

Василенко С.Л.

**СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСФОРМАЦИИ
АЗОСОДЕРЖАЩИХ КОМПОНЕНТ В ВОДОТОКАХ ДЛЯ ЗАДАЧ ОХРАНЫ
ВОД**

Математические модели, реализуемые в виде машинных компьютерных программ, играют все большую роль в процессе принятия решений в различных водоохраных задачах. Они позволяют компактно выразить основные свойства водного объекта и получать с помощью математических операций сведения об его функционировании в определенных условиях. Методы моделирования дают инструментарий для анализа устойчивости водных биоценозов без прямого экспериментирования на водных объектах, которое в ряде случаев невозможно либо нецелесообразно.

Практический интерес представляют вопросы разработки моделей, описывающих процессы формирования качества воды в водотоках по азотосодержащим компонентам и отвечающих требованиям при решении многокритериальных оптимизационных задач в области охраны вод.

Один из таких подходов предложен, например, в работе [1] для последовательной трансформации четырех азотных составляющих: растворенный органический, аммонийный, нитритный, нитратный. Его обобщение нашло отражение при построении экологических моделей разной сложности в виде систем дифференциальных уравнений в частных производных [2] с учетом биологической продуктивности водных объектов, связанной с жизнедеятельностью разных форм планктона.

В последние годы получил распространение также альтернативный подход [3, 4], который позволяет получить необходимые результаты в условиях неполной информации о механизме моделируемых процессов и предполагает определение вида и параметров модели таким образом, чтобы достичь наилучшего приближения рассчитанных по модели процессов к реальным условиям.

При этом наиболее приемлемым представляются зависимости, вид которых отражает существенные причинно-следственные связи реальных внутри водоемных процессов, а параметры оцениваются с применением статистических методов, исходя из критериев наилучшего приближения рассчитанного выходного процесса к фактически измеренному. В теории идентификации систем такие множества моделей с настраиваемыми параметрами, допускающими физическую интерпретацию, называют также "серыми ящиками".

В настоящей работе результаты исследований [1, 2] доводятся до уровня аналитических зависимостей и используются затем при построении статистических моделей, пригодных для практического применения в различных задачах охраны вод.

В некотором смысле это можно считать симбиозом двух направлений:

- в основу полагаются способы моделирования В. Еременко, состоящие в изучении и количественном описании изменения качества воды на основе известных закономерностей, исходя из теоретических представлений о природе моделируемых процессов;
- соотношения представляются в удобной компактной форме, допускающей анализ и статистическую обработку экспериментальных данных, собранных непосредственно на изучаемом водном объекте и определяющих его "вход-выход", а также идентификацию параметров модели.

Для определенности изложения основного содержания предлагаемого подхода ограничимся на одной достаточно простой схеме взаимосвязи азотосодержащих компонент, приемлемой для выполнения инженерных расчетов (рис. 1).

В этой схеме не учитываются:

- ⇐ бактерии, которые не подлежат стандартным измерениям и требуют проведение специальных исследований;

⇐ зоопланктон, как представитель более высокого трофического уровня, поскольку его продуктивность обычно не превышает 10 % от продуктивности фитопланктона [1], и он вносит наименьший вклад в массу и деструкцию органического вещества.

В первом приближении можно также исключить лимитирующее влияние фосфора на рост фитопланктона, которое для водотоков имеет несущественное значение в отличие, например, от замкнутых систем типа озера или водоема-охладителя.

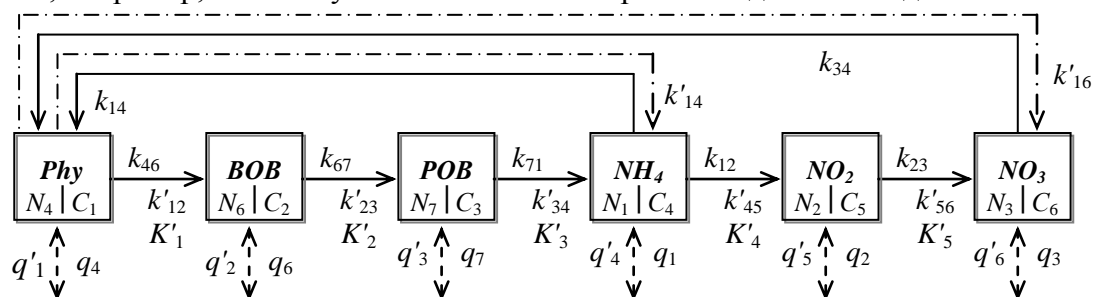


Рисунок 1 – Схема взаимосвязи азотосодержащих компонент: по Еременко [1] (обозначение N_i) и согласно обобщенному последовательно-параллельному процессу трансформации [5] (обозначение C_i , параметры помечены знаком "штрих")
 ———— дуальные внутренние связи, - - - внешние связи

Математическое моделирование основано на уравнениях баланса веществ с соответствующими начальными условиями. Конечные продукты трансформации веществ потребляются фитопланктоном, который затем в процессе отмирания сам становится поставщиком органического вещества через взвешенные вещества.

Система уравнений имеет вид (для удобства сопоставления результатов нумерация компонент сохранена, как в [2]):

$$\begin{cases} RN_1 = k_{71}N_7 - k_{12}N_1 - k_{14}N_4 + q_1, \\ RN_2 = k_{12}N_1 - k_{23}N_2 + q_2, \\ RN_3 = k_{23}N_2 - k_{34}N_4 + q_3, \\ RN_4 = (k_{14} + k_{34})N_4 - k_{46}N_4 + q_4, \\ RN_6 = k_{46}N_4 - k_{67}N_6 + q_6, \\ RN_7 = k_{67}N_6 - k_{71}N_7 + q_7, \end{cases} \quad (1)$$

где $R \equiv v \frac{\partial}{\partial x} - D \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ – дифференциальный оператор, v – скорость течения воды, D – коэффициент продольной диффузии, x – координата вдоль водотока; азот: N_1 – аммонийный (NH_4), N_2 – нитритный (NO_2), N_3 – нитратный (NO_3), N_4 – фитопланктона (Phy), N_6 – взвешенного органического вещества (BOB), N_7 – растворенного органического вещества (POB); k_{iu} – коэффициенты, характеризующие скорость трансформации i -той компоненты в u -тую или скорость отмирания фитопланктона, q_i – функции внешних источников (положительных или отрицательных).

Система уравнений (1) отражает закон сохранения массы и при принятых гипотезах описывает процессы трансформации компонент с точностью до параметров k_{iu} .

Рассматриваемая модель является частным случаем более общей модели процессов трансформации веществ [5], а именно – последовательное превращение шести компонент ($I=6$) с двумя дополнительными параллельными связями k_{14} , k_{34} .

Эквивалентная система дифференциальных уравнений для последовательно-параллельной трансформации веществ в общем случае имеет вид:

$$RC_i = -K'_i C_i + \sum_{u=1, i \geq 2}^{i-1} k'_{iu} C_u + q'_i, \quad i = \overline{1, I}, \quad (2)$$

где $K'_i = \sum_{u=i+1}^I k'_{iu}$ – обобщенный коэффициент трансформации i -той компоненты в остальные по последовательной цепочке по мере возрастания индекса u : $i+1 \leq u \leq I$, $C=C(x)$ – концентрации азотосодержащих компонент (рис. 1), $x \in [0, I]$; q'_i – функции внешних источников: те же, что и в (1), но с измененной нумерацией.

Для рассматриваемого примера $K'_1 = k_{46} - k_{14} - k_{34}$, $K'_2 = k_{67} = k'_{23}$, $K'_3 = k_{71} = k'_{34}$, $K'_4 = k_{12} = k'_{45}$, $K'_5 = k_{23} = k'_{56}$.

Учитывая знак (плюс или минус) в зависимости от принятой направленности превращения компонент, величины k'_{iu} называются дуальными коэффициентами трансформации между i, u -тыми компонентами [5]: $k'_{iu} = -k'_{ui}$, $k'_{iu} > 0$ при $i \rightarrow u$, $k'_{iu} < 0$ при $u \rightarrow i$; $k'_{i, i+1} = k'_{ii}$.

Для фитопланктона в качестве дуальных коэффициентов трансформации могут использоваться и комплексы типа $k_{u4}^\circ = \frac{k_f \mu_{u4} \bar{N}_u}{(k_{su4} + \bar{N}_u)}$, $u = 1, 3$, где μ_{u4} k_{su4} – максимальная скорость роста популяций фитопланктона и коэффициенты полунасыщения по кинетике Михаэлиса-Ментен, Моно; k_f – коэффициент освещенности, \bar{N}_u – усредненные концентрации компонент на некотором квазистационарном участке водотока.

Последовательно-параллельное превращение компонент удобно характеризовать в терминах конечного ориентированного несвязного линейного графа с вершинами (узлами) и соответствующими ребрами (ветвями): узлам графа соответствуют сами компоненты с концентрациями C_i , ребрам – массоперенос между компонентами на уровне дуальных внутренних связей либо их обмен с внешними источниками.

Исходя из общего подхода [5], решение системы уравнений (2) при $D = 0$ можно представить в виде следующих аналитических зависимостей:

$$C_i = C_{0i} k_i + q_i f_i^* + P_i, \quad i = \overline{1, 6}; \quad (3)$$

$$P_i = \sum_z \sum_{m=1}^{i_1} \sum_{u=m}^{i-1-\tilde{x}} (C_{0m} F_{i b_u} + q_m x G_{i b_u}) \prod_{s=m}^{i-1-\tilde{x}} k''_{b_s b_{s+1}} \rho_{b_s b_u}, \quad i \geq i_2; \quad (4)$$

$$f_i^* = \frac{k_i - 1}{\ln k_i}, \quad F_{i r} = K'_r \frac{(k_i - k_r)}{(K'_r - K'_i)}; \quad (5)$$

$$G_{i r} = K'_r \frac{f_i^* - f_r^*}{(K'_r - K'_i)} = F_{i r} \frac{f_i^* - f_r^*}{k_i - k_r}; \quad (6)$$

$$\rho_{su} = \frac{K'_s}{(K'_s - K'_u)} \wedge s \neq u \quad \vee \quad 1 \wedge s = u; \quad (7)$$

$$K_i = \exp(-K'_i x v^{-1}), \quad q_i = q'_i x v^{-1}, \quad (8)$$

где C_{0i} – начальные концентрации на входном участке водотока, $q'_i = const$ – функции внешних источников (нумерация соответствует концентрациям C_i), $k''_{iu} = k'_{iu} / K'_i$ – нормированный (безразмерный) коэффициент трансформации между парой i, u -тых компонент; i_1, i_2 – номера узлов соответственно перед первой и после последней удаленной вершиной графа в z -м столбце матрицы взаимосвязей b_{rz} ; \tilde{x} – количество удаляемых вершин графа при формировании параллельных цепочек. Индекс z в b_{rz} для простоты записи в (4) опущен. Расстояние (координата x) зафиксировано в интегральных коэф-

фициентах консервативности k_i . Матрица взаимосвязей b_{rz} представляет собой комбинацию из $z = 3$ возможных последовательно-параллельных цепочек от 1-й до 6-й компоненты (табл. 1): 1 – 2 – 3 – 4 – 5 – 6; 1 – 4 – 5 – 6; 1 – 6.

Таблица 1 – Параметры индексации модели для $I = 6$ азотосодержащих компонент

Элементы матрицы взаимосвязей b_{rz} , $z = \overline{1, 3}$; $r = \overline{1, 6 - \bar{x}}$	1	1	1
	2	4	6
	3	5	–
	4	6	–
	5	–	–
	6	–	–
Узел перед первой удаленной вершиной – i_1	$I-1$	1	1
Узел после последней удаленной вершины – i_2	2	4	6
Количество удаляемых вершин графа – \bar{x}	0	2	4

Предполагается, что обобщенные коэффициенты трансформации не равны между собой, то есть $K'_i \neq K'_r$; $i, r = \overline{1, I}$, $i \neq r$.

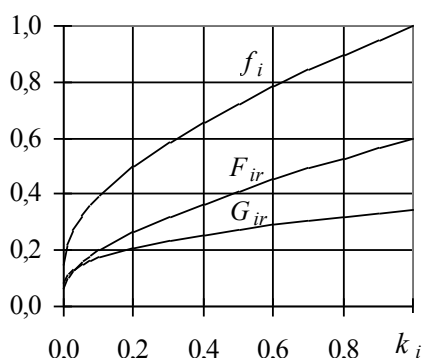


Рисунок 2 – Графики функций f_i^* ; G_{ir}, F_{ir} – при $k_r = 0,4$

Статистическая модель процесса. При построении статистических моделей необходимо исходить из условия сокращения числа свободных параметров (коэффициентов), которые идентифицируются по натурным данным. Кроме того, все параметры по возможности должны иметь физический смысл. Это позволяет определять границы их изменчивости, использовать результаты моделирования на других водных объектах, обеспечивает работоспособность моделей при существенных изменениях нагрузки водотока возвратными водами.

Анализ графиков функций G_{ir} , F_{ir} , f_i^* (рис. 2) относительно коэффициента консервативности k_i показывает, что они являются выпуклыми. Их частные производные при $k_i > 0,1$ изменяются незначительно и в целом они близки к линейным зависимостям в широком диапазоне изменения переменной k_i .

Если число измерений значимо в статистическом смысле, то представляется возможным перейти от рассмотренной модели к ее статистической модификации, обладающей рядом новых свойств, полезных для практических инженерных расчетов. Для этого целесообразно из всех параметров оценивать только интегральные коэффициенты консервативности, а модель относительно них линеаризовать, используя, например, разложение в ряд Тейлора относительно некоторой начальной точки k_{i0} .

Возможен и более эффективный способ линеаризации – по критерию минимума среднеквадратической ошибки (СКО) при замене функций их оценками. Одним из таких приближений являются прямые, проходящие через фиксированные точки $k_i = 1$ под большим углом к оси абсцисс, чем касательные, то есть

$$\begin{cases} \hat{f}_i^* = k_i^f = \mu_f + (1 - \mu_f)k_i; \\ \hat{F}_{ir} = k_i^F (1 - k_r), \quad k_i^F = \mu_F + (1 - \mu_F)k_i; \\ \hat{G}_{ir} = (1 - \mu_f)\hat{F}_{ir}, \end{cases} \quad (9)$$

где \hat{a} – символ оценки; μ_f, μ_F – параметры, влияющие на угол наклона линий аппроксимации и предварительно выбираемые из условия минимума СКО аппроксимации функций для различных диапазонов варьирования величин k_i .

Линейные приближения (9) вполне приемлемы для проведения инженерных расчетов: максимальные ошибки аппроксимации функций $\Delta_{\max} = |a - \bar{a}| \cdot 100$ не превышают 4,5 %, СКО – 3,0 % в широком интервале изменения коэффициентов консервативности $0,1 \leq k \leq 1,0$, причем с их увеличением точность существенно увеличивается. Применение соотношений (9) позволяет выделить для каждой i -той компоненты ее коэффициент консервативности k_i и представить модель (3)-(8) таким образом:

$$\hat{C}_i = k_i [C_{0i} + q_i(1 - \mu_f) + U_r] + q_i \mu_f + W_r + \Delta \tilde{N}_i, \quad (10)$$

где величины U_r , W_r не зависят от k_i и включают в себя слагаемые, зависящие от параметров компонент $r < i$ (в том числе линейным образом от концентраций C_r); $x = l$.

Аддитивные параметры ΔC_i характеризуют неконтролируемые возмущения, что согласуется с фактическим положением дел, когда в реальных условиях не представляется возможным осуществить полный контроль всех воздействий и учет всех природных и антропогенных факторов, оказывающих влияние на качество воды. Эти параметры определены на уровне математического ожидания невязок фактических и расчетных концентраций и не зависят от времени, что вполне допустимо при исследовании установившихся процессов формирования качества воды.

Введение в модель свободных параметров ΔC_i позволяет формализовать не измеряемые процессы до степени получения их численных оценок, а также автоматизировать процедуры оперирования с самими моделями.

Для последовательной оценки параметров k_i и ΔC_i статистической модели (10) по мере увеличения индекса i вполне приемлемы простые методы парной регрессии. В отличие от (3)-(8) коэффициенты трансформации K'_i в (10) могут быть равны между собой.

Разработанная модель достаточно полно описывает трансформацию азотосодержащих компонент и представляется в виде линейных зависимостей относительно концентраций веществ в начальном участке водотока и интегральных коэффициентов консервативности. Это позволяет их использовать при решении различных оптимизационных задачах, включая управление качеством воды. В целом полученные результаты отвечают предъявляемым требованиям к моделям, которые используются для целей охраны вод. Дальнейшие исследования в этом направлении целесообразно сосредоточить на проверке разработанной статистической модели на данных натуральных наблюдений для конкретных водотоков.

Литература

1. Васильев О.Ф., Еременко Е.В. Моделирование трансформации соединений азота для управления качеством воды в водотоках// Водные ресурсы. – 1980, № 5. – С. 110-117.
2. Еременко Е.В. Экологические модели разной сложности для прогнозирования качества воды // Проблемы охраны навколишнього природного середовища та техногенної безпеки: Зб. наук. пр. /УкрНДІЕП, Харків, 2000. – С. 90-99.
3. Василенко С.Л., Волошкіна О.С., Красовський Г.Я. Моделі якості води, зумовленої транскордонним переносом забруднюючих речовин у водотоках// Екологія і ресурси: Зб. наук. праць. – К.: УІНСіР РНБОУ, 2003. – Вип.5. – С. 98-105.
4. Василенко С.Л. Статистическая многокомпонентная модель трансформации веществ в зоне смешения речной и сточных вод// Экономические, технические и организационные основы охраны вод: Сб. науч. тр. – Харьков: ВНИИВО, 1986.– С.138-147.
5. Василенко С.Л. Моделирование процессов последовательно-параллельной трансформации веществ для решения задач оптимизации в области охраны вод// Інтегровані технології та енергозбереження. – 2004, № 1.