

*V Всероссийская конференция с международным участием
“Турбулентность, динамика атмосферы и климата”,
посвященная памяти академика Александра Михайловича Обухова*



**Интеграция химической транспортной модели и искусственной нейронной сети
для повышения качества прогноза воздушных концентраций O₃ и PM₁₀**

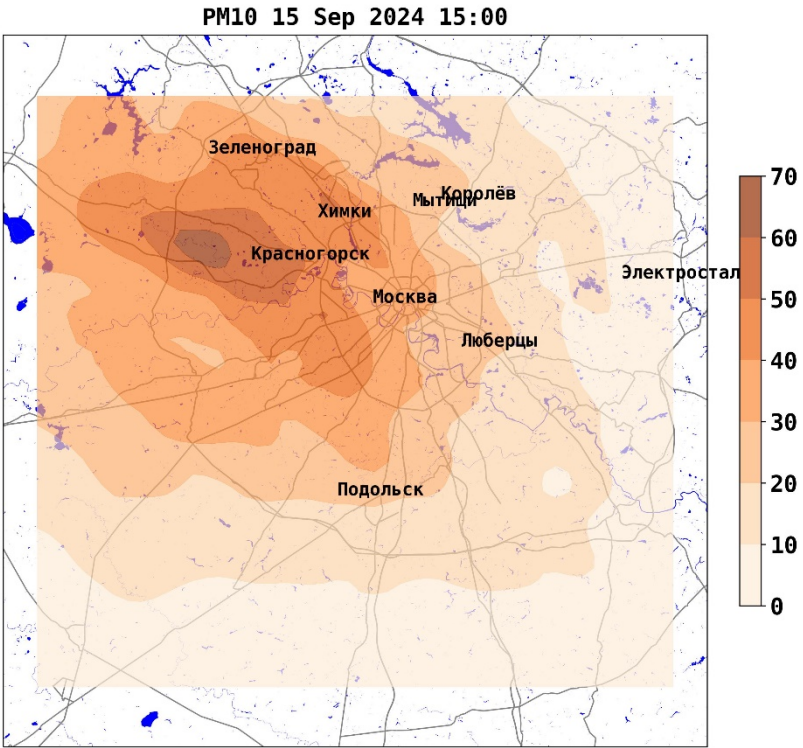
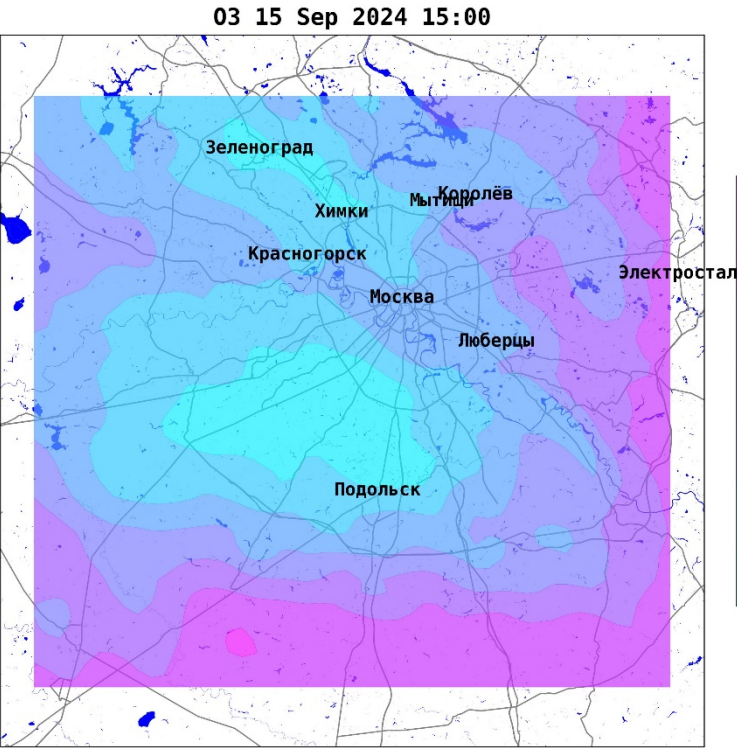
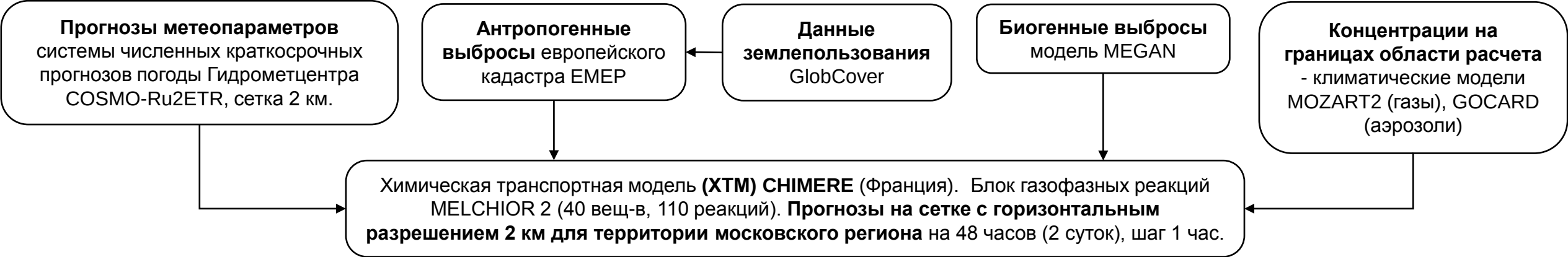
м.н.с Борисов Данил Владимирович

д.г.н., г.н.с Кузнецова Ирина Николаевна

ФГБУ “Гидрометцентр России”, Отдел численных краткосрочных прогнозов погоды, Группа прогнозирования метеорологических условий загрязнения

19–21 ноября 2024 г. Москва

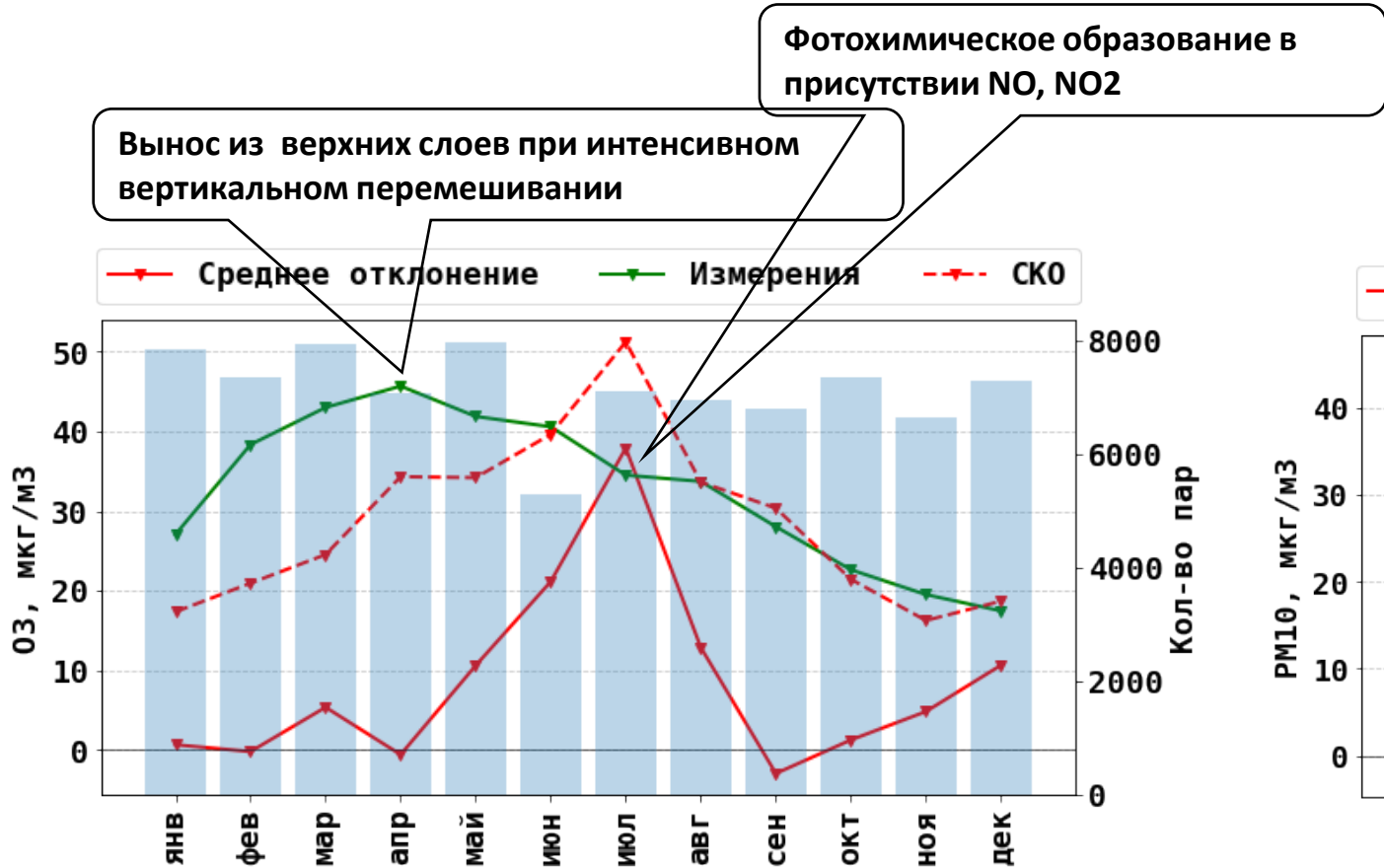
Актуальность. Прогнозирование загрязнения воздуха в Гидрометцентре России.



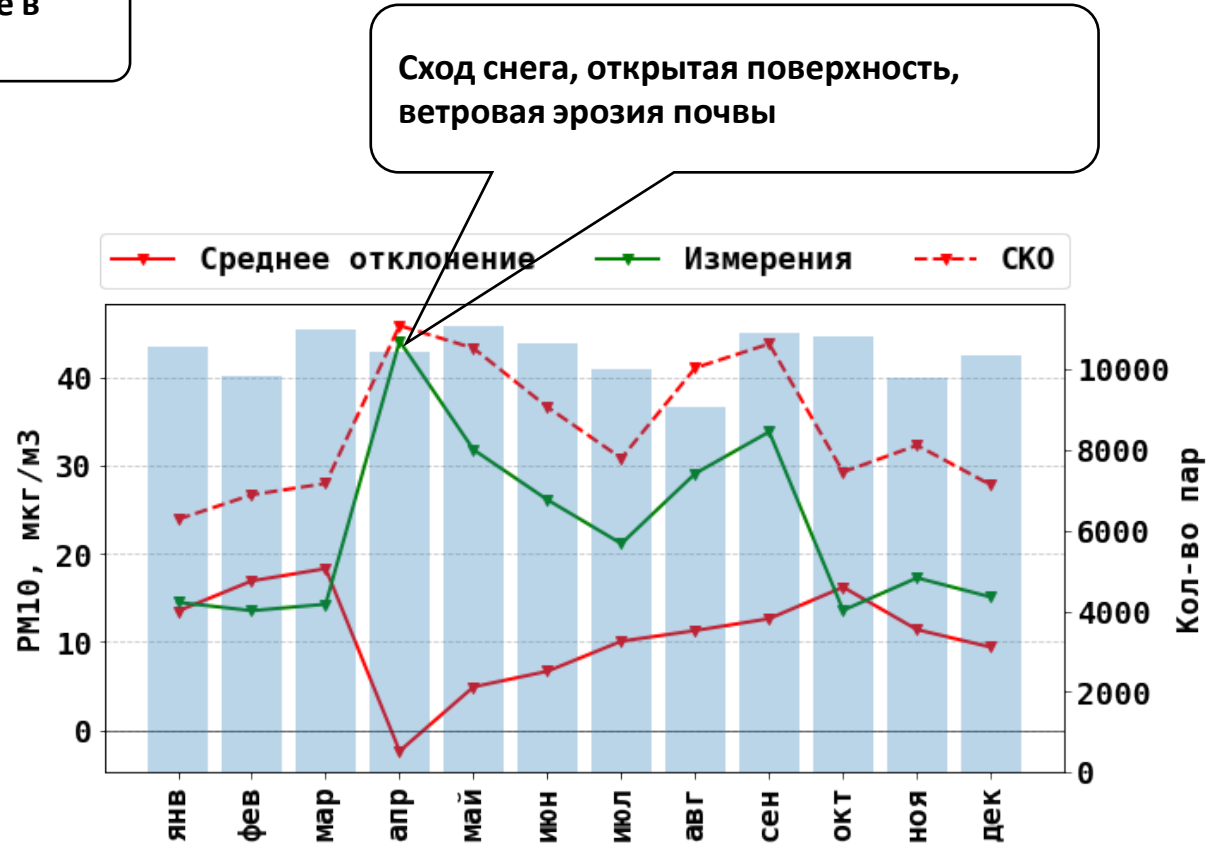
Верификация прогнозов ХТМ CHIMERE по данным измерений автоматических станций контроля загрязнения атмосферы (АСКЗА) в Москве ГПБУ "Мосэкомониторинг"

Проблема. Отклонения прогнозов загрязнения воздуха XTM CHIMERE.
Среднегодовая изменчивость концентраций O3 и PM10.

Приземный озон (O3)

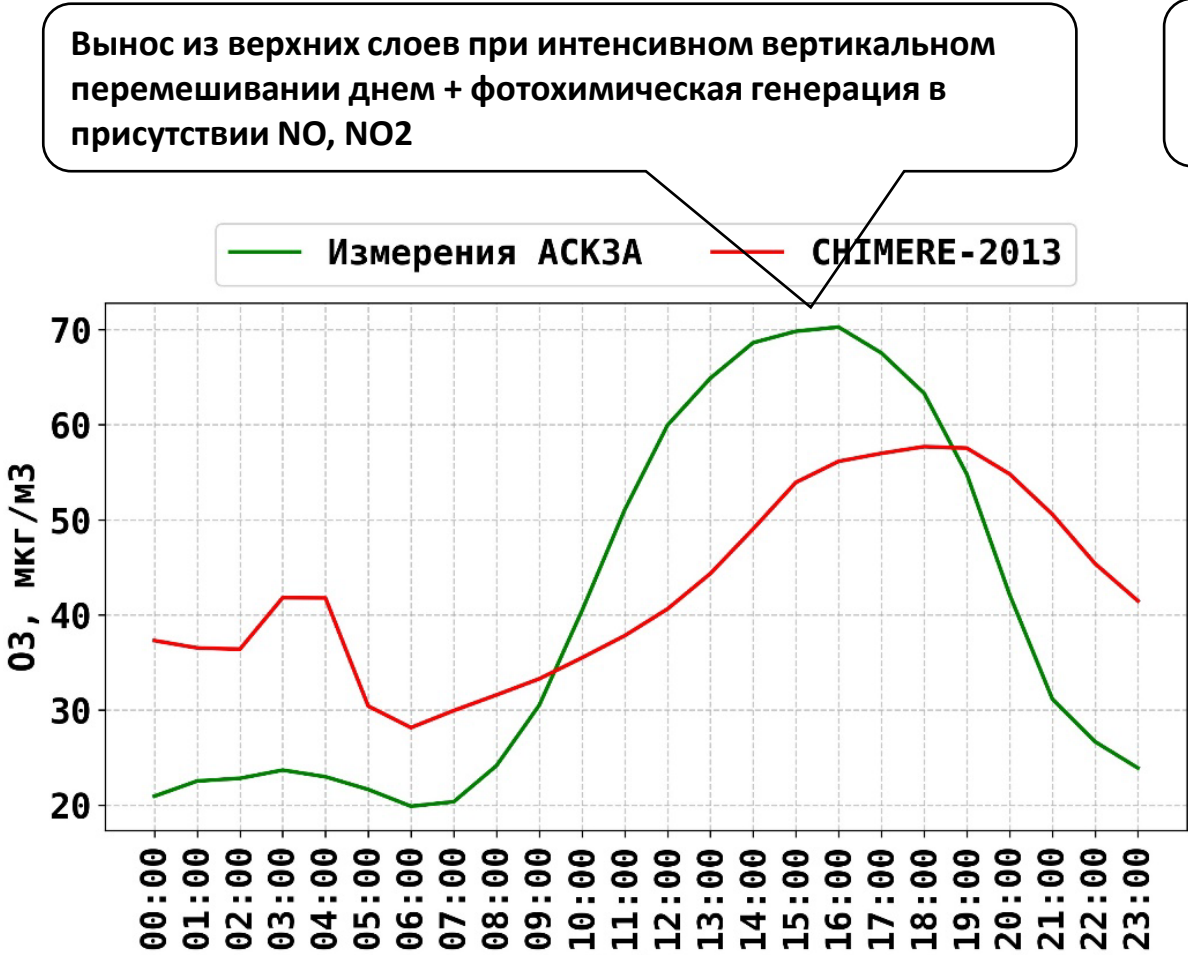


Взвешенные частицы (PM10)

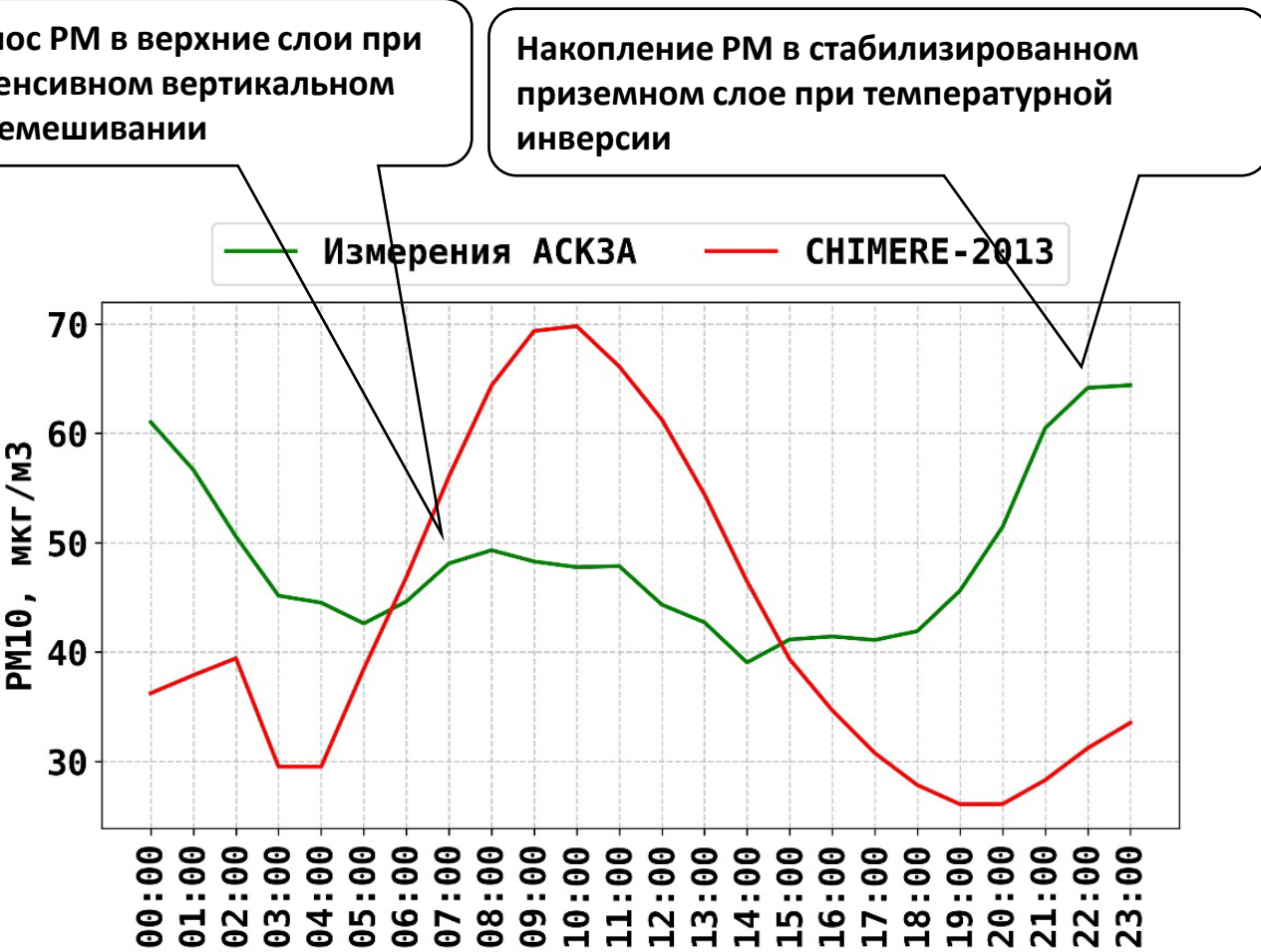


**Проблема. Отклонения прогнозов загрязнения воздуха XTM CHIMERE.
Среднесуточная изменчивость концентраций O3 и PM10, апрель 2023.**

Приземный озон (O3)



Взвешенные частицы (PM10)



Используемые методы и способы повышения качества прогнозов ХТМ CHIMERE

На этапе препроцессинга:

1. Шалыгина И.Ю., Кузнецова И. Н, Нахаев М.И., Борисов Д.В., Лезина Е.А. **Эффективность коррекции эмиссий** для расчетов химической транспортной модели CHIMERE в московском регионе. // Оптика атмосферы и океана 33 №6 2020. С. 441-447.
2. Борисов Д.В., И.Ю. Шалыгина. **Уточнение данных о землепользовании** для расчетов эмиссий в химической транспортной модели CHIMERE на примере нижегородского региона / Гидрометеорологические исследования и прогнозы. 2021. №3 (381), с.150-161. DOI: <https://doi.org/10.37162/2618-9631-2021-3-77-94>
3. Д.В. Борисов, И.Н. Кузнецова, М.И. Нахаев. **Изменения кадастровых данных о выбросах** в атмосферу загрязняющих веществ в московском регионе // Гидрометеорологические исследования и прогнозы. 2023. № 2 (388). С. 156-173. DOI: <https://doi.org/10.37162/2618-9631-2023-2-156-173>

На этапе постпроцессинга:

4. Статистическая коррекция суточной изменчивости спрогнозированных ХТМ концентраций по данным измерений

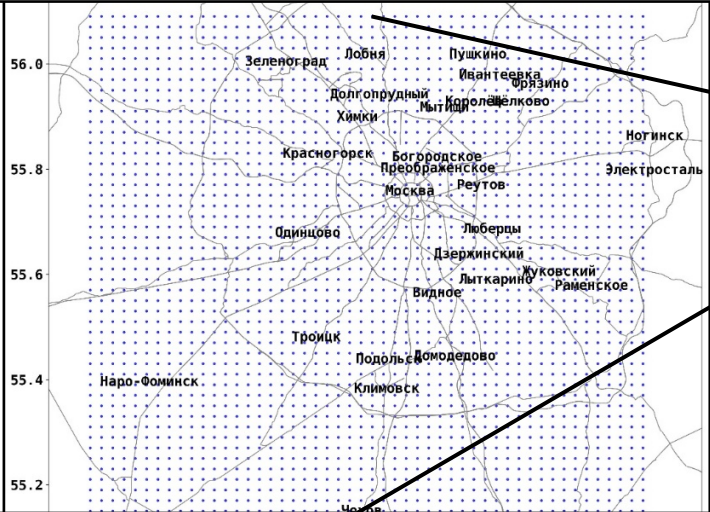
Предлагаемый подход:

Коррекция первичных прогнозов ХТМ с применением модели машинного обучения, обученной с использованием данных наземных измерений концентраций (ML-коррекция).

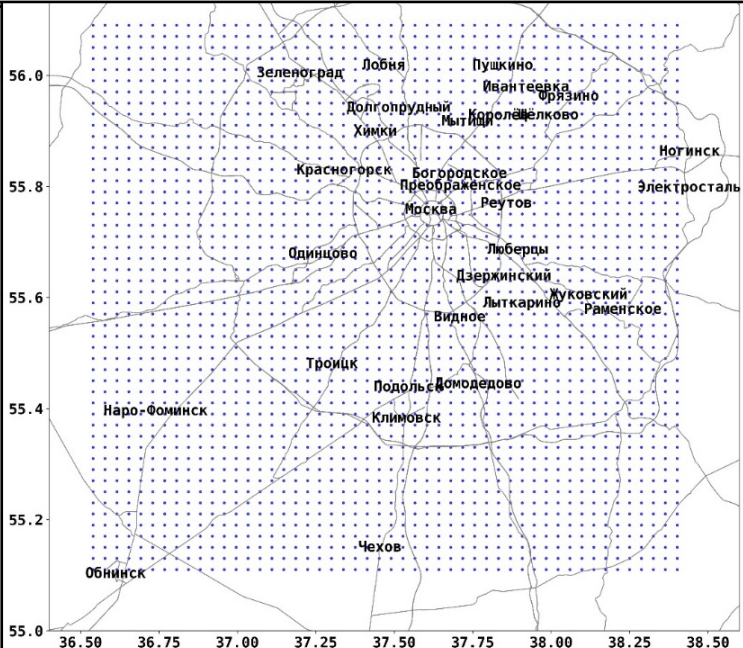
По данным Всемирной организации здравоохранения (ВОЗ) ОЗ и РМ10 являются приоритетными показателями при оценке качества воздуха. Повышенное содержание в приземном слое воздуха ОЗ и РМ10 вызывает острые и хронические заболевания.

Методика. Формирование обучающей выборки.

Часовые прогнозы CHIMERE на первые сутки, сетка 2 км, 2019-2024 гг.



Часовые прогнозы COSMO-Ru на первые сутки, сетка 2 км, 2019-2024 гг.



Предикторы обучения

О ₃ – 20 предикторов	PM ₁₀ – 20 предикторов
Прогнозы концентарций	
О ₃ , NO, NO ₂	PM ₁₀
Прогнозы метеопараметров	
T ₂ , h _{апс} , ρ, Precip, V ₁₀ , SRad,	T ₂ , h _{апс} , ρ, Precip, V ₁₀ ,
Tgrad 2-200, Tgrad 2-750, V ₇₅₀ , dd ₇₅₀	Tgrad 2-200, Tgrad 2-400, Tgrad 2-750, V ₇₅₀ , V ₄₀₀ , V ₁₅₀₀ , dd ₇₅₀ , dd ₁₅₀₀
Временная метка	
Месяц, день недели, час, заблаговременность прогноза (1-24)	Месяц, день недели, час, Заблаговременность прогноза (1-24)
Среднесуточное содержание О ₃ в атмосферном столбе	
Транспортный выброс в узле (т/год)	
Плотность дорог в узле (км/км ²)	

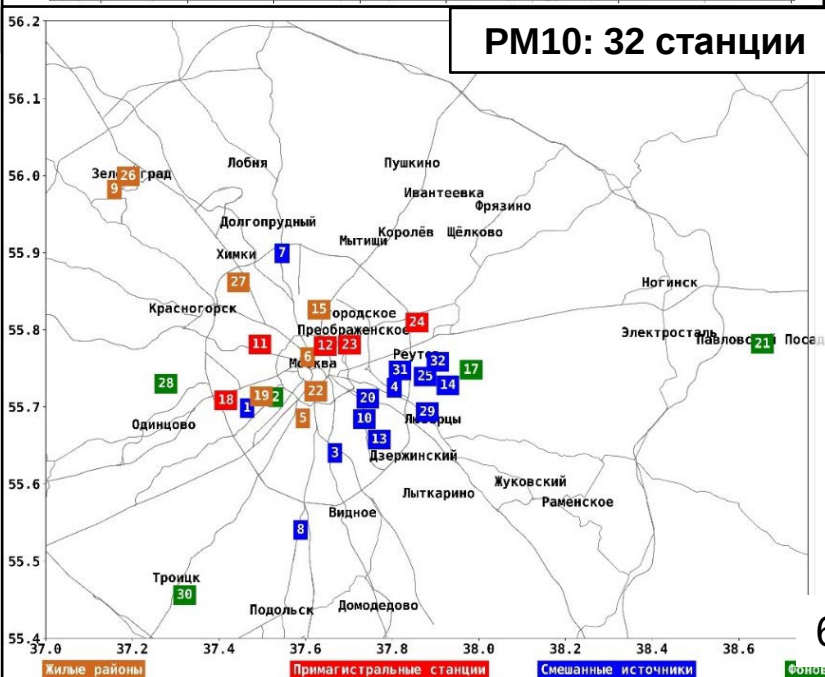
Часовые измерения концентраций 2019-2024 гг.

О₃: 25 станций

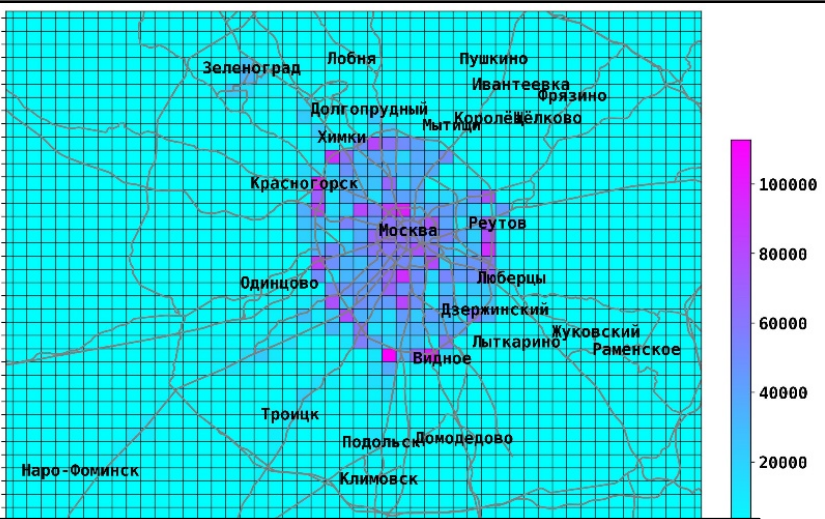


Синхронизация прогноз-измерение по часу и узлу

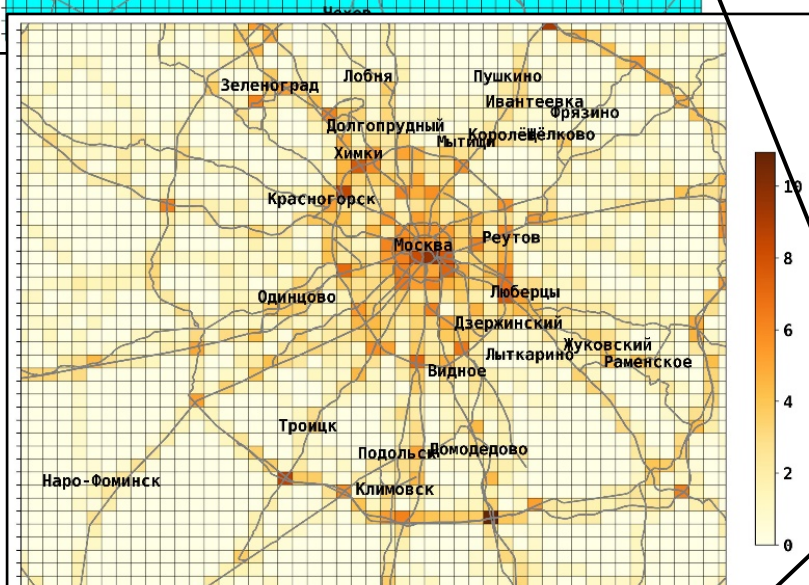
PM₁₀: 32 станции



Методика. Формирование обучающей выборки.



Среднегодовые транспортные выбросы ($const_t$)
НИИАТ (Ю.В. Ткачева)

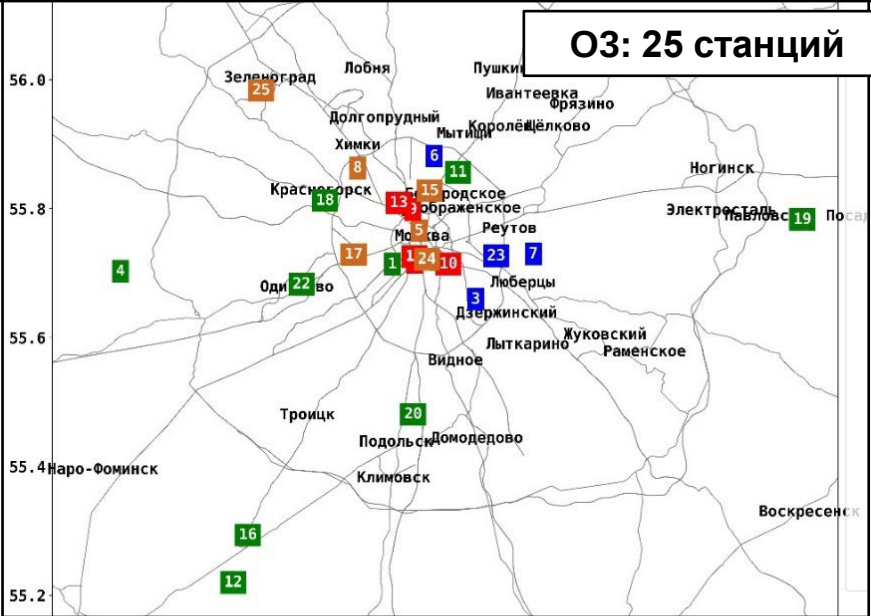


Плотность автомобильных дорог ($const_t$)
OpenStreetMaps (А.А. Кирсанов)

Предикторы обучения

О ₃ – 20 предикторов	PM ₁₀ – 20 предикторов
Прогнозы CHIMERE	
О ₃ , NO, NO ₂	PM ₁₀
Прогнозы COSMO-Ru2	
T ₂ , h _{апс} , ρ, Precip, V ₁₀ , SRad,	T ₂ , h _{апс} , ρ, Precip, V ₁₀ ,
Tgrad 2-200, Tgrad 2-750, V ₇₅₀ , dd ₇₅₀	Tgrad 2-200, Tgrad 2-400, Tgrad 2-750, V ₇₅₀ , V ₄₀₀ , V ₁₅₀₀ , dd ₇₅₀ , dd ₁₅₀₀
Временная метка	
Месяц, день недели, час, заблаговременность прогноза (1-24)	Месяц, день недели, час, Заблаговременность прогноза (1-24)
Среднесуточное содержание О ₃ в атмосферном столбе	
↓ Транспортный выброс в узле (т/год)	
↑ Плотность дорог в узле (км/км ²)	

Часовые измерения концентраций 2019-2024 гг.



О₃: 25 станций



PM10: 32 станции

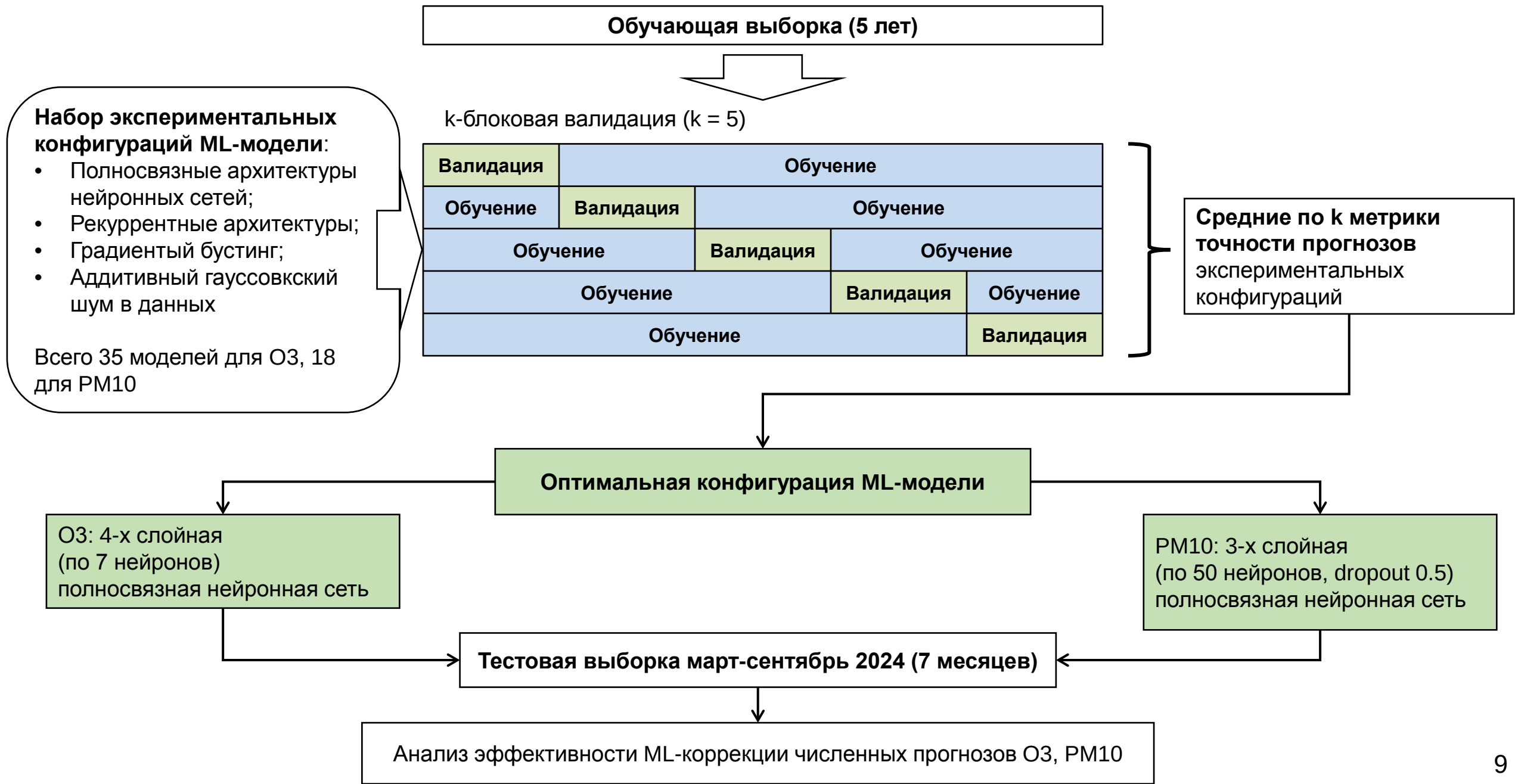
Синхронизация по узлу сетки

Объемы обучающих/тестовых выборок

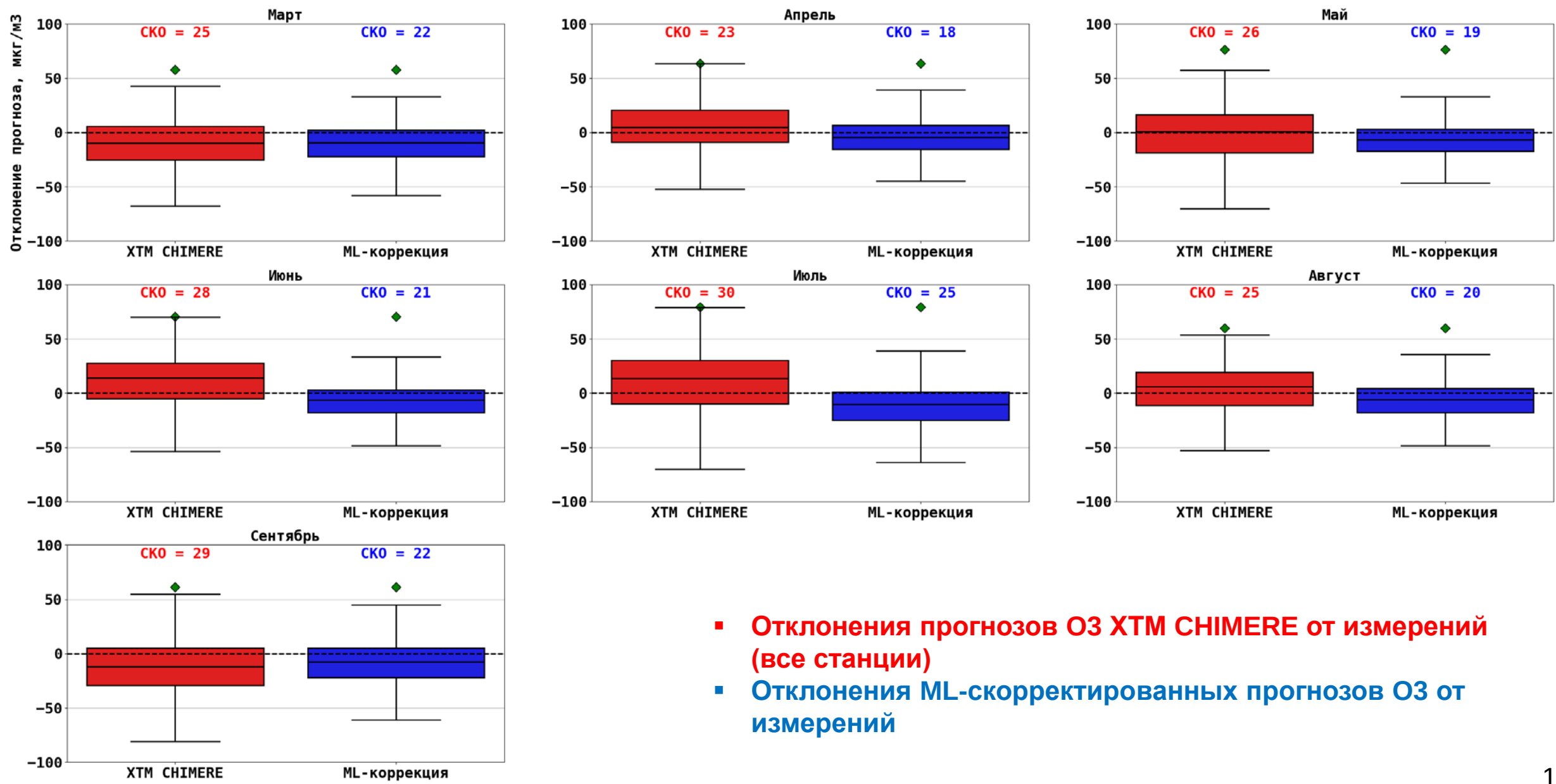
Количество пар прогноз-измерение O3						
	2019	2020	2021	2022	2023	2024
январь		10304	12341	13427	14325	11569
февраль	5090	9035	9866	12467	13945	13578
март	6860	10265	13086	10857	15295	13192
апрель	6435	9194	12043	13411	13067	12595
май	6720	9474	6183	14432	14494	13343
июнь	6536	8243	0	10949	9989	11011
июль	6810	7568	0	10193	13459	13029
август	6910	9360	0	14909	12866	13847
сентябрь	7558	9454	0	7599	13135	13479
октябрь	7124	8962	15160	8146	13445	Тестовая выборка, объем 90496 пар
ноябрь	7366	9624	11749	14254	12491	
декабрь	4382	10056	13897	12911	13640	
	Обучающая выборка, объем 606508 пар					Всего 697004 пар

Количество пар прогноз-измерение PM10						
	2019	2020	2021	2022	2023	2024
январь		16908	13930	14368	14783	13801
февраль	11029	14674	12518	13334	13541	15414
март	14894	16655	14682	11496	15414	16435
апрель	14170	15904	13559	14434	14054	15202
май	14660	16889	7231	14893	14760	15917
июнь	14917	15224	0	12979	14109	15903
июль	14479	12243	0	13154	14103	15421
август	13337	10986	0	13591	13335	14481
сентябрь	14621	11643	0	7126	15348	14565
октябрь	14202	13167	13767	8386	14702	Тестовая выборка, объем 107924 пары
ноябрь	14544	11824	12133	14904	14027	
декабрь	7711	13002	15293	13009	14720	
	Обучающая выборка, объем 745366 пар					Всего 882505 пар

Методика. Поиск оптимальной конфигураций ML моделей для коррекции прогнозов ОЗ, РМ10.

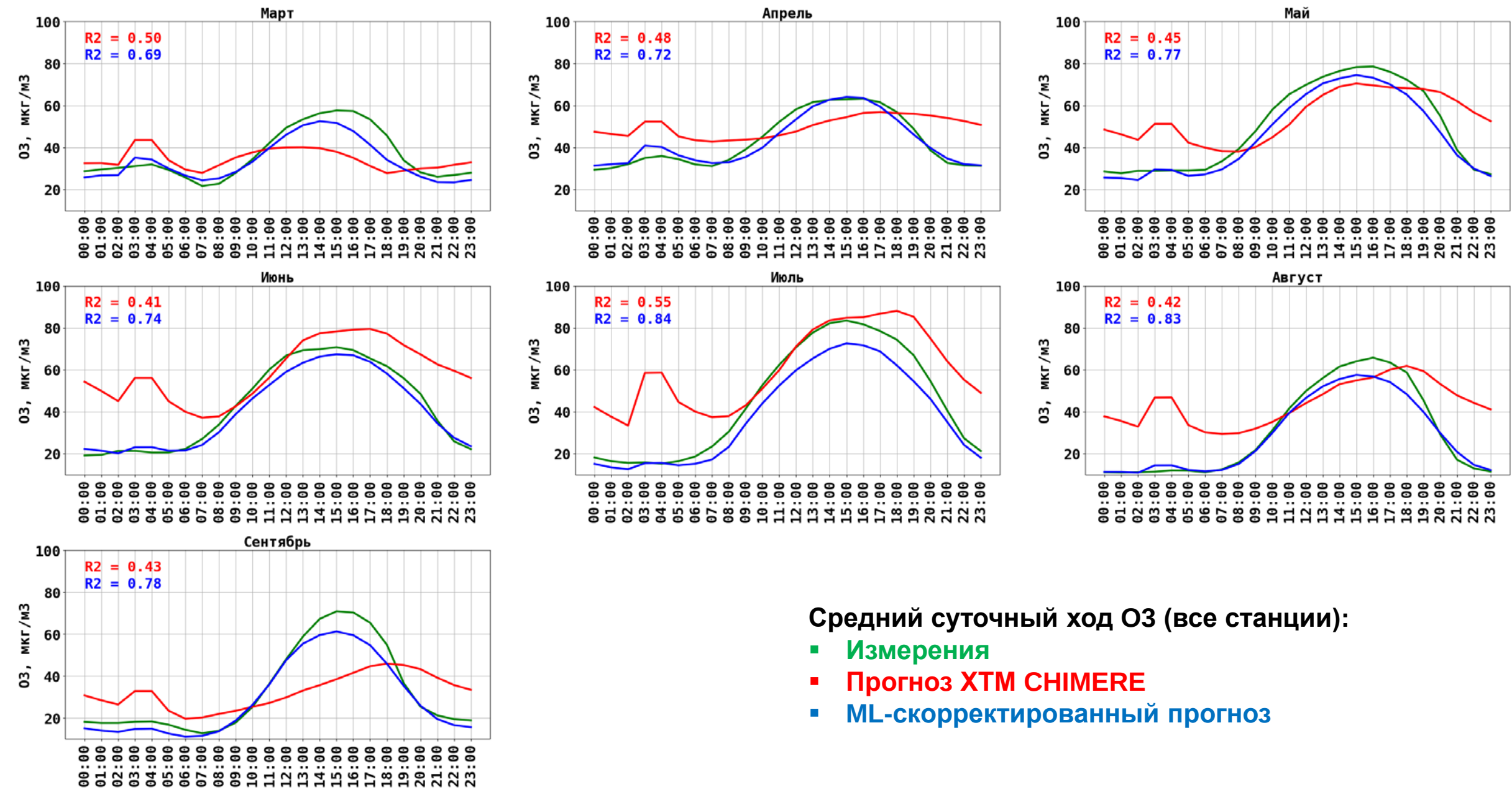


Эффективность ML-коррекции прогнозов концентраций приземного озона.



Эффективность ML-коррекции часовых прогнозов концентраций приземного озона.

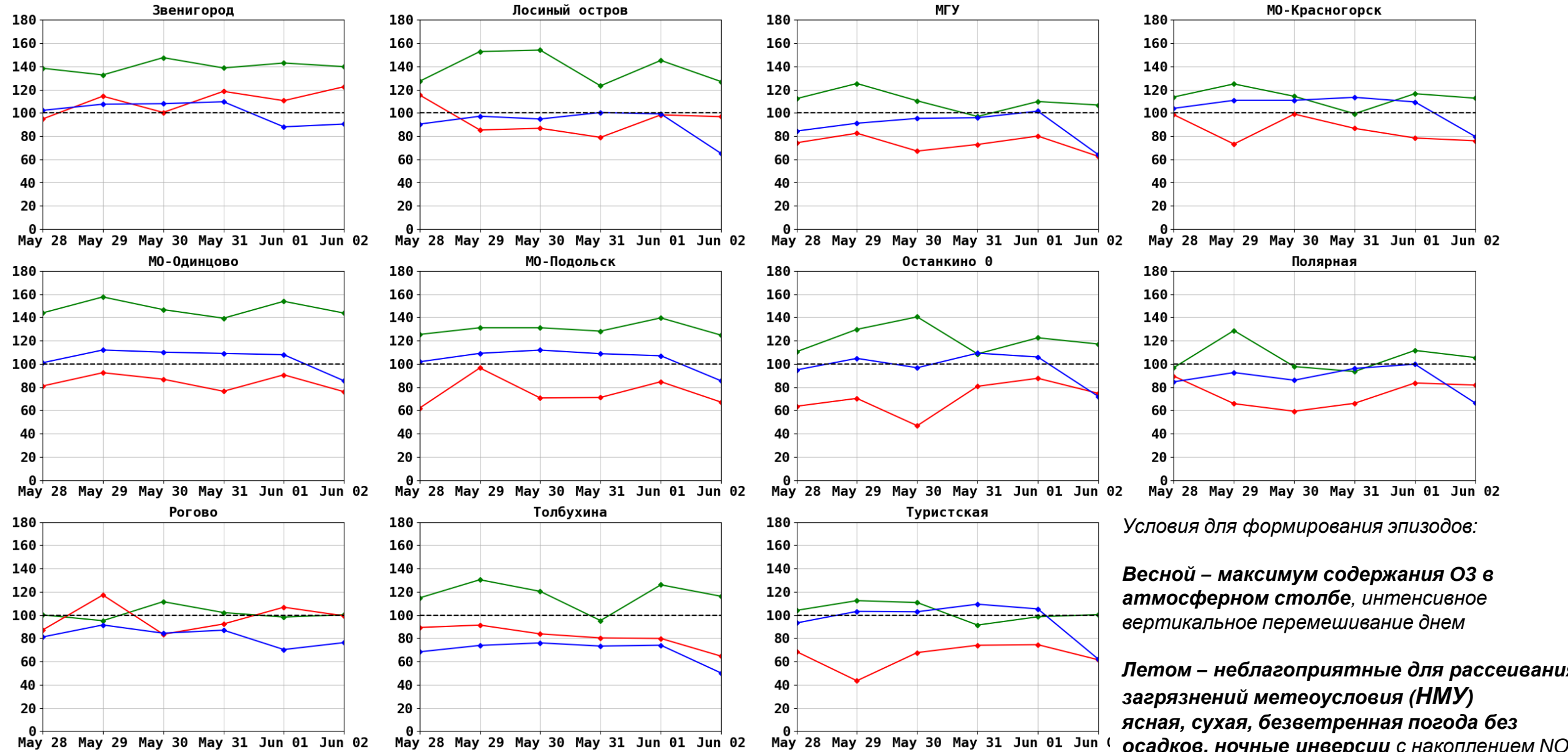
Коррекция суточного хода концентраций.



ML-коррекция в эпизодах повышенного озонного загрязнения.

28 мая – 02 июня 2024 г.

Всего превышений: 56
Предсказано ИНС: 25 (45%)
Предсказано CHIMERE: 6 (11%)

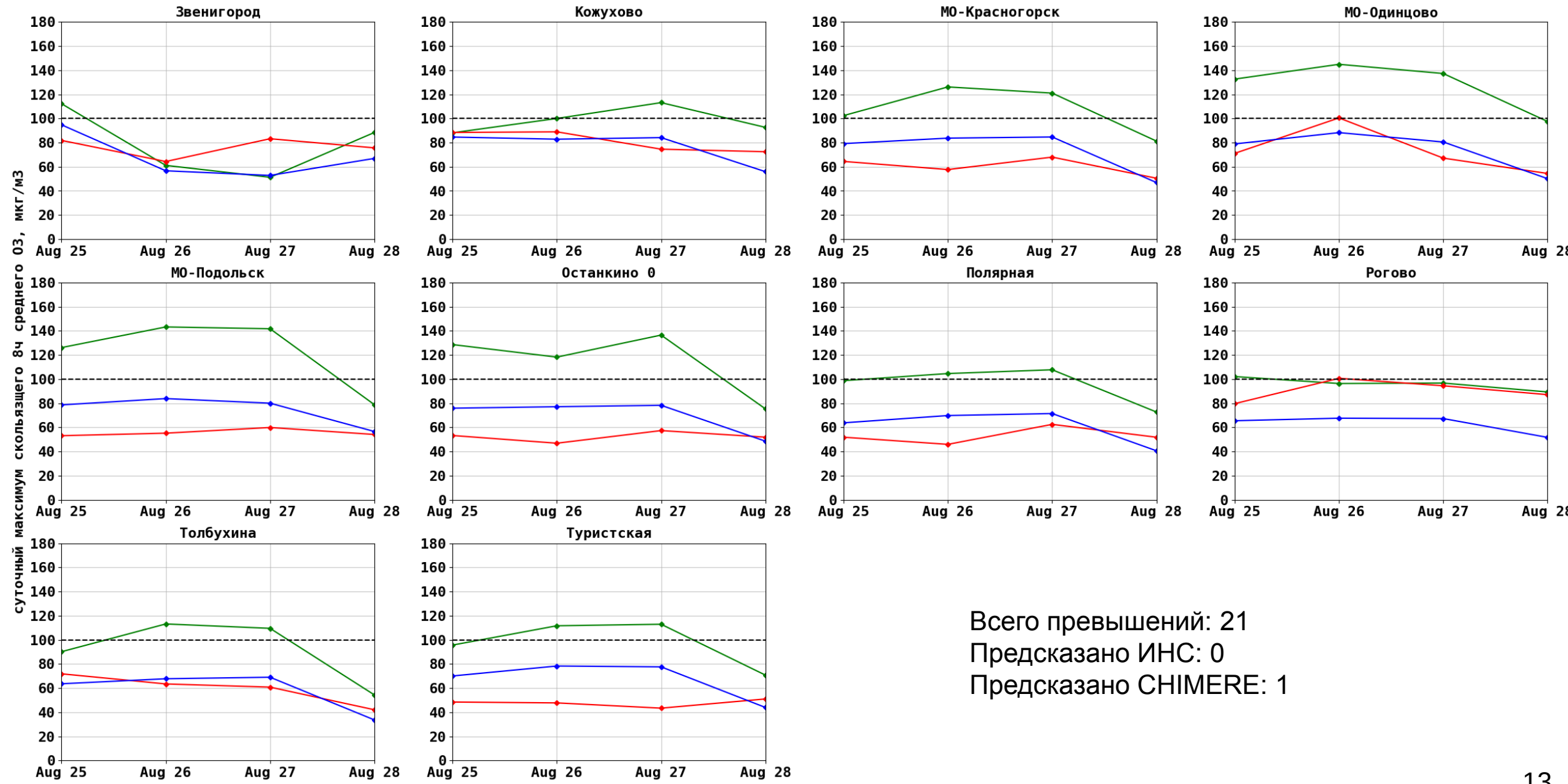


Условия для формирования эпизодов:

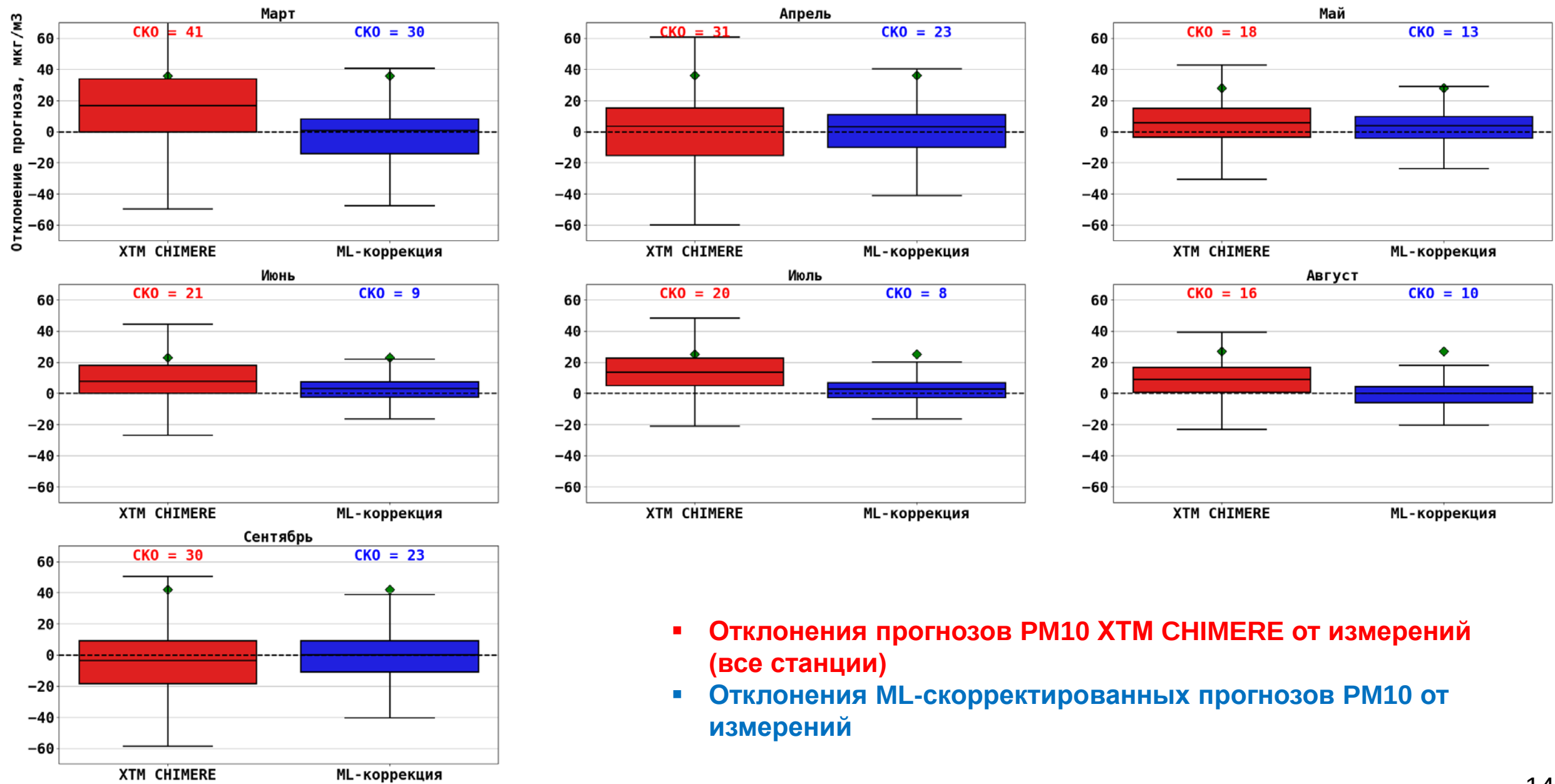
Весной – максимум содержания ОЗ в атмосферном столбе, интенсивное вертикальное перемешивание днем

Летом – неблагоприятные для рассеивания загрязнений метеоусловия (НМУ) ясная, сухая, безветренная погода без осадков, ночные инверсии с накоплением NO, NO2 - предшественников ОЗ

**ML-коррекция в эпизодах повышенного озонного загрязнения.
25 – 28 августа 2024 г.**



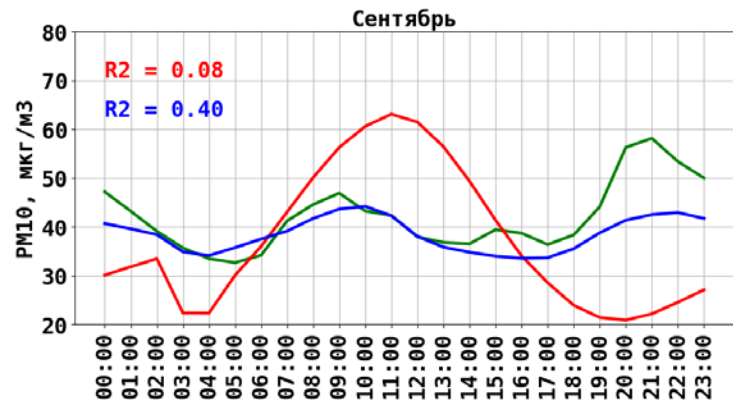
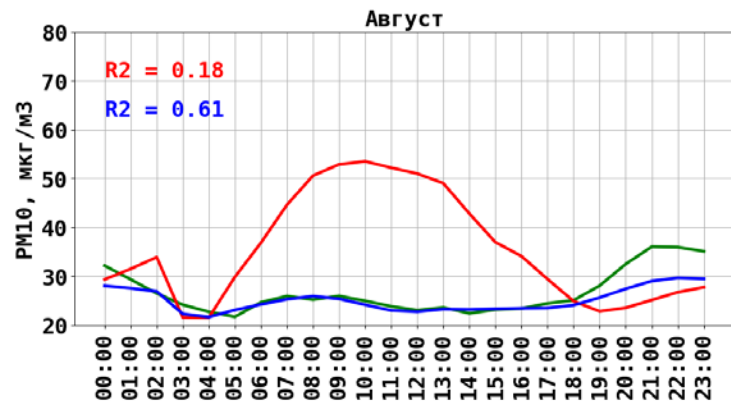
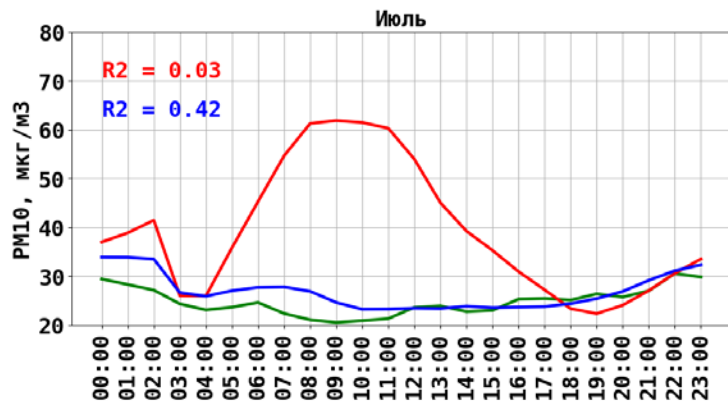
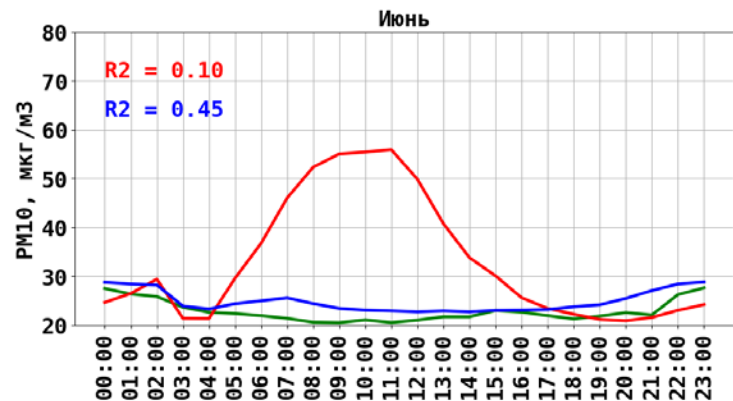
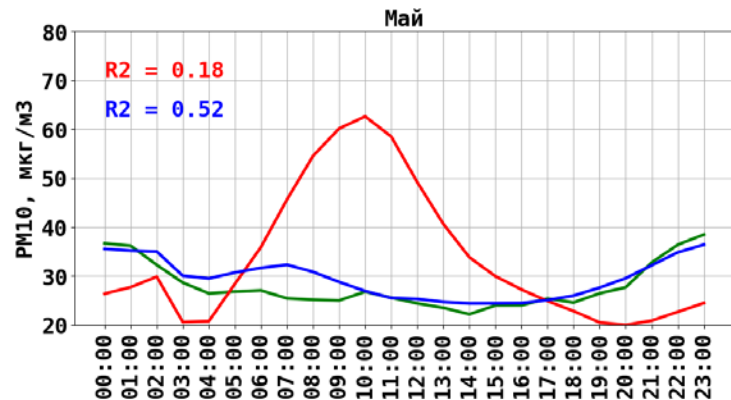
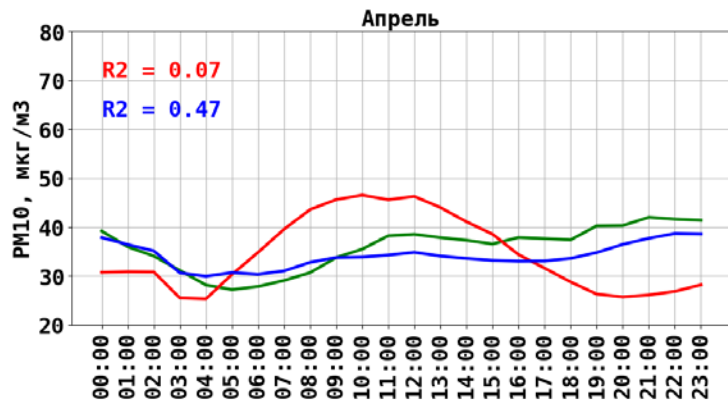
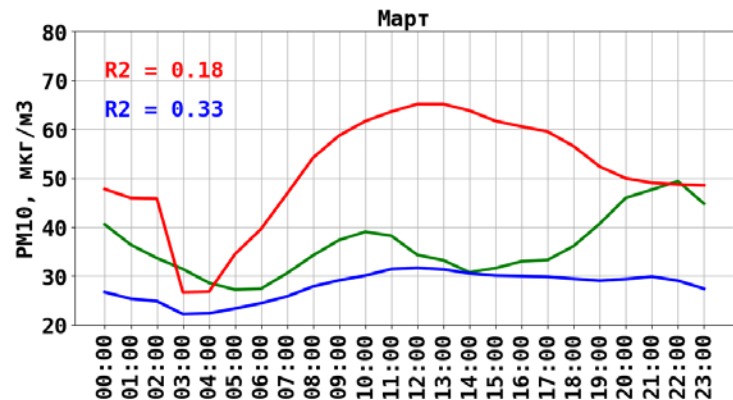
Эффективность коррекции прогнозов концентраций взвешенных частиц PM10.



- Отклонения прогнозов PM10 XTM CHIMERE от измерений (все станции)
- Отклонения ML-скорректированных прогнозов PM10 от измерений

Эффективность коррекции часовых прогнозов концентраций взвешенных частиц PM10.

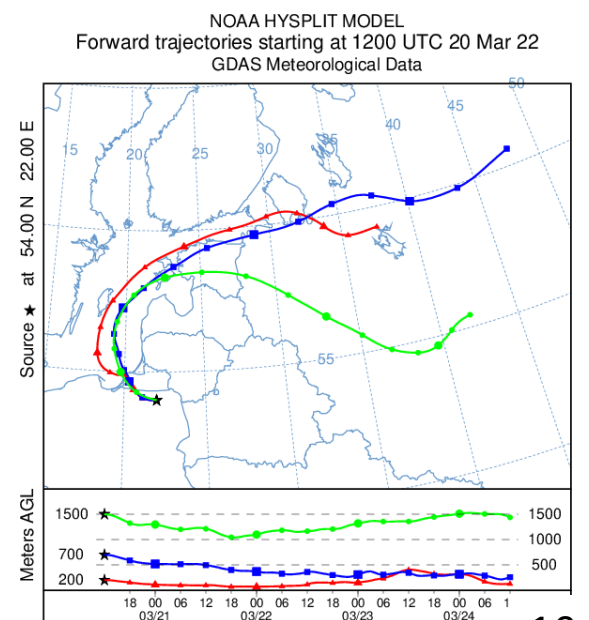
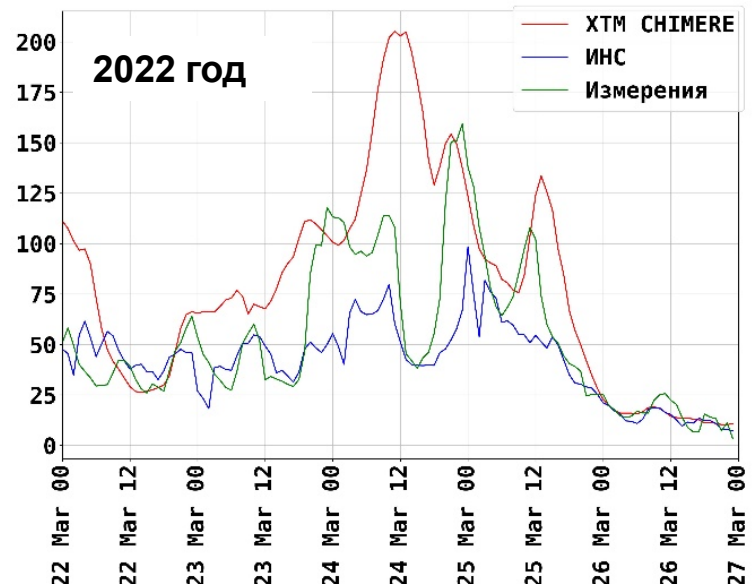
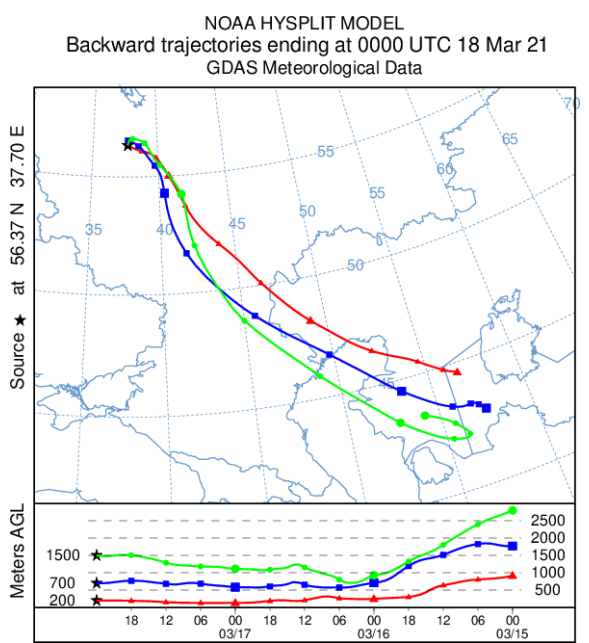
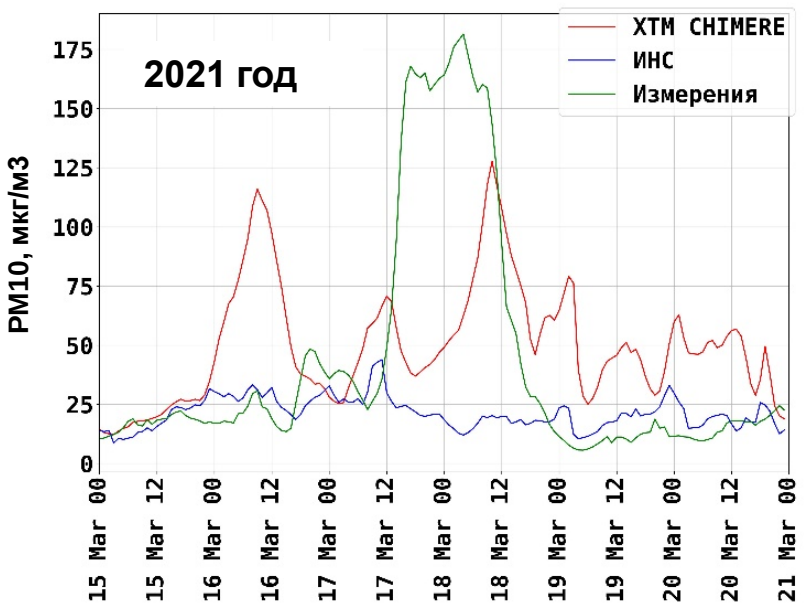
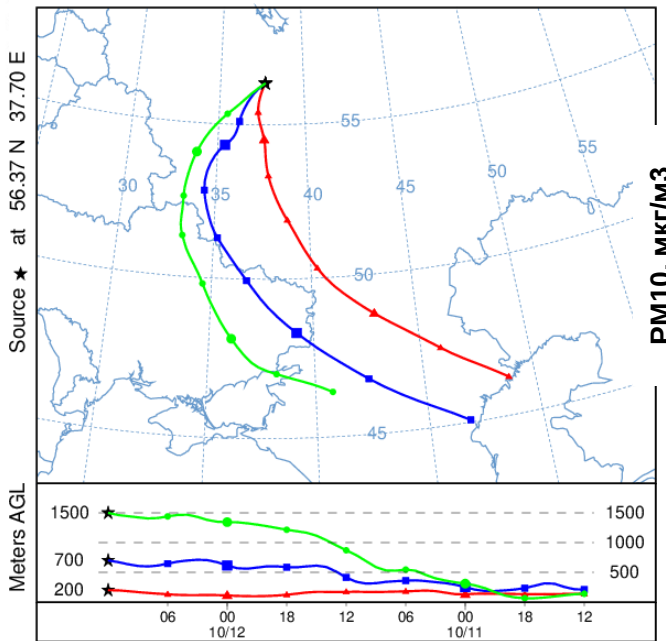
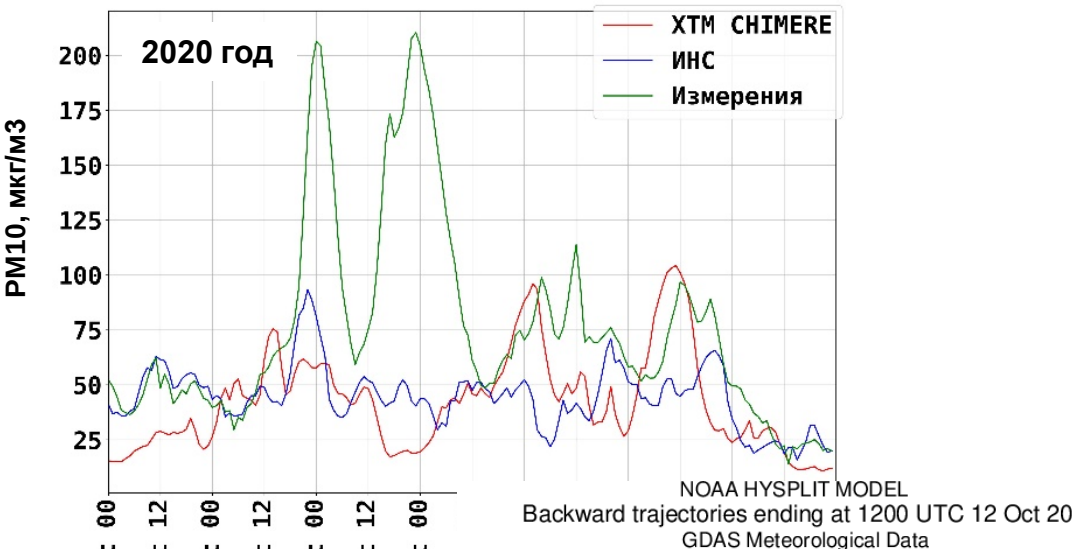
Коррекция суточного хода концентраций.



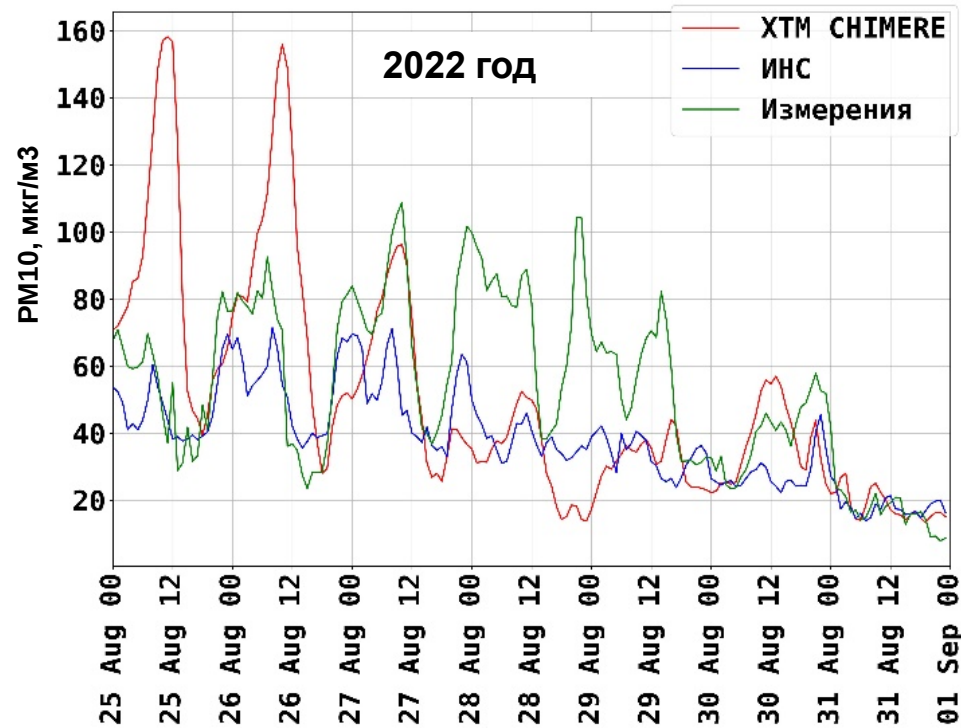
Средний суточный ход PM10 (все станции):

- Измерения
- Прогноз XTM CHIMERE
- ML-скорректированный прогноз

Эпизоды повышенного загрязнения РМ10 в московском регионе. Дальний перенос аэрозолей.



Эпизоды повышенного загрязнения РМ10 в московском регионе. Перенос пирогенных аэрозолей из районов лесных пожаров.

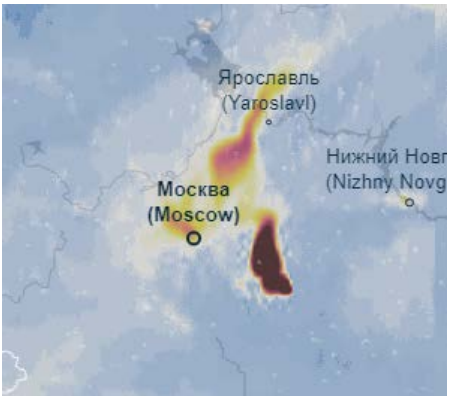


+ НМУ – неблагоприятные для рассеивания загрязнений метеоусловия

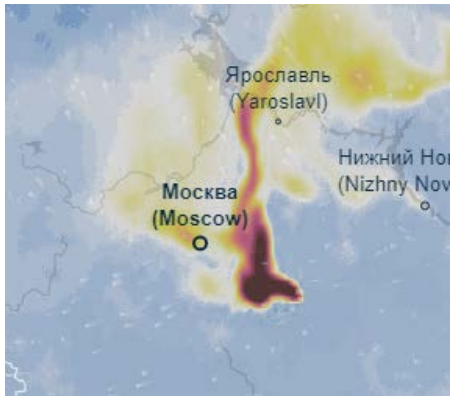
Ясная, сухая, безветренная погода без осадков с вечерними/ночными температурными инверсиями

Вечерние пики концентраций РМ10 в условиях накопления РМ в стабилизированном приземном слое атмосферы (инверсия)

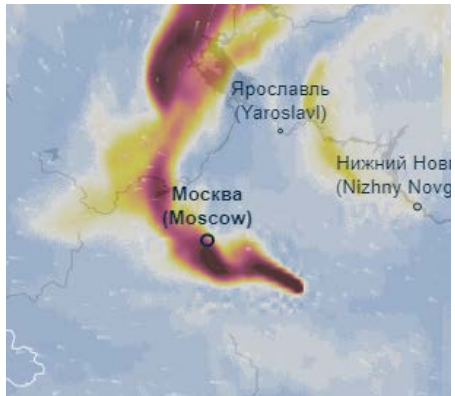
26 августа



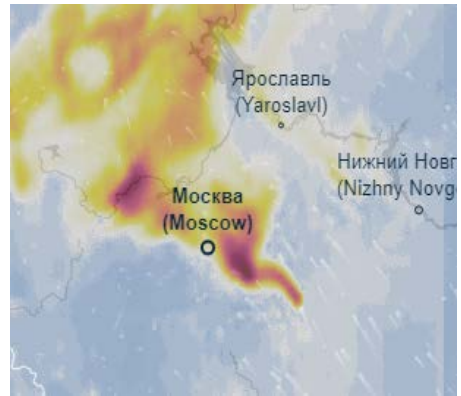
27 августа



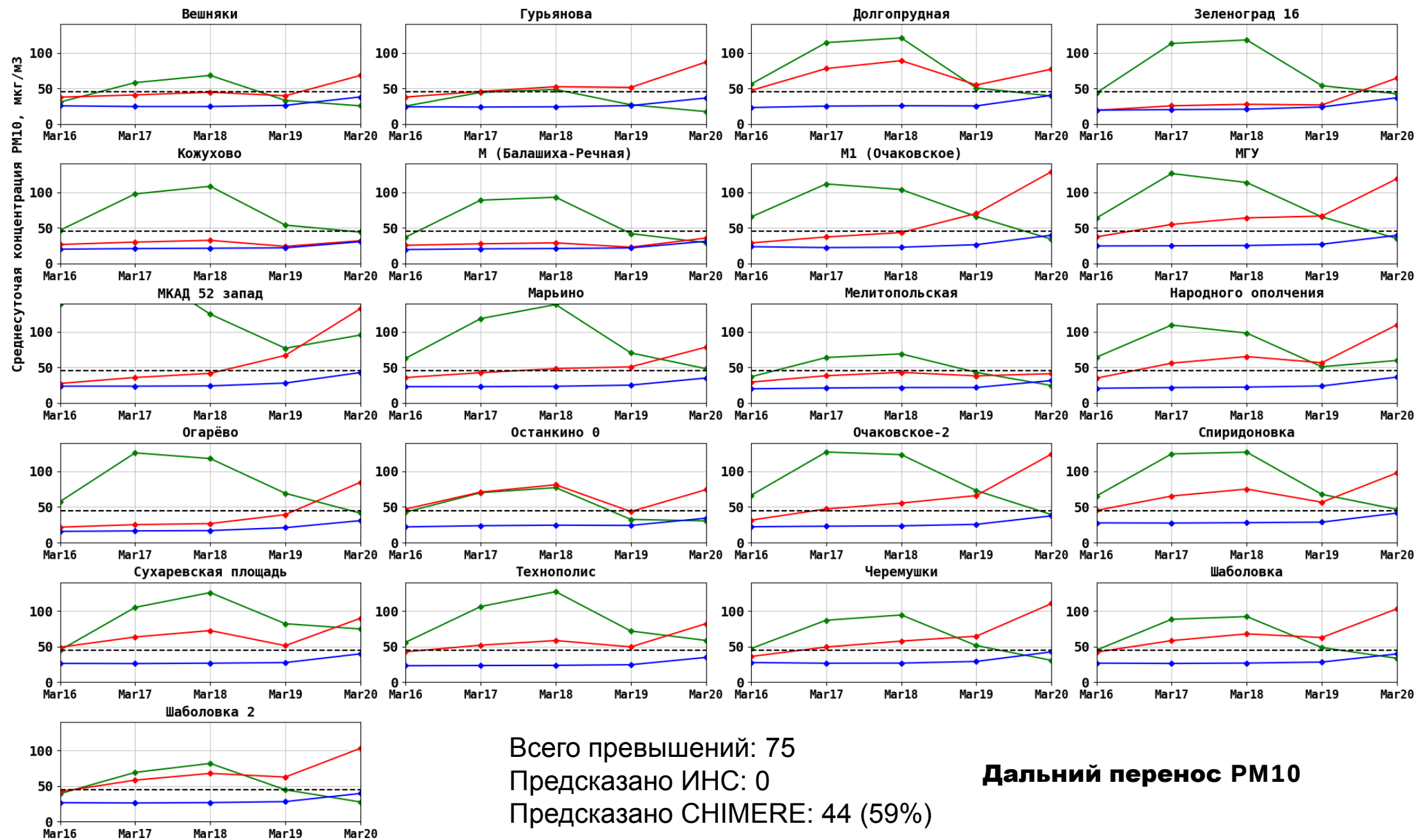
28 августа



29 августа



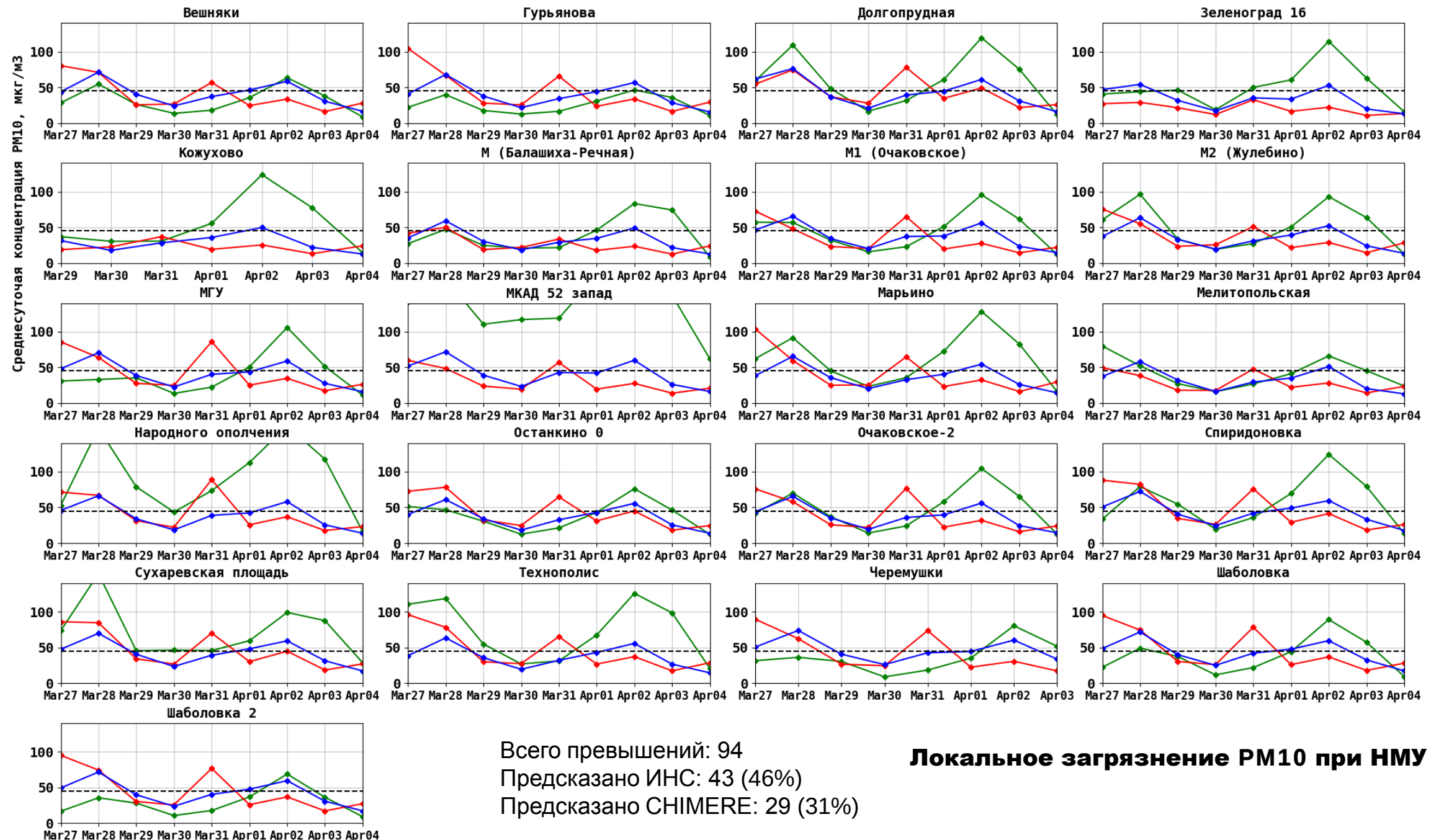
ML-коррекция в эпизодах повышенного аэрозольного загрязнения. 16-20 марта 2024 г.



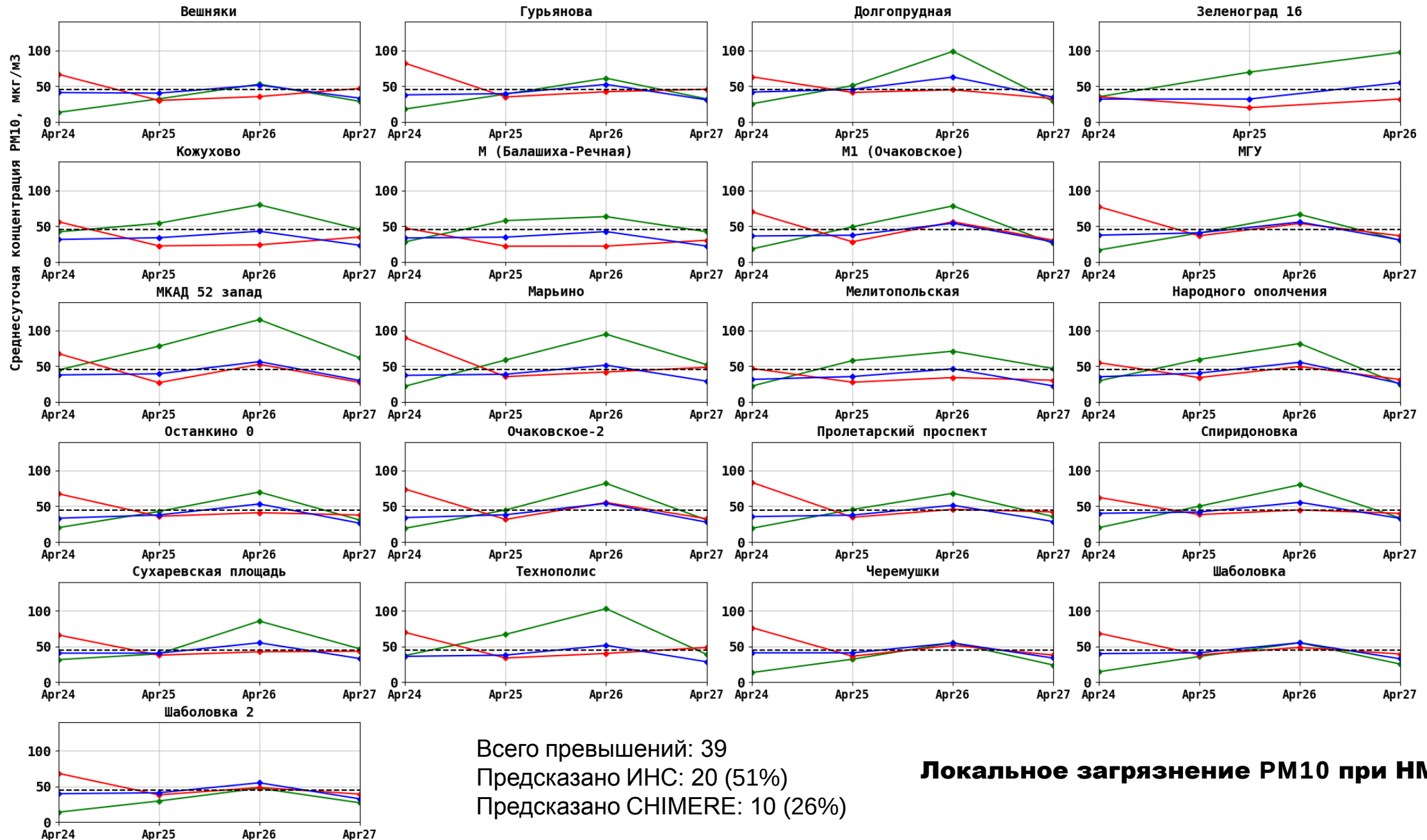
Всего превышений: 75
Предсказано ИНС: 0
Предсказано CHIMERE: 44 (59%)

Дальний перенос PM10

ML-коррекция в эпизодах повышенного аэрозольного загрязнения. 27 марта - 04 апреля 2024 г.



ML-коррекция в эпизодах повышенного аэрозольного загрязнения. 24-26 апреля 2024 г.

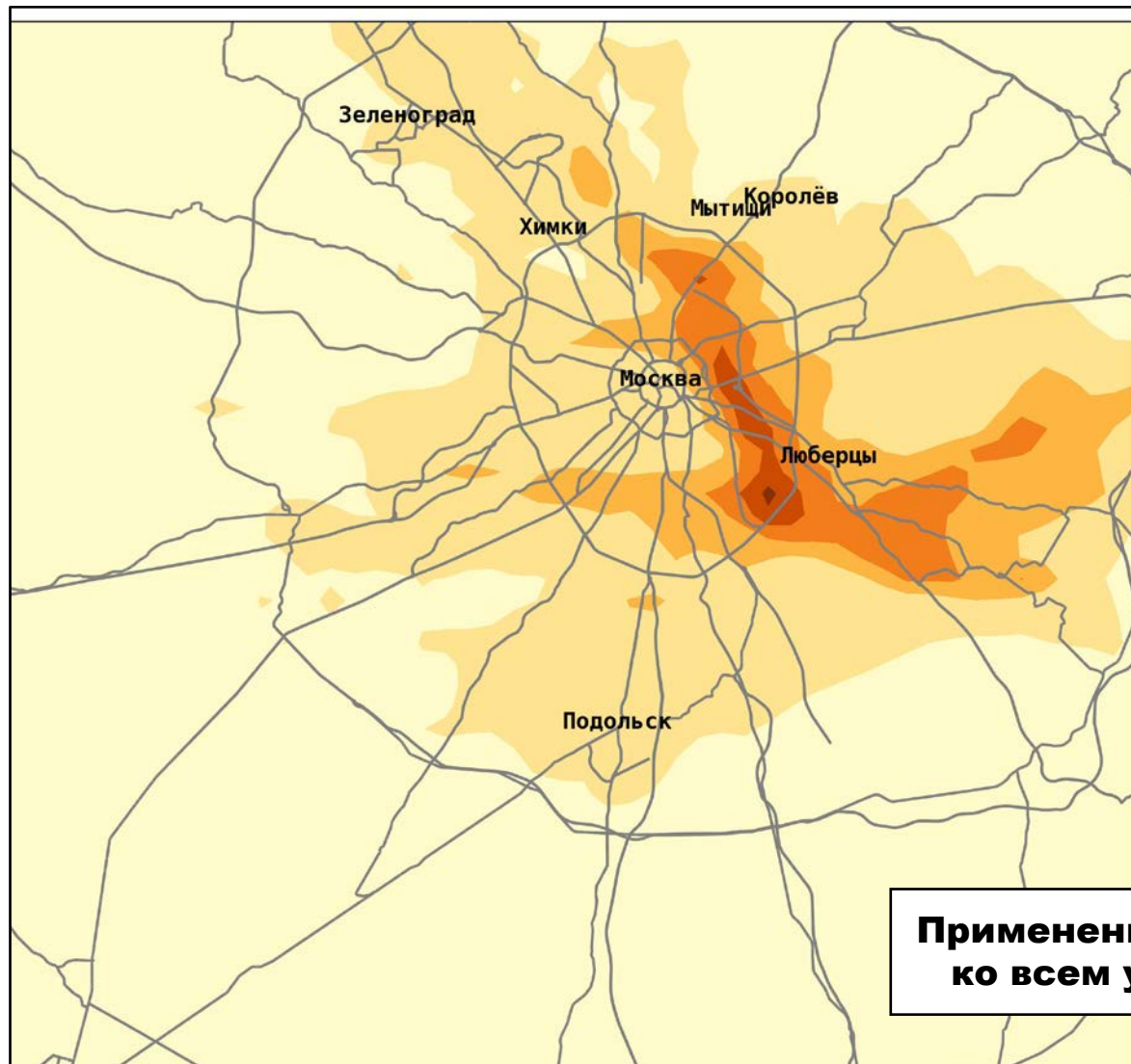


Всего превышений: 39
Предсказано ИНС: 20 (51%)
Предсказано CHIMERE: 10 (26%)

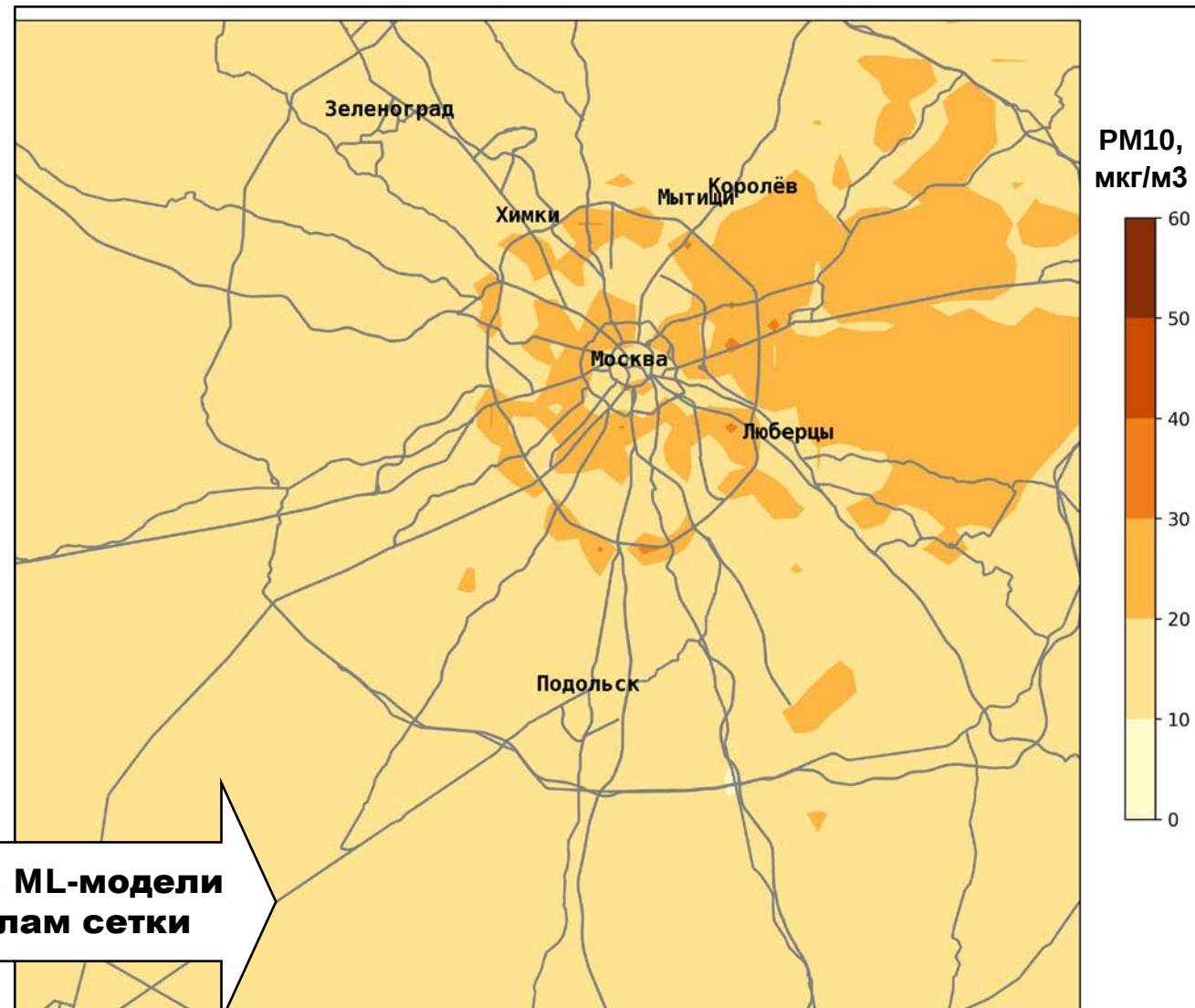
Локальное загрязнение PM10 при НМУ

ML-коррекция прогнозов XTM CHIMERE концентраций взвешенных частиц PM10. 10 августа 2024 г. 18:00

Прогноз XTM CHIMERE



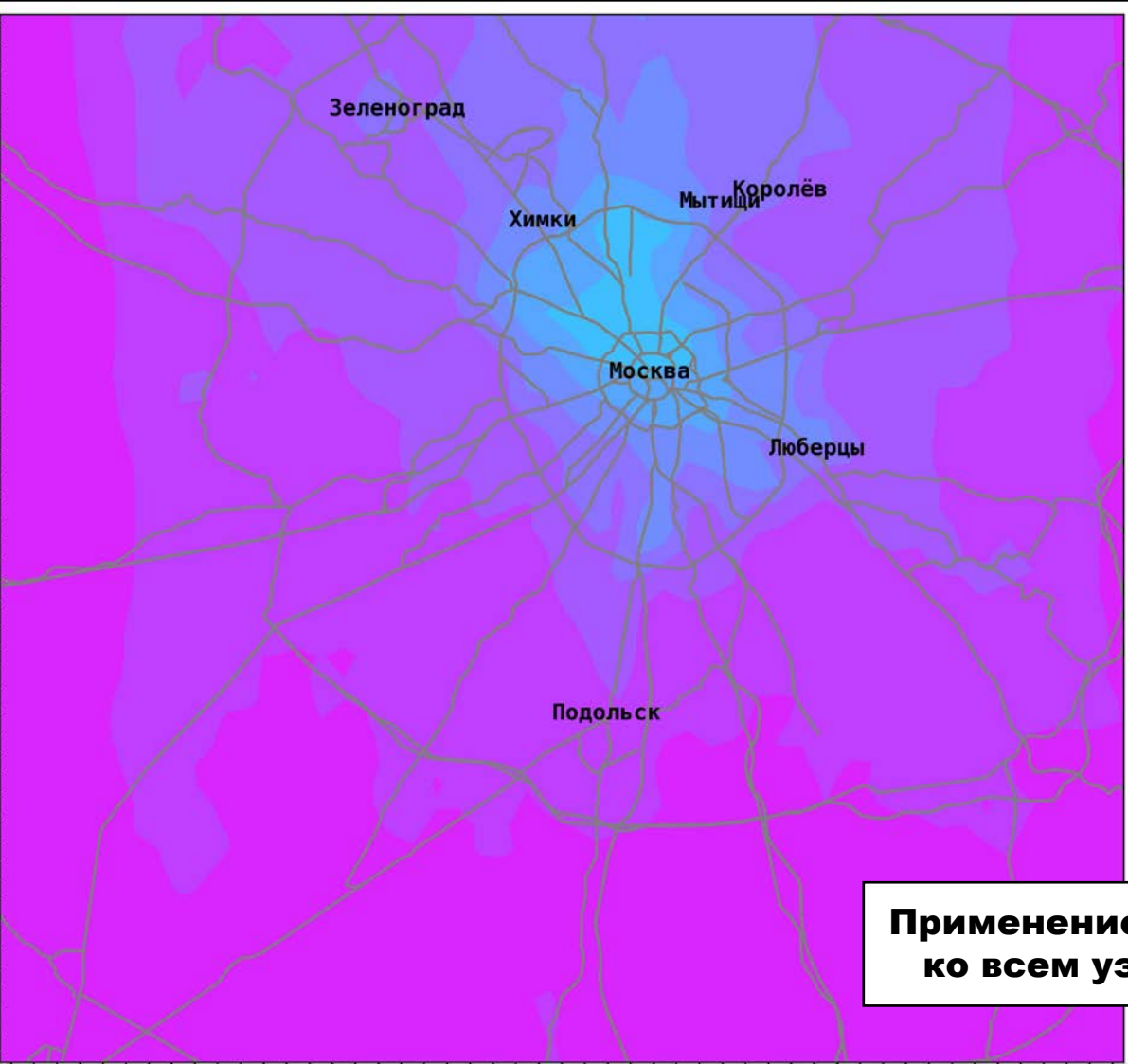
ML-коррекция



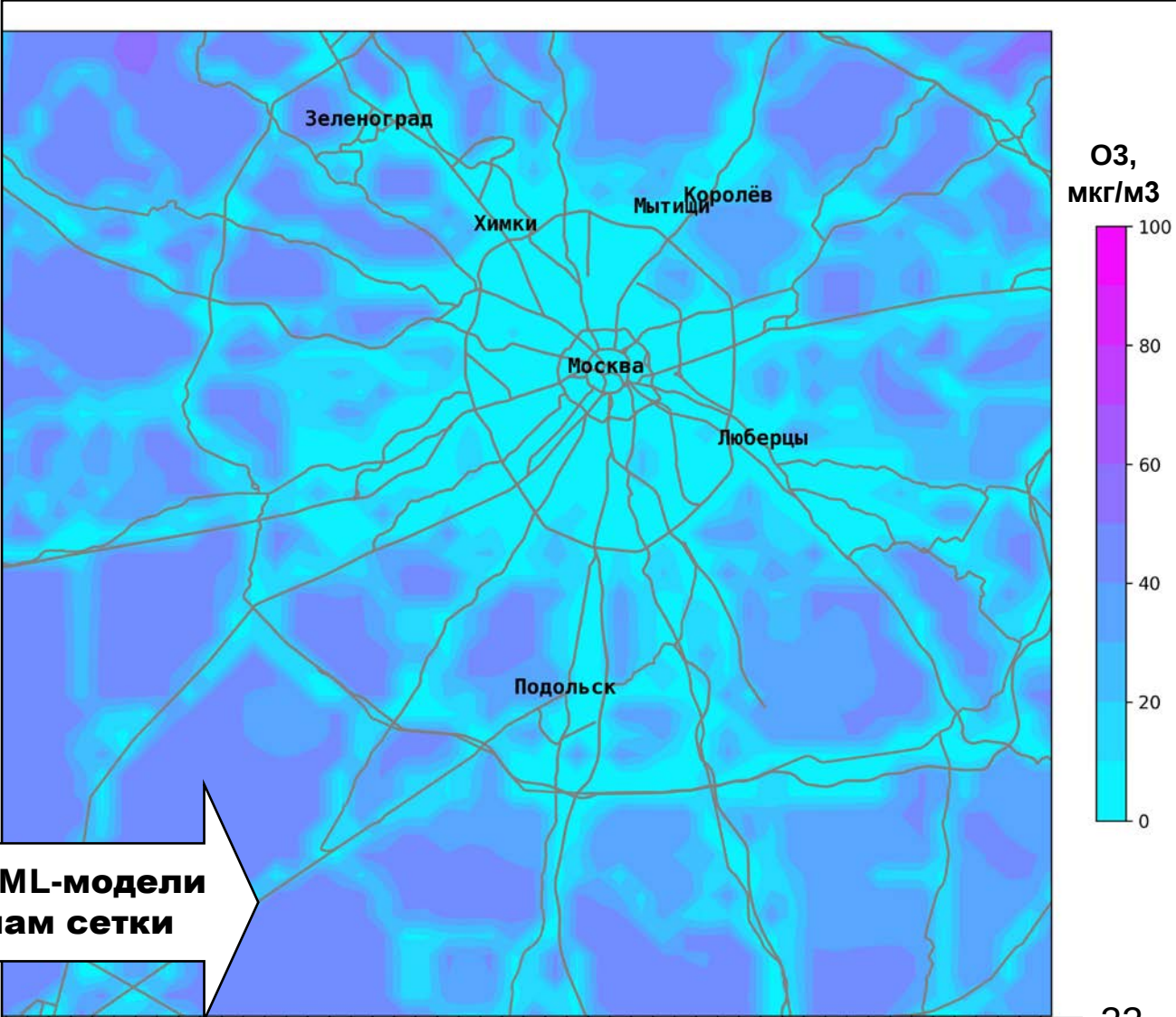
Применение ML-модели
ко всем узлам сетки

**ML-коррекция прогнозов XTM CHIMERE концентраций приземного озона.
01 апреля 2024 г. 07:00**

Прогноз XTM CHIMERE



ML-коррекция

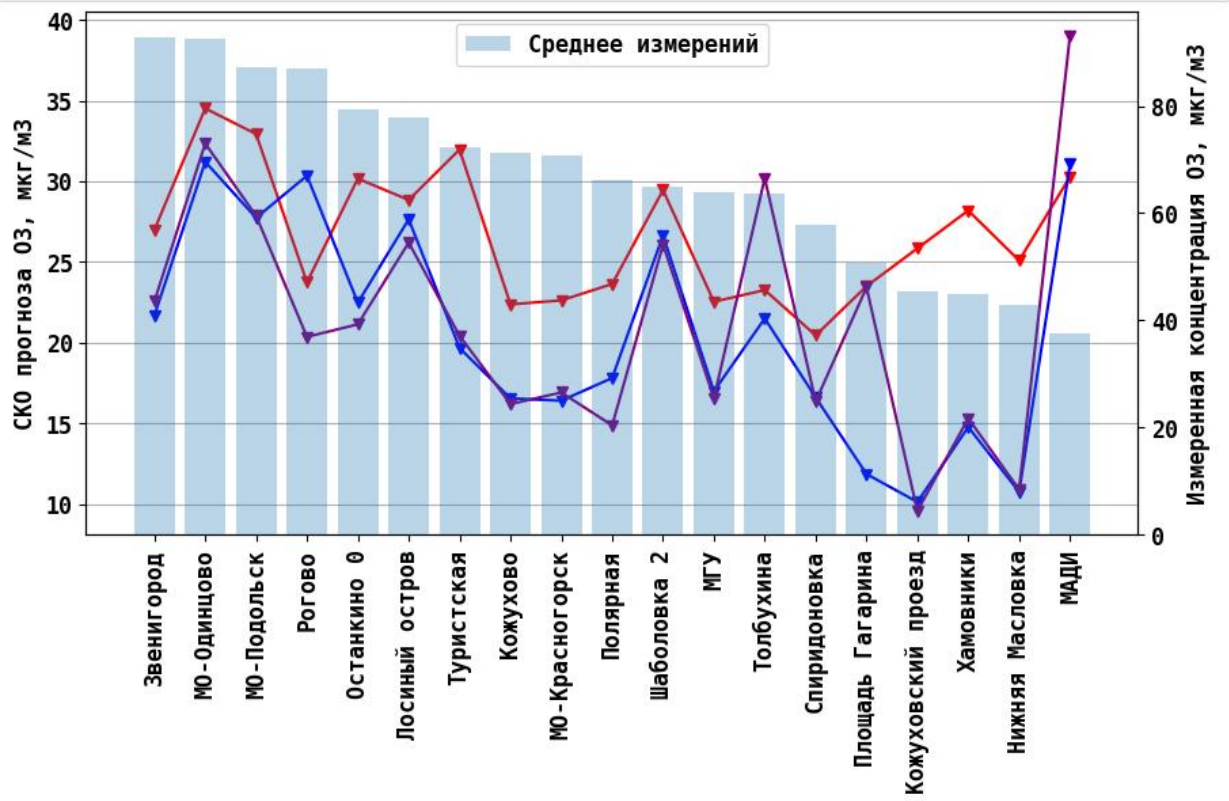


**Применение ML-модели
ко всем узлам сетки**

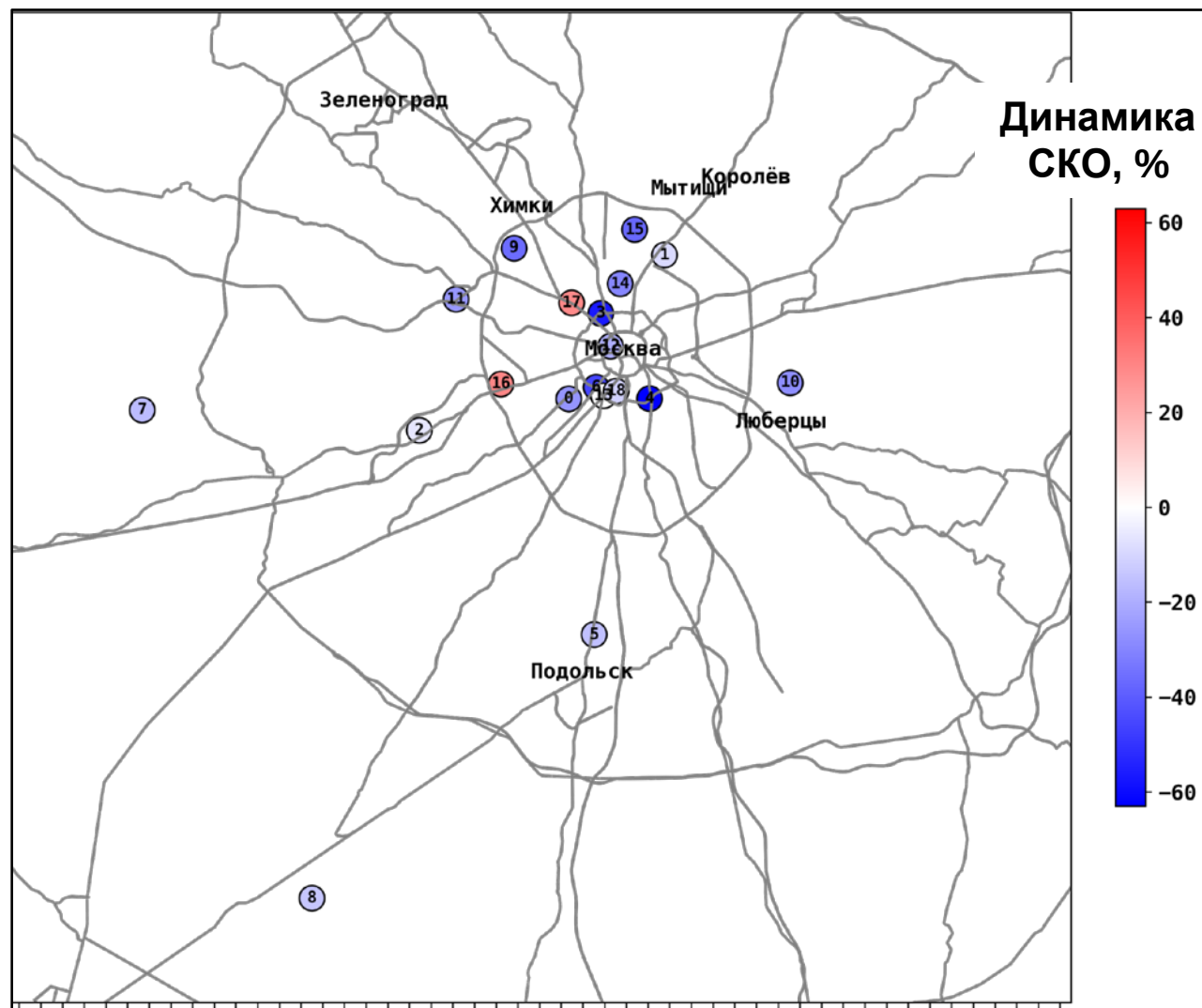
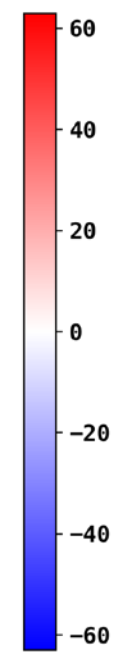
**ОЗ,
 $\mu\text{г}/\text{м}^3$**
100
80
60
40
20
0

Спасибо за внимание!

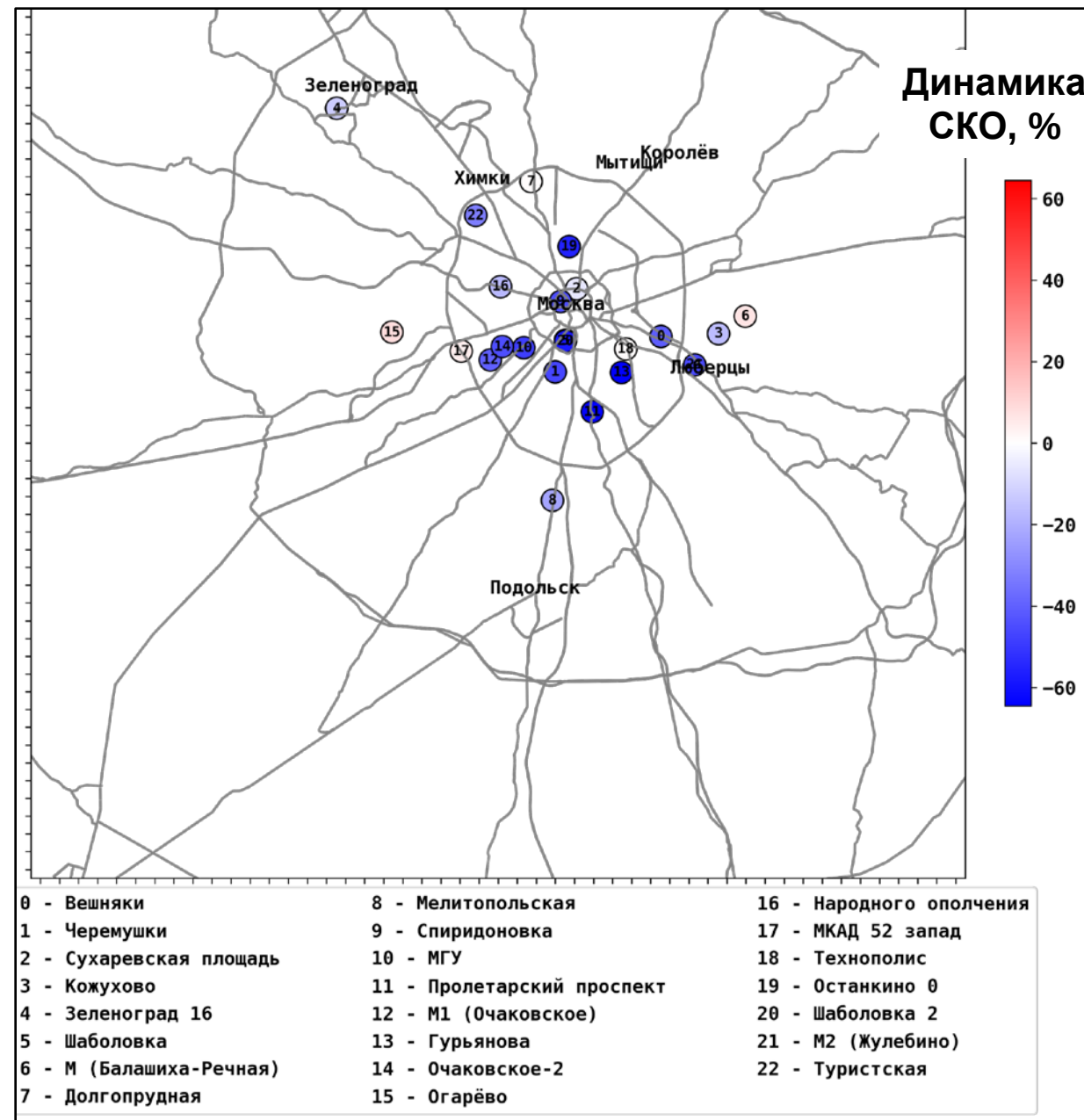
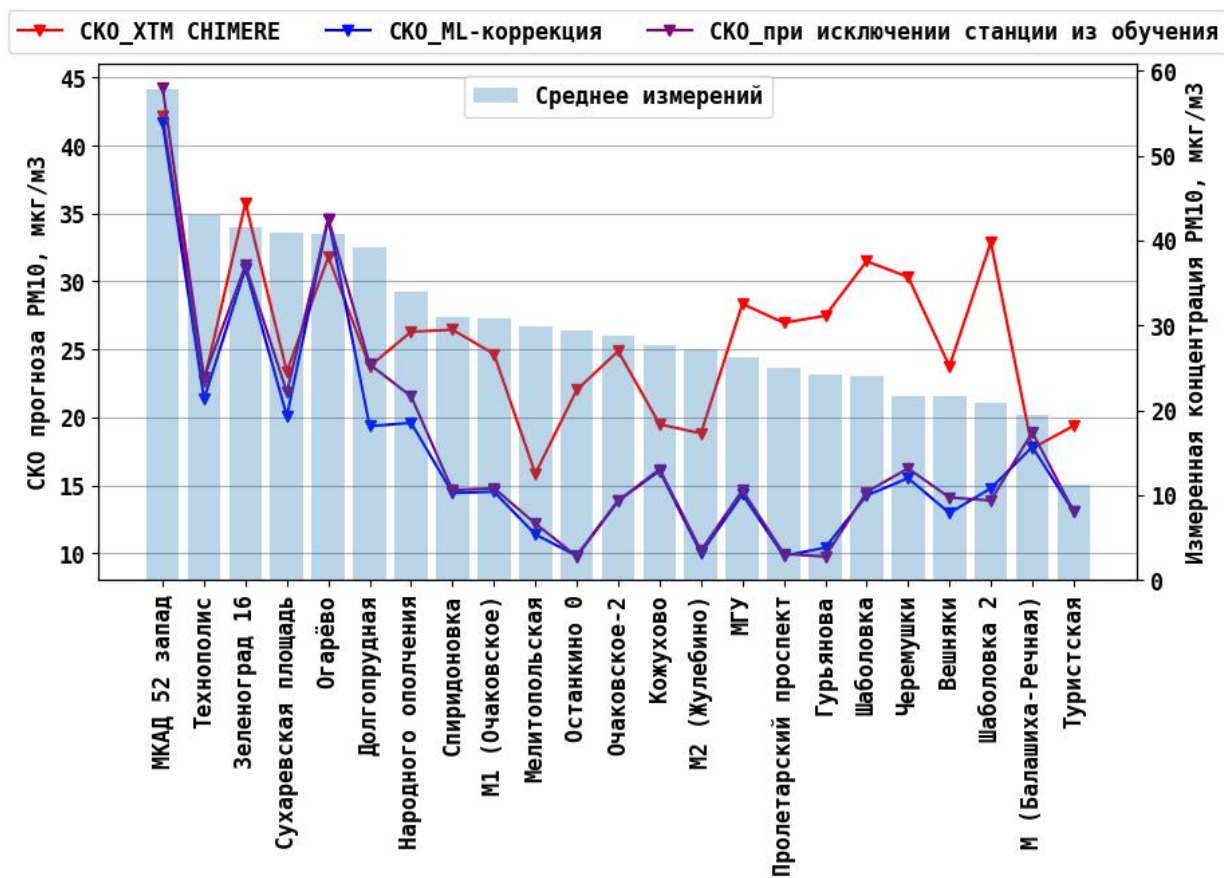
SKO_XTM CHIMERE SKO_ML-коррекция SKO_при исключении станции из обучения



Динамика
СКО, %



- | | | |
|------------------------|---------------------|-----------------------|
| 0 - МГУ | 7 - Звенигород | 13 - Площадь Гагарина |
| 1 - Лосиный остров | 8 - Рогово | 14 - Останкино 0 |
| 2 - МО-Одинцово | 9 - Туристская | 15 - Полярная |
| 3 - Нижняя Масловка | 10 - Кожухово | 16 - Толбухина |
| 4 - Кожуховский проезд | 11 - МО-Красногорск | 17 - МАДИ |
| 5 - МО-Подольск | 12 - Спиридоновка | 18 - Шаболовка 2 |
| 6 - Хановники | | |



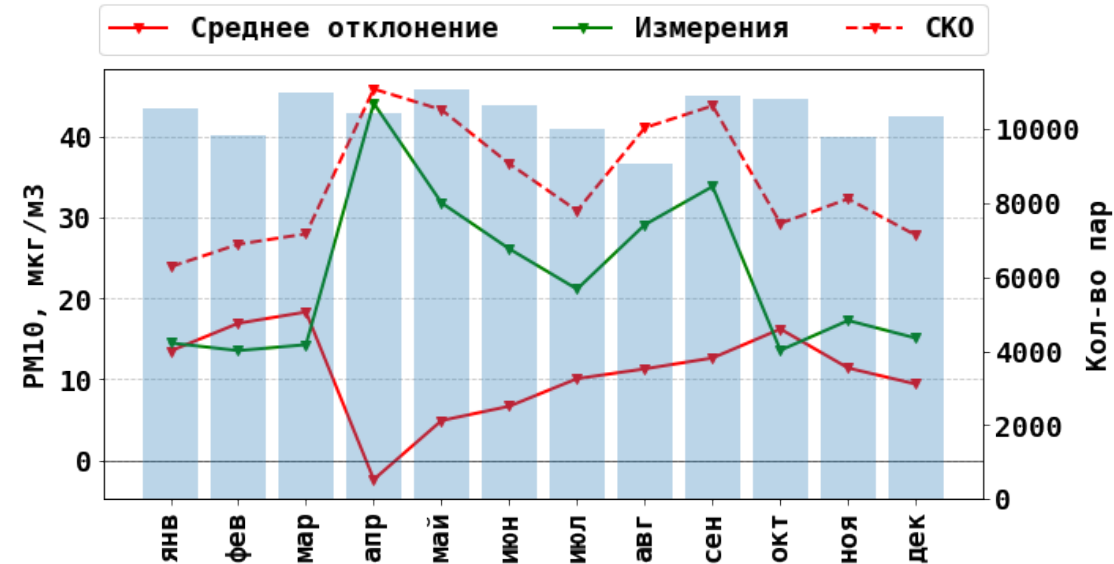
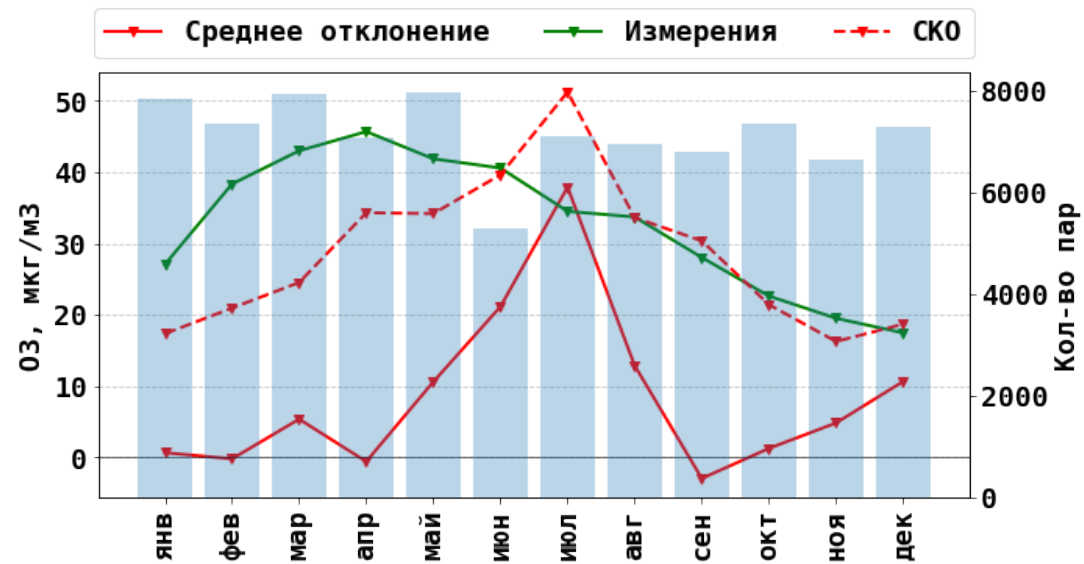
Эксперименты по подбору конфигурации ML-модели для коррекции прогнозов ОЗ

№	Архитектура	Кол-во слоев	Кол-во нейронов в слое	Исключения нейронов в слоях	Аддитивный гауссовский шум (ст. откл)	Ср. абс. откл. (ст. откл. по k блокам)	Ср. квадр. откл. (ст. откл. по k блокам)	Коеф. Корр. (ст. откл. по k блокам)
1	Полносвязная	4	7			14,3 (1,6)	35,0 (37,7)	0,63 (0,26)
2	Полносвязная	3	30	0.5		14,5 (1,5)	35,1 (37,6)	0,63 (0,25)
3	Полносвязная	3	15		0.1	14,5 (1,5)	35,3 (37,5)	0,63 (0,25)
4	Полносвязная	3	15			14,6 (1,6)	35,3 (37,5)	0,63 (0,25)
5	Реккурентная LSTM	1	10	0.5		14,7 (1,8)	35,6 (38,9)	0,63 (0,26)
6	Полносвязная	3	30	0.5	0.1	14,7 (1,5)	35,4 (37,4)	0,63 (0,25)
7	Полносвязная	3	15		0.5	14,8 (1,4)	35,7 (37,3)	0,62 (0,25)
8	Полносвязная	4	25			14,9 (1,4)	35,8 (37,2)	0,61 (0,24)
9	Реккурентная LSTM	3	15			14,9 (1,7)	36,2 (38,7)	0,61 (0,25)
10	Реккурентная LSTM	1	30	0.5		14,9 (1,7)	36,5 (38,5)	0,60 (0,24)
11	Полносвязная	3	20			15,0 (1,6)	35,9 (37,2)	0,61 (0,25)
12	Реккурентная LSTM	3	15		0.1	15,0 (1,5)	36,9 (38,3)	0,60 (0,24)
13	Реккурентная LSTM	3	30	0.5	0.1	15,0 (1,5)	37,1 (38,2)	0,60 (0,24)
14	Полносвязная	4	30	0.5		15,1 (1,8)	36,2 (37,0)	0,60 (0,25)
15	Полносвязная	3	10			15,2 (2,2)	36,6 (36,9)	0,60 (0,25)
16	Полносвязная	4	14	0.5		15,3 (1,4)	36,0 (37,2)	0,60 (0,24)
17	Реккурентная LSTM	3	20	0.5		15,3 (1,8)	37,3 (38,2)	0,58 (0,25)
18	Градиентный бустинг (деревья решений)	Кол-во деревьев 5000				15,4 (2,5)	37,9 (36,3)	0,58 (0,25)
19	Полносвязная	3	30	0.5	0.5	15,4 (1,4)	36,2 (37,1)	0,61 (0,25)
20	Полносвязная	3	25			15,4 (2,0)	36,4 (37,1)	0,60 (0,25)
21	Полносвязная	4	35			15,5 (1,5)	36,5 (37,0)	0,59 (0,24)
22	Полносвязная	4	55			15,5 (1,4)	37,1 (36,7)	0,58 (0,23)
23	Полносвязная	2	15			15,7 (3,0)	37,5 (36,6)	0,58 (0,26)
24	Полносвязная	4	15			16,0 (3,3)	38,3 (36,4)	0,56 (0,27)
25	Полносвязная	2	25			16,3 (3,7)	38,8 (36,3)	0,57 (0,26)
26	Полносвязная	2	35			16,3 (3,3)	38,4 (36,3)	0,58 (0,25)
27	Полносвязная	3	30	0.5	1	16,6 (1,6)	37,4 (36,6)	0,57 (0,24)
28	Полносвязная	2	55			16,7 (3,4)	38,8 (36,2)	0,55 (0,26)
29	Полносвязная	3	55			17,5 (4,9)	40,1 (36,0)	0,53 (0,26)
30	Полносвязная	3	35			17,5 (5,5)	41,8 (36,2)	0,53 (0,28)
31	Полносвязная	3	100			17,9 (4,8)	41,0 (35,6)	0,52 (0,25)
32	Полносвязная	2	100, 50			18,1 (5,9)	41,6 (36,1)	0,53 (0,27)
33	Полносвязная	2	100			18,2 (5,7)	41,7 (36,1)	0,53 (0,28)
34	Полносвязная	3	75			19,0 (7,8)	43,5 (36,5)	0,51 (0,29)
35	Полносвязная	2	75			19,8 (9,7)	46,2 (38,4)	0,50 (0,32)

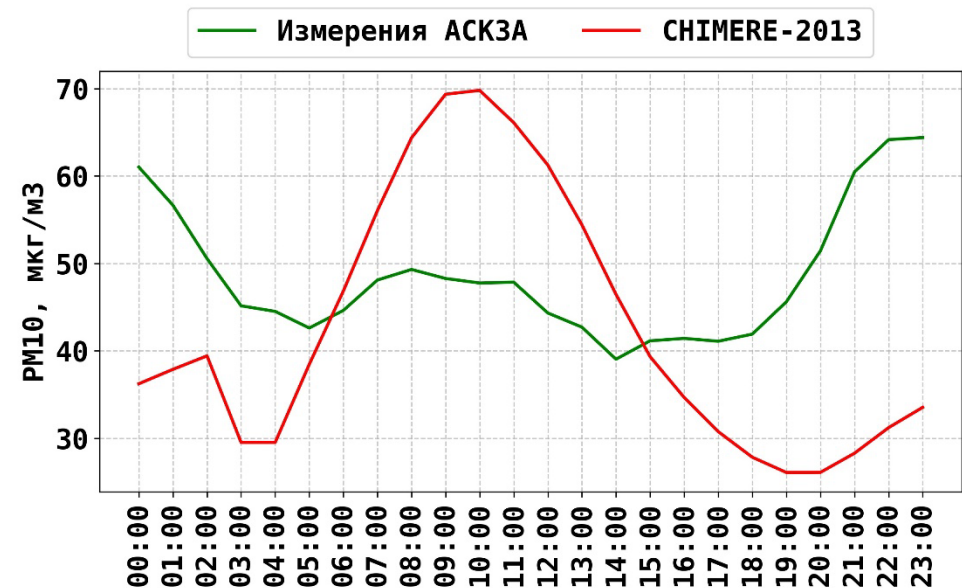
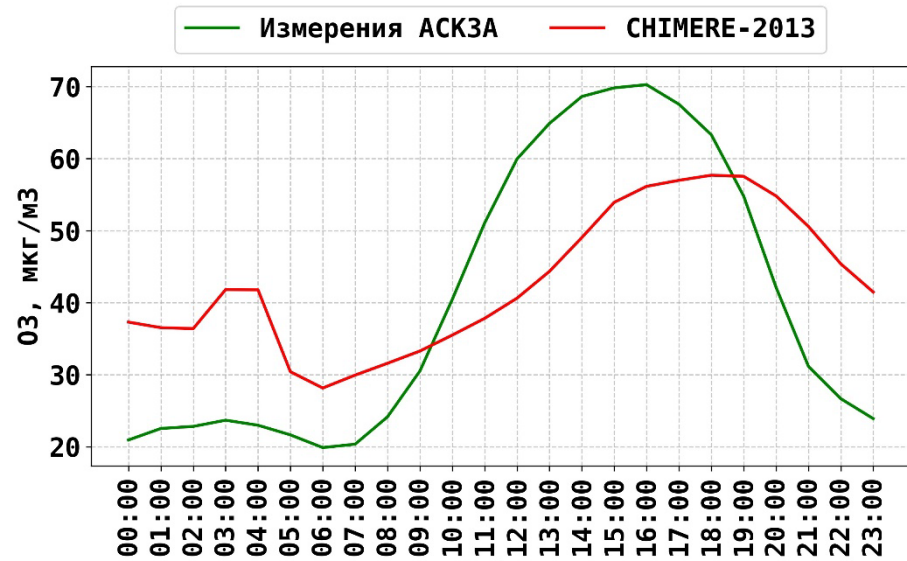
Эксперименты по подбору конфигурации ML-модели для коррекции прогнозов PM10

№	Архитектура	Кол-во слоев	Кол-во нейронов в слое	Исключения нейронов в слоях	Аддитивный гауссовский шум (ст. откл)	Ср. абс. откл. (ст. откл. по k блокам)	Ср. квадр. откл. (ст. откл. по k блокам)	Коэф. Корр. (ст. откл. по k блокам)
1	Реккурентная LSTM	1	30	0.5		11,6 (0,8)	22,4 (2,0)	0,51 (0,08)
2	Реккурентная LSTM	3	15	0.5		11,8 (0,8)	23,4 (2,4)	0,49 (0,04)
3	Реккурентная LSTM	1	10	0.5		12,3 (1,1)	23,6 (2,3)	0,48 (0,07)
4	Реккурентная LSTM	3	15			12,3 (0,4)	24,1 (1,5)	0,48 (0,05)
5	Полносвязная	3	15		0.1	11,8 (0,9)	51,9 (67,0)	0,44 (0,20)
6	Полносвязная	3	50	0.5		11,6 (0,7)	51,9 (66,9)	0,44 (0,20)
7	Полносвязная	3	25			11,9 (0,7)	51,9 (66,9)	0,44 (0,20)
8	Полносвязная	3	25		0.1	12,0 (1,0)	52,0 (66,9)	0,43 (0,20)
9	Полносвязная	3	30	0.5		11,8 (0,8)	52,1 (66,9)	0,43 (0,20)
10	Полносвязная	4	14	0.5		11,9 (0,7)	52,3 (66,8)	0,42 (0,19)
11	Полносвязная	4	7			12,2 (0,5)	52,5 (66,6)	0,41 (0,19)
12	Полносвязная	4	7	0.5		12,2 (0,8)	52,6 (66,6)	0,41 (0,19)
13	Полносвязная	4	25			12,4 (0,8)	52,6 (66,4)	0,42 (0,18)
14	Полносвязная	2	35			12,8 (1,6)	52,8 (66,4)	0,41 (0,20)
15	Полносвязная	2	75			13,4 (1,9)	53,1 (66,2)	0,41 (0,20)
16	Полносвязная	4	14			12,8 (1,4)	53,2 (66,3)	0,38 (0,19)
17	Полносвязная	2	100, 50			13,8 (3,1)	54,4 (65,7)	0,40 (0,21)
18	Полносвязная	3	15			18,6 (14,2)	70,1 (68,5)	0,31 (0,27)

Проблема. Отклонения прогнозов загрязнения воздуха ХТМ CHIMERE.



Средняя суточная изменчивость концентраций, апрель 2023



Значимость предикторов обучающих выборок ML-моделей для коррекции прогнозов концентраций ОЗ и РМ10

ОЗ, полносвязная ИНС

Предиктор	Среднее абсолютное отклонение прогноза	Кол-во пар
Трансп. выбросы НИИАТ	16,62	90496
SRad	16,59	90496
T ₂	16,57	90496
h _{АПС}	16,52	90496
Час	16,37	90496
Месяц	16,35	90496
Прогноз ХТМ NO	16,24	90496
Tgrad ₇₅₀	16,24	90496
ρ	16,22	90496
Precip	16,20	90496
V ₇₅₀	16,19	90496
Tgrad ₂₀₀	16,17	90496
Прогноз ХТМ O ₃	16,17	90496
V ₁₀	16,15	90496
dd ₇₅₀	16,13	90496
Прогноз ХТМ NO ₂	16,01	90496
Среднесуточное содержание O ₃ в столбе	15,94	90496
Заблаговременность прогноза	15,89	90496
Плотность автодорог OSM	15,86	90496
День недели	15,67	90496

РМ10, полносвязная ИНС

Предиктор	Среднее абсолютное отклонение прогноза	Кол-во пар
V ₁₅₀₀	17,3	107924
Месяц	16,4	107924
Tgrad ₄₀₀	16,0	107924
Precip	15,8	107924
T ₂	15,0	107924
Плотность автодорог OSM	15,4	107924
dd ₇₅₀	15,3	107924
Прогноз ХТМ РМ ₁₀	14,8	107924
Трансп. выбросы НИИАТ	14,7	107924
Tgrad ₂₀₀	14,8	107924
Час	14,8	107924
Tgrad ₇₅₀	14,7	107924
V ₄₀₀	14,7	107924
dd ₁₅₀₀	14,7	107924
V ₂₀₀	14,9	107924
V ₁₀	14,8	107924
V ₇₅₀	14,7	107924
ρ	14,8	107924
Заблаговременность прогноза	14,8	107924
День недели	14,7	107924
h _{АПС}	14,7	107924

Фотохимические реакции с образованием озона в приземном слое

