

DOI: <https://doi.org/10.37162/2618-9631-2024-3-42-63>

УДК 504.3.054+004.85+504.064

Интегрирование химической транспортной модели и искусственной нейронной сети для прогноза концентрации PM_{10}

Д.В. Борисов, И.Н. Кузнецова

*Гидрометеорологический научно-исследовательский центр
Российской Федерации, г. Москва, Россия
lbj23.98@mail.ru*

Разработана и протестирована гибридная модель прогноза приземных концентраций PM_{10} на территории московского региона, состоящая из химической транспортной модели (ХТМ) и искусственной нейронной сети (ИНС), с использованием данных автоматических измерений PM_{10} . ИНС обучена рассчитывать концентрации PM_{10} по данным прогноза концентраций ХТМ и прогностическим метеорологическим параметрам на сетке с разрешением 2 км. Обсуждаются результаты тестирования ИНС на независимых выборках, включающих эпизоды повышенных концентраций PM_{10} .

Ключевые слова: искусственная нейронная сеть, гибридная модель, численный прогноз загрязнения воздуха, взвешенные частицы, CHIMERE

Integration of a chemical transport model and an artificial neural network for PM_{10} concentration forecasting

D. V. Borisov, I. N. Kuznetsova

*Hydrometeorological Research Center of Russian Federation,
Moscow, Russia
lbj23.98@mail.ru*

A hybrid model for forecasting PM_{10} surface concentrations in the Moscow region, consisting of a chemical transport model and an artificial neural network (ANN), with the use of PM_{10} automatic measurements data was developed and tested. The ANN was trained to predict PM_{10} concentrations based on the forecasts of CTM concentrations and meteorological parameters on a 2 km grid. The results of testing the ANN based on independent samples, including the episodes of high PM_{10} pollution, are discussed.

Keywords: artificial neural network, hybrid model, numerical forecasting of air pollution, PM_{10} , CHIMERE

Введение

Современной практикой контроля атмосферных загрязнений является численное моделирование и прогнозирование с использованием химических транспортных моделей (ХТМ). ХТМ являются основной многих

национальных и глобальных систем прогнозирования качества воздуха, в их числе Европейский ансамбль CAMS, состоящий из 11 ХТМ, Система национального прогнозирования качества воздуха США на основе ХТМ CMAQ, ХТМ CUAGE в Китае [9].

В Гидрометцентре России прогнозы загрязнения воздуха на территории московского региона рассчитываются на основе оффлайн ХТМ CHIMERE [3]. ХТМ CHIMERE имеет горизонтальное разрешение сетки 2 км, использует прогностические метеорологические данные модели COSMO-Ru-2ETR [4] и данные об антропогенных выбросах зарубежного кадастра ЕМЕП (<https://www.emep.int/>).

Качество численных прогнозов концентраций загрязняющих веществ регулярно оценивается по данным измерений на более 50 автоматических станциях контроля загрязнения атмосферы (АСКЗА) ГПБУ “Мосэкомониторинг” (<https://mosecom.mos.ru/>), расположенных на территории Москвы и Московской области [3]. Сравнение модельных прогнозов с данными измерений позволяет выявлять характерные отклонения модельных расчетов от наблюдений и служит основой для выбора направления усовершенствования прогнозирования.

В последние годы в сфере прогнозирования качества воздуха активно внедряются методы машинного обучения (англ. Machine Learning, далее ML). Многие исследователи обучают модели по данным наземных измерений метеопараметров и примесей; такой подход достаточно точен, но ограничивает возможность прогнозирования мезо- и крупномасштабных загрязнений, распространения шлейфов, поскольку модели обучены на измерениях в точке и способны давать точный прогноз в той же точке либо в среднем по городу [6].

Другой подход представляют интегрирование модели прогноза качества воздуха из ХТМ и модели машинного обучения; при таком подходе по прогнозам ХТМ ML-модели обучаются «восстанавливать» измеренные концентрации. К примеру, в публикации [10] обсуждается применение гибридной модели, состоящей из трех ХТМ и четырех моделей машинного обучения, в том числе рекуррентной искусственной нейронной сети (ИНС), для прогноза концентраций PM_{10} , NO_x , O_3 в г. Стокгольме, Швеция. В Германии разработана гибридная модель, состоящая из ХТМ WRF-Chem и искусственной нейронной сети, для прогноза суточных максимумов O_3 на четверо суток вперед [7]. Используя ХТМ LOTOS-EUROS, китайские исследователи обучили ИНС восстанавливать отклонения прогноза $PM_{2.5}$ от данных наземных измерений в г. Шанхае [8].

Интеграция ХТМ и моделей машинного обучения с использованием данных наземных измерений позволяет улучшать качество прогноза распространения загрязнений; преимуществом такого подхода является прогнозирование на регулярной сетке для обширной территории. В ранее опубликованной авторами работе [1] было показано улучшение прогнозов концентраций O_3 путем интеграции ХТМ и ML-модели.

Цель данного исследования – разработка и тестирование гибридной модели прогноза концентраций PM_{10} на территории московского региона, состоящей из ХТМ и ML-модели, с использованием данных измерений АСКЗА “Мосэкомониторинг”.

Методы и использованные данные

Искусственная нейронная сеть представляет собой статистическую модель, обучаемую предсказывать значение целевой переменной из набора предикторов. Основными составляющими ИНС являются слои, состоящие из искусственных нейронов. Нейроны первого слоя вычисляют взвешенные линейные комбинации вектора предикторов, подаваемого на вход ИНС, пропускают полученные комбинации через нелинейную функцию активации (часто сигмоид или гиперболический тангенс) и передают полученные значения следующему слою, последующие слои прodelывают те же операции. Можно сказать, что слои ИНС вычисляют *количество нейронов* новых представлений предикторов. Последний слой в случае регрессионной задачи имеет 1 нейрон, который выдает прогноз ИНС. Функция потерь (в случае регрессии – обычно средняя абсолютная ошибка) вычисляет отклонение прогноза ИНС от истинного значения целевой переменной, затем вычисляются градиенты функции потерь по весам нейронов ИНС и веса обновляются в сторону минимизации функции потерь. Данные операции составляют 1 шаг обучения ИНС.

Обучающая выборка ИНС состоит из n векторов предикторов, которым соответствуют n истинных значений целевой переменной. За 1 шаг обучения через ИНС проходит т. н. пакет данных, состоящий из m записей обучающей выборки. Вся обучающая выборка проходит через ИНС за n/m шагов, что называется эпохой обучения. Как правило, ИНС обучаются несколько эпох.

Обучение ИНС заключается в последовательной оптимизации весов ИНС с целью минимизации потерь, то есть отклонений прогнозов ИНС от истинных значений целевой переменной.

Преимуществом ИНС перед другими моделями является выстраивание сложных нелинейных связей между предикторами и целевой переменной. При обучении ИНС крайне важен состав и объем обучающей выборки – чем больше и разнообразнее обучающая выборка, тем точнее ИНС выстроит связи между предикторами и целью. Не менее важен выбор предикторов – в случае прогноза концентраций они должны как можно более полно описывать механизмы формирования загрязнений.

В данном исследовании поставлена цель обучить ИНС предсказывать концентрации PM_{10} , максимально близкие к измерениям АСКЗА “Мосэкомониторинг”, по прогнозам ХТМ CHIMERE и модели атмосферы COSMO-Ru.

Для формирования массива истинных значений целевой переменной использовались предоставленные ГПБУ “Мосэкомониторинг” данные

часовых измерений PM_{10} на 32 АСКЗА за период с 00 ч ВСВ 1 января 2019 г. по 23.00 ч ВСВ 31 марта 2024 г., всего 962872 измерений. Основная часть АСКЗА располагается в пределах и рядом с МКАД, несколько АСКЗА – на удалении от Москвы (Павловский Посад, Зеленоград, Огарёво, Троицк, Балашиха).

Основу обучающей выборки составили прогнозы концентраций загрязняющих веществ ХТМ CHIMERE и метеорологических параметров, рассчитанных по модели атмосферы COSMO-Ru. Процедуры препроцессинга при расчетах CHIMERE включают интерполяцию прогнозов метеопараметров COSMO-Ru на заданную сетку ХТМ CHIMERE. Архив прогнозов содержит 1605 ежедневных прогнозов на сетке с горизонтальным разрешением 2 км и временным шагом 1 час для территории московского региона с заблаговременностью 48 часов за период с 7 февраля 2019 г. по 29 февраля 2024 г. Для формирования обучающей выборки использовались прогнозы ХТМ CHIMERE на первые сутки (ряды 24 ч). По техническим причинам в архиве отсутствуют прогнозы за период 23 мая – 30 сентября 2021 года.

Выбросы автотранспорта – основной источник загрязнений в мегаполисах. Источником PM_{10} служат поднятие пыли на стройках и дорогах, стирание автомобильных шин и дорожного полотна. В обучающей выборке были использованы два типа данных, отражающих распределение транспортной нагрузки по территории московского региона.

Данные о среднегодовых суммарных выбросах автотранспорта на участках улично-дорожной сети Москвы рассчитаны специалистами Научно-исследовательского института автомобильного транспорта (НИИАТ). По разработанной в Гидрометцентре России методике [5] данные НИИАТ интерполированы на регулярную сетку с горизонтальным разрешением 2 км.

Открытые геоинформационные данные OpenStreetMap (OSM, <https://download.geofabrik.de/>) описывают формы и протяженность автомобильных дорог на территории московского региона. В Гидрометцентре России разработана методика вычисления по данным OSM плотности автомобильных дорог (в $км/км^2$) в узлах регулярной сетки (автор – А.А. Кирсанов). В обучающей выборке использовались данные плотности автомобильных дорог на территории московского региона в узлах регулярной сетки с разрешением 2 км.

В табл. 1 представлен полный список предикторов обучающей выборки ИНС для прогноза концентраций PM_{10} . Предикторы выбирались из представлений о факторах изменчивости концентраций PM_{10} на территории московского региона. Из прогнозов метеопараметров COSMO-Ru выбраны основные приземные метеопараметры и рассчитаны градиенты температуры для учета термической устойчивости в пограничном слое атмосферы (АПС). Скорость и направление ветра на высотах рассчитаны для учета дальнего переноса PM_{10} в обучающей выборке. «Календарные»

предикторы – месяц, день недели, час прогноза – добавлены в обучающую выборку для учета сезонно-суточной изменчивости концентраций PM_{10} . Заблаговременность прогноза отражает рост отклонений прогноза со временем.

Таблица 1. Предикторы обучающей выборки ИНС
Table 1. Predictors of the ANN training set

Источник данных	Тип данных	Предикторы
Прогнозы концентраций XTM CHIMERE	Числовой	PM_{10} (мкг/м ³)
Прогнозы метеопараметров COSMO-Ru	Числовой	Температура 2 м (К) Высота пограничного слоя (м) Относительная влажность (0–1) Осадки (кг/м ²) Скорость ветра на 10 м (м/с) Градиент Т до 200, 400, 750 м (К) Скорость ветра на 200, 400, 750, 1500 м (м/с) Направление ветра на 750, 1500 м (градусы)
Константы транспортной нагрузки	Числовой	Выбросы автотранспорта НИИАТ (т/год) Плотность автодорог OSM (км/км ²)
Календарные предикторы	Категории	Месяц День недели Час
Заблаговременность прогноза	Числовой	Значение в диапазоне 1–24 (ч)
Целевая переменная	Числовой	Измерение PM_{10} на АСКЗА (мкг/м ³)

На рис. 1 схематично представлена технология формирования обучающей выборки, конструирования, обучения и тестирования ИНС.

Обучающая выборка состоит из:

- прогнозов на сетке XTM CHIMERE и модели атмосферы COSMO-Ru;
- констант транспортной нагрузки на сетке – выбросы НИИАТ и плотность автодорог OSM;
- измерений на АСКЗА в качестве целевой переменной.

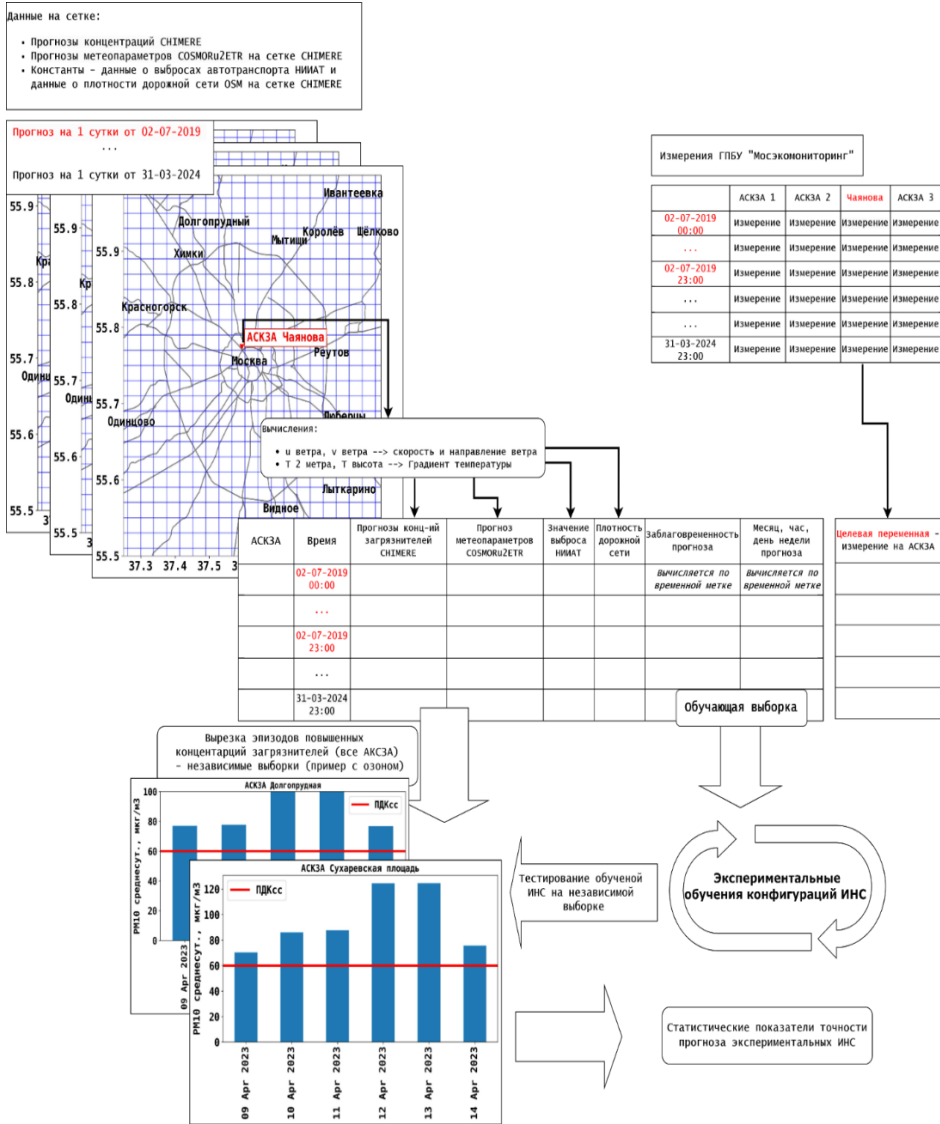


Рис. 1. Схема формирования обучающей выборки, конструирования, обучения и тестирования ИНС.

Fig. 1. Training sample formation; ANN design, training and testing scheme

Суточный ряд часовых измерений на каждой АСКЗА синхронизируется с прогнозами концентрации PM_{10} CHIMERE и метеопараметров COSMO-Ru в ближайшем к АСКЗА узле сетки. Данные операции выполняются последовательно для ряда суток 7 февраля 2019 г. – 29 февраля 2024 г. и для всех АСКЗА. Каждой АСКЗА присваиваются константы транспортной нагрузки в ближайшем к АСКЗА узле сетки.

Полный объем обучающей выборки после удаления пропусков и вырезки тестовых независимых выборок составил 753349 часовых записи за период 7 февраля 2019 г. – 29 февраля 2024 г. (5 лет и 1 месяц) для 32 АСКЗА.

Для проведения независимых тестов обученных ИНС предварительно из обучающей выборки для всех АСКЗА вырезаны периоды, включающие эпизоды повышенных концентраций PM_{10} . Тестовые прогнозы ИНС проводились в узлах сетки, ближайших к АСКЗА.

В ранее опубликованной авторами работе по разработке гибридной модели прогноза концентраций O_3 [1], также включающей ИНС, были проведены 12 экспериментальных обучений ИНС с вариациями архитектуры ИНС и настроек обучения. Наилучшие результаты прогнозов концентраций O_3 показала полносвязная двуслойная ИНС объемом 100–50 нейронов (11201 весов сети) с инерционным обновлением весов при обучении с коэффициентом 0.9, шаг обучения 0.001, длина обучения в 50 эпох, размер пакета 128 (5781 шаг оптимизации на эпоху). Этот же вариант ИНС (сокр. ИНС 100-50) использовался как базовый при обучении ИНС для прогноза концентраций PM_{10} .

В ходе данного исследования апробированы дополнительные архитектуры ИНС: увеличен объем двуслойной полносвязной ИНС до 200–100 нейронов (32601 вес сети, сокр. ИНС 200–100), апробирована рекуррентная ИНС с одним LSTM (англ. Long short-term memory, слой долгой краткосрочной памяти) слоем в 100 нейронов (сокр. LSTM 100).

Кратко отметим, рекуррентные нейронные сети (англ. Recurrent neural network, RNN) предсказывают целевую переменную на временном шаге t по наборам предикторов на шаге t и на предшествующих шагах $t - n$, применяются для прогнозирования временных рядов. При исследованиях нами было проведено обучение RNN на предшествующих прогнозам временных рядах длиной 48 часов. Выяснилось, что рекуррентная нейронная сеть с LSTM-слоем достаточно точно восстанавливает суточный ход концентраций PM_{10} , но сильно занижает прогностические концентрации по сравнению с измерениями.

Алгоритмы формирования обучающей выборки, конструирования, обучения и тестирования ИНС разработаны на языке программирования Python с использованием библиотек для работы с данными NumPy и Pandas и библиотек машинного обучения Tensorflow и Keras. Разработанная технология обучения и тестирования ИНС универсальна и масштабируема для прогнозов концентраций других загрязнителей на других территориях.

Обсуждение результатов

Для тестирования ИНС на независимых выборках отобрано семь эпизодов продолжительностью 7–12 суток с превышениями среднесуточной концентрации PM_{10} 60 $мкг/м^3$ (ПДК_{с.с.} PM_{10}) более чем на 40 % АСКЗА в московском регионе. Такие случаи будем называть «аэрозольные

эпизоды», они наблюдались в марте 2021 и 2022 гг., апреле 2019, 2021 и 2023 гг., августе 2022 г. и октябре 2020 г. Из обучающей выборки в пределах заданных эпизодов вырезались записи предикторов для всех АСКЗА (см. рис 1) с заполненностью ряда в эпизоде $> 70\%$. Итоговый объем независимой тестовой выборки составил 136 массивов, всего 27192 записи предикторов.

Общее представление об эффективности применения ИНС дают показанные в табл. 2 метрики качества прогноза экспериментальных архитектур ИНС и первичных прогнозов XTM CHIMERE, полученные на полной независимой тестовой выборке – в среднем по семи эпизодам повышенных концентраций PM_{10} .

Таблица 2. Статистические показатели качества прогноза концентраций PM_{10} ($\mu\text{г}/\text{м}^3$) XTM CHIMERE и экспериментальных архитектур ИНС на полной тестовой независимой выборке

Table 2. Statistical indicators of CTM CHIMERE and experimental ANN architectures PM_{10} concentrations ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) forecasts quality on a full test independent sample

Характеристики	XTM CHIMERE	ИНС 100–50	ИНС 200–100	LSTM 100
Средняя измеренная концентрация PM_{10}	57	57	57	56
Средняя рассчитанная концентрация PM_{10}	43	39	41	26
Среднее отклонение (прогноз – измерение)	-14	-18	-16	-30
Среднее абсолютное отклонение (прогноз – измерение)	38	26	27	32
Среднее квадратическое отклонение (прогноз – измерение)	59	48	48	58
Коэффициент корреляции	0,25	0,59	0,55	0,47
Количество пар	27192	27192	27192	23568

По статистическим метрикам качества прогноза видно, что все модели занижают прогноз PM_{10} , наибольшее занижение показывает LSTM-сеть, в то же время лучше описывая суточную изменчивость концентраций, чем XTM CHIMERE, на что указывают коэффициенты корреляции в табл. 2. Полносвязные ИНС показали заметное снижение среднего абсолютного и среднеквадратического отклонений прогноза, увеличение коэффициента корреляции прогноза с измерениями по сравнению с XTM CHIMERE

и LSTM-сетью. Увеличение объема полносвязной ИНС не показало существенного улучшения прогноза, предположительно, из-за переобучения увеличенной ИНС.

Далее приводится подробный анализ прогнозов полносвязной ИНС 100-50, показавшей наилучший прогноз в среднем по семи эпизодам повышенных концентраций PM_{10} и в отдельных эпизодах.

Отметим, что повышение уровня PM_{10} в приземном воздухе города связано с тремя факторами: загрязнение воздуха городскими источниками, дальний перенос почвенных частиц и поступление продуктов горения природных пожаров. Два последних фактора имеют малую повторяемость, преобладающим фактором повышения уровня PM_{10} в Москве является поступление в городскую атмосферу мелкодисперсных частиц от локальных источников. Учитывая, что ХТМ не усваивает оперативную информацию о крупномасштабном переносе аэрозоля, а воспроизводит процессы загрязнения от местных источников, можно предположить, что аэрозольные эпизоды локального происхождения должны успешно описываться гибридной моделью – при интеграции ХТМ и ИНС. Очевидно, ИНС из-за малой частоты эпизодов дальнего переноса не может быть полноценно настроена на их воспроизведение. Именно поэтому при оценке эффективности ИНС необходимо установить причину формирования аэрозольных эпизодов.

По признаку главного фактора возникновения аэрозольные эпизоды сгруппированы в три типа, каждому из которых свойственны характерные особенности атмосферных процессов:

Тип 1. Повышение уровня PM_{10} при неблагоприятных для рассеивания примесей в неблагоприятных метеорологических условиях (НМУ).

Тип 2. Повышение уровня PM_{10} , обусловленное дальним переносом почвенных частиц.

Тип 3. Повышение уровня PM_{10} при адвекции (поступлении) пирогенного аэрозоля.

Ниже описываются особенности атмосферных процессов в эпизодах каждого из трех типов аэрозольного загрязнения воздуха в Москве и их модельное воспроизведение. Отдельно подчеркнем, что тестирование проводилось с использованием прогностических расчетов концентрации PM_{10} ХТМ CHIMERE, погрешности которых в определенной мере связаны с ошибками численных прогнозов метеорологических параметров.

Тип 1. Аэрозольные эпизоды, наблюдавшиеся при НМУ. К числу такого типа относятся аэрозольные эпизоды в апреле 2019 и 2023 гг. Отметим, НМУ – это комплексное сочетание слабого ветра и устойчивой стратификации в отсутствии осадков, в рассматриваемых эпизодах, наблюдавшихся в темное время суток или ранним утром. В основном такие условия формируются при антициклональном типе погоды в малоградиентных барических полях. Следует подчеркнуть, что все аэрозольные эпизоды при НМУ формировались при аномально теплой и сухой погоде, что обеспечивало в дневные часы ветровой подъем частиц с подстилающей поверхности, в апреле еще не заросшей растительностью.

На рис. 2а показаны повышения средней городской концентрации PM_{10} до 85–100 $\mu\text{кг}/\text{м}^3$ при НМУ, в ночь на 25 апреля – почти до 130 $\mu\text{кг}/\text{м}^3$, когда наблюдалась самая глубокая в эпизоде инверсия температуры (до 8 °С). Подчеркнем, что при НМУ наблюдается большой разброс пиковых величин PM_{10} на АСКЗА, и это указывает на то, что городской уровень PM_{10} формируется местными источниками. К примеру, ночью 25 апреля концентрация PM_{10} повышалась на АСКЗА МГУ, Марьино, Шаболовка и Черемушки до 120–130 $\mu\text{кг}/\text{м}^3$, на АСКЗА Туристская и Народного ополчения – до 150 $\mu\text{кг}/\text{м}^3$, на АСКЗА Сухаревская пл. – до 170 $\mu\text{кг}/\text{м}^3$, в Новокосино – до 240 $\mu\text{кг}/\text{м}^3$.

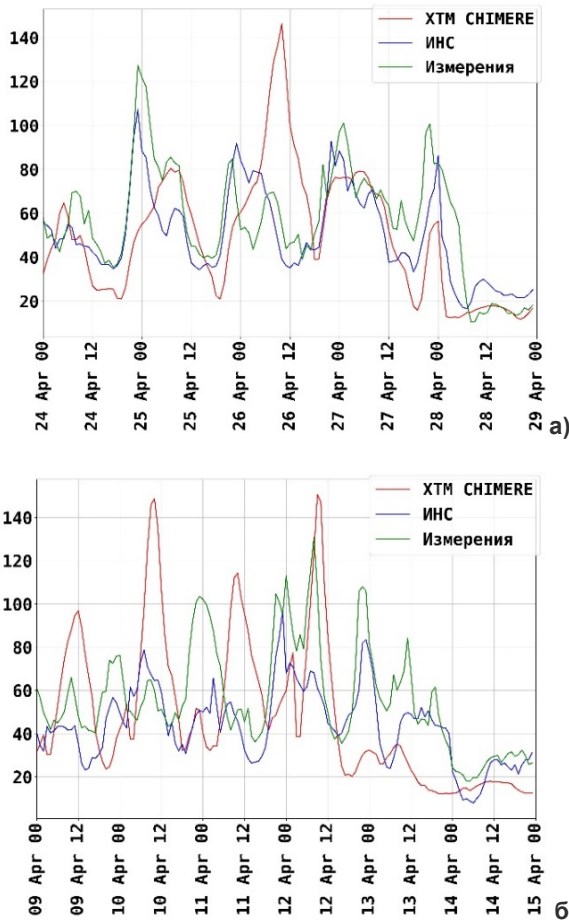


Рис. 2. Временной ход концентраций PM_{10} ($\mu\text{кг}/\text{м}^3$), осредненных по измерениям на АСКЗА городского типа (зеленая линия), рассчитанных ХТМ CHIMERE (красная линия) и ИНС (синяя линия): 24–28 апреля 2019 г. (а); 9–14 апреля 2023 г. (б).

Fig. 2. PM_{10} concentrations ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) averaged over urban-type stations measurements (green line), calculated by the CTM CHIMERE (red line) and ANN (blue line): April 24–28, 2019 (a), April 9–14, 2023 (b).

Расчеты ХТМ на 25–27 апреля в общем отражают свойственное НМУ повышение уровня PM_{10} , хотя и со сдвигами максимумов на первую половину суток. (Эту характерную особенность модельных расчетов в более поздних исследованиях мы учитывали с помощью коррекции модельного суточного хода.) При этом расчеты ИНС, как видно на рис. 2а, вполне успешно и с небольшими отклонениями воспроизводили временной ход PM_{10} как при НМУ, так и при интенсивном перемешивании в послеполуденные часы и перед прохождением холодного атмосферного фронта ночью 28 апреля.

В апрельском аэрозольном эпизоде в 2023 г. (рис. 2б), также при НМУ, в ночное время фиксировался рост концентрации PM_{10} в среднем по городу до 100–110 $мкг/м^3$. ХТМ прогнозировала уровень PM_{10} примерно в 2 раза меньше, ИНС воспроизвела временной ход в эпизоде точнее, существенно корректировала модельные расчеты PM_{10} в утренние часы, приближая их к наблюдавшимся. Успешно воспроизведен ИНС и характерный процесс предфронтальных флуктуаций PM_{10} , а также приближение к измеренным концентрациям при похолодании почти на 10 °С за сутки 13–14 апреля. Вместе с тем следует отметить значительное занижение ИНС концентрации PM_{10} на ночь 11 апреля, что, по-видимому, связано с ошибками метеорологического прогноза, не предсказавшего НМУ на эту ночь.

Обратим внимание на нехарактерные дневные повышенные концентрации PM_{10} 50±10 $мкг/м^3$. С учетом результатов траекторного анализа сделано предположение, что с вечера 11 апреля через Москву проходила запыленная воздушная масса, медленно перемещавшаяся над центральными областями ЕТР, при отсутствии там растительного покрова. То есть аэрозольное загрязнение формировалось за счет и городских, и региональных источников. Видимо по этой причине ИНС занизила наблюдавшуюся концентрацию почти на 60 $мкг/м^3$, хотя по расчетам ХТМ (с характерным для нее систематическим завышением PM_{10}) утренний пик PM_{10} до 150 $мкг/м^3$ 12 апреля, очевидно, случайно почти совпал с измеренными концентрациями PM_{10} .

Отметим главное в рассмотренных апрельских аэрозольных эпизодах при НМУ: измеренные концентрации PM_{10} превышают средние сезонные величины в 2–3 раза, ХТМ в целом не отражает суточную динамику PM_{10} , но удовлетворительно воспроизводит суточные максимумы, интегрированная модель ИНС достаточно успешно корректирует модельные расчеты, воспроизводит в отличие от ХТМ вечерние пики, однако количественно их занижает.

Тип 2. Аэрозольное загрязнение в эпизодах дальнего переноса почвенных частиц. В тестовых выборках три эпизода повышения уровня PM_{10} связаны с поступлением воздушной массы из прикаспийского региона, что подтверждается траекторным анализом каждого случая. Поступление пылевого прикаспийского аэрозоля в Москву в основном фиксировалось в периоды аномально теплой погоды в центре и на юге ЕТР. Причина

аэрозольного загрязнения воздушной массы – пыльные бури и ветровой подъем почвенных частиц в пустынных районах при прохождении там активных атмосферных фронтов. Вынос пылевых частиц осуществлялся по западной периферии антициклона с большими скоростями в АПС и часто при формировании мезоструйного течения нижнего уровня, что обеспечивало вынос в умеренные широты ЕТР твердого аэрозоля – за сутки частицы могли переноситься на расстояния почти в 1000 км. На рис. 3 показаны типовые траектории частиц, переносимых в московский регион из Калмыкии, низовой Волги и западного Казахстана.

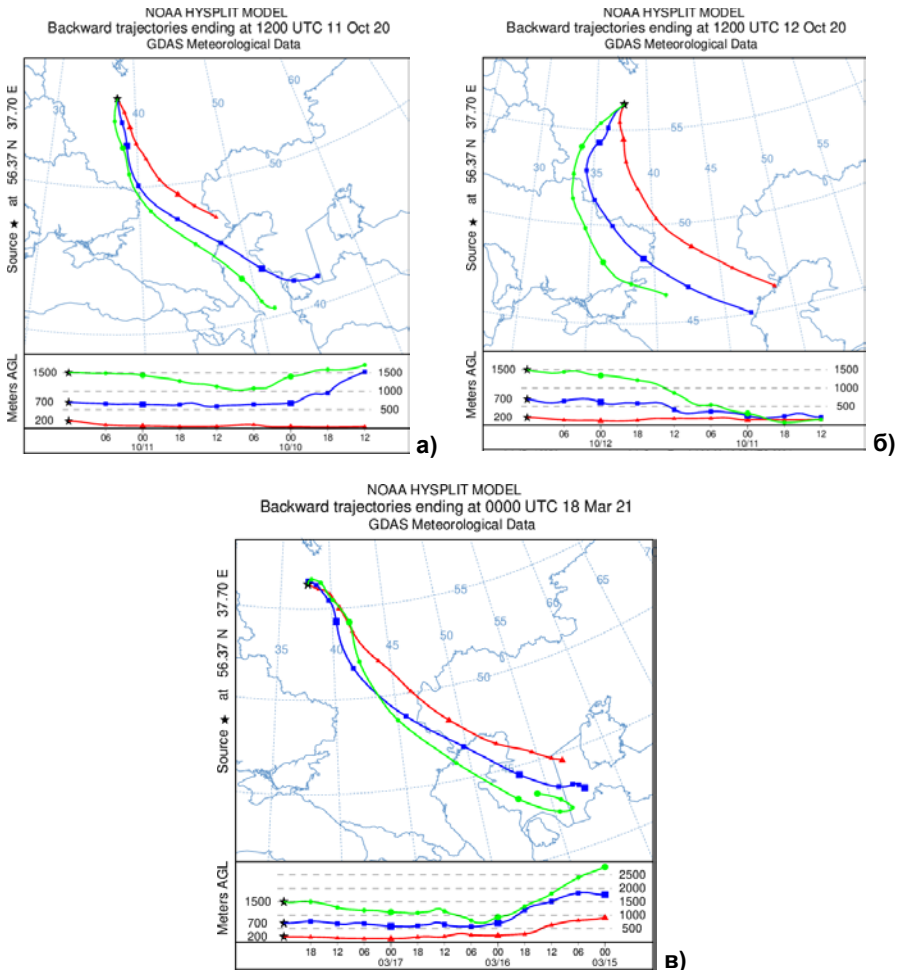


Рис. 3 Перенос воздушных частиц, характерный для эпизодов аэрозольного загрязнения в Москве под влиянием дальнего переноса: 11 октября 2020 г. (а); 12 октября 2020 г. (б); 18 марта 2021 г. (в).

Fig. 3. Transfer of air particles in high aerosol pollution episodes in Moscow formed under the influence of long-range transport: October 11, 2020 (a); October 12, 2020 (b); March 18, 2021 (v).

Учитывая, что ХТМ CHIMERE в явном виде не усваивает данные о переносе частиц из удаленных районов в московский регион, в аэрозольном эпизоде в апреле 2021 г. ХТМ не предусматривала резкое повышение уровня PM_{10} до 200–240 $мкг/м^3$ вечером 13 апреля, вызванное поступлением запыленной воздушной массы из Прикаспия, продолжавшегося почти 2 суток. ИНС воспроизвела этот скачок в виде слабого пика, «увеличив» модельный расчет PM_{10} почти в 6 раз (рис. 4а). Вместе с тем следует отметить более успешное предсказание ночного роста концентраций PM_{10} в предшествующую ночь (12 апреля) при НМУ: гибридные расчеты предусматривали увеличение концентраций PM_{10} , но характерный при НМУ уровень PM_{10} (100–120 $мкг/м^3$) они занижали примерно на 20 $мкг/м^3$.

Второй тестовый эпизод наблюдался в марте 2021 г. при наличии снежного покрова в Москве, что практически исключает существенное загрязнение локальными источниками. Длившийся почти сутки аэрозольный эпизод с повышением PM_{10} до 170–180 $мкг/м^3$ (рис. 4б) был связан, как подтвердил траекторный анализ, с поступлением запыленного воздуха из Прикаспия и Приаралья. В редких случаях удается получить убедительное подтверждение наличия почвенного аэрозоля в воздушной массе. Одним из косвенных признаков значительного содержания аэрозольных частиц в воздушной массе может служить аномальный рост температуры в нижних слоях атмосферы в дневные часы (ночью обнаружить сложно) в результате прямого нагрева пылевых частиц. От инверсии оседания такого рода аномальное повышение температуры можно отличить по высоте наблюдаемой аномалии: инверсия оседания в антициклоне, как правило, образуется в слое 1,5–2 км.

Нам удалось обнаружить эффект аэрозольного нагрева в запыленной воздушной массе по данным радиозондирования в пунктах на пути переноса воздушного потока из Прикаспия – в п. Рязань и п. Саратов. Рис. 5 отражает ярко выраженный аномальный рост температуры в 12 ч ВСВ 16 марта в слое 500–700 м над землей в Саратове и в слое 900–1300 м в Рязани, куда был направлен ведущий поток, и, очевидно, аэрозоля было больше. Видно, что максимальная величина аномального нагрева над Рязанью составила 1,5 °С на 100 м, над Саратовом – 0,6 °С на 100 м. Мезоструя над Рязанью с максимумом скорости 18 м/с на высоте 900 м служила своего рода «транспортёром» для переноса пылевых частиц на большие расстояния, а ее ось совпала с началом аномального повышения температуры.

Отметим особенности модельных расчетов в данном эпизоде. Нехарактерные для марта модельные расчеты ХТМ повышенных концентраций PM_{10} , очевидно, являются следствием сезонного распределения эмиссий PM в кадастре ЕМЕР с годовым максимумом эмиссий в марте. Следует отметить, что заложенный в эмиссии «европейский стандарт» сезонного хода проявился в расчетах ХТМ ростом PM_{10} и 16, и 18 марта. Лишь «случайно» 18 марта модельный максимум ХТМ почти совпал по величине с уровнем

PM_{10} , повысившимся в Москве за счет дальнего переноса аэрозольных частиц. Также отметим, что из-за отсутствия в обучающей выборке мартовских аэрозольных эпизодов ИНС «проигнорировала» повышение концентраций PM_{10} , удерживая их в пределах наблюдаемых в Москве средних сезонных величин.

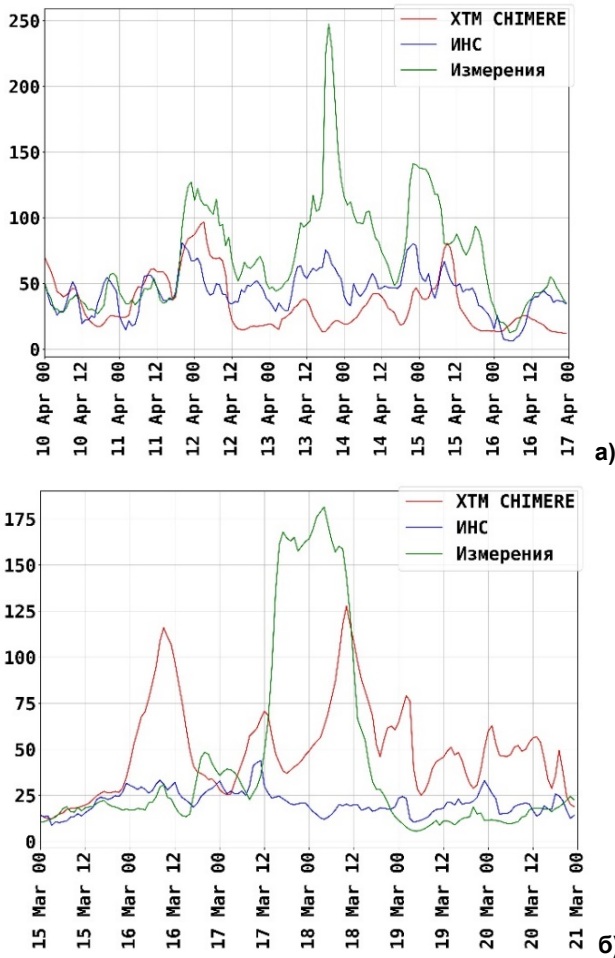


Рис. 4. Временной ход концентраций PM_{10} ($\mu\text{кг}/\text{м}^3$), осредненных по измерениям на АСКЗА городского типа (зеленая линия), рассчитанных XTM CHIMERE (красная линия) и ИНС (синяя линия): 10–16 апреля 2021 г. (а); 15–20 марта 2021 г. (б).

Fig. 4. PM_{10} concentrations ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) averaged over urban-type stations measurements (green line), calculated by the CTM CHIMERE (red line) and ANN (blue line): April 10–16, 2021 (a); March 15–20, 2021 (b).

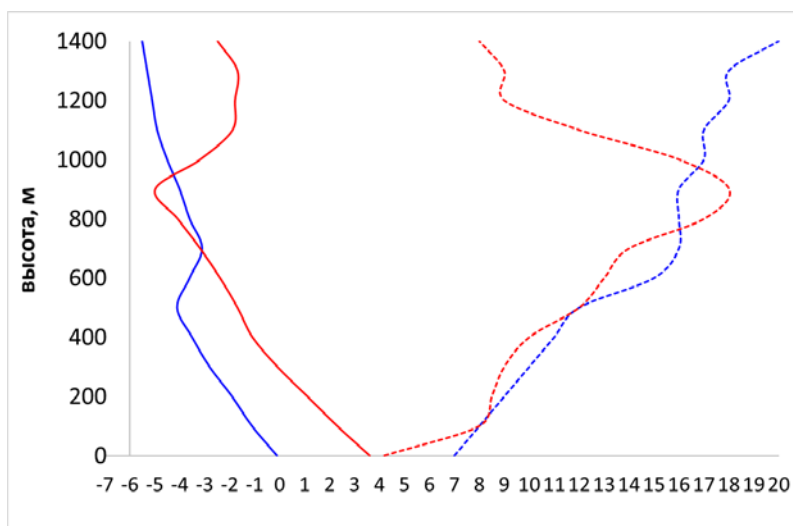


Рис. 5. Температура (°С, тонкая линия) и скорость ветра (м/с, штриховая линия) по данным радиозондирования в 12 ВСВ 16 марта 2021 г. в п. Рязань (красные линии) и п. Саратов (синие линии)

Fig. 5. Temperature (°C, thin line) and wind speed (m/s, dashed line) according to radiosonde data at 12 UTC on March 16, 2021 in Ryazan (red lines) and Saratov (blue lines)

Третий аэрозольный эпизод был зафиксирован в октябре 2020 г., начало которого было связано с дальним переносом аэрозоля, а перед окончанием эпизода сформировались непродолжительные НМУ. Приход в Москву насыщенной почвенным аэрозолем сухой воздушной массы, прошедшей, как показал траекторный анализ, над Прикаспием, сопровождался 11 и 12 октября резким повышением концентрации PM_{10} до 200–210 $\mu\text{кг}/\text{м}^3$ (рис. 6). Дальний перенос твердых частиц обеспечивали большие скорости ветра на западной периферии антициклона.

Очевидно, что при адвекции почвенного аэрозоля ХТМ и ИНС воспроизводить события роста PM_{10} априори не могут. Вместе с тем следует признать достаточно успешным модельное отображение аэрозольного загрязнения 13–14 октября с повышением концентрации PM_{10} до 100–120 $\mu\text{кг}/\text{м}^3$, в явном виде не связанного с дальним переносом. Дневные околополуденные максимумы PM_{10} в эти дни, по-видимому, формировались за счет конвективного перемешивания в загрязненном АПС, в те октябрьские дни температура повышалась до +18–20 °С.

Очевидно, редкие события дальнего переноса и регионального загрязнения не позволяют обучить ИНС, поэтому расчеты ХТМ CHIMERE 13–14 октября, казавшиеся на первый взгляд вполне «удачными», ИНС в основном понижала в первую половину дня, но почти в 2 раза увеличивала поздним вечером.

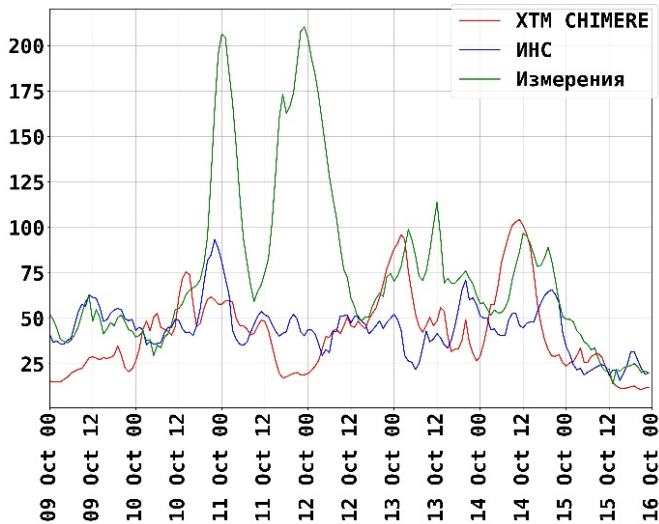


Рис. 6. Временной ход концентраций PM_{10} ($\mu\text{г}/\text{м}^3$), осредненных по измерениям на АСКЗА городского типа (зеленая линия), рассчитанных ХТМ CHIMERE (красная линия) и ИНС (синяя линия) 9–15 октября 2020 г.

Fig. 6. PM_{10} concentrations ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) averaged over urban-type stations measurements (green line), calculated by the CTM CHIMERE (red line) and ANN (blue line). October 9–15, 2020.

Еще один эпизод тестовой выборки (март 2022 г.) представляет собой уникальный редко идентифицируемый случай совместного аэрозольного загрязнения за счет местных источников и дальнего переноса из Восточной Европы. Аномально теплая погода в Москве 19–24 марта с повышением температуры до $+10\text{--}15\text{ }^\circ\text{C}$ при северо-западных ветрах привела к быстрому сходу снежного покрова: 25 марта снега практически не было. Очевидно, еще влажная подстилающая поверхность не могла быть источником значительного аэрозольного загрязнения: концентрации PM_{10} повышались до $60\text{--}80\text{ }\mu\text{г}/\text{м}^3$, и ИНС вполне успешно воспроизвела загрязнение местными источниками 22 и 23 марта (рис. 7а).

Пиковые концентрации PM_{10} в эпизоде были зафиксированы в темное время 24 и 25 марта в штилевых условиях при инверсиях до $7\text{--}8\text{ }^\circ\text{C}$. Средняя по городу концентрация PM_{10} увеличивалась до $120\text{--}150\text{ }\mu\text{г}/\text{м}^3$, на подветренных (относительно общего слабого переноса) АСКЗА Вешняки, Марьино фиксировались короткопериодный скачки PM_{10} до $280\text{--}300\text{ }\mu\text{г}/\text{м}^3$, что показательно для загрязнения за счет дальнего переноса. При характерном для ХТМ завышении PM_{10} модель вполне успешно рассчитала максимальные уровни 24 и 25 марта. Но это следует признать случайным совпадением, поскольку в эти два дня в Москву приходила воздушная масса из Восточной Европы (рис. 7б, в). Не исключено, что в Польше в середине марта, благодаря теплой без дождей погоде, начался

пахотный сезон, и в циркулирующую в антициклоне воздушную массу мог попадать почвенный аэрозоль и переноситься на большие расстояния.

Флуктуации PM_{10} 24–25 марта ИНС воспроизводила как характерные для НМУ с максимальным ростом концентраций до 80–100 $\mu\text{г}/\text{м}^3$.

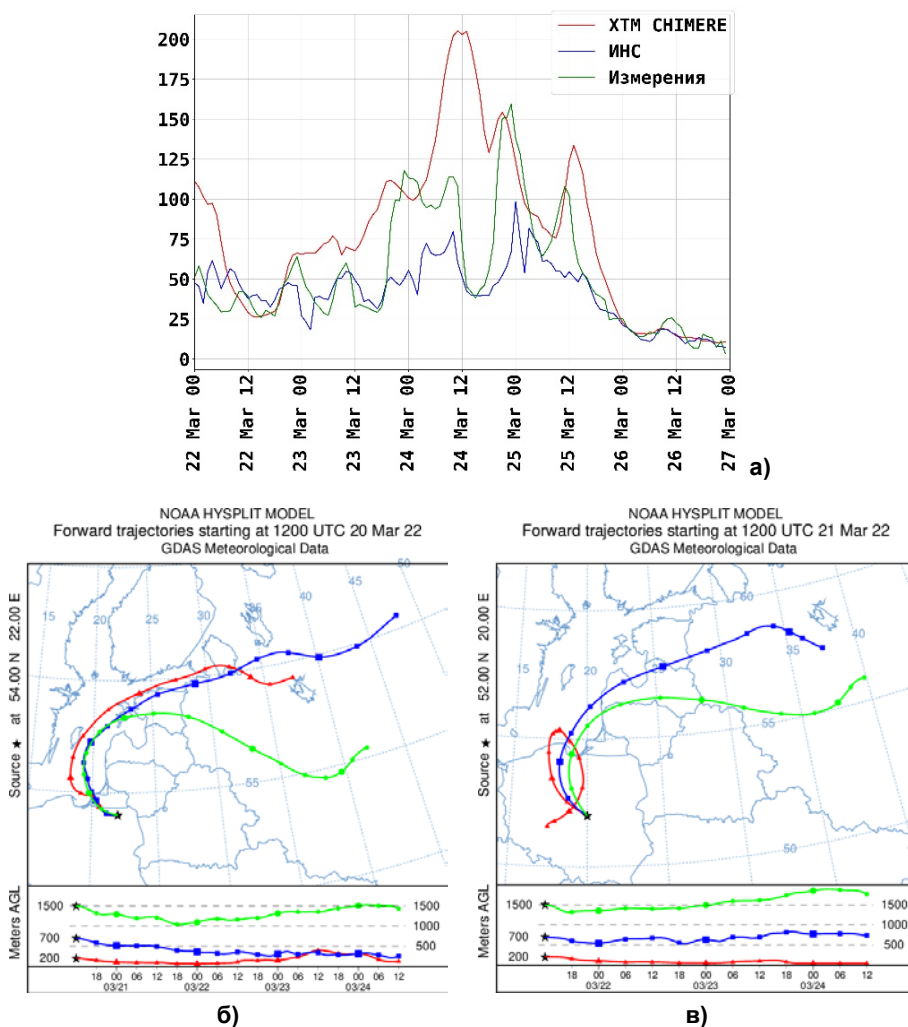


Рис. 7. Временной ход концентраций PM_{10} ($\mu\text{г}/\text{м}^3$), осредненных по измерениям на АСКЗА городского типа (зеленая линия), рассчитанных ХТМ CHIMERE (красная линия) и ИНС (синяя линия): 22–27 марта 2022 г. (а); траектории воздушных частиц, переносимые из Польши в центральные области России (б, в).

Fig. 7. PM_{10} concentrations ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) averaged over urban-type stations measurements (green line), calculated by the CTM CHIMERE (red line) and ANN (blue line), March 22–27, 2022 (a); trajectories of air particles carried from Poland to the central regions of Russia (б, в).

Тип. 3. Аэрозольное загрязнение при адвекции пирогенного аэрозоля в августе 2022 г. Весь август 2022 г. в центре ЕТР стояла аномально теплая и сухая погода. Возникшие в начале августа в Рязанской области лесные пожары перекинулись на Окский заповедник и Национальный парк «Мещёра», позже пожары появлялись в соседней Владимирской области. В Москве с 18 августа фиксировались запахи гари. В 20-х числах наблюдалась третья волна 30-градусной жары в сопровождении повышения в воздухе мелкодисперсных частиц.

Наиболее сильное аэрозольное загрязнение в Москве наблюдалось 25–29 августа (рис. 8а) в ночные и утренние часы при слабом переносе из юго-восточного сектора в условиях мощных приземных инверсий величиной 6–9 °С в нижнем 300-метровом слое. Лишь после полудня концентрация PM_{10} снижалась до обычных 30–40 $мкг/м^3$ благодаря притоку незагрязненного воздуха из верхних слоев АПС при увеличении слоя перемешивания примерно до 2 км.

Расчеты ХТМ концентрации PM_{10} на 25–26 августа показывали сильное завышение максимумов при сдвиге пиковых уровней на предполуденное время, воспроизводя ситуацию как при ночных НМУ. ИНС вполне успешно корректировала модельные расчеты, приближая концентрации к измеренным. Но 26 и 27 августа из-за приближения к Москве шлейфа пирогенного аэрозоля (рис. 8б, в) концентрации PM_{10} стали увеличиваться. Об адвекции пирогенного аэрозоля можно судить по измерениям в парковой зоне на АСКЗА МГУ: ночью на этой станции концентрация PM_{10} повышалась до 80–90 $мкг/м^3$. 28–29 августа при усилении скорости юго-восточного переноса Москва оказалась в плотном шлейфе лесных пожаров (рис. 8г, д); средняя по данным городских АСКЗА концентрация PM_{10} повысилась до 100–110 $мкг/м^3$. Такую ситуацию гибридная модель не предусматривала в отличие от предшествовавшего эпизода НМУ 25–27 августа и от последовавшего понижения аэрозольного загрязнения 30 августа после ухода из региона загрязненной пирогенным аэрозолем воздушной массы.

Заключение

В ходе проведенного исследования разработана и протестирована гибридная модель прогноза концентраций PM_{10} на территории московского региона. Гибридная модель включает искусственную нейронную сеть, обученную восстанавливать измеренные концентрации PM_{10} по прогнозам концентраций ХТМ и метеопараметров модели атмосферы. Апробированы вариации архитектуры ИНС и обучающей выборки. Тестирование ИНС проводилось на независимых выборках, включающих семь эпизодов повышенных концентраций PM_{10} в московском регионе различного происхождения.

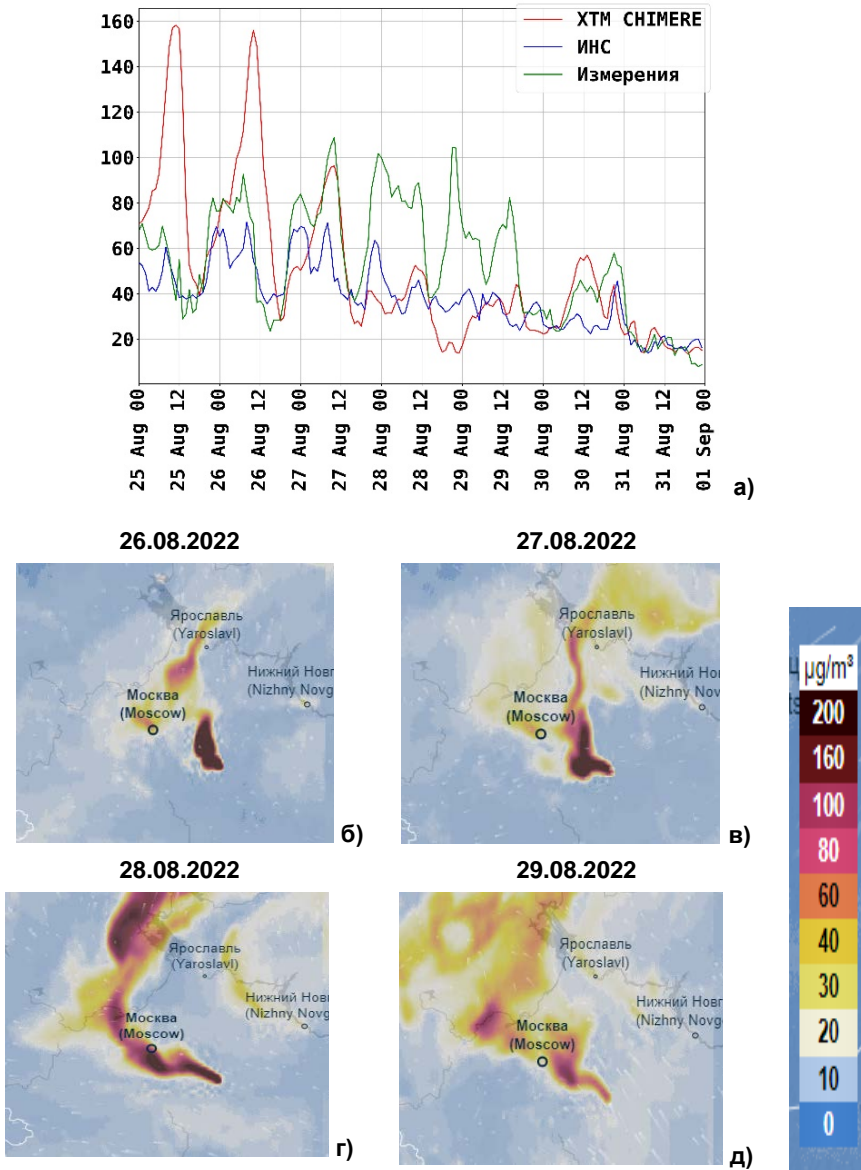


Рис. 8. Временной ход концентраций PM_{10} , осредненных по измерениям на АСКЗА городского типа (зеленая линия), рассчитанных XTM CHIMERE (красная линия) и ИНС (синяя линия) 25–31 августа 2022 г. (а); модельный расчет переноса PM_{10} из районов лесных пожаров в Рязанской области от 6 ч 26–29 августа 2022 г. (б–д) (<https://www.ventusky.com/>). Справа – шкала концентрации PM_{10} , $\mu\text{г}/\text{м}^3$.

Fig. 8. PM_{10} concentrations ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) averaged over urban-type stations measurements (green line), calculated by the CTM CHIMERE (red line) and ANN (blue line), 25–31 August 2022 (a); model calculation of PM_{10} transfer from forest fire areas in the Ryazan region, August 26–29, 2022 6 a.m. (б–д) (<https://www.ventusky.com/>). PM_{10} concentration scale ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) on the right.

Практически во всех эпизодах гибридная модель успешно моделирует изменчивость концентраций PM_{10} при ночных НМУ при характерном для таких условий повышении средней по городу концентрации до 90–100 $\mu\text{г}/\text{м}^3$, воспроизводит в отличие от ХТМ вечерние пики концентраций, хотя и занижает концентрации по сравнению с измерениями. ИНС вполне успешно показывает понижения уровня PM_{10} днем при перемешивании в АПС, предфронтальные пики PM_{10} при усилении ветра, а также уменьшение концентраций аэрозольного загрязнения при смене воздушных масс.

В смешанных эпизодах, когда повышение PM_{10} обусловлено локальными источниками и дальним переносом загрязненной воздушной массы, гибридная модель прогноза удовлетворительно предсказывает время формирования пиковых концентраций, но занижает по сравнению с измерениями концентрации.

В аэрозольных эпизодах без НМУ при дальнем переносе загрязнений, включая пирогенный аэрозоль, в Москве фиксируются максимальные уровни PM_{10} до 150–270 $\mu\text{г}/\text{м}^3$. Гибридная модель прогноза в таких ситуациях прогнозирует характерные сезонные значения PM_{10} без повышения концентраций как следствие малой повторяемости таких явлений в обучающей выборке.

Авторы выражают признательность и благодарность сотрудникам и руководству ГПБУ «Мосэкомониторинг» за поддержку исследования и предоставление данных измерений.

Список литературы

1. Борисов Д.В., Кузнецова И.Н. Постпроцессинг численных прогнозов концентраций приземного озона с использованием машинного обучения // Гидрометеорологические исследования и прогнозы. 2023. № 4 (390). С. 86–104.
2. Вильфанд Р.М., Кирсанов А.А., Ревокатова А.П., Ривин Г.С., Суркова Г.В. Прогноз перемещения и трансформации загрязняющих веществ в атмосфере с помощью модели COSMO-ART // Метеорология и гидрология. 2017. № 5. С. 31–41.
3. Кузнецова И.Н., Нахаев М.И., Кирсанов А.А., Борисов Д.В., Ткачева Ю.В., Ривин Г.С., Лезина Е.А. Тестирование и перспективы технологии прогнозирования загрязнения воздуха с применением химических транспортных моделей CHIMERE и COSMO-Ru2ART // Гидрометеорологические исследования и прогнозы. 2022. № 4 (386). С. 147–170.
4. Ривин Г.С., Розинкина И.А., Астахова Е.Д., Блинов Д.В., Бундель А.Ю., Кирсанов А.А., Шатунова М.В., Чубарова Н.Е., Алферов Д.Ю., Варенцов М.И., Захарченко Д.И., Копейкин В.В., Никитин М.А., Полохов А.А., Ревокатова А.П., Татаринovich Е.В., Чурюлин Е.В. Система краткосрочного численного прогноза высокой детализации COSMO-Ru, ее развитие и приложения // Гидрометеорологические исследования и прогнозы. 2019. №4 (374). С. 27–53.
5. Ткачева Ю.В. Методика интерполяции кусочно-линейных данных об эмиссиях автотранспорта на регулярную модельную сетку // Гидрометеорологические исследования и прогнозы. 2018. № 2 (368). С. 170–180.
6. Adil M., Kafeel A. A review on emerging artificial intelligence (AI) techniques for air pollution forecasting: Fundamentals, application and performance // Journal of Cleaner Production. 2021. Vol. 322. P. 129072. DOI: 10.1016/j.jclepro.2021.129072.

7. Kleinert F., Leufen L., Lupascu A., Butler T., Schultz M. Representing chemical history in ozone time-series predictions - a model experiment study building on the MLAir (v1.5) deep learning framework // *Geoscientific Model Development*. 2022. Vol. 15. P. 8913-8930. DOI: 10.5194/gmd-15-8913-2022.

8. Min X., Jianbing J., Guoqiang W., Arjo S., Tuo D., Hai X.L. Machine learning based bias correction for numerical chemical transport models // *Atmospheric Environment*. 2021. Vol. 248. P. 118022. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2020.118022.

9. Zhang Y., Baklanov A. (Eds.) *Training Materials and Best Practices for Chemical Weather/Air Quality Forecasting*. The First Edition ETR-26. Geneva, Switzerland, World Meteorological Organization (WMO), 2020. 576 p.

10. Zhang Z., Johansson C., Engardt M., Ma X. Improving 3-day deterministic air pollution forecasts using machine learning algorithms // *Atmospheric Chemistry and Physics*. 2024. Vol. 24. P. 807-851. DOI: 10.5194/acp-24-807-2024.

References

1. Borisov D.V., Kuznetsova I.N. Post-processing of ground-level ozone numerical forecasts using machine learning. *Gidrometeorologicheskie issledovaniya i prognozy [Hydrometeorological Research and Forecasting]*, 2023, vol. 390, no. 4, pp. 86-104 [in Russ.].

2. Vil'fand, R.M., Kirsanov, A.A., Revokatova, A.P., Rivin G.S., Surkova G.V. Forecasting the transport and transformation of atmospheric pollutants with the COSMO-ART model. *Russ. Meteorol. Hydrol.*, 2017, vol. 42, pp. 292-298. DOI: 10.3103/S106837391705003X.

3. Kuznetsova I.N., Nakhaev M.I., Kirsanov A.A., Borisov D.V., Tkacheva Yu.V., Rivin G.S., Lezina E.A. Testing and prospects of air pollution prediction technology based on CHIMERE and COSMO-Ru2ART chemical transport models. *Gidrometeorologicheskie issledovaniya i prognozy [Hydrometeorological Research and Forecasting]*, 2022, vol. 386, no. 4, pp. 147-170 [in Russ.].

4. Rivin G.S., Rozinkina I.A., Astakhova E.D., Blinov D.V., Bundel' A.Yu., Kirsanov A.A., Shatunova M.V., Chubarova N.Ye., Alferov D.Yu., Varentsov M.I., Zakharchenko D.I., Kopeykin V.V., Nikitin M.A., Poliukhov A.A., Revokatova A.P., Tatarinovich E.V., Churiulin E.V. COSMO-Ru high-resolution short-range numerical weather prediction system: its development and applications. *Gidrometeorologicheskie issledovaniya i prognozy [Hydrometeorological Research and Forecasting]*, 2019, vol. 374, no. 4, pp. 27-53 [in Russ.].

5. Tkacheva Ju.V. Methodology of interpolating piecewise linear data on vehicle emissions on a regular model grid. *Gidrometeorologicheskie issledovaniya i prognozy [Hydrometeorological Research and Forecasting]*, 2018, vol. 368, no. 2, pp. 170-180 [in Russ.].

6. Adil M., Kafeel A. A review on emerging artificial intelligence (AI) techniques for air pollution forecasting: Fundamentals, application and performance. *Journal of Cleaner Production*. 2021, vol. 322, pp. 129072. DOI: 10.1016/j.jclepro.2021.129072.

7. Kleinert F., Leufen L., Lupascu A., Butler T., Schultz M. Representing chemical history in ozone time-series predictions - a model experiment study building on the MLAir (v1.5) deep learning framework. *Geoscientific Model Development*, 2022, vol. 15, pp. 8913-8930. DOI: 10.5194/gmd-15-8913-2022.

8. Min X., Jianbing J., Guoqiang W., Arjo S., Tuo D., Hai X.L. Machine learning based bias correction for numerical chemical transport models. *Atmospheric Environment*, 2021, vol. 248, pp. 118022. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2020.118022.

9. Zhang Y., Baklanov A. (Eds.) Training Materials and Best Practices for Chemical Weather/Air Quality Forecasting. The First Edition ETR-26. Geneva, Switzerland, World Meteorological Organization (WMO), 2020, 576 p.

10. Zhang Z., Johansson C., Engardt M., Ma X. Improving 3-day deterministic air pollution forecasts using machine learning algorithms. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2024, vol. 24, pp. 807-851. DOI: 10.5194/acp-24-807-2024.

Поступила 26.08.2024; одобрена после рецензирования 24.09.2024;

принята в печать 15.10.2024.

Submitted 26.08.2024; approved after reviewing 24.09.2024;

accepted for publication 15.10.2024.