

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАКСИМАЛЬНЫХ КОНЦЕНТРАЦИЙ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ВЕЩЕСТВ В МАЛЫХ ВОДОТОКАХ

Выполнено математическое моделирование максимальных значений концентрации аммонийного азота методом Монте-Карло притока реки Сухона Двинско-Печерского бассейна. Предложена методика прогнозирования допустимого уровня биогенного загрязнения.

Малые реки, нечерноземная зона, биогенное загрязнение, математическое моделирование максимальных гидрохимических характеристик.

Антропогенная деятельность на водосборных площадях связана с изменением естественных параметров окружающей среды. С середины двадцатого века начаты исследования, направленные на оценку влияния хозяйственной деятельности, на природную среду водосборов поверхностных водных объектов. Эти работы привели к формированию государственных структур по организации мониторинга окружающей среды на водосборных бассейнах, разработке нормативных документов, регламентирующих содержание загрязняющих веществ в речных водах.

На современном этапе исследований при оценке загрязненности поверхностных вод различными веществами преобладает детерминированный подход. Суть его заключается в сопоставлении результатов химического анализа содержания в пробе воды загрязняющих веществ с нормативно-установленной концентрацией данного ингредиента в речной воде. Такой подход не отражает истинных динамических процессов, происходящих в речных водах, поэтому малоэффективен. Загрязнение водотоков является сложным многофакторным процессом, складывающимся из естественных (природно-климатических) и искусственных (антропогенных) явлений стохастической природы. Следует отметить, что формирование концентрации загрязняющего вещества в водотоке происходит под влиянием различных случайных факторов, поэтому и сам процесс загрязнения – стохастический. Стохастический подход позволяет получить с заданной вероятностью оценки количественных показателей концентрации загрязнения. Нормирование концентрации загрязняющего вещества в зависимости от величины обеспеченности дает возможность научно обоснованно защитить водный объект от превышения допустимого уровня концентрации этого вещества в речных водах.

В процессе анализа натуральных наблюдений удалось выделить два напряженных сезона, связанных с особенностями работы дренажных осушительных систем. Последние выступают основными загрязнителями природных вод малых рек биогенными веществами, которые поступают с сельскохозяйственных угодий, расположенных на площадях бассейнов рек. Для условий нечерноземной зоны России указанные сезоны следующие: весенний (март–май) и летне-осенний (август–октябрь). В эти периоды дренажные осушительные системы наиболее активны; влияние

дренажного стока на воды водоприемников, к которым чаще всего относятся малые реки, – наиболее заметно.

Высокие концентрации биогенных веществ, поступающих с площади водосбора, способствуют ускорению эвтрофикационных процессов, особенно для неглубоких, слабоподвижных и хорошо прогреваемых водоемов. Наиболее опасными в этом отношении выступают соединения азота и фосфора.

Изучение динамики гидрологических и гидрохимических характеристик малых водотоков способствует уточнению и корректировке уровня загрязнения средних и больших рек, так как «без малых рек нет больших». Сток малых рек составляет до 50% водности средних и крупных рек. Более 90% водных объектов Северо-западной зоны Российской Федерации составляют малые реки с высокой плотностью речной сети (~0,45 км/км²). Гидрологические и гидрохимические характеристики малых рек в настоящее время изучены слабо. Данная категория рек относится к третьему и четвертому классу по классификации Росгидромета. На водных объектах третьей категории наблюдения проводятся один раз в месяц, на объектах четвертой категории – в определенные гидрологические фазы (в среднем 3-7 раз в год). Эти данные представляют собой практически единственный материал, который можно использовать для прогностических исследований.

В основу предлагаемого метода расчета допустимого уровня содержания загрязняющего вещества в речной воде положен стохастический анализ исходной информации, в результате которого получают кривую обеспеченности максимального содержания загрязняющего вещества в створе полного смешения речных и сбросных вод с учетом фонового загрязнения речных вод. Для случая репрезентативного количества данных натуральных наблюдений подбор аналитической кривой обеспеченности осуществляется по критерию согласия Пирсона. При прочих равных условиях предпочтение отдается кривым трехпараметрического гамма-распределения. Однако, как это следует из сказанного выше, данных натуральных наблюдений недостаточно для проведения такого полноценного анализа, поэтому метод базируется на способе удлинения рядов наблюдений с помощью математического моделирования. На полученной тем или иным способом кривой обеспеченности устанавливается величина вероятности превышения, соответствующая

предельно допустимой концентрации (ПДК) конкретного ингредиента. Расчетное значение обеспеченности предлагается назначать с учетом категории реки и ее загрязненности в среднем на 5-10 % меньше обеспеченности ПДК. Расчетное значение концентрации загрязняющего вещества в створе полного смешения речных и дренажных вод является нормативно допустимым содержанием. Оно используется для расчетов предельно допустимых сбросов (предельно допустимого содержания загрязняющего вещества в дренажных водах в соответствии с балансовым уравнением).

Математическое моделирование концентрации загрязняющего вещества основано на использовании метода Монте-Карло (метод статистических испытаний). В его основе лежит натурная информация о максимальной концентрации загрязняющих веществ в речных водах и средней арифметической за выбранный сезон наблюдений (весенний или осенний). Статистический анализ этих данных обнаружил довольно тесную корреляцию между ними. Например, для малой реки Верхняя Ерга коэффициент корреляции составляет более 95% за период наблюдений в 28 лет. Естественно, что за такой короткий срок наблюдений при весьма малой их частоте сведения о максимальной концентрации загрязняющих веществ в речном стоке получаются недостоверными. Между тем, среднее арифметическое в статистическом анализе – это наиболее устойчивая вероятностная характеристика. В этой связи удлинение рядов наблюдений за средней концентрацией загрязняющих веществ в пределах одного периода в речных водах математическим методом представляется достаточно надежной операцией. При этом должно приниматься во внимание наличие или отсутствие автокорреляционных связей в хронологических рядах наблюдений [7]. При отсутствии таких связей (равенстве нулю коэффициента автокорреляции) расширение ряда наблюдений реализуется непосредственно по сглаженной кривой обеспеченности, полученной по результатам натуральных наблюдений. Суть этого вида моделирования состоит в следующем: розыгрыш случайной величины осуществляется при помощи генератора случайных чисел (ГСЧ). Равномерно распределенные числа, вырабатываемые ГСЧ в диапазоне 0–1, интерпретируются значениями величин обеспеченности (ось абсцисс). По кривой обеспеченности определяются значения ординат, которые соответствуют искомым случайным величинам найденного закона распределения. Для выполнения этой операции используются таблицы ординат кривых обеспеченности трехпараметрического гамма-распределения. Значения величин между узловыми точками определяются с помощью квадратической интерполяции по Бесселю [2, 8].

При наличии автокорреляционных связей в хронологическом ряду наблюдений за средними величинами концентрации загрязняющих веществ в пределах одного сезона (весеннего или осеннего) математическое моделирование усложняется и реализуется следующим образом [7]:

1. По хронологическому ряду средних арифметических значений за многолетний период методом моментов определяются оценки основных статистических параметров кривых распределения. С помощью

критериев согласия подбирается аналитическая кривая распределения.

2. Выполняется математическое моделирование случайных величин с внутрирядовой связью для трехпараметрического гамма-распределения в соответствии с формулой [3]:

$$C_{cp_i} = [\bar{C}_{cp} + r \cdot (C_{cp_{i-1}} - \bar{C}_{cp})] K_{pi}(\xi_i, C_{v_i}^{y_{cl}}), \quad (1)$$

где C_{cp_i} – первая искомая, средняя за сезон, случайная концентрация загрязняющего вещества, подчиняющаяся трехпараметрическому гамма-распределению с автокорреляционной связью на первом шаге моделирования; \bar{C}_{cp} – среднее арифметическое значение концентрации из средних величин данных натуральных наблюдений; r – коэффициент автокорреляции; $C_{cp_{i-1}}$ – последнее значение концентрации загрязняющего вещества в хронологическом ряду; K_{pi} – ордината, определенная по кривой обеспеченности в зависимости от выбранного ГСЧ случайного числа и условного коэффициента вариации $C_{v_i}^{y_{cl}}$. Последний рассчитывается по формуле:

$$C_{v_i}^{y_{cl}} = \frac{\sigma \cdot \sqrt{1-r^2}}{\bar{C}_{cp} + r(C_{cp_{i-1}} - \bar{C}_{cp})}, \quad (2)$$

где σ – среднее квадратическое отклонение.

3. Полученное значение C_{cp_i} подставляется в конец хронологического ряда. Таким образом, на первом шаге моделирования ряд данных натуральных наблюдений увеличивается на одно значение.

4. При каждом смоделированном значении осуществляется перерасчет статистических параметров ряда \bar{C}_{cp} , σ , r , определяется новое значение коэффициента $C_{v_i}^{y_{cl}}$ по формуле 2.

5. В зависимости от величины коэффициента $C_{v_i}^{y_{cl}}$ определяется новая кривая обеспеченности трехпараметрического гамма-распределения.

Для выполнения предложенного алгоритма в системе Microsoft Office Excel составлена программа с использованием пакета программирования VBA.

Уравнение прямой регрессии C_{max_i} по C_{cp_i} , где C_{max_i} – максимальное, а C_{cp_i} – среднее арифметическое значения концентраций конкретного ингредиента за один сезон i -го года ($i = 1, 2, \dots, n$, n – число лет наблюдений) то же, что в формуле (1), запишется в следующем виде:

$$C_{max_i} = \bar{C}_{max} + R \cdot \frac{\sigma_{max}}{\sigma_{cp}} \cdot (C_{cp_i} - \bar{C}_{cp}); \quad (3)$$

здесь R – коэффициент корреляции, σ_{max} и σ_{cp} – средние квадратические отклонения C_{max_i} и C_{cp_i} , \bar{C}_{max} и \bar{C}_{cp} – средние арифметические из максимальных и средних за весь срок наблюдений величин концентрации загрязняющего вещества в течение осеннего или весеннего периода.

В соответствии с [7] уравнение прямой регрессии (3) используется при удлинении ряда наблюдений за максимальной величиной концентрации загрязняющего вещества в выбранный весенний или осенний лимитирующий сезон путем математического моделирования. В процессе математического моделирования по величине C_{cp_i} определяется точка, лежащая на прямой регрессии (3), затем – случайное отклонение от нее, которое получается в результате розыгрыша. При этом предполагается, что случайные отклонения от прямой регрессии распределены по нормальному закону. Но тогда необходимо знать величину среднего квадратического отклонения случайных точек от прямой регрессии. Здесь используется фундаментальная зависимость, известная из теории дисперсионного анализа, в соответствии с которой

$$\sigma_{\max}^2 = \sigma_{0R}^2 + \sigma_R^2. \quad (4)$$

Зависимость (4) свидетельствует о том, что дисперсия относительно центра распределения равна сумме дисперсий относительно регрессии σ_{0R}^2 дисперсии σ_R^2 , обусловленной самой регрессией. Но из этого же дисперсионного анализа известно, что

$$\sigma_R^2 = R^2 \cdot \sigma_{\max}^2. \quad (5)$$

Подставляя (5) в (4), получим формулу для определения среднего квадратического отклонения случайных точек относительно прямой регрессии:

$$\sigma_{0R} = \sigma_{\max} \cdot \sqrt{1 - R^2}. \quad (6)$$

Окончательно с учетом (3) и (6) получим зависимость для моделирования случайных максимальных величин концентрации загрязняющего вещества за расчетный сезон в виде [7]:

$$C_{\max_i} = \bar{C}_{\max} + R \cdot \frac{\sigma_{\max}}{\sigma_{cp}} \cdot (C_{cp_i} - \bar{C}_{cp}) + \xi_i \cdot \sigma_{\max} \cdot \sqrt{1 - R^2}, \quad (7)$$

где ξ_i – случайная нормально распределенная величина. Нормально распределенная случайная величина моделируется с помощью кривой обеспеченности, которая находится в первой строчке таблицы биномиального закона распределения. Значения обеспеченности на оси абсцисс моделируются по равномерно распределенному закону случайных чисел, находящихся в диапазоне от 0 до 1 ГСЧ, имеющегося в программном обеспечении. Для каждого смоделированного значения обеспеченности с помощью квадратической интерполяции (по методу Бесселя) определяется значение ординаты по кривой нормального закона распределения. Таким образом, в предлагаемом методе математическое моделирование реализуется дважды: сначала моделируются средние значения концентрации загрязняющего вещества за весенний или осенний сезоны, а затем с учетом регрессионных связей – максимальное значение в выбранном сезоне. Оба типа моделирования можно проводить непрерывно или дискретно. При непрерывном моделировании после определения в результате розыгрыша величины C_{cp_i} моделирование продолжается с использованием уравнения (7), в результате находится случайная величина C_{\max_i} . После этого в уравнение (7) вводятся поправки в величины

\bar{C}_{\max} , \bar{C}_{cp} , R , σ_{\max} , σ_{cp} , учитывающие появление новой точки с координатами C_{\max_i} и C_{cp_i} . Далее моделирование можно продолжать, реализуя на следующем этапе изложенный выше алгоритм. При дискретном типе моделирования сначала разыгрывается полный набор величин C_{cp_i} , число которых назначается в зависимости от пожеланий исследователя. Выборка в хронологической последовательности сохраняется в памяти компьютера. Затем в той же последовательности начинается второй этап дискретного моделирования с использованием уравнения (7). Перед началом следующего шага, в котором будет использована следующая по порядку величина C_{cp_i} , вводятся поправки в уравнение (7), как было отмечено для случая непрерывного моделирования. По найденным в результате моделирования величинам строится эмпирическая кривая обеспеченности. По ней подбирается аналитическая кривая с помощью критерия Пирсона.

Для реализации предложенного метода разработан алгоритм и составлена программа с использованием программного обеспечения Microsoft Excel и приложений VBA.

Для выполнения математического моделирования концентрации биогенов в малых реках выбраны пять водотоков в бассейнах рек Северной Двины и Верхней Волги на территории Вологодской области. В данной работе проверка методики осуществлена с использованием натурной информации по реке Верхняя Ерга.

Эта река является левым притоком реки Сухоны, впадает в нее в среднем течении. По принятой классификации Верхняя Ерга относится к малым рекам. На ней установлен один гидрометрический пост наблюдений Росгидромета, совмещенный с гидрохимическим. Натурные наблюдения на данном посту относятся к четвертой категории и производятся лишь в определенные гидрологические фазы водного объекта. Экспериментальный ряд наблюдений охватывает период в 28 лет. В общей сложности ряд хронологических данных натурных наблюдений за концентрацией аммонийного азота составляет 147 значений. Из них за весенний сезон объем выборки составляет 85 значений. Из натурного хронологического ряда за весенний сезон были получены средние арифметические значения в каждом году наблюдений и для каждого года отобраны максимальные значения наблюдаемых величин. Таким образом, сформировано два ряда величин объемом в 28 значений. Затем была выполнена статистическая обработка средних арифметических значений концентрации аммонийного азота для весеннего сезона и получены следующие статистические характеристики:

максимальное значение в ряду – 1,18 мг/л;

среднее арифметическое значение – 0,47 мг/л;

коэффициент вариации $Cv = 0,9$;

отношение коэффициента асимметрии к коэффициенту вариации $Cs/Cv = 1,5$.

На основе полученных результатов построена эмпирическая кривая обеспеченности, к которой с по-

мощью статистического критерия согласия Пирсона подобрана аналитическая кривая трехпараметрического гамма-распределения с параметрами $Cv=0,7$, $Cs/Cv=1,0$. Расчетное значение критерия Пирсона равно 6,4, а критическое – 10,81.

По данным натуральных наблюдений была построена прямая регрессии между максимальными и средними за сезон концентрациями загрязняющего вещества (рис.1). Коэффициент линейной парной корреляции средних арифметических и максимальных значений за многолетний период для весеннего сезона оказался равным 0,95. В результате регрессионного анализа получены следующие параметры прямой: коэффициент регрессии – 1,44, свободный член – 0,05.

На рис. 1 приведены не только данные натуральных наблюдений, но и результаты математического моделирования C_{cp} и C_{max} . Количество моделируемых значений равно 100.

На рис. 2 представлены эмпирическая и аналитическая кривые обеспеченности, причем последняя подобрана по критерию согласия Пирсона. Эмпирическая кривая включает в себя 28 натуральных и 100 смоделированных значений. По совместным данным, полученным из натурального эксперимента и в результате моделирования значений, определены для максимальных концентраций аммонийного азота следующие статистические характеристики:

- максимальное значение в ряду – 2,31 мг/л;
- среднее арифметическое значение – 0,60 мг/л;
- коэффициент вариации $Cv=0,81$;

отношение коэффициента асимметрии к коэффициенту вариации $Cs/Cv=1,12$.

Аналитическая кривая обеспеченности трехпараметрического гамма-распределения имеет следующие параметры: $Cv=0,8$; $Cs/Cv=1,0$.

Методика определения допустимого уровня загрязняющего вещества в устье магистрального канала, впадающего в водоприемник, заключается в следующем. На кривой обеспеченности (рис. 2) находим по ординате значение, соответствующее ПДК, и определяем его обеспеченность. В нашем случае обеспеченность ПДК составляет примерно 7%. Согласно предлагаемой методике величину обеспеченности необходимо увеличить. Для этого принимаем обеспеченность допустимого уровня загрязнения равной 10%, которой соответствует максимальная концентрация 1,3 мг/л.

Полученное значение считается расчетным с учетом стохастического характера процесса загрязнения. Расчет концентрации загрязняющего вещества в дренажных водах следует проводить по балансовой зависимости, учитывающей расчетные характеристики расходов речного и дренажного стоков, а также концентрации загрязняющего вещества в фоновом створе. В первом приближении можно рекомендовать следующие расчетные значения величины обеспеченности: 60% для речного и 40% для дренажного стоков. Обеспеченность концентрации загрязняющего вещества в фоновом створе рекомендуется принимать равной 50% по кривой обеспеченности средних концентраций за сезон.

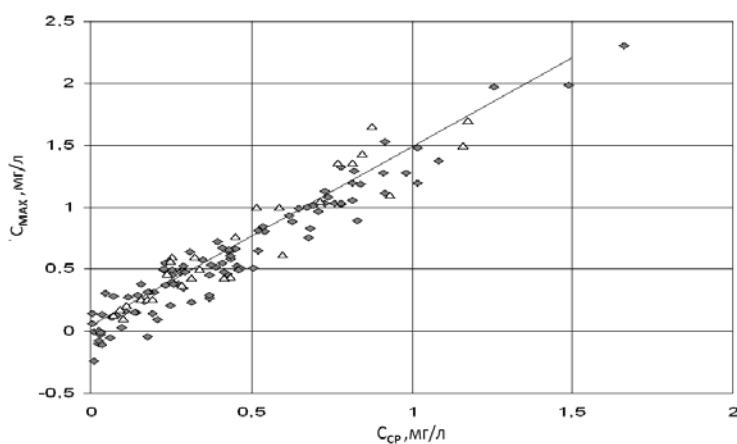


Рис. 1. Математическое моделирование максимальных значений концентрации аммонийного азота для весеннего сезона по результатам регрессионного анализа C_{max} по C_{cp} . Обозначения: сплошная линия и треугольник – прямая регрессии и разброс натуральных данных; ромб – разброс смоделированных величин

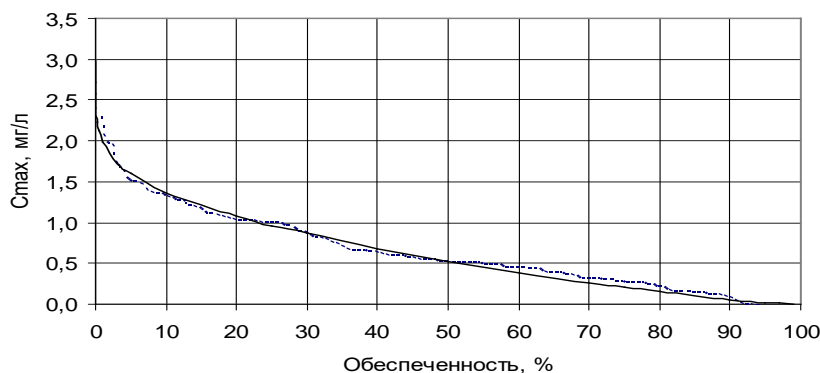


Рис. 2. Кривая обеспеченности максимальных значений многолетних данных за весенний сезон, удлиненных с помощью математического моделирования (пунктир), и аналитическая кривая трехпараметрического гамма-распределения (сплошная линия)

Литература

1. Боглов, М. В. Современные проблемы оценки водных ресурсов и водообеспечения / М. В. Боглов, В. М. Мишон, Н. И. Сенцова. – Москва: Наука, 2005. – 318 с.
2. Бронштейн, И. Н. Справочник по математике / И. Н. Бронштейн, К. А. Семенов. – Москва: Наука, 1980. – 977 с.
3. Крицкий, С. Н. Расчет многолетнего регулирования речного стока с учетом корреляционной связи между стоком смежных лет / С. Н. Крицкий, М. Ф. Менкель // Труды 3-го Всесоюзного гидрологического съезда. Т. 6. – Москва, 1959. – С. 6–18.
4. Крицкий, С. Н. Гидрологические основы управления речным стоком / С. Н. Крицкий, М. Ф. Менкель. – Москва: Наука, 1981. – 255 с.
5. Максимов, Ю. Д. Математическая статистика / Ю. Д. Максимов. – Санкт-Петербург: Изд-во СПбГПУ, 2004. – 100 с.
6. Михалев, М. А. Инженерная гидрология / М. А. Михалев. – Санкт-Петербург: Изд-во СПбГПУ, 2003. – 360 с.
7. Гидрологические основы гидротехники / А. Ш. Резниковский, А. Ю. Александров, В. В. Атурин и др. – Москва: Энергия, 1979. – 232 с.
8. Общая теория статистики: [учеб. пособие] / Т. В. Рябушкин, М. Р. Ефимова, И. М. Ипатова, Н. И. Яковлева – Москва: Финансы и статистика, 1981. – 279 с.
9. Федеральная служба России по гидрометеорологии и мониторингу окружающей среды. Северное территориальное управление по гидрометеорологии и мониторингу окружающей среды. Государственный водный кадастр. Разд. 1. Поверхностные воды. Сер. 2. Ежегодные данные о качестве поверхностных вод. Ч. 1. Реки и каналы Т.1 (28) РФ Бассейны рек на территории Архангельской, Вологодской и республики Коми. – 157 с.

S.N. Kovalenko

MATHEMATICAL MODELING OF MAXIMUM CONCENTRATIONS OF POLLUTANTS IN SMALL WATERCOURSES

Mathematical modeling of the maximum values of ammonium nitrogen concentration in the surface waters was performed on the example of the Sukhona river of the Dvinsko-Pechersky Basin using the Monte Carlo method. A method to predict the permissible level of biogenic pollution was proposed.

Small rivers, non-chernozem belt, biogenic pollution, mathematical modeling of maximum hydrochemical characteristics.