

<https://doi.org/10.31891/2307-5732-2025-359-71>

УДК 004.94+519.218

ФРИЗ МИХАЙЛО.

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

<https://orcid.org/0000-0002-8720-6479>e-mail: mykh.fryz@gmail.com**МЛИНКО БОГДАНА**

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

<https://orcid.org/0000-0003-0780-5365>e-mail: b.mlynko@gmail.com

МОДЕЛЮВАННЯ ЧАСОВОЇ ДИНАМІКИ ЗАБРУДНЕННЯ ПОВІТРЯ ДІОКСИДОМ АЗОТУ НА ОСНОВІ УМОВНИХ ЛІНІЙНИХ ВИПАДКОВИХ ПРОЦЕСІВ

Математичне моделювання та аналіз забруднення атмосферного повітря відіграють ключову роль у прогнозуванні розповсюдження забруднювачів, ідентифікації джерел викидів, оцінюванні впливів на здоров'я населення та довкілля, а також у розробленні ефективних стратегій моніторингу й контролю. Моделі, що ґрунтуються на теоретичних дослідженнях та аналізі даних забезпечують детальну просторово-часову інформацію та дозволяють проводити тестування сценаріїв для оцінки перспективних стратегій, тим самим підтримуючи ухвалення обґрунтованих рішень у сфері управління якістю повітря.

Діоксид азоту (NO_2) є одним із основних атмосферних забруднювачів, що утворюється переважно внаслідок процесів згоряння, пов'язаних з енергетикою та транспортом. Окрім безпосередніх негативних впливів, NO_2 виступає ключовим фактором у формуванні смогу та кислотних опадів, посилюючи ризики для довкілля та здоров'я людини.

Математичні моделі у поєднанні з методами аналізу часових рядів становлять основні інструменти для моніторингу концентрацій NO_2 . У даному дослідженні розглянуто математичну модель концентрації NO_2 у формі умовного лінійного циклостационарного випадкового процесу, яка явно враховує циклостационарність та фізичні механізми утворення викидів NO_2 . Запропонована модель спирається на концепцію гаусівських шлейфових моделей, що широко застосовуються для моделювання розсіювання забруднювачів від точкових джерел, забезпечуючи спрощений, але практичний підхід до моделювання якості повітря. Розроблена нами модель характеризує забруднення NO_2 на автомагістралях як суперпозицію стохастично залежних викидів, де точкові джерела виникають у часі відповідно до неоднорідного пуассонівського потоку.

Ключові слова: забруднення повітря, математичне моделювання, моніторинг, аналіз часових рядів, машинне навчання, оцінювання.

FRYZ MYKHAILO, MLYNKO BOGDANA

Ternopil Ivan Puluj National Technical University

CONDITIONAL LINEAR RANDOM PROCESSES BASED MODELLING OF THE NITROGEN DIOXIDE AIR POLLUTION TEMPORAL DYNAMICS

Mathematical modeling and analysis of air pollution play a critical role in predicting pollutant dispersion, tracing emission sources, evaluating health and environmental impacts, and designing efficient monitoring and control strategies. Models grounded in theoretical investigations and data-driven analysis yield high-resolution spatial and temporal information, supplement costly monitoring networks, and enable "what-if" scenario testing to assess prospective policies, thereby supporting evidence-based decisions in air quality management.

Nitrogen dioxide (NO_2) is a major atmospheric pollutant primarily generated by combustion processes associated with energy production and transportation. Beyond its direct adverse effects, NO_2 is a key precursor in the formation of photochemical smog and acid deposition, amplifying risks to environmental integrity and human health.

Mathematical models, complemented by time series analysis, constitute essential tools for monitoring NO_2 concentrations. Both deterministic and stochastic approaches have been developed to represent NO_2 dynamics. In this study, we examine a mathematical model of NO_2 concentration along highways formulated as a conditional linear cyclostationary random process, explicitly accounting for cyclostationarity and the physical mechanisms underlying NO_2 emissions. The proposed framework draws inspiration from Gaussian plume models, which are widely employed to simulate pollutant dispersion from point sources, providing a simplified yet practical basis for air quality modeling. We develop a model of NO_2 highway pollution that characterizes emissions as a superposition of stochastically dependent plumes, where point sources arise in time according to a non-homogeneous Poisson process.

Keywords: air pollution, mathematical modelling, monitoring, time series analysis, machine learning, estimation.

Стаття надійшла до редакції / Received 07.10.2025

Прийнята до друку / Accepted 11.11.2025

Постановка проблеми у загальному вигляді

та її зв'язок із важливими науковими чи практичними завданнями

Обґрунтування та аналіз властивостей математичної моделі становить один із ключових етапів розробки сучасних інформаційних систем та технологій, побудованих на методах опрацювання часових рядів, машинному навчанні, штучному інтелекті. Серед стохастичних моделей сигналів та часових рядів поширеними є лінійні випадкові процеси, методологія застосування яких у теоретичних і прикладних задачах є добре розробленою. Узагальненням цих підходів виступають умовні лінійні випадкові процеси (УЛВП) [1,2], що використовуються для математичного моделювання сигналів, які можна представити як суму значної кількості стохастично залежних випадкових імпульсів (на відміну від класичних лінійних моделей, де імпульси вважаються незалежними), що виникають у випадкові пуассонівські моменти часу. Застосування таких моделей

охоплює низку прикладних галузей, серед яких і моніторинг забруднень атмосферного повітря. Розвиток методології математичного моделювання часової динаміки концентрації забруднень атмосферного повітря на основі УЛВП, враховуючи фізичні особливості виникнення, поширення та часової динаміки забруднень, є актуальною науково-прикладною проблемою.

Аналіз досліджень та публікацій

Математичні моделі та методи аналізу часових рядів відіграють ключову роль у моніторингу забруднення повітря діоксидом азоту (NO_2). Для опису концентрацій NO_2 застосовуються різні детерміновані та стохастичні моделі, що функціонують на погодинному, добовому, тижневому та місячному масштабах [3,4].

Детерміновані моделі базуються на фізико-хімічних рівняннях, які описують процеси утворення, транспортування та розсіювання NO_2 , забезпечуючи механістичне пояснення закономірностей атмосферного забруднення [5]. Вони ґрунтуються на фундаментальних законах фізики та хімії, що визначають поведінку забруднювачів у повітрі. За допомогою математичних рівнянь моделюються викиди, транспорт, хімічні перетворення та осадження NO_2 . Такі моделі дозволяють отримати детальне уявлення про атмосферні процеси, що впливають на концентрації NO_2 , та проводити комплексний аналіз якості повітря.

Статистичні моделі та методи машинного навчання використовують історичні дані й статистичні методи для встановлення залежностей між концентраціями NO_2 та чинниками впливу, забезпечуючи орієнтований на дані підхід до аналізу якості повітря [6]. Аналізуючи часові ряди, ці моделі виявляють закономірності та тенденції у динаміці NO_2 , що дозволяє здійснювати прогнозування майбутнього стану атмосферного середовища [7]. Статистичні та машинно-навчальні підходи є доповненням до детермінованих моделей, особливо у випадках, коли детальна інформація про викиди та атмосферні процеси є обмеженою [8].

Регресійні методи, зокрема множинна лінійна регресія та квантильна регресія [9], застосовуються для оцінки концентрацій NO_2 на основі набору предикторних змінних. Для прогнозування майбутніх рівнів забруднення використовуються методи аналізу часових рядів, такі як авторегресивна інтегрована модель ковзного середнього (ARIMA), сезонна авторегресивна інтегрована модель ковзного середнього (SARIMA), мережі з довгою короткочасною пам'яттю (LSTM) та нелінійні авторегресивні нейронні мережі [6].

Такі моделі здатні відображати часові закономірності, включаючи сезонні та трендові компоненти, виявляючи циклічні та довгострокові зміни у концентраціях NO_2 . Сезонність у цьому контексті означає повторювані коливання рівнів NO_2 у певні періоди року, наприклад, підвищення концентрацій у зимові місяці через інтенсивніше використання опалювальних систем. Водночас наведені вище моделі часових рядів, з погляду теорії випадкових процесів, належать до стаціонарних, тобто їх ймовірнісні характеристики (математичне сподівання, коваріаційна функція, функції розподілу) не залежать від зсуву в часі. Це обмежує їх здатність відображати циклостаціонарну природу динаміки забруднень, яка часто зумовлена повторюваними патернами людської активності. Зокрема, циклічність погодинної концентрації NO_2 на автомагістралях значною мірою визначається добовими коливаннями інтенсивності транспортних потоків.

Формулювання цілей статті

Метою роботи є обґрунтування математичної моделі динаміки концентрації забруднення повітря діоксидом азоту, викликаного автомобільним трафіком із врахуванням фізичного механізму його породження та циклостаціонарних властивостей. Обґрунтування моделі дасть можливість здійснити аналіз ймовірнісних характеристик досліджуваного процесу, визначити методи та технології його опрацювання.

Виклад основного матеріалу

Математична модель концентрації забруднення повітря NO_2 , спричиненого потоком транспортних засобів, створена на основі припущення, що концентрацію NO_2 можна представити у вигляді суми фонові концентрації $C(\omega, r, t)$, $\omega \in \Omega$, $r \in \mathbb{R}^3$, $t \in \mathbb{R}$ (де $\omega \in \Omega$ простір елементарних подій) та умовного лінійного випадкового поля $\xi(\omega, r, t)$, $\omega \in \Omega$, $r \in \mathbb{R}^3$, $t \in \mathbb{R}$ що має наступне інтегральне представлення:

$$\xi(\omega, r, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\omega, \rho, \tau; r, t) d\eta(\omega, \rho, \tau), \quad (1)$$

де $\varphi(\omega, \rho, \tau; r, t)$, $\rho \in \mathbb{R}^3$, $\tau \in \mathbb{R}$ - стохастичне ядро,

$\eta(\omega, \rho, \tau)$ – просторово-часове стохастично неперервне гільбертове випадкове поле з незалежними приростами (породжуюче випадкове поле),

Випадкові функції $\varphi(\omega, \rho, \tau; r, t)$ і $\eta(\omega, \rho, \tau)$ є стохастично незалежними.

Якщо нам потрібна модель тільки концентрації забруднення повітря NO_2 в конкретному просторовому місці (наприклад, точковий сенсор на автомагістралі), ми можемо розглянути умовний лінійний випадковий процес $r \in \mathbb{R}^3$, який визначається як інтегральне представлення в неперервному часі в наступному вигляді:

$$\xi(\omega, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\omega, \tau, t) d\eta(\omega, \tau), \quad \omega \in \Omega, \quad t \in \mathbb{R}, \quad (2)$$

де $\varphi(\omega, \tau, t)$, $\tau, t \in \mathbb{R}$ – дійсна випадкова функція (ядро),

$\eta(\omega, \tau)$, $\tau \in \mathbb{R}$, $P(\eta(\omega, 0) = 0) = 1$ – дійсний гільбертовий стохастично неперервний випадковий процес з незалежними приростами (породжуючий процес),

$E\eta(\omega, \tau) = a(\tau) < \infty$ і $Var[\eta(\omega, \tau)] = b(\tau) < \infty$, $\forall \tau$,

випадкові функції $\varphi(\omega, \tau, t)$ і $\eta(\omega, \tau)$ є стохастично незалежними.

На основі аналізу результатів, пов'язаних зі стохастичним моделюванням транспортних потоків, ми припускаємо, що транспортні засоби прибувають до деякої ефективної зони (точки або відрізка на шосе) в

Пуассонівські моменти часу, які є точковими джерелами забруднення повітря діоксидом азоту. На основі цього можемо стверджувати, що $\eta(\omega, \tau)$, $\tau \in \mathbb{R}$ є неоднорідним узагальненим процесом Пуассона.

Випадкові функції $\varphi(\omega, \tau, t)$, $\tau, t \in \mathbb{R}$ є стохастично залежними випадковими функціями, які представляють забруднення, викликане різними точковими джерелами (внесок відповідних транспортних засобів у концентрацію NO_2). Кожна функція $\varphi(\omega, \tau, t)$ описує просторово-часову еволюцію шлейфу NO_2 від одного транспортного засобу. Властивості функцій $\varphi(\omega, \tau, t)$ потребують додаткового дослідження. Але ми вважаємо, що вони залежать від типу транспортного засобу, віку, об'єму двигуна, технічного обслуговування, прискорення/уповільнення, швидкості та навантаження, характеристик шлейфу, параметрів хімічного перетворення, мікромасштабної турбулентності, що генерується самим транспортним засобом або під впливом його безпосереднього оточення. Форма функції $\varphi(\omega, \tau, t)$ зазвичай моделює адвекцію (перенесення шлейфу вітром) і дисперсію (поширення шлейфу через атмосферну турбулентність), а також хімічні реакції.

Тобто, ми представляємо концентрацію NO_2 як суму стохастично залежних внесків від окремих транспортних засобів та фонові концентрації (стохастичний процес, на який впливають масштабні атмосферні перевезення, викиди з інших джерел та метеорологічні умови).

Властивості умовних лінійних випадкових процесів детально розглянуто в [1,2]. Цей клас процесів є узагальненням лінійних випадкових процесів. Для моделювання погодинних концентрацій потрібно означити дискретно-часовий варіант умовного лінійного випадкового процесу.

Дійсний умовний лінійний випадковий процес з дискретним часом (умовний лінійний часовий ряд) $\xi_t(\omega)$, $t \in \mathbb{Z}$, $\omega \in \Omega$ означається наступним чином:

$$\xi_t(\omega) = \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \varphi_{\tau,t}(\omega) \zeta_{\tau}(\omega), \quad (3)$$

де $\varphi_{\tau,t}(\omega)$, $\tau, t \in \mathbb{Z}$ – дійсна випадкова матриця (або двовимірне випадкове поле на $\mathbb{Z}^2$),

$\zeta_{\tau}(\omega)$, $\tau \in \mathbb{Z}$ – послідовність безмежно подільних незалежних випадкових величин (безмежно подільний білий шум) з математичним сподіванням і дисперсією $E\zeta_{\tau}(\omega) = a_{\tau} < \infty$, $\text{Var}[\zeta_{\tau}(\omega)] = \sigma_{\tau}^2 < \infty$, $\forall \tau$,

випадкові функції $\varphi_{\tau,t}(\omega)$ і $\zeta_{\tau}(\omega)$ є стохастично незалежними.

Як ми вже згадували вище, погодинна динаміка концентрації NO_2 , викликана потоком транспортних засобів має властивість циклостационарності. У моделі умовного лінійного випадкового процесу з дискретним часом ця властивість представлена наступним чином.

Нехай існує найменше ціле число (період) $T > 1$ таке, що білий шум $\zeta_{\tau}(\omega)$ має періодичні математичні сподівання і дисперсію, тобто $E\zeta_{\tau}(\omega) = a_{\tau} = a_{\tau+T}$ і $\text{Var}[\zeta_{\tau}(\omega)] = \sigma_{\tau}^2 = \sigma_{\tau+T}^2$, а математичне сподівання і кореляційна функція ядра $\varphi_{\tau,t}(\omega)$ мають такі властивості: $\varphi_{\tau,t} = \varphi_{\tau+T,t+T}$, $R_{\tau,s;t_1,t_2}^{\varphi} = R_{\tau+T,s+T;t_1+T,t_2+T}^{\varphi}$.

Тоді умовний лінійний випадковий процес з дискретним часом є періодично корельованою випадковою послідовністю, тобто виконується наступне: $E\xi_t(\omega) = E\xi_{t+T}(\omega)$ (математичне сподівання є періодичною функцією), $R_{t_1,t_2} = R_{t_1+T,t_2+T}$ (кореляційна функція є періодичною функцією щодо її часових аргументів).

Аналогічну властивість можна отримати і стосовно характеристичної функції УЛВП. А саме, якщо існує таке найменше ціле число $T > 1$, що випадкові матриці $\varphi_{\tau,t}(\omega)$ і $\varphi_{\tau+T,t+T}(\omega)$ стохастично еквівалентні в широкому сенсі, а білий шум $\zeta_{\tau}(\omega)$, $\tau \in \mathbb{Z}$ є стохастично періодичним (циклостационарним), то характеристична функція $f_{\xi}(u_1, u_2, \dots, u_m; t_1, t_2, \dots, t_m)$ є періодичною за своїми часовими аргументами, тобто, вона задовольняє такій умові: $f_{\xi}(u_1, u_2, \dots, u_m; t_1, t_2, \dots, t_m) = f_{\xi}(u_1, u_2, \dots, u_m; t_1 + T, t_2 + T, \dots, t_m + T)$.

Циклостационарні властивості мають важливе значення для аналізу погодинного забруднення повітря на автомагістралях, оскільки вони забезпечують більш точну та реалістичну основу для розуміння та прогнозування рівнів забруднення.

Висновки

У роботі розглянуто задачі математичного моделювання, аналізу та моніторингу забруднення повітря, викликаного викидами діоксиду азоту. Зокрема, було розглянуто проблему математичного моделювання та аналізу концентрацій забруднення повітря на автомобільних дорогах внаслідок руху автомобільного транспорту. Обґрунтовано математичну модель досліджуваного процесу у вигляді умовного лінійного циклостационарного часового ряду з урахуванням фізичної природи формування забруднення повітря, що відображає комбінований ефект стохастично залежних викидів від транспортних засобів, що прибувають в деяку ефективну зону відповідно до неоднорідного пуассонівського потоку.

Також проаналізовано властивості багатовимірної характеристичної функції моделі, її математичного сподівання та кореляційної функції. На основі проведеного аналізу обґрунтовано властивість циклостационарності досліджуваного процесу.

Література

1. Fryz M. Determination of the characteristic function of discrete-time conditional linear random process and its application / M. Fryz, B. Mlynko // Scientific Journal of TNTU. – Tern. : TNTU, 2023. – Vol 109.– No 1. – P.16–23.
2. Бабак В.П. Об'єктно-орієнтована ідентифікація стохастичних шумових сигналів / В.П. Бабак, Ю.В. Куц, М.В. Мислович, М.Є. Фриз, Л.М. Щербак. - Київ: Наукова думка, 2024. - 240 с.

3. Rybarczyk Y. Machine Learning Approaches for Outdoor Air Quality Modelling: A Systematic Review / Y. Rybarczyk, R. Zalakeviciute // *Applied Sciences*. - 2018. - Vol. 8, №12. – DOI: <https://doi.org/10.3390/app8122570>.
4. Shao Y. Estimation of daily NO₂ with explainable machine learning model in China, 2007–2020 / Y. Shao // *Atmos. Environ.* 2023. - Vol. 314. - P. 120111. – DOI: <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2023.120111>.
5. Reiminger N. Modeling NO₂ concentrations in real urban areas using computational fluid dynamics: A comparative analysis of methods to assess NO₂ concentrations from NO_x dispersion results / N. Reiminger // *Sustain. Cities Soc.* - 2024. - Vol. 103. P. 105286. - DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scs.2024.105286>.
6. Al Yammahi A. Forecasting the concentration of NO₂ using statistical and machine learning methods: A case study in the UAE / A. Al Yammahi, Z. Aung // *Heliyon*. - 2023. - Vol. 9, № 2. - P. e12584.
7. Marinov E. Time Series Forecasting of Air Quality: A Case Study of Sofia City / E. Marinov, D. Petrova-Antonova, S. Malinov // *Atmosphere*. - 2022. Vol. 13, № 5. – DOI: <https://doi.org/10.3390/atmos13050788>.
8. Subramaniam S. Artificial Intelligence Technologies for Forecasting Air Pollution and Human Health: A Narrative Review / S. Subramaniam // *Sustainability*. - 2022. - Vol. 14, № 16.
9. Vasseur S.P. Comparing quantile regression methods for probabilistic forecasting of NO₂ pollution levels / S.P. Vasseur, J.L. Aznarte // *Sci. Rep.* - 2021. - Vol. 11, № 1. – P. 11592.

References

1. Fryz M. Determination of the characteristic function of discrete-time conditional linear random process and its application / M. Fryz, B. Mlynko // *Scientific Journal of TNTU*. – Tern. : TNTU, 2023. – Vol 109.– No 1. – P.16–23.
2. Babak V.P. Object-oriented identification of stochastic noise signals / V.P. Babak, Y.V. Kuts, M.V. Myslovych, M.Ye. Fryz, L.M. Scherbak. - Kyiv: Naukova dumka, 2024. - 240 p.
3. Rybarczyk Y. Machine Learning Approaches for Outdoor Air Quality Modelling: A Systematic Review / Y. Rybarczyk, R. Zalakeviciute // *Applied Sciences*. - 2018. - Vol. 8, №12. – DOI: <https://doi.org/10.3390/app8122570>.
4. Shao Y. Estimation of daily NO₂ with explainable machine learning model in China, 2007–2020 / Y. Shao // *Atmos. Environ.* 2023. - Vol. 314. - P. 120111. – DOI: <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2023.120111>.
5. Reiminger N. Modeling NO₂ concentrations in real urban areas using computational fluid dynamics: A comparative analysis of methods to assess NO₂ concentrations from NO_x dispersion results / N. Reiminger // *Sustain. Cities Soc.* - 2024. - Vol. 103. P. 105286. - DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scs.2024.105286>.
6. Al Yammahi A. Forecasting the concentration of NO₂ using statistical and machine learning methods: A case study in the UAE / A. Al Yammahi, Z. Aung // *Heliyon*. - 2023. - Vol. 9, № 2. - P. e12584.
7. Marinov E. Time Series Forecasting of Air Quality: A Case Study of Sofia City / E. Marinov, D. Petrova-Antonova, S. Malinov // *Atmosphere*. - 2022. Vol. 13, № 5. – DOI: <https://doi.org/10.3390/atmos13050788>.
8. Subramaniam S. Artificial Intelligence Technologies for Forecasting Air Pollution and Human Health: A Narrative Review / S. Subramaniam // *Sustainability*. - 2022. - Vol. 14, № 16.
9. Vasseur S.P. Comparing quantile regression methods for probabilistic forecasting of NO₂ pollution levels / S.P. Vasseur, J.L. Aznarte // *Sci. Rep.* - 2021. - Vol. 11, № 1. – P. 11592.