
<http://dx.doi.org/10.15407/dopovidi2016.10.060>

УДК 556,531:556,18:311

Член-корреспондент НАН Украины **В.И. Осадчий,**
Н.Н. Осадчая, Л.А. Ковальчук, О.Я. Скриник

Украинский гидрометеорологический институт
ГСЧС Украины и НАН Украины, Киев
E-mail: LeonidKovalchuk@ukr.net

Стохастический процесс изменения концентраций азота аммонийного в Десне

Восстановлен стохастический процесс изменения концентраций азота аммонийного в Десне за период 1991–2003 гг. посредством адекватных аналитических моделей. Вычислены вероятности категорий качества воды на годовых сечениях процесса. Путем решения уравнения Колмогорова–Фоккера–Планка для процесса Орнштейна–Уленбека определена заблаговременность достоверного оценивания вероятностей категорий качества воды, ограниченная 285 сутками.

Ключевые слова: стохастический процесс, вероятности категорий качества воды, уравнение Колмогорова–Фоккера–Планка, процесс Орнштейна–Уленбека.

Состояние проблемы. Возрастающее загрязнение среды обитания обусловило необходимость разработки и безотлагательного осуществления мероприятий по восстановлению и сохранению природного состояния водных объектов. Обычно используется несколько простых способов определения естественного состояния, например: 1) по аналогии с состоянием в отдалённом прошлом, когда антропогенное воздействие было минимальным, или 2) по 20–40%-му перцентилю исторического ряда наблюдений загрязняющих компонентов. Очевидно, что такой подход содержит существенные и неприемлемые изъяны, а именно: состояние в прошлом неизбежно связано с фазами климата и водности; перцентили не предполагают, что каждое измеренное значение концентрации загрязнителя (двойного происхождения: природного и антропогенного) может включать и природную и антропогенную составляющую. В качестве альтернативы предложен метод вероятностно-статистического разделения концентрации наблюдаемых компонент на природную и антропогенную составляющую [1], но применимость его ограничена одномодальными распределениями. При многомодальности не понятно, чем обусловлено появление дополнительных мод: внутрисистемными изменениями или же дополнительными внешними воздействиями. В случае внутрисистемных изменений разделение многомодальных распределений наблюдаемых концентраций на природную и антропогенную составляющую в первом приближении можно осуществлять вероятностным методом, предназначенным для одномодальных распределений, т.е. сложное распределение аппроксимировать одномодальным распределением. Если же обнаружены внешние воздействия — необходимо разрабатывать новый метод, приспособленный к многомодальным распределениям.

Путь к разделению наблюдаемых гидрохимических процессов на внутрисистемные и внешне управляющие процессы намечен в работах А.Н. Колмогорова [2] и И.Р. Пригожина [3, 4]. Подход Колмогорова–Пригожина, трансформированный к проблемам формирования качества поверхностных вод, предполагает вероятностное изучение нелинейной неравновесной гидрохимической системы случайных процессов, т.е. динамики статистических совокупностей гидрохимических компонент, обусловленной суммой эндогенных изменений и внешних воздействий. Другими словами и более детально. Сначала необходимо установить фазовое пространство изучаемой гидрохимической системы: определить фазовые координаты системы и провести анализ аттрактора системы. Затем оценить плотность вероятности $\rho_{\text{ф.п.}}$ состояний в фазовом пространстве системы, рассчитать мгновенное изменение плотности вероятности состояний $d\rho_{\text{ф.п.}}/dt$ и вычислить трансформации распределения. Если дополнительные модальности предсказуемы, то внешних дополнительных воздействий нет. Однако до настоящего времени не решена проблема определения фазового пространства гидрохимической системы, хотя, исходя из теории, фазовое пространство может быть определено по временному ряду наблюдений за гидрохимическим процессом, т.е. возможно восстановить гидрохимический процесс по историческим наблюдениям. Возможное в принципе восстановление нестационарных стохастических процессов, представляющее собой расчёт множества внутрисистемных и внешних корреляций, связано с большим объёмом результирующих материалов и проблематично для анализа. По грандиозности работы восстановление случайного процесса соизмеримо с описанием химическими формулами всех реакций, которые протекают в реальном водном объекте, но, также как и с химическими формулами, полнота описания случайного процесса водного объекта должна определяться решаемой практической задачей.

Наша цель — изыскать аналитические модели, отвечающие закономерностям формирования химического режима водных объектов и позволяющие восстанавливать случайные процессы исторических изменений гидрохимических компонент.

Материал и методика. В основу исследования положены материалы ежедневных гидрохимических наблюдений за содержанием азота аммонийного (NH_4^+ , мгN/дм³) в замыкающем створе Десны с 1991 по 2003 гг.

Ввиду значительных сложностей восстановления нестационарных гидрохимических процессов нами предлагается степень полноты восстановления определять по решаемой практической задаче. В нашем случае — это оценка сроков применимости для шкалы категорий качества воды.

В качестве рабочей гипотезы мы полагаем, что в основе временной динамики азота аммонийного — одного из случайных процессов гидрохимической системы — лежит процесс Гаусса, периодически деформируемый климатическими и антропогенными факторами. Учитывая, что случайный процесс имеет бесконечное множество реализаций и является в нашем случае не стационарным, будем изучать хронологическую последовательность ежегодных сечений теоретически бесконечного ряда ежедневных концентраций азота аммонийного.

Следуя рабочей гипотезе, для сравнительного статистического анализа нами использованы: модель Pearson-3 [5], обобщённые модели Gaussian-1 и Gaussian-2 [1, 6]. Аналитическое описание множества статистических распределений случайных величин было систематизировано в 1896 г. К. Пирсоном. Типизация “кривых Пирсона” упростила процедуры расчётов, но внесла ограничения. Например, модели плотностей вероятностей третьего типа (Pearson-3), представляющие распределения с левой асимметрией, не могут применяться для случаев, если в анализируемых данных имеются значения, близкие к нулю. Трёхпараметрическая экспоненциальная модель Gaussian-1 описывает распределения от островершинных, близких по своим свойствам к распределениям Коши и Лапласа, до нормальных, трапецеидальных и равномерных распределений. Обобщённая экспоненциальная модель Gaussian-2 позволяет оценивать плотности вероятностей, имеющих как левую, так и правую асимметрию. Двухвершинные статистические распределения идентифицировались посредством перечисленных моделей методом ком-плексации [7]. Для этого в соответствии с их центрами идентифицировались отдельно каждое

из двух распределений и затем объединялись. Адекватность моделей исходным статистическим распределениям оценивалась посредством критерия согласия χ^2 .

Вероятность категорий качества воды по азоту аммонийному вычислялась для каждого годового сечения процесса посредством интеграла вероятностей по общепринятым процедурам.

Практическая значимость полученных результатов продемонстрирована на динамике вероятностей категорий качества воды, вычисленной хронологически. Качество воды оценивалось с учётом максимальной концентрации компонента за период исследований по пяти категориям: 1 — отличная, 2 — хорошая, 3 — удовлетворительная, 4 — плохая, 5 — очень плохая. Очевидно, что по мере поступления новых данных могут появиться значения концентрации компонента, существенно превышающие исторический максимум, в результате чего изменятся границы категорий. Сроки и вероятность появления концентраций, превышающих исторический максимум, были определены посредством решения уравнения Фоккера—Планка—Колмогорова для стохастического процесса изменения концентраций. Но решение уравнения Фоккера—Планка—Колмогорова для частично восстановленного стохастического процесса изменения концентраций азота аммонийного, в свою очередь, — сложная задача. Ведь восстановленная эволюция одноточечной плотности вероятностей для некоторого случайного процесса по его единственной реализации может иметь на сечениях многомодальные распределения.

Для решения задачи сфокусируем внимание на границах процесса и учтём, что многомодальность возникает вследствие смешения случайных процессов, неопределённость каждого из которых определяется процессом Винера. Добавим к этому, что сумма винеровских процессов даёт процесс Винера. Следовательно, границы будущей неопределённости многомодального процесса могут быть определены в первом приближении, по его одномодальной аппроксимации. Далее полагаем, что неопределённость колебаний концентраций гидрохимических компонент, как природного, так и антропогенного происхождения, будет охвачена “винеровскими блужданиями”, удерживаемыми в естественных границах с одномодальным распределением. Поэтому изменения концентраций азота аммонийного в будущем были представлены посредством процесса Орнштейна—Уленбека, а границы неопределённости в будущем определены решением уравнения Фоккера—Планка—Колмогорова для процесса Орнштейна—Уленбека [8].

Необходимым условием реализации уравнения Орнштейна-Уленбека является временной интервал dt расчётов, в течение которого невозможны значимые, инструментально регистрируемые, изменения концентрации компонента:

$$dx = -\beta(x - \xi) dt + \sigma \delta W, \quad (1)$$

где x — концентрации компонента по ежедневным наблюдениям (x_{NH_4}); β — коэффициент “притяжения”; ξ — равновесный уровень “притяжения”; t — время, $dt = 4$ ч; σ — стандартное отклонение ($\sigma_{x_{\text{NH}_4}}$); $W(t)$ — бесконечно малый винеровский “шум”:

$$\delta W = \varepsilon \sqrt{dt}, \quad \varepsilon \sim N(0,1). \quad (2)$$

Параметры β и ξ определялись на основе результатов наблюдений:

$$\beta = \sigma^2_{\mu_{\text{NH}_4}} / 2R^2_{\mu_{\text{NH}_4}}, \quad R — \text{размах колебаний } \mu_{\text{NH}_4} \text{ (“коридор”);} \quad (3)$$

$$\xi = \mu_{(\text{NH}_4)k} / \mu_{(\text{NH}_4)h}, \quad (4)$$

где $\mu_{(\text{NH}_4)k}$ — средняя годовая концентрация компонента, вычисленная по наблюдаемым значениям за период k , исходная для вычисления по уравнению Орнштейна—Уленбека будущих значений динамических среднегодовых концентраций; $\mu_{(\text{NH}_4)h}$ — средняя годовая концентрация компонента, вычисленная по наблюдаемым значениям за период h , к которой будут “притягиваться” будущие значения динамических среднегодовых концентраций. В нашем случае $\xi = 1$, так как мы, прежде всего, стремились минимизировать ошибку оценивания вероятно-

сти перехода от исторически максимальной концентрации компонента к ближайшему значению концентрации, превышающей исторический максимум, т. е. $\mu_{(\text{NH}_4)k} = \mu_{(\text{NH}_4)h} = \mu_{(\text{NH}_4)\text{max}}$.

Плотность вероятности перехода $p(x_0, t_0 \Rightarrow x, t)$ от концентраций азота аммонийного x_{NH_4} к значениям концентраций, превышающих исторический максимум, оценивалась согласно решению уравнения Фоккера—Планка—Колмогорова процесса Орнштейна—Уленбека. Расчёт реализован посредством формул, удобных для вычислений [8]:

$$p(x_0, t_0 \Rightarrow x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D(t, t_0)}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{[x - \bar{x}(t, t_0)]^2}{D(t, t_0)} \right\}, \quad (5)$$

где

$$\bar{x}(t, t_0) = \xi + (x_0 - \xi) e^{-\beta(t-t_0)}, \quad (6)$$

$$D(t, t_0) = \frac{\sigma^2}{2\beta} (1 - e^{-2\beta(t-t_0)}). \quad (7)$$

На основе полученных значений плотностей вероятностей перехода $p(x_0, t_0 \Rightarrow x, t)$ с помощью интеграла вероятностей были вычислены вероятности перехода $P(x_0, t_0 \Rightarrow x, t)$.

Обсуждение результатов исследований. Уровень значимости критерия согласия χ^2 фактических статистических распределений и аналитических моделей Pearson-3, Gaussian-1 и Gaussian-2 концентраций азота аммонийного по годам колебался от 76,39 до 99,95 % (табл.1). Наименее успешной оказалась идентификация, относящаяся к 2001 г., что обусловлено пилообразным фактическим распределением концентраций и маленьким числом степеней свободы — 8. Хотя фактическое значение χ^2 было небольшим — 4,77, но уровень значимости при этом не мог превысить 76,39 %. Напротив, идентификация, относящаяся к 2003 г., сопровождавшаяся несколько большим числом степеней свободы — 13 и меньшим критерием χ^2 — 1,75, была оценена на высоком уровне значимости — 99,95 %.

Восстановленные, относящиеся к отдельным условным моментам времени, плотности вероятностей концентраций азота аммонийного в пункте Литки на Десне за период 1991—2003 гг. были разными. Или, другими словами, восстановленный стохастический процесс динамики

Таблица 1. Уровень значимости критерия согласия χ^2 идентификации статистических распределений концентраций азота аммонийного в Десне по годам

Год	Модель идентификации	Параметры критерия согласия χ^2		
		Число степеней свободы	Значение χ^2	Уровень значимости, %
1991	Одновершинная, Gaussian-1	13	4,20	98,85
1992	Одновершинная, Pearson-3	15	6,19	97,60
1993	Одновершинная, Pearson-3	12	5,33	98,86
1994	Двухвершинная, Gaussian-2	17	11,55	82,42
1995	Одновершинная, Pearson-3	15	2,89	99,95
1996	Двухвершинная, Gaussian-2	24	2,31	99,95
1997	Двухвершинная, Gaussian-1	16	2,22	99,95
1998	Одновершинная, Gaussian-1	9	6,07	80,86
1999	Одновершинная, Gaussian-1	10	6,56	76,46
2001	Одновершинная, Gaussian-1	8	4,93	76,39
2002	Одновершинная, Gaussian-1	8	4,77	78,09
2003	Двухвершинная, Pearson-3	13	1,75	99,95

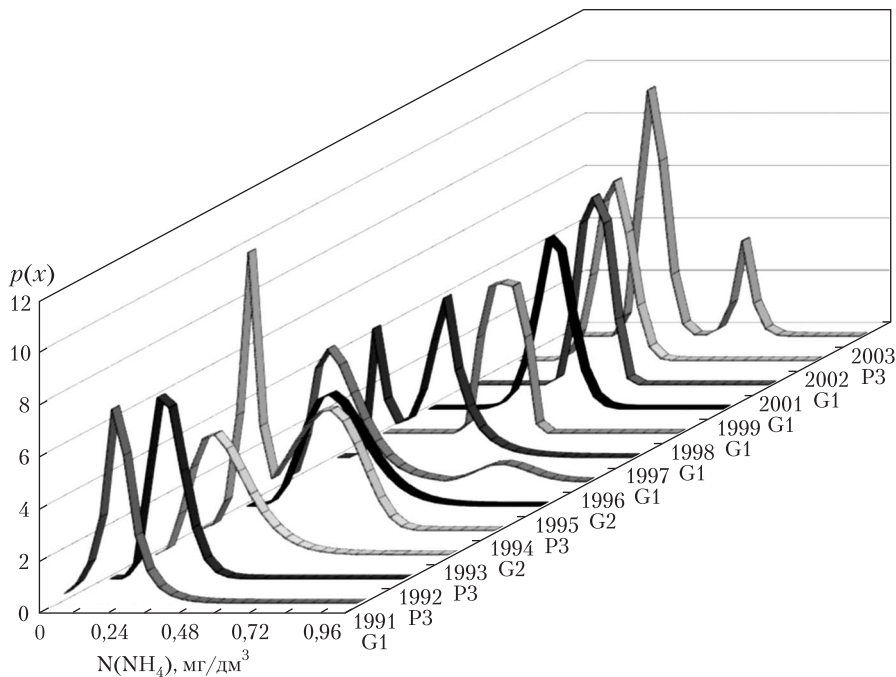


Рис. 1. Законы статистических распределений $p(x)$ на годовых сечениях стохастического процесса азота аммонийного $N(NH_4)$ в Десне: G1 – Gaussian-1, G2 – Gaussian-2, P3 – Pearson-3

концентраций азота аммонийного имел очень сложный вид (рис. 1). На его сечениях статистические распределения концентраций отличались как по форме, так и по диапазонам реализаций. Если в 1991–1993 гг. и в 1995 г. форма законов распределений оставалась одновершинной и диапазоны реализаций практически совпадали, то в 1994, 1996 и 1997 гг. распределения уже были двухмодальные (двухвершинные) с различными диапазонами реализаций. Затем в 1998, 1999 и 2001 гг. форма распределений вновь стала одновершинной, но диапазон реализаций уже

Таблица 2. Вероятности категорий качества воды в Десне за период 1991–2003 гг.

Год	Границы (мг/л) и категории качества воды				
	0–0,11	0,12–0,22	0,23–0,47	0,48–1,00	> 1,00
	Очень хорошая	Хорошая	Удовлетворительная	Плохая	Очень плохая
1991	0,199	0,607	0,147	0,002	0,045
1992	0,137	0,659	0,205	0,000	0,000
1993	0,022	0,216	<u>0,714</u>	0,049	0,000
1994	0,089	0,313	0,439	0,159	0,000
1995	0,000	0,027	<u>0,806</u>	0,167	0,000
1996	0,304	0,310	0,240	0,145	0,000
1997	0,126	0,175	<u>0,635</u>	0,064	0,000
1998	0,000	0,000	<u>0,949</u>	0,051	0,000
1999	0,000	0,006	<u>0,873</u>	0,120	0,001
2001	0,000	0,000	<u>0,964</u>	0,036	0,001
2002	0,001	0,116	<u>0,882</u>	0,001	0,000
2003	0,000	0,107	<u>0,678</u>	0,215	0,000

существенно изменился, ввиду отсутствия концентраций от 0 до 0,15 мг/дм³, что может свидетельствовать о значительном антропогенном воздействии. Напротив, в 2003 г. плотность вероятностей концентраций была двухвершинной, без реализаций в области низких концентраций. Восстановленный стохастический процесс концентраций азота аммонийного в Десне позволил обнаружить существенные изменения в режиме концентраций азота аммонийного в 1994, 1996 и 1997–2003 г.

Согласно восстановленному стохастическому процессу изменений концентраций азота аммонийного в Десне, “очень хорошая” вода наблюдалась только в 1991–1992 гг. при вероятности 0,14 – 0,20, а также в 1996–1997 гг. с вероятностью 0,13–0,30 (табл. 2). “Хорошая” вода обнаруживалась с более высокой частотой, достигавшей 61–66 % случаев в 1991–1992 гг. Кроме того, “хорошая” вода была выявлена в 1993–1994 гг. и в 2002–2003 гг. “Удовлетворительная” вода доминировала в 1993–1995 гг. и в 1997–2003 гг. Особо следует подчеркнуть, что в 1995 и в 1998–2002 гг. частота “удовлетворительной” воды достигала 80–96 % случаев. Вероятность “плохой” воды была существенной (0,15–0,17) в 1994–1996 гг., а также в 1999 и 2003 гг. (0,12, 0,22 соответственно). “Очень плохая” вода была выявлена только на протяжении 1991 г. и всего лишь в 5 % случаев.

Плотность вероятности перехода от максимального, среднего за год, значения концентрации азота аммонийного (0,39 мг/дм³) к возможным значениям “расползлась” с течением времени при изменяющемся динамическом среднем, которое, согласно уравнению (6), вышло на свое стабильное значение 0,81 на 275-е сутки. Аналогичным образом вели себя и вероятности перехода, достигнув уже на 285-е сутки вероятности 0,16 для максимального исторического значения концентрации азота аммонийного (1 мг/л), что может быть объективным основанием ожидать превышения концентрации исторического максимума в дальнейшем. Следовательно, срок пригодности принятой нами шкалы оценивания качества воды не превышает 285 суток.

Таким образом, аналитические модели Pearson-3, Gaussian-1 и Gaussian-2 соответствуют закономерностям формирования химического режима водных объектов и позволяют восстанавливать случайные процессы исторических изменений гидрохимических компонент. Экстраполяция вероятностей категорий качества воды по процессу азота аммонийного в Десне ограничена 285 сутками.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. *Осадчий В.И., Ковальчук Л.А.* Теоретические основы вероятностно-статистического разделения величины показателей химического состава водных объектов на природную и антропогенную составляющие // Доп. НАН України. – 2013. – № 4. – С. 97–103.
2. *Колмогоров А.Н.* О сохранении условно периодических движений при малом изменении функции Гамильтона // Докл. АН СССР. – 1954. – **98**. – С. 527–530.
3. *Пригожин И.* Философия нестабильности // Вопр. философии. – 1991. – № 6. – С. 46–52.
4. *Николис Г., Пригожин И.* Познание сложного. – Москва: Мир, 1990. – 344 с.
5. *Казакевич Д.И.* Основы теории случайных функций и её применение в гидрометеорологии. – Ленинград: Гидрометеониздат, 1977. – 320 с.
6. *Ковальчук Л.А.* Стохастическое оценивание вековой динамики сезонных распределений ежедневных атмосферных осадков на примере наблюдений в Киеве // Доп. НАН України. – 2014. – № 1. – С. 111–116.
7. *Новицкий П.В., Зограф И.А.* Оценка погрешностей результатов измерений. – Ленинград: Энергоатомиздат, 1985. – 248 с.
8. *Ковальчук Л.А.* Моделирование динамики статистических распределений температуры воздуха посредством процесса Орнштейна–Уленбека и уравнения Фоккера–Планка // Доп. НАН України. – 2014. – № 5. – С. 95–101.

REFERENCES

1. *Osadchiy V.I., Kovalchuk L.A.* Dopov. Nac. akad. Ukr., 2013, No 4: 97-103 (in Russian).
2. *Kolmogorov A.N.* Dokl. AN SSSR, 1954, **98**: 527-530 (in Russian).
3. *Prigogine I.* Voprosy filosofii, 1991, No 6: 46-52 (in Russian).

4. *Nicolis G., Prigogine I.* Exploring complexity, Moscow: Mir, 1990 (in Russian).
5. *Kazakevich D.I.* Fundamentals of the theory of random functions and its application in hydrometeorology, Leningrad: Gidrometeoizdat, 1977 (in Russian).
6. *Kovalchuk L.A.* Dopov. Nac. akad. Ukr., 2014, No 1: 111-116 (in Russian).
7. *Novitsky P.V., Zograf I.A.* Evaluation of errors of measurement results, Leningrad: Energoatomisdat, 1985 (in Russian).
8. *Kovalchuk L.A.* Dopov. Nac. akad. Ukr., 2014, No 5: 95-101 (in Russian).

Поступило в редакцію 28.03.2016

Член-кореспондент НАН України В.І. Осадчий,
Н.М. Осадча, Л.А. Ковальчук, О.Я. Скриник

Український гідрометеорологічний інститут ДСНС України і НАН України, Київ
E-mail: LeonidKovalchuk@ukr.net

СТОХАСТИЧНИЙ ПРОЦЕС ЗМІН КОНЦЕНТРАЦІЙ АЗОТУ АМОНІЙНОГО В ДЕСНІ

Відновлено стохастичний процес змін концентрацій азоту амонійного в Десні за період 1991–2003 рр. за допомогою адекватних аналітичних моделей. Обраховано імовірності категорій якості води на річних перетинах процесу. Шляхом розв'язання рівняння Колмогорова—Фоккера—Планка для процесу Орнштейна—Уленбека визначено завчасність достовірного оцінювання імовірності категорій якості води, що обмежена 285 добами.

Ключові слова: стохастичний процес, імовірності категорій якості води, рівняння Колмогорова—Фоккера—Планка, процес Орнштейна—Уленбека.

Corresponding Member of the NAS of Ukraine V.I. Osadchii,
N.N. Osadcha, L.A. Kovalchuk, O.Y. Skrynyk

Ukrainian Hydrometeorological Institute
under the State Emergency Service of Ukraine and the NAS of Ukraine, Kyiv
E-mail: LeonidKovalchuk@ukr.net

THE STOCHASTIC PROCESS OF CHANGING THE CONCENTRATION OF AMMONIA NITROGEN IN THE DESNA RIVER

The stochastic process of change in the concentration of ammonia nitrogen in the Desna river for the period 1991–2003 is restored within adequate analytical models. We calculate the probability of the categories of water quality in the annual sections of the process. By solving the Kolmogorov—Fokker—Planck equation for the Ornstein—Uhlenbeck process, the reliable estimation of probability categories of the water quality, which is limited by 285 days, is determined in advance.

Keywords: stochastic process, probability categories of water quality, Kolmogorov—Fokker—Planck equation, Ornstein—Uhlenbeck process.