

Соляникова Е.П., ас.

Одесский государственный экологический университет

ИССЛЕДОВАНИЕ ВРЕМЕННЫХ РЯДОВ КОНЦЕНТРАЦИЙ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ВЕЩЕСТВ (СУЛЬФАТОВ) В ВОДНЫХ БАССЕЙНАХ МАЛЫХ КАРПАТ

Методы нелинейного стохастического анализа и теории хаоса применены к изучению стохастических аспектов и выявлению элементов хаоса во временных рядах концентраций загрязняющих веществ (сульфатов) в водных бассейнах в районе Малых Карпат.

Ключевые слова: нелинейный стохастический анализ, временные ряды концентраций сульфатов, регион Малых Карпат

Введение. Изучение динамики процессов загрязнения водных сред, включая, бассейны рек, является, как известно, одной из важнейших проблем современной гидроэкологии и охраны окружающей среды. Однако, несмотря на это, современное состояние искомой проблематики характеризуется отсутствием достаточно надежных и эффективных методов и моделей математического моделирования процессов загрязнения и распространения загрязняющих веществ (ЗВ) в водных средах, включая, речные системы [1,2]. Как правило, наиболее перспективным подходом к решению указанных задач следовало бы считать гидродинамическое 3D- моделирование. Однако, хорошо известные концептуальные и вычислительные трудности этого подхода стимулируют поиск альтернативных методов. В последние годы очень перспективными в решении указанных задач следует считать методы теории хаоса и динамики нелинейных стохастических систем [1-18]. В качестве весьма эффективных и убедительных примеров успешного применения этих методов можно упомянуть группу недавних работ [9-16] по развитию физических 3D моделей гидрологического цикла, детектированию структуры поля загрязнения воздуха в атмосфере промышленного города, установлению корреляции между атмосферными телеконнекционными паттернами и величиной морского ледового покрытия (с использованием эмпирических данных и ПК комплекса "GeoMath"), выявлению долговременных изменений фаз антарктического колебания и их связи с содержанием озона в южном полушарии. Разумеется, к числу успешных реализаций указанных выше методов относится и анализ данных колебаний внутри сезонных расходов и временной эволюции флуктуаций ЗВ в приустьевых зонах ряда рек и северо-западной части Черного моря, позволивший выявить новое в гидроэкологии явление, а именно, генезис фрактальных размерностей в системе «речная система - прибрежная морская зона» [11,12]. В данной работе, продолжающей исследования [1,2,12], методы нелинейного стохастического анализа и теории хаоса применены нами к изучению стохастических аспектов и выявлению элементов хаоса во временных рядах концентраций ЗВ на примере сульфатов в водных бассейнах Малых Карпат. В [2] аналогичная программа была успешно реализована для другого класса ЗВ – нитратов. Установление наличия стохастических структур в соответствующих флуктуационных зависимостях позволяет далее перейти непосредственно к построению моделей нелинейного краткосрочного прогноза [9, 13-16]. Подобная программа оказалась весьма успешной в случае изучения и прогноза временных рядах концентраций загрязняющих веществ в атмосфере промышленных городов [15]. Речь идет о новом подходе к моделированию пространственно-временной структуры полей загрязнения воздуха в атмосфере

промышленных городов и соответствующем прогнозе, базирующихся на методе теории хаоса, теории распознавания образов и нейросетевом моделировании [11-13].

Данные и методика исследования. В качестве исходных данных используем результаты эмпирических наблюдений, выполненных сотр. Института гидрологии Академии наук Словакии в 6 водосборах региона Малых Карпат (17-17°50' в.д. и 48°10'-48°40' с.ш.) [17]. В табл. 1 приведены некоторые статистические характеристики для измеренных величин концентраций сульфатов в водных потоках Мало-Карпатского региона (в течение 991-1995гг). На рис.1 приведены эмпирические данные о временных вариациях измеренных концентраций сульфатов в ряде водосборов региона Малых Карпат (в период с июня 1991г. по декабрь 1993г.).

Таблица 1 - Некоторые статистические характеристики для измеренных величин концентраций n сульфатов (в $\text{мг}\cdot\text{л}^{-1}$) в водных потоках Мало-Карпатского региона (в течение 1991-1995гг)

Река Пост	Vydrica C.Most	Vydrica Spariska	Blatina Pezinok	Gidra Main	Gidra Pila	Pama Majdan	Hlbocsky Smolenice
Ср. n	77,71	82,35	99,49	77,83	74,76	71,91	79,87
min	47,00	53,10	63,80	48,90	52,20	53,10	54,35
max	115,40	120,00	177,30	126,00	110,60	106,40	121,70
ск.откл.	16,31	12,78	21,90	16,23	13,35	11,36	11,96
c_s	0,16	0,16	1,11	0,51	0,59	0,70	0,29
c_v	0,21	0,15	0,22	0,21	0,18	0,16	0,15
c_{95}	113,00	101,80	141,30	105,85	96,22	91,03	94,19
c_{90}	93,74	98,01	123,90	97,40	90,38	88,49	93,03
c_{10}	53,10	66,40	78,35	58,55	59,96	57,50	64,18

Методика реализации версий методов теории хаоса и динамики нелинейных стохастических систем [1,10-16] подробно изложена в указанных работах. Детальный алгоритм анализа временных рядов концентраций ЗВ на примере нитратов рассмотрен в [2]. Поэтому ниже остановимся лишь на ключевых аспектах искомой методологии. Первая задача состоит в том, чтобы на основе данных измерений восстановить фазовое пространство системы. Для восстановления фазового пространства системы используется информация, содержащаяся в наблюдениях $s(k)$ [15,16]. Этот процесс реконструкции приведет некоему набору d -мерных векторов $y(k)$, которые заменят наблюдаемые скалярные данные, и заключается в сочетании динамических концепций о нелинейных системах, как о генераторах информации, и геометрических представлений о том, как обнаружить аттрактор при помощи координат, определенных на основе их информационно-теоретического содержания. Тогда, используя совокупность временных задержек для создания вектора в d -мерном пространстве

$$y(k) = [s(k), s(k + \tau), s(k + 2\tau), \dots, s(k + (d-1)\tau)], \quad (1)$$

можно получить требуемые координаты. Если τ слишком мало, то координаты $s(k + j\tau)$ и $s(k + (j+1)\tau)$ будут так близки друг к другу, что их нельзя будет различить одна от другой. Аналогично, если τ слишком велико, то $s(k + j\tau)$ и $s(k + (j+1)\tau)$ будут полностью независимы друг от друга в статистическом смысле и проекция орбит на аттрактор будут направлены по двум совершенно несвязанным направлениям. Поэтому необходимо выбрать некое промежуточное положение между двумя упомянутыми случаями.

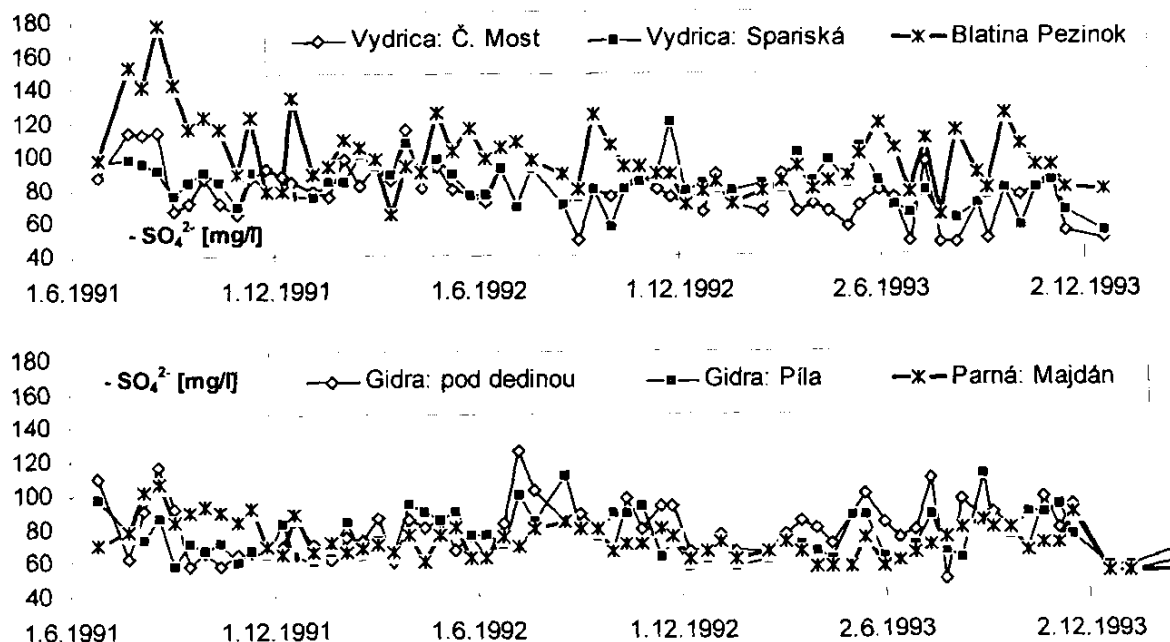


Рис. 1 - Временные вариации наблюдаемых концентраций сульфатов в речной воде рек Малых Карпат (06.91-12.93).

Первым и наиболее простым подходом для выбора τ может быть расчет линейной автокорреляционной функции C_L и нахождение временной задержки, на которой C_L первый раз переходит через некое значение, что дает вполне допустимое, в принципе, значение τ , при котором $s(k + j\tau)$ и $s(k + (j+1)\tau)$ линейно независимы. По крайней мере, реализация этого подхода оказалась крайне эффективной в задаче моделирования временных вариаций загрязняющих веществ в атмосфере промышленных городов [9]. Следующим этапом восстановления аттрактора является нахождение его размерности в рамках метода корреляционной размерности. Рассматривается корреляционный интеграл функции $C(r)$ с целью нахождения различий между хаотическими и стохастическими системами. Для расчета корреляционного интеграла удобно использовать алгоритм Грассбергера-Прокаччия [8], в соответствии с которым

$$C(r) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{2}{N(k-1)} \sum_{\substack{i,j \\ (1 \leq i < j \leq N)}} H(r - \|y_i - y_j\|), \quad (2)$$

где H – ступенчатая функция Хевисайда, $H(u) = 1$ для $u > 0$ и $H(u) = 0$ для $u \leq 0$; r – радиус сферы с центром в y_i или y_j ; N – длина временного ряда. Если временной ряд характеризуется аттрактором, то корреляционный интеграл $C(r)$ соотносится с радиусом r посредством

$$d_2 = \lim_{\substack{r \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \frac{\log C(r)}{\log r}, \quad (3)$$

где d_2 – корреляционная размерность, которую можно определить как наклон линии в координатах $\log C(r)$ и $\log r$ посредством среднеквадратического подбора прямой линии в некотором диапазоне r , называемом диапазоном масштабирования. Если корреляционная размерность достигает насыщения на некотором значении размерности вложения, то динамика системы в целом рассматривается как хаотическая. Значение корреляционной размерности, при котором она достигает насыщения, определяется как корреляционная размерность аттрактора (d_A). Ближайшее целое число большее, чем d_2 ,

дает оптимальную (необходимую) размерность вложения d_E для реконструкции фазового пространства или количество переменных, необходимых для моделирования динамики системы.

Результаты исследования. Как указывалось ранее, первым шагом при восстановлении фазового пространства является нахождение временной задержки τ с помощью автокорреляционной функции или взаимной информации. Так как для восстановления фазового пространства важным является определение временной задержки τ , то только оптимальный выбор дает наилучшее разделение соседних траекторий внутри минимального фазового пространства вложения. Приведем результаты численных экспериментов по восстановлению размерности фазового пространства (d_E), используя при этом метод корреляционной размерности. Для нахождения корреляционной размерности d_2 необходимо рассчитать корреляционные интегралы $C(r)$ для разных размерностей вложения. Корреляционная размерность аттрактора (d_A) определяется как значение корреляционной размерности, при котором она не изменяется при увеличении размерности вложения. На рис. 2 представлены соответствующие кривые, указывающие на наличие хаоса в системе.

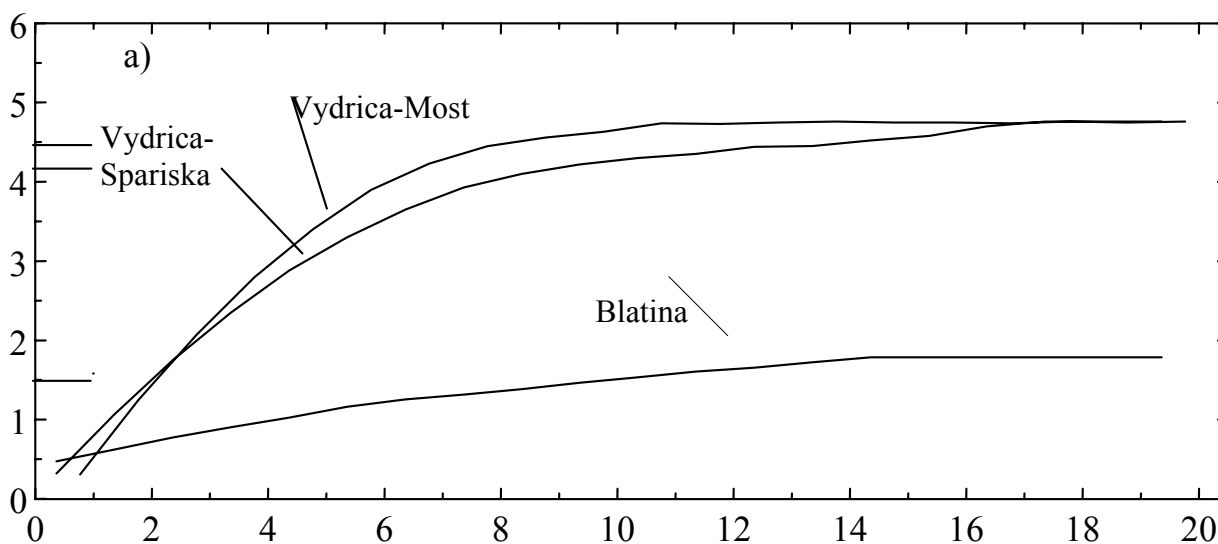


Рис. 2 - Зависимость корреляционной размерности от размерности вложения (ось X) для постов измерения Vydrica-Spariska, Vydrica-Most, Blatina-Pezinok величин концентраций сульфатов в водных потоках Мало-Карпатского региона (1991-1995гг).

Выводы. Представленный в настоящей работе анализ данных о временных зависимостях изменения концентраций сульфатов в водосборах Мало-Карпатского региона с помощью методов теории хаоса оказывается в полной мере аналогичен анализу для другого класса веществ (нитратов). Данная работа показала, что искомые временные ряды концентраций сульфатов также характеризуются элементами хаоса. Результаты восстановления фазового пространства системы по данным наблюдений могут быть далее использованы для построения модели прогноза будущих режимов системы, в частности, будущих изменений концентраций ЗВ на основе метода нелинейного прогноза и теории хаоса [9,11-16]. Важно подчеркнуть, что при этом детальные данные о химии и физике процесса не требуются, а необходимы лишь данные о хаотической динамике системы, которая для сульфатов выявлена выше.

В заключение автор выражает глубокую благодарность проф. Глушкову А.В., проф. Сафранову Т.А., проф. Хохлову В.Н. за полезные замечания и комментарии.

Список литературы

1. Глушков А.В., Хохлов В.Н., Сербов Н.Г., Балан А.К., Бунякова Ю.Я., Баланюк Е.П. Низкоразмерный хаос во временных рядах концентраций загрязняющих веществ в атмосфере и гидросфере// Вестник ОГЭКУ.-2007.-№4.-С.337-348.
2. Соляникова Е.П. Исследование временных рядов концентраций загрязняющих веществ (нитратов) в водных бассейнах Малых Карпат// Вестник ОГЭКУ.-2008.-№6.-С.40-45.
3. Schuster H.G. Deterministic chaos: an introduction. New York: Wiley, 2005.-312p.
4. Letellier C., Aziz-Alaoui M.A. Analysis of the dynamics of a realistic ecological model // Chaos, Solitons & Fractals.-2002.-V.13, №1.-P.95-107.
5. Sprott J.C., Vano J.A., Wildenberg J.C., Anderson M.B., Noel J.K. Coexistence and chaos in complex ecologies // Phys. Lett. A.-2005.-V.335, № 2-3.-P.207-212.
6. Islam M.N., Sivakumar B. Characterization and prediction of runoff dynamics: a nonlinear dynamical view // Adv. Water Res.-2002.-V.25, № 2- P.179-190.
7. Fraser A.M., Swinney H.L. Independent coordinates for strange attractors from mutual information // Phys. Rev. A.-1986.-V.33, № 2- P.1134-1140.
8. Schreiber T. Interdisciplinary application of nonlinear time series methods // Phys. Rep.-1999. V.308,№1.-P.1-64.
9. Grassberger P, Procaccia I. Measuring the strangeness of strange attractors // Physica D.-1983.- V.9.,№1-2.-P.189-208.
10. Лобода Н.С. Формализм функций памяти и мультифрактальный подход в задачах моделирования годового стока рек и его изменений под влиянием факторов антропогенной деятельности// Метеорология, климатология и гидрология.-2002.-№45.-С.140-146.
11. Glushkov A.V. , Loboda N.S. Statistical Modelling and Estimating the Irrigation Effects on Annual Runoff and Water Resources // Water resources in Asia Pasific Region.- Kyoto, Japan .-2003.-P.1359-1362.
12. Глушков А.В., Балан А.К., Баланюк Е.П. Метод многофакторного системного и мультифрактального моделирования в задачах расчета экстремальных гидрологических явлений//Ecology of Siberia, the Far East and the Arctic.-2003.-V.2.- P.113-118.
13. Glushkov A.V., Loboda N.S., Khokhlov V.N., Lovett L. Using non-decimated wavelet decomposition to analyse time variations of North Atlantic Oscillation, eddy kinetic energy, and Ukrainian precipitation // Journal of Hydrology (Elsevier; The Netherlands). – 2006. – Vol. 322. – No. 1-4. – P. 14-24.
14. Loboda N.S., Glushkov A.V., Khokhlov V.N. Using meteorological data for reconstruction of annual runoff series over an ungauged area: Empirical orthogonal functions approach to Moldova-Southwest Ukraine region//Atmospheric Research (Elsevier; The Netherlands).-2005.-Vol.77.-P.100-113.
15. Khokhlov V.N., Glushkov A.V., Loboda N.S., Bunyakova Yu.Y., Short-range forecast of atmospheric pollutants using non-linear prediction method//Atmospheric Environment (Elsevier; The Netherlands).-2008.-Vol.42.-P.7284–7292.
16. Glushkov A.V., Khokhlov V.N., Loboda N.S., Serbov N.G., Zhurbenko K. Signatures of low-dimensional chaos in hourly water level measurements at coastal site of Mariupol, Ukraine// Stoch Environ Res Risk Assess (Springer).-2008.-Vol.22,№6.-P.777-788.
17. Glushkov A.V., Khokhlov V.N., Loboda N.S. On the nonlinear interaction between global teleconnection patterns// Q.J.R.Meteorol.Soc.-2006.-Vol.132.-P.447–465.
18. Pekarova P., Miklanek P., Konicek A., Pekar J. Water quality in experimental basins.- Nat. Rep.1999 of the UNESKO.-Project 1.1.-Intern.Water Systems.-1999.-98P.

Дослідження часових рядів концентрацій забруднюючих речовин (сульфатів) у водних басейнах Малих Карпат.

Соляникова О.П.

Методи нелінійного стохастичного аналізу і теорії хаосу застосовані до дослідження стохастичних аспектів та з'ясування елементів хаосу у часових рядах концентрацій забруднюючих речовин (сульфатів) в водних басейнах в районі Малих Карпат.

***Ключові слова:** нелінійний стохастичний аналіз, часові ряди концентрацій сульфатів, регіон Малих Карпат*

Studying temporal sets of concentrations of the pollution substances (sulphates) in water basins of Small Carpathian.

Solyanikova E.P.

Methods of non-linear stochastic analysis and chaos theory are applied to studying stochastic aspects and manifestation of the chaos elements in the temporal sets of the pollution substances (sulphates) concentrations in water basins of Small Carpathian.

***Key words:** non-linear stochastic analysis, temporal sets of sulphates concentrations, Small Carpathian region*