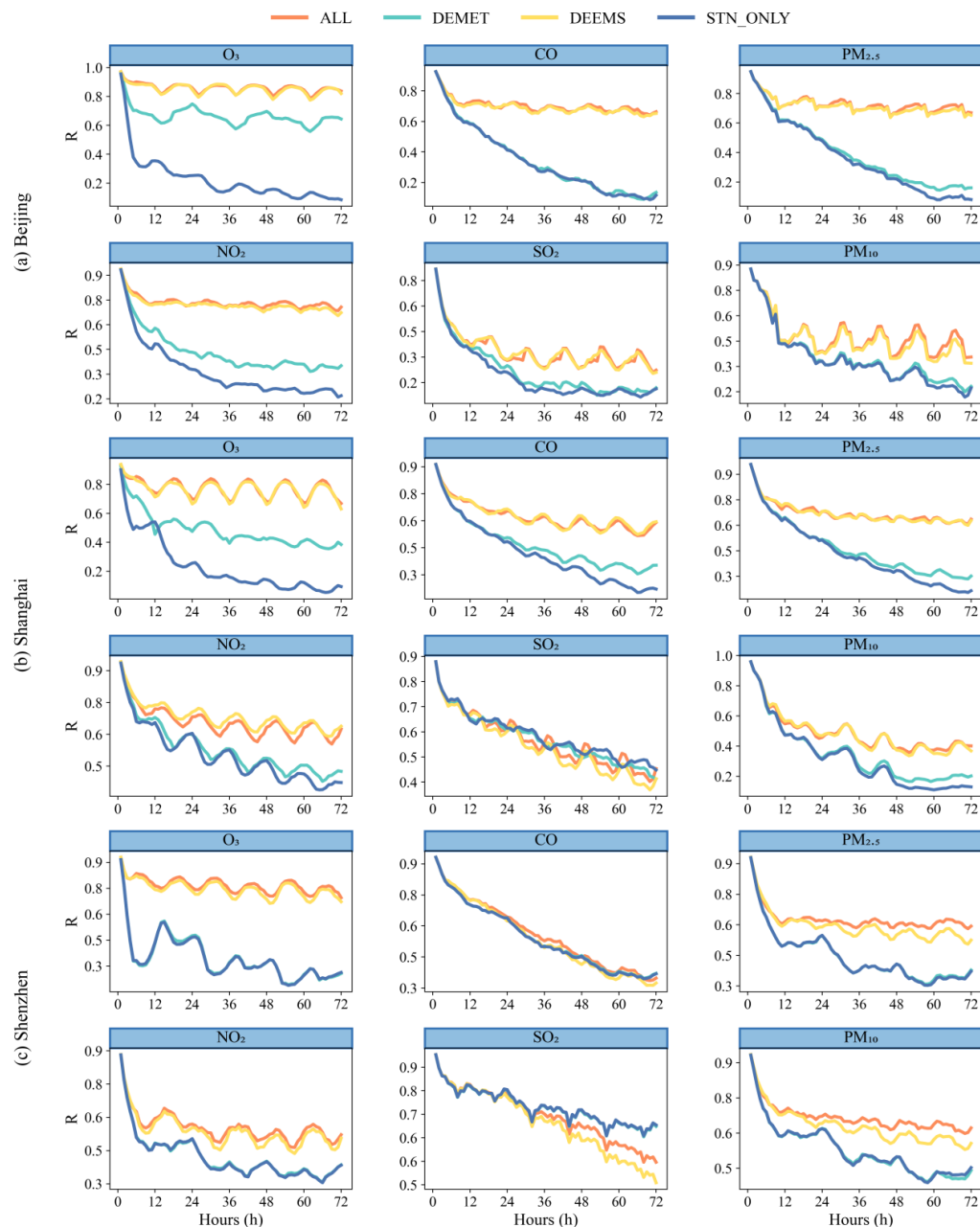
欧盟哥白尼大气监测服务（CAMS）开发的高分辨率全球人为排放清单。该数据集包含17个经济部门（如交通、能源、工业等）的36种大气成分（如NO_x、SO₂、CO、PM_{2.5}、CO₂等），覆盖年份为2000-2023年，排放量以月平均值提供，空间分辨率为0.1°×0.1°。

气象-排放清单消融实验结果



◆ 多源数据融合模型展现出最优的预测性能；气象数据对模型性能的改善显著优于排放清单

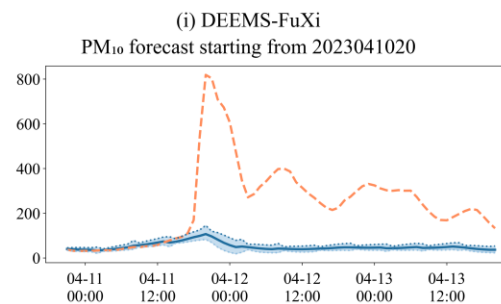
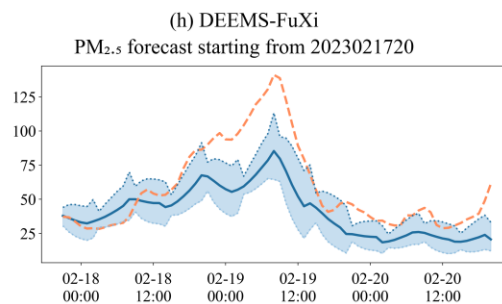
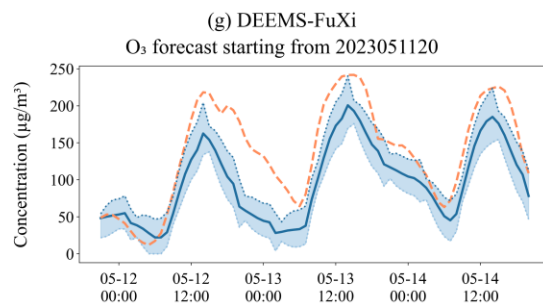
- ALL-CAMS组展现出最优的预测性能：从O₃、PM_{2.5}主要污染物来看，R分布在0.6-0.82区间，89%实验的RMSE显著降低；而STAN_ONLY组则表现出显著的局限性（R<0.5，RMSE普遍偏高）
- 气象数据对模型性能的改善显著优于排放清单。以O₃为例，DEEMS组与DEMET组相比1-72步的 ΔR_{avg} 提高0.28， $\Delta RMSE_{avg}$ 降低8.94 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 。



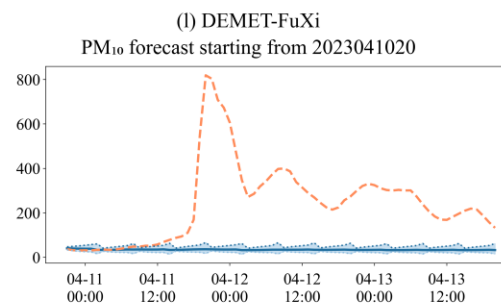
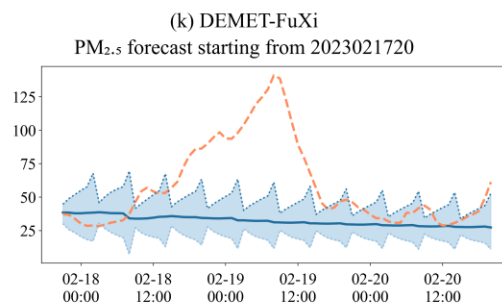
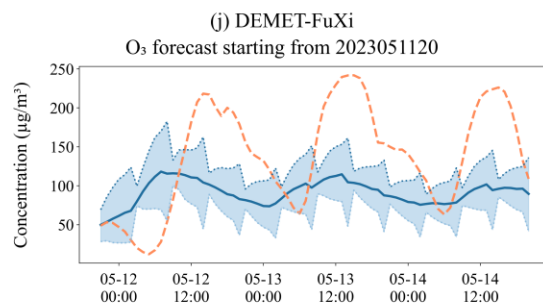
- O_3 预报中纳入气象因子使相关系数 R 提高了 0.64, RMSE 降低了 $23.38 \mu\text{g}/\text{m}^3$, 这一改进幅度优于单独引入排放清单的效果 ($\Delta R = 0.44$, $\Delta \text{RMSE} = 11.04 \mu\text{g}/\text{m}^3$)。
- 气象变量在捕捉污染趋势和峰值响应中的主导作用。然而, 也观察到耦合衰减效应: 在多源输入情景下, 气象的贡献有所减弱 ($\Delta R_{\text{max}} = 0.45$, 小于单一输入情景下的 0.64), 排放清单起到明显作用。
- 气象-排放的耦合作用在数据驱动的AI模型中得以体现!

典型污染过程与观测值对比图

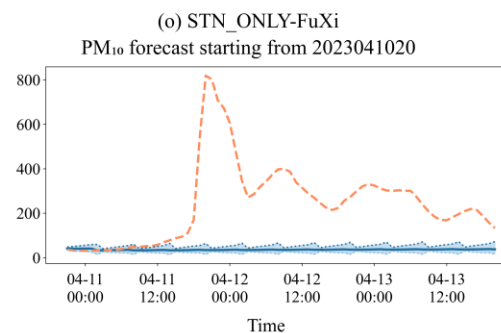
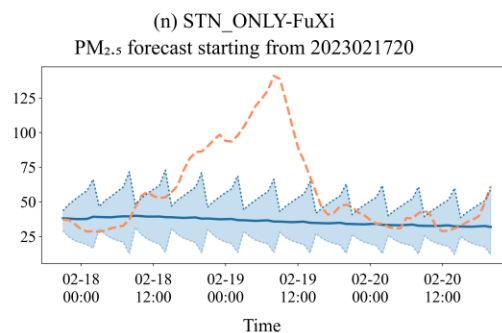
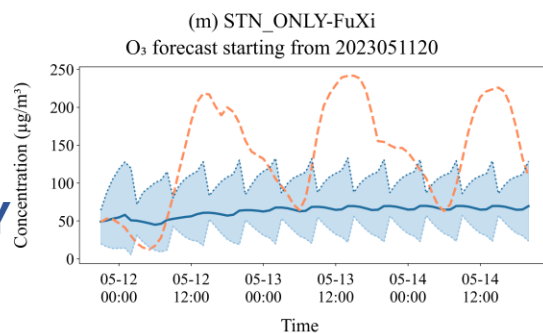
DEEMS



DEMET



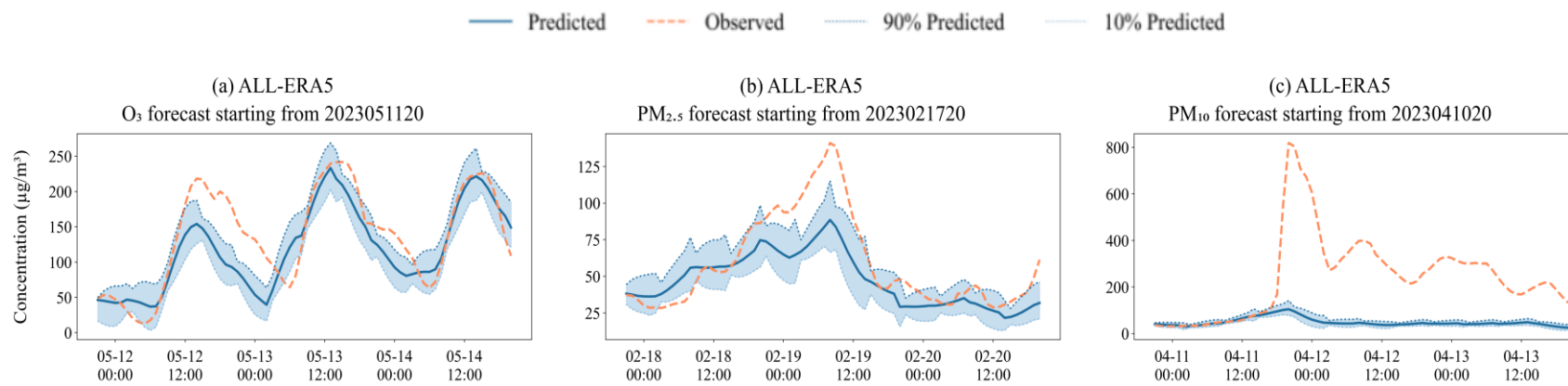
STAN_ONLY



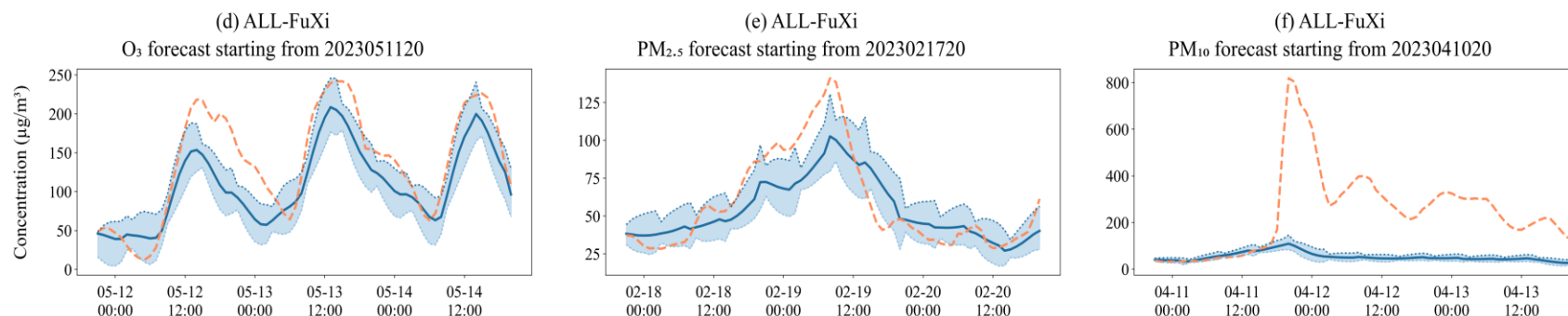
- 去除排放清单导致模型模拟精度下降，峰值降低。
- 去除气象数据导致模型无法捕捉污染物浓度波动的周期性特征和峰值的出现，预测浓度序列趋于平缓。
- 气象条件与本地站点浓度的协同作用仍可微弱反映跨区域输送规律，而去除气象后则完全消除此类响应。

典型污染过程与观测值对比

ERA5

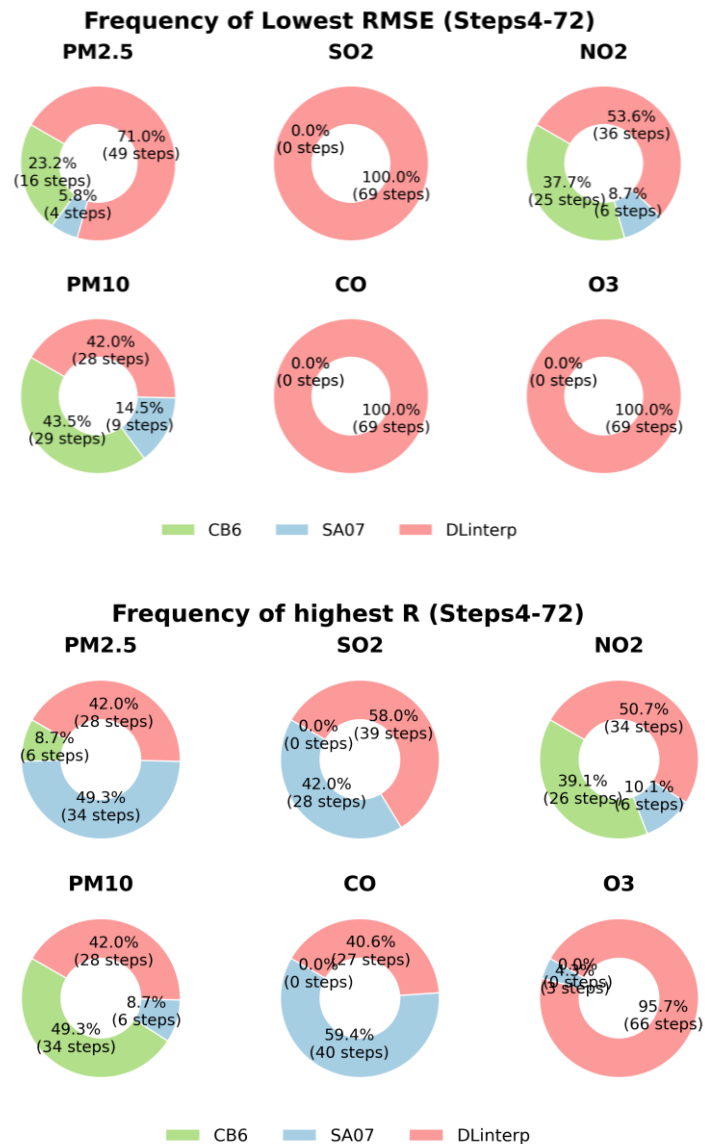
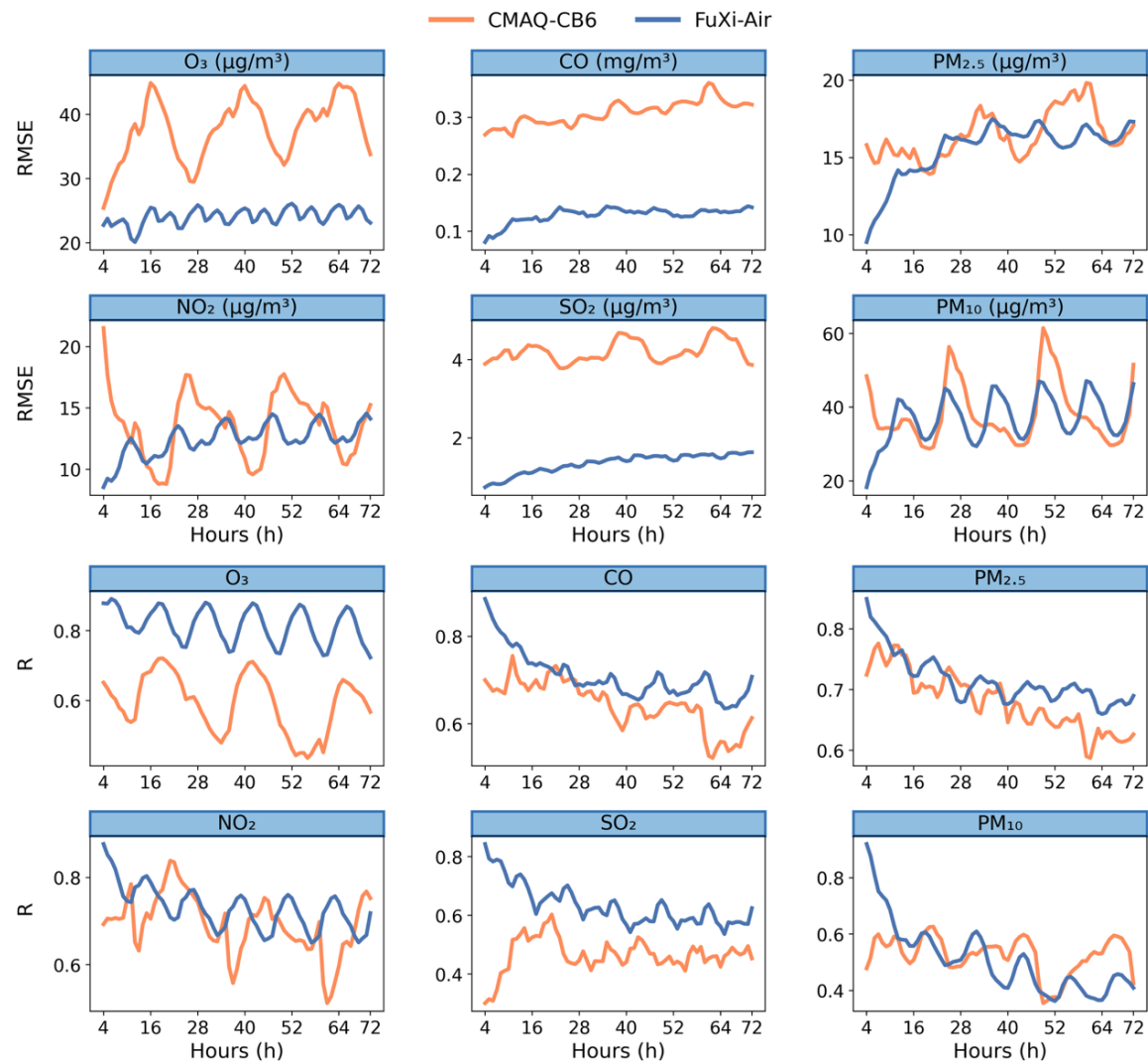


FuXi



- 基于FuXi驱动模型相较于ERA5驱动模型，对PM₁₀、CO、SO₂预测的RMSE_{avg}分别增大0.51、0.01和0.29 μg/m³
- FuXi-Air对O₃、NO₂和PM_{2.5}预测的ΔR_{avg}降幅<0.06，RMSE_{avg}增幅<3μg/m³，展现出与传统再分析数据相近的预报性能

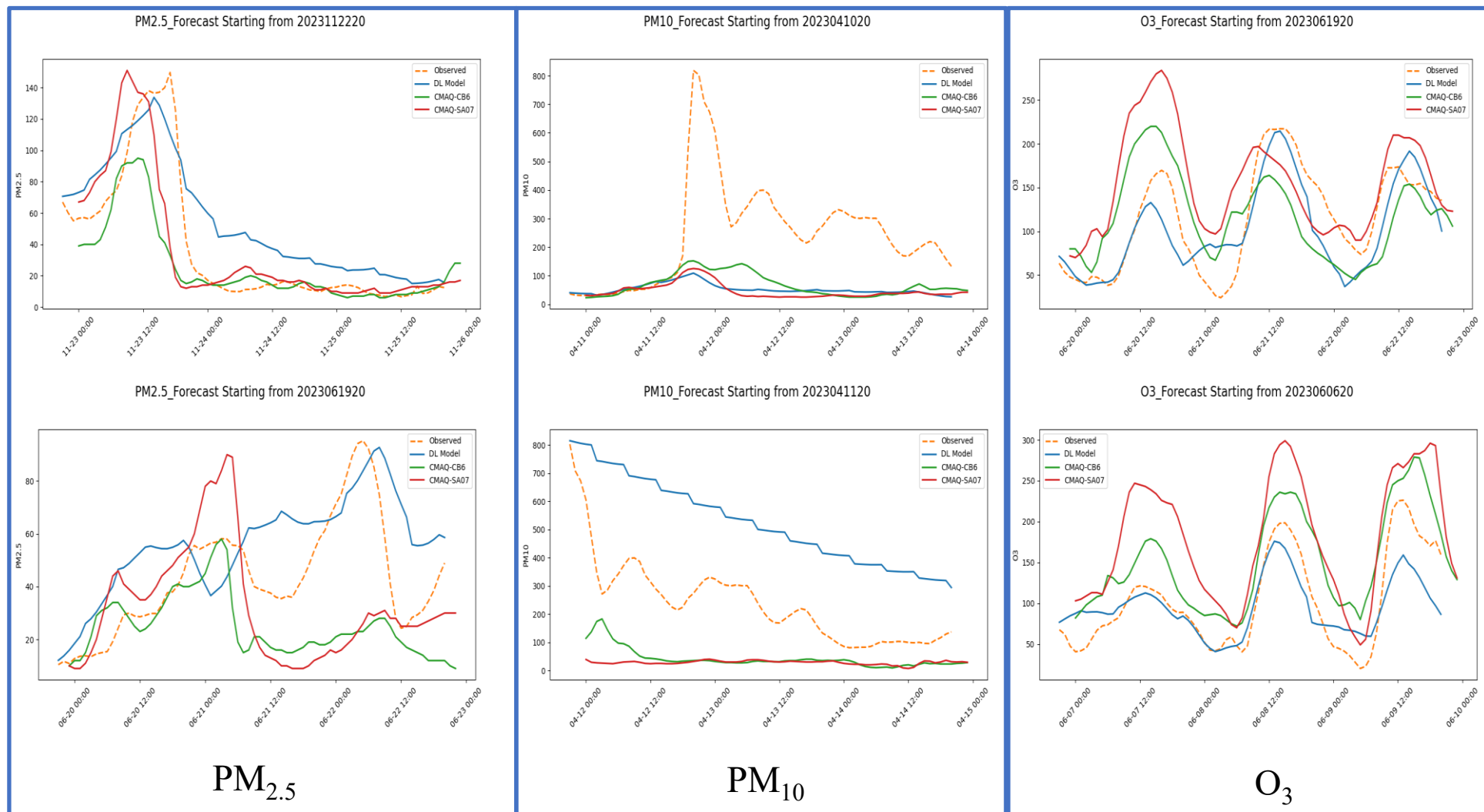
指标评估结果分析



➤ AI预报在六种污染物上，除PM₁₀外，均**优于**两种数值模式（三种100%），其它污染物种表现出明显的优势

➤ PM_{2.5}表现和数值模式接近（71%最好），但RMSE依然明显低于数值模式，PM₁₀和CB6效果接近，相差较小

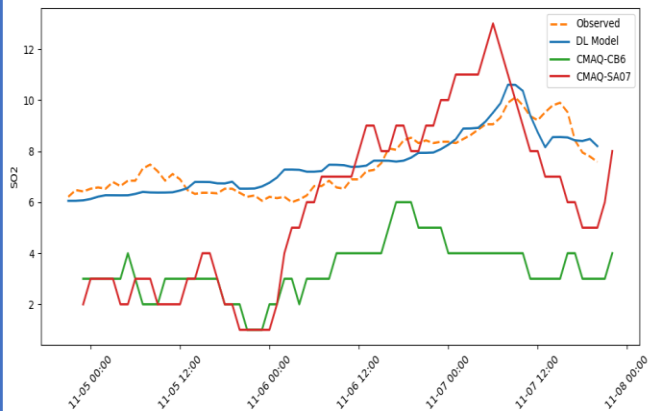
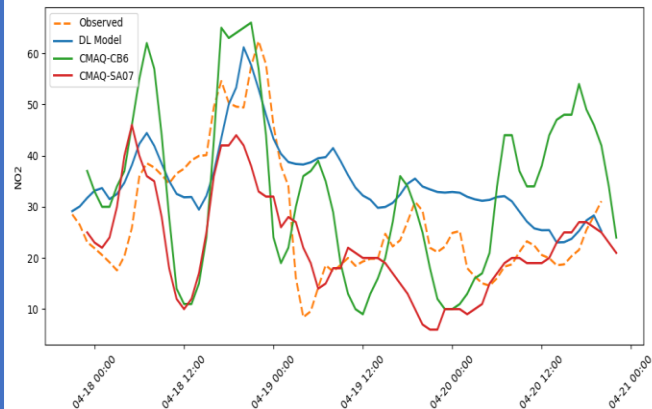
典型污染过程图：AI预报（ALL-CAMS）与数值模式结果



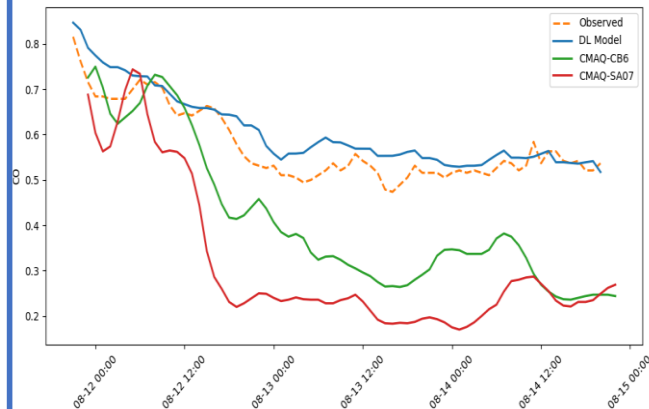
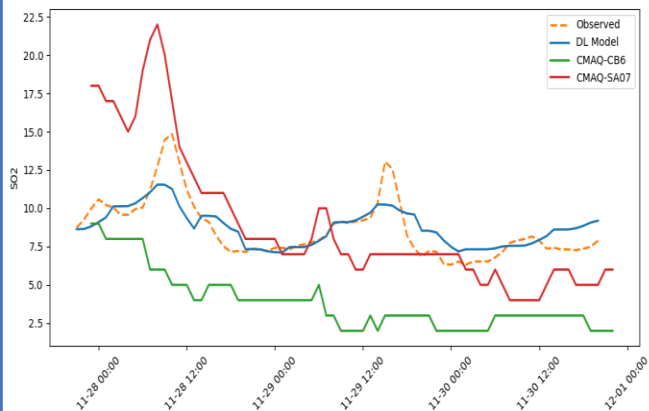
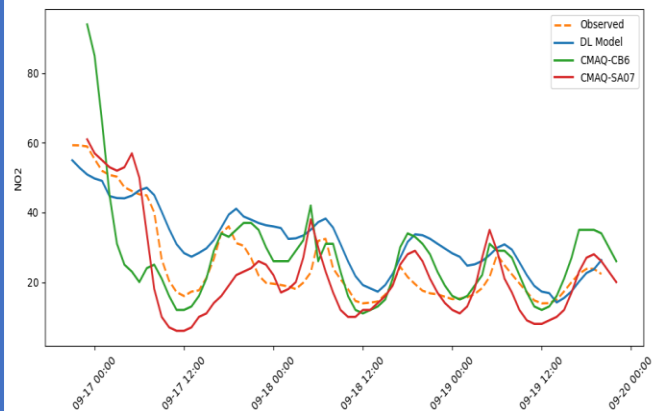
- PM_{2.5}：AI模型整体拟合度优于模式
- PM₁₀：当模型学习到初始浓度后才能够报出高值
- O₃：三种方法在高浓度预报时都较好，模式结果存在高估的现象

AI预报 (ALL-CAMS) 与数值模式结果对比

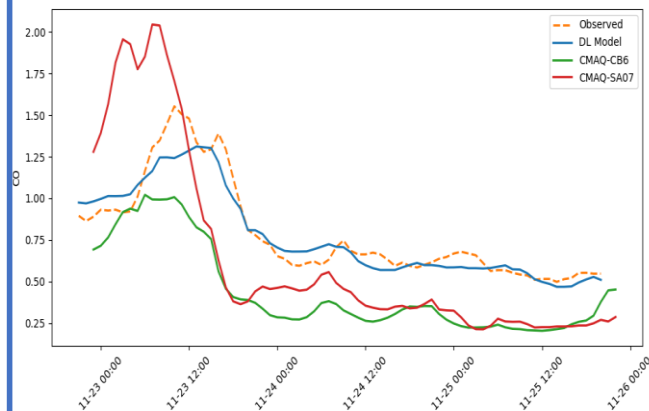
- SO_2 : AI模型在拟合度和高值预报上都大幅度好于模式, 验证了之前的指标评估
- NO_2 : 三种方法预测出了高值
- CO : SA07存在高估现象 (其余物种也存在), AI模型显现优势。

SO₂_Forecast Starting from 2023110420NO₂_Forecast Starting from 2023041720

CO_Forecast Starting from 2023081120

SO₂_Forecast Starting from 2023112720SO₂NO₂_Forecast Starting from 2023091620NO₂

CO_Forecast Starting from 2023112220



CO

- 本研究提出了一种气象-排放-污染物耦合的空气质量预报模型（FuXi-Air）。该模型将 FuXi-2.0 的高分辨率气象预报融入基于注意力机制的框架，实现了城市尺度多污染物的实时、高精度逐时预测。该方法有效克服了传统数值模拟方法存在的效率低、泛化性差和计算成本高等局限性。
- 在北京、上海和深圳的验证结果表明，即使在最长 72 小时的预报时效下，FuXi-Air 依然能够准确刻画区域差异化的污染过程，并能够适应不同城市的污染特征，而城市正是空气质量管理的的基本单元。
- 气象输入与排放清单的耦合显著提升了模型模拟复杂大气污染过程的能力。控制实验中观察到的区域差异进一步凸显了在预报模型中整合多源异质数据的重要性。

More details refer to FuXi-Air: Urban Air Quality Forecasting Based on Emission-Meteorology-Pollutant multimodal Machine Learning DOI: [10.48550/arXiv.2506.07616](https://doi.org/10.48550/arXiv.2506.07616)

◆问题和挑战

- (1) 在机理建模层面，需针对污染物空间分布及站点间相互作用关系、气象条件对污染物传输与化学转化的动态影响建模**
- (2) 在建模过程中如何降低污染物实测数据中大量缺失数据的影响**
- (3) 在业务化预报中需量化预报的不确定性，并建立涵盖短期预警与中长期趋势预测的评估体系，以确保其准确性和可靠性**

THANKS