05.11.13

НЕЙРОСЕТЕВОЙ РАСЧЕТ КОНЦЕНТРАЦИЙ ДИОКСИДА УГЛЕРОДА

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

¹ Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева – КАИ, г. Казань

² Институт проблем экологии и недропользования Академии наук Республики Татарстан, г. Казань

Снижение углеродного следа в настоящее время является одной из приоритетных задач мировой экономики. Для достижения этой цели необходимо с одной стороны снижать выбросы парниковых газов, с другой стороны развивать методы мониторинга парниковых газов в атмосферном воздухе для обеспечения контроля эффективности принимаемых решений.

Учитывая сложность процессов рассеивания газов в атмосферном воздухе, значительными преимуществами в вопросах определения концентраций атмосферных примесей обладают нейросетевые методы моделирования. В данной статье представлен метод расчета концентраций углекислого газа в атмосферном воздухе с помощью спроектированной и обученной каскадной нейросетевой модели, позволяющей при расчете концентраций учитывать сложное влияние метеорологических факторов и локальных условий рассеивания. Первым уровнем модели является расчет концентрации оксида углерода по известным параметрам источников выбросов этого вещества с использованием регламентированной методики расчета рассеивания примесей в атмосфере в Унифицированной программе расчета рассеивания «Эколог-Город». Вторым уровнем является нейронная сеть, которая корректирует рассчитанную на первом шаге концентрацию по заданным метеорологическим параметрам для увеличения точности моделирования. Третьим уровнем является нейронная сеть, позволяющая по полученной на предыдущем шаге концентрации оксида углерода, а также измеренным значениям коэффициента химической трансформации и концентрации атмосферного озона производить расчет концентрации углекислого газа.

Полученная каскадная модель апробирована на территории г. Нижнекамск. Достигнутая точность расчета концентрации углекислого составила более 95%. Таким образом, представленная технология позволяет расширить возможности локальной системы мониторинга в условиях недостаточного количества измерений диоксида углерода.

Ключевые слова: выбросы в атмосферу, парниковый газ, нейронная сеть, расчет концентраций, диоксид углерода.

ВВЕДЕНИЕ

Использование нейросетевых подходов для расчета концентраций примесей в приземном слое атмосферного воздуха позволяет учесть все трудно моделируемые скрытые зависимости между уровнями загрязнения приземного слоя атмосферы и факторами, его формирующими. Нами использованы инновационные расчетные технологии для определения концентраций парниковых газов в приземном слое атмосферного воздуха на примере территории г. Нижнекамска. Необходимость расчета концентраций парниковых газов связана с отсутствием систематических наблюдений на постах, за исключением АСКЗА-11 (автоматическая станция контроля загрязнения атмосферы) г. Нижнекамска, на котором проводятся наблюдения за содержанием диоксида углерода, что позволяет получить достаточное количество обучающих примеров для настройки спроектированной нейросети. Впоследствии обученные на данных АСКЗА-11 г. Нижнекамска нейронные сети могут применяться для расчета концентраций парниковых газов на территории других городов после соответствующего дообучения.

В предыдущих работах авторами были получены важные результаты по возможностям использования корректирующих нейронных сетей для расчета концентрации загрязняющих веществ в атмосфере с высокой точностью [1,2]. В качестве основного предиктора для таких нейронных сетей выступало значение концентрации примеси, полученное расчетным путем на основе программного продукта УПРЗА (Унифицированная программа расчета рассеивания) «Эколог-Город» версии 4.60, реализующего нормативный метод расчета рассеивания [3]. Дополнительными предикторами нейросетевой модели выступали погодные условия: направление и скорость ветра, давление, температура и влажность воздуха. Нейросетевые расчеты производились для произвольной локации на территории г. Нижнекамска. Точность модели составила более 83%.

Однако для расчета диоксида углерода CO_2 использовать разработанную методику невозможно, так как параметры источников выбросов диоксида углерода не известны. В связи с этим был разработан принципиально новый подход, основанный на расчете концентраций CO_2 с учетом вторичных химических реакций в атмосфере.

ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

Согласно [4] в 2019 году содержание диоксида углерода в атмосфере в 1,5 раза превышало соответствующий показатель в доиндустриальную эпоху, что связано с антропогенной деятельностью. Причем наиболее активный рост выбросов произошел за последние сорок лет.

В общемировой структуре основная масса выбросов парниковых газов соотносится с работой промышленности, производством тепловой и электрической энергии и транспортным комплексом [5]. Основным процессом, в результате которого в атмосферу выбрасываются парниковые газы, является сжигание ископаемого топлива.

Как известно, в состав отходящих газов, образующихся при сжигании любого вида топлива, в реальных условиях входит также ряд загрязняющих веществ, среди которых оксиды азота и монооксид углерода. Оксиды азота образуются вследствие окисления атмосферного азота или азотсодержащих топливных примесей. Оксид углерода образуется вследствие не дожигания топливного углерода. Таким образом, указанные вещества являются неизменными «спутниками» диоксида углерода в реальных промышленных процессах горения, что влечет наличие взаимосвязи между концентрациями этих газов.

Основанием, позволяющим проектировать нейросетевую модель для расчета концентраций CO_2 , явился также тот факт, что в реально измеренных на АСКЗА концентрациях диоксида углерода помимо поступивших в атмосферный воздух с выбросами из стационарных источников, есть доля диоксида углерода, образовавшегося в ходе вторичных реакций из оксида углерода (CO).

Концентрация CO рассчитывалась на первом этапе с использованием корректирующей нейронной сети, топология которой указана в [1,2].

Учет процессов трансформации примесей за счет вторичных химических реакций в атмосфере

Модели с учетом химической трансформации веществ являются новым поколением прогностических моделей с более точным прогнозом концентраций примесей. 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 альбедо и т.д.), тем самым усложняя модель и снижая ее точность. Использование нейросетевых технологий позволяет сократить число необходимых для учета факторов, оставив основные.

Авторами предлагается для учета превращения веществ в атмосфере учитывать две характеристики:

1. Коэффициент трансформации (КТ), вычисляемый на основе предложенного ниже алгоритма расчета. Предлагаемый для использования в качестве предиктора нейросети коэффициент КТ выражает способность атмосферы принять заданное количество вещества и с помощью химических реакций произвести определенное количество вторичного вещества. Немаловажным обстоятельством является высокая чувствительность и четкая локализация этого коэффициента, позволяющие оценивать и сравнивать интенсивность вторичных реакции в атмосфере на локальных участках. Коэффициент КТ предлагается оценивать по трансформации оксида азота в диоксид по следующей схеме.

На основании сформированного банка данных по содержанию оксидов азота, определяемых на автоматизированных постах Министерства экологии и природных ресурсов РТ в г. Нижнекамске, были построены вариационные ряды значений r_i :

$$r_i = q\text{NO}_{2i} / q\text{NO}_i, \quad (1)$$

где r_i - отношение приземных концентраций диоксида азота $q\text{NO}_{2i}$ и оксида азота $q\text{NO}_i$, взятые за временной интервал i .

Вариационные ряды полученных значений r_i упорядочивались по возрастанию и определялся 95%-ный квантиль этого распределения (r_{95}) по всем точкам наблюдения за i -тый промежуток времени. В вариационном ряду отбрасывали 5% наибольших значений отношений концентраций r и первое оставшееся значение принимали за значение 95%-ного квантиля распределения. Таким же образом получали 95%-ный квантиль распределения по единому вариационному ряду для всех циклов наблюдений. Значение коэффициента трансформации КТ вычисляли по формуле (2):

$$\text{КТ} = 1/(1 + 1,53/r_{95}) \quad (2)$$

2. Анализ научных публикаций по интенсивности вторичных фотохимических реакций позволил рассматривать концентрации озона (O_3) в качестве показателя интенсивности трансформации и учитывать их в моделях расчета концентраций примесей. Образование озона происходит главным образом в результате фотохимических реакций. Скорость его образования зависит от интенсивности солнечного света. Поэтому, наряду с использованием в качестве предиктора показателя, характеризующего химическую активность атмосферы, авторами предложено в качестве предиктора модели учитывать динамику концентраций озона.

Таким образом, в итоговой нейросетевой модели расчета концентрации диоксида углерода на основе значений оксида углерода с учетом трансформации веществ в атмосфере были определены три предиктора:

- Значение CO , получаемое из корректирующей нейросетевой модели

- Значение КТ, рассчитанное по формуле (2)
- Значение O_3 (измеренное).

Методика каскадного нейросетевого расчета концентрации диоксида углерода

Расчет концентраций реализован при помощи специально спроектированной нейросетевой каскадной модели в условиях недостатка исходных

данных по параметрам источников выбросов. Модель представляет собой гибрид из расчетного блока на базе программного комплекса «Эколог-Город» и двух нейросетевых моделей типа многослойный персептрон, последовательно каскадом передающим информацию от одной к другой. Структуру модели можно представить следующей схемой (Рис.1).

Рис. 1. Структура нейросетевого каскада для расчета концентраций диоксида углерода

Модель состоит из трех уровней расчетов, последовательно передающих данных от первого к третьему.

Первым уровнем является программный продукт УПРЗА «Эколог-Город», рассчитывающий значение CO . Вторым уровнем является корректирующая нейросетевая модель, уточняющая полученное значение с учетом метеоусловий. Третьим уровнем является нейросетевая модель расчета CO_2 с учетом процессов трансформации в атмосфере.

Вся трехуровневая модель целиком функционирует следующим образом:

1 шаг. На вход модели первого уровня подаются значения параметров источников выбросов, а также координаты точек для расчета. На выходе модели будет получено расчетное (грубое, с погрешностью) значение концентраций оксида углерода.

2 шаг. Полученное грубое расчетное значение уточняется при помощи нейросетевой модели второго уровня (нейросетевая модель №1), на входы которой помимо полученного значения CO подаются уточняющие метеопараметры. Обучение модели производится предварительно на данных измерений, полученных с постов наблюдений АСКЗА-11 на территории г. Нижнекамска. В результате будет получено скорректированное расчетное значение CO для заданной точки.

3 шаг. Данные предаются на нейросетевую модель третьего уровня (нейросетевая модель №2), на входы которой кроме полученного на предыдущем шаге значения CO подаются значения концентраций в воздухе озона и рассчитанного коэффициента

трансформации. Данные дополнительные параметры позволяют учесть процессы превращения веществ в атмосфере, и увеличить точность расчетов в несколько раз.

Результаты вычислительных экспериментов

По разработанной методике были проведены тестовые расчеты значений концентраций диоксида углерода в зоне действия поста АСКЗА-11 г. Нижнекамска с проверкой адекватности расчетов по данным измерений поста. Точность нейросетевых моделей определялась на основании среднеквадратического отклонения рассчитанных при помощи модели значений CO_2 от результатов натурных экспериментальных измерений поста АСКЗА-11.

Нейросетевая модель №1 строилась согласно топологии, представленной в [1,2]. Нейросетевая модель №2 первоначально строилась для всего набора обучающих значений, полученных с поста АСКЗА-11, однако показала неудовлетворительную точность (порядка 50%). Анализ влияющих на точность факторов выявил прямую зависимость погрешности вычислений от величины измеренных значений концентраций CO_2 : в общем наборе данных находились значения, отличающиеся друг от друга на три порядка. В результате было принято решение о проектировании двух отдельных моделей: для малых концентраций CO_2 , близких к фоновым, и для повышенных значений концентраций.

Нейросетевая модель №2 для малых концентраций диоксида углерода (менее 10 мг/м^3) имела следующую топологию (Рис.2):

1. Количество входных нейронов – 3.
2. Количество выходных нейронов – 1: концентрация CO₂.
3. Количество скрытых слоев – 1.
4. Количество нейронов в скрытом слое – 5.
5. Функция активации нейронов скрытого слоя – гиперболический тангенс.
6. Функция активации нейрона выходного слоя – линейная.

Рис. 2. Топология нейросетевой модели для расчета диоксида углерода при низких концентрациях

Точность модели составила более 70%. Усложнение структуры модели не привело к увеличению точности. С ростом значений концентраций выше установленного ограничения происходит потеря точности расчетов, что подтверждает предположение о необходимости проектирования разных нейросетей для малых и высоких концентраций. В дальнейших исследованиях данное предположение и методика дифференциации моделей будут усовершенствованы.

Для высоких значений концентраций диоксида углерода в атмосферном воздухе (от 10 до 550 мг/м³) была спроектирована нейросетевая модель №2 усложненной топологии (Рис.3):

Рис. 3. Топология нейросетевой модели для расчета диоксида углерода при высоких концентрациях

1. Количество входных нейронов – 3.
2. Количество выходных нейронов – 1: концентрация CO₂.
3. Количество скрытых слоев – 2.
4. Количество нейронов в первом скрытом слое – 5.
5. Функция активации нейронов первого скрытого слоя – гиперболический тангенс.

6. Количество нейронов во втором скрытом слое – 3.

7. Функция активации нейронов второго скрытого слоя – линейная.

8. Функция активации нейрона выходного слоя – гиперболический тангенс.

Точность данной модели составила более 95%. Как и в предыдущем эксперименте, на относительно ровных участках точность остается стабильно высокой, скачкообразное увеличение значений концентраций приводит к снижению точности, однако не столь значительному.

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, последовательно обрабатывающих входные данные и передающих полученные расчетные значения на следующий уровень. Первый уровень модели представляет собой вычисления по стандартным расчетным методикам, другие два – нейросетевые.

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 достаточную 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 ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Использование интеллектуальных расчетных методов для повышения точности результатов расчетного мониторинга основных компонентов выбросов г.Нижнекамска (сообщение 1) / С.В. Новикова и др. // Вестник Технологического университета. – 2020. – № 9. – С. 89-92.
2. Использование интеллектуальных расчетных методов для повышения точности результатов расчетного мониторинга основных компонентов выбросов г.Нижнекамска (сообщение 2) / С.В. Новикова и др. // Вестник Технологического университета. – 2020. – № 9. – С. 85-88.
3. Методы расчетов рассеивания выбросов вредных (загрязняющих) веществ в атмосферном воздухе, утверждены Приказом Минприроды РФ от 06.06.2017 г. № 273.
4. Бюллетень ВМО по Парниковым Газам - № 16: Содержание парниковых газов в атмосфере по данным глобальных наблюдений в 2019 году [Электронный ресурс] // Сайт Всемирной метеорологической организации. – 2020. – Режим доступа: https://library.wmo.int/doc_num.php?explnum_id=10460
5. IPCC, 2014: Climate Change 2014: Synthesis Report. Contribution of Working Groups I, II and III to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change [Core

Writing Team, R.K. Pachauri and L.A. Meyer (eds.)). IPCC, Geneva, Switzerland. – 151 pp.

Тунакова Юлия Алексеевна – д.х.н., проф., зав. каф. Общая химия и экология, КНИТУ им. А.Н. Туполева – КИИ, juliaprof@mail.ru

Новикова Светлана Владимировна – д.т.н., проф. каф. Прикладной математики и информатики КНИТУ им. А.Н. Туполева – КИИ, sweta72@bk.ru

Шагидуллин Артур Рифгатович – к.ф.-м.н., с.н.с. лаборатории прикладной экологии, Институт проблем экологии и недропользования АН РТ, тел. (843)298-00-31, Artur.Shagidullin@tatar.ru

Валиев Всеволод Сергеевич – с.н.с. лаборатории биогеохимии, Институт проблем экологии и недропользования АН РТ, podrost@mail.ru

NEURAL NETWORK CALCULATION OF CARBON DIOXIDE CONCENTRATIONS

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

¹ *Kazan National Research Technical University named after A.N. Tupolev - KAI, Kazan*

² *Research Institute for Problems of Ecology and Mineral Wealth Use of Tatarstan Academy of Sciences, Kazan*

Reducing the carbon footprint is currently one of the priorities for the world economy. To do this, it is necessary to reduce greenhouse gas emissions, as well as to develop methods for monitoring greenhouse gases in the atmospheric air to ensure control over the effectiveness of decisions taken.

Considering the complexity of the processes of dispersion of gases in the atmospheric air, neural network modeling methods have significant advantages in determining the concentrations of atmospheric impurities. This article presents a method for calculating the concentration of carbon dioxide in the atmospheric air using a designed and trained cascade neural network model, which makes it possible to take into account the complex influence of meteorological factors and local dispersion conditions when calculating concentrations. The first level of the model is the calculation of the concentration of carbon monoxide according to the known parameters of the emission sources of this substance using the regulated method for calculating the dispersion of impurities in the atmosphere in the Unified program for calculating dispersion "Ecolog-City". The second level is a neural network, which corrects the concentration calculated at the first step according to the specified meteorological parameters to increase the modeling accuracy. The third level is a neural network that allows calculating the concentration of carbon dioxide based on the concentration of carbon monoxide obtained at the previous step, as well as the measured values of the coefficient of chemical transformation and concentration of atmospheric ozone.

The resulting cascade model was tested on the territory of Nizhnekamsk. The achieved accuracy of calculating the concentration of carbon dioxide was more than 95%. Thus, the presented technology makes it possible to expand the capabilities of the local monitoring system in conditions of an insufficient number of measurements of carbon dioxide.

Key words: emissions into the atmosphere, greenhouse gas, neural network, calculation of concentrations, carbon dioxide.

REFERENCES

1. Novikova, S.V. [Novikova, S.V., Yu.A. Tunakova, A.R. Shagidullin and O.N. Kuznetsova], "Using intelligent computational methods to improve the accuracy of the computational monitoring results for the main emission components of the city of Nizhnekamsk (message 1)", *Vestnik Tekhnologicheskogo universiteta*, vol. 23, no. 9, pp. 89-92, Sept. 2020.
 2. Novikova, S.V. [Novikova, S.V., Yu.A. Tunakova, A.R. Shagidullin and O.N. Kuznetsova], "Using intelligent computational methods to improve the accuracy of the computational monitoring results for the main emission components of the city of Nizhnekamsk (message 2)", *Vestnik Tekhnologicheskogo universiteta*, vol. 23, no. 9, pp. 85-88, Sept. 2020.
 3. Methods for calculating the dispersion of emissions of harmful (polluting) substances in the air, approved by Order of the Ministry of Natural Resources of the Russian Federation dated 06.06.2017 No. 273.
 4. *WMO Greenhouse Gas Bulletin (GHG Bulletin) - No.16 : The State of Greenhouse Gases in the Atmosphere Based on Global Observations through 2019 (2020)*, accessed October 04, 2021, https://library.wmo.int/?lvl=notice_display&id=21820#.YVsLzFVByUk
 5. IPCC, 2014: Climate Change 2014: Synthesis Report. Contribution of Working Groups I, II and III to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change [Core Writing Team, R.K. Pachauri and L.A. Meyer (eds.)]. IPCC, Geneva, Switzerland. – 151 pp.
- Tunakova Yulia Alekseevna – doctor of chemistry, professor, head of the department of General chemistry and ecology, Kazan National Research Technical University named after A.N. Tupolev - KAI, juliaprof@mail.ru*
- Novikova Svetlana Vladimirovna – doctor of technical science, professor of the department of Applied mathematics and informatics, Kazan National Research Technical University named after A. N. Tupolev - KAI, sweta72@bk.ru*
- Shagidullin Artur Rifgatovich – candidate of physical and mathematical sciences, Senior Research Associate of applied ecology laboratory, Research Institute for Problems of Ecology and Mineral Wealth Use of Tatarstan Academy of Sciences, (843)298-00-31, Artur.Shagidullin@tatar.ru*
- Valiev Vsevolod Sergeevich – Senior Research Associate of laboratory of biogeochemistry, Research Institute for Problems of Ecology and Mineral Wealth Use of Tatarstan Academy of Sciences, podrost@mail.ru*