

3. Global total ozone recovery trends attributed to ozone-depleting substance (ODS) changes derived from five merged ozone datasets / M. Weber [et al.] // *Atmos. Chem. Phys.* – 2022. – Vol. 22. – P. 6843–6859.
4. Environmental effects of stratospheric ozone depletion, UV radiation and interactions with climate change: UNEP Environmental Effects Assessment Panel, update 2019 / G. H. Bernhard [et al.] // *Photochem. Photobiol. Sci.* – 2020. – Vol. 19. – P. 542–584.
5. NASA Ozone Watch [Electronic resource]. – Mode of access: <http://ozonewatch.gsfc.nasa.gov/data>. – Date of access: 14.11.2022.

**ЭФФЕКТИВНАЯ МЕТОДИКА УЧЕТА НЕЛИНЕЙНОЙ ЗАВИСИМОСТИ
КОНЦЕНТРАЦИИ ПРИЗЕМНОГО ОЗОНА ОТ МЕТЕОПАРАМЕТРОВ
И КОНЦЕНТРАЦИЙ АНТРОПОГЕННЫХ ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ ВОЗДУХА**

**EFFICIENT METHOD FOR ACCOUNTING OF THE NONLINEAR DEPENDENCE
OF THE SURFACE-LEVEL OZONE CONCENTRATION ON METEOPARAMETERS
AND CONCENTRATIONS OF ANTHROPOGENIC AIR POLLUTANTS**

А. М. Людчик¹, А. Н. Акимов¹, П. Н. Павленко²
A. M. Liudchik, A. N. Akimov, P. N. Paulenka

*¹Национальный научно-исследовательский центр мониторинга озоносферы
Белорусского государственного университета,
г. Минск, Республика Беларусь
liudchikam@tut.by*

*²Белорусский национальный технический университет,
г. Минск, Республика Беларусь
pavlenko_pn@mail.ru*

*National Ozone Monitoring Research Centre of the Belarusian State University, Minsk, the Republic of Belarus
Belarusian National Technical University, Minsk, the Republic of Belarus*

Представлено обоснование и описание методики учета нелинейности в зависимости концентрации приземного озона от метеоусловий и концентраций антропогенных загрязнений воздуха в месте наблюдений. Авторы доклада предприняли попытку объединить все наиболее эффективные подходы к построению уравнения регрессии для концентрации приземного озона, предложенные ранее.

The substantiation and description of the methodology for accounting of nonlinearity in the dependence of surface-level ozone concentration on meteorological conditions and concentrations of anthropogenic air pollution at the observation site is presented. The authors of the report make an attempt to combine all the most effective approaches to constructing a regression equation for the concentration of surface-level ozone proposed earlier.

Ключевые слова: приземный озон, уравнение регрессии, нелинейность, метеорологические условия, антропогенные загрязнители воздуха.

Keywords: surface-level ozone, regression equation, nonlinearity, meteorological conditions, anthropogenic air pollutants.

<https://doi.org/10.46646/SAKH-2023-2-257-260>

Приземный озон является вторичным загрязнителем атмосферы, поскольку в основном образуется за счет фотолиза коротковолновым солнечным излучением других загрязнителей воздуха естественного и антропогенного происхождения. Часть приземного озона формируется также за счет обмена воздухом между тропосферой и стратосферой, где концентрации озона особенно велики. Ввиду сказанного, наблюдаемые концентрации озона у поверхности земли существенно зависят от метеорологических условий и уровня загрязнения приземного воздуха прекурсорами озона.

Озон считается опасным загрязнителем, так как угнетающе действует на живые организмы и способствует разрушению материалов. Поэтому задача изучения климатологии приземного озона и получения его достоверного прогноза на будущее с учетом меняющегося климата и экологической обстановки весьма актуальна.

В Национальном научно-исследовательском центре мониторинга озоносферы (НИИЦ МО) было предложено уравнение регрессии [1], описывающее зависимость концентрации приземного озона от метеоусловий и концентраций антропогенных загрязнений воздуха в месте наблюдений. Уравнение является аппроксимацией зависимости приземного озона от влияющих на него факторов многочленом Тэйлора с учетом членов второго порядка.

В качестве точки, около которой ведется разложение в ряд, удобно выбрать значения объясняющих переменных, отвечающие климатической норме «чистой атмосфере Беларуси», а именно: для метеопараметров – их климатические нормы для г. Минска, для концентраций антропогенных загрязнений – средние значения для Бerezинского биосферного заповедника, весьма слабо отличающиеся от нуля [2]. Такой подход является дальнейшим развитием предложенной в [1] концепции однородности в пределах небольшой по территории страны поля приземного озона, которое подвержено местным флуктуациям из-за различий в метеорологических условиях и степени антропогенного загрязнения воздуха. Именно по отношению к названной норме следует оценивать наблюдаемые флуктуации концентрации приземного озона в зависимости от места наблюдений (местных метеорологических условий и концентраций прекурсоров).

Сравнение результатов расчетов по полученному уравнению регрессии с данными наблюдений в областных центрах Беларуси показывает удовлетворительное соответствие [3]. Об этом также свидетельствует величина доли объясненной уравнением регрессии дисперсии по отношению к дисперсии экспериментальных результатов, составляющая немногим более 60%. Тем не менее, несмотря на случаи, когда имеется вполне хорошее согласие между измеренными значениями концентрации приземного озона и расчетными данными, довольно часто выявляются существенные расхождения.

Список объясняющих переменных уравнения регрессии, учитывающий только основные переменные и их взаимные произведения, возможно недостаточен, несмотря на предпринятые действия по выбору «точки отсчета», около которой ведется разложение. Проведенные в [2] вычислительные эксперименты показали, что добавленные переменные в виде произведений трех и четырех основных переменных, интерпретирующие члены более высоких порядков разложения Тэйлора, имеют заметный коэффициент корреляции с озоном. Сказанное следует интерпретировать как наличие существенной нелинейности в зависимости концентрации приземного озона от объясняющих переменных, что препятствует точному описанию этой зависимости разложением в многочлен Тэйлора. Более плодотворным может оказаться вариант с введением явных нелинейных зависимостей озона от переменных.

Известно [4], что в отсутствие в приземном воздухе летучих органических соединений быстро устанавливается фотохимическое равновесие между концентрациями озона O_3 и оксидов азота NO , NO_2 с учетом интенсивности фотохимически активного солнечного излучения:

$$O_3 \cdot NO = J/k \cdot NO_2, \quad (1)$$

Здесь J определяет объемную плотность солнечного излучения, приводящего к фотодиссоциации диоксида азота, k – скорость реакции образовавшегося оксида азота с озоном.

В обзоре [5] анализируются различные подходы к решению задачи статистической оценки влияния метеорологических условий на приземный озон. Отвлекаясь от новых, весьма универсальных методов, таких как, например, нейронные сети, не используя дополнительные физические и химические знания об изучаемых процессах, сконцентрируемся на решениях, связанных с модификацией уравнения регрессии. В частности, в названном обзоре упоминаются подходы с использованием уравнения линейной регрессии не для самой объясняющей переменной, а для ее квадратного корня или логарифма, и для этого можно привести физическое обоснование. Именно построение уравнения регрессии для логарифма концентрации приземного озона довольно популярно и представлено во многих публикациях. Действительно, если взять логарифм выражения (1), получим

$$\ln(O_3) = \ln(J) + \ln(NO_2) - \ln(k) - \ln(NO),$$

и модифицированное уравнение начинает линейно зависеть от логарифмов концентраций оксида и диоксида азота, скорости фотолиза и скорости реакции озона с оксидом азота. Кстати, логарифм скорости упомянутой реакции, экспоненциально зависящей от температуры, зависит от нее уже практически линейно с учетом того, что в показатель экспоненты входит абсолютная температура, а не выраженная в градусах Цельсия.

Конечно, соотношение (1) чрезвычайно упрощено и не учитывает множества других факторов, влияющих на озон, а также реально существующее их взаимовлияние. Однако достигнутый прогресс в линеаризации весьма сложной зависимости вселяет оптимизм и позволяет надеяться на существенное улучшение аппроксимации зависимости приземного озона от метеоусловий и прекурсоров.

В публикациях, цитируемых в обзоре, имеются существенные различия в применении в качестве объясняемой переменной логарифма концентрации озона, а не непосредственно его концентрации. Эти различия заслуживают обсуждения.

Так, в ряде публикаций, цитируемых в обзоре, авторы обсуждают необходимость четкого разделения различных масштабов движения, включенных в данные временных рядов озона, а именно: краткосрочные изменения (связанные с погодой), сезонные изменения (вызванные изменением поступающей солнечной энергии) и долгосрочные тенденции (связанные с изменением климата). Такая процедура обеспечит лучшее понимание основных физических процессов, которые влияют на уровни озона в окружающей среде. Пространственная и временная информация в данных временных рядов озона, неясная до разделения, впоследствии четко отображается после осуществления такого разделения. Однако упомянутое разделение удастся осуществить только в случае его применения к логарифму измеренных концентраций озона, а не непосредственно к ним.

Разделение временных рядов озонных и метеорологических данных на синоптические, сезонные и долгосрочные компоненты необходимо, поскольку процессы, происходящие на разных частотах, вызваны различными физическими явлениями. Компонент синоптического масштаба связан с погодой и кратковременными

колебаниями концентраций прекурсоров, сезонный компонент зависит от изменения солнечного угла, а долгосрочный – с изменениями климата, политики и / или экономики. С учетом сказанного временные ряды данных об озоне и температуре представляются в виде

$$O_3(t) = e(t) + S(t) + W(t), \quad T(t) = e'(t) + S'(t) + W'(t),$$

где $O_3(t)$ – натуральный логарифм исходного временного ряда концентрации озона, а $T(t)$ – временной ряд температуры, $e(t)$ – долгосрочный (трендовый) компонент, $S(t)$ – сезонное изменение, $W(t)$ – кратковременное изменение, а t – время.

Логарифмическая шкала важна для четкого разделения компонентов озона, как и выбор метода разделения, поскольку фильтрация непосредственно измеренных концентраций озона оставляет в кратковременном компоненте $W(t)$ заметную сезонную составляющую.

В одной из цитируемых в обзоре публикаций логарифмы ежечасных измерений концентрации приземного озона использованы для регрессионного анализа зависимости наблюдаемой концентрации от метеоусловий и загрязнения воздуха. Преобразование объясняемой переменной – концентрации приземного озона к логарифмическому масштабу – оказывается требованием приведения ежедневных наблюдений за максимальными среднечасовыми значениями озона в соответствие с условием применимости множественной линейной регрессии: данные должны быть нормально распределены. Названное преобразование очень хорошо справляется с задачей. В другой публикации почасовые данные измерений также предварительно преобразовывались к логарифму и группировались в суточные значения для применения в уравнении регрессии. Кроме этого, данные о загрязнении брались со сдвигом на более раннее время для учета времени, необходимого для прохождения химических реакций. Этот весьма оригинальный подход позволил определить оптимальное время запаздывания – 1 час. В методе, развиваемом в НИИЦ МО, данные о приземном озоне и загрязнениях усредняются около метеорологических сроков наблюдений (через каждые 3 часа), и такое запаздывание в этом случае представляется несущественным.

На рис. 1 в качестве наглядного примера, демонстрирующего изменения в исходных данных после их логарифмирования, приведены результаты измерений концентрации приземного озона в марте 2019 г. на пункте 06 г. Могилева. Сразу бросается в глаза существенное сокращение динамического диапазона изменения объясняемой переменной при переходе к логарифмам ее значений.

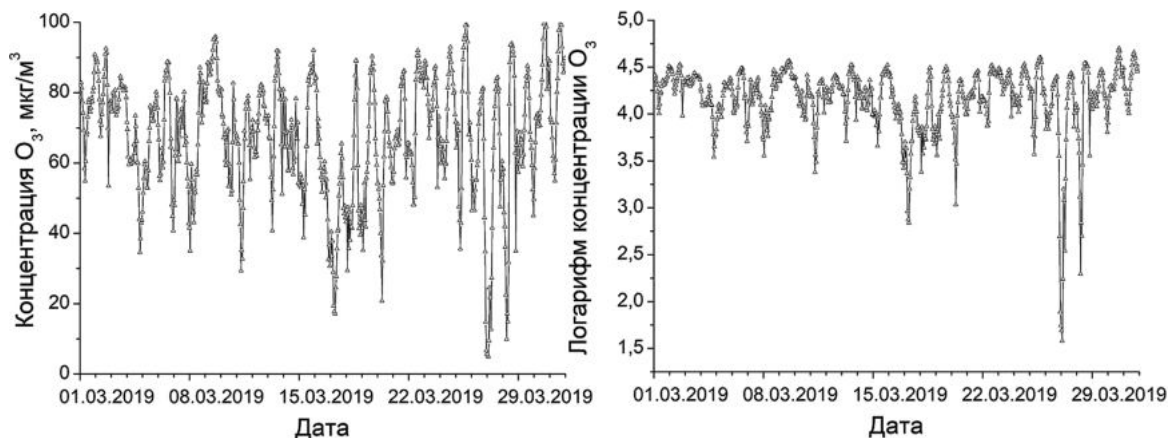


Рисунок 1 – Концентрации приземного озона, зарегистрированные в марте 2019 г. на пункте 06 г. Могилева, и их логарифмы

Здесь следует обратить внимание на одну существенную особенность методики, используемой в НИИЦ МО, которая не позволяет непосредственно перейти от аппроксимации концентрации приземного озона с помощью уравнения линейной регрессии к аппроксимации логарифма его концентрации. Дело в том, что изначально в методике НИИЦ МО уравнение регрессии использовалось для приближения не зависимости полной наблюдаемой концентрации озона $O_3(t)$, а зависимости ее отклонения $\Delta O_3(t)$ от климатической нормы озона в «чистой» атмосфере региона $O_{3N}(t)$ [1]:

$$O_3(t) = O_{3N}(t) + \Delta O_3(t). \quad (2)$$

Были приведены вполне убедительные соображения в пользу такого подхода. В частности, основная часть сезонной и суточной изменчивости приземного озона удовлетворительно описывается поведением его климатической нормы, и это позволяет предположить независимость коэффициентов регрессии от сезона и времени суток. Первое предположение было подтверждено пробными расчетами в [2], допустимость второго пока не проверялась. С учетом сказанного желательно сохранить указанные преимущества и при разработке нового подхода к построению уравнения регрессии.

В случае применения предложенного подхода логарифм концентрации озона есть логарифм суммы климатической нормы озона и отклонения от нормы. Поэтому требуются дополнительные усилия, чтобы обосновать непротиворечивую методику учета нелинейности в зависимости концентрации приземного озона от метеоусловий и загрязнений воздуха, не отказываясь от использованного ранее представления наблюдаемой концентрации озона в виде (2).

Возьмем логарифм от выражения (2):

$$\ln[O_3(t)] = \ln[O_{3N}(t)] + \ln[1 + \Delta O_3(t) / O_{3N}(t)]. \quad (3)$$

Представление логарифма концентрации озона в виде (3) допустимо, поскольку ни норма озона, ни наблюдаемая концентрация никогда не обращаются в ноль. Следовательно: $\Delta O_3(t) / O_{3N}(t) > -1$.

Именно второе слагаемое в (3) и предлагается аппроксимировать линейной регрессией:

$$\ln[1 + \Delta O_3(t) / O_{3N}(t)] \approx a_0 + \sum_{i=1}^N a_i x_i, \quad (4)$$

где a_i – коэффициенты регрессии, a_0 – свободный член, x_i – объясняющие переменные, $N + 1$ – полное число объясняющих переменных. Необходимость присутствия свободного члена обусловлена неполным учетом всех факторов, оказывающих влияние на приземный озон. В некоторой степени он компенсирует несовершенство расчетов с ограниченным числом основных объясняющих переменных. Как и в [1], допустимо использование дополнительных объясняющих переменных в виде произведений основных для учета их взаимовлияния.

Если предположить малость реальных отклонений концентрации озона от климатической нормы, выражение (3) можно приближенно представить в виде

$$\ln[O_3(t)] = \ln[O_{3N}(t)] + \Delta O_3(t) / O_{3N}(t).$$

Это выражение весьма близко к тому, что использовалось в [1], если отвлечься от того, что сейчас используются логарифмы концентрации озона и его климатической нормы, а также относительное отклонение наблюдаемой концентрации озона от нормы. Возможно, построение уравнения регрессии было бы проще реализовать на основании приведенного выражения. Однако наблюдаемые отклонения от нормы весьма часто существенно отличаются от нее, и первое приближение для разложения логарифма – не очень удачный выбор. Поэтому рациональнее для построения уравнения регрессии использовать точное выражение (3).

Исходя из выражения (4) оценка отклонения измеренной концентрации озона от ее климатической нормы выглядит следующим образом:

$$\Delta O_3(t) = O_{3N}(t) [\exp(a_0 + \sum_{i=1}^N a_i x_i) - 1].$$

Именно эту величину и следует сравнивать с измеренными отклонениями от нормы для оценки эффективности предложенной методики.

ЛИТЕРАТУРА

1. Статистическая оценка антропогенного воздействия на приземный озон / А. М. Людчик [и др.] // Природные ресурсы. – 2015. – №1. – С. 95–105.
2. Климатическая норма приземного озона в чистой атмосфере Беларуси / В. В. Божкова [и др.] // Природные ресурсы. – 2019. – № 2. – С. 94–103.
3. Божкова В.В. Флуктуации поля приземного озона в Беларуси, обусловленные метеорологическими условиями и антропогенным загрязнением воздуха / В. В. Божкова, А. М. Людчик, Е. А. Мельник // Природные ресурсы. – 2020. – № 1. – С. 80–91.
4. Jenkin, M. E. Ozone and Other Secondary Photochemical Pollutants: Chemical Process Governing their Formation in the Planetary Boundary Layer / M. E. Jenkin, and K. C. Clemitshaw // Atmospheric Environment. – 2000. – Vol. 34. – P. 2499 – 2527.
5. A review of Statistical Methods for the Meteorological Adjustment of Tropospheric Ozone / M. L. Thompson [et al.] // Atmospheric Environment. – 2001. – Vol. 35. – P. 617–630.