



绪 论

随着我国经济的不断增长,人们生产生活排出更多的氮氧化物、二氧化硫、一氧化碳等有害气体,引起大气污染、造成空气质量恶化,严重影响我国人口健康、生态环境与可持续发展。《礼记·中庸》中说“凡事豫(预)则立,不豫(预)则废”。如果能预知未来空气质量并据此追溯其来源,从而做好事前防范,将会极大地改善空气质量。

然而,现有空气质量的影响因素分析都是静态的,且是对过去事实的分析,即“事后分析”。现有研究有使用过往演变规律,即历史数据驱动下,使用机器学习实现未来空气质量准确预测的,但鲜有根据空气质量预测结果进行来源的追溯与解析,即“事先预防”。原因是目前支持空气质量预测与溯源的大气污染排放清单数值模拟只是对过去的、基本物化原理的模拟,达成的只是行业级的源解析,而支持空气质量预测的机器学习方法(黑盒子)很难识别污染来源,使得改善空气质量的成效较小。现状表明,解决我国大气污染问题仍任重道远。因此,如果可以根据大气污染演变规律提前预知未来,并且能够通过预知的结果进行分析溯源,势必对空气质量的改善更具实际意义。

本书针对空气质量管理创新性地提出一个研究视角——空气质量预测溯源,从不同角度(能源、气象、企业污染源等)进行空气质量预测与溯源研究,即“预测结果+追溯原因”。具体来说,根据污染成因历史数据规律预测



未来空气质量,并根据未来预测结果进行溯源定位、解析成因等来辅助决策,达到事先预防的目的。数据驱动下的空气质量预测与溯源管理模式的具体线路如图 0-1 所示。

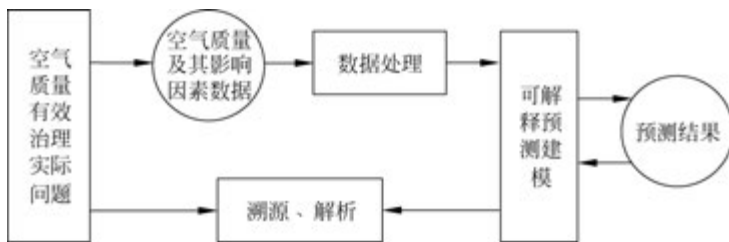


图 0-1 数据驱动下空气质量预测溯源模式

本书研究内容结构如图 0-2 所示。


第1章 关于空气质量			
第2章 城市空气质量预测与溯源研究现状			
第3章 能源消费作用 下城市空气质 量预测与溯源	第4章 气象影响下城 市空气质量预 测与溯源	第5章 面向企业大气排 污的城市空气质 量预测与溯源	第6章 城市内区域间多因 素影响下空气质 量的因果溯源
第7章 城市空气质量大数据预测与溯源系统设计			

图 0-2 内容结构

以下章节的安排是,第 1 章关于空气质量,主要用于界定空气质量、大气污染、温室气体等概念的区别以及空气质量标准与监测;第 2 章城市空气质量预测与溯源研究,综述了现有的基于大气污染排放清单的源解析、基于数值模拟的空气质量预测、基于统计的空气质量预测、数据驱动下的空气质量预测,从而提出空气质量预测与溯源;第 3 章~第 6 章提出空气质量预测溯源方法并进行实证分析,分别为:从能源消费作用角度,进行能源消费作用下的空气质量预测与溯源;从气象影响的角度,进行气象影响下的空气质量预测与溯源;面向企业污染源的角度,进行空气质量的预测与企业溯源;从区域间多因素影响的角度,进行空气质量的因果溯源。而且,每一章中都包含

四大方面的主题,分别为不同角度(能源、气象、工业企业排污)对空气质量的现实影响、基于不同角度(能源、气象、企业排污、区域间联动)的空气质量预测与溯源研究、不同角度(能源、气象、企业排污、区域间联动)的空气质量预测与溯源方法以及实证分析。最后,第7章城市空气质量大数据预测与溯源系统设计,基于空气质量大数据,实现空气质量大数据预测与溯源系统的分析与设计。

本书是作者及其合作者、研究生们多年科研的总结,反映了近年来的新思想、新成果。参与本书撰写的作者除了彭珍外,还有其研究生张彩晓等,张彩晓主要负责第5章方法与实证部分的撰写。本书得到国家自然科学基金项目(72271033)、北京市教委与自然科学基金委联合项目(KZ202110017025)的资助。由于可解释预测属于人工智能、机器学习领域的前沿方向,本书还将此应用于环境管理,是一项复杂系统,作者水平有限,书中难免存在不妥之处,敬请广大读者批评指正。



第 1 章

关于空气质量

要讲空气质量(air quality),首先需要分辨空气质量与大气污染、空气质量与温室气体。要实现空气质量治理和后续的分析,还必须明确空气质量标准及我国空气质量监测情况。

1.1 空气质量与大气污染

要辨识大气污染与空气质量这两个概念,首先要区分“大气”与“空气”。

“大气”是一种广义的空间地理概念。研究发现,在不同的高度上,大气的情况是在变化的,可以对大气分为 5 个层次,即对流层、平流层、中间层、热层和逃逸层。其中,对流层是大气层的最底层,其厚度随纬度和季节而变化:在赤道附近为 16km~18km;在中纬度地区为 10km~12km;两极附近为 8km~9km。在这一层,大气的温度随着高度的增加而不断下降。在这一层中,根据受地表的影响不同,又可分为两层:在 1km~2km 以下,受地表的机械、热力作用强烈,通称摩擦层,或边界层,亦称低层大气,人为排放的大气污

染物绝大部分活动在此层；在1km~2km以上，受地表影响变小，称为自由大气层，主要天气过程如雨、雪、雹的形成均出现在此层。^① 我们研究的对象是大气人类赖以生存的低层。大气污染通常是指由于人类活动或自然过程引起某些物质进入大气中，呈现出足够的浓度，达到足够的时间，并因此危害了人体的舒适、健康和福利或环境的现象。

“空气”是一种物质定义，特指地球表面附近的气态物质，是多种气体的混合物。空气是人类呼吸和植物光合所需要的气体，主要成分是氮气和氧气，以体积计，氧气约占1/5，氮气约占4/5，还含有水蒸气、二氧化碳以及氦、氩等稀有气体。^②

两个概念的区别印证了我们常用的说法，通常是大气污染，因为污染一般是针对一定空间地理范围而言，而空气污染则限定为地球表面附近的物质不达标；通常是空气质量而不是大气质量，因为质量是物质的而不是空间地理的。

空气质量的好坏反映了人类赖以生存的大气环境的良好程度，它是依据若干化学物质浓度的高低来判断的，详见1.3。大气污染会导致空气质量的降低、生态的破坏，从而造成经济的损失，甚至危害人体健康。欧盟由于大气污染造成的材料损坏、农作物和森林以及人体健康损失费用每年超过100亿美元，我国仅大气污染造成的损失每年高达120亿元人民币。^①

1.2 空气质量与温室气体

在世界范围内，温室气体的排放是一个令人严重关切的问题。温室气体是大气中任何能够吸收红外线辐射的气体化合物，能够捕获并保持大气中的热量。通过增加大气中的热量，温室气体产生温室效应，最终导致全球变暖。

① <https://zhidao.baidu.com>.

② <https://www.sohu.com>.



全球变暖带来很坏影响：极端天气、海平面上升、动植物灭绝、海洋酸化、气候的重大变化和前所未有的社会动荡。^①

有三个因素关乎温室气体对全球变暖的影响程度：它在大气中含量的丰富度、它在大气中停留的时间及它的全球变暖潜力。温室气体包括：二氧化碳(CO₂)、甲烷(CH₄)、氧化亚氮(N₂O)、氢氟碳化物(HFCs)、全氟碳化物(PFCs)及六氟化硫(SF₆)。温室气体中，二氧化碳对全球变暖有重大影响，因为它在大气中含量丰富，且会在大气中停留数千年；其次甲烷吸收辐射的效率是二氧化碳的 21 倍，这使得甲烷的全球变暖指数更高，尽管它在大气中的停留时间只有 10 年左右。根据数据统计，从工业革命开始到 2009 年，大气中的二氧化碳含量增加了近 38%，甲烷含量增加了 148%，其中大部分是在过去 50 年里增加的。^①也就是说，应对全球变暖和气候变化，主要是解决碳减排问题。

从广义上讲，温室气体属于空气质量的范畴，温室气体减排效果也是衡量空气质量的体现之一。2007 年，美国最高法院就马萨诸塞州诉环保署案做出判决，认定二氧化碳属于空气污染物，之前联邦环保署是否有权力对温室气体排放进行管制存在争议。2009 年 12 月，美国联邦环保署根据该判决将二氧化碳和其他 5 种温室气体列为大气污染物。^②大气污染物和温室气体是“同根、同源、同过程”，比如煤炭等化石燃料在燃烧过程中会排放 PM_{2.5}、二氧化硫、氮氧化物等空气污染物，也会排放二氧化碳。治理空气污染和应对气候变化，在目标措施等方面也具有协同效应。^[1,2]协同控制传统污染物与温室气体，已成为我国“十四五”时期面临的重要任务之一。

旨在减少温室气体排放的碳减排政策除了减少长期气候变化风险之外，还能够减少共同排放的大气污染物。同样，旨在提升空气质量的措施，既能够减少大气污染物，也会减少温室气体排放，进而削弱气候变化带来的消极影响，同时提升人类健康水平。

^① <https://www.360doc.com>.

^② <https://www.tanpaifang.com>.

1.3 空气质量标准

空气质量的好坏反映了空气污染的程度。那么,空气质量的好坏又如何衡量?空气质量的好坏是依据空气中污染物浓度的高低来判断的。我国先后实施、改进了环境空气质量标准和空气质量评价标准。

1996年10月1日我国开始实施标准《环境空气质量标准》(GB 3095—1996),同时替代 GB 3095—82。GB 3095—1996 标准规定了二氧化硫 SO_2 、氮氧化物 NO_x 、二氧化氮 NO_2 的(年、日、时)平均浓度限值,总悬浮颗粒物 TSP、可吸入颗粒物 PM_{10} 的(年、日)平均浓度限值,一氧化碳 CO (日、时)平均浓度限值,以及臭氧 O_3 时平均浓度限值等。2000 年国家环保总局对该标准进行了修改,包括取消了氮氧化物(NO_x)指标,提升了二氧化氮 NO_2 的(年、日、时)平均浓度限值,提升了臭氧(O_3)的时平均浓度限值。^①

根据《环境空气质量标准》(GB 3095—1996),1997年6月开始,对环境监测部门标准中规定的几种主要污染物进行长期例行监测,以掌握和评价城市空气质量状况和污染变化趋势,开展空气质量周报工作,并以空气污染指数 (air pollution index, API) 的表征形式定期向社会发布,逐步发展为空气质量日报。API 评价的污染物仅为 SO_2 、 NO_2 和 PM_{10} 三项,而作为占据空气悬浮颗粒物重量大半的 $\text{PM}_{2.5}$ 并未纳入其中。^①

2012年2月29日,国务院常务会议同意发布新修订的《环境空气质量标准》(GB 3095—2012)。它增加了细颗粒物($\text{PM}_{2.5}$)和臭氧(O_3)8小时浓度限值监测指标。国家环保总局明确规定分期实施要求,2012年在京津冀、长三

^① <https://www.mee.gov.cn/>.



角、珠三角等重点区域以及直辖市和省会城市,2013年在113个环境保护重点城市和环保模范城市,2015年在所有地级以上城市,2016年1月1日全国实施新标准。^①

根据新的环境空气质量标准(GB 3095—2012),我国环境保护部颁布了《环境空气质量指数(AQI)技术规定(试行)》(HJ 633—2012),并要求与标准GB 3095—2012AQI同步执行。它规定了我国环境空气质量指数日报和实时报工作的要求和程序,还规定了参与AQI评价的污染物为SO₂、NO₂、PM₁₀、PM_{2.5}、O₃、CO六项,较API监测的污染物指标更多,其评价结果更加客观。

空气质量指数(AQI)是指定量描述空气质量状况的无量纲指数。^[3]空气质量指数AQI及相关信息如表1-1所示。空气质量指数的计算公式如式(1-1)所示。

$$AQI = \max\{IAQI_1, IAQI_2, IAQI_3, \dots, IAQI_n\} \quad (1-1)$$

式中IAQI为空气质量分指数(individual air quality index, IAQI), n 为污染物项目总数。污染物项目 p 的空气质量分指数计算如式(1-2)所示。

$$IAQI_p = \frac{IAQI_{H_j} - IAQI_{L_0}}{BP_{H_j} - BP_{L_0}}(C_p - BP_{L_0}) + IAQI_{L_0} \quad (1-2)$$

式中IAQI _{p} 为污染物项目 p 的空气质量分指数; C_p 是污染物项目 p 的质量浓度值; BP_{H_j} 为表中与 C_p 相近的污染物浓度限值的高位值; BP_{L_0} 为表中与 C_p 相近的污染物浓度限值的低位值;IAQI _{H_j} 为表中与 BP_{H_j} 对应的空气质量分指数;IAQI _{L_0} 为表中与 BP_{L_0} 对应的空气质量分指数。

表 1-1 空气质量指数及相关信息

AQI	级别	等级	表示颜色	对健康的影响	建议采取的措施
0~50	I	优	绿色	空气质量令人满意,基本无空气污染	各类人群可正常活动

^① <https://www.mee.gov.cn/>.

续表

AQI	级别	等级	表示颜色	对健康的影响	建议采取的措施
51~100	II	良	黄色	空气质量可接受,某些污染物对极少数敏感人群健康有较弱影响	极少数敏感人群应减少户外活动
101~150	III	轻度	橙色	易感人群部分症状略有轻度加剧,健康人群出现刺激症状	老人、儿童、呼吸系统等疾病患者减少长时间、高强度的户外活动
151~200	IV	中度	红色	进一步加剧易感人群症状,会对健康人群的呼吸系统有影响	儿童、老人、呼吸系统等疾病患者及一般人群减少户外活动
201~300	V	重度	紫红色	心脏病和肺病患者症状加重、运动耐受力降低,部分健康人群也出现不适症状	儿童、老人、呼吸系统等疾病患者及一般人群停止或减少户外运动
>300	VI	严重	褐红色	健康人群运动耐受力降低,有明显强烈症状,可能导致疾病	儿童、老人、呼吸系统等疾病患者及一般人群停止户外活动

如表 1-2 所示,IAQI 大于 50 时,IAQI 最大的污染物为首要污染物。若 IAQI 最大的污染物为两项或两项以上时,并列为首要污染物。IAQI 大于 100 的污染物为超标污染物。

与美国的空气质量标准相比,两国的分指数与指数的计算方式都是相同的,即空气质量指数分指数 IAQI 计算采用内插法,空气质量指数 AQI 指数计算采用 IAQI 的最大值。两者的差别体现在对不同浓度安全等级的划分的不同,PM_{2.5} 浓度与 AQI 等级对照表如表 1-3 所示。

因此,在大多数情况下我们能够观察到美国领事馆与国内发布数据存在不同。可以看到,在 AQI 小于 200 处,美标比国标更为严格。



表 1-2 空气质量分指数及对应的污染物浓度限值

空气质量分指数 (IAQI)	污染物项目浓度限值									
	二氧化硫 (SO ₂) 24 小时平均/ (μg/m ³)	二氧化硫 (SO ₂) 1 小时平均/ (μg/m ³) ⁽¹⁾	二氧化氮 (NO ₂) 24 小时平均/ (μg/m ³)	二氧化氮 (NO ₂) 1 小时平均/ (μg/m ³) ⁽¹⁾	颗粒物 (粒径小于或等于 10μm) 24 小时平均/ (μg/m ³)	一氧化碳 (CO) 24 小时平均/ (mg/m ³)	一氧化碳 (CO) 1 小时平均/ (mg/m ³) ⁽¹⁾	臭氧 (O ₃) 1 小时平均/ (μg/m ³)	臭氧 (O ₃) 8 小时滑动平均/ (μg/m ³)	颗粒物 (粒径小于或等于 2.5μm) 24 小时平均/ (μg/m ³)
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
50	50	150	40	100	50	2	5	160	100	35
100	150	500	80	200	150	4	10	200	160	75
150	475	650	180	700	250	14	35	300	215	115
200	800	800	280	1200	350	24	60	400	265	150
300	1600	⁽²⁾	565	2340	420	36	90	800	800	250
400	2100	⁽²⁾	750	3090	500	48	120	1000	⁽³⁾	350
500	2620	⁽²⁾	940	3840	600	60	150	1200	⁽³⁾	500

说明：
 (1) 二氧化硫(SO₂)、二氧化氮(NO₂)和一氧化碳(CO)的 1 小时平均浓度限值仅用于实时报,在日报中需使用相应污染物的 24 小时平均浓度限值。
 (2) 二氧化硫(SO₂)1 小时平均浓度值高于 800μg/m³ 的,不再进行其空气质量分指数计算,二氧化硫(SO₂)空气质量分指数按 24 小时平均浓度计算的分指数报告。
 (3) 臭氧(O₃)8 小时平均浓度值高于 800μg/m³ 的,不再进行其空气质量分指数计算,臭氧(O₃)空气质量分指数按 1 小时平均浓度计算的分指数报告。

表 1-3 PM_{2.5} 浓度在中美两国 AQI 等级对照表

中国 AQI 标准		PM _{2.5} 标志性浓度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	美国 AQI 标准	
等级	AQI 值		AQI 值	等级
一级 优	0	0	0	good 健康
	》	15.4	50	
	50	35.3	100	moderate 中等
二级 良	88	65.4	150	unhealthy for sensitive groups 对敏感人群不健康
	100	75	156	unhealthy 不健康
三级 轻度污染	150	115	180	
四级 中度污染	200	150	200	severely unhealthy 非常不健康
五级 重度污染	300	250	300	健康
六级 严重污染	500	500	500	hazardous 危险
爆表	\$ @ & . *	>500	\$ @ & . *	beyond index 超标

1.4 我国城市空气质量监测现状

这里强调空气质量主要来自城市,主要原因是大气污染源主要来自城市的燃料燃烧、工业生产过程、交通运输过程等,而且空气质量监测相对而言城市比较健全。

2012—2014 年,国家环境保护部组织分三个阶段完成了全国 338 个地级及以上城市的空气质量新标准监测实施工作。2013 年 1 月 1 日起,京津冀、长三角、珠三角等重点区域及直辖市、省会城市和计划单列市共 74 个城市的 496 个监测点位开始实施空气质量新标准监测,并向社会实时发布 PM_{2.5} 等 6 项污染物的实时浓度和 AQI 指数等空气质量信息;2014 年 1 月 1 日起,空气质量新标准监测扩大至国家环保重点城市和环保模范城市在内的 161 个地级及以上城市的 884 个监测点位;2014 年底,在全国 338 个地级及以上城市共 1436 个监测点位全部开展了空气质量新标准监测,提前一年完成《大气污



染防治行动计划》关于城市空气质量新标准监测实施的要求,并从 2015 年 1 月 1 日起实时发布全国所有地级及以上城市的空气质量监测数据。“十四五”期间,我国城市环境空气质量监测网还将进一步扩容,点位总量将增加到 1800 个,国家大气颗粒物组分监测网将实现 PM_{2.5} 超标的城市全覆盖。^①

根据我国的《环境空气质量监测规范》^①,国家环境空气质量监测网中的空气质量评价点、空气质量评价点上的环境空气质量监测应优先选用自动监测方法。手工监测方法进行非常规项目监测,采用手工监测方法进行环境空气质量监测,应按《环境空气质量手工监测技术规范》(HJ/T 194—2005)所规定的方法和技术要求进行,如表 1-4 和表 1-5。

表 1-4 国家环境空气质量监测网监测项目

必测项目	选测项目
二氧化硫(SO ₂)	总悬浮颗粒物(TSP)
二氧化氮(NO ₂)	铅(Pb)
可吸入颗粒物(PM ₁₀)	氟化物(F)
一氧化碳(CO)	苯并[a]芘(B[a]P)
臭氧(O ₃)	有毒有害有机物

表 1-5 国家环境空气质量评价点设置数量要求

建成区城市人口(万人)	建成区面积(km ²)	监测点数
<10	<20	1
10~50	20~50	2
50~100	50~100	4
100~200	100~150	6
200~300	150~200	8
>300	>200	按每 25km ² ~30km ² 建成区面积设 1 个监测点,并且不少于 8 个点

环境空气污染物监测结果通常以标准状况下的质量浓度(mg/m³ 或 μg/m³)表示。按式(1-3)计算:

^① <https://www.mee.gov.cn/>.

$$C = W/V_{\text{nd}} \quad (1-3)$$

式中 C 为污染物浓度(mg/m^3 或 $\mu\text{g}/\text{m}^3$)； V_{nd} 是标准状况下采样体积(m^3)； W 表示为在相应采样体积中污染物的含量(mg 或 μg)。

在实际工作时,有时也用空气中的体积分数($\times 10^{-6}$)表示气体污染物浓度。两种单位的换算公式如式(1-4)所示。

$$C = (M/22.4)X \quad (1-4)$$

式中 C 为污染物浓度(mg/m^3 或 $\mu\text{g}/\text{m}^3$)； M 为污染物的摩尔质量(g/mol)； X 是污染物的体积分数($\times 10^{-6}$)；22.4 为标准状态下,1 摩尔分子气体污染物的体积(L/mol)。

监测数据平均值计算是某一监测点(某一污染物)监测数据在 $i = 1, 2, \dots, n$ 时段的平均值计算,如式(1-5)所示。

$$\bar{C}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n C_{ij} \quad (1-5)$$

式中 \bar{C}_j 是第 j 监测点在 $i = 1, 2, \dots, n$ 时段的平均值； C_{ij} 为第 j 监测点在第 i 个时段的监测数据； n 为监测时段的总数。

若样品浓度低于监测方法检出限,应在监测数据中标注“未检出”,并以 $1/2$ 最低检出限报出,同时用该数值参加统计计算。

多个监测点监测数据在 $i = 1, 2, \dots, n$ 时段的平均值计算,如式(1-6)所示。

$$\bar{C} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m C_{ij} \right) \quad (1-6)$$

式中 C_{ij} 为第 j 监测点在第 i 个时段的监测数据； \bar{C} 是 m 个监测点在 $i = 1, 2, \dots, n$ 时段的监测数据平均值； m 与 n 分别为监测点数目与监测时段的总数。

超标倍数按式(1-7)计算：

$$r = \frac{C - C_0}{C_0} \quad (1-7)$$

式中 r 为超标倍数； C 是监测数据浓度值； C_0 是相应的环境空气质量标



准值。

同时,我国加快了建立重污染天气监测预警体系。随着 2014 年 12 月珠三角区域空气质量预报预警平台基本建成,目前我国京津冀、长三角和珠三角三大重点区域中心均已建成空气质量预报预警平台,并开展预报预警业务。自 2014 年 12 月 28 日起,三大重点区域空气质量预报和重污染天气预警信息全部在生态环境部网站和中国环境监测总站网站对外发布。^{①②}

① <https://www.mee.gov.cn/>.

② <http://www.cnemc.cn/>.