УДК 551.510.42 https://doi.org/10.5281/zenodo.12509720

Акимов А.Н.[1], Людчик А.М.[1], Павленко П.Н.[2], Яротов А.Е.[1], Туболев В.А.[1], Мурашко О.А.[1], Сидоркина Е.И.[1]

[1]Национальный научно-исследовательский центр мониторинга озоносферы, Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь
[2]Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь

ОБ УЧЕТЕ НЕЛИНЕЙНОСТИ В ЗАВИСИМОСТИ ПРИЗЕМНОГО ОЗОНА ОТ МЕТЕОРОЛОГИЧЕСКИХ УСЛОВИЙ И ЕГО ПРЕКУРСОРОВ

Аннотация. *Ранее полученное уравнение регрессии для концентрации приземного озона в зависимости от метеоусловий и антропогенных загрязнений воздуха модифицировано для более полного учета нелинейности названной зависимости. С этой целью линейное уравнение регрессии строилось не для величины отклонения измеренной концентрации озона от ее климатической нормы, а для логарифма этого отклонения. Результаты расчетов по обеим моделям сравниваются с измеренными значениями для всех областных городов Беларуси. Сравнение показывает незначительные количественные различия, однако вариант с логарифмом предпочтительнее, поскольку исключает редкие случаи, когда уравнение регрессии приводит к отрицательным значениям концентрации озона. Предложены варианты уточнения расчетов по уравнению регрессии за счет модификации исходных предпосылок.*

Ключевые слова: *приземный зон, климатическая норма, уравнение регрессии, метеорологические условия, антропогенное загрязнение воздуха.*

Akimov A.N.[1], Lyudchik A.M.[1], Pavlenko P.N.[2], Yarotau A.E.[1], Tuboleu V.A.[1], Murashka A.A.[1], Cidorkina E.I.[1]

[1]National Ozone Monitoring Research Centre, Belarusian State University, Minsk, Belarus
[2]Belarusian National Technical University, Minsk, Belarus

THE PROBLEM OF ACCOUNTING FOR THE NONLINEAR DEPENDENCE OF GROUND-LEVEL OZONE FROM METEOROLOGICAL CONDITIONS AND ITS PRECURSORS

Abstract. *The previously obtained regression equation for the concentration of ground-level ozone depending on weather conditions and anthropogenic air pollution has been modified to more fully take into account the nonlinearity of this relationship. For this purpose, the linear regression equation was constructed not for the deviation of the measured ozone concentration from its climatic normal, but for the logarithm of this deviation. The calculation results for both models are compared with the measured values for all regional cities of Belarus. The comparison shows minor quantitative differences, but the logarithm variant is preferable, since it excludes rare cases when the regression equation leads to negative values of ozone concentration. Options for refining calculations using the regression equation by modifying the initial assumptions are proposed.*

Key words*: surface zone, climate norm, regression equation, meteorological conditions, anthropogenic air pollution.*

Введение и постановка проблемы. Концентрацию приземного озона можно приближенно представить в виде нелинейной функции от совокупности факторов, оказывающих влияние на озон. Это – существенное преимущество рассматриваемого случая, поскольку зависимость носит не абстрактно статистический, а вполне функциональный характер. В такой ситуации доступные физические и химические сведения о поведении приземного озона могут быть успешно использованы для аппроксимации названной функции.

Утверждение о функциональной зависимости не совсем точное, поскольку в заданную точку пространства, где происходят химические реакции, постоянно поступают (или убывают) реагенты из других областей за счет горизонтального переноса и вертикального перемешивания атмосферы. На данном этапе исследований мы не можем достаточно корректно учесть эффекты переноса в виде функциональной зависимости. Авторы приближенно их учитывают с использованием вполне логичных предположений и, разделяя исследуемые регионы, в зависимости от расположения и наличия источников антропогенных загрязнений: оксидов азота (NO_x), летучих органических соединений (ЛОС) и других. Например, в городах уровень антропогенного загрязнения воздуха, очевидно, выше, чем в сельской местности. Поэтому сильный ветер способствует очищению воздуха от таких загрязнений, а поскольку химия приземного озона на территории Беларуси в настоящее время носит NO_x-насыщенный (ЛОС-чувствительный) характер [6,12,16], ветер приносит в города повышенные концентрации озона. И совсем другая ситуация происходит в сельской местности. Очевидно, что используемый подход является приближением и должен обосновываться в каждом конкретном случае. Это обстоятельство существенно локализует его применимость. В частности, мы концентрируем внимание на городах Беларуси, где обычно концентрации приземного озона ниже, чем в сельской местности, из-за повышенного уровня антропогенных загрязнений, отрицательно влияющих на озон.

Обоснование методики ННИЦ МО для построения уравнения линейной регрессии для зависимости концентрации приземного зона от прекурсоров и метеоусловий дано в [1-4]. Основные особенности методики излагаются ниже, а далее описывается модернизированный вариант, использующий оригинальный подход к учету сильной нелинейности исследуемой зависимости, и результаты его применения.

Время (если отвлечься от весьма коротких периодов, необходимых для установления химического равновесия между реагентами) не входит в обсуждаемую функцию в явном виде, а изменение концентрации озона со временем обусловлено только зависимостью от него переменных. К сожалению, не известны полный набор определяющих концентрацию озона переменных и сама функция. Для решения проблемы, представим эту функцию в виде разложения в ряд Тэйлора:

$$O_3(x) = O_3(X) + \sum_i c_i (x_i - X_i) + (1/2)\sum_{i,j} c_{ij}(x_i - X_i)(x_j - X_j) + \ldots, \quad (1)$$

где $\{x\}$ - совокупность переменных, представляющих собой количественные оценки различных факторов, влияющих на озон, $\{X\}$ - совокупность значений переменных, соответствующих точке в многомерном пространстве, около которой осуществляется разложение. Коэффициенты c – частные производные от функции по соответствующим переменным:

$$c_i = \left(\partial O_3 / \partial x_i\right)_X, \; c_{ij} = \left(\partial^2 O_3 / \partial x_i \partial x_j\right)_X. \quad (2)$$

Если точка с координатами $\{X\}$ меняет свое положение со временем, коэффициенты $c_i, c_{ij}, \ldots$ также зависят от времени.

Чем меньше «расстояние» между $\{x\}$ и точкой $\{X\}$, тем короче может быть длина разложения (1) для удовлетворительного приближения функции $O_3(x)$. В качестве координат такой «точки отсчета» рационально выбрать значения, отвечающие средним значениям переменных $\{x\}$. Для метеорологических переменных это означает, что выбираются их климатические нормы в соответствии с общепринятым определением, как многолетних средних значений. Подразумевается, что известна их зависимость от времени суток и поры года.

Действительно, зависящая от времени t физическая характеристика атмосферы $y(t)$ может быть представлена в виде

$$y(t) = Y(t) + y'(t),$$

где $Y(t)$ - климатическая норма, $y'(t)$ - флуктуации, вызванные случайными изменениями влияющих на рассматриваемую величину других характеристик состояния атмосферы. По сути, $Y(t)$ представляет собой многолетнее среднее значение физического параметра атмосферы в зависимости от сезона и времени суток и отражает основную, наиболее существенную часть временной изменчивости этого параметра.

В качестве точки, около которой ведется разложение в ряд, удобно выбрать значения объясняющих переменных, отвечающие климатической норме «чистой атмосферы Беларуси» [1-3], а именно: для метеопараметров – их климатические нормы для г. Минска, для концентраций антропогенных загрязнений – средние значения для Березинского биосферного заповедника, весьма слабо отличающиеся от нуля. Такой подход является дальнейшим развитием предложенной в [3] концепции однородности поля приземного озона в пределах относительно небольшой по территории страны, которое подвержено местным флуктуациям из-за различий в метеорологических условиях и степени местного 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 других загрязнений воздуха, влияющих на озон).

В первом приближении можно ограничиться учетом членов разложения в (1) до второго порядка включительно. Это действительно первое приближение, поскольку, бесспорно, наличие взаимовлияния между отдельными переменными x_i и нелинейной зависимости концентрации приземного озона от этих переменных.

В [4] высказано предположение, что климатическая норма приземного озона соответствует средней погоде (климатическим нормам метеопараметров) и среднему уровню загрязнения воздуха прекурсорами озона в данный день года и в данное время суток в данной местности. Иными словами, предполагается, что функция $O_3[X(t)]$ совпадает с климатической нормой приземного озона.

В действительности данное предположение не совсем точно и требует более тщательного анализа. С этой целью усредним разложение (1) по совокупности многолетних измерений в заданные день года и время суток. Будем считать, что точке $\{X\}$ отвечают средние значения переменных на это же время: $X_i = \overline{x_i}$ (черта означает усреднение по заданному многолетнему набору значений). Очевидно, что левая часть выражения в результате усреднения превращается в климатическую норму приземного озона, рассчитанную на этот день года и время суток - $\overline{O_3}(t)$, а в правой части исчезает первая сумма:

$$\overline{O_3}(t) = O_3[X(t)] + (1/2)\sum_{i,j} c_{ij}(t) D_{ij}(t) + \ldots, \qquad (3)$$

где $D_{ij} = \overline{(x_i - X_i)(x_j - X_j)}$ - ковариация переменных x_i и x_j. Если переменные не коррелируют друг с другом, соответствующие члены в (3), содержащие их ковариацию, обращаются в нуль.

Таким образом, климатическая норма приземного озона $\overline{O_3}(t)$ совпадает с функцией $O_3[X(t)]$ от норм переменных с точностью до членов второго порядка малости, пропорциональных дисперсиям и ковариациям переменных. Чем сильнее нелинейность функции, тем заметнее отклонение климатической нормы озона от значения этой функции для норм переменных. Полное совпадение возможно только в случае линейной зависимости концентрации озона от переменных $\{x\}$.

Полученное соотношение позволяет заменить неизвестную функцию $O_3[X(t)]$ в (1) на климатическую норму приземного озона. Тогда для отклонения наблюденной концентрации озона от нормы можно записать

$$\Delta O_3[x(t)] = O_3[x(t)] - \overline{O_3}(t) =$$
$$= \sum_i c_i (x_i - X_i) + (1/2)\sum_{i,j} c_{ij}(x_i - X_i)(x_j - X_j) - (1/2)\sum_{i,j} c_{ij} D_{ij} + \ldots \quad (4)$$

Климатическая норма концентрации приземного озона для г. Минска, учитывающая сезонный и суточный ход в зависимости от сезона и времени суток определена в [1,5].

Значения производных, входящих в разложение (4), оцениваются посредством статистического анализа результатов наблюдений за концентрацией приземного озона, погодой и уровнем загрязнения воздуха в месте наблюдений. В качестве аппроксимации разложения (4) используется уравнение линейной регрессии:

где ΔO_3 – отклонение концентрации приземного озона от климатической нормы, a_i – коэффициенты регрессии, z_i – объясняющие переменные, M+1 – полное число переменных.

Коэффициенты регрессии являются решением системы линейных уравнений

$$\mathbf{Da} = \mathbf{b},$$

где элементы матрицы **D** ($D_{ij} = \sum_k x_i^k x_j^k$) и вектора-столбца **b** ($b_i = \sum_k y^k x_i^k$) являются суммами по всем k результатам наблюдений.

Коэффициенты уравнения регрессии являются оценками первых и вторых производных, входящих в выражение (4), и в общем случае зависят от сезона и времени суток. Как и ранее полагаем, что основная часть сезонной и суточной изменчивости приземного озона удовлетворительно описывается поведением его климатической нормы. Поэтому коэффициенты a_i предполагаются постоянными. Возможно также определять значения коэффициентов для отдельных сезонов и таким образом учитывать сезонные особенности.

Коэффициент a_0 введен для приближенной компенсации отклонения $O_3[X(t)]$ от $\overline{O_3}(t)$, а также осредненного влияния неучтенных факторов и других причин. Соответствующая этому коэффициенту переменная введена ради унификации алгоритма расчета и на самом деле является постоянной: $z_0 \equiv 1$. Основные объясняющие переменные уравнения регрессии, использованные в исследовании, представлены в [4]. Список, очевидно, не полный – он базируется только на переменных, регистрируемых на автоматических пунктах наблюдений Национальной системы мониторинга окружающей среды (НСМОС) Республиканского центра по гидрометеорологии, контролю радиоактивного загрязнения и мониторингу окружающей среды (Белгидромета).

Оценка качества разработанного подхода проведена для всех областных городов Беларуси, различающихся метеорологическими условиями и спецификой антропогенных загрязнений воздуха. Из дополнительных метеопараметров желательно было бы включить направление ветра, однако это параметр нелокального характера, связанный с переносом озона из других регионов, и существуют нерешенные проблемы с его корректным учетом. Альтернативным решением проблемы является рассмотрение только случаев с несильным ветром. Аналогичная ситуация с осадками, случаи которых также можно исключить из рассмотрения и анализировать отдельно.

Изученность вопроса. То, что концентрация приземного озона нелинейно зависит от прекурсоров озона и метеорологических условий, хорошо известно [9-12,15,17,18], причем степень нелинейности очень высока. В качестве доказательства

рассмотрим простейший случай химического равновесия приземного озона в присутствии только оксидов азота и солнечного света [12]:

$$[O_3]=J\,[NO_2]/(k[NO]), \quad (6)$$

где J – скорость фотолиза диоксида азота, зависящая от интенсивности солнечного излучения у поверхности земли, k - скорость реакции оксида азота с озоном, которая, в свою очередь, экспоненциально зависит от температуры воздуха (квадратные скобки означают концентрацию заключенного в них соединения).

Очевидно, что линейная регрессия является простейшим и самым примитивным подходом к изучению с помощью уравнении регрессии зависимостей между объясняемой и объясняющими переменными в отсутствие дополнительной физической и химической информации об особенностях их взаимодействия. В частности, об этом прямо говорится в обзоре статистических подходов к исследованию изменчивости озона в тропосфере [17]: «Все модели, базирующиеся на линейной регрессии, подвержены критике, поскольку лежащие в основе изучаемого явления химические и физические процессы, к сожалению, не являются линейными и аддитивными». И еще: «… идеальная статистическая методика должна учитывать природу процесса, то есть руководствоваться пониманием лежащих в его основе физических механизмов».

В цитируемом обзоре анализируются различные предложенные подходы к решению этой задачи. Отвлекаясь от новых весьма универсальных методов, таких как, например, нейронные сети, не использующие 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. В отношении последнего варианта можно привести физическое обоснование, ссылаясь на приведенное выше соотношение. Именно построение уравнения регрессии для логарифма концентрации приземного озона довольно популярно и используется во многих публикациях (см., например, [7,8]). Действительно, если взять логарифм выражения (6), получим

$$\ln([O_3])=\ln(J)+\ln([NO_2])-\ln(k)-\ln([NO]), \quad (7)$$

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.

Соотношение (7) 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 позволяет надеяться на существенное улучшение аппроксимации зависимости приземного озона от метеоусловий и его прекурсоров.

В публикациях, цитируемых в обзоре, имеются существенные различия в причинах применения в качестве объясняемой переменной логарифма концентрации озона, а не непосредственно его концентрации. Так, в [7] авторы обсуждают необходимость четкого разделения различных масштабов движения, определяющих поведение 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 проявляется после осуществления такой процедуры. Однако упомянутое разделение удается осуществить только в случае его применения к логарифму измеренных концентраций озона, а не непосредственно к ним [7].

В [8] преобразование объясняемой переменной - концентрации приземного озона к логарифмическому масштабу - согласуется с требованием приведения сравнения расчетов с помощью уравнения регрессии с ежедневными наблюдениями за максимальными среднечасовыми значениями озона в соответствие с условиями применимости множественной линейной регрессии: данные должны быть нормально распределены. Названное преобразование способствует решению поставленной задачи.

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

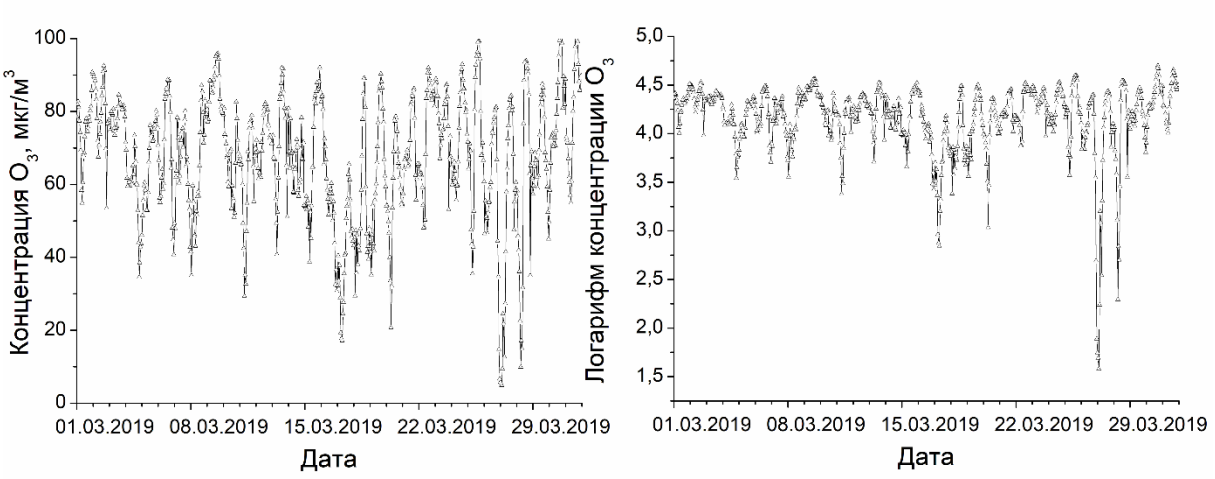


Рис. 1. Концентрации приземного озона, зарегистрированные в марте 2019 г. на пункте 06 г. Могилева, и их логарифмы

Цель и задачи работы. Целью работы является модификация ранее полученного уравнения регрессии для концентрации приземного озона в зависимости от метеоусловий и антропогенных загрязнений воздуха для более полного учета нелинейности названной зависимости. В связи с этим была поставлена задача построить линейное уравнение регрессии не для величины отклонения измеренной концентрации озона от ее климатической нормы, а для логарифма этого отклонения, а также сравнить результаты расчетов по обеим моделям с измеренными значениями для всех областных городов Беларуси

Материалы и методы. В представленной работе используются исходные данные из [2]. Сравнение результатов расчетов по полученному уравнению регрессии с данными наблюдений в областных центрах Беларуси показывает удовлетворительное соответствие [2]. 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 ограниченный ряд Тэйлора. Более плодотворным может оказаться вариант с введением явных нелинейных зависимостей озона от переменных.

Изначально в методике ННИЦ МО уравнение регрессии использовалось для приближения не зависимости полной наблюдаемой концентрации озона $O_3(t)$ от объясняющих переменных, а зависимости от этих переменных только отклонения $\Delta O_3(t)$ от климатической нормы озона в «чистой атмосфере» региона $O_{3N}(t)$ [1]:

$$O_3(t)= O_{3N}(t) + \Delta O_3(t). \quad (8)$$

Были приведены вполне убедительные доводы 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 [1], допустимость второго пока не проверялась. С учетом сказанного, желательно сохранить указанные преимущества и при разработке нового подхода к построению уравнения регрессии.

В случае его применения логарифм концентрации озона есть логарифм суммы климатической нормы озона и ее отклонения от нормы:

$$\ln[O_3(t)]=\ln[O_{3N}(t)] +\ln[1+\Delta O_3(t)/ O_{3N}(t)]. \quad (9)$$

Представление логарифма концентрации озона в виде (9) допустимо, поскольку ни норма озона, ни наблюдаемая концентрация никогда не обращаются в ноль. Следовательно, $\Delta O_3(t)/O_{3N}(t)>-1$, и аргумент второго логарифма в правой части (9) не имеет недопустимых значений.

Именно второе слагаемое в (9) и предлагается аппроксимировать линейной регрессией:

$$\ln[1+\Delta O_3(t)/O_{3N}(t)] \approx a_0 + \sum_1^N a_i x_i , \quad (10)$$

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 [2], допустимо использование дополнительных объясняющих переменных в виде произведений основных для учета их взаимовлияния.

Если предположить малость реальных отклонений концентрации озона от климатической нормы, выражение (9) 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 [1-3], если отвлечься от того, что сейчас имеем дело с логарифмами концентрации озона и его климатической нормы, а также с относительным отклонением 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 (10).

Исходя из выражений (9) – (10), расчетная оценка измеренной концентрации озона выглядит следующим образом:

$$O_3(t) = O_{3N}(t) + O_{3N}(t)\exp(a_0 + \sum_1^N a_i x_i) .$$

Результаты и их обсуждение. С целью проверки эффективности новой методики были проведены расчеты на сновании тех же исходных данных, выбранных объясняющих переменных и других условий, использованных ранее в [2]. На рис. 2 - 10 представлены результаты работы [2], дополненные расчетами по новой методике.

Первое, на что следует обратить внимание, это визуально улучшенное соответствие новых расчетов с экспериментом в случае минимальных (ночных) концентраций озона.

Кроме того, в расчетах исчезают нефизические отрицательные значения концентраций озона. Примеры показаны на рис. 3 (октябрь 2017 г.), рис. 8 (октябрь 2012 г., август 2014 г.) и других. На некоторых рисунках эффект от перехода к новой методике расчетов вообще трудно выявить.

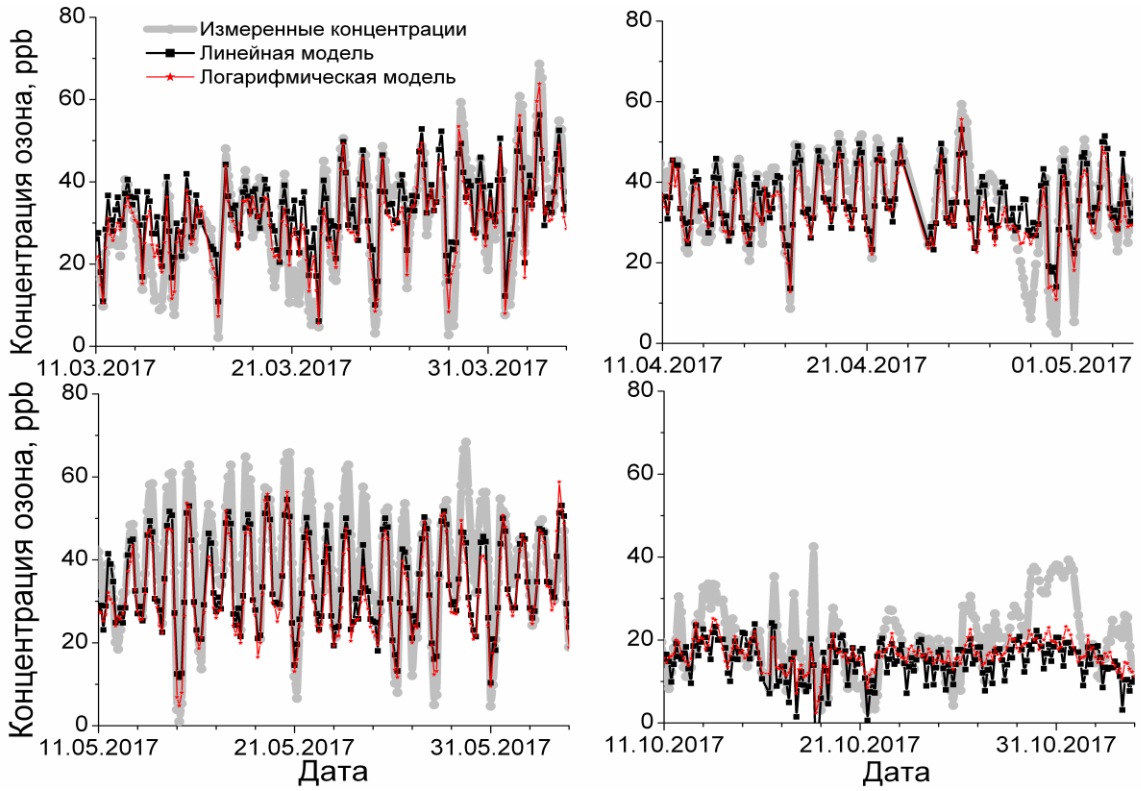


Рис. 2. Сравнение рассчитанных концентраций приземного озона с измеренными, г. Брест, пункт 01, 2017 г.

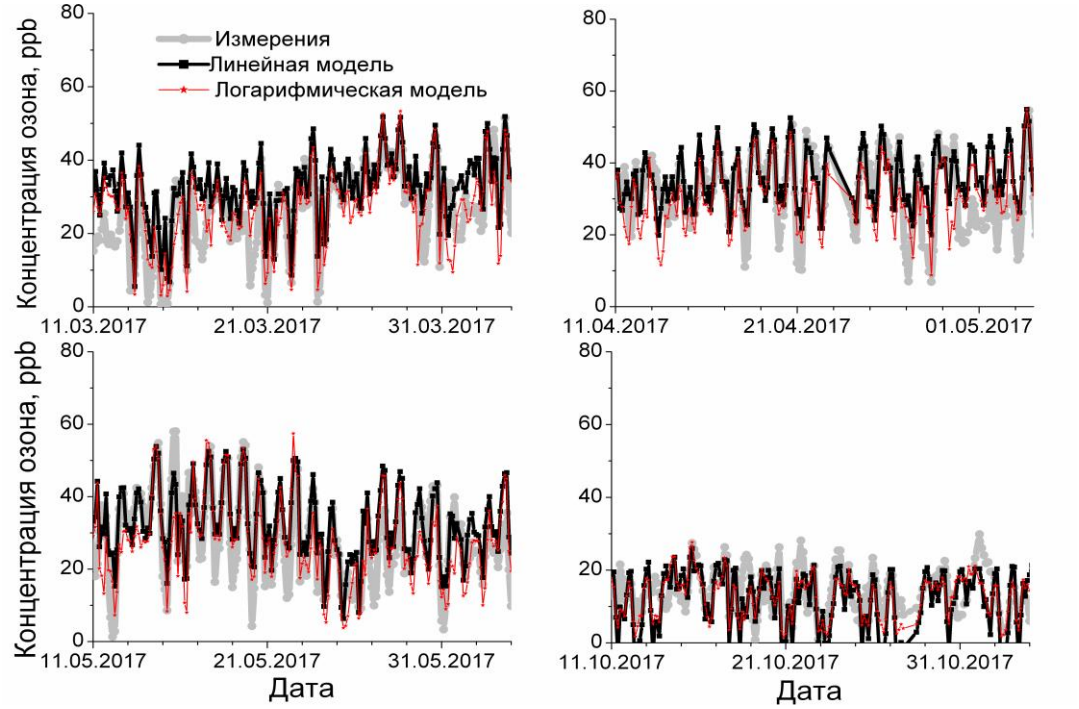


Рис. 3. Сравнение рассчитанных концентраций приземного озона с измеренными, г. Гомель, пункт 14, 2017 г.

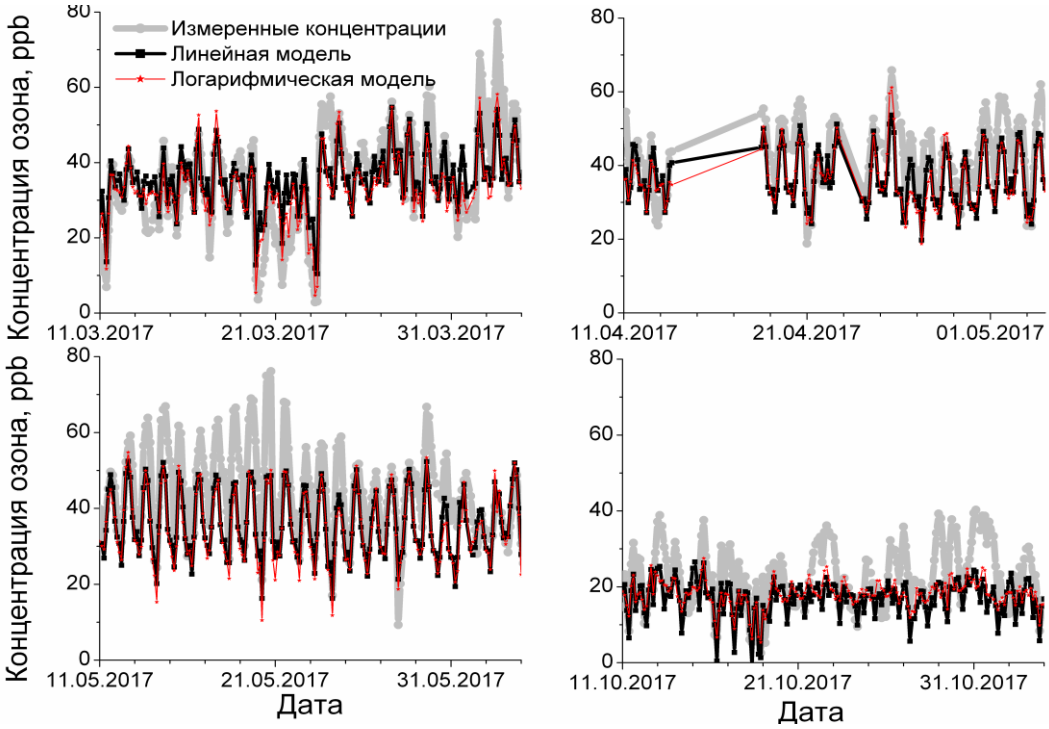


Рис. 4. Сравнение рассчитанных концентраций приземного озона с измеренными, г. Гродно, пункт 07, 2017 г.

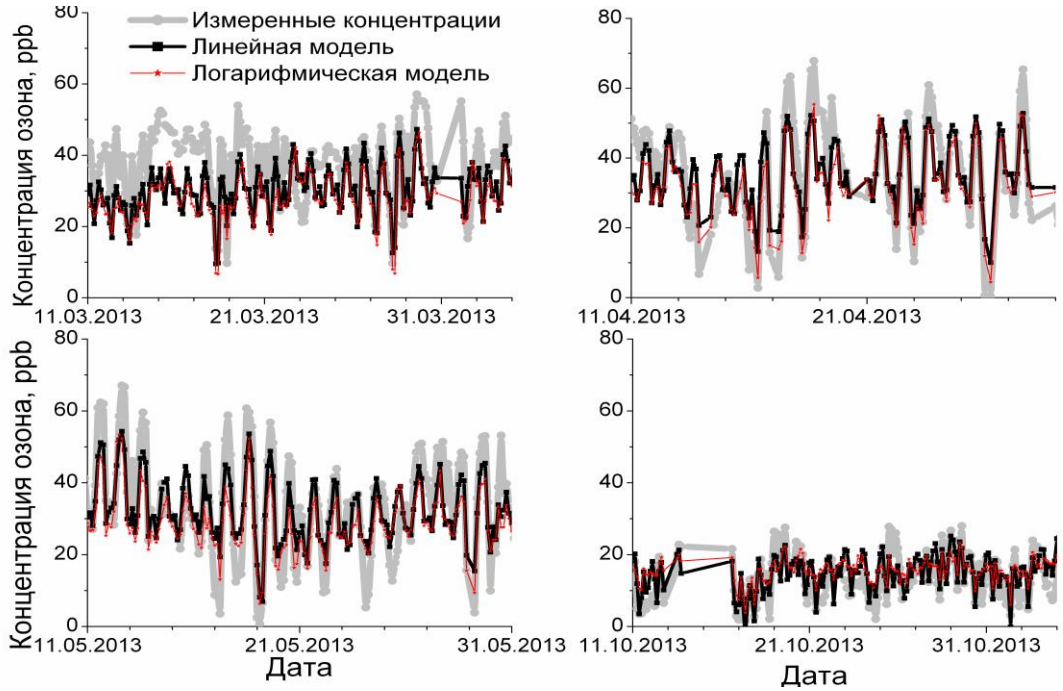


Рис. 5. Сравнение рассчитанных концентраций приземного озона с измеренными, г. Минск, пункт 01 (Белгидромет), 2013 г.

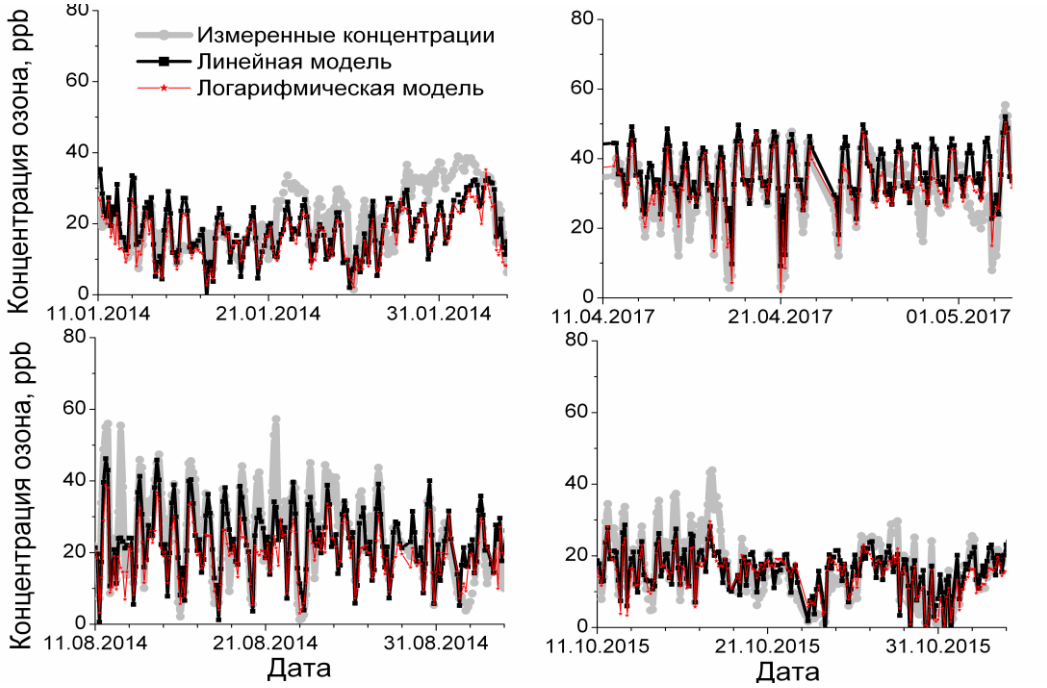


Рис. 6. Сравнение рассчитанных концентраций приземного озона с измеренными, г. Минск, пункт 04 (бывший радиаторный завод), 2014, 2015, 2017 гг.

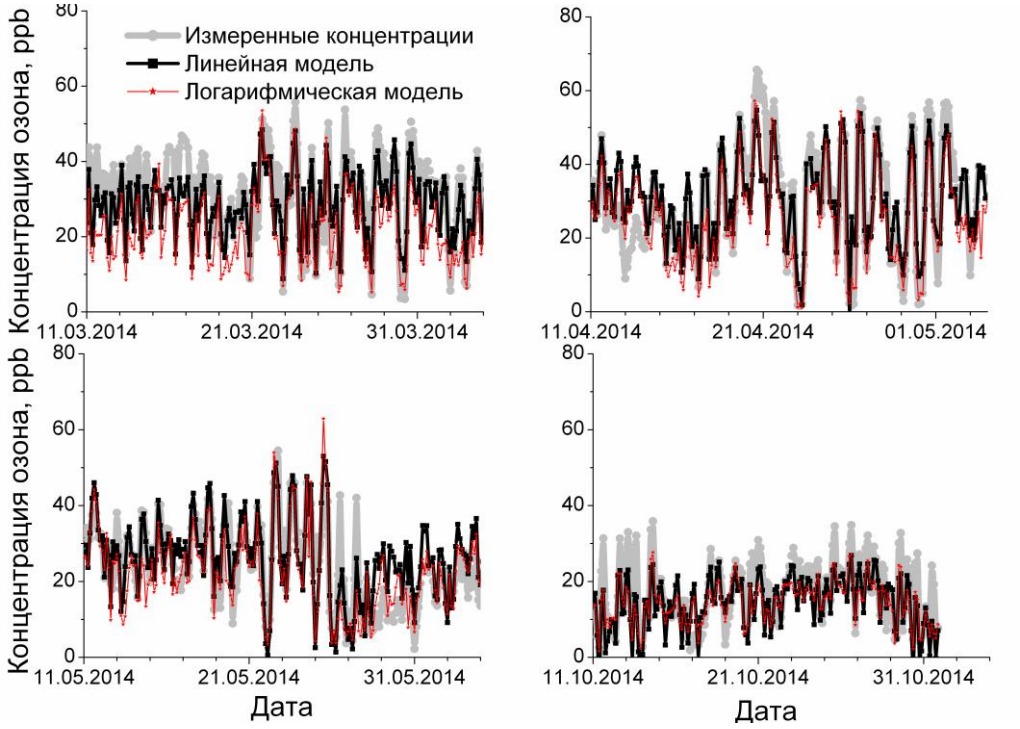


Рис. 7. Сравнение рассчитанных концентраций приземного озона с измеренными, г. Минск, пункт 11 (район Курасовщина), 2014 г.

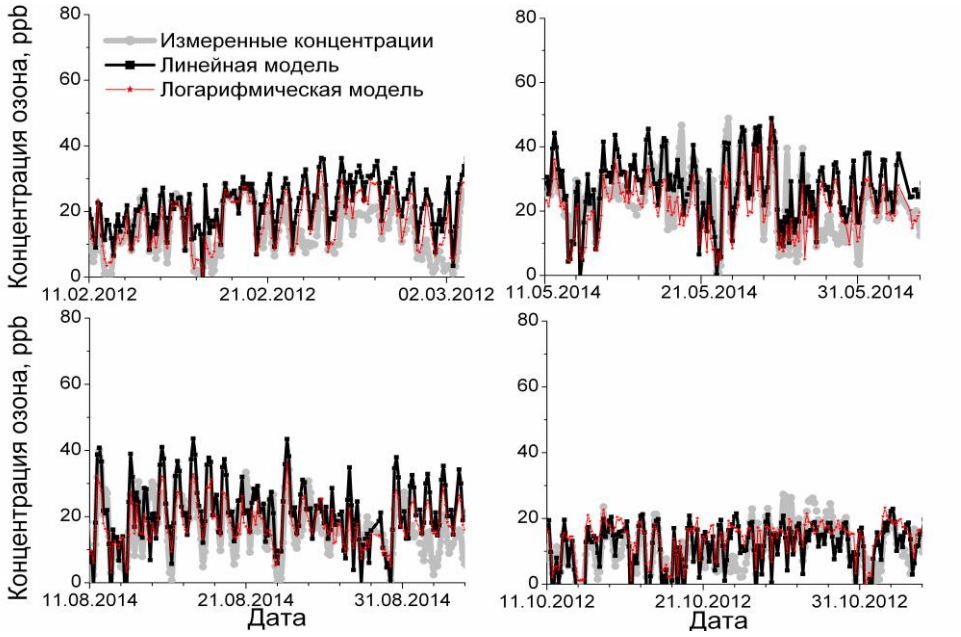


Рис. 8. Сравнение рассчитанных концентраций приземного озона с измеренными, г. Минск, пункт 13 (район Дражня), 2012, 2014 гг.

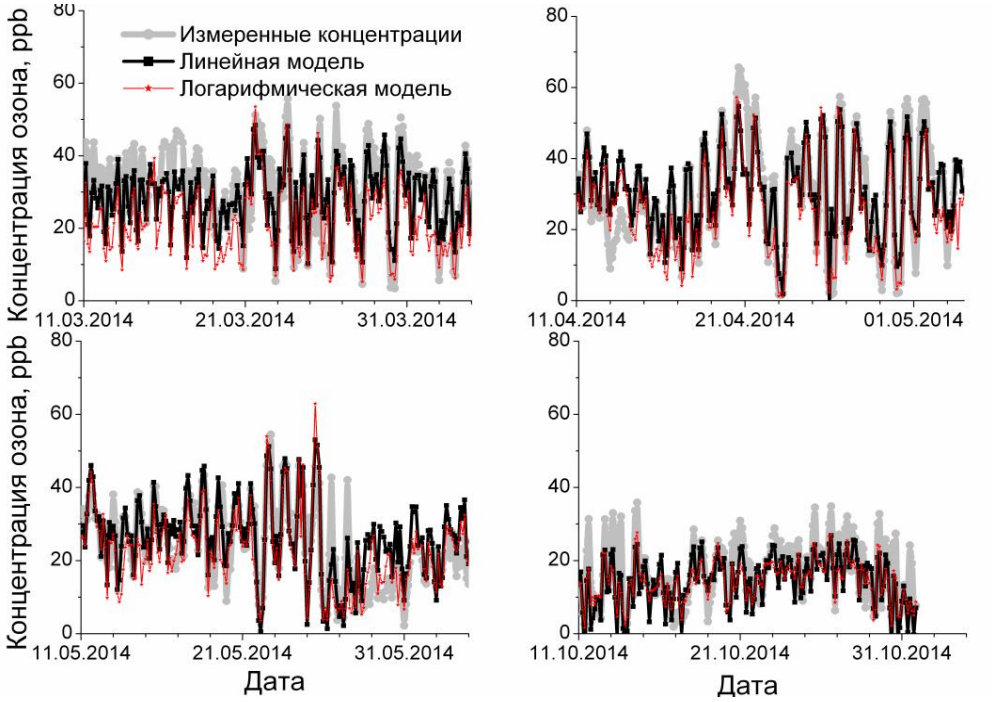


Рис. 9. Сравнение рассчитанных концентраций приземного озона с измеренными, г. Могилев, пункт 04 (промышленный район), 2014, 2017 гг.

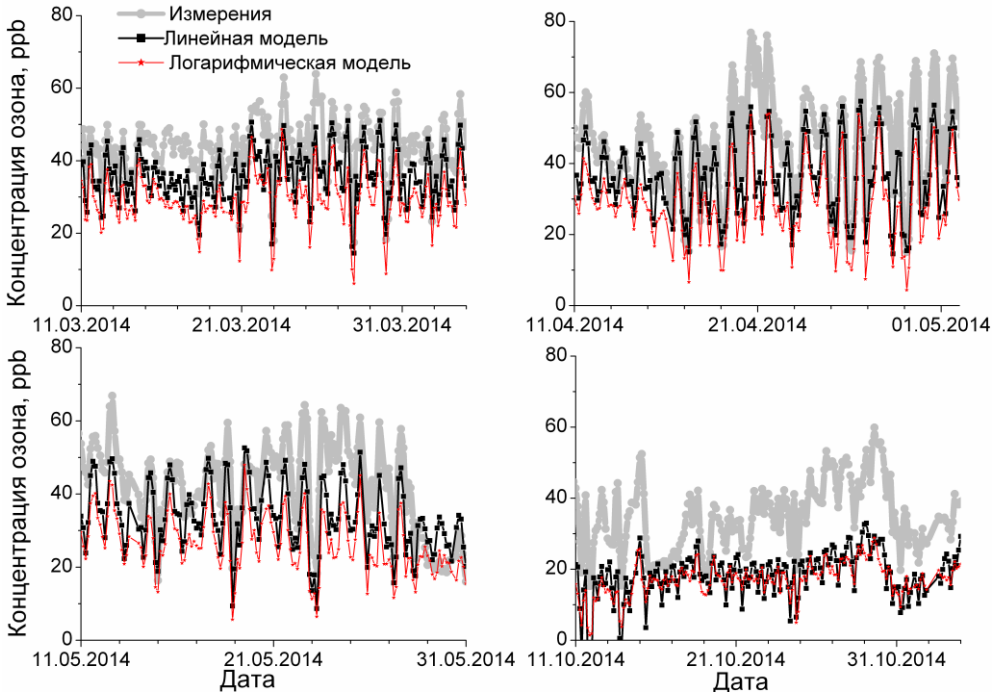


Рис. 10. Сравнение рассчитанных концентраций приземного озона с измеренными, г. Витебск, пункт 03, 2014 г.

Более объективный подход к оценке эффективности новой методики заключается в сравнении объясненных дисперсий в обоих случаях для каждого пункта наблюдений. Различия в объясненных дисперсиях для каждого пункта обусловлены или неточностью измерений на конкретном пункте наблюдений, или недостатками методики обработки измерений, и требуют дополнительного анализа.

В таблице 1 приведены сведения о количестве обработанных данных на каждом пункте наблюдений (колонка «Число данных»), среднее значение отклонения

рассчитанных концентраций озона от измеренных и среднеквадратичное отклонение (колонки «Среднее отклонение» и «Среднеквадратичное отклонение») для линейной и логарифмической моделей уравнения регрессии для каждого пункта наблюдений. Сразу можно заметить, что в случае логарифмической модели среднее значение отклонений получилось для всех пунктов наблюдений положительным, поскольку минимизировались не сами отклонения, а их логарифмы. Среднеквадратичные отклонения для обоих случаев оказались весьма близкими по величине.

В рамках обеих моделей самые большие средние значения разностей «расчет – измерение» получились для пунктов Могилев 06 и Витебск 03. Величины среднеквадратичных отклонений названной разности также максимальны для этих пунктов. Свидетельствует ли это о неважном качестве измерений на этих пунктах или недостатках обеих использованных моделей – задача дальнейших исследований.

Нужно отметить, что качество работы измерительных приборов существенно сказывается на результатах их дальнейшей математической обработки и, следовательно, на качестве построенного уравнения регрессии.

С другой стороны, даже в случае «правильного» уравнения регрессии расчеты по нему, проведенные с использованием некорректных данных о концентрациях прекурсоров озона, будут обнаруживать заметные отклонения от измеренных концентраций приземного озона. И наоборот, неверно измеренные концентрации озона при корректных значениях концентраций антропогенных загрязнений опять приведут к появлению отклонений расчетных значений от измеренных концентраций озона.

Таблица 1

Статистические характеристики линейной и логарифмической моделей регрессии для разных пунктов наблюдений

Пункт	Число данных	Линейная модель, среднее отклонение, ppb	Линейная модель, среднеквадратичное отклонение, ppb	Логарифмическая модель, среднее отклонение, ln(ppb)	Логарифмическая модель, Среднеквадратичное отклонение, ln(ppb)
Mo 04	10681	-1,153	7,812	1,311	7,772
Mo 06	228	6,588	11,663	9,735	11,424
Br 01	8851	1,855	9,321	3,097	9,534
Mi 01	5290	-0,065	8,703	3,009	9,548
Mi 04	4956	-2,292	6,937	0,767	7,133
Mi 11	4417	3,652	8,06	6,503	8,881
Mi 13	4482	-2,702	8,136	0,77	8,397
Gr 07	10491	-0,628	9,627	1,038	9,823
Go 14	8332	-1,469	9,125	1,669	9,777
Vi 03	3439	6,078	13,215	10,364	12,661

Следует также отметить, что список регистрируемых газовых загрязнений воздуха, оказывающих влияние на приземный озон, значительно более широк, чем номенклатура регистрируемых автоматическими станциями Белгидромета веществ. Уровень влияния неучтенных антропогенных и естественных загрязнений воздуха на приземный озон в условиях Беларуси следует детально исследовать, составив список веществ, играющих определяющую роль, и обеспечив их мониторинг. В частности, регистрируемые данные о среднесуточных концентрациях частиц в воздухе вполне

надежны, и их следует включить в число объясняющих переменных уравнения регрессии.

Имеются и существенные недоработки методики применения регрессионного анализа зависимости приземного озона от метеоусловий и его прекурсоров. Например, осадки и снежный покров. Хорошо известно, что концентрация приземного озона во время осадков снижается (роль грозовых разрядов в генерации озона, в отличие от генерации оксидов азота, весьма спорна и не является общепризнанной [14]). Также не рассматривалось наличие или отсутствие снежного покрова, существенного тормозящего скорость осаждения озона на земную поверхность [13]. Этот недостаток методики можно устранить двумя путями: исключить из рассмотрения случаи осадков и зимний период, или ввести в уравнение регрессии объясняющие переменные, ответственные за эти явления. Второй представляется более сложным для реализации. Проще строить уравнение регрессии отдельно для зимнего озона и для случая отсутствия дождей в теплые периоды.

Слишком упрощенный учет влияния на приземный озон скорости ветра, вертикальной устойчивости атмосферы и объемной плотности солнечного излучения у поверхности земли представлен в [4]. В частности, не учитывалась концентрация частиц в воздухе, которая влияет не только на плотность солнечного излучения, но и непосредственно на озон и его прекурсоры. В этом случае были бы полезны натурные измерения объемной плотности солнечной радиации у поверхности земли в коротковолновом участке видимого диапазона (еще лучше – в длинноволновом ультрафиолетовом диапазоне).

Выводы. Разработаны оригинальная методика и программное обеспечение для эффективного учета нелинейности в зависимости концентрации приземного озона от его прекурсоров. С этой целью уравнение регрессии для аппроксимации названной зависимости строится не для отклонения концентрации озона от его климатической нормы в данное время суток данного дня года, а для логарифма отклонения.

Использование логарифма концентрации озона для построения уравнения регрессии, аппроксимирующего зависимость приземного озона от метеоусловий и, в первую очередь, от его прекурсоров, дольно часто применяется и описано в литературе. Однако изначально методика ННИЦ МО существенно отличалась от традиционных подходов: уравнение регрессии строилось не для полной концентрации приземного озона, а для ее отклонения от климатической нормы для чистой (свободной от антропогенных загрязнений) атмосферы на территории страны. Основную часть суточной и сезонной изменчивости концентрации озона удовлетворительно передает ее климатическая норма. Это позволило использовать одно и то же уравнение регрессии для описания изменчивости озона в течение суток для разных сезонов и для разных регионов. Аналогичный подход был применен в случае, когда уравнение регрессии строилось не для названного отклонения, а для его логарифма. Ожидалось, что при этом будет более точно учтена роль нелинейности в зависимости озона от прекурсоров и метеоусловий.

В результате проведенных исследований и расчетов полученный эффект оказался менее заметным, чем в случае, когда уравнение регрессии строится для логарифма полной концентрации озона. Тем не менее, он привел к устранению некоторых принципиальных недостатков ранее использованной методики. Это свидетельствует о плодотворности подхода ННИЦ МО, использующего в качестве объясняемой переменной уравнения регрессии отклонение концентрации приземного озона от климатической нормы, а не ее абсолютное значение. Можно предположить, что эффекты нелинейности в последнем случае проявляют себя в значительно меньшей степени.

Обсуждены возможные недостатки методики и определены направления дальнейших исследований. Следует отметить, что на результаты обработки данных наблюдений существенно влияет качество измерений концентраций озона и

прекурсоров, а также ограниченное число регистрируемых автоматическими пунктами Белгидромета загрязнений атмосферного воздуха, влияющих на приземный озон.

Использованная литература:

1. Божкова В.В. и др. Климатическая норма приземного озона в чистой атмосфере Беларуси // Природные ресурсы. 2019. 2. С. 98-107.
2. Божкова В.В., Людчик А.М., Мельник Е.А. Флуктуации поля приземного озона в Беларуси, обусловленные метеорологическими условиями и антропогенным загрязнением воздуха // Природные ресурсы. 2020. № 1. С. 80-91.
3. Болотько Л.М. и др. Флуктуации поля концентрации приземного озона, обусловленные меняющимися метеоусловиями и степенью загрязнения воздуха // Экологический вестник. 2016. № 3. С. 45–50.
4. Людчик А.М. и др. Статистическая оценка антропогенного воздействия на приземный озон // Природные ресурсы. 2015. № 1. С. 95–105.
5. Людчик А.М., Покаташкин В.И. Многолетний тренд приземного озона // Природные ресурсы. 2014. № 1. С. 97-105.
6. Покаташкин В.И., Людчик А.М. Оценка влияния некоторых антропогенных загрязнителей на концентрацию приземного озона в условиях Минска // Природные ресурсы. 2013. № 2. С. 87–92.
7. Abdollahian M., Foroughi R. *Regression analysis of ozone*, data department of mathematics and statistics RMIT University Melbourne Australia. Mali. 1-5. [Internet, cited 2023 June 25]. URL: abdollahian@rmit.edu.au.
8. Abdul-Wahab S., Bouhamra W., Ettouney H., Sowerby B., Crittenden B.D. (1996), Predicting ozone levels. A statistical model for predicting ozone levels in the Shuaiba industrial area, Kuwait, *ESPR - Environ. Sci. & Pollut. Res.*, vol. 3, No. 4, pp. 195-204.
9. Baidrulhisham S.E. [et al.]. (2022), Effects of weather and anthropogenic precursors on ground-level ozone concentrations in Malaysian cities, *Atmosphere*, vol. 13, p. 1780. https://doi.org/10.3390/atmos13111780
10. Coates J., Mar K.A., Ojha N., Butler T.M. (2016), The influence of temperature on ozone production under varying NOx conditions – a modelling study, *Atmos. Chem. Phys*, No. 16, pp. 11601–11615.
11. Demuzere M. [et al.] (2009), The impact of weather and atmospheric circulation on O3 and PM10 levels at a rural mid-latitude site, *Atmos. Chem. Phys.*, No. 9, pp. 2695–2714. www.atmos-chem-phys.net/9/2695/2009/
12. Jenkin M.E., Cletmitshaw K.C. (2000), Ozone and Other Secondary Photochemical Pollutants: chemical processes governing their formation in the planetary boundary layer, *Atmospheric environment*, issue 34, pp. 2499-2527.
13. Liudchik A., Pakatashkin V., Umreika S. & Girgzdiene R. (2013), Role of ozone deposition in the occurrence of the spring maximum, *Atmosphere-Ocean*, No. 2, pp. 1-8. http://dx.doi.org/10.1080/07055900.2013.853284
14. Monks P.S. [et al.]. (2015), Tropospheric ozone and its precursors from the urban to the global scale from air quality to short-lived climate forcer, *Atmos. Chem. Phys.*, No. 15, pp. 8889–8973. www.atmos-chem-phys.net/15/8889/2015/doi:10.5194/acp-15-8889-2015
15. Pawlak I., Jarosławski J. (2019), Forecasting of surface ozone concentration by using artificial neural networks in rural and urban areas in central Poland, *Atmosphere*, No. 10 (2), pp. 52-68. doi:10.3390/atmos10020052.
16. Sillman S. (2003), Tropospheric ozone and photochemical smog, *Treatise on Geochemistry*, No. 9, pp. 407-431.
17. Thompson M.L. [et al.] (2001), A review of statistical methods for the meteorological adjustment of tropospheric ozone, *Atmospheric Environment*, vol. 35, pp. 617-630.
18. Vlachogianni A. [et. al] (2011), Evaluation of a multiple regression model for the forecasting of the concentrations of NOx and PM10 in Athens and Helsinki, *Science of the Total Environment*, vol. 409, pp. 1559–1571.

References:

1. Bozhkova V.V. [et al.] (2019), Climatic norm of ground-level ozone in the clean atmosphere of Belarus, *Prirodnyye resursy*, No. 2, pp. 98-107. (In Russ.).

2. Bozhkova V.V., Lyudchik A.M., Melnik E.A. (2020), Fluctuations of the ground-level ozone field in Belarus due to meteorological conditions and anthropogenic air pollution, *Prirodnyye resursy*, No. 1, pp. 80-91. (In Russ.).

3. Bolotko L.M. [et al.] (2016), Fluctuations in the field of ground-level ozone concentration due to changing weather conditions and the degree of air pollution, *Ekologicheskiy vestnik,* No. 3, pp. 45-50. (In Russ.).

4. Lyudchik A.M. [et al.] (2015), Statistical assessment of anthropogenic impact on ground-level ozone, *Prirodnyye resursy*, No. 1, pp. 95-105. (In Russ.).

5. Lyudchik A.M., Pokatashkin V.I. (2014), Long-term trend in ground-level ozone, *Prirodnyye resursy*. No. 1, pp. 97-105. (In Russ.).

6. Pokatashkin V.I., Lyudchik A.M. (2013), Assessment of the influence of some anthropogenic pollutants on the concentration of ground-level ozone in the conditions of Minsk, *Prirodnyye resursy*. No. 2, pp. 87–92. (In Russ.).

7. Abdollahian M., Foroughi R. *Regression analysis of ozone*, data department of mathematics and statistics RMIT University Melbourne Australia. Mali. 1-5. [Internet, cited 2023 June 25]. URL: abdollahian@rmit.edu.au.

8. Abdul-Wahab S., Bouhamra W., Ettouney H., Sowerby B., Crittenden B.D. (1996), Predicting ozone levels. A statistical model for predicting ozone levels in the Shuaiba industrial area, Kuwait, *ESPR - Environ. Sci. & Pollut. Res.*, vol. 3, No. 4, pp. 195-204.

9. Baidrulhisham S.E. [et al.]. (2022), Effects of weather and anthropogenic precursors on ground-level ozone concentrations in Malaysian cities, *Atmosphere*, vol. 13, p. 1780. https://doi.org/10.3390/atmos13111780

10. Coates J., Mar K.A., Ojha N., Butler T.M. (2016), The influence of temperature on ozone production under varying NOx conditions – a modelling study, *Atmos. Chem. Phys*, No. 16, pp. 11601–11615.

11. Demuzere M. [et al.] (2009), The impact of weather and atmospheric circulation on O3 and PM10 levels at a rural mid-latitude site, *Atmos. Chem. Phys.*, No. 9, pp. 2695–2714. www.atmos-chem-phys.net/9/2695/2009/

12. Jenkin M.E., Cletmitshaw K.C. (2000), Ozone and Other Secondary Photochemical Pollutants: chemical processes governing their formation in the planetary boundary layer, *Atmospheric environment,* issue 34, pp. 2499-2527.

13. Liudchik A., Pakatashkin V., Umreika S. & Girgzdiene R. (2013), Role of ozone deposition in the occurrence of the spring maximum, *Atmosphere-Ocean*, No. 2, pp. 1-8. http://dx.doi.org/10.1080/07055900.2013.853284

14. Monks P.S. [et al.]. (2015), Tropospheric ozone and its precursors from the urban to the global scale from air quality to short-lived climate forcer, *Atmos. Chem. Phys.*, No. 15, pp. 8889–8973. www.atmos-chem-phys.net/15/8889/2015/doi:10.5194/acp-15-8889-2015

15. Pawlak I., Jarosławski J. (2019), Forecasting of surface ozone concentration by using artificial neural networks in rural and urban areas in central Poland, *Atmosphere*, No. 10 (2), pp. 52-68. doi:10.3390/atmos10020052.

16. Sillman S. (2003), Tropospheric ozone and photochemical smog, *Treatise on Geochemistry*, No. 9, pp. 407-431.

17. Thompson M.L. [et al.] (2001), A review of statistical methods for the meteorological adjustment of tropospheric ozone, *Atmospheric Environment*, vol. 35, pp. 617-630.

18. Vlachogianni A. [et. al] (2011), Evaluation of a multiple regression model for the forecasting of the concentrations of NOx and PM10 in Athens and Helsinki, *Science of the Total Environment*, vol. 409, pp. 1559–1571.

Сведения об авторах:

Акимов Александр Николаевич – Национальный научно-исследовательский центр мониторинга озоносферы, Белорусский государственный университет (Минск, Беларусь), кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник. E-mail: alex_akimov@mail.ru

Людчик Александр Маркович – Национальный научно-исследовательский центр мониторинга озоносферы, Белорусский государственный университет (Минск, Беларусь), кандидат физико-математических наук, доцент. E-mail: liudchikam@tut.by

Павленко Павел Николаевич – Белорусский национальный технический университет (Минск, Беларусь), старший преподаватель. E-mail: pavlenko_pn@mail.ru

Яротов Алексей Евгеньевич – Национальный научно-исследовательский центр мониторинга озоносферы, Белорусский государственный университет (Минск, Беларусь), кандидат географических наук, доцент.

Туболев Вадим Алексеевич – Национальный научно-исследовательский центр мониторинга озоносферы, Белорусский государственный университет (Минск, Беларусь), младший научный сотрудник.

Мурашко Олег Артурович – Национальный научно-исследовательский центр мониторинга озоносферы, Белорусский государственный университет (Минск, Беларусь), младший научный сотрудник.

Сидоркина Екатерина Игоревна – Национальный научно-исследовательский центр мониторинга озоносферы, Белорусский государственный университет (Минск, Беларусь), младший научный сотрудник.

Information about authors:

Akimov Aleksandr – National Ozone Monitoring Research Centre, Belarusian State University (Minsk, Belarus), PhD in physics and mathematics, senior researcher. E-mail: alex_akimov@mail.ru

Liudchik Alexander – National Ozone Monitoring Research Centre, Belarusian State University (Minsk, Belarus), PhD in physics and mathematics, Associate Professor. E-mail: liudchikam@tut.by

Paulenka Pavel – Belarusian National Technical University (Minsk, Belarus), senior lecturer. E-mail: pavlenko_pn@mail.ru

Yarotau Aliaksei – National Ozone Monitoring Research Centre, Belarusian State University (Minsk, Belarus), PhD in geography, Associate Professor.

Tuboleu Vadzim – National Ozone Monitoring Research Centre, Belarusian State University (Minsk, Belarus), junior researcher.

Murashka Aleh – National Ozone Monitoring Research Centre, Belarusian State University (Minsk, Belarus), junior researcher.

Cidorkina Katsiaryna – National Ozone Monitoring Research Centre, Belarusian State University (Minsk, Belarus), junior researcher.

Для цитирования:

Акимов А.Н., Людчик А.М., Павленко П.Н., Яротов А.Е., Туболев В.А., Мурашко О.А., Сидоркина Е.И. Об учете нелинейности в зависимости приземного озона от метеорологических условий и его прекурсоров // Центральноазиатский журнал географических исследований. 2024. № 1-2. С. 42-58.

For citation:

Akimov A.N., Lyudchik A.M., Pavlenko P.N., Yarotau A.E., Tuboleu V.A., Murashka A.A., Cidorkina E.I. (2024), The problem of accounting for the nonlinear dependence of ground-level ozone from meteorological conditions and its precursors, *Central Asian Journal of Geographical Sciences*, No. 1-2, pp. 42-58. (In Russ.).