



НЕЙРОСЕТЕВОЙ АЛГОРИТМ И ГИБРИДНАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ РАСЧЕТА КОНЦЕНТРАЦИЙ ПАРНИКОВОГО ГАЗА ДИОКСИДА УГЛЕРОДА

Ю.А. Тунакова¹, С.В. Новикова¹, А.Р. Шагидуллин², В.С. Валиев²

¹Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева - КАИ, РФ, г. Казань, ул. К. Маркса, 10

²Институт проблем экологии и недропользования АН РТ, РФ, г. Казань, ул. Даурская, 28
E-mail: juliaprof@mail.ru; artur.shagidullin@tatar.ru

В статье предложена и апробирована методика создания каскадной модели для расчета приземных концентраций диоксида углерода CO₂. В качестве входных параметров обосновано использование концентрации угарного газа CO, метеорологических условий, коэффициента трансформации (химическая трансформация) и концентрации озона (фотохимические реакции). Разработана поэтапная методика расчета. На первом этапе проводится стандартный расчет рассеивания CO по регламентированной модели. Второй этап – нейросетевая коррекция полученных на первом этапе результатов. На третьем этапе создаются нейронные сети, рассчитывающие непосредственно концентрацию CO₂ с учетом атмосферных трансформаций.

Ключевые слова: выбросы, нейронная сеть, гибридная модель, расчет концентраций, диоксид углерода.

Поступила в редакцию: 19.07.2023. После доработки: 26.07.2023.

Введение. Использовать апробированные методические подходы для расчета концентраций диоксида углерода (CO₂) не представляется возможным, так как параметры источников выбросов диоксида углерода не известны, и выполнить расчет рассеивания в воздухе невозможно. В связи с этим был разработан принципиально новый подход, основанный на расчете концентраций CO₂ с учетом химической трансформации примесей в атмосферном воздухе.

Значительные количественные и пространственно-временные ограничения по определению содержания диоксида углерода могут быть нивелированы за счет использования нейросетевых подходов для расчета концентраций примесей в приземном слое атмосферного воздуха, которые позволяют учесть все трудно моделируемые скрытые зависимости между уровнями загрязнения приземного слоя атмосферы и факторами, его формирующими. Необходимость расчета концентраций парниковых газов связана с ограниченным количеством систематических инструментальных наблюдений.

В Республике Татарстан автоматизированные измерения проводятся АСКЗА-11 (автоматическая станция контроля загрязнения атмосферы) (г. Нижнекамск) и АСКЗА-1, АСКЗА-2 (г. Казань). Это позволяет получить достаточное количество обучающих примеров для настройки искусственной нейронной сети. Впоследствии спроектированные нейросети могут применяться для расчета концентраций парниковых газов на территории других городов после соответствующего дообучения.

В качестве модели регрессии для процессов, обладающих выраженной нелинейностью и неопределенностью внутренних взаимосвязей, целесообразнее всего использовать современные интеллектуальные системы – искусственные регрессионные нейронные сети типа многослойный перцептрон (MLP). Являясь, согласно теореме Цыбенко, универсальными аппроксиматорами, при достаточном охвате в обучающих данных всевозможных сочетаний значений предикторов можно получить высокоточную адекватную модель процесса.

Подходы к созданию гибридной расчетной модели содержания CO_2 в приземном слое атмосферного воздуха. В состав отходящих газов, образующихся при сжигании любого вида топлива, в том числе и ископаемого углеродного сырья, в реальных условиях входит также ряд загрязняющих веществ, среди которых оксиды азота и оксид углерода CO – угарный газ. Оксиды азота образуются вследствие окисления атмосферного азота или азотсодержащих топливных примесей. Оксид углерода образуется вследствие недожога топливного углерода. Таким образом, указанные вещества являются неизменными «спутниками» диоксида углерода в реальных промышленных процессах горения, что влечет наличие некоторой взаимосвязи между концентрациями этих газов. Кроме того, в экспериментально измеренных на автоматизированных постах концентрациях диоксида углерода помимо поступившего в атмосферный воздух с выбросами техногенных источников есть доля диоксида углерода, образовавшегося в ходе вторичных реакций из оксида углерода. Таким образом, концентрации CO могут использоваться в качестве исходных данных для расчета CO_2 . При этом в модели необходимо учитывать процессы превращения веществ в атмосфере.

Преимуществом данного подхода является возможность непосредственного расчета концентраций CO в заданной точке при помощи нормативной методики расчета рассеивания [1], реализованной в УПРЗА (унифицированная программа для расчета загрязнения атмосферы) «Эколог-Город», при условии наличия общегородского банка данных параметров выбросов [2, 3].

Для увеличения точности модели ее необходимо дополнить возможностью гибкого учета метеорологических условий (что отсутствует в УПРЗА). Такой «доучет» метеофакторов возможен при помощи корректирующей нейронной сети, обученной на данных измерений АСКЗА [4, 5]. Главным условием для выбора поста является одновременное измерение метеопараметров и CO . Ме-

тодика коррекции (адаптации) рассчитанных в УПРЗА значений загрязняющих веществ в атмосфере при помощи нейросетей апробирована на расчетах концентраций аммиака, бензола, сероводорода, диоксида серы и оксида углерода на территории г. Нижнекамск. Ранее нами показано, что скорректированные расчетные значения обладают высокой степенью сходимости к экспериментально измеренным.

Таким образом, полученное в результате последовательного применения нормативной и нейросетевой модели значение оксида углерода будет отражать как данные о метеоусловиях, так и данные об источниках стационарных выбросов CO .

Следующим этапом построения модели расчета CO_2 будет являться разработка способа учета трансформации оксида в диоксид углерода в атмосфере.

Общее математическое описание механизмов влияния вторичных реакций на концентрации газов требует учета множества атмосферных процессов (интенсивность солнечной радиации, облачность, интенсивность осадков, тип подстилающей поверхности или альbedo и т.д.), тем самым усложняется модель и снижается ее адекватность. Для расчетов необходимо сократить число учитываемых факторов, оставив основные. На основе проведенного анализа, для учета превращения веществ в атмосфере предлагается использовать две характеристики:

Характеристика № 1: коэффициент трансформации. Интенсивность вторичных химических реакций в атмосфере нами оценивалась по предложенному выше алгоритму расчета коэффициента трансформации (КТ) [6].

Характеристика № 2: концентрация озона (O_3). Поскольку образование озона происходит главным образом в результате фотохимических реакций, использование динамики концентраций озона повышает точность нейросетевых моделей расчета приземных концентраций примесей.

Таким образом, в итоговой нейросетевой модели расчета концентрации ди-

оксида углерода на основе значений оксида углерода с учетом трансформации веществ в атмосфере определены три предиктора:

- значение концентрации СО, получаемое из корректирующей нейросетевой модели на основе расчетов по нормативной методике;
- значение КТ, рассчитанное по измеренным концентрациям оксидов азота;

– значение концентрации O_3 , измеренное.

В итоговой гибридной модели расчетов CO_2 будет присутствовать блок расчетов по стандартной нормативной методике, а также два нейросетевых блока. Расчеты проводятся последовательно.

Схематически последовательность расчетов при помощи гибридной расчетной модели демонстрирует рис. 1.

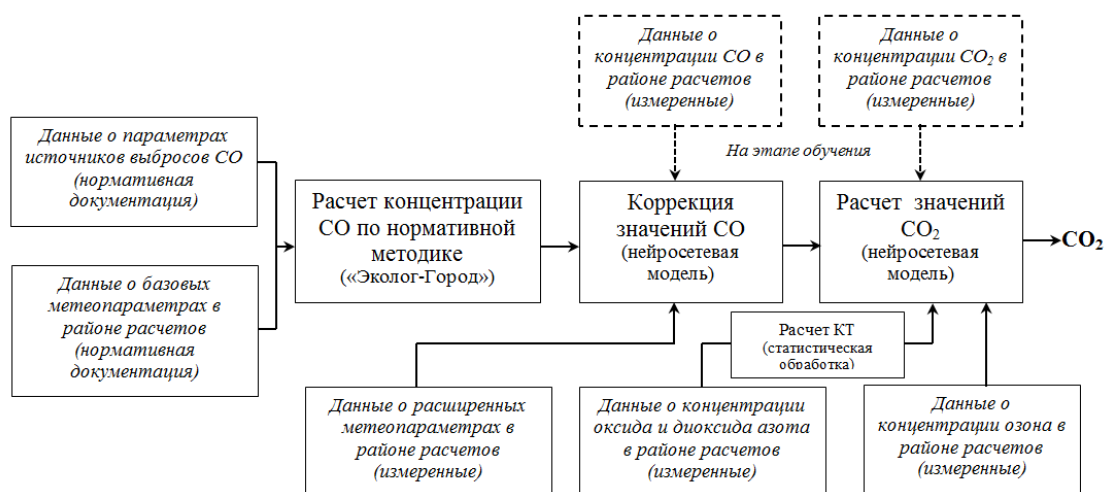


Рис. 1. Структурная схема блоков гибридной модели расчета концентрации диоксида углерода
 Fig. 1. Structural block diagram of the hybrid model for calculating the concentration of carbon dioxide

Практическая реализация гибридной расчетной модели содержания CO_2 в атмосфере. Расчет произведен для зон охвата постов АСКЗА-1, АСКЗА-2 и АСКЗА-11, на которых проводятся натурные измерения CO_2 . В качестве исходных данных для расчета используются параметры источников выбросов СО: координаты расположения источников выбросов, высота устья, температура, скорость выхода газовой смеси и др. Метеоусловия задавались температурой воздуха, скоростью и направлением ветра.

Для создания массива результатов расчетов концентраций СО при комбинации различных скоростей и направлений ветра с использованием регламентированной методики в УПРЗА для каждой точки расположения АСКЗА проведены расчеты с перебором скорости ветра с шагом 1 м/с (начиная с минимально воз-

можной для расчета по регламентированной методике скорости 0,5 м/с до наибольшей, фиксируемой метеостанциями в составе АСКЗА, скорости 8,5 м/с) и направления ветра по полному кругу с шагом 10° . Далее эти данные были интерполированы на весь массив скоростей от 0,5 до 8,5 м/с с шагом 0,1 м/с и направлений $0^\circ-359^\circ$ с шагом 1° . Метод интерполяции – линейная. Все значения концентраций приведены в mg/m^3 .

Для коррекции рассчитанных УПРЗА концентраций оксида углерода в атмосферном воздухе разработана нейросетевая модель типа MLP. В качестве предикторов для модели выступают расширенный набор метеопараметров в точке расчета: атмосферное давление (мм рт. ст.), относительная влажность воздуха (%), направление ветра ($^\circ$), скорость ветра (м/с), температура воздуха ($^\circ C$), а также рассчитанное в УПРЗА

значение концентрации CO (мг/м^3). Единственным выходом модели является значение концентрации оксида углерода CO . Общее количество кортежей данных – 5689. После ввода исходных данных в нейросетевой генератор Loginom система автоматически подобрала оптимальную архитектуру модели методом перебора заданных структур: количество входных нейронов – 6; количество выходных нейронов – 1 (скорректированное значение примеси); количество скрытых слоев – 1; количество нейронов в скрытом слое – 4; функция активации нейронов скрытого слоя – гиперболический тангенс; функция активации нейрона выходного слоя – линейная. Входные и выходные данные нормализованы гиперболическим тангенсом. Точность модели составила более 83%.

Для программной реализации расчетного нейросетевого блока значений концентраций CO_2 необходимо предварительно реализовать вспомогательный блок статистического расчета коэффициента трансформации (КТ), исходя из измеренных значений концентраций оксида и диоксида азота [6].

Затем полученные данные объединяются с метеоданными, измеренными концентрациями CO_2 на АСКЗА, а также с результатами корректирующих расчетов концентраций CO . Подготовленная таблица импортируется во внутренний формат файла данных Loginom. Общее количество кортежей – 17089. Однако точность построенной таким образом модели составила менее 50%, что можно считать неудовлетворительным результатом.

Визуализация результатов моделирования позволяет предположить, что низкая точность может быть обусловлена неоднородностью набора исходных данных. Точность модели может быть увеличена, если рассматривать данные однородными группами по принципу состояния атмосферы по содержанию CO_2 :

– устойчивое состояние с относительно низким содержанием CO_2 – примерно соответствует первым 4500 кор-

тежам упорядоченного по возрастанию множества данных;

– переходное состояние, характеризующееся резким возрастанием концентрации CO_2 . Соответствует кортежам примерно с 4501 до 6150.

– устойчивое состояние с относительно высоким содержанием CO_2 . Соответствует кортежам, начиная с 6151-го упорядоченного по возрастанию множества данных.

Приведенные границы градаций являются грубым качественным обобщением и приведены исключительно для лучшего понимания самой идеи распределения исходного множества данных на однородные группы.

С математической точки зрения, данные должны распределяться по однородным группам каким-либо алгоритмом. Наиболее предпочтителен в данном случае алгоритм кластеризации.

Для практической реализации отобран алгоритм многомерной кластеризации при помощи самообучающихся нейронных сетей Кохонена. Ключевой особенностью данного алгоритма является возможность заранее задать требуемое количество кластеров для группировки данных. В нашем случае – три.

В результате кластеризации было получено три набора данных, отличающихся по уровню содержания CO_2 . Данные, образующие кластер № 0, характеризуются низким содержанием CO_2 , данные, образующие кластер № 1, соответствуют переходному процессу, где концентрации CO_2 меняются от низких до повышенных. И, наконец, данные кластера № 3 можно охарактеризовать как набор данных с повышенным и высоким содержанием диоксида углерода.

Каждый выделенный из общего множества данных однородный набор был помещен в собственный временный xlsx -файл для последующей обработки. Для каждого набора была построена собственная аппроксимирующая нейронная сеть с архитектурой: количество входных нейронов – 8; количество выходных нейронов – 1; количество скрытых слоев – 1; количество нейронов

в скрытом слое – 12; функция активации нейронов скрытого слоя – синусоида; функция активации нейрона выходного слоя – линейная. Общая схема вычислительных процессов итоговой гибридной модели представлена рис. 2.

Результаты расчетов трех нейронных сетей для расчета CO₂ были объединены в единый файл. Средняя ошибка модели

по всему множеству данных составила менее одного процента – 0,87%.

Итоговый сценарий, соответствующий всем этапам построения и использования гибридной интеллектуальной модели расчета уровня диоксида углерода в атмосферном воздухе, представлен на рис. 3.

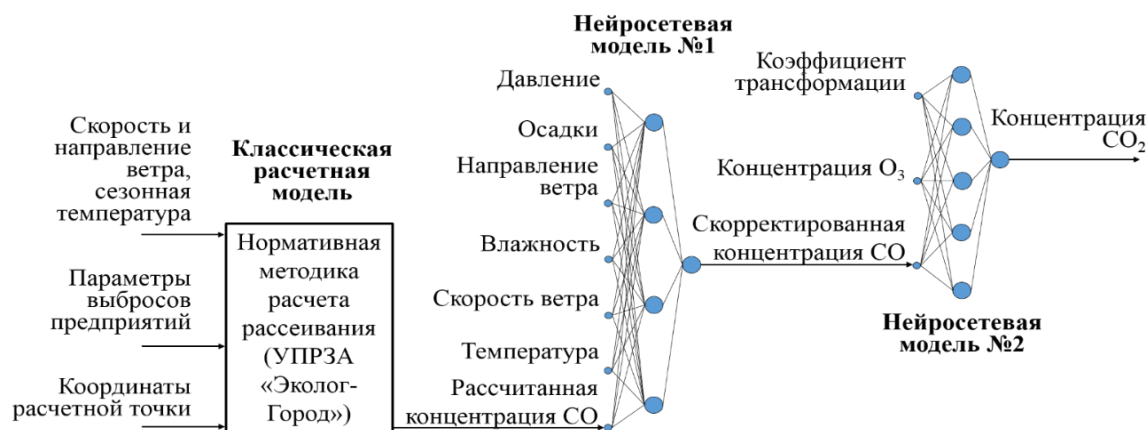


Рис. 2. Алгоритм нейросетевого расчета концентраций диоксида углерода
 Fig. 2. Algorithm for neural network calculation of carbon dioxide concentrations

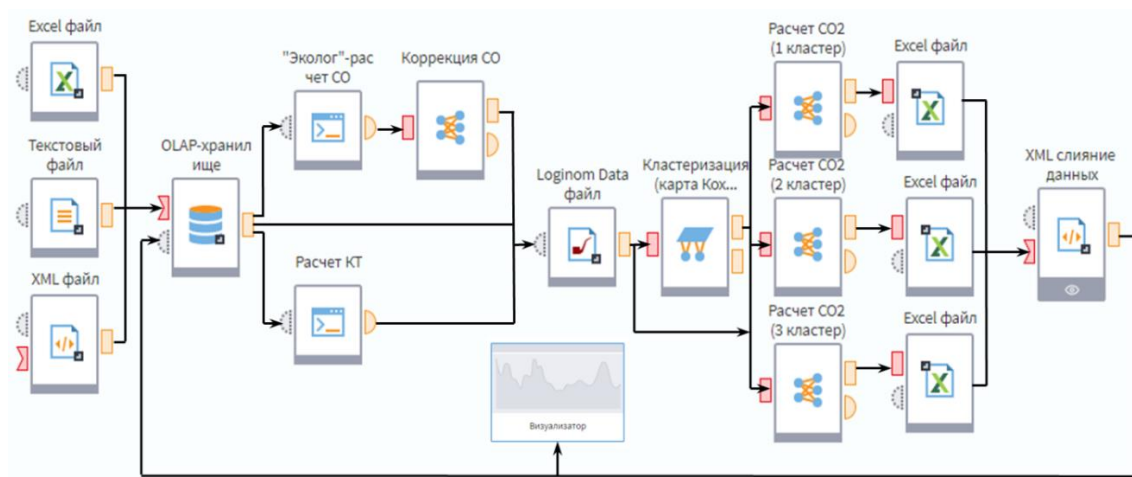


Рис. 3. Графическое представление программного комплекса для расчета уровня диоксида углерода

Fig. 3. Graphical representation of the software package for calculating the level of carbon dioxide

Таким образом, исходя из проведенных исследований, сформулирована методика проектирования и обучения интеллектуальных нейросетевых моделей для расчета концентраций парникового газа диоксида углерода, описанная ниже.

1 этап. Сбор исходных мониторинговых данных. Заключается в получении данных натурных измерений с постов контроля состояния атмосферного воздуха в связке с измерениями метеословий в точке мониторинга. Необходимыми данными являются:

1. Атмосферное давление (мм рт. ст.),
2. Относительная влажность воздуха (%),
3. Направление ветра (°),
4. Скорость ветра (м/с),
5. Температура воздуха (°C),
6. Измеренное значение концентрации оксида азота (мг/м^3),
7. Измеренное значение концентрации диоксида азота (мг/м^3),
8. Измеренное значение концентрации оксида углерода (мг/м^3),
9. Измеренное значение концентрации диоксида углерода (мг/м^3),
10. Измеренное значение концентрации озона (мг/м^3).

2 этап. Сбор исходных данных для расчета в УПРЗА. Заключается в получении и сбора в сводную базу данных об источниках выбросов оксида углерода.

3 этап. Расчет уровня содержания оксида углерода при помощи нормативной методики. На данном этапе производится расчет уровня оксида углерода при помощи УПРЗА на основе данных о параметрах источников выбросов для точек, соответствующих координатам расположения реальных постов мониторинга оксида и диоксида углерода. Метеоусловия генерируются для всех возможных вариантов комбинации параметров «скорость ветра» и «направление ветра» с заданным шагом.

4 этап. Корректировка расчетных значений концентраций оксида углерода нейросетевой моделью. Полученные на предыдущем этапе расчетные значения концентраций СО объединяются с данными натурного мониторинга, включающими расширенный набор метеоусловий и экспериментально измеренные значения оксида углерода на постах. Проектируется нейросетевая модель типа MLP, которая обучается на сформированном наборе данных. Измеренные значения СО выступают в качестве эталонных значений – «учителя».

5 этап. Подготовка данных для проектирования нейросетевой модели расчета CO_2 . По данным экспериментальных измерений оксида и диоксида азота вычисляются значения коэффициента

трансформации для каждого кортежа данных. Полученные значения объединяются с измеренными на постах значениями озона, а также расширенным набором метеопараметров. Рассчитанные на предыдущем этапе скорректированные расчетные значения оксида углерода также дополняют формируемый набор в качестве предикторов будущей нейросетевой модели. Наконец в качестве выхода-эталона, необходимого для обучения, добавляются данные измеренных на постах АСКЗА концентраций CO_2 .

6 этап. Кластеризация данных. Для увеличения точности расчетов сформированный на предыдущем этапе набор данных разбивается на однородные группы – кластеры. Количество групп должно быть указано заранее исходя из неформализуемой информации о данных, либо по упрощенному принципу «низкие – средние – высокие» значения выходного параметра. Алгоритм кластеризации не является жестко заданным, однако с точки зрения возможностей визуализации предпочтение следует отдавать SOM-картам Кохонена.

7 этап. Построение нейросетевых моделей расчета CO_2 . Предпоследним этапом является построение нейронных сетей для каждого выделенного кластера отдельно. Конкретная архитектура сети зависит от данных, общие рекомендации – многослойная сеть типа MLP.

8 этап. Агрегирование данных. Визуализация. Результаты расчетов концентраций CO_2 , полученные на предыдущем этапе для каждого кластера, объединяются в единый файл и передаются в OLAP-хранилище для последующей обработки. При необходимости может быть проведена визуализация данных параллельно с процессом загрузки.

Заключение. В результате проведенных исследований разработана методика получения расчетных значений концентраций парниковых газов на примере диоксида углерода в условиях отсутствия информации о параметрах источников выбросов данного вещества. Модель представляет собой каскад трех вычислительных блоков, последователь-

но обрабатывающих входные данные и передающих полученные расчетные значения на следующий уровень. Учет в моделях параметров, характеризующих способность атмосферы к трансформации веществ, позволяет использовать значения концентраций оксида углерода для расчета концентрации диоксида углерода в атмосфере. Вычислительные эксперименты продемонстрировали высокую точность предложенной методики, а также определили направления для дальнейших исследований.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках программы «Приоритет 2030».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Методы* расчетов рассеивания выбросов вредных (загрязняющих) веществ в атмосферном воздухе. Утв. приказом Минприроды РФ от 06.06.2017 г. № 273.

2. *Ведение* системы расчетного мониторинга за состоянием атмосферного воздуха для выявления источников загрязнения, деятельность которых является причиной повышенной загазованности атмосферного воздуха в городе Казани: отчет по ГК № 20 МЭ-4с от 14.02.2020 г. Казань: ИПЭН АН РТ, 2020. 247 с.

3. *Ведение* системы расчетного мониторинга за состоянием атмосферного воздуха для выявления источников загрязнения, деятельность которых является причиной повышенной загазованности атмосферного воздуха в городе Нижнекамске: отчет по ГК № 20 МЭ-5с от 14.02.2020 г. Казань: ИПЭН АН РТ, 2020. 177 с.

4. *Новикова С.В., Тунакова Ю.А., Шагидуллин А.Р., Кузнецова О.Н.* Использование интеллектуальных расчетных методов для повышения точности результатов расчетного мониторинга основных компонентов выбросов г. Нижнекамска (сообщение 1) // Вестник Технологического университета. 2020. Т. 23. № 9. С. 85–88.

5. *Новикова С.В., Тунакова Ю.А., Шагидуллин А.Р., Кузнецова О.Н.* Использование интеллектуальных расчетных методов для повышения точности результатов расчетного мониторинга основных компонентов выбросов г. Нижнекамска (сообщение 2) // Вестник Технологического университета. 2020. Т. 23. № 9. С. 89–92.

6. *Григорьева И.Г., Тунакова Ю.А., Валиев В.С., Александрова А.К., Кузнецова О.Н.* Оценка коэффициента трансформации оксидов азота в приземном слое атмосферы Нижнекамского промышленного узла // Вестник технологического университета. 2015. № 19. С. 242–244.

THE NEURAL NETWORK ALGORITHM AND THE HYBRID MODEL FOR CALCULATING THE CARBON DIOXIDE GREENHOUSE GAS CONCENTRATIONS

Yu.A. Tunakova¹, S.V. Novikova¹, A.R. Shagidullin², V.S. Valiev²

¹Kazan National Research Technical University named after A.N. Tupolev - KAI, RF, Kazan, K. Marks St., 10

²Research Institute for Problems of Ecology and Mineral Wealth Use of Tatarstan Academy of Sciences, RF, Kazan, Daur'skaya St., 28

E-mail: juliaprof@mail.ru; artur.shagidullin@tatar.ru

The article proposes and tests the methodology for creating the model to calculate concentrations of carbon dioxide CO₂. The use of carbon monoxide concentration CO, meteorological conditions, transformation coefficient and ozone concentration as input parameters is justified. At the first stage, we use standard calculation of CO dispersion. The second stage is the neural network correction of the results of the first stage. The third stage is the creation of neural networks for the CO₂ concentration calculation.

Keywords: emission, neural network, hybrid model, calculation of concentrations, carbon dioxide.

REFERENCES

1. *Metody* raschetov rasseivaniya vybrosov vrednyh (zagryaznyayushchih) veshchestv v atmosfernom vozduhe (Russian standard), Moscow: Ministry of Natural Resources of the Russian Federation, 2017.

2. *Vedenie* sistemy raschetnogo monitoringa za sostoyaniem atmosfernogo vozduha dlya vyyavleniya istochnikov zagryazneniya, deyatel'nost' kotoryh yavlyaetsya prichinoy povyshennoj zagazovannosti atmosfernogo vozduha v gorode Kazani (Maintaining a system of calculated monitoring of the state of atmospheric air to identify sources of pollution, the activity of which is the cause of increased atmospheric air pollution in the city of Kazan), Kazan: IPEN AN RT, 2020, 247 p.

3. *Vedenie* sistemy raschetnogo monitoringa za sostoyaniem atmosfernogo vozduha dlya vyyavleniya istochnikov zagryazneniya, deyatel'nost' kotoryh yavlyaetsya prichinoy povyshennoj zagazovannosti atmosfernogo vozduha v gorode Nizhnekamske (Maintaining a system of calculated monitoring of the state of atmospheric air to identify sources of pollution, the activity of which is the cause of increased atmospheric air pollution in the city of Nizhnekamsk), Kazan: IPEN AN RT, 2020, 177 p.

4. *Novikova S.V., Tunakova Yu.A., SHagidullin A.R., Kuznecova O.N.* Ispol'zovanie intellektual'nyh raschetnyh metodov dlya povysheniya tochnosti rezul'tatov raschetnogo monitoringa osnovnyh komponentov vybrosov g.Nizhnekamska (soobshchenie 1) (Use of intelligent computational methods to improve the accuracy of the results of computational monitoring of the main components of emissions from the city of Nizhnekamsk (message 1)). *Vestnik Tekhnologicheskogo universiteta*, 2020, Vol. 23, No. 9, pp. 85–88.

5. *Novikova S.V., Tunakova Yu.A., SHagidullin A.R., Kuznecova O.N.* Ispol'zovanie intellektual'nyh raschetnyh metodov dlya povysheniya tochnosti rezul'tatov raschetnogo monitoringa osnovnyh komponentov vybrosov g.Nizhnekamska (soobshchenie 2) (Use of intelligent computational methods to improve the accuracy of the results of computational monitoring of the main components of emissions from the city of Nizhnekamsk (message 2)). *Vestnik Tekhnologicheskogo universiteta*, 2020, Vol. 23, No. 9, pp. 89–92.

6. *Grigor'eva I.G., Tunakova Yu.A., Valiev V.S., Aleksandrova A.K., Kuznecova O.N.* Ocenka koefficienta transformacii oksidov azota v prizemnom sloe atmosfery Nizhnekamskogo promyshlennogo uzla (Estimation of the transformation coefficient of nitrogen oxides in the surface layer of the atmosphere of the Nizhnekamsk industrial hub). *Vestnik tekhnologicheskogo universiteta*, 2015, No. 19, pp. 242–244.