

Статистическое моделирование максимальных суточных концентраций приземного озона

А.М. Звягинцев¹, И.Б. Беликов², Н.Ф. Еланский², Г. Какаджанова¹,
И.Н. Кузнецова³, О.А. Тарасова¹, И.Ю. Шалыгина^{3*}

¹ГУ «Центральная аэрологическая обсерватория» Росгидромета
141700, Московская обл., г. Долгопрудный, ул. Первомайская, 3

²Институт физики атмосферы им. А.М. Обухова РАН
109017, г. Москва, Пыжевский пер., 3

³Гидрометеорологический научно-исследовательский центр РФ
123242, г. Москва, Б. Предтеченский пер., 9-13

Поступила в редакцию 15.06.2009 г.

Предложена статистическая модель максимальных разовых концентраций приземного озона, основанная на связи с их предикторами. Среди предикторов рассмотрены температура, относительная влажность, средняя скорость ветра в пограничном слое атмосферы, концентрации других малых газовых составляющих, а также «метеорологический потенциал загрязнения», которым можно характеризовать неблагоприятные (для рассеяния загрязнений) метеорологические условия. Статистическая модель пригодна для прогноза уровней озона, использует текущие измерения метеопараметров, а также их прогнозы. Наиболее существенными предикторами для приземного озона в Московском регионе являются «метеорологический потенциал загрязнения» и аномалии (отклонения от норм) температуры, относительной влажности, а также приземного озона, наблюдаемого в предшествующие сутки. Модель проверена на данных, полученных для Московского региона и ряда германских станций. Такая модель лучше «климатической» и «инерционной» моделей и позволяет достичь коэффициента детерминации аномалий приземного озона около 50%.

Ключевые слова: приземный озон, статистическое моделирование, прогнозирование качества воздуха; surface ozone, statistical modeling, air quality forecasting.

Введение

Приземный озон (далее — озон) входит в пятерку основных соединений, концентрации которых в приземном слое атмосферы (прежде всего средние за 1 или 8 ч), согласно рекомендациям Всемирной организации здравоохранения, определяют качество воздуха. Большинство неудовлетворительных оценок качества воздуха в Северной Америке и Западной Европе связано с превышением предельно допустимых концентраций (ПДК) озона. Такие превышения обусловлены интенсивной фотохимической генерацией озона под действием солнечного облучения при наличии в воздухе его предшественников — оксидов азота (NO_x), оксида углерода (CO) и угле-

водородов [1], причем скорость этой генерации нелинейным и немонотонным образом зависит от скоростей эмиссии предшественников [1, 2].

Случаи превышения предельно допустимых концентраций озона в России зарегистрированы, например, в Московском регионе [3, 4], на юге Западной Сибири [5], в Хабаровском крае [6] и на других территориях, причем наиболее значительные из них имели место в период пожаров на больших территориях (лесных, торфяных, степных) [3, 5] или при дальнейшей адвекции загрязненных воздушных масс [6]. В частности, эпизод 2002 г. в Московском регионе был одним из самых значительных в Европе за всю историю наблюдений — такие высокие концентрации озона наблюдались лишь на юге Германии и южнее (в Италии, Греции и др.) и никогда севернее 55° с.ш. В связи с этим выявление количественных связей между концентрацией озона и атмосферными и другими параметрами представляет собой не только научную, но и в целом актуальную для России практическую задачу, решение которой может способствовать прогнозу этого опасного загрязнителя атмосферы.

* Анатолий Михайлович Звягинцев (azvyagintsev@cao-ghms.ru); Игорь Борисович Беликов (uawgr@mail.ru); Николай Филиппович Еланский (n.f.elansky@mail.ru); Гульджихан Какаджанова (azvyagintsev@cao-ghms.ru); Ирина Николаевна Кузнецова (muza@mecom.ru); Оксана Алексеевна Тарасова (OTarasova@yandex.ru); Ирина Юрьевна Шалыгина (irus76@mail.ru).

В настоящее время в Интернете действуют несколько сайтов (например, <http://www.eumetnet.eu.org>, <http://airnow.gov>), на которых приводятся прогнозы концентрации озона в Западной Европе и в США, однако на территорию Центральной России такие прогнозы либо не распространяются, либо недостаточно точны (<http://db.eurad.uni-koeln.de>). Для прогнозирования используют данные текущего состояния атмосферы (значения метеопараметров и концентраций ее основных газовых составляющих — расчетные или измеренные). Для расчетов применяют транспортно-фотохимические и дисперсионные модели различного масштаба, включающие в состав в качестве ядра оперативные модели прогноза погоды типа MM5, HIRLAM или GEM/LAM [7].

Особенностью России являются меньшие, чем в Западной Европе и Северной Америке, концентрации предшественников озона в атмосфере, что во многом связано с меньшими плотностями населения, автотранспорта и промышленных предприятий. Поэтому влияние естественных эмиссий углеводородов на территории России на генерацию озона может быть сравнимым или даже превышать влияние антропогенных, а концентрация озона в значительной мере обусловлена метеорологическими факторами [8, 9].

В настоящей статье представлена эмпирическая модель максимальных за сутки уровней озона, основанная на связи озона прежде всего с метеорологическими параметрами и пригодная для прогнозирования. Под максимальными за сутки уровнями озона будем понимать максимальные средние за 1 ч концентрации озона, регламентируемые нормативными документами [10]. Такая эмпирическая модель может также служить для сопоставления с разрабатываемыми транспортно-фотохимическими моделями.

Описание модели и данных для ее проверки

Содержание озона в приземном слое зависит от соотношения скоростей его переноса (горизонтального и вертикального), фотохимической генерации, а также фотохимического и химического разрушения [1, 11]. В средних и высоких широтах суточный ход озона в значительной степени определяется вертикальным перемешиванием, которое зависит от вертикального градиента температуры [9, 12]. Скорости фотохимического образования и разрушения озона зависят от солнечной облученности и концентраций предшественников, в первую очередь от окислов азота (NO и NO_2) и углеводородов (прежде всего неметановых; озonoобразующие способности различных углеводородов сильно различаются). Разрушение озона в приземном слое идет на твердых поверхностях (сухое осаждение), а также в химических и фотохимических реакциях в воздухе.

В период с апреля по сентябрь рост концентраций озона в средних широтах за счет фотохимической генерации обычно ограничен скоростями поступления предшественников озона. Для расчета по фо-

тохимическим моделям концентраций NO_x и CO требуются знания концентраций окислов азота и отдельных органических соединений (особенно тех, которые обладают большой озonoобразующей способностью); зависимость концентрации озона от концентраций и эмиссий предшественников получается достаточно сложной [1, 2]. Соединения с большой озonoобразующей способностью стандартными для России системами контроля качества воздуха не измеряются, а по порядку величины их содержание в общем количестве органических соединений не превышает, как правило, единиц процентов. Значительная часть таких соединений имеет биогенное происхождение (интенсивность их выделения растениями, в первую очередь изопрена и монотерпенов, зависит от окружающей температуры и влажности). Определяющая роль таких эмиссий в возникновении многих эпизодов с высокими концентрациями озона была осознана лишь в последние 10–20 лет [1].

У окислов азота, выступающих в роли катализаторов при фотохимическом образовании озона, концентрации в отдаленных районах слишком малы, чтобы вызвать заметную генерацию озона, а в населенных районах, где они превышают 5 млрд^{-1} , скорость генерации озона, как правило, слабо зависит от их значений и ограничена нехваткой углеводородов [1, 2].

Из метеорологических факторов на концентрацию озона сильнее всего влияет температура воздуха [8, 13–19]. Она обуславливает интенсивность вертикального перемешивания, эмиссии предшественников озона и скорости химических реакций. Слабее, но тем не менее ощутимо, особенно при определенных условиях, влияют влажность воздуха, а также скорость и направление ветра [8, 20, 21]. При высокой влажности увеличивается содержание влажных аэрозолей, на которых озон разрушается особенно быстро. В различных условиях ветер может как увеличивать содержание озона, так и уменьшать его, влияя, например, на интенсивность вертикального перемешивания и концентрации предшественников озона [21].

Предлагаемая эмпирическая модель основана на наличии эмпирически устанавливаемых связей между концентрацией озона и основными предикторами, в число которых могут входить метеорологические параметры, солнечная освещенность, характеристики газового состава атмосферы, а также концентрации самого озона в предшествующие дни. Наличие таких связей впервые было установлено при анализе наблюдений концентрации озона на американских и западноевропейских станциях [14–16] и подтверждено анализом данных измерений на территории России [8, 19, 20].

При трудностях с получением достоверной информации о концентрациях в воздухе малых газовых составляющих — предшественников озона, модель может оказаться достаточно эффективной, если антропогенные эмиссии этих предшественников меняются сравнительно слабо от дня ко дню и от года к году, а естественные эмиссии и процессы накопления и рассеяния в приземном слое атмосферы

обусловлены, главным образом, метеорологической ситуацией. При небольших периодах времени (от нескольких суток до месяцев) озон и метеопараметры заметно коррелируют между собой. Но поскольку сроки экстремумов сезонного хода озона и метеопараметров не совпадают, то в эмпирической модели целесообразно использовать не абсолютные их значения, а отклонения от «норм» (средних многолетних величин). К тому же именно отклонения от «норм» распределены по закону, близкому к нормальному, что дает возможность построить модель в форме линейной регрессии.

Эмпирическая зависимость максимальной среднесуточной концентрации озона $C(d)$ от предикторов описывается следующим выражением:

$$C(d) = C_0(d) + \sum_i k_i(d-i)\Delta C(d-i) + \sum_{j,l} k_{jl}\Delta P_j(d-l) + r(d), \quad (1)$$

где $C_0(d)$ – средняя многолетняя («норма») концентрация озона, зависящая только от юлианского дня d ; $\Delta C(d) = C(d) - C_0(d)$ – отклонение наблюдаемой концентрации озона от «нормы» в день d ; $k_i(d-i)$ – коэффициент авторегрессии i -го порядка для наблюдаемых отклонений концентрации озона за i дней ($i = 1, 2, 3, \dots$) до прогноза; $\Delta P_j(d-l) = P_j(d-l) - P_{j0}(d-l)$ – отклонение прогнозируемых или наблюдаемых значений предиктора $P_j(d-l)$ от «нормы» $P_{j0}(d-l)$ в день $(d-l)$; $k_{jl}(d-l)$ – коэффициент регрессии для отклонений в день l ($l = 0, 1, 2$) до дня прогноза j -го предиктора $\Delta P_j(d-l)$ (например, для температуры, концентрации NO_2 и др.); $r(d)$ – остаток, среднее которого равно 0, а дисперсия существенно меньше дисперсии исходного ряда $C(d)$.

Регрессионный коэффициент $k_{jl}(d)$ для предиктора $P_j(d-l)$ имеет вид

$$k_{jl}(d-l) = k_{j0} + k_{js} \sin \frac{2\pi(d-l)}{365} + k_{jc} \cos \frac{2\pi(d-l)}{365}, \quad (2)$$

где k_{j0} , k_{js} и k_{jc} – постоянные. Такое представление позволяет учесть наличие сезонного хода у этих коэффициентов.

Предикторами в формуле (1) могут являться основные метеопараметры (температура, максимальная за сутки и в отдельные сроки, относительная влажность, минимальная или также в отдельный срок, характеристики ветра у земной поверхности и(или) на различных уровнях пограничного слоя), концентрации различных малых газовых составляющих (в первую очередь окислов азота, оксида углерода, различных углеводов и др.), а также другие величины. «Нормы» для концентраций озона и предикторов, необходимые для использования формулы (1), получают сглаживанием их ходов за несколько последних полных лет наблюдений.

Средний сглаженный сезонный ход предиктанта – для концентрации озона $C_0(d)$ – в зависимости от юлианского дня d (для упрощения вычисле-

ний сутки 29 февраля в високосные годы можно не учитывать) запишем в виде

$$C_0(d) = C_{00} + \sum_{i=1}^3 \left[A_i \sin \frac{2\pi id}{365} + B_i \cos \frac{2\pi id}{365} \right], \quad (3)$$

где C_{00} – постоянная (оценка средней годовой концентрации); A_i и B_i – коэффициенты при i -х гармониках годового хода.

Для станций средних и высоких широт коэффициенты при основной гармонике A_1 и(или) B_1 существенно (в несколько раз) превосходят коэффициенты при высших гармониках [8], поэтому амплитуда годового хода концентрации озона определяется, в основном, коэффициентами A_1 и B_1 (их геометрической суммой). Коэффициенты при высших гармониках A_i и B_i ($i > 1$) существенно влияют, главным образом, на положения максимума и минимума в сезонном ходе концентрации озона. «Нормы» для предикторов вычисляют по формуле, аналогичной (3).

Проверка модели проведена по данным трех германских станций: Дойсельбах (49°46' с.ш.; 7°03' в.д.; 480 м над у.м.), Вальдхоф (52°48' с.ш.; 10°46' в.д.; 74 м над у.м.) и Вестерланд (54°56' с.ш.; 8°19' в.д.; 12 м над у.м.) и московской станции (55°45' с.ш.; 37°34' в.д.; 190 м над у.м.) ИФА РАН [3] в предположении «совершенного» прогноза метеопараметров. Данные по концентрации озона (максимальные в течение суток, оцененные по среднечасовым концентрациям) и метеопараметрам (приземная температура, относительная влажность, направление и скорость ветра) на германских станциях заимствованы в Мировом центре данных парниковых газов (<http://gaw.kishou.go.jp>). Для Москвы использованы данные Мировой метеорологической станции № 27612 (расстояние между пунктами наблюдений озона и метеопараметров составляет около 18 км). В качестве предикторов использованы максимальная за сутки среднечасовая температура в приземном слое воздуха, суточная амплитуда температуры, относительная влажность и скорость ветра в 15 ч местного времени, которые также входят в число наиболее эффективных метеорологических предикторов концентрации озона [8, 13–20]. Кроме того, для Москвы в качестве предикторов опробованы концентрации оксидов азота и оксида углерода, измеренные на той же станции ИФА РАН.

Апробация модели и возможностей ее использования

Предпосылкой для успешной применимости модели являются представленные в табл. 1 коэффициенты корреляции между остатками максимальных суточных концентраций озона и различных регрессоров (отметим, что ряды остатков метеопараметров, в первую очередь температуры и влажности, в значительной мере зависимы и потому коэффициенты корреляции не совсем адекватно отражают влияние этих метеопараметров на озон). Из близости коэффициентов

корреляции на различных станциях можно предположить, что качество измерений озона и метеопараметров на всех рассмотренных станциях также близко и поведение озона там в значительной степени определяется общими закономерностями.

Таблица 1

Коэффициенты корреляции между остатками максимальных суточных концентраций озона и различных регрессоров за год в целом и различные сезоны на различных станциях за 3-летний период

Время года	Станция	$C-C_{-1}$	$C-T$	$C-H$	$C-w$
Год в целом	Москва	0,59	0,49	-0,44	-0,1
	Дойсельбах	0,6	0,65	-0,45	-0,03
	Вальдхоф	0,54	0,61	-0,46	0,16
	Вестерланд	0,52	0,41	-0,25	0,17
Зима	Москва	0,46	0,34	-0,09	0,14
	Дойсельбах	0,46	0,28	-0,08	0,42
	Вальдхоф	0,47	0,25	-0,19	0,51
	Вестерланд	0,5	0,33	-0,23	0,38
Весна	Москва	0,52	0,65	-0,43	-0,14
	Дойсельбах	0,44	0,65	-0,57	-0,04
	Вальдхоф	0,43	0,63	-0,46	0,15
	Вестерланд	0,39	0,22	-0,27	0,11
Лето	Москва	0,55	0,73	-0,48	-0,15
	Дойсельбах	0,6	0,84	-0,53	-0,24
	Вальдхоф	0,56	0,83	-0,54	-0,11
	Вестерланд	0,48	0,62	-0,18	-0,25
Осень	Москва	0,43	0,21	-0,44	-0,14
	Дойсельбах	0,62	0,65	-0,48	-0,05
	Вальдхоф	0,49	0,48	-0,52	0,22
	Вестерланд	0,5	0,23	-0,31	0,32

Примечания: $C-C_{-1}$ – коэффициент корреляции между остатками концентраций озона в текущие и предыдущие сутки; $C-T$ – коэффициент корреляции между остатками концентрации озона и температуры; $C-H$ – коэффициент корреляции между остатками концентрации озона и относительной влажности; $C-w$ – коэффициент корреляции между остатками концентрации озона и скорости ветра.

Для германских станций в качестве предикторов наиболее целесообразным оказалось использовать наблюдаемый уровень озона в предыдущий день и «прогнозируемые» максимальную температуру и минимальную относительную влажность, что согласуется с результатами работ [8, 15]. Скорость ветра в приземном слое оказывается статистически значимым предиктором лишь на сравнительно небольших временных интервалах (как правило, в зимний и летний периоды), а направление ветра на концентрацию озона влияет еще слабее. Коэффициенты, присутствующие в выражениях (1)–(3), для германских станций были оценены по данным наблюдений в 1999–2001 гг. Во всех рассмотренных случаях оказалось достаточным ограничиться авторегрессионным членом лишь первого порядка.

Лучшим доказательством применимости модели является возможность ее использования для прогнозирования, т.е. когда численные коэффициенты модели вычисляются для одного периода времени, а проверка качества модели производится для дру-

гого периода. Качество «прогнозирования» для германских станций было оценено по данным 2002 и 2003 гг. Здесь за все время наблюдений с 1990 г. самые многочисленные эпизоды с опасными для здоровья концентрациями озона наблюдались в 2003 г. [22], 2002 г. был близок к нормальному. Эффективность модели для германских станций проиллюстрирована на рис. 1. Если стандартное отклонение ряда отклонений от «норм» (которое может рассматриваться как «ошибка климатического прогноза») составляет $\sim 25 \text{ мкг} \cdot \text{м}^{-3}$, то стандартное отклонение ряда ошибок модели составляет $\sim 15 \text{ мкг} \cdot \text{м}^{-3}$. Из рис. 1 следует, что ошибки «прогнозов» на +24 ч в 2002–2003 гг. заметно меньше межсуточной изменчивости максимальных уровней озона. Для Москвы «нормы» и регрессионные коэффициенты рассчитаны по данным наблюдений 2003–2004 гг., а «прогнозирование» осуществляли на 2002 и 2005 гг.

Такой выбор связан с тем, что в 2003–2005 гг. здесь значительных погодных аномалий не было, а лето 2002 г. было аномально сухим и жарким (это привело к многочисленным лесным и торфяным пожарам в регионе и сопровождалось наибольшими за все время наблюдений концентрациями озона [3]).

Если все рассмотренные германские станции расположены в сельской местности, где на расстояниях около 100 км уровни озона отличаются мало [23, 24], то распределение озона в крупных мегаполисах более неоднородно. Значительные неоднородности возникают обычно в районах высоких выбросов загрязнений, в частности вблизи крупных автомагистралей, где из-за эмиссий оксида азота концентрации озона заметно меньше, чем вдали от них.

Зарубежный опыт [23] и наши исследования с помощью переносного малогабаритного измерителя озона производства ПБОУЛ «Рудаков» [25] показали, что в Москве наиболее высокие уровни озона возникают в районах парков и других территорий, удаленных от автомагистралей и промышленных предприятий на несколько сотен метров и используемых населением для отдыха и прогулок. Такова ситуация и в районе метеообсерватории МГУ; этому благоприятствует его расположение на одном из возвышенных мест в Москве – Воробьевых горах. По нашим данным, измеряемые в районе метеообсерватории МГУ концентрации озона в периоды ее высоких уровней отличаются от максимальных по Москве не более чем на 10%. Подробное описание распределения озона по Москве будет приведено в другой публикации.

Результаты «прогнозирования» озона в Московском регионе на 2005 г. (рис. 2, б) на +24 ч можно признать удовлетворительными, хотя летом 2002 г. имели место несколько эпизодов, прогнозы для которых ухудшают общую картину (рис. 2, а).

Анализ этих эпизодов показал [3, 13], что они были связаны с интенсивными лесными и торфяными пожарами в Московском регионе, которые значительно изменили обычный для региона газовый состав атмосферы. Наиболее эффективными предикторами по результатам моделирования (рис. 2)

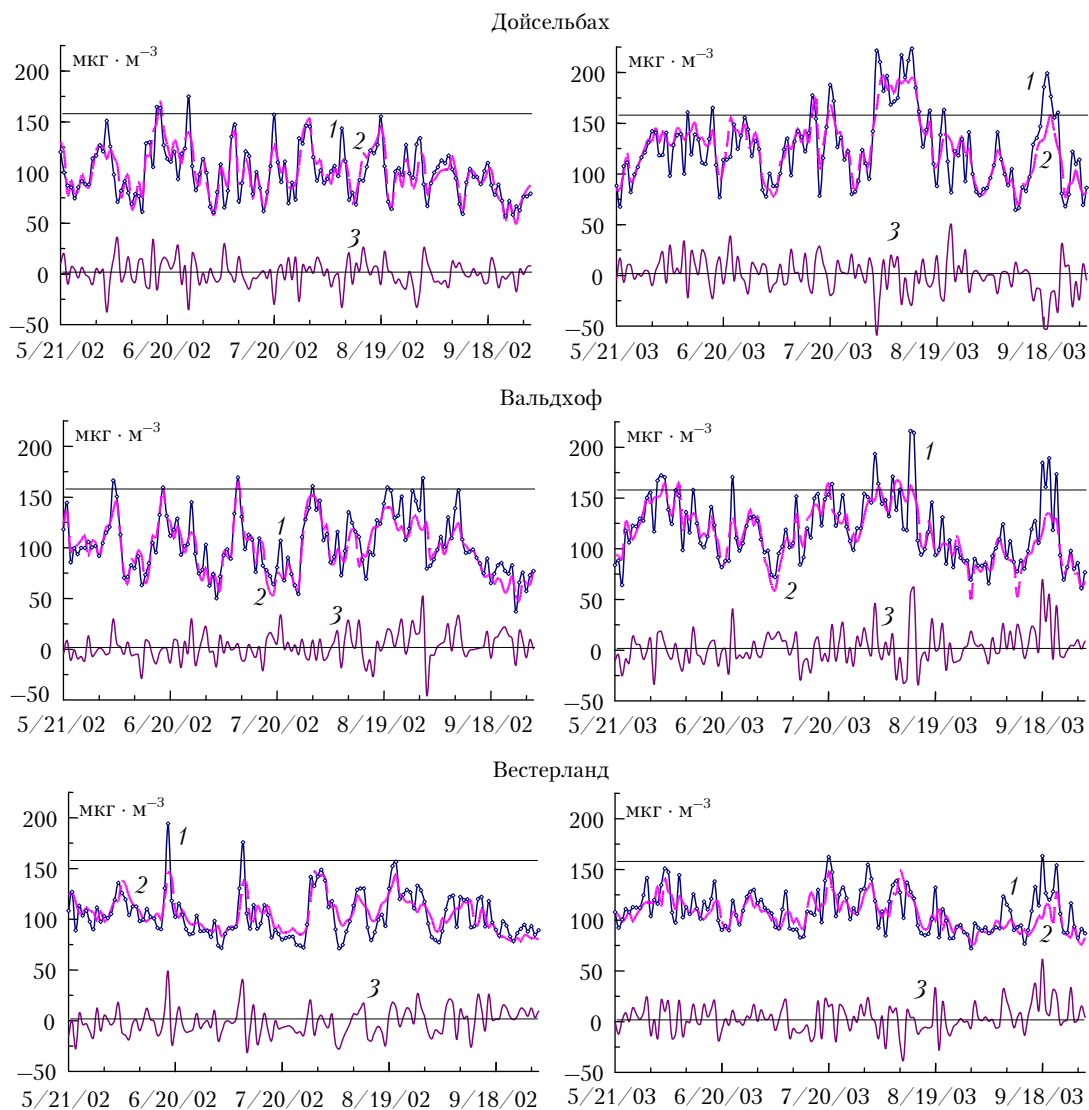


Рис. 1. Результаты наблюдений (1), прогнозируемые максимальные средние за 1 ч концентрации приземного озона с использованием эмпирической модели (2) и их разность (3) для германских станций для 2002 и 2003 гг. Горизонтальная прямая — максимальная разовая ПДК озона (160 $\text{мкг} \cdot \text{м}^{-3}$), установленная для населенных мест России

оказались отклонения от нормы максимального уровня озона в предшествующий день, а также максимальной температуры и минимальной влажности в текущий день. Расширение состава модели за счет включения других метеорологических предикторов, например суточной амплитуды температур и скорости ветра (дневная скорость ветра взята на уровне 925 гПа как наиболее эффективный ветровой предиктор [8, 21]), практически незначительно в абсолютных единицах, хотя и статистически значимо улучшает качество модели. Влияние метеорологических предикторов имеет ярко выраженную сезонную зависимость: максимальное влияние температуры наблюдается в летний период, зимой оно невелико, для относительной влажности ситуация противоположная.

Для улучшения соответствия между модельными концентрациями и наблюдениями, особенно в перио-

ды неблагоприятных для рассеяния загрязнений метеорологических условий внутри города, для ст. Москва был использован дополнительный параметр — «метеорологический потенциал загрязнения» атмосферы (МПЗ), разработанный в Гидрометцентре РФ. Индекс МПЗ изменяется в диапазоне от 0,4 до 1 и имеет наибольшие значения в теплый сезон при аномально высоких температурах и малых скоростях приземного ветра на уровне 925 гПа (не более $3 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$). Будучи примененным в качестве предиктора к временным рядам озона в период 2002–2005 гг., этот индекс оказался наиболее эффективным. Его эффективность в прогнозировании на +24 ч проиллюстрирована на рис. 2, а в применении к летне-осеннему периоду 2002 г. (на рис. 2, б для 2005 г. различие статистически значимое, хотя и менее наглядное).

Модели прогноза максимальной одночасовой концентрации озона $C'(d)$ в $\text{мкг} \cdot \text{м}^{-3}$ на юлианский

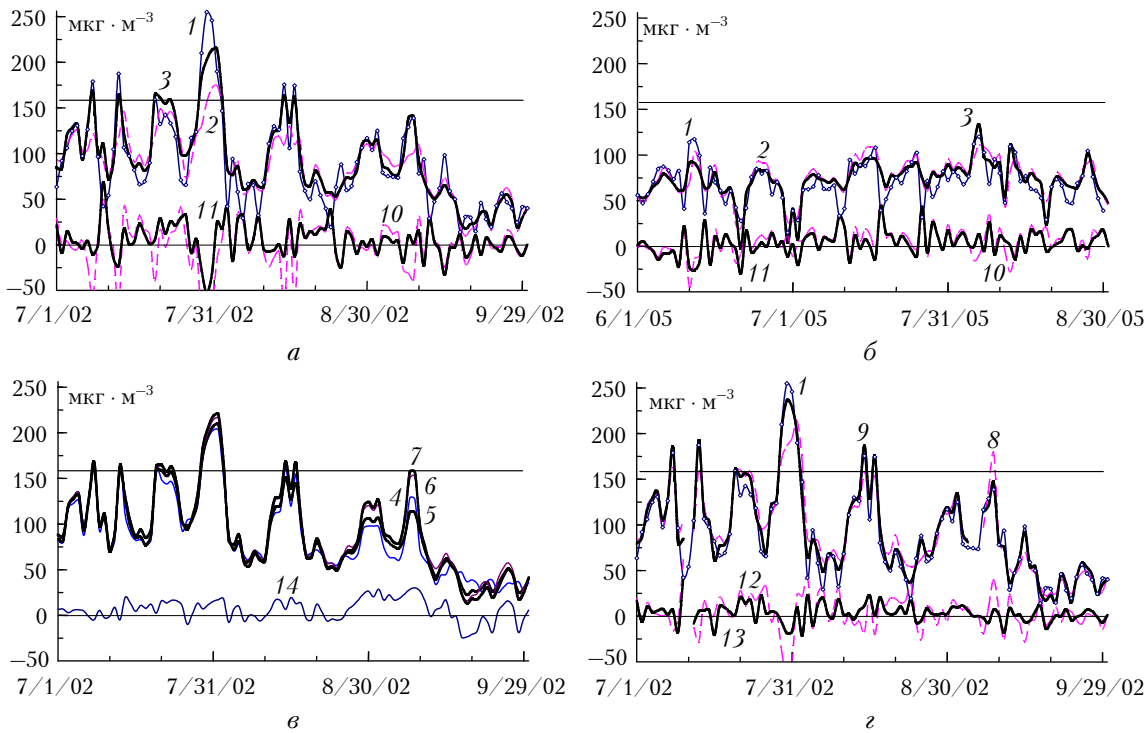


Рис. 2. Результаты наблюдений (1), моделей прогноза (2–9) максимальных средних за 1 ч концентраций приземного озона для станции ИФА РАН (55°45' с.ш.; 37°34' в.д.; 190 м над у.м.) и ошибки прогнозов для различных моделей (10–13): *a* и *б* – предикторами модели (2) являются озон в предыдущий день, прогнозы температуры и относительной влажности, а модели (3) – те же и МПЗ; кривые 10 и 11 – ошибки для моделей 2 и 3 соответственно; коэффициенты в формулах вычислены по данным 2003–2004 гг.; *в* – коэффициенты прогностических моделей (4–7) вычислены по данным 2002–2005 г. соответственно; кривая 14 – разность между наиболее различающимися моделями 7 и 5; *г* – к числу предикторов добавлены наблюдения в 9 (модель 8 и ее ошибка 12) и 13 ч (модель 9 и ее ошибка 13) текущего дня. Все цифры на графиках относятся к кривым; каждая кривая (2–9) соответствует модели с тем же номером; модели различаются составом предикторов и/или численными коэффициентами при предикторах. Горизонтальная прямая – максимальная разовая ПДК озона 160 мкг · м⁻³, установленная для населенных пунктов России

день d , изображенные кривыми 2 и 3 на рис. 2, *a* и *б* (без учета и с учетом индекса МПЗ соответственно), описываются соответствующими уравнениями:

$$C'(d) = C_0(d) + 0,23 + 0,34\Delta C(d-1) + \left(-0,36 + 0,21\sin\frac{2\pi d}{365} + 0,20\cos\frac{2\pi d}{365}\right)\Delta H(d) + \left(1,59 - 1,37\sin\frac{2\pi d}{365}\right)\Delta T(d),$$

$$C'(d) = C_0(d) - 0,75 + \left(67,2 - 57,9\cos\frac{2\pi d}{365}\right) \times (\text{МПЗ}(d) - 0,4168) + 0,25\Delta C(d-1) + \left(-0,32 + 0,13\sin\frac{2\pi d}{365}\right)\Delta H(d) + \left(1,21 - 0,77\cos\frac{2\pi d}{365}\right)\Delta T(d),$$

где МПЗ(d) – индекс метеорологического потенциала загрязнения; $\Delta C(d)$, $\Delta H(d)$, $\Delta T(d)$ – отклонения от «норм» концентраций озона, относительной влажности (%) и температуры (°C) соответственно.

«Нормы», входящие в приведенные выше уравнения, выражаются следующими соотношениями:

$$C_0(d) = 56,53 + 11,76\sin\frac{2\pi d}{365} - 25,35\cos\frac{2\pi d}{365} + 3,86\sin\frac{4\pi d}{365} - 8,4\sin\frac{6\pi d}{365} + 4,51\cos\frac{6\pi d}{365};$$

$$T_0(d) = 9,7 - 3,02\sin\frac{2\pi d}{365} - 14,53\cos\frac{2\pi d}{365} + 0,4\sin\frac{4\pi d}{365} + 0,98\cos\frac{6\pi d}{365};$$

$$H_0(d) = 67,6 - 6\sin\frac{2\pi d}{365} + 14\cos\frac{2\pi d}{365} + 4,1\cos\frac{4\pi d}{365} + 1,9\sin\frac{6\pi d}{365} - 1,6\cos\frac{6\pi d}{365}.$$

Для построения и использования модели важно знать степень ее устойчивости. Иначе говоря, насколько хорошо модель, построенная по наблюдениям одних лет, будет применима к другим годам, отличающимся метеорологическими условиями. На рис. 2, *в* приведены результаты «прогнозирования» на +24 ч на 2002 г. по четырем моделям, коэффициенты которых получены с использованием наблю-

дений озона, максимальной температуры, минимальной влажности и индексов МПЗ, рассчитанных отдельно для 2002–2005 гг. Из рис. 2, в видно, что расхождения между модельными оценками (для разного состава моделей) существенно меньше разностей между модельными концентрациями и данными наблюдений, представленными на рис. 2, а и б. Нужно отметить, что модельные концентрации, оцененные по отдельным годам, отличаются не только численными значениями регрессионных коэффициентов, но и их набором, а также значимостью (например, если в модели 2003 г. наибольшую статистическую значимость имеет авторегрессионное слагаемое, то в другие годы самым значимым оказывается индекс МПЗ, см. табл. 1). Сказанное является следствием того факта, что временные ряды предикторов хотя и не являются, строго говоря, линейно зависимыми, но каждый из них с тем или иным приближением может быть записан в виде линейной комбинации остальных.

Описанный метод имеет важное приложение для прогнозирования опасных концентраций озона, т.е. превышающих предельно допустимые концентрации. Качество прогнозирования оценивают в зависимости от его целей. Если целью является прогнозирование максимальных уровней, то качество разумно оценивать по дисперсии разностей «прогноз – измеренное значение»; если целью является прогнозирование наступления того или иного события (например, попадание в определенный интервал значений, в частности, превышение предельно допустимых концентраций), то по долям правильно и ложно предсказанных событий.

Прогнозируя уровни озона в европейских странах, как правило, употребляют качественную систему оценок – от «очень хорошей» (*sehr gut – very good*) до «очень плохой» (*sehr schlecht – very bad*). В Западной Европе есть еще четыре промежуточные градации: «хорошо», «удовлетворительно» (*befriedigend – satisfactory*), «терпимо» (*ausreichend – sufficient*), «плохо».

Естественно, что при оценке качества прогнозирования также нужно учитывать его связь с реальными погрешностями средств измерений (для современных приборов в России – не менее 15%) и с требованиями нормативных документов (например, «суммарная погрешность измерений концентраций вредного вещества не должна превышать $\pm 25\%$ » [26]).

С учетом сказанного прогноз можно считать оправдавшимся, если его погрешность не превысит уровня 20%-го российского норматива ПДК для воздуха населенных мест, т.е. $32 \text{ мкг} \cdot \text{м}^{-3}$. Следует считать также с возможностью возникновения опасных уровней озона, если прогнозируемая концентрация озона составляет $128 \text{ мкг} \cdot \text{м}^{-3}$ и более.

О качестве описанного синоптико-статистического «прогнозирования» говорит то обстоятельство, что в 2002 г. без учета индекса МПЗ удалось бы предсказать четыре из восьми случаев превышения максимальной разовой ПДК, а с его учетом были бы предсказаны все восемь. Среднеквадратические ошибки для климатического (когда предска-

зывают средние многолетние значения), инерционного (когда на следующий день предсказывают значение текущего дня) и описанного синоптико-статистического прогнозов в Москве составили 25, 23 и $15 \text{ мкг} \cdot \text{м}^{-3}$ в период 2002–2005 гг., в том числе для 2002 г. 44, 36 и $18 \text{ мкг} \cdot \text{м}^{-3}$ соответственно. Ошибки синоптико-статистического прогноза для Москвы соответствуют диапазонам неопределенности результатов применения современных транспортно-фотохимических моделей при проверке их чувствительности и воспроизводимости результатов в различных сценариях изменения входных параметров [7, 27]. Соответственно для оценки качества прогностических моделей, основанных на прямом моделировании атмосферного переноса и фотохимических превращений, полезно проводить их сравнение с простыми эмпирическими малопараметрическими моделями, подобными описанной выше.

В практике прогнозирования важное значение имеют уточнения прогнозов, проведенные на основе последних экспериментов, особенно в период, когда наблюдаются высокие уровни озона (в климатических моделях такой процесс называется усвоением данных). Поскольку максимальные уровни озона обычно фиксируются через 2–4 ч после местного полудня, то по утренним наблюдениям озона и уточненным прогнозам метеопараметров можно получить более точный прогноз озона. Очевидно, что минимальные ночные концентрации озона малы и отягощены значительной изменчивостью для того, чтобы их можно было использовать в качестве эффективного предиктора для уточнения прогнозируемых уровней концентрации озона. Однако во время утреннего подъема, начиная с некоторого момента, концентрации озона становятся такими, что позволяют значительно уточнить прогноз на текущий день.

Анализ наблюдений по всем рассмотренным станциям показывает, что заметное улучшение прогноза наступает, если использовать в качестве предикторов данные наблюдений за концентрацией озона с 8–9 ч местного времени (рис. 2, з).

Для проверки эффективности эмпирического моделирования мы рассмотрели его приложение к прогнозированию опасных максимальных суточных концентраций озона в соответствии с нормативным документом [28]. Максимальную суточную концентрацию озона считали опасной, если среднечасовая концентрация превышала максимальную разовую предельно допустимую концентрацию озона, равную $160 \text{ мкг} \cdot \text{м}^{-3}$, установленную нормативным документом Минздрава РФ [10] (в аналогичных случаях в Европе власти обязаны оповещать население об опасности озонового загрязнения через СМИ [29]). В отечественном стандарте [26] для установления факта превышения опасного уровня концентраций озона допускается применение средств измерений с погрешностью не выше 25%. Лучшие отечественные средства измерений концентрации озона имеют погрешность не ниже 15% от ПДК озона.

Результат прогнозирования наступления опасных концентраций будет успешным, если: 1) прогнозировалось не менее ПДК ($160 \text{ мкг} \cdot \text{м}^{-3}$) и реально

наблюдалось не менее 80% от ПДК или 2) прогнозировалось не менее 80% от ПДК и реально наблюдалось не менее ПДК. В качестве альтернативного метода прогноза использован «инерционный» (т.е. такой, когда на завтра прогнозируются наблюдаемые сегодня показатели), а в качестве критериев – показатели оправдываемости и предупредительности [15]; он оказывается существенно успешнее, чем так называемый «климатический» прогноз. Под оправдываемостью понимают отношение числа наступивших событий (опасных концентраций) при прогнозах концентраций озона выше ПДК к числу этих прогнозов. Под предупредительностью понимают отношение числа прогнозов концентраций озона не менее 80% от ПДК при условии наблюдений концентраций выше ПДК к общему числу наблюдений концентраций выше ПДК. Результаты прогнозирования отображены в табл. 2.

Таблица 2

Оправдываемость и предупредительность прогнозирования опасных концентраций озона различными методами на различных станциях (слева от черты – число успешных прогнозов, справа – число случаев выдачи прогноза)

Характеристика прогноза превышений ПДК	Метод прогноза	Вестерланд	Вальдхоф	Дойсельбах	ИФА РАН
Оправдываемость	Предложенный нами	1/1	9/9	13/13	11/11
	Инерционный	1/4	12/18	18/27	4/8
Предупредительность	Предложенный нами	3/4	15/18	23/27	8/8
	Инерционный	3/4	12/18	24/27	3/8

Видно, что показатели рассматриваемого прогноза превосходят соответствующие показатели инерционного прогноза почти во всех случаях. В частности, случаев неоправдавшихся прогнозов ни на одной из станций не отмечено.

Заключение

1. Обоснована необходимость разработки метода прогноза максимальных разовых концентраций приземного озона для России, и предложен синоптико-статистический метод прогноза, основанный на текущих измерениях уровней озона и прогнозах метеопараметров, а также синоптической обстановки.

2. Продемонстрировано качество предлагаемой методики прогноза на различных наборах данных. Для сельских районов Германии при прогнозе на +24 ч с учетом двух метеопараметров отклонения прогнозируемых уровней концентрации озона от наблюдаемых для более чем 95% прогнозов составили менее 32 мкг · м⁻³. Для г. Москвы ошибки прогноза близкие, хотя и несколько большие; существенно большие отклонения зафиксированы лишь для аномального 2002 г., когда в регионе имела место ин-

тенсивная фотохимическая генерация озона, обусловленная продуктами лесных и торфяных пожаров. Оправдываемость прогноза уровня озона для г. Москвы превышает 0,96, предупредительность прогноза опасных концентраций близка к 1,00.

3. Показано, что наиболее значимыми предикторами, определяющими прогнозируемые уровни приземного озона в Московском регионе, являются индекс «метеорологического потенциала загрязнения» атмосферы, отклонения от норм температуры и относительной влажности, а также уровень приземного озона, наблюдаемый в предшествующие сутки.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проект № 08-05-13545-офи_ц. Наблюдения газового состава атмосферы на московской станции ИФА РАН в МГУ ведутся при поддержке РФФИ, проект № 07-05-00428, и МНТЦ, проект № 2773.

1. *Jacob D.J.* Introduction to Atmospheric Chemistry. Princeton: Princeton University Press, 1999. 266 p.
2. *Sillman S.* The relation between ozone, NO_x and hydrocarbons in urban and polluted rural environments // Atmos. Environ. 1999. V. 33. 12. P. 1821–1845.
3. *Звягинцев А.М., Беликов И.Б., Егоров В.И., Еланский Н.Ф., Крученицкий Г.М., Кузнецова И.Н., Николаев А.Н., Обухова З.В., Скороход А.И.* Положительные аномалии приземного озона в июле–августе 2002 г. в Москве и ее окрестностях // Изв. РАН. Физ. атмосфер. и океана. 2004. Т. 40. № 1. С. 75–86.
4. *Звягинцев А.М., Иванова Н.С., Крученицкий Г.М., Кузнецова И.Н., Лезина Е.А.* Содержание озона над территорией Российской Федерации в 2006 г. // Метеорол. и гидрол. 2007. № 2. С. 116–121.
5. *Звягинцев А.М., Селегей Т.С., Кузнецова И.Н.* Изменчивость приземного озона в г. Новосибирске // Оптика атмосфер. и океана. 2007. Т. 20. № 7. С. 647–650.
6. *Еланский Н.Ф., Моисеев К.Б., Панкратова Н.В.* Фотохимическая генерация озона в антропогенных пятнах над Хабаровским краем // Изв. РАН. Физ. атмосфер. и океана. 2005. Т. 41. № 4. С. 461–468.
7. *Vautard R., Builtjes P.H.J., Thunis P., Cuvelier C., Bedogni M., Bessagnet B., Honore C., Moussiopoulos N., Pirovano G., Schaap M., Stern R., Tarrason L., Wind P.P.* Evaluation and intercomparison of Ozone and PM10 simulations by several chemistry transport models over four European cities within the CityDelta project // Atmos. Environ. 2007. V. 41. Iss. 1. P. 173–188.
8. *Звягинцев А.М., Крученицкий Г.М.* Об эмпирической модели приземной концентрации озона вблизи Москвы (г. Долгопрудный) // Изв. РАН. Физ. атмосфер. и океана. 1996. Т. 32. № 1. С. 96–100.
9. *Демин В.И., Карпечко А.Ю., Белоглазов М.И., Кюро Е.* О роли турбулентного перемешивания в формировании приземных концентраций озона на Кольском полуострове // Оптика атмосфер. и океана. 2006. Т. 19. № 5. С. 448–450.
10. *Гигиенические* нормативы ГН 2.1.6.1338-03 «Предельно допустимые концентрации (ПДК) загрязняющих веществ в атмосферном воздухе населенных мест». 2003.
11. *Fjaeraa A.M.* Ozone measurements 2004 // EMEP/CCC-Report 2/2006. Norway: NILU. 2006. 98 p. (<http://www.nilu.no>).
12. *Еланский Н.Ф., Смирнова О.И.* Концентрация озона и окислов азота в приземном воздухе г. Москвы // Изв. РАН. Физ. атмосфер. и океана. 1997. Т. 33. № 5. С. 597–611.

13. *Звягинцев А.М.* Аномалии приземного озона в Европе // Изв. РАН. Физ. атмосфер. и океана. 2004. Т. 40. № 3. С. 387–396.
14. *Clark T.L., Karl T.R.* Application of prognostic meteorological variables to forecasts of daily maximum one-hour ozone concentrations in the northeastern United States // J. Appl. Meteorol. 1982. V. 21. N 11. P. 1662–1671.
15. *Feister U., Balzer K.* Surface ozone and meteorological predictors on a subregional scale // Atmos. Environ. A. 1991. V. 25. N 9. P. 1781–1790.
16. *Flaum J.B., Rao S.T., Zurbenko I.G.* Moderating the influence of meteorological conditions on ambient ozone concentrations // J. Air & Waste Manage. Assoc. 1996. V. 46. N 1. P. 35–46.
17. *Jianhui Bai, Wang Gengchen, Wang Mingxing.* An empirical correlation between surface O₃ and its factors // Atmos. Environ. 2005. V. 39. N 25. P. 4419–4423.
18. *Demuzere M., Trigo R.M., Vila-Guerau de Arellano J., van Lipzig N.P.M.* The impact of weather and atmospheric circulation on O₃ and PM10 levels at a rural mid-latitude site // Atmos. Chem. Phys. 2009. V. 9. N 8. P. 2695–2714.
19. *Звягинцев А.М., Кузнецова И.Н.* Изменчивость приземного озона в окрестностях Москвы: результаты десятилетних регулярных наблюдений // Изв. РАН. Физ. атмосфер. и океана. 2002. Т. 38. № 4. С. 486–495.
20. *Tarasova O.A., Karpetchko A.Yu.* Atmospheric chemistry and physics accounting for local meteorological effects in the ozone time-series of Lovozero (Kola Peninsula) // Atmos. Chem. Phys. 2003. V. 3. P. 941–949.
21. *Звягинцев А.М.* Измерения концентрации приземного озона в г. Долгопрудном в 1991–1993 гг. // Изв. РАН. Физ. атмосфер. и океана. 1995. Т. 31. № 1. С. 115–119.
22. *Solberg S., Hov O., Soevde A., Isaksen I., Coddeville P., De Backer H., Forster C., Orsolini Y.J., Uhse K.* European surface ozone in the extreme summer 2003 // Atmos. Chem. Phys. Discuss. 2005. V. 5. N 5. P. 9003–9038.
23. *Transboundary* air pollution: Acidification, eutrophication and ground-level ozone in UK (NEGТАР 2001) // Edinburgh: СЕН. 2001. 314 p.
24. *Звягинцев А.М., Крученицкий Г.М.* О пространственно-временных связях приземной концентрации озона в Европе // Изв. РАН. Физ. атмосфер. и океана. 1997. Т. 33. № 1. С. 104–113.
25. *Звягинцев А.М., Рудаков В.В., Кузнецова И.Н., Демин В.И.* О временном ходе приземного озона в центре Европейской территории России в весенне-летний период 2004 г. // Метеорол. и гидрол. 2006. № 4. С. 41–46.
26. *ГОСТ 12.1.005-88 «ССБТ. Воздух рабочей зоны. Общие санитарно-гигиенические требования».*
27. *Vautard R., Beekmann M., Roux J., Gombert D.* Validation of a deterministic forecasting system for the ozone concentrations over the Paris area // Atmos. Environ. 2001. V. 35. P. 2449–2461.
28. *РД 52.27.284-91.* МУ. Проведение производственных (оперативных) испытаний новых и усовершенствованных методов гидрометеорологических и гелиофизических прогнозов. М.: Госкомгидромет, 1991. 150 с.
29. *Directive 2002/3/EC of 12 February 2002 relating to ozone in ambient air* // Official J. Europ. Union. V. L67/14. 2002.

A.M. Zvyagintsev, I.B. Belikov, N.F. Elansky, G. Kakadjanova, I.N. Kuznetsova, O.A. Tarasova, I.Yu. Shalygina. **Statistical modelling of daily maximal concentrations of the surface ozone.**

A statistical model of the daily maximal concentration of the surface ozone is proposed. The model is based on relations of surface ozone and its predictors. Among the predictors of the surface ozone are the temperature, relative humidity, the mean wind speed in the planetary boundary layer, concentrations of other minor gases, and the value of “meteorological pollution potential”, which can characterize adverse meteorological conditions. Our statistical model for surface ozone forecasting uses actual meteorological parameters and their forecasting values. The most significant predictors of the surface ozone for the Moscow region are “meteorological pollution potential” and anomalies (deviations from norms) of temperature, relative humidity, surface ozone in previous day. The model was testified for observations in the Moscow region and at German stations. Such model is better than “climatic” and “inertia” models and can ensure determination coefficient ca. 50%.