

通条件下几乎没法观察到)作为异常产物出现。

主产物“切换”现象。在更复杂的反应(如 Hantzsch 合成)中,研究人员观察到一个有趣现象:当你在参数空间里走到不同的角落(不同浓度组合、不同温度等),主产物可以“切换”,某一条件下 A 是主产物,另一个条件下 B 是主产物。这意味着,通过调整条件,一个反应体系可以被“重编程”为不同主要产物的合成工厂。

这项工作展示了将自动化实验、光谱学与数学建模结合起来系统解析反应空间的可行性,为有机合成从“经验式优化”迈向“全空间勘测”提供了新技术路径。未来结合在线反馈控制与机器学习模型,有望实现反应体系的自适应探索与快速路径设计,加速新反应与新合成路线的发现。

(来源:《Nature》)

烟囱、红绿灯成为城市污染“新指示器”

在同一条街上,红绿灯的等待、店铺的出风口、居民楼的烟囱,可能比“这是不是主干道”更能决定你呼吸到的空气。2025年9月27日,荷兰乌特勒支大学在《Environmental Science & Technology》发表的一项研究显示,通过整合街景图像的AI分析技术,传统城市空气污染暴露模型的精度显著提升。该研究在阿姆斯特丹开展,覆盖4.6万余条路段,首次发现烟囱、红绿灯等视觉特征可作为空气污染的关键预测指标,为超局部尺度的空气污染监

测提供了新方案。

城市空气污染的精细分布监测,是制定公共卫生政策、保护居民健康的关键。此前,科研人员常用“土地利用回归模型”(LUR)结合移动监测数据绘制污染地图,但这类模型存在明显短板——传统预测变量(如土地类型、交通流量)难以捕捉建成环境的细节(如隧道墙壁、路边绿化带)和未被记录的排放源(如居民燃烧烟囱)。

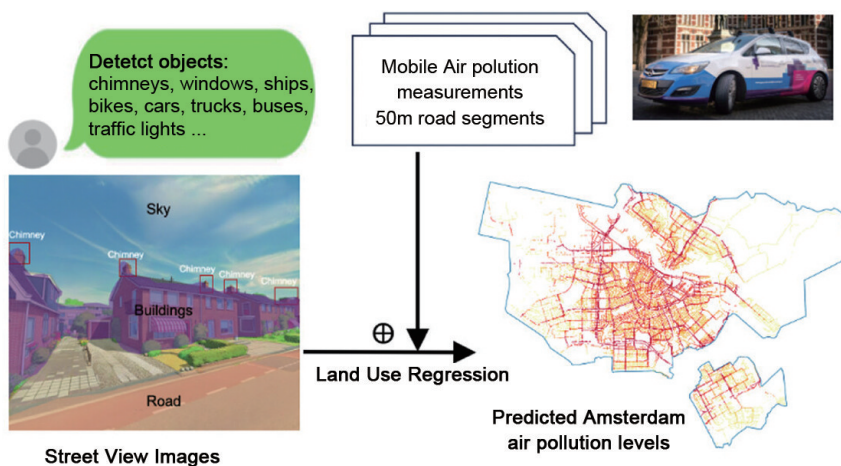
“移动监测车和街景车的行驶路线高度重合,两者数据分辨率天然匹配。”研究人员首次将街景图像整合到空气污染模型中,搭建了一套“视觉增强型土地利用回归框架”(VLUR)。该框架融了2种AI技术,开放词汇目标检测:采用谷歌开发的OWL-ViT模型,无需手动标注即可通过自然语言定义目标,识别传统模型忽略的潜在污染关联物体;语义分割:利用Mask2Former模型,将街景图像像素分类为道路、墙壁、草地、树木等150类,量化建成环境的结构特征。

研究团队收集了海量的数据,包括2019—2020年阿姆斯特丹570万条移动污染监测数据(涵盖二氧化氮(NO_2)、黑碳、超细颗粒物3种关键污染物),以及2008—2024年的37万张谷歌街景图像,最终将这些数据匹配到46664条50米级路段上。

预测结果显示,对比传统LUR模型,整合街景特征后,新模型的决定系数(R^2)提升0.01~0.05,平均绝对误差(MAE)降低0.7%~10.3%。其中, NO_2 模型经独立监测站点验证,MAE最大降幅达10.3%,意味着污染浓度预测更接近实际值。

“随着街景、卫星、众包图像数据的普及,视觉信息有望成为城市环境监测”的新基建。研究人员强调,该研究为暴露组学提供了新工具,未来结合个人移动设备数据,有望实现“个人级”的空气污染暴露评估,为精准公共卫生干预提供支撑。

(来源:《Environmental Science & Technology》)



借助街景图像的开放词汇表目标检测与语义

分割技术改进空气污染暴露模型

(图片来源:《Environmental Science & Technology》)