УДК 551.509.328
В.Н. Хохлов, *канд. геогр. наук*
Одесский государственный экологический университет

ХАОС И ПРЕДСКАЗУЕМОСТЬ КОНЦЕНТРАЦИЙ ПАРНИКОВЫХ ГАЗОВ В АТМОСФЕРЕ

Наличие низкоразмерного хаоса во временных рядах концентраций трех парниковых газов – метана, двуокиси азота и хлороформа – показано с помощью метода корреляционной размерности. Восстановлен спектр размерностей Ляпунова и на его основе рассчитана энтропия Колмогорова, которая обратно пропорциональна пределу предсказуемости. Сделан вывод о возможности использования метода нелинейного прогноза для рядов некоторых загрязняющих веществ в атмосфере.
***Ключевые слова**: Парниковые газы, Хаос, Предсказуемость*

Введение

Прогноз является одной из центральных задач любой науки. Эта задача может быть сформулирована следующим образом: «Можно ли предсказать будущее развитие процесса, основываясь на прошлых его состояниях?» Классический подход к решению этой задачи заключается в построении объяснительной модели, основанной на использовании исходных данных и параметризации существующих первопричин и взаимосвязей между характеристиками процесса. К сожалению, реализация такого подхода связана с большими трудностями и его результат не всегда имеет достаточную степень точности. Например, прогноз погоды с помощью гидродинамических моделей, развитие которых продолжается в течение, по крайней мере, полувека, можно считать успешным только на несколько суток, при этом с увеличением заблаговременности прогноза уменьшается его успешность. Более того, далеко не всегда известны точные первопричины процесса (как, например, в экономике) или взаимосвязи, определяющие его динамику.

Большая часть моделей, использующихся в настоящее время для оценки состояния (а так же, прогноза) уровня загрязнения атмосферы, является или детерминистическими моделями, или основана на простых статистических регрессиях. Успешность этих моделей, однако, ограничивается как их неспособностью описать нелинейные характеристики загрязняющих веществ, так и недостаточным пониманием вовлеченных физических и химических процессов.

В современной теории прогнозов временной ряд рассматривается как реализация случайного процесса, когда случайность является результатом сложного движения с многими независимыми степенями свободы. Альтернативой случайности является хаос, который имеет место в очень простых детерминистических системах. Хотя хаос устанавливает фундаментальное ограничение на долгосрочный прогноз (см., например, обзор Абарбанела и др. [1]), он может использоваться для краткосрочного прогноза: данные, выглядящие случайными, могут содержать в себе простые детерминистические взаимосвязи, имеющие только несколько степеней свободы. Такой подход с успехом использовался при анализе многих гидрометеорологических характеристик [2], в том числе временных рядов составляющих атмосферного воздуха [3, 4].

Размерность странного аттрактора является мерой его комплексности и может рассматриваться в качестве основного свойства аттрактора. В настоящее время существует большое количество методов для определения дробной размерности странных аттракторов, порождаемых хаотическими процессами. Эти методы делятся на две категории, основанные на топологии и динамике системы. Метрикой, относящейся к первой категории, является корреляционная размерность, ставшая распространенной после работы Грассбергера и Прокаччиа [5], а размерность Ляпунова, предложенная Капланом и Йорком [6], относится ко второму типу. Следует отметить, что предсказуемость обратно противоположна энтропии Колмогорова, которая равняется сумме всех положительных размерностей Ляпунова. С другой стороны, для некоторых хаотических процессов (возможно, и для всех) существует связь между указанными размерностями [7].

Таким образом, использование подхода, основанного на положениях теории хаоса, позволяет не только определить степень хаотичности процесса, но и определить верхний предел, до которого можно применять методы хаотической динамики для прогноза развития процесса. Целью настоящей работы как раз и является определение этих характеристик для временных рядов загрязняющих веществ в атмосфере.

Данные и методика исследования

В качестве исходных данных использовались результаты эксперимента AGAGE (Advanced Global Atmospheric Gases Experiment) на станции Мейс Хед, расположенной на западном побережье Ирландии (53°19' с.ш., 9°54' з.д.) и окруженной торфяными болотами. Этот пункт часто используется для фоновых измерений составляющих атмосферы, так как в этот район поступает относительно чистый морской воздух с Северной Атлантики. В эксперименте AGAGE осуществляются измерения (с интервалом около 40 минут) двух биогенных/антропогенных (метана, CH_4, и двуокиси азота, N_2O) и нескольких антропогенных газов, из которых в настоящей работе исследуются тетрахлорид углерода (CCl_4) и хлороформ ($CHCl_3$). Оценка степени хаотичности производилась для временных рядов указанных четырех газов с шестичасовым осреднением за период с 3 марта 1994 г. по 30 сентября 2004 г., т.е. длина выборок составляла 15457. На рис. 1 представлено изменение со временем концентраций загрязняющих веществ за указанный период, а в табл. 1 приведены некоторые статистические характеристики для всех рассматриваемых газов. Отметим, что концентрации CH_4 и N_2O измерены в 10^{-9}, а CCl_4 и $CHCl_3$ – в 10^{-12}.

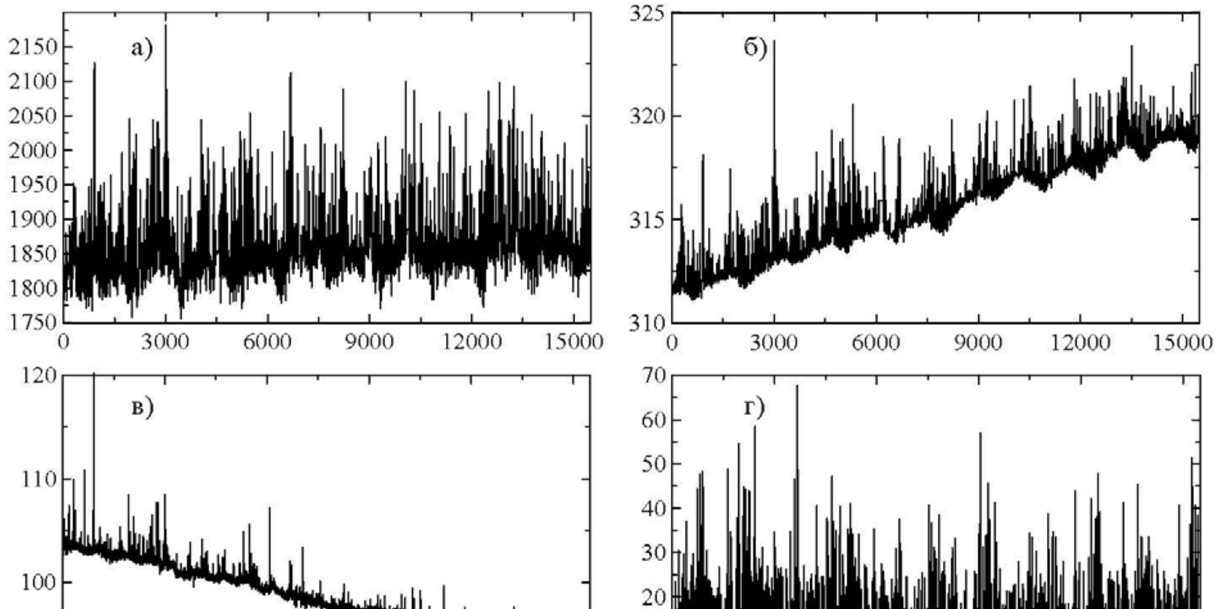

Рис. 1. Концентрации метана (а), двуокиси азота (б), тетрахлорида углерода (в) и хлороформа (г) на станции Мейс Хед за период с 03.03.94 по 30.09.04. Для CH_4 и N_2O концентрации даны в 10^{-9}, для CCl_4 и $CHCl_3$ – в 10^{-12}. Метки на оси X – порядковые номера элементов ряда.

Таблица 1

Средние ($\bar{f}$), максимальные (f_{max}) и минимальные (f_{min}) величины, изменение по линейному тренду (Δ), среднеквадратическое отклонение (σ^2), коэффициенты асимметрии (γ_1) и эксцесса (γ_2) для временных рядов CH_4, N_2O, CCl_4 и $CHCl_3$ за период с 03.03.1994 по 30.09.2004

	$\bar{f}$	f_{max}	f_{min}	Δ	σ^2	γ_1	γ_2
CH_4	1855,40	2180,91	1755,62	+28,95	43,26	1,73	4,47
N_2O	315,70	323,62	311,10	+7,83	2,39	0,002	–1,04
CCl_4	98,33	120,19	92,43	–10,84	3,21	0,18	–0,98
$CHCl_3$	14,04	67,77	5,98	–2,46	4,61	2,68	11,76

Как CH_4, так и N_2O, характеризуются увеличением концентрации по тренду за рассматриваемый период; это увеличение особенно заметно для двуокиси азота (см. рис. 1б). Наоборот, для антропогенных газов характерно, в целом, уменьшение концентраций. Интересной особенностью временных рядов концентраций также является то, что они не подчиняются нормальному распределению, что показывают величины асимметрии и эксцесса (см. табл. 1).

Корреляционная размерность (d_2) характеризует предельное расстояние, до которого одна точка, лежащая на аттракторе, оказывает влияние на другие точки. В методе корреляционной размерности для проведения различия между хаотическим и стохастическим режимами используется корреляционный интеграл. Концепция последнего основывается на следующем. Пусть выглядящий беспорядочным процесс является следствием детерминистической динамики; тогда для него характерно ограниченное число степеней свободы равное наименьшему числу дифференциальных уравнений первого порядка, описывающих наиболее важные свойства этой динамики. Поэтому, если для бесконечного множества данных восстанавливается фазовое пространство все большей и большей размерности, то может быть достигнут предел, в которой размерность равна числу степеней свободы, а увеличение размерности существенно не влияет на корреляционную размерность. Одной из методик, позволяющих отыскать корреляционную размерность, является алгоритм Грассбергера-Прокаччиа [5], основные положения которого можно сформулировать следующим образом.

Для скалярного временного ряда X_i ($i = 1, 2, \ldots, N$) фазовое пространство может быть восстановлено с помощью метода задержек:

$$\mathbf{y}_j = (X_j, X_{j+\tau}, X_{j+2\tau}, \ldots, X_{j+(d-1)\tau/\Delta t}), \qquad (1)$$

где $j = 1, 2, \ldots, N - (d-1)\tau/\Delta t$; d – размерность вектора $\mathbf{y}_j$, называемая также размерностью вложения; τ – время задержки. Для d-мерного фазового пространства корреляционный интеграл $C(r)$ задается посредством

$$C(r) = \lim_{N\to\infty} \frac{2}{N(N-1)} \sum_{\substack{i,j \\ (1\le i<j\le N)}} H(r - |y_i - y_j|), \qquad (2)$$

где H – ступенчатая функция Хевисайда; r – радиус сферы с центром в $\mathbf{y}_i$ или $\mathbf{y}_j$.

Если данные временного ряда характеризуются аттрактором, то корреляционный интеграл $C(r)$ соотносится с радиусом r следующим образом

$$\underset{\substack{r\to0 \\ N\to\infty}}{C(r)} \sim \alpha r^{\nu}, \qquad (3)$$

где α – константа; ν – степень наклона графика $C(r)$ от r, задаваемая, как

$$\nu = \lim_{\substack{r\to0 \\ N\to\infty}} \frac{\log C(r)}{\log r}. \qquad (4)$$

Наклон можно определить подгонкой по методу наименьших квадратов отрезка прямой в диапазоне некоторых r.

Чтобы определить, наблюдается ли хаос, строится график значений корреляционной размерности от соответствующих значений размерности вложения. Если корреляционная размерность стремится к конечной величине, то система может рассматриваться как система с преобладающей детерминистической динамикой. Значение, после которого ν практически не изменяется и является корреляционной размерностью аттрактора временного ряда. Наоборот, если в системе преобладает стохастическая динамика, то корреляционная размерность растет неограниченно.

Как следует из уравнения (1), непосредственно до расчетов нужно определить время задержки τ. Как правило, в качестве τ берется значение, на котором автокорреляционная функция достигает определенной величины; в нашем случае это значение равняется 0,5.

Чувствительность динамической системы к начальным условиям может быть оценена размерностями Ляпунова. Рассмотрим, например, две траектории с близкими начальными условиями. Если аттрактор является хаотическим, то траектории расходятся с экспоненциальной (в среднем) скоростью, характеризующейся наибольшей размерностью Ляпунова. Эта концепция может быть также обобщена для спектра размерностей Ляпунова λ_i ($i = 1, 2, \ldots, d$), если рассматривать небольшую d-мерную сферу начальных условий, где d – количество уравнений (или, что то же самое, количество фазовых переменных), используемых для описания системы. С течением времени сфера развивается в эллипсоид, чьи главные оси вытягиваются (или сокращаются) со скоростями, определяемыми размерностями Ляпунова. Наличие положительной размерности является необходимым для обнаружения хаоса и представляет собой неустойчивость в определенном направлении. Отметим, что для существования аттрактора итоговая динамика должна быть диссипативной, т.е. глобально устойчивой, и суммарная скорость сокращения должна превалировать над суммарной скоростью расширения, т.е. если даже существует несколько положительных размерностей Ляпунова, сумма всего спектра должна быть отрицательной.

Один из алгоритмов расчета размерностей Ляпунова для дискретных временных рядов использует оценку якобиана отображения. Изменения со временем вектора $\mathbf{y}(n)$ определяются векторным уравнением

$$\mathbf{y}(n + z) = \mathbf{F}(\mathbf{y}(n + z)), \tag{5}$$

где $\mathbf{F}$ – некоторая, как правило, нелинейная векторная функция. Эволюция векторов небольших смещений векторов в касательном пространстве определяется линеаризованным уравнением

$$\delta\mathbf{y}(n + z) = D\mathbf{F}(\mathbf{y}(n))\cdot\delta\mathbf{y}(n), \tag{6}$$

где $D\mathbf{F}$ – якобиан $\mathbf{F}$. Предположим, что мы начинаем двигаться от некой точки в фазовом пространстве по орбите, которая проходит через эту точку. Спустя S шагов по времени начальное возмущение возрастет (или уменьшится) до

$$\delta\mathbf{y}(n + Sz) = D\mathbf{F}(\mathbf{y}(n + (S - 1)z))\ldots D\mathbf{F}(\mathbf{y}(n))\cdot\delta\mathbf{y}(n) = \mathbf{Y}(\mathbf{y}(n), S)\,\delta\mathbf{y}(n). \tag{7}$$

Матрица $\Lambda = \lim\limits_{S\to\infty}\left[\mathbf{Y}(\mathbf{y}(n), S)\cdot\mathbf{Y}(\mathbf{y}(n), S)^T\right]^{\frac{1}{2S}}$ имеет собственные значения e^{λ_1}, e^{λ_2}, …, e^{λ_d} для d-мерной системы, которая не зависит от $\mathbf{y}(n)$. Здесь λ_i и являются, как раз, размерностями Ляпунова. Процедура нахождения якобиана и, как следствие, матрицы $\mathbf{Y}$, предложена Сано и Савадой [8].

Результаты исследования и их анализ

Как указывалось в разделе 2, первым шагом при восстановлении фазового пространства является нахождение времени задержки τ с помощью автокорреляционной функции. На рис. 2 показана автокорреляционная функция для двух газов – метана и хлороформа. Для метана эта функция пересекает значение 0,5 на времени $\tau = 9$, а для хлороформа – на времени $\tau = 5$. Отметим, что автокорреляционные функции для двуокиси азота и тетрахлорида углерода в целом подобны функции для метана и также пересекают значение 0,5 на времени $\tau = 9$. Таким образом, фазовое пространство можно восстанавить по формуле (1) с указанными временами задержки.

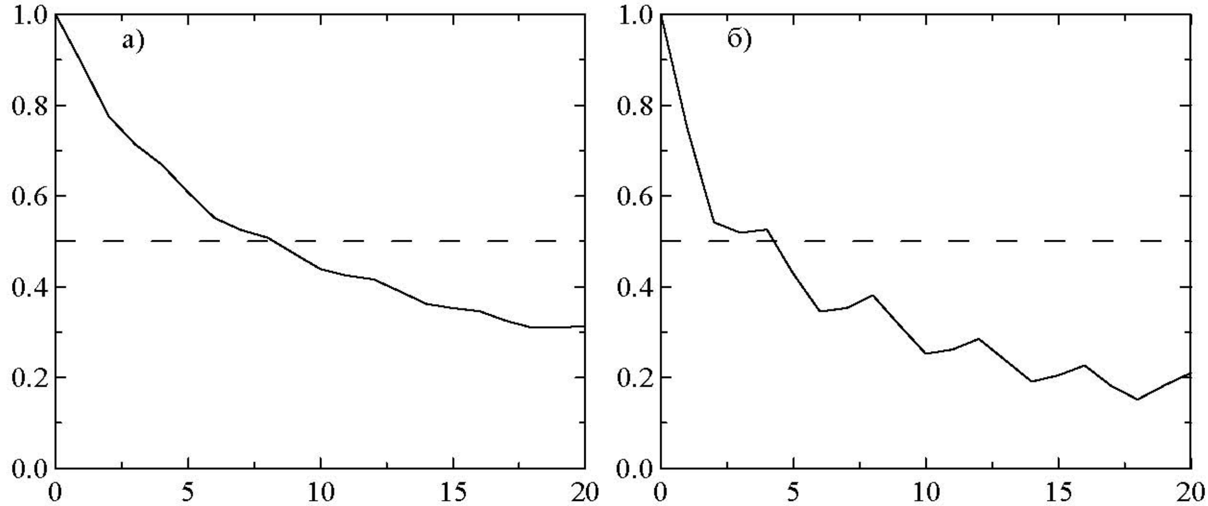

Рис. 2. Автокорреляционные функции (ось Y) для временных рядов метана (а) и хлороформа (б). Ось X – время с шестичасовым интервалом.

Корреляционный интеграл $C(r)$ и степень наклона (ν) его графика от радиуса r может быть рассчитана по формулам (2) и (4). На рис. 3, в качестве примера, показана взаимосвязь корреляционного интеграла и радиуса для различных значений размерности вложения d для временного ряда метана, а на рис. 4 представлены зависимости ν от d для всех четырех газов. Также, рис. 4 показывает, что значения ν увеличиваются с ростом размерности вложения до определенной величины, после чего практически перестают изменяться, т.е. ν достигает насыщения. Эта величина ν и является корреляционной размерностью, а значение d определяет размерность восстановленного фазового пространства (размерность аттрактора).

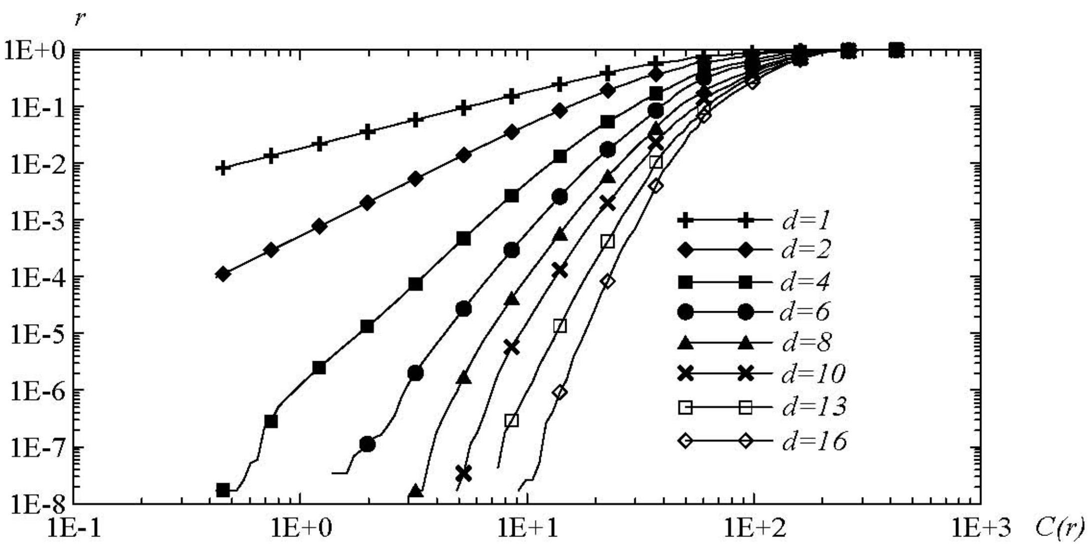

Рис. 3. Взаимосвязь между корреляционным интегралом $C(r)$ и радиусом r для разных размерностей вложения d для метана.

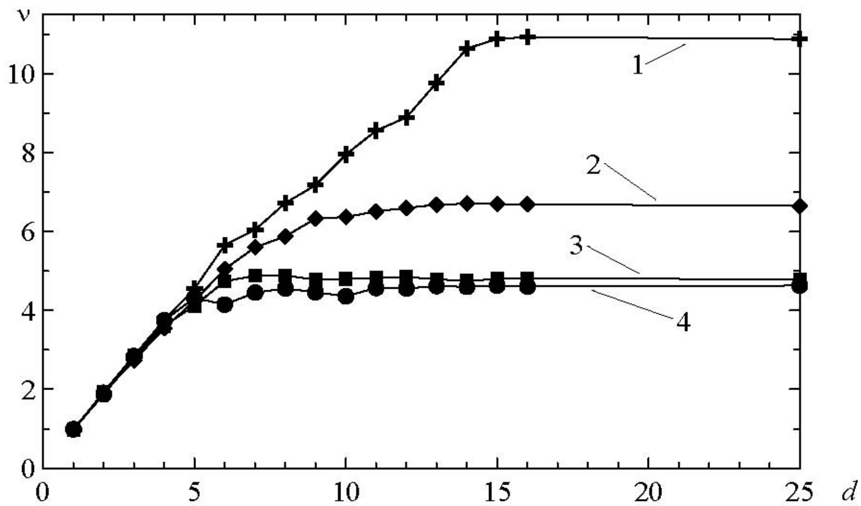

Рис. 4. Взаимосвязь между ν и *d* для тетрахлорида углерода (1), метана (2), хлороформа (3) и двуокиси азота (4).

После того, как размерность фазового пространства восстановлена, можно приступать к расчету спектра размерностей Ляпунова по формулам (5-7). Результаты расчетов корреляционной размерности и размерностей Ляпунова сведены в табл. 2. Отметим, что такой расчет не может быть выполнен для системы со слишком большим числом степеней свободы (в нашем случае – это временной ряд тетрахлорида углерода) вследствие того, что матрица Λ вырождается [8].

Таблица 2

Время задержки (τ), корреляционная размерность (D_2), минимальное необходимое количество переменных (N_{ess}), достаточное число переменных (N_{suf}), энтропия Колмогорова (K) и предел предсказуемости (Pr_{max}, часы) для временных рядов CH_4, N_2O, CCl_4 и $CHCl_3$ по данным за период с 03.03.1994 по 30.09.2004

	τ	D_2	N_{ess}	N_{suf}	K	Pr_{max}
CH_4	9	6,65±0,05	7	11	0,19	32
N_2O	9	4,55±0,08	5	7	0,12	50
CCl_4	5	10,89±0,03	11	15	-	-
$CHCl_3$	9	4,80±0,05	5	6	0,25	24

Значения корреляционной размерности для четырех газов колеблются от 4,55 до 10,89 (см. табл. 2). Насыщение значений ν имеет место при размерностях вложения от 6 до 15. Наибольшие значения здесь относятся к тетрахлориду углерода. Строго говоря, результаты, полученные для этого газа, могут быть подтверждением того, что для него динамика системы является скорее не хаотической, а стохастической. Для остальных газов полученные результаты подтверждают наличие хаоса, так как значения D_2 достаточно низки и являются фрактальными. Ближайшее целое число, большее, чем корреляционная размерность, может рассматриваться как минимальная размерность фазового пространства, необходимого для вложения аттрактора. С другой стороны, значение размерности вложения, при котором имеет место насыщение корреляционной размерности, может рассматриваться как максимальная размерность фазового пространства, достаточная для описания движения аттрактора. Более того, размерность фазового пространства вложения равна количеству переменных, участвующих в эволюции динамики системы. Поэтому представленные результаты указывают на то, число минимальное необходимое количество переменных равно 7 для CH_4 и 5 для N_2O и $CHCl_3$, а достаточное число переменных равняется 11, 7 и 6, соответственно.

Таким образом, для того чтобы смоделировать, например, динамику CH_4, необходимо использовать, по крайней мере, 7 переменных; существенное улучшение моделирования будет достигнуто после включения 11 переменных, тогда как большее их количество практически не повлияет на результат. Нужно, тем не менее, отметить, что анализ корреляционной размерности дает сведения только о количестве переменных, но не указывает ни сами переменные, ни математическую формулировку, необходимые для моделирования динамики процесса. Это вполне логично, так как при анализе рассматривается только один временной ряд. Для того чтобы получить информацию о переменных, влияющих на эволюцию, нужно использовать другие методы и понятия, например, взаимную информацию [3]. Другим способом является расчет локальных размерностей Ляпунова и (на их основе) энтропий Колмогорова и сравнение их с временными рядами возможно влияющих факторов, как это сделано в работе Цониса и Элснера [9]; если коэффициент корреляции между такими рядами достаточно велик, то можно говорить о значимости влияющего фактора. С другой стороны, при выборе переменных модели нужно учитывать физику и химию процесса. Например, в свете выявленной связи между индексами Североатлантического колебания и концентрацией метана в Мейс Хед [10] ошибкой был бы выбор этих индексов как значимой переменной, так как вряд ли разница давлений (чем являются, по сути, эти индексы) в удаленных от пункта точках может определять динамику процесса. Скорее, индексы Североатлантического колебания являются комплексным показателем, учитывающим направление и скорость ветра, распределение температуры с высотой, влажность воздуха и т.п. над Мейс Хед; последние (вполне вероятно) и могут быть переменными, которые необходимо учитывать при моделировании. Ясно, что перебор всех влияющих факторов и выбор наиболее необходимых из них является сложной и трудоемкой задачей.

Остановимся теперь на результатах расчета спектра размерностей Ляпунова, представленных в табл. 2. Так как скорость превращения сферы в эллипсоид по разным осям определяется λ_i, то ясно, что чем меньше сумма положительных размерностей, тем более устойчивой является динамическая система. С одной стороны, это увеличивает ее предсказуемость, но, с другой стороны, является признаком меньшей «хаотичности» системы [1]. Наибольшей степенью предсказуемости обладает временной ряд двуокиси азота (8 шестичасовых интервалов = двое суток), а для метана и хлороформа она составляет 5 и 4 шестичасовых интервалов (около суток). Такая предсказуемость является вполне достаточной для краткосрочного прогноза загрязнения. Например, по данным Цониса и Элснера [9] предел предсказуемости среднемесячных индексов Южного колебания не превышает 3-х месяцев. Также, наши результаты сравнимы пределами предсказуемости для некоторых хаотических систем, например Рёсслера (см., например, [7]).

4. Выводы

Представленный в настоящей работе анализ данных загрязняющих веществ в атмосфере с помощью двух методов определения хаоса (корреляционной размерности и размерности Ляпунова) показал, что временные ряды некоторых парниковых газов характеризуются низкоразмерным хаосом. При этом размерность хаотического аттрактора в каждом случае разная. Также, были получены оценки минимального необходимого количества и достаточного числа переменных, определяющих эволюцию каждого парникового газа. Более того, представлены результаты по расчету предела предсказуемости, который оказался достаточным для краткосрочного прогноза загрязнения. Наиболее простой, с нашей точки зрения, подход к предсказанию будущих концентраций загрязняющих веществ может быть основан на методе нелинейного прогноза (см., например, [1]), так как он требует знаний не о химии и физике процесса, а о хаотической динамике системы, которая была выявлена в настоящей работе.

Список литературы

1. *Abarbanel H.D.I., Brown R., Sidorowich J.J. and Tsimring L.Sh.* The analysis of observed chaotic data in physical systems // Reviews of Modern Physics. – 1993. – Vol. 65. – P. 1331-1392.

2. *Sivakumar B.* Chaos theory in geophysics: past, present and future // Chaos, Solitons and Fractals. – 2004. – Vol. 19. – P. 441-462.

3. *Paluš M., Pelikán E., Eben K., Krejčíř P., Juruš P.* Nonlinearity and prediction of air pollution // Artificial Neural Nets and Genetic Algorithms / V. Kurkova, N.C. Steele, R. Neruda, M. Karny (Eds.). – Wien: Springer, 2001. – P. 473-476.

4. *Glushkov A.V., Bunyakova Yu.Ya., Khokhlov V.N., Prepelitsa G.P., Tsenenko I.A.* Sensing air pollution field structure in the industrial city's atmosphere: stochasticity and effects of chaos // Sensor Electronics and Microsystem Technologies. – 2005. – No. 1. – P. 80-84.

5. *Grassberger P., Procaccia I.* Measuring the strangeness of strange attractors // Physica D. – 1983. – Vol. 9.– P. 189-208.

6. *Kaplan J., Yorke J.* Chaotic behavior of multidimensional difference equations // Functional Differential Equations and Approximations of Fixed Points / H.-O. Peitgen, H.-O. Walther (Eds.). – Berlin: Springer, 1979. – P. 228-237.

7. *Chlouverakis K.E., Sprott J.C.* A comparison of correlation and Lyapunov dimensions // Physica D. – 2005. – Vol. 200. – P. 156-164.

8. *Sano M., Sawada Y.* Measurement of the Lyapunov spectrum from a chaotic time series // Physical Review Letters. – 1985. – Vol. 55. – P. 1082-1085

9. *Tsonis A.A., Elsner J.B.* Global temperature as a regulator of climate predictability // Physica D. – 1997. – Vol. 108. – P. 191-196.

10. *Глушков А.В., Хохлов В.Н., Препелица Г.П., Цененко И.А.* Временная изменчивость содержания атмосферного метана: влияние североатлантической осцилляции // Оптика атмосферы и океана. – 2004. – Т. 17. – С.573-575.

В.М. Хохлов

ХАОС ТА ПЕРЕДБАЧУВАНІСТЬ КОНЦЕНТРАЦІЙ ПАРНИКОВИХ ГАЗІВ В АТМОСФЕРІ

Наявність низькорозмірного хаосу у часових рядах концентрацій трьох парникових газів – метану, двоокису азоту та хлороформу – показана за допомогою методу кореляційної розмірності. Відновлений спектр розмірностей Ляпунова та на його основі розрахована ентропія Колмогорова, яка зворотно пропорційна межі передбачуваності. Зроблений висновок про можливість використання метода нелінійного прогнозу для рядів деяких забруднюючих речовин в атмосфері.

Ключові слова*: Парникові гази, Хаос, Передбачуваність*

V.N. Khokhlov

CHAOS AND PREDICTABILITY FOR GREENHOUSE GASES CONCENTRATIONS IN ATMOSPHERE

Using the method of correlation dimension, an existence of low-dimensional chaos is revealed for time series of three greenhouse gases concentrations – methane, nitrogen dioxide, and chloroform. The spectrum of Lyapunov exponents is reconstructed, and Kolmogorov entropy that inversely proportional to the predictability limit is calculated. It is concluded that the nonlinear prediction method can be used for some air pollutants in the atmosphere.

Key words*: Greenhouse gases, Predictability, Chaos*