DOI: https://doi.org/10.37162/2618-9631-2022-4-147-170 УДК 551.510.4

Тестирование и перспективы технологии прогнозирования загрязнения воздуха с применением химических транспортных моделей CHIMERE и COSMO-Ru2ART

И.Н. Кузнецова¹, М.И. Нахаев¹, А.А. Кирсанов¹, Д.В. Борисов¹, Ю.В. Ткачева¹, Г.С. Ривин¹, Е.А. Лезина²

> ¹ Гидрометеорологический научно-исследовательский центр Российской Федерации, г. Москва, Россия; ²ГПБУ "Мосэкомониторинг", г. Москва, Россия тига(@тесот.ru

Действующая в Гидрометцентре России технология численного прогнозирования загрязнения воздуха основана на расчетах химических транспортных моделей (XTM) CHIMERE и COSMO-ART на сетке с горизонтальным шагом 2,2 км с использованием данных кадастра ЕМЕР 2013 года актуализации о выбросах в атмосферу, а также метеорологических данных модели атмосферы COSMO-Ru2. В статье представлены результаты тестирования модельных прогнозов концентраций загрязняющих веществ (NO₂, CO, PM₁₀, O₃) по данным непрерывных наблюдений загрязнения в московском регионе в течение 12 месяцев. Установлено преимущественное завышение концентраций XTM CHIMERE и их занижение COSMO-ART; обе XTM преимущественно недооценивают загрязнение на территориях транспортного типа. Выявлена сезонная изменчивость модельных отклонений со сменой знака для каждой модели и каждого загрязняющего вещества; наибольшие модельные отклонения наблюдались при аномальных погодных условиях – во время волн жары летом и при адвекции запыленного воздуха весной. С учетом установленных модельных ошибок каждой ХТМ сформулированы рекомендации для составления оперативного консолидированного прогноза с использованием комплексирования расчетов двух ХТМ.

Обсуждается развитие технологии численного прогнозирования загрязнения воздуха на основе применения модифицированных версий XTM и учета эмиссий кадастра EMEP 2019 г. актуализации на сетке 0,1×0,1°.

Ключевые слова: загрязнение воздуха, численный прогноз, химическая транспортная модель, CHIMERE, COSMO-ART, эмиссии, EMEP, тестирование

Testing and prospects of air pollution prediction technology based on CHIMERE and COSMO-Ru2ART chemical transport models

I.N. Kuznetsova¹, M.I. Nakhaev¹, A.A. Kirsanov¹, D.V. Borisov¹, Yu.V. Tkacheva¹, G.S. Rivin¹, E.A. Lezina²

¹ Hydrometeorological Research Center of Russian Federation, Moscow, Russia; ² Budgetary environmental protection institution «MosEcoMonitoring», Moscow, Russia muza@mecom.ru The technology for numerical air pollution prediction operating in the Hydrometeorological Center of Russia is based on the calculations with CHIMERE and COSMO-ART chemical transport models (CTMs) on a grid with a horizontal step of 2.2 km using the EMEP inventory data on atmospheric emissions updated in 2013 and meteorological data of the COSMO-Ru2 atmosphere model. The paper presents the results of testing model forecasts of pollutant (NO₂, CO, PM₁₀, O₃) concentrations based on continuous pollution observations in the Moscow region for 12 months. A predominant overestimation of concentrations by the CHIMERE and an underestimation by the COSMO-ART were revealed. Both CTMs mainly underestimate pollution in transport-type areas. The seasonal variability of model deviations with a sign change for each model and each pollutant was identified. The largest model deviations were observed under abnormal weather conditions: during summer heat waves and spring advection of dusty air. Taking into account the model errors established for each CTM, recommendations are formulated for producing an operational consolidated forecast using the integration of simulations with the two CTMs.

The development of the technology for numerical air pollution prediction using modified CTM versions and EMEP emissions updated in 2019 on a $0.1 \times 0.1^{\circ}$ grid is discussed.

Keywords: air pollution, numerical forecast, chemical transport model, CHIMERE, COSMO-Ru2ART, emissions, EMEP, testing

Введение

Действующая в Гидрометцентре России технология численного прогнозирования концентраций загрязняющих веществ (далее – ТЧПЗ) основана на использовании химической транспортной модели (XTM) CHIMERE, относящейся к оффлайн типу XTM, и COSMO-ART – мезомасштабной негидростатической метеорологической модели COSMO (COnsortium for Small-scale MOdelling) с включенным в нее химико-транспортным блоком ART (Aerosols and Reactive Trace gases). Особенностью COSMO-ART (модель онлайн типа) является совместный расчет метеорологических величин и химических преобразований на каждом шаге по времени, что позволяет учитывать обратное влияние аэрозолей и газов на радиационные процессы и метеорологический режим атмосферы [4].

XTM CHIMERE разработана во Франции специалистами INERIS (Institut national de l'environnement industriel et des risques, IPSL/LISA -Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques, Sorbonne Université) [17, 22, 28]. CHIMERE - свободно распространяемая модель; она использовалась многими авторами при экспериментальных расчетах и для количественных оценок численного моделирования [19, 24, 27]. На сайте (http://www.lmd.polytechnique.fr/chimere) доступна версия XTM CHIMERE актуализации 2020 г. [21]. В качестве начальных и граничных метеорологических условий в ТЧПЗ используется оперативный прогноз системы COSMO-Ru численного краткосрочного прогноза погоды, в которую включена конфигурация COSMO-RuART модели COSMO-ART [3, 14, 15]. Для задания антропогенных эмиссий CO, NO, NO2, SO2, HCHO, PM блок ART и CHIMERE используют адаптированные региональные данные выбросов программы European Monitoring and Evaluation Programme (EMEP), (https://www.ceip.at/ms/ceip home1/ceip home/webdab emepdatabase/). Особые

и детальные характеристики химических транспортных моделей CHIMERE и COSMO-ART описаны в публикациях авторов [4, 10, 11].

Наличие двух моделей в ТЧПЗ оправдано не только для тестирования XTM с целью сравнения качества их расчетов, но и для комплексирования модельных прогнозов на этапе постпроцессинга, а также для разработки в перспективе ансамблевого прогнозирования, которое является устоявшейся зарубежной практикой не только для прогноза погоды (например, https://www.wetterzentrale.de/en/show_diagrams.php), но и для воздушного загрязнения [27]. К примеру, в странах Европейского Союза качество воздуха прогнозируется системой САМS с использованием ансамбля из семи партнерских моделей: SILAM, MATCH, MOCAGE, CHIMERE, EURAD-IM, EMEP, LOTOS-EUROS. На веб-ресурсе (https://regional.atmosphere. copernicus.eu/) представляются данные верификации модельных расчетов концентраций загрязняющих веществ для отдельных стран и городов, для станций в жилых районах города (станции городского типа) и примагистральных районах (станции транспортного типа).

Установка ТЧПЗ в Гидрометцентре России с последующими ее модификациями сопровождается регулярным тестированием модельных расчетов по данным наблюдений на автоматизированных станциях контроля загрязнения атмосферы (ACK3A) «Мосэкомониторинг» в Москве (https://mosecom.mos.ru/vozdux/). Только наличием данных натурных автоматизированных измерений в масштабе, по времени и пространству соответствующих модельным расчетам, объясняется регион тестирования – г. Москва. В данной статье кратко представлены результаты верификации модельных расчетов COSMO-Ru2ART и XTM CHIMERE в конфигурации ТЧПЗ с горизонтальным шагом сетки 2,2 км с использованием данных кадастра EMEP 2013 года актуализации о выбросах загрязняющих веществ.

Результаты проведенного тестирования модельных расчетов COSMO-Ru2ART и XTM CHIMERE в период март 2021 г. – февраль 2022 г. являются мотивацией и руководством для усовершенствования функционирующей в Гидрометцентре России ТЧПЗ. Этому могут способствовать обновление данных ЕМЕР и модифицированная XTM CHIMERE. В данной статье приводятся основные изменения в XTM CHIMERE, представлен сравнительный анализ данных ЕМЕР 2019 года актуализации.

1. Тестирование модельных расчетов загрязнения приземного воздуха по данным автоматизированных измерений концентраций загрязняющих веществ

В режиме автоматического регулярного счета в период март 2021 г. – февраль 2022 г. (12 месяцев) с использованием XTM CHIMERE и COSMO-Ru2ART рассчитаны прогнозы приземных концентраций загрязняющих веществ на следующие после старта моделей сутки для территории Москвы. Расчеты системы COSMO-Ru2ART выполнялись на 288 ядрах суперкомпьютера CRAY XC40-LC Главного вычислительного центра Росгидромета; расчеты XTM CHIMERE проведены на локальном персональном компьютере на 24 ядрах. Прогностические концентрации рассчитывались на сетке с горизонтальным шагом 2.2 км с использованием метеорологических данных COSMO-Ru2.

Для сравнений модельных расчетов концентраций загрязняющих веществ NO₂, CO и PM₁₀, с марта по сентябрь – O₃ с наблюдениями использованы данные измерений на автоматических станциях контроля загрязнения атмосферы (ACK3A) «Мосэкомониторинг»; количество ACK3A по разным веществам колебалось от 15 до 40.

Оценки модельных прогнозов проводились а) в среднем для города по данным в узлах сетки расчетного домена и осредненных по ACK3A раздельно по станциям «городского» и «транспортного» типа; б) по отдельным ACK3A, при этом измеренная на ACK3A концентрация сравнивалась со значением, рассчитанным в ближайшем узле расчетной сетки на нижнем модельном уровне в слое от 0 до 10 м.

Размер выборки в базе данных для тестирования составил для каждой XTM более 600 тыс. пар «модель – измерение» (далее «отклонение»). Поскольку нет специализированной методики оценки численного прогноза концентраций загрязняющих веществ, успешность прогноза концентраций устанавливалась по общим рекомендациям [9], принимался во внимание опыт отечественных [8] и зарубежных исследователей по представлению показателей качества моделирования XTM [18, 22, 23, 25, 26]. Были рассчитаны стандартные статистические характеристики оценок; кроме того, проводилось сравнение модельных прогнозов двух XTM между собой и с инерционным прогнозом.

Общее представление о качестве численных прогнозов дают приведенные в табл. 1 и на рис. 1–3 показатели ошибки модельных прогнозов двух XTM. Отметим, что из-за технических причин в отдельные месяцы количество расчетов двух XTM не совпадает. Приведенные в табл. 1 данные указывают на близкие абсолютные ошибки расчетов COSMO-Ru2ART и CHIMERE. Видно, что изменчивость отклонений модельных расчетов от измерений по данным системы COSMO-Ru2ART и химико-транспортной модели CHIMERE различаются: COSMO-Ru2ART преимущественно недооценивает концентрации загрязняющих веществ, CHIMERE – завышает.

Занижение концентраций системой COSMO-Ru2ART можно связать как с близостью границ расчетной области, на которых заданы низкие климатические концентрации, так и с отсутствием дополнительных антропогенных выбросов некоторых соединений, специфичных для модели CHIMERE.

При тестировании модельных расчетов обнаружена сезонная зависимость модельных ошибок, наиболее выраженная в расчетах NO_2 , O_3 и PM_{10} . Как видно на рис. 1, XTM CHIMERE в теплый период завышает концентрацию NO_2 , с ноября по февраль – занижает. COSMO-Ru2ART в основном занижает концентрацию NO₂, но в осенние месяцы ее расчеты очень близки к наблюдениям.

Таблица 1. Средние в период тестирования (12 месяцев) статистические показатели ошибок модельных прогнозов концентрации загрязняющих веществ COSMO-Ru2ART и XTM CHIMERE. Март 2021 г. – февраль 2022 г. Table 1. Average statistical values of errors of model predictions of pollutant concentrations COSMO-Ru2ART and CTM CHIMERE during the testing period (12 months). March 2021 - February 2022

Концентрация	Загрязняющее	Статистические показатели			
	вещество	Средняя	Средняя	Коэффициент	
		Ошиока	ошибка	корреляции	
	C	OSMO-Ru2ART		1	
Средняя	CO	-0.036	0.078	0.70	
суточная	NO ₂	-0.010	0.012	0.59	
	O ₃	0.002	0.013	0.43	
	PM10	-0.012	0.013	0.21	
Максимальная	CO	-0.182	0.252	0.64	
за сутки	NO ₂	-0.014	0.019	0.48	
	O3	-0.003	0.020	0.52	
	PM10	-0.021	0.027	0.26	
	Х	TM CHIMERE			
Средняя	CO	0.044	0.083	0.74	
суточная	NO ₂	0.004	0.013	0.62	
	O3	0.012	0.015	0.72	
	PM10	0.010	0.015	0.46	
Максимальная	CO	-0.155	0.212	0.73	
за сутки	NO ₂	0.003	0.021	0.69	
	O ₃	0.006	0.016	0.82	
	PM10	0.012	0.029	0.47	

При выработке правил постпроцессинга необходимо принимать во внимание сезонный фон загрязнения. Так, по оценкам многолетних рядов [8] концентрация NO₂ в воздухе Москвы характеризуется значительными сезонными колебаниями – от годового максимума в феврале– апреле к растянутому минимуму с июня по ноябрь. Абсолютные ошибки прогнозов NO_{2c.c.} (с.с. – средние суточные концентрации) обеих XTM находятся в основном в диапазоне 0,01–0,015 мг·м⁻³. В июне–июле 2021 г. ошибки XTM CHIMERE возрастали примерно до 20 мг·м⁻³; в этот период в Москве наблюдались продолжительные волны жары (https://meteoinfo.ru/). Аномальные погодные условия позволили выявить высокую чувствительность XTM CHIMERE к изменчивости метеорологических характеристик, в частности, обнаружена зависимость увеличения воспроизводства вторичных загрязнителей (NO₂ и O₃) от температурного фона вследствие активизации химических процессов, описываемых в XTM.



Рис. 1. Осредненные за месяц модельные и измеренные концентрации NO_{2c.c.} (а), средняя (б) и абсолютная (в) модельные ошибки прогноза, мг·м⁻³, коэффициент корреляции «модель – измерение» (г). Март 2021 г. – февраль 2022 г.

Fig. 1. Monthly averaged model and measured NO2_{m.d.} concentrations (a), mean (σ) and absolute (σ) model prediction errors, mg·m-3, "model - measurement" correlation coefficient (r). March 2021 – February 2022.

Во время волн жары в Москве наблюдались продолжительные эпизоды загрязнения, в первую очередь озоном с ранее не фиксировавшейся в мегаполисе приземной концентрацией [1]. Такие эпизоды, как видно на рис. 2a, были вполне успешно воспроизведены XTM CHIMERE; на рис. 2a показаны также измеренные на одной из ACK3A (Марьино) максимальные за сутки концентрации приземного озона.

Максимальная за сутки концентрация приземного озона по рекомендации ВОЗ [6] является одним из важнейших показателей качества воздуха, именно на этой характеристике сосредоточено наше внимание. На рис. 26 представлены средние за месяц отклонения модельных расчетов суточных максимумов концентрации О₃ (О₃мах), осредненные по АСКЗА. В среднем за период март–сентябрь 2021 г. (который выбран как период возможного превышения гигиенического отечественного норматива 0,16 мг·м⁻³ [5]) ошибка инерционного прогноза осредненного по АСКЗА О₃мах составила 0,017 мг·м⁻³, R=0,74. В весенние месяцы средняя ошибка прогноза О₃мах СНІМЕRЕ была около 0,01 мг·м⁻³, COSMO-Ru2ART другого знака – -0,015 мг·м⁻³; летом модельные ошибки почти в 2 раза больше и составили, соответственно, 0,019 и -0,025 мг·м⁻³.



Рис. 2. Максимальная в городе суточная концентрация приземного озона ($Mr \cdot M^{-3}$) по измерениям на ACK3A «Мосэкомониторинг» и на ACK3A Марьино: по расчетам XTM CHIMERE и COSMO-Ru2ART в период март–сентябрь 2021 г. (а); средняя ошибка суточных максимумов, осредненных по ACK3A, по расчетам двух XTM (б). Март 2021 г. – февраль 2022 г. **Fig. 2.** Maximum daily ground-level ozone concentration in the city ($mg \cdot m$ -3) as measured at APCS "Mosecomonitoring" and at APCS Maryino: by CHIMERE and COSMO-Ru2ART in March-September 2021 (a); average error of daily maximums averaged over APCS, by two HTM calculations (б). March 2021 – February 2022.

При интерпретации модельных прогнозов важно принимать во внимание то, что для поля приземного озона в мегаполисе характерна высокая неоднородность, обусловленная деструкцией озона вблизи локальных источников загрязнений. Так, средняя за период тестирования О₃мах по измерениям на «транспортных» АСКЗА была в диапазоне 0,05–0,06 мг·м⁻³, на городских – 0,08–0,09 мг·м⁻³, в северо-западном секторе на окраинах Москвы (АСКЗА Туристская и Полярная) – около 0,1 мг·м⁻³. Отметим, что в озоновых эпизодах максимальная за сутки концентрация озона на городских станциях оказывалась в 1,5–3 раза больше, чем вблизи автодорог.

Концентрация угарного газа в городской атмосфере Москвы преимущественно невысокая – существенно ниже ПДК [5]). В период тестирования прогностические расчеты СО двух XTM оказались близки к наблюдениям, при этом в основном модельные концентрации COSMO-Ru2ART были меньше наблюдавшихся, по XTM CHIMERE – больше измеренных (рис. 3а).



Рис. 3. Средние за месяц измеренные и модельные концентрации CO (а), средние абсолютные ошибки прогноза CO (б). Март 2021– февраль 2022.

Fig. 3. Monthly averages of measured and model CO concentrations (a), mean absolute errors of CO predictions (δ). March 2021 – February 2022.

При этом величины средней ошибки обеих моделей в большинстве месяцев находились в интервале $\pm 0,1$ мг·м⁻³ (рис. 36), что близко к точности измерений концентрации оксида углерода. Коэффициент корреляции прогноз – измерение (R) у обеих XTM оказался в диапазоне 0,7–0,9, в мае и сентябре по XTM CHIMERE R=0,6 (рис. 36). Но максимальные суточные концентрации обе модели занижали (преимущественно на 0,1–0,25 мг·м⁻³), сильнее всего в мае и августе. Описанные выше сравнения модельных расчетов с наблюдениями сделаны по выборкам максимального количества прогнозов каждой XTM. Для корректного сравнения расчетов двух XTM сделаны оценки прогнозов по синхронизированной базе данных, на основании которых можно сформулировать рекомендации для комплексирования расчетов XTM CHIMERE и COSMO-Ru2ART. Учитывая значительную неоднородность полей концентрации загрязняющих веществ в мегаполисе, связанную с расположением источников антропогенного загрязнения (в Москве основным источником загрязнения воздуха является автотранспорт), оценки модельных прогнозов сделаны по сезонам раздельно для типовых территорий «транспортного» и «городского» типа (табл. 2).

Результаты, полученные при анализе синхронизированных прогнозов, в целом совпадают с приведенными выше данными, но позволяют получить более детализированную картину сезонных и пространственных особенностей прогнозов двух XTM. Необходимо еще раз подчеркнуть, что из-за аномальных погодных условий показатели прогнозов XTM СНІМЕRE в летние месяцы можно признать репрезентативными только по знаку отклонений. Оказалось, что при средней за год ошибке инерционного прогноза NO₂cc 0,011 мг·м⁻³ошибки прогнозов обеих XTM колеблются в пределах $\pm(0,01-0,015)$.

Как видно в табл. 2, XTM CHIMERE концентрацию NO₂ с марта по август завышает, а с ноября по февраль – занижает. COSMO-Ru2ART, за исключением осенних месяцев, занижает концентрацию NO₂, но CKO ошибок в этой модели меньше, чем в CHIMERE. Получен важный вывод о том, что на территориях городского типа обе модели прогнозируют NO₂c.c. и NO₂мах с меньшими погрешностями, чем на территориях примагистрального типа, где в холодный период возрастает характерная недооценка концентрации NO₂. Можно заметить, что наибольшие ошибки XTM CHIMERE пришлись на лето 2021 г., когда наблюдалось несколько аномальных эпизодов загрязнения.

Средняя ошибка инерционного прогноза СО составила 0,26 мг·м⁻³при СКО около 0,2 мг·м⁻³. Обе ХТМ имеют преимущество при расчете средней суточной концентрации СО, немного занижая на территориях транспортного типа и незначительно завышая на городских территориях. Но модельные расчеты максимальной за сутки концентрации СО уступают инерционному прогнозу. Та же закономерность прослеживается в СКО, по моделям СКО близко к инерционному прогнозу средней за сутки концентрации, почти в 2 раза превышают инерционный СКО при расчетах максимальной концентрации СО.

По рекомендации ВОЗ содержание PM_{10} является ключевым при оценке качества городского воздуха; рекомендованный критерий средней суточной концентрации составляет 50 мкг м⁻³ [6]. Отечественный критерий мягче и составляет 60 мкг м⁻³ [5].

за		õ
мах)		р 100
ой (120
льн		2
ЯМЮ		110
akc		ive
Z		2 ح
<u>;</u>		00
й С		τ
THE		
2pe/		Cere
щ		0110
Ē		202
Ē		ť
≥		000
×	2 	it
Z L	202	0.0
2AR	ЧĽ	LL LL
'n	Bpa	Z
Ś	å	Ē
SOS	Ŀ	Z
D D	021	ί τ
1030	л 2	200
HOC	Map	
и Ц	3).) ()
OCT	٨ĿМ	C
HI	ے o	Z
VCII	Ö Z	C
Ы	02	لم م
ате	Ē	oto.
каз	аци	00
Ĕ	энтр	
a 2	энце	ū
ЛИЦ	иKo	с с
[a6]	3TK	401
_	0	-

I able 2. Success rates of COSMO-RUZAR1 and CI M CHIMEKE predictions of day average (m.d.) and maximum (max) per day NO2 and CO concentrations (mg·m³). March 2021 – February 2022

Ň		XTM CH	HIMERE			COSMO-	Ru2ART		co		XTM CF	IIMERE			COSMO-	Ru2ART	
4	∧- III	III/-I/	IX-XI	II-IIX	∧-III	III/-I/	IX-XI	II-IIX		∧-III	III/-I/	IX-XI	II-IIX	∧- III	III/-I/	IX-XI	XII-II
			~	NO _{2 c.c.} AE	S								CO cc.	ABS			
urban	0.015	0.028	0.015	0.012	0.015	0.014	0.011	0.016	urban	0.167	0.200	0.152	0.153	0.150	0.145	0.140	0.136
trafic	0.019	0.019	0.015	0.018	0.027	0.027	0.012	0.025	trafic	0.020	0.249	0.203	0.168	0.219	0.325	0.236	0.213
			2	VO _{2 max} AE	3S							-	CO _{max} AB	Ş			
urban	0.025	0.045	0.022	0.018	0.028	0.025	0.018	0.021	urban	0.334	0.361	0.268	0.227	0.369	0.362	0.311	0.279
trafic	0.030	0.036	0.026	0.027	0.043	0.037	0.020	0.031	trafic	0.573	0.642	0.541	0.431	0.638	0.714	0.564	0.497
			ž	J2 c.c. B	AS							C	O c.c. BI/	4S			
urban	0.002	0.026	0.010	-0.004	-0.011	-0.007	0.004	-0.012	urban	0.104	0.126	0.085	0.109	0.031	0.001	0.042	0.024
trafic	-0.012	0.010	0.000	-0.016	-0.026	-0.026	-0.007	-0.024	trafic	-0.061	-0.166	-0.146	-0.081	-0.153	-0.313	-0.201	-0.176
			N	J2 max B	IAS							ŏ	D max Bl	٩S			
urban	-0.002	0.038	0.010	-0.007	-0.021	-0.009	0.009	-0.011	urban	-0.044	0.049	-0.051	0.003	-0.112	-0.014	-0.021	-0.023
trafic	-0.019	0.018	-0.006	-0.024	-0.041	-0.034	-0.009	-0.029	trafic	-0.447	-0.554	-0.482	-0.363	-0.549	-0.655	-0.473	-0.408
			ž	02 c.c. C	¥0							с О	O c.c. CK	Q			
urban	0.017	0.022	0.018	0.013	0.012	0.012	0.011	0.012	urban	0.173	0.175	0.177	0.129	0.179	0.141	0.163	0.146
trafic	0.019	0.021	0.020	0.014	0.014	0.015	0.012	0.014	trafic	0.203	0.207	0.194	0.179	0.194	0.188	0.195	0.187
			N	D2 max C	KO KO							O	O max CI	Q Y			
urban	0.029	0.041	0.027	0.018	0.024	0.026	0.019	0.019	urban	0.433	0.409	0.387	0.302	0.464	0.419	0.451	0.365
trafic	0.033	0.041	0.031	0.021	0.028	0.030	0.023	0.023	trafic	0.570	0.557	0.501	0.439	0.597	0.565	0.567	0.484
			-	NO2 c.c.	В								CO c.c. F	~			
urban	0.67	09.0	0.63	0.64	0.65	0.55	0.65	0.59	urban	0.47	0.43	0.61	0.49	0.40	0.45	0.56	0.48
trafic	0.57	0.65	0.59	0.55	0.56	0.57	0.63	0.51	trafic	0.49	0.51	0.67	0.42	0.45	0.51	0.61	0.43
			2	VO2 max	Ъ							-	CO max F	~			
urban	0.48	0.53	0.57	0.57	0.42	0.38	0.42	0.41	urban	0.41	0.44	0.63	0.45	0.32	0.37	0.43	0.42
trafic	0.46	0.57	0.56	0.45	0.36	0.40	0.41	0.32	trafic	0.47	0.48	0.62	0.36	0.40	0.43	0.46	0.33

При интерпретации результатов оценки прогнозов концентрации PM_{10} следует учитывать, что в отличие от NO_2 и CO содержание частиц PM_{10} в городском воздухе определяется не только местными городскими источниками, но и дальним переносом взвешенных частиц. Яркой иллюстрацией влияния дальнего переноса стало повышение уровня PM_{10} при поступлении в Московский регион продуктов горения природных пожаров в августе 2022 г. (https://mosecom.mos.ru/). Такого рода процессы не предусмотрены в расчетах XTM используемых конфигураций, вместе с тем имеется опыт прогнозирования переноса загрязнения от очагов природных пожаров на основе COSMO-Ru2ART [4]. Кроме переноса гари, PM_{10} повышается при дальнем переносе почвенных частиц из районов пыльных бурь в Нижнем Поволжье и Прикаспии, ежегодно фиксируемых в Москве (рис. 4).



Рис. 4. Концентрация PM_{10} (мг·м⁻³) на ACK3A в центре и в юго-восточном секторе Москвы (а) в эпизодах поступления запыленных воздушных масс из низовий Волги и Приаралья: 17–18 марта (б); 12–14 апреля (в); 18 мая (г). На рис. б–г красным цветом показаны траектории частиц, поступивших на высоту 200 м, синим – на высоту 500 м, зеленым – на высоту 1000 м. **Fig. 4.** Concentration of PM_{10} (mg·m-3) at APCS in the center and south-eastern sector of Moscow (a) in the episodes of dusty air masses arriving from the lower Volga and Prearalie: March 17-18 (б); April 12-14 (в); May 18 (г). In Fig. 6-г, the trajectories of particles arriving at a height of 200 m are shown in red, at a height of 500 m – in blue, and at a height of 1000 m – in green.

Весной в период тестирования в Москве были зафиксированы несколько эпизодов увеличения РМ₁₀ с превышением фона в 2–3 раза (рис. 4а): кратковременный всплеск 17–18 марта 2021 г. при наличии снежного покрова в Москве при поступлении воздушной массы из Северного Прикаспия (рис. 4б) и более продолжительный эпизод 12–14 апреля при атмосферном переносе из Западного Казахстана (рис. 4б).

В мае 2021 г. (18.05) в Москве также имел место кратковременный эпизод превышения фоновых концентраций PM_{10} почти в 2 раза, обусловленный адвекцией из отмеченных выше регионов (рис. 4г).

Как видно на рис. 5а, содержание PM_{10} в воздухе Москвы имеет выраженный сезонный ход: наибольшие концентрации наблюдаются в теплый период с годовым максимумом в апреле (в этом месяце после схода снежного покрова подстилающая поверхность еще не покрыта растительностью), а меньше всего PM_{10} в зимние месяцы в условиях снежного покрова.



Рис. 5 Средняя за месяц измеренная и модельная концентрация РМ₁₀ (а), средняя ошибка прогноза суточной концентрации (б). Март 2021 г. – февраль 2022 г.

Fig. 5. Monthly mean measured and modeled PM₁₀ concentrations (a), mean error in predicting daily concentrations (6). March 2021-February 2022.

В период тестирования модельный прогноз средней суточной концентрации PM_{10} XTM CHIMERE в целом оказался завышенным, в большинстве месяцев систематическая ошибка была 0,011±0,003 мг·м⁻³. Три месяца (апрель, май, ноябрь) модельный прогноз был близок к наблюдавшемуся среднему по городу уровню PM_{10} , но в марте и июне в среднем за месяц ошибка прогноза оказалась близкой к 0,02 мг·м⁻³.

Для COSMO-Ru2ART характерно занижение в прогнозе PM_{10} , с сентября по март не более чем на 0,01 мг·м⁻³, в летние месяцы – примерно на 0,02 мг·м⁻³, в апреле, мае – почти на 0,03 мг·м⁻³. В зимние месяцы прогнозы COSMO-Ru2ART практически совпадают с наблюдениями.

Те же характерные особенности двух XTM установлены при оценке прогноза максимальной суточной концентрации РМ₁₀, для которой отсутствуют критерии ВОЗ, а именно завышение CHIMERE и занижение COSMO-Ru2ART. Наибольшие ошибки CHIMERE имели место в марте, когда расчеты COSMO-Ru2ART были близки к наблюдениям, но COSMO-Ru2ART сильно занижала максимальную концентрацию с апреля по август (на 0,04–0,06 мг·м⁻³). Если для COSMO-Ru2ART характерным является уменьшение ошибок с сентября по март, модельные погрешности XTM CHIMERE не имеют яркой сезонной зависимости, при том что при наличии снежного покрова (декабрь–март) ошибки CHIMERE немного больше, чем в другие месяцы.

Установленные характерные погрешности модельных расчетов концентрации загрязняющих веществ XTM CHIMERE и COSMO-Ru2ART в целом соотносятся с данными о модельных ошибках зарубежных XTM [18, 23, 25–27] и являются основой для консолидированного численного прогноза качества воздуха в Москве. Ансамблирование является широко применяемой практикой в прогнозе погоды, оно применяется при прогнозировании качества воздуха в Европе (https://regional.atmosphere.copernicus.eu/), целесообразность его отмечается и в научных публикациях [27].

По результатам тестирования сформулированы рекомендации для постпроцессинга модельных расчетов CHIMERE и COSMO-Ru2ART в каждый сезон применительно к отдельным загрязняющим веществам. В рамках созданной технологии предполагается ежедневный расчет концентраций загрязняющих веществ по CHIMERE и COSMO-Ru2ART, на этапе постпроцессинга – комплексирование модельных расчетов или введение систематических погрешностей в расчеты XTM CHIMERE с последующим анализом успешности прогнозирования каждой XTM для обновления правил коррекции оперативных расчетов.

Последняя процедура целесообразна, поскольку протестированный ретроспективный ряд модельных расчетов содержит эпизоды нетипичного загрязнения воздуха летом во время продолжительной жары, а также случаи влияния дальнего переноса взвешенных частиц весной.

2. Обновление технологических блоков оперативной технологии

Нацеленный на минимизацию ошибок численного расчета загрязнения воздуха консолидированный прогноз рассматривается нами наряду с внедрением в технологию усовершенствованных версий XTM и обновленных данных о выбросах загрязнений в атмосферу. В этом разделе остановимся на некоторых перспективных направлениях усовершенствования технологии, предполагающих улучшение успешности и надежности численного прогноза загрязняющих веществ.

Представленные выше оценки прогнозов получены на основании расчетов прогнозов COSMO-Ru2ART версии 5.0; в настоящее время в Гидрометцентре России установлена модель COSMO-ART версии 6.0. Расчеты XTM CHIMERE проводились по модели версии 2013 г. [17, 28]. В настоящее время разработчики XTM CHIMERE предоставили в открытом доступе последнюю доработанную модель CHIMERE версии 2020 г. (далее CHIMERE-2020) [21], в Гидрометцентре России выполнена ее установка. Ниже приводятся наиболее существенные характеристики модифицированной модели.

2.1. Характеристики CHIMERE-2020

Модель CHIMERE-2020 по сравнению с ранее выпущенными версиями существенно доработана в части расширения физического наполнения, вычислительного процесса; она объединена с гидродинамической моделью открытого доступа WRF [21]. Несмотря на отлаженный тандем "WRF 3.7.1 – CHIMERE", XTM CHIMERE-2020 предусматривает использование данных и других метеорологических моделей при условии предоставления всех обязательных для моделирования переменных в соответствующем формате. Расчет модели CHIMERE-2020 возможен по любому региону (вплоть до полушария) с различным разрешением по горизонтали (от 2 км и меньше).

Новая версия CHIMERE-2020 сопровождается подробной инструкцией для пользователей. Отметим наиболее важные внесенные изменения в XTM CHIMERE-2020:

1. Возможность работать в автономном режиме и online-режиме, позволяющем учитывать обратный эффект влияния аэрозолей на излучение (прямое) и образование облаков (косвенный эффект). В автономном режиме метеорологические поля для заданного периода и географического региона моделирования считываются предварительно из метеорологической модели. Далее они интерполируются на заданные пользователем временные и пространственные сетки CHIMERE.

2. Новые параметризации, повышающие производительность модели, и схемы, улучшающие физическое описание процессов [20]. При этом улучшение распараллеливания вычислительных схем увеличило требования к используемым версиям системных библиотек. 3. Новая схема вертикальной адвекции, способная более корректно моделировать перенос тонких шлейфов загрязняющих веществ на большие расстояния, включение в расчеты схемы противодиффузионной адвекции.

4. Подсеточный расчет изменчивости концентраций по секторам деятельности.

5. Модифицированный блок учета эмиссий загрязняющих веществ, в частности, добавлен учет эмиссий морской соли, диметилсульфида, эмиссий оксидов азота (NOx) от вспышек молний.

6. Введены дополнительные параметры для выбора варианта пограничного слоя: самостоятельный счет или считывание из метеорологической модели. Вертикальная скорость ветра берется непосредственно из выбранной метеорологической модели.

7. Предусмотрено использование более ранних версий модели CHI-MERE для удобства проведения экспериментов, что дает возможность оценить эффекты введения различных усовершенствований, включая учет обратной связи между метеорологической и химической моделями.

8. Расчет концентраций от антропогенных выбросов отдельных источников в подсеточном масштабе, благодаря включению схемы, в соответствии с которой область ячеек сетки модели CHIMERE делится на несколько подсеточных областей, каждая из которых представляет отдельный источник выбросов [21]. Во время моделирования на каждом временном шаге расчет химического состава разделяется на подсеточные области.

Следует отметить, что в обновленной технологии предполагается использование данных об эмиссиях последней доступной версии кадастра ЕМЕР. Произведенная в ней замена формата записи потребовала от разработчиков модели CHIMERE практически полностью переписать препроцессор (emisurf2020) для подготовки входных данных о выбросах загрязняющих веществ в атмосферу.

2.2. Анализ изменений эмиссий в кадастре ЕМЕР

Значительная модификация блока эмиссий в XTM CHIMERE-2020 ориентирована на использование данных о выбросах в атмосферу кадастра ЕМЕР 2019 г. актуализации (далее ЕМЕР-2019) в обновленном формате [12]. В предшествующей конфигурации технологии прогнозирования качества воздуха в Гидрометцентре России использовались эмиссии кадастра 2013 г. актуализации (далее ЕМЕР-2013) [2, 16].

В базе данных ЕМЕР объемы выбросов на регулярной сетке распределены по загрязнителям и отраслевым источникам выбросов. В ЕМЕР-2019 увеличено разрешение регулярной сетки до $0,1\times0,1^{\circ}$ по широте и долготе (в ЕМЕР-2013 было $0,5\times0,5^{\circ}$). Кроме того, в ЕМЕР-2019 увеличено до 15 количество отраслевых источников и изменена номенклатура отраслевых источников умиссий – GNRF (General Nomenclature for Reporting) [12].

Поскольку в EMEP-2013 использовалась номенклатура 11 источников выбросов – SNAP (Selected Nomenclature for sources of Air Pollution), для сравнения данных двух кадастров потребовалось привести их в соответствие друг с другом (табл. 3).

Таблица 3. Соответствие отраслевых источников выбросов в атмосферу в кадастрах EMEP-2019 и EMEP-2013

	EMEP-20	19 (GNRF)		EMEP-2013 (SNAP)	
Α	PublicPower	Энергетика	S1	Сжигание в энергетической промышленности	
С	OtherStationary Comb	Другое стационарное сжигание	S2	Сжигание на непромышлен- ных заводах	
В	Industry	Промышленность	S3	Сжигание в обрабатываю- щей промышленности	
D	Fugitive	Летучие вещества	S5	Извлечение и распределе- ние ископаемого топлива и геотермической энергии	
Е	Solvents	Растворители	S6	Использование растворителей	
F	RoadTransport	Дорожный транспорт			
I	Offroad	Внедорожный транспорт	S7	Автомобильный транспорт	
G	Shipping	Судоходство			
Н	Aviation	Авиация		Пругие мобильные	
0	AviCruise	Гражданская авиация	S8	источники и механизмы	
Ρ	IntShipping	Внутреннее судоходство			
J	Waste	Отходы	S9	Переработка отходов и утилизация	
К	AgriLivestock	Животноводство			
L	AgriOther	Другое сельское хозяйство	S10	Сельское хозяйство	
N	Natural	Природные отходы	S11	Другие источники (естественные и биогенные источники)	

Table 3: Correspondence of industry sources of air emissions in EMEP-2019 and EMEP-2013 inventories

Сравнительный анализ проводился с использованием языка программирования Python. Данные EMEP-2019 были приведены к формату данных EMEP-2013 на сетке 0,5×0,5° для 11 источников выбросов SNAP (табл. 3). Поскольку ранее авторами проводился подробный анализ эмиссий на территории московского региона кадастра EMEP-2013 [16], несмотря на то,

162

что на сайте EMEP доступны данные о выбросах на территории московского региона EMEP-2013 в «новом» формате, для удобства сравнений принято решение привести данные EMEP-2019 к «старому» формату. Сравнительный анализ проводился для шести ячеек EMEP-2013, охватывающих территорию московского региона (рис. 6).



Рис. 6. Ячейки кадастра ЕМЕР, охватывающие территорию московского региона. Красным цветом отмечены сетка ЕМЕР-2013 и условные номера ячеек.

Fig. 6. EMEP inventory cells covering the territory of the Moscow region. The EMEP-2013 grid and the conventional numbers of the cells are marked in red.

Установлено, что суммарные выбросы загрязняющих веществ в атмосферу на территории рассматриваемого домена в кадастре EMEP-2019 уменьшены по сравнению с EMEP-2013 на 8 % (1188778 и 1296622 т/год соответственно).

Анализ структуры суммарных выбросов по отраслевым источникам показал существенное увеличение в ЕМЕР-2019 по сравнению с ЕМЕР-2013 выбросов от сжигания в обрабатывающей промышленности (на 87 %) и выбросов автомобильного транспорта (на 99 %) при уменьшении выбросов загрязняющих веществ от всех других отраслевых источников. Отметим, что такая динамика выбросов лишь частично соотносится с данными, обобщенными в [7].

Сравнительный анализ позволил установить реализованное в ЕМЕР-2019 корректное пространственное распределение эмиссий на территории московского региона, необходимость которого отмечалась в опубликованных авторами исследованиях [2,16]. В ЕМЕР-2019 основной объем выбросов соответствует территории Москвы: сглажен имевший место в ЕМЕР-2013 ярко-выраженный максимум эмиссий автотранспорта в юго-западной части домена (ячейки 1, 3 на рис. 6), значительно увеличены объемы эмиссий в северной и юго-восточной частях (ячейки 2, 4, 5, 6 на рис. 6).

Анализ количества и динамики выбросов проведен и для отдельных загрязнителей (СО, NH₃, NMVOC, NOx, PM, SOx); детальное описание результатов исследований будет представлено в отдельной публикации.

2.3 Расчет распространения загрязнений от одиночного источника

В обновленной версии CHIMERE-2020 предусмотрена возможность расчета распространения выбросов от одиночного источника, с помощью комплекса CHIMERE-2020 – WRF выполнены тестовые расчеты переноса загрязнений от локального источника. В конфигурации CHIMERE-2020 имеется возможность использовать несколько вариантов запуска счета; наименее сложным является расчет распространения трассеров; второй вариант требует дополнительной подготовки полей эмиссий, используя подпрограмму emiPoint.

На рис. 7 как пример реализации новых возможностей технологии показаны рассчитанные CHIMERE-2020 приземные концентрации CO вследствие выброса в атмосферу угарного газа непрерывно действующим точечным источником (ТЭЦ-25) с заданными параметрами выбросов. Такие возможности технологии позволяют вести регулярный мониторинг влияния выбросов от конкретных источников, а в чрезвычайных ситуациях обеспечивать прогностическими данными о переносе загрязнений с учетом фотохимических процессов и их отключением (перенос пассивной примеси), используя для этого сценарные схемы с известными и теоретическими входными параметрами выбросов.

В завершении отметим, что ближайшими планами авторов является полное обновление технологии численного прогнозирования загрязнения приземного воздуха с расширением области моделирования до нижегородского промышленного региона с сопутствующим тестированием модельных расчетов по данным наблюдений.

Заключение

Разрабатываемая в Гидрометцентре России технология численного прогнозирования загрязнения приземного воздуха на основе химических транспортных моделей предназначена как для экспериментального моделирования, так и для практического применения. На выборке март 2021 г. – февраль 2022 г. (12 месяцев), используя прогностические расчеты концентраций загрязняющих веществ XTM CHIMERE и COSMO-Ru2ART для территории Москвы, выполнено тестирование модельных расчетов по

данным измерений на автоматизированных станциях контроля загрязнения. Путем сравнения модельных и измеренных концентраций установлены характерные особенности двух XTM с общим выводом о преимущезавышении величин концентраций XTM CHIMERE ственном И преобладающем их занижении COSMO-Ru2ART. Обнаружена сезонная изменчивость модельных ошибок со сменой знака отклонений для каждой модели и каждого загрязняющего вещества. На результаты тестирования в определенной мере повлияли наблюдавшиеся аномальные погодные условия – продолжительные волны жары в каждый месяц летом 2021 г. и эпизоды аномального повышения взвешенных частиц в приземном воздухе вследствие дальнего переноса в каждый весенний месяц.



Рис. 7. Расчет XTM CHIMERE-2020 приземной концентрации CO на территории Москвы вследствие непрерывного выброса в атмосферу загрязняющих веществ локальным источником: в 8 ч 25.08 (а); 0 ч 26.08 (б); 9 ч 26.08 (в), 14 ч 26.08.2022 (г).

Fig. 7. CHIMERE-2020 CTM calculation of surface CO concentration in Moscow due to continuous emission of pollutants from a) 8 h 25.08.2022, b) 0 h 26.08, c) 9 h 26.08, d) 14 h 26.08.2022.

Установленные средние ошибки прогноза средних для территории городского типа концентраций в целом соотносятся с модельными погрешностями зарубежных XTM; обе модели на территориях транспортного типа преимущественно недооценивают максимальные суточные концентрации. С учетом установленных систематических сезонных модельных ошибок каждой XTM сформулированы рекомендации для составления оперативного консолидированного прогноза с использованием комплексирования расчетов двух XTM.

Для реализации обновленной технологии численного прогнозирования загрязнения приземного воздуха на основе химических транспортных моделей изучены включенные в новую версию XTM CHIMERE блоки и схемы, в деталях исследованы количественные и структурные изменения в базе данных о выбросах в атмосферу EMEP последней доступной версии, что в совокупности предполагает повышение точности и надежности численных прогнозов загрязнения приземного воздуха с применением XTM.

Подготовка материалов и написание статьи выполнены в рамках Гос. задания № 169-00039-22-01 НИТР 4.7.2 и 1.1.3 Плана НИОКР Росгидромета, а также при поддержке программы развития ННГУ Приоритет-2030 проекта «Комфортная окружающая среда».

Авторы выражают благодарность Департаменту природопользования и охраны окружающей среды города Москвы, лично Е.Г. Семутниковой и П.В. Захаровой за создание и поддержание современной системы мониторинга, за информационную поддержку научных исследований в области численного прогнозирования качества воздуха.

Список литературы

1. Андреев В.В., Аршинов М.Ю., Белан Б.Д., Белан С.Б. и др. Концентрация тропосферного озона на территории России в 2021 году // Оптика атмосферы и океана. 2022. Т. 35, № 7. С. 559-571. DOI:10.15372/AOO20220706.

2. Борисов Д.В., Шалыгина И.Ю. Уточнение данных о землепользовании для расчетов эмиссий в химической транспортной модели CHIMERE на примере нижегородского региона // Труды Гидрометцентра России. 2021. № 3 (381) С. 150-161.

3. Быков Ф.Л. Статистическая коррекция прогнозов погоды по модели COSMO с помощью нейронных сетей // Метеорология и гидрология. 2020. № 3. С. 5-20.

4. 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. 31-40.

5. Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания» ГН 2.1.3685-21.

6. Глобальные рекомендации ВОЗ по качеству воздуха: касающиеся твердых частиц (ТЧ2,5 и ТЧ10), озона, двуокиси азота, двуокиси серы и окиси углерода. https://apps.who.int/iris/bitstream/handle/10665/345334/9789240035409-rus.pdf

7. Государственный доклад «О состоянии и об охране окружающей среды Российской федерации. [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://www.mnr.gov.ru/docs/ gosudarstvennye_doklady/

8. Еланский Н.Ф., Шилкин А.В., Пономарев Н.А., Захарова П.В., Качко М.Д., Поляков Т.И. Пространственно-временные вариации содержания загрязняющих примесей в воздушном бассейне Москвы и их эмиссии // Известия РАН, ФАО. 2022. Т. 58, № 1. С. 92-108. 10.31857/s0002351522010023

9. РД 52.27.284-91 Методические указания. Проведение производственных (оперативных) испытаний новых и усовершенствованных методов гидрометеорологических и гелиофизических прогнозов

10. Кузнецова И.Н., Шалыгина И.Ю., Нахаев М.И., Ткачева Ю.В., Ривин Г.С., Кирсанов А.А., Борисов Д.В., Лезина Е.А. Система прогнозирования качества воздуха на основе химических транспортных моделей // Гидрометеорологические исследования и прогнозы. 2019. № 4 (374). С. 203-218.

11. Нахаев М.И., Березин Е.В., Шалыгина И.Ю., Кузнецова И.Н., Коновалов И.Б., Блинов Д.В. Прогнозирование концентраций загрязняющих веществ в атмосфере с применением химической транспортной модели CHIMERE и модели COSMO-Ru7 // Труды Гидрометцентра России. 2015. Вып. 357. С. 146-164.

12. Официальный сайт CEIP (Centre on Emission Inventories and Projections, Центр кадастров и прогнозов выбросов). Режим доступа: URL https://www.ceip.at/the-emepgrid/gridded-emissions

13. Пономарев Н.А., Еланский Н.Ф., Кирсанов А.А., Постыляков О.В., Боровский А.Н., Веревкин Я.М. Применение химико-транспортных моделей атмосферы для валидации эмиссий загрязняющих примесей в Москве // Оптика атмосферы и океана. 2020. Т. 33, № 2. С 119-126. DOI: 10.15372/АОО20200206.

14. 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., Полюхов А.А., Ревокатова А.П., Татаринович 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.

15. Ривин Г.С., Розинкина И.А., Вильфанд Р.М., Киктев Д.Б., Тудрий К.О., Блинов Д.В., Варенцов М.И., Захарченко Д.И., Самсонов Т.Е., Репина И.А., Артамонов А.Ю. Разработка оперативной системы численного прогноза погоды и метеоусловий опасных явлений с высокой детализацией для Московского региона // Метеорология и гидрология. 2020. Т. 7. С. 5-19.

16. 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. 2020. Т. 33, № 6. С. 441-447.

17. *Beekmann M., Vautard R.* A modelling study of photochemical regimes over Europe: robustness and variability // Atmos. Chem. Phys. 2010. Vol. 10. P.10067-10084. DOI: https://doi.org/10.5194/acp-10-10067-2010

18. Bentayeb M., Stempfelet M., Wagner V. et al. Retrospective modeling outdoor air pollution at a fine spatial scale in France, 1989-2008 // Atmos. Env. 2014. Vol. 92. P. 267-279. DOI: https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2014.04.019.

19. Bessagnet B., Hodzic A., Vautard R. et al. Aerosol modeling with CHIMERE-preliminary evaluation at the continental scale // Atmos. Env. 2004. Vol. 38. P. 2803-2817. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2004.02.034ff.

20. Bessagnet B., Couvidat F., Lemaire V. A statistical physics approach to perform fast highly-resolved air quality simulations – A new step towards the meta-modelling of chemistry transport models // Environmental Modelling & Software. 2019. Vol. 116. P. 100-109. DOI: https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2019.02.017.

21. *Bessagnet B., Menut L., Lapere R. et al.* High Resolution Chemistry Transport Modeling with the On-Line CHIMERE-WRF Model over the French Alps – Analysis of a Feedback of Surface Particulate Matter Concentrations on Mountain Meteorology // Atmosphere. 2020. Vol. 11. P. 565. https://doi.org/10.3390/atmos11060565

22. Couvidat F., Bessagnet B., Garcia-Vivanco M. et al. Development of an inorganic and organic aerosol model (CHIMERE 2017 β v1.0): seasonal and spatial evaluation over Europe // Geosci. Model Dev. 2018. Vol. 11. P.165-194. DOI: 10.5194/gmd-11-165-2018

23. Dore A.J., Carslaw D.C., Braban C. et al. Whyatt. Evaluation of the performance of different atmospheric chemical transport models and inter-comparison of nitrogen and sulphur deposition estimates for the UK // Atmos. Env. 2015. Vol. 119. P. 131-143.

24. *Menut L., Bessagnet B., Khvorostyanov D. et al.* CHIMERE-2013: a model for regional atmospheric composition modelling // Geosci. Model Dev. 2013. Vol. 6. P. 981-1028. DOI: 10.5194/gmd-6-981-2013

25. *Prank M., Sofiev M., Tsyro S. et al.* Evaluation of the performance of four chemical transport models in predicting the aerosol chemical composition in Europe in 2005 // Atmos. Chem. Phys. 2016. Vol. 16. P. 6041-6070.

26. Schaap M. Cuvelier C., Hendriks C. et al. Performance of European chemistry transport models as function of horizontal resolution // Atmos. Env. 2015. Vol. 112. P. 90-105.

27. Srivastava N., Blond N. Impact of meteorological parameterization schemes on CTM model simulations // Atmos. Env. 2022 Vol. 268. Article 118832. https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2021.118832

28. *Valari M., Menut L.* Transferring the heterogeneity of surface emissions to variability in pollutant concentrations over urban areas through a chemistry-transport model // Atm. Env. 2010. Vol. 44, is. 27, P. 3229-3238. https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2010.06.001

References

1. Andreev V.V., Arshinov M.YU., Belan B.D., Belan S.B. Davydov D. K., Demin V. I., Dudorova N. V., Elansky N. F., Zhamsueva G. S., Zayakhanov A. S., Ivlev G. A., Kozlov A. V., Konovaltseva L. V., Kotelnikov S. N., Kuznetsova I. N., Lapchenko V. A., Lesina E. A., Obolkin V. A., Postylyakov O. V., Potemkin V. L., Savkin D. E., Senik I. A., Stepanov E. V., Tolmachev G. N., Fofonov A. V., Khodzher T. V., Chelibanov I. V., Chelibanov V. P., Shirotov V. V., Shukurov K. A. Tropospheric ozone concentration in Russia in 2021. Optika Atmosfery i Okeana [Atmospheric and Oceanic Optics], 2022, vol. 35, no. 7, pp. 559-571. DOI: 10.15372/AOO20220706 [in Russ.].

2. Borisov D.V., Shalygina I.U. Refinement of land use data for emission calculations in the CHIMERE chemistry-transport model: A case study for the Nizhny Novgorod region. *Gidrometeorologicheskie issledovaniya i prognozy* [Hydrometeorological Research and Forecasting], 2021, vol. 381, no. 3, pp. 150-161 [in Russ.].

3. *Bykov F.L.* Statistical Correction of the COSMO Model Weather Forecasts Based on Neural Networks. *Russ. Meteorol. Hydrol.* 2020, vol. 45, no. 3, pp. 141-152. DOI: 10.3103/S1068373920030012

4. *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, no. 5, pp. 292-298. DOI: 10.3103/S106837391705003X.

5. Gigienicheskie normativy i trebovaniya k obespecheniyu bezopasnosti i (ili) bezvrednosti dlya cheloveka faktorov sredy obitaniya» GN 2.1.3685-21. Available at: https://base.garant.ru/ [in Russ.].

6. Global'nye rekomendacii VOZ po kachestvu vozduha: kasayushchiesya tverdyh chastic (TCH2,5 i TCH10), ozona, dvuokisi azota, dvuokisi sery i okisi ugleroda. Available at: https://apps.who.int/iris/bitstream/handle/10665/345334/9789240035409-rus.pdf. [in Russ.].

7. Gosudarstvennyy doklad «O sostoyanii i ob ohrane okruzhayushchey sredy Rossiyskoy federacii. Available at: http://www.mnr.gov.ru/docs/gosudarstvennye_doklady/ [in Russ.].

8. Elansky N.F., Shilkin A.V., Ponomarev N.A. Zakharova P.V., Kachko M.D., Poliakov T.I. Spatiotemporal Variations in the Content of Pollutants in the Moscow Air Basin and Their Emissions. *Izv. Atmos. Ocean. Phys.* 2022, vol. 58, no. 1, pp. 80-94. DOI: 10.1134/S0001433822010029.

9. RD 52.27.284-91 Metodicheskie ukazaniya. Provedenie proizvodstvennyh (operativnyh) ispytaniy novyh i usovershenstvovannyh metodov gidrometeorologicheskih i geliofizicheskih prognozov [in Russ.].

10. Kusnetsova I.N., Shalygina I.U., Nahaev M.I., Tkacheva U.V., Rivin G.S., Kirsanov A.A., Borisov D.V., Lezina E.A. Air quality forecasting system based on chemical transport models. Trudy Gidromettsentra Rossii [Proceedings of the Hydrometcentre of Russia], 2019, vol. 374, no. 4, pp. 203-218 [in Russ.].

11. Nakhayev M.I., Berezin E.V., Shalygina I.Yu., Kuznetsova I.N., Konovalov I.B., Blinov D.V. Prediction of pollutant concentrations in the atmosphere using the chemical transport model CHIMERE and the model COSMO-Ru7. Trudy Gidromettsentra Rossii [Proceedings of the Hydrometcentre of Russia], 2015, vol. 357, pp. 146-164 [in Russ.].

12. Oficial'nyy sayt CEIP (Centre on Emission Inventories and Projections, Centr kadastrov i prognozov vybrosov). Available at: https://www.ceip.at/the-emep-grid/gridded-emissions [in Russ.].

13. Ponomarev N.A., Elansky N.F., Kirsanov A.A., Postylyakov O.V., Borovski A.N. and Verevkin Y.M. Application of Atmospheric Chemical Transport Models to Validation of Pollutant Emissions in Moscow. Atmospheric and Oceanic Optics, 2020, vol. 33, no. 04, pp. 362-371.

14. 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.].

15. Rivin G.S., Rozinkina I.A., Vil'fand R.M. Kiktev D.B., Tudrii K.O., Blinov D. V., Varentsov M.I., Zakharchenko D.I., Samsonov T.E., Repina I.A., Artamonov A.Yu. Development of the High-resolution Operational System for Numerical Prediction of Weather and Severe Weather Events for the Moscow Region. Russ. Meteorol. Hydrol., 2020, vol. 45, pp. 455-465 DOI: 10.3103/S1068373920070018.

16. Shalygina I.Yu., Kuznetsova I.N., Nahaev M.I., Borisov D.V., Lesina E.A. Emission correction efficiency for calculations in the CHIMERE chemical transport model in the Moscow region. *Optika Atmosfery i Okeana [Atmospheric and Oceanic Optics]*, 2020, vol. 33. no. 6, pp 441-447. DOI: 10.15372/AOO20200604 [in Russ].

17. Beekmann M., Vautard R. A modelling study of photochemical regimes over Europe: robustness and variability. Atmos. Chem. Phys., 2010, vol. 10, pp. 10067-10084. DOI: https://doi.org/10.5194/acp-10-10067-2010

18. Bentayeb M., Stempfelet M., Wagner V. et al. Retrospective modeling outdoor air pollution at a fine spatial scale in France, 1989-2008. Atmos. Env., 2014, vol. 92, pp. 267-279. DOI: https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2014.04.019.

19. Bessagnet B., Hodzic A., Vautard R. et al. Aerosol modeling with CHIMERE-preliminary evaluation at the continental scale. *Atmos. Env.*, 2004, vol. 38, pp. 2803-2817. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2004.02.034ff.

20. Bessagnet B., Couvidat F., Lemaire V.A statistical physics approach to perform fast highly-resolved air quality simulations – A new step towards the meta-modelling of chemistry transport models. Environmental Modelling & Software, 2019, vol. 116, pp. 100-109. DOI: https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2019.02.017.

21. *Bessagnet B., Menut L., Lapere R. et al.* High Resolution Chemistry Transport Modeling with the On-Line CHIMERE-WRF Model over the French Alps – Analysis of a Feedback of Surface Particulate Matter Concentrations on Mountain Meteorology. *Atmosphere.* 2020, vol. 11, pp. 565. DOI: 10.3390/atmos11060565

22. Couvidat F., Bessagnet B., Garcia-Vivanco M. et al. Development of an inorganic and organic aerosol model (CHIMERE 2017 β v1.0): seasonal and spatial evaluation over Europe. Geosci. Model Dev., 2018, vol. 11, pp.165-194. DOI: 10.5194/gmd-11-165-2018.

23. Dore A.J., Carslaw D.C., Braban C. et al. Whyatt. Evaluation of the performance of different atmospheric chemical transport models and inter-comparison of nitrogen and sulphur deposition estimates for the UK. Atmos. Env., 2015, vol. 119, pp. 131-143.

24. Menut L., Bessagnet B., Khvorostyanov D. et al. CHIMERE-2013: a model for regional atmospheric composition modeling. Geosci. Model Dev., 2013, vol. 6, pp. 981-1028. DOI: 10.5194/gmd-6-981-2013.

25. Prank M., Sofiev M., Tsyro S. et al. Evaluation of the performance of four chemical transport models in predicting the aerosol chemical composition in Europe in 2005. Atmos. Chem. Phys., 2016, vol. 16, pp. 6041-6070.

26. Schaap M. Cuvelier C., Hendriks C. et al. Performance of European chemistry transport models as function of horizontal resolution. *Atmos. Env.*, 2015, vol. 112, pp. 90-105.

27. Srivastava N., Blond N. Impact of meteorological parameterization schemes on CTM model simulations. *Atmos. Env.*, 2022, vol. 268, Article 118832. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2021.118832.

28. Valari M., Menut L. Transferring the heterogeneity of surface emissions to variability in pollutant concentrations over urban areas through a chemistry-transport model. *Atm. Env.*, 2010, vol. 44, no. 27, pp. 3229-3238. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2010.06.001.

Поступила 07.10.2022; одобрена после рецензирования 16.11.2022;

принята в печать 29.11.2022.

Submitted 07.10.2022; approved after reviewing 16.11.2022;

accepted for publication 29.11.2022.