

**Л. М. Болотько, А. М. Людчик,
В. И. Покаташкин, П. Н. Павленко, С. Д. Умрейко**

*Национальный научно-исследовательский центр мониторинга озоносферы,
г. Минск, Республика Беларусь*

ФЛУКТУАЦИИ ПОЛЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ПРИЗЕМНОГО ОЗОНА, ОБУСЛОВЛЕННЫЕ МЕНЯЮЩИМИСЯ МЕТЕОУСЛОВИЯМИ И СТЕПЕНЬЮ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ВОЗДУХА

Приводятся результаты статистической обработки наблюдений за приземным озоном в г. Минске в 2013–2015 гг. с целью определения зависимости концентрации озона от метеоусловий и концентраций загрязнителей атмосферы. Показано, что полученная зависимость удовлетворительно воспроизводит данные наблюдений. Предполагается, что она может быть распространена и на другие регионы страны. Приводятся два примера такого пробного применения. Обсуждаются вопросы совершенствования используемой методики.

➤ **Ключевые слова:** *приземный озон, загрязнители атмосферы, метеорологические параметры, климатическая норма, регрессия.*

Введение

Для приземного озона характерна сезонная и суточная изменчивость, которая зависит от места наблюдений. В связи с этим в публикациях по приземному озону используется следующая классификация пунктов наблюдений [1]: удаленный (remote), сельский (rural), пригородный (suburban) и городской (urban). Часто бывает, что пункты, относящиеся к разным типам, расположены относительно близко друг к другу. При этом в большинстве случаев они находятся в зоне влияния одной и той же воздушной массы и, соответственно, в одном и том же поле приземного озона. В связи с этим разделение на типы представляется недостаточно обоснованным.

В основе настоящего исследования лежит естественное предположение, что поле концентрации приземного озона однородно в пределах воздушной массы. Местные различия в метеоусловиях и специфика естественных и антропогенных загрязнений, взаимодействующих с озоном, «модулируют» это поле, являясь причиной локальных флуктуаций приземного озона относительно его естественного суточного хода и основанием для упомянутой выше классификации пунктов наблюдений. Если исключить влияние различающихся метеоусловий и степени загрязнения воздуха, концентрации, измеренные в разных регионах Беларуси, должны быть близкими друг другу. Скорректированные на случай одинаковых метеоусловий (климатических норм метеопараметров, усредненных по территории Республики) значения концентрации озона для чистой атмосферы (свободной от влияющих на озон загрязнений) должны быть репрезентативными для всей территории страны, по крайней мере, в периоды, когда она находится под воздействием одной воздушной массы [2]. В связи с этим имеет смысл ввести в употребление и использовать на практике термин «климатическая норма приземного озона для чистой атмосферы и среднего климата Беларуси». Именно такая норма должна служить «точкой отсчета» для учета влияния метеорологических и антропогенных факторов на приземный озон, а также оценки его долговременных изменений (тренда) в небольшой по территории стране.

Описанная в [2] методика статистического анализа результатов измерений дает возможность проверить выдвинутую гипотезу. В данной работе приводятся результаты такого анализа на основании наблюдений в г. Минске и предварительные результаты проверки высказанного предположения. Обсуждаются также некоторые вопросы развития и углубления методики анализа.

Уравнение регрессии

Если предположить, что химическое равновесие достаточно быстро устанавливается в приземной атмосфере, зависимость концентрации приземного озона от метеоусловий и прекурсоров может быть описана нелинейной функцией названных переменных. Эта неизвестная функция аппроксимируется разложением в ряд Тэйлора. Чем меньше «расстояние» в многомерном пространстве переменных между рассматриваемой точкой и точкой, около которой ведется разложение, тем

меньшим числом членов разложения можно ограничиться для удовлетворительного описания функции. В качестве такой «точки отсчета» рационально выбрать совокупность переменных, отвечающих климатическим нормам метеопараметров на время измерений и нулевым концентрациям прекурсоров. Динамические климатические нормы основных метеопараметров для города Минска получены в [3].

Поскольку функция явно не линейна, разложение должно включать, по крайней мере, члены второго порядка. В данном исследовании оценивается отклонение наблюдаемой концентрации озона от ее климатической нормы, полученной в [4–5]. Поэтому значения производных, входящих в разложение, полагаются не зависящими от времени (считается, что основная сезонная и суточная изменчивость концентрации приземного озона достаточно хорошо описывается временным ходом нормы). Более подробное описание методики исследования приведено в [2].

Коэффициенты разложения в ряд Тэйлора зависимости концентрации приземного озона от метеопараметров и концентраций загрязнителей воздуха (оценки первых и вторых производных, входящих в разложение) определены посредством решения уравнения регрессии с учетом наблюдений на пунктах контроля качества воздуха Гидрометеоцентра в г. Минске в течение 2013–2015 гг. в 4-х районах города, различающихся степенью загрязнения воздуха:

$$Y = a_0 x_0 + \sum_{i=1}^M a_i x_i,$$

где Y – отклонение концентрации приземного озона от климатической нормы, a_i – коэффициенты регрессии, x_i – объясняющие переменные, $M+1$ – полное число переменных.

Основные переменные включают температуру, влажность воздуха, скорость ветра, фотохимическую активность солнечного излучения, вертикальную устойчивость атмосферы, концентрации CO , NO_2 , NO и летучих органических соединений (суммарные концентрации бензола, толуола, ксилола). Для оценки вторых производных введены дополнительные переменные: квадраты и произведения основных. Коэффициент a_0 добавлен для приближенной компенсации осредненного влияния неучтенных факторов и несовпадения значений некоторых переменных с их отличием от климатической нормы. Соответствующая ему переменная введена ради унификации алгоритма расчета и на самом деле является постоянной: $x_0 \equiv 1$.

Анализ коэффициентов корреляции объясняющих переменных с концентрацией озона позволяет исключить из их списка, те, которые слабо влияют на озон. В результате полное количество переменных уменьшается до 43.

Анализ взаимных коэффициентов корреляции предоставляет еще одну возможность исключения переменных, которые существенно коррелируют друг с другом. Высокие абсолютные значения коэффициентов корреляции служат указанием на возможную линейную зависимость переменных или их линейных комбинаций. Однако к исключению на основе взаимных корреляций следует относиться с большой осторожностью. Например, весьма часто в случае антропогенных загрязнителей большие коэффициенты взаимной корреляции просто указывают на общие источники их выбросов: рост концентраций загрязнителей одного типа сопровождается ростом концентраций загрязнителей другого типа. Очевидно, что в таких случаях исключение зависимых переменных неуместно, поскольку расширение базы экспериментальных наблюдений с привлечением данных из других регионов, различающихся метеоусловиями и спецификой источников загрязнения воздуха, способно уничтожить корреляцию, обнаруженную на ограниченном объеме данных.

Если случай высокой взаимной корреляции относится к концентрациям загрязнителей воздуха, иногда рационально просто ввести переменную, равную сумме их концентраций. Именно так было сделано в отношении трех летучих органических соединений, контролируемых на пунктах наблюдений Гидрометеоцентра. Однако при этом следует иметь в виду, что полученные коэффициенты регрессии будут иметь сугубо «местное» значение, определяемое климатом местности и особенностями источников загрязнения атмосферы. Впрочем, вероятность получения «местных» коэффициентов регрессии никогда не исключается в случаях ограниченного набора экспериментальных данных, и к этому нужно всегда быть готовым.

На данном этапе исследований не найдены веские основания для сокращения числа переменных на основе анализа взаимных корреляций. Допустимость такого решения подтверждается тем, что матрица системы линейных уравнений для коэффициентов регрессии не является особенной (среди ее собственных значений отсутствуют нулевые или близкие к нулю, а это означает отсутствие выраженных линейных зависимостей между переменными).

Более точное представление о роли отдельных переменных в изменении концентрации приземного озона можно получить на основании оценок относительных вкладов дисперсий переменных в дисперсию отклонения концентрации озона от климатической нормы. Эта величина рассчитывается по формуле

$$r_i = a_i^2 \sigma_i^2 / \Sigma,$$

где σ_i^2 – дисперсия i -й переменной, определенная по всему набору исходных данных, $\Sigma = \sum_i a_i^2 \sigma_i^2$ – сумма всех дисперсий с учетом коэффициентов уравнения регрессии a_i .

В результате оценок установлено, что сильное положительное влияние (рост значений переменных приводит к увеличению концентрации озона) оказывают переменные:

1. Температура воздуха.
2. Скорость ветра.
3. Произведение концентраций CO и ЛОС.
4. Произведение концентраций NO₂ и NO.

Отрицательное влияние оказывают переменные:

1. Влажность.
2. Концентрация NO (очень сильное влияние!).
3. Концентрация ЛОС.
4. Произведение влажности и скорости ветра.
5. Квадрат концентрации CO.
6. Произведение концентраций CO и NO₂.

Интересно, что коэффициенты при первых степенях концентраций CO и NO имеют другой знак, чем коэффициенты при квадратах концентраций, и влияние на концентрацию озона первых степеней названных переменных слабее, чем их квадратов. Это еще раз свидетельствует, что зависимость концентрации приземного озона от выбранных объясняющих переменных существенно нелинейная.

Ограничиваясь учетом перечисленных выше переменных, уравнение регрессии для отклонения концентрации приземного озона от климатической нормы выглядит следующим образом (в скобках указаны их единицы измерений):

$$\begin{aligned} Y(\text{ppbv}) = & -5.73 + 0.635 \delta T (^{\circ}\text{C}) - 0.876 \delta H (\text{гПа}) \\ & + 1.506 W (\text{м/с}) - 0.227 [\text{NO}] (\text{ppbv}) - 0.787 [\text{LOS}] (\text{ppbv}) - 0.385 \delta H (\text{гПа}) * W (\text{м/с}) \\ & - 0.072 W (\text{м/с}) * W (\text{м/с}) - 0.00011 [\text{CO}] (\text{ppbv}) * [\text{CO}] (\text{ppbv}) + 0.00153 [\text{CO}] (\text{ppbv}) * [\text{LOS}] (\text{ppbv}) \\ & + 0.00134 [\text{NO}_2] (\text{ppbv}) * [\text{NO}] (\text{ppbv}). \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь δT – отклонение температуры от климатической нормы на заданный день года и время суток, δH – отклонение влажности от климатической нормы, W – скорость ветра, [CO], [NO], [NO₂], [LOS] – концентрации оксида углерода, оксидов азота и летучих органических соединений соответственно.

Следует отметить, что представленная формула явно учитывает специфику региона, для которого проводились расчеты, поскольку базируется не только на коэффициентах уравнения регрессии, но и на оценках дисперсий отдельных переменных уравнения. Включенные в выражение члены отобраны на основании принципа наибольшего влияния на изменчивость концентрации озона, исходя из использованного набора экспериментальных данных. Например, фотохимическая активность солнечного излучения явно не фигурирует в формуле, поскольку на протяжении многих лет относительно стабильна, в среднем воспроизводится из года в год, а ее флуктуации относительно климатической нормы незначительны. Отсюда следует, что основная доля изменчивости излучения (его суточный и сезонный ход) уже учтена в климатической норме суточного и сезонного хода приземного озона, а оставшиеся флуктуации оказывают незначительное влияние на озон.

Сравнение расчетов с результатами наблюдений в г. Минске

На рис. 1–3 концентрации приземного озона, измеренные на разных пунктах Гидрометеоцентра в г. Минске, сравниваются с рассчитанными по формуле (1). Показаны также значения климатической нормы приземного озона. Видно, что уравнение регрессии существенно улучшает описание экспериментальных результатов по сравнению с климатической нормой приземного озона. Это достигается за счет учета влияния меняющихся метеорологических условий и меняющейся степени загрязнения воздуха в различных районах города.

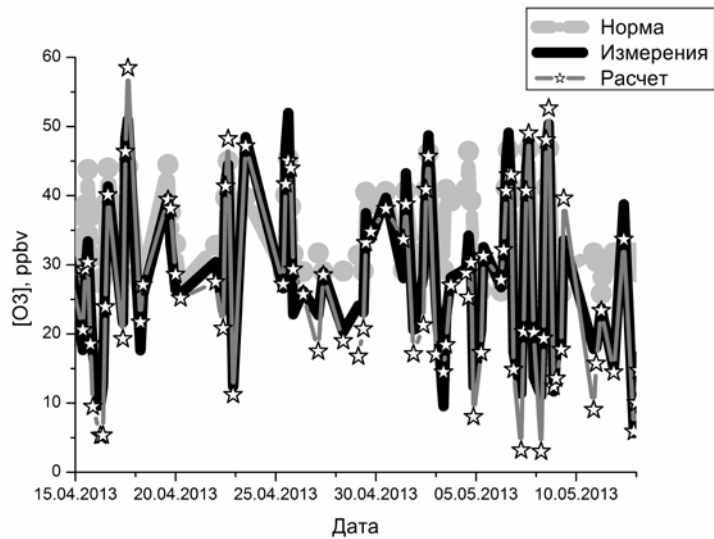


Рисунок 1 – Сравнение результатов расчета концентрации приземного озона с данными наблюдений в апреле-мае 2013 г. (Минск, завод отопительного оборудования)

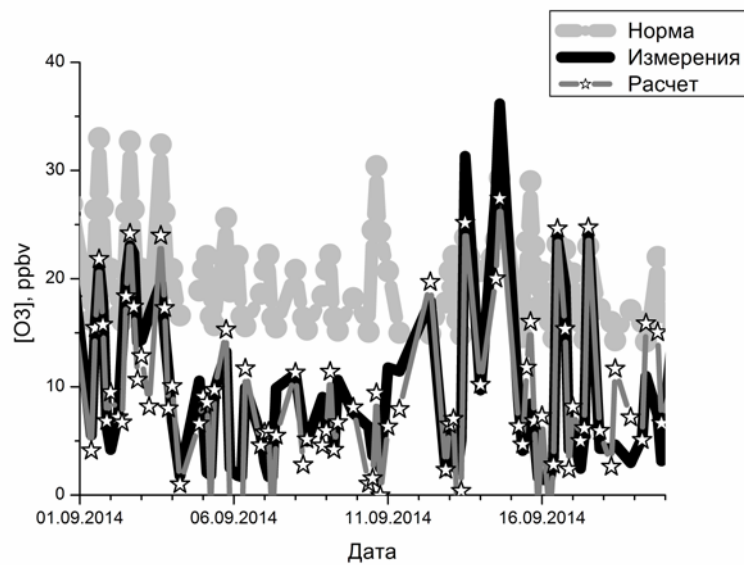


Рисунок 2 – Сравнение результатов расчета концентрации приземного озона с данными наблюдений в сентябре 2014 г. (Минск, Курасовицина)

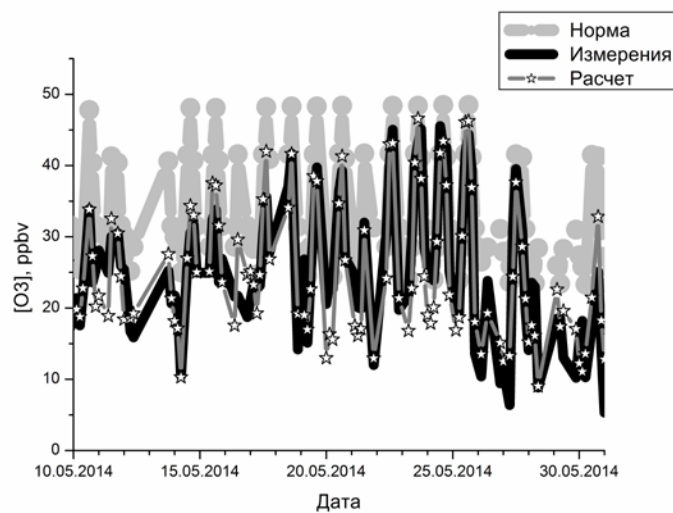


Рисунок 3 – Сравнение результатов расчета концентрации приземного озона с данными наблюдений в мае 2014 г. (Минск, Дrajня)

Прогноз тренда приземного озона в г. Минске в ближайшие годы

Базируясь на результатах расчета климатических норм метеопараметров и их многолетних трендов для г. Минска [3], а также прогнозе уровня антропогенного загрязнения воздуха в городе, можно осуществить прогноз поведения приземного озона в будущем с использованием полученной зависимости концентрации озона от названных параметров. При этом основное внимание будем уделять весенне-летнему периоду, когда концентрация озона достигает своих максимальных значений. Экстраполяция трендов метеопараметров [3] на 2020 г. указывает на снижение температуры и влажности в зимний период и их рост в остальные сезоны. Облачность будет уменьшаться в зимнее, весеннее и летнее время и расти осенью. Фотохимическая активность солнечного излучения стабильна и сохранится на прежнем уровне.

Что касается уровня антропогенного загрязнения городского воздуха, в ближайшие годы трудно рассчитывать на оптимистический прогноз. Специфика климата региона и соотношение концентраций загрязнителей указывают на их в целом отрицательное влияние на приземный озон [6]. Этому же способствует увеличение влажности воздуха в весенне-летний период. Остается единственный фактор, способный вызвать рост концентрации приземного озона в ближайшее пятилетие – это возможное повышение весенних и летних температур.

Таким образом, поведение приземного озона определяют три основных фактора: температура воздуха, его влажность и степень загрязнения. Будем считать, что верно определены тенденции изменения этих факторов в ближайшие годы: температура воздуха будет расти, влажность будет расти, и загрязнение воздуха в городе также будет расти.

Определенные в [3] динамические климатические нормы весенних и летних среднесуточных температур и влажности составляют в 2015 г. 8.0 и 19.5 °С и 6.8 и 14.7 гПа соответственно. К 2020 г. названные нормы увеличатся и составят 8.5 и 20 °С и 7.2 и 15.2 гПа.

В качестве прогноза уровня загрязнения воздуха примем для каждой анализируемой компоненты значение, равное сумме его среднего и половины его среднеквадратичного отклонения, определенного за период измерений. Это весьма «сильное» предположение, и такое развитие событий, скорее всего, маловероятно. В результате получим по основным загрязнителям следующие данные (табл. 1).

Таблица 1

Средние концентрации загрязнителей в 2015 г. и «прогноз» на 2020 г.

Переменная	2015 г., средняя концентрация, ppbv	2020 г., ожидаемая концентрация, ppbv
CO	160	260
NO ₂	20	36
NO	25	42
ЛОС	2.5	4

Далее, для оценки влияния предполагаемых изменений в значениях переменных воспользуемся формулой (1). Помимо названных переменных в формуле присутствует скорость ветра. Поскольку отсутствует прогноз изменения климатической нормы этой переменной, будем считать ее неизменной. Вычисления приводят к следующим вкладам в изменение концентрации приземного озона за счет предполагаемых изменений переменных (табл. 2)

Таблица 2

Влияние предполагаемых к 2020 г. изменений метеоусловий и загрязненности воздуха на концентрацию приземного озона

Переменная	Ожидаемое изменение	Вклад в изменение концентрации озона, ppbv
Температура	+0.5 °С	+0,3
Влажность	+0,4 гПа	-0,5
Концентрация CO	+100 ppbv	-0,35
Концентрация NO ₂	+16 ppbv	+0,4
Концентрация NO	+17 ppbv	-8,0
Концентрация ЛОС	+1,5 ppbv	-0,8
Сумма вкладов	–	-9,05

Таким образом, в случае правильности прогноза изменений метеоусловий и антропогенного загрязнения воздуха в Минске концентрация приземного озона снизится в среднем на 9 ppbv (прибли-

зительно 18 мкг/м^3). Основной вклад в прогнозируемое снижение даст рост концентрации оксида азота. Одновременный рост температуры и влажности практически не влияет на приземный озон.

Применение полученной зависимости к другим регионам

Рис. 4–5 показывают предварительные результаты применения полученной по данным наблюдений в г. Минске зависимости концентрации приземного озона от метеоусловий и концентраций загрязнителей атмосферы к другим регионам страны. Результаты названы предварительными, поскольку не все переменные были определены для Витебска и Могилева. В частности, отсутствовали данные о вертикальной устойчивости атмосферы для этих городов, и были использованы оценки для г. Минска. Возможно, по этой причине соответствие расчета и эксперимента заметно ухудшилось. В следующем разделе обсуждаются и другие причины, способные повлиять на результат.

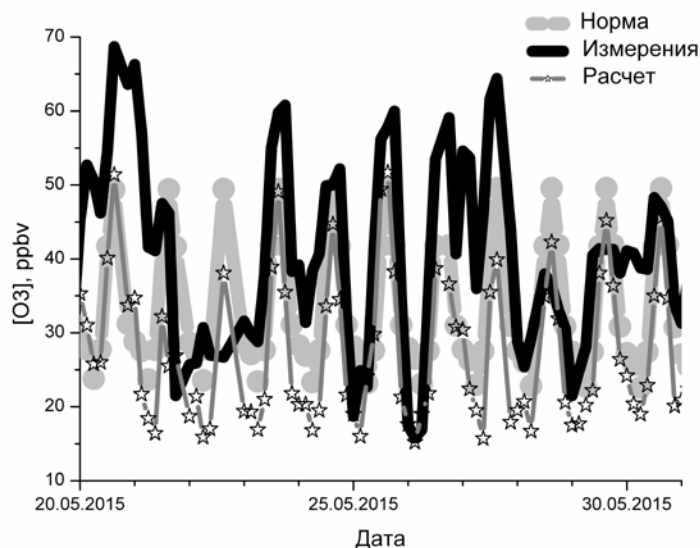


Рисунок 4 – Сравнение результатов расчета концентрации приземного озона с данными наблюдений в мае 2015 г. (Витебск)

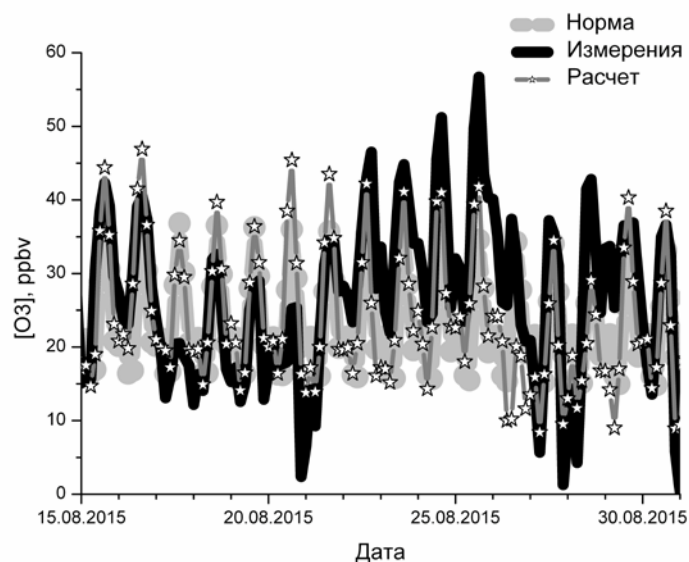


Рисунок 5 – Сравнение результатов расчета концентрации приземного озона с данными наблюдений в августе 2015 г. (Могилев)

Заключение

Исходя из самых общих соображений, зависимость концентрации приземного озона от переменных, влияющих на него, может быть представлена в виде нелинейной функции. Далее эта функция раскладывается в ряд Тэйлора. Чтобы обосновать возможность ограничиться учетом членов вплоть до второго порядка включительно, предложено в качестве точки, около которой осуществля-

ется разложение, выбрать точку, соответствующую климатическим нормам метеопараметров и нулевым концентрациям антропогенных загрязнений. Показано, что в принятом приближении данной точке соответствует климатическая норма приземного озона с учетом сдвига, обусловленного нелинейной зависимостью озона от переменных [2].

Коэффициенты разложения определены посредством решения уравнения регрессии на основании наблюдений в 4-х районах г. Минска в 2013–2015 гг. и позволяют удовлетворительно описать результаты измерений. По мере накопления данных наблюдений за озоном и антропогенными загрязнителями в других регионах появится больше возможностей для проверки и обоснования предположения, сформулированного во введении. Вместе с тем, следует указать на недостатки используемой методики.

1. Ошибки калибровки или сбои в работе измерительной техники могут существенно влиять на качество результатов. Часто отсутствуют измерения некоторых из основных использованных переменных, и иногда встречаются явно некачественные данные. По мере развития и совершенствования системы наблюдений Гидрометеоцентра за качеством воздуха эти недостатки будут устранены, что позволит уточнить результаты расчетов.

2. Другая проблема, касающаяся исходных данных, связана с их полнотой. Из литературных источников известно, что значительно большее количество загрязнителей воздуха, чем контролируется на минских пунктах наблюдений, оказывает влияние на концентрацию приземного озона. В частности, к ним относятся диоксид серы, метан, формальдегид, а также терпены и изопрены, являющиеся продуктами естественного происхождения. Этот список, наверное, можно продолжить. Поскольку отсутствуют количественные оценки влияния названных веществ, следует признать, что использованная методика в части учета всех основных загрязнителей воздуха, способных взаимодействовать с озоном, несовершенна. Очевидным недостатком является отсутствие аэрозолей в списке основных переменных, хотя концентрации аэрозольных частиц уже включены в состав контролируемых Гидрометеоцентром параметров атмосферы, и на многих пунктах ведется мониторинг аэрозольных частиц.

3. Третьей серьезной проблемой, связанной с исходными данными, является ограниченность диапазона изменений объясняющих переменных. Это приводит к появлению физически необусловленных корреляций между отдельными переменными. Например, коэффициенты корреляции между концентрациями контролируемых загрязнителей атмосферы достаточно высоки, что вероятно связано с тем, что у них имеются общие источники выбросов. Также следует отметить незначительно меняющуюся влажность воздуха. Для преодоления этой проблемы требуется расширение базы данных по разным регионам страны.

4. Погрешности определения климатической нормы приземного озона. Помимо ошибок, обусловленных неполнотой рядов данных наблюдений, сама процедура получения климатической нормы озона является источником ошибок, поскольку базируется на результатах измерений в загрязненном воздухе. В то же время нулевые значения реально использованных объясняющих переменных в уравнении регрессии соответствуют климатическим нормам метеопараметров и отсутствию антропогенных загрязнителей. Поэтому в качестве «точки отсчета» желательно иметь климатическую норму приземного озона для случая нулевых концентраций загрязнителей. Иначе возможны дополнительные ошибки.

5. Список объясняющих переменных, учитывающий только основные переменные и их взаимные произведения, возможно недостаточен для адекватного описания имеющихся экспериментальных данных, несмотря на предпринятые меры по выбору «точки отсчета». Возможно, в дальнейшем потребуются включение нелинейных членов более высоких степеней. Это будет соответствовать разложению зависимости концентрации озона в ряд Тэйлора с учетом членов третьего и более высоких порядков.

6. Упомянутая в [2] зависимость от времени коэффициентов уравнения регрессии реально возможна. Дело в том, что сезонные изменения метеоусловий оказывают влияние на фотохимические процессы с участием озона. Поскольку указанные процессы учитываются опосредованно (детали явно никак не отражены в используемой методике), их трансформация при существенных изменениях метеорологических условий может отражаться на функциональной зависимости концентрации озона от объясняющих переменных.

Практически все перечисленные выше проблемы могут быть решены после накопления достаточно длинных рядов измерений концентраций приземного озона и его прекурсоров в различных регионах страны, отличающихся климатическими условиями и своим набором основных антропогенных и естественных загрязнителей. Желательно также расширить список контролируемых на пунктах наблюдений прекурсоров озона.

В представленной работе показано, как определенная по результатам обработки данных наблюдений в г. Минске зависимость концентрации приземного озона от метеоусловий и concentra-

ций антропогенных загрязнителей атмосферы соответствует результатам измерений озона в разных районах города, различающихся степенью загрязнения. Попытка применения полученной зависимости к другим регионам страны носит предварительный характер из-за отсутствия данных о полном наборе основных переменных. Можно только утверждать, что эти результаты не отвергают выдвинутую гипотезу об однородности главной составляющей поля приземного озона на территории страны и возможности объяснить локальные флуктуации его концентрации влиянием меняющихся метеорологических условий и уровня загрязнения атмосферы.

Список литературы

1. Hjellrkke, A. G., and Solberg, S. Ozone measurements 2001. Norwegian Institute for Air Research: Kjeller, EMEP/ CCC-Report 4/2003 (<http://www.nilu.no>)
2. Людчик, А. М. Статистическая оценка антропогенного воздействия на приземный озон / А. М. Людчик, В. И. Покаташкин, Л. М. Болотько, Р. Н. Бурак, П. Н. Павленко, С. Д. Умрейко // Природные ресурсы. – 2015. – № 1. – С. 96–106.
3. Людчик, А. М. Динамические климатические нормы и многолетние тренды метеопараметров для г. Минска / А. М. Людчик, В. И. Покаташкин, Е. В. Комаровская // Природные ресурсы. – 2016. – № 1. – С. 101–108.
4. Людчик, А. М. Многолетний тренд приземного озона / А. М. Людчик, В. И. Покаташкин // Природные ресурсы. – 2014. – № 1. – С. 97–104.
5. Людчик, А. М. Климатология приземного озона в г. Минске / А. М. Людчик, В. И. Покаташкин // Природные ресурсы. – 2014. – № 2. – С. 112–118.
6. Покаташкин, В. И. Оценка влияния некоторых антропогенных загрязнителей на концентрацию приземного озона в условиях Минска / В. И. Покаташкин, А. М. Людчик // Природные ресурсы. – 2013. – № 2. – С. 87–92.

L. M. Balatsko, A. M. Liudchik, V. I. Pakatashkin, P.N. Paulenka, S. D. Umreika

FLUCTUATIONS OF THE FIELD OF SURFACE OZONE CONCENTRATION INDUCED BY THE CHANGING WEATHER CONDITIONS AND LEVEL OF AIR POLLUTION

It is shown that accounting for changing weather conditions and level of air pollution eliminates largely differences in the concentrations of surface ozone, measured in different regions of Belarus.