

Ozono koncentracijos troposferoje statistinis modeliavimas

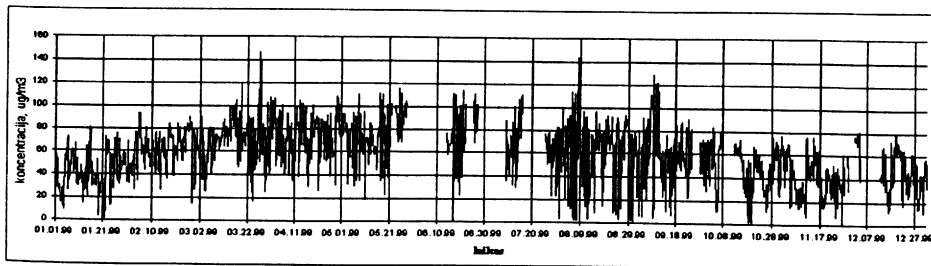
Rasa GIRGŽDIENĖ (FI), Tomas REKAŠIUS (VGTU)

el. paštas: tomas.rekasius@smst.vtu.lt

1. Ozonas, jo tyrimas Lietuvoje

Ozonas yra natūraliai egzistuojanti atmosferos priemaiša ir turi du pagrindinius šaltinius. Pirmasis yra natūralus – stratosfera, kur susidaro iš deguonies, veikiant jonizuojančiai saulės spinduliuotei, ir kurio indėlis į ozono kiekį troposferoje metai iš metų mažai kinta ir yra glaudžiai susijęs su atmosferos dinamika. Antrasis yra pačioje troposferoje, antropogeninis fotocheminis, kuris labai kinta priklausomai nuo ozono pirmtakų (pagrindiniai yra lakūs organiniai junginiai ir azoto oksidai) koncentracijos lygio, saulės ultravioletinių spindulių intensyvumo, sinoptinės situacijos, oro masių pernašos bei vietinių meteorologinių sąlygų. Ozono fotocheminis susidarymas suaktyvėja esant ore padidintoms kitų dujų (pvz., metano, anglies oksidų) koncentracijoms. Veikiant jonizuojančiai Saulės spinduliuotei ir esant atitinkamai oro temperatūrai iš šių dujų pirmtakų susidaro ozonas. Tačiau šiame sluoksnyje ozonas yra ir labai energingai ardomas tiek dėl kontakto su įvairiais paviršiais, tiek vykstant cheminėms reakcijoms su dujomis. Dėl šių priežasčių bendra ozono koncentracija atmosferos pažemio sluoksnyje metai iš metų labai kinta.

Pagrindinis integruoto monitoringo tikslas yra nustatyti ir įvertinti ekosistemos būklę, taip pat jos pokyčius per metus, atsižvelgiant į oro teršalų, ypač tokių, kaip azoto, sieros junginiai ir ozonas, įtaką bei poveikį aplinkai. Taigi atskirti natūralius ekosistemų pokyčius (fluktuacijas) nuo antropogeniškai sąlygotų pakeitimų ir yra pagrindinis integruoto monitoringo tikslas. Ozono koncentracijos atmosferos pažemio sluoksnyje monitoringas leidžia nustatyti ozono lygio pokyčius per ilgą laikotarpį, ozono kitimo tendenciją bei šaltinius, nustatyti kritinius jo lygius bei įvertinti galimą poveikį ekosistemoms. Ozono kon-



Pav. 1. Tipinė ozono koncentracijos laiko eilutė.

centracija atmosferos pažemio sluoksnyje Lietuvoje pagal integruoto monitoringo programos reikalavimus nuolat stebima trijose integruoto monitoringo stotyse: Aukštaitijos ir Žemaitijos nacionaliniuose parkuose (Rūgšteliškės, Plateliai) bei Preilos stotyje Kuršių Nerijos nacionaliniame parke. Visos jos pakankamai toli nuo stambių oro taršos šaltinių ir vadinamos foninėmis stotimis. Foninės ozono koncentracijos lygis yra svarbus rodiklis.

Vienas iš oficialių integruotam monitoringui mūsų šalyje keliamų uždavinių – tobulinti ir naudoti ekosistemos pokyčių, medžiagų masių balansui aprašyti skirtus modelius. Tačiau iki šiol Lietuvoje ozono koncentracijos tyrimai ir gautų duomenų analizė buvo atliekama remiantis aprašomąja bei palyginamąja statistika, daugiamečiais stebėjimais (ozono lygio tendencijos), taip pat ryšių tarp ozono koncentracijos ir meteorologinių faktorių tyrimas, didelį dėmesį skiriant vietinėms meteorologinėms sąlygoms. Daugiau dėmesio skiriama teršalams patenkantiems į atmosferą iš vietinių taršos šaltinių ar atnešamiems su oro masėmis iš šaltinių kitose šalyse bei jų daromai įtakai foniniam ozono koncentracijos lygiui.

Dauguma tyrinėtojų, ypač tų, kurie analizuoja rezultatus iš užterštų rajonų, randa ryškią ozono koncentracijos priklausomybę nuo temperatūros ir vėjo krypties bei greičio. Tačiau šios priklausomybės labai keičiasi. Gauti ozono koncentracijos priklausomybės nuo temperatūros gradiento tyrimų rezultatai parodė, kad vietinis fotocheminis ozono susidarymas Lietuvoje nelabai efektyvus ir ozono lygis tokioje oro masėje, jai pereinat Lietuvos teritoriją iš vakarų į rytus, sumažėja. Tai reiškia, kad ozono lygis didele dalimi formuojasi dėl dinaminių atmosferos procesų.

2. Metodai ir modeliavimas

Ozono koncentracijos kitimas yra labai sudėtingas ir sunkiai aprašomas fizikinis reiškinys. Įvairių meteorologinių faktorių įtaka dažnai nevienareikšmiška, didelę reikšmę turi vietinės sąlygos, bendra sinoptinė situacija. Todėl net trendo-ciklinės komponentės forma sunkiai aprašoma. Svarbiausias šio darbo uždavinys – sumodeliuoti pažemio sluoksnio ozono foninės koncentracijos kitimą.

Iki šiol Lietuvoje ozono koncentracijos tyrimui laiko eilučių, regresinės analizės metodai nebuvo naudojami. Tačiau daugiamečiai ozono lygio stebėjimai, ryšių tarp ozono koncentracijos ir meteorologinių bei atmosferos taršos faktorių analizė, sukaupta ozono tyrimo patirtis ir gauti rezultatai duoda tvirtą pagrindą tęsti šiuos darbus.

Formaliai pritaikyti laiko eilučių metodai neduoda gerų rezultatų. Pvz., Friedli ir Schuepbach atliktas tyrimas [6: TOR-10] rodo, kad ozono koncentracijos lygis aukštosiose vietovėse prastai modeliuojamas gana sudėtingu sezoniniu integruotu slenkančio vidurkio ir autoregresijos (SARIMA) modeliu. Norint sėkmingai pritaikyti regresinius modelius reikia tiksliai nustatyti ozono ir meteorologinių faktorių ryšius, o jie dažnai yra nevienareikšmiai, priklauso nuo vietinių sąlygų, ypač sudėtinga įvertinti vėjo greičio ir krypties įtaką ozono koncentracijai.

Foninės ozono koncentracijos duomenys iš Lietuvos integruoto oro kokybės monitoringo stočių pateikti laiko eilučių forma. Tokia eksperimentinių duomenų rinkimo forma

charakterizuoja vykdomų tyrimų pobūdį – stebėjimą laike, bei iš dalies nustato jų analizės metodus. Kartu iškyla su laiko eilučių analize susijusios problemos, viena iš jų – praleisti ar klaidingi stebėjimai, o tai taip pat nulemia metodų pasirinkimą. Prognozavimas, periodiškumų išaiškinimas, priklausomybių tyrimas ir panašūs uždaviniai sprendžiami statistiniais modeliais. Jų pagalba aprašomi reiškiniai, kuriuose yra atsitiktinių faktorių, neleidžiančių apibūdinti reiškinį deterministiškai. Laiko eilutės su trendo-cikline ir atsitiktine komponentėmis kaip tik yra tipinis tokių modelių pavyzdys.

Kaip jau buvo minėta, duomenys taip pat įtakoja matematinių metodų pasirinkimą ir jų pritaikymo galimybes. Nors ozono koncentracija pateikta laiko eilučių pavidalu, tačiau šiame darbe autoregresijos (AR), slenkančio vidurkio (MA) ar bendru atveju ARIMA modeliai nebus taikomi. Tam yra kelios priežastys: nestacionarios ozono koncentracijos laiko eilutės (1 pav.), duomenyse yra praleistų stebėjimo reikšmių, bei iš anksto numatyta modelių struktūra. Praleistos reikšmės laiko eilutėse – blogas reiškinys, sunku realizuoti laiko eilučių modelių algoritmus. Be ozono koncentracijos, duomenyse pateikti ir meteorologinių faktorių stebėjimai. Kadangi praktiškai visi jie daugiau ar mažiau įtakoja foninę ozono koncentraciją, juos bei jų sąveikas su ozono koncentracija tikslinga įtraukti į modelį.

Apsiribota tiesine regresijos funkcija. Modelio kintamieji – ozono koncentracija, meteorologiniai faktoriai (temperatūra, saulės aktyvumas, vėjo greitis ir kryptis) bei jų sąveikos su ozono koncentracija praeities laiko momentais.

Modelis konstruojamas remiantis tokiais samprotavimais, kad ozono koncentracija priklauso nuo:

- ozono kiekio praeityje;
- ozono kiekio praeityje ir įvairių meteorologinių faktorių tarpusavio sąveikos;
- per meteorologinius faktorius pasireiškiančios vietinių sąlygų įtakos.

Tokiu būdu įtraukiant į modelį įvairių faktorių tarpusavio sąveikas siekiama įvertinti žymiai sudėtingesnes netiesines priklausomybes, jų galimą poveikį ozono koncentracijai, tačiau koeficientų atžvilgiu regresijos funkcija išlieka tiesine.

Ozono koncentracijos kitimas yra sezoninis reiškinys. Žinoma, kad pagrindinis ozono šaltinis troposferoje yra su vertikaliais oro masių srautais atkeliaujantis stratosferos ozonas, ir jis susijęs su bendru sezoniniu ozono kiekiu kitimu atmosferoje, o tai yra viena iš priežasčių daryti atskirus modelius žiemos (spalio–kovo mėn.) ir vasaros (balandžio–rugsėjo mėn.) sezonams. Foniniam ozono koncentracijos lygiui labai svarbus 24 val. periodas. Jis labai glaudžiai susijęs su vietinėmis geografinėmis ir meteorologinėmis stočių sąlygomis, taip pat priklauso nuo metų sezono. Tokiu būdu ozono koncentracija iškart priklauso nuo dviejų ryškių ciklų: žiemos–vasaros ir dienos–nakties.

Foninė ozono koncentracija priklauso ir nuo prieš tai buvusio ozono kiekio ir tokių meteorologinių faktorių, kurie skatina arba lėtina tolimesnį ozono susidarymą, tarpusavio sąveikos. Šitos sąveikos sudaromos kaip ozono koncentracijos ir meteorologinių kintamųjų sandaugos ir į modelį įtraukiamos kaip atskiri kintamieji.

Ryškos ozono koncentracijos priklausomybės nuo vėjo krypties bei greičio. Tačiau jos labai nepastovios ir priklauso nuo kitų meteorologijų faktorių. Tos pačios krypties ir

greičio vėjas gali tiek sumažinti, tiek padidinti foninę ozono koncentraciją. Didelę ozono koncentraciją gali sąlygoti tiek švaraus arktinio oro, tiek užterštų oro masių pernašos. Panagrinėjus sąryšį tarp ozono valandinių koncentracijų ir vėjo greičio pastebėta, kad pajūryje, kai mažas vėjo greitis (mažiau nei 2 m/s), didelės ozono koncentracijos paprastai neregistruojamos, o miškingoje vietovėje kaip tik, kai mažas vėjo greitis, t.y. nedidelis oro maišymasis, buvo pastebėtos didžiausios ozono koncentracijos. Labai sunku tiksliai įvertinti vėjo greičio ir krypties įtaką.

Šiame darbe ozono koncentracija modeliuojama vienerių metų ribose. Išskirtos trys modelių grupės:

- ozono koncentracija modeliuojama iš ozono lygio praityje ir meteorologinių faktorių,
- ozono koncentracija modeliuojama tik iš meteorologinių faktorių,
- kai modeliuojami ozono koncentracijos pokyčiai.

Modeliavimui naudojamas klasikinis tiesinės regresijos modelis:

$$\begin{aligned} Y_i &= \theta_0 + \theta_1 x_i^{(1)} + \theta_2 x_i^{(2)} + \theta_p x_i^{(p)} + \varepsilon_i, \quad i = \overline{1, n}; \\ E\varepsilon_i &= 0, \quad i = \overline{1, n} \\ E(\varepsilon_i, \varepsilon_j) &= \begin{cases} \sigma^2, & i = j, \\ 0, & i \neq j; \end{cases} \end{aligned} \quad (1)$$

$(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(p)})$ – neatsitiktiniai kintamieji;

Tačiau pasirinktuose ozono koncentracijos modeliuose reikia įvertinti ir tam tikrų faktorių tarpusavio sąveikas. Jos formuojamos kaip regresorių sandaugos (2). Tada tokios į modelį įtrauktos tarpusavio sąveikos užrašomos kaip atskiras regresorius. Galutinai suformuotų kintamųjų atžvilgiu sudaromas naujas tiesinis regresijos modelis (3).

$$Y_i = \theta_0 + \theta_1 x_i^{(1)} x_i^{(2)} + \varepsilon_i; \quad (2)$$

$$Y_i = \theta_0 + \theta_1 z_i^{(1)} + \varepsilon_i, \quad z_i^{(1)} = x_i^{(1)} x_i^{(2)}. \quad (3)$$

Pradinis modelis:

$$O_t = a_0 + O_{t-1} \cdot MF^1 + O^{10} + MF^{12} + VK^{21} + \varepsilon_t,$$

kur:

$$\begin{aligned} MF^i &= a_i T_t + a_{i+1} T_{t-1} + a_{i+2} T_{t-2} + a_{i+3} S_t + \dots + a_{i+7} V_{t-1} + a_{i+8} V_{t-2}, \\ O^i &= a_i O_{t-1} + a_{i+1} O_{t-2}, \\ VK^i &= a_i K1_t + a_{i+1} K1_{t-1} + a_{i+2} K1_{t-2} + \dots + a_{i+21} K8_t + a_{i+22} K8_{t-1} \\ &\quad + a_{i+23} K8_{t-2}. \end{aligned} \quad (4)$$

Čia: MF – meteorologinių faktorių dedamoji; T – oro temperatūra, S – saulės aktyvumas, V – vidutinis vėjo greitis;

- O – ozono koncentracija,
- VK – vėjo krypčių dedamoji,
- ε_t – atsitiktinė dedamoji;

Oro srautų trajektorijų suskirstymo metodas naudojamas daugelio ozono tyrinėtojų. Taip siekiama išsiaiškinti, iš kokių regionų atnešamos oro masės padidina ozono lygį. Lietuvoje visos oro srautų trajektorijos suskirstytos į 5 sektorius:

- 0 – Lietuvos teritorija;
- 1 – šiaurės–vakarų kryptis (Skandinavija);
- 2 – pietvakarių kryptis (Rytų Europa);
- 3 – pietryčių kryptis (Ukraina);
- 4 – šiaurės–rytų kryptis (Norvegija ir šiaurinė Rusijos dalis);

Siekiant kuo tiksliau įvertinti konkrečių vėjo krypčių įtaką, visos galimos kryptys (360 laipsnių) padalintos į 8 lygius sektorius ir sukurti papildomi binariniai krypties kintamieji, modelio regresoriai: K1 (šiaurės), K2 (šiaurės–rytų) ir kt. Jie lygūs 1 jei vėjo kryptis patenka į atitinkamą sektorių ir 0 – jei nepatenka.

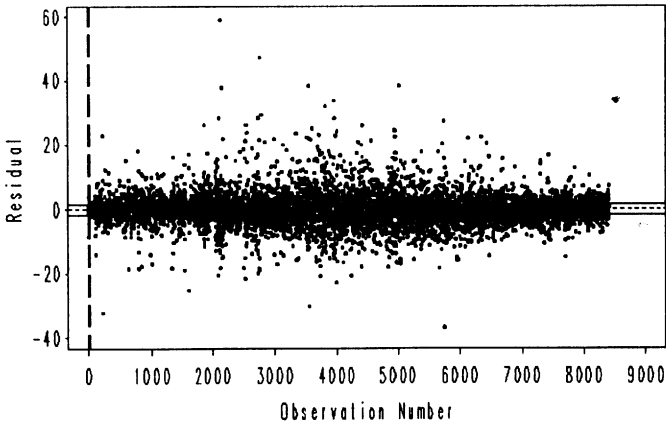
Modelio parametrai įvertinami mažiausių kvadratų metodu, pateikiamos kai kurios modelio adekvatumo ir tikslumo statistikos bei modelio liekanų grafikai. Visų trijų grupių modeliai parenkami žiemos ir vasaros sezonų duomenų rinkiniams, bei bendras modelis pagal visų metų duomenis (1 lentelė).

Suprantama, kad pirmos grupės modeliai tiksliausiai nusako ozono kitimą, jais gauti labai geri rezultatai. Bendro modelio liekanų išsibarstymas vasaros sezonu didesnis nei žiema. Vadinasi yra ir modelių neįtrauktų faktorių, kurie leistų dar geriau prognozuoti ozono koncentraciją (2 pav.). Panaši situacija ir su modeliu ozono koncentracijos skirtumams, nors statistikos R^2 reikšmė mažesnė. Tokiu modeliu galima paaiškinti iki 58% ozono koncentracijos pokyčio per valandą.

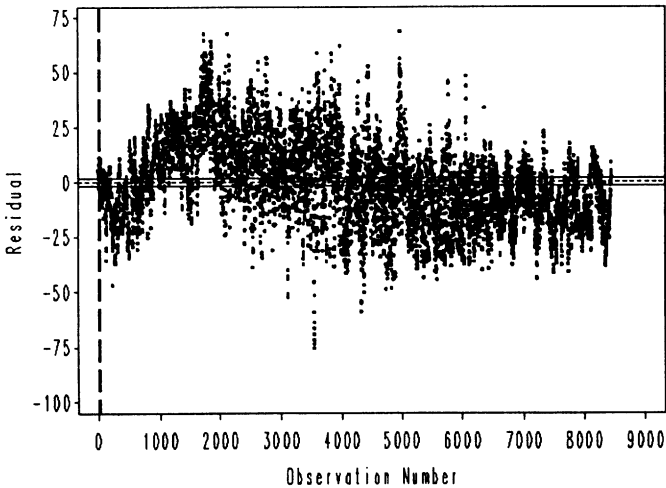
Meteorologiniu modeliu gerai prognozuojamas fotocheminis ozono susidarymas, tačiau silpnai įvertinama metinė ozono konc. eiga, todėl liekanos labai išsibarsčiusios, koreliuotos ir turi tipišką metinę eigą (3 pav.).

1 lentelė. Ozono koncentracijos modelių charakteristikos

Modelis	Sezonas	Modelio kintamųjų skaičius, N	Statistika R^2	Liekanų koreliacijos koef., $r(1)$	Durbin–Watson statistika, DW
Bendras ozono modelis	vasarai	19	0,99	0,01	1,97
	žiemai	19	0,99	0,01	1,97
	metams	22	0,99	0,01	1,97
Meteorologinis ozono modelis	vasarai	10	0,92	0,89	0,22
	žiemai	11	0,94	0,95	0,11
	metams	10	0,91	0,92	0,16
Modelis ozono koncentracijos skirtumams	vasarai	18	0,58	0,19	1,62
	žiemai	17	0,29	0,34	1,33
	metams	20	0,52	0,24	1,52



2 pav. Bendro modelio metams liekanos.



3 pav. Meteorologinio modelio metams liekanos.

3. Kiti uždaviniai

Modeliai pasitarnavo ieškant klaidų ozono koncentracijos duomenyse. Didelis liekanų nuokrypis dažnu atveju nurodo į tokias vietas duomenyse, kada sugedus registravimo prietaisui ozono koncentracija registruojama neteisingai. Tokius stebėjimus tenka pašalinti iš duomenų.

Siekiant patobulinti gautus modelius, reikėtų tiksliau įvertinti meteorologinių faktorių, ypač vėjo greičio ir krypties, jų kombinacijų įtaką ozono koncentracijai, įtraukti į modelį svarbų regresorių – oro drėgnumą (jo nebuvo dėl duomenų stokos).

Kitas svarbus uždavinys – teoriškai pagrįsti, kad ozono koncentracijos įvairiose stovyse patikimai skiriasi. Tam reikėtų formuluoti ir patikrinti hipotezę apie skirtingų stočių ozono koncentracijos modelių parametų lygybę.

Literatūra

- [1] R. Girgždienė, A. Girgždys, Spatial and temporal variability in ozone concentration level at two Lithuanian stations, *Water, Air, and Soil Pollution*, **130**, 1547–1552 (2001).
- [2] R. Girgždienė, A. Girgždys, A. Mikelinskienė, Trend analysis of ozone in Lithuania, A contribution to subproject TOR-2, *Proceedings of EUROTRAC Symposium*, 255–259, (1998).
- [3] Lietuvos Respublikos Sveikatos apsaugos ministerijos Higienos instituto mokslo darbai, Serija: *Ekologinė medicina*, tomas 1, Sveikata ir aplinka: straipsnių rinkinys, Vilnius, 1996.
- [4] K. Ligutaitė, *Ozono prietaisų gradavimas ir taikymas monitoringo sistemose*, baigiamasis magistro darbas, aplinkos inžinerijos ir kraštovarkos mokslo kryptis (04T), aplinkos apsauga, Vilnius (2001).
- [5] *Scientific Assessment of Ozone Depletion*, Global ozone research and monitoring project, report No. 37, World Meteorological Organization (1995).
- [6] Transport and chemical transformation in the troposphere, *EUROTRAC-2 Symposium* (2000).

Statistical modelling of ozone concentration in troposphere

R. Girgždienė, T. Rekašius

Statistical analysis of the ozone concentration data received from the background monitoring stations located in Lithuania is performed. The goal of the study is modelling of ozone background concentration trend-cycle component. The regression models obtained include ozone concentrations at foregoing moments, local meteorological factors (such as air temperature, solar activity, wind speed and its direction, ect.), their lags and interactions.