

УДК 631.03:631.67

П. І. Ковальчук, д-р техн. наук, професор,

А. В. Герус, аспірант

Інститут водних проблем і меліорації НААН України, м. Київ

МЕТОДИ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ДЛЯ ВДОСКОНАЛЕННЯ КРИЗОВОГО МОНІТОРИНГУ ОЦІНКИ ЯКОСТІ ПОВЕРХНЕВИХ ВОД

Запропоновано математичні методи та модель вдосконалення кризового моніторингу оцінки якості поверхневих вод. Розроблена математична модель поширення забруднень в річках та взаємодії з завислими наносами та донними відкладами, що дозволяє моделювати різні сценарії аварійних викидів забруднюючих речовин в річковій системі з водосховищем. Для системної екологічної оцінки якості води пропонується метод нейронних мереж.

Ключові слова: *математична модель, поширення забруднень, перцептрон, екологічна оцінка, якість води.*

Постановка задачі. Для водних об'єктів кризовий моніторинг здійснюється за рівнями забруднення поверхневих вод у зонах впливу можливих аварій і виникнення надзвичайних ситуацій та у районах об'єктів, що стали причиною несанкціонованого скиду забруднюючих речовин [1].

Ставиться задача розробити систему математичних методів та моделей, які описують процес поширення забруднень, оцінку зміни кількісних та якісних показників оцінки екологічного стану водного середовища.

Аналіз даних спостережень в системі кризового моніторингу вимагає також розробки методу формального їх представлення для об'єктивної просторово-часової оцінки якості води. Реалізація методу полягає в формалізації нейронної мережі, особливістю якої є ансамбль нейронів перцептронного типу [2], що взаємодіють в басейні ріки на рівні взаємозв'язаної множини точок вимірювання. Така нейронна мережа є базою знань для оцінки і прийняття управлінських рішень.

Метод математичного моделювання і прогнозування поширення забруднень. Використання водних ресурсів у промисловості спричиняє значне погіршення їх якості. У більшості випадків частково очищена вода скидається в приймач – річку чи водойму. Технологічні схеми передбачають будівництво значних хвостосховищ для зберігання рідких відходів промислового виробництва. В Україні ряд техногенно небезпечних об'єктів побудовано в Криворізькому залізрудному басейні. Зокрема, відходи переробки уранових руд (хвости) розміщуються у хвостосховищі «Щербаківське» в 5 км від м. Жовті Води (рис. 1) [3].



Рис. 1. Розміщення пунктів спостереження

Враховуючи значний термін експлуатації та знос основних фондів сховища, існує загроза аварійного скиду забруднених речовин у водне середовище р. Жовта з подальшим потраплянням в р. Інгулець, на якій розташований питний водозабір м. Кривий Ріг.

На основі аналізу існуючих моделей [4–6] та процесів поширення забруднень у водотоках формалізовано тривимірну по глибині математичну модель з процесами сорбції і десорбції в системі «вода-завислі наноси» та випадіння (сорбції) в системі «завислі наноси-донні випадіння». Запропонована математична модель поширення консервативних речовин базується на системі трьох диференціальних рівнянь переносу та дифузії у водному потоці, взаємодії забруднень потоку з завислими наносами та донними відкладами:

$$\begin{cases} \frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \alpha(x) \frac{\partial U}{\partial x} - V(x) \frac{\partial U}{\partial x} - \lambda(x)U + \mu_2(x)S + f(x, t); \\ \frac{\partial S}{\partial t} = \lambda(x)U + (\mu_1(x) + \mu_2(x))S; \\ \frac{\partial R}{\partial t} = \mu_1(x)S. \end{cases} \quad (1)$$

де $U(x, t)$ концентрація забруднюючої речовини у водотоці (в частках від $U_{ГДК}$, об'ємної гранично допустимої концентрації забруднюючих речовин); $S(x, t)$ концентрація забруднюючої речовини в завислих наносах (в частках від $U_{ГДК}$); $V(x)$ швидкість течії потоку, м/с; $\alpha(x)$ коефіцієнт молекулярної або турбулентної дифузії; $f(x, t)$ функція джерела надходження забруднень у водний потік; $R(x)$ — функція накопичення забруднюючих речовин в донних відкладах; $\lambda(x)$ — коефіцієнт сорбції речовини, що знаходиться в потоці, у завислі наноси; $\mu_1(x)$ — коефіцієнт сорбції в донні відклади; $\mu_2(x)$ — коефіцієнт сор-

бції-десорбції в системі «вода-завислі наноси»; t — час; x — координата в напрямку руху. Функція джерела являється точковим джерелом викиду забруднюючих речовин точкового викиду:

$$f(x, t) = \begin{cases} f(t), & \text{при } x = 0; \\ 0, & \text{при } x \neq 0. \end{cases} \quad (2)$$

Одержану систему диференціальних рівнянь (1) розв'язуємо за методом скінченно-різничевої апроксимації. Інтегро-інтерполяційний метод [7] дозволяє найбільш точно визначити значення балансу концентрацій та побудувати різничеву схему, апроксимує неперервну задачу (1) з точністю $O(|\Delta x|^2 + \tau)$ і має вигляд:

$$\begin{cases} U_i^{n+1} = U_i^n + \frac{\tau}{\Delta x} \left[\left(\alpha^2(x) \frac{U_{i+1}^n - U_i^n}{\Delta x} + V U_i^n \right) - \left(\alpha^2(x) \frac{U_i^n - U_{i-1}^n}{\Delta x} + V U_{i-1}^n \right) \right] - \\ - \tau \lambda U_i^n + \tau \mu_2 S_i^n \pm \tau f(x_i, t_n); \\ S_i^{n+1} = S_i^n + \tau \lambda U_i^n - \tau \mu_1(x) S_i^n + \tau \mu_2(x) S_i^n; \\ R_i^{n+1} = R_i^n + \tau \mu_1(x) S_i^n, \end{cases} \quad (3)$$

$$i = 0.1, \dots, m; n = 0.1, \dots, N,$$

Крайові умови в річках: при $i = 0$ (вище викиду забруднень в р. Жовта) або вище впадіння р. Жовта в р. Інгулець задаються як $U_{\phi, i=0}^n = U_{\phi, i=0}^n$, $n = 0.1, \dots, N$; початкові концентрації $U_{\phi, i} = U_{\phi, i=1, \dots, m}$ задаються, крім точок випуску, як фонові, а в точці змішування вод р. Жовта і р. Інгулець розраховуються за формулою:

$$U_2^n = \frac{U_{N+1}^n Q_1 \tau + U_2 Q_2 \tau + (W - Q_1 \tau) U_1^n}{W}, \quad (4)$$

де $Q_1 \tau$ — кількість води, що потрапила в Інгулець з р. Жовта за один такт часу; $Q_2 \tau$ — кількість води, що проходить з Інгульця до пункту змішування за час τ ; $U_{N+1}^n Q_2 \tau$ — об'єм води з концентрацією U_1^n ; $U_2^\phi Q_2 \tau$ — об'єм води з концентрацією U_2^n .

При розв'язанні поставленої задачі проходження забруднень в руслі ріки, її акваторія розбивається на множину ділянок, кількість яких повинна в достатній мірі відображати конфігурацію русла з врахуванням основних гідрографічних характеристик.

Процеси переносу забруднюючої речовини у водосховищі, в початковий момент часу та перерозподіл концентрації з врахуванням зміни швидкості потоку вздовж руху по осі x описує система рівнянь:

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial t} &= \alpha^2 \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \right) - \\ &- V(x, y) \frac{\partial U}{\partial x} - \lambda(x, y)U + \mu(x, y)S(x, y) + f(x, y, t); \\ \frac{\partial S}{\partial t} &= \lambda(x, y)U(x, y) - (\mu_1(x, y) + \mu_2(x, y))S(x, y); \\ \frac{\partial R}{\partial t} &= \mu_1(x, y)S(x, y). \end{aligned} \right. \quad (5)$$

Для розрахунку концентрацій за напрямком поширення забруднень використовуємо двомірну скінченно-різницеву схему:

$$\left\{ \begin{aligned} U_{ij}^{n+1} &= \\ &= U_{ij}^n + \frac{\Delta \tau}{\Delta x} \left(\alpha^2_{i+\frac{1}{2},j} \frac{U_{i+1,j}^n - U_{ij}^n}{\Delta x} - \alpha^2_{i-\frac{1}{2},j} \frac{U_{i,j}^n - U_{i-1,j}^n}{\Delta x} \right) + \\ &+ \frac{\Delta \tau}{\Delta y} \left(\alpha^2_{i,j+\frac{1}{2}} \frac{U_{i,j+1}^n - U_{ij}^n}{\Delta y} - \alpha^2_{i,j-\frac{1}{2}} \frac{U_{i,j}^n - U_{i,j-1}^n}{\Delta y} \right) + \\ &- V_{i-\frac{1}{2}} \frac{U_{i,j}^n - U_{i-1,j}^n}{\Delta x} + V_{i+\frac{1}{2}} \frac{U_{i+1,j}^n - U_{i,j}^n}{\Delta x} - \lambda U_{ij}^n + \mu_2 S_{i,j}^n; \\ S_{i,j}^{n+1} &= S_i^n + \tau \lambda U_i^n - \tau \mu_1 S_{i,j}^n - \tau \mu_2 S_{i,j}^n; \\ R_{i,j}^{n+1} &= R_{i,j}^n + \tau \mu_1 S_{i,j}^n. \end{aligned} \right. \quad (6)$$

де τ — крок по часу; n — номер розрахункового шару в часі; Δx — крок по координаті x ; i — номер i -ї розрахункової комірки.

На твердих границях (берег) задані умови не протікання забруднюючих речовин:

$$Q_n = 0; \alpha^2 \frac{dU}{dy} = 0. \quad (7)$$

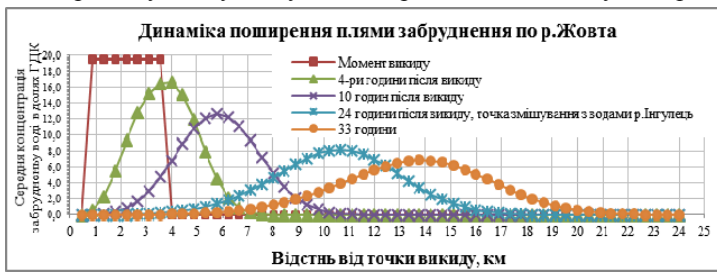
На рідких границях, де вода впадає і витікає з водоймища задані витрати води:

$$Q_n = f_n(x, y, t) \quad (8)$$

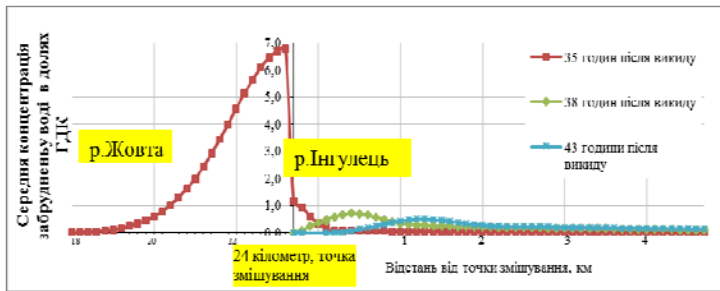
з концентраціями $Q_{\text{ВП}}^n$ при впадінні і $Q_{\text{ВИТ}}^n$ при витокі з водосховища.

Результати розрахунків. Математична модель поширення консервативних речовин була адаптована до умов досліджуваної системи «р. Жовта — р. Інгулець — Карачунівське водосховище». При розрахунку моделюється залповий викид на протязі однієї години з хвос-

тосховища (рис. 2) урановмісних відходів у р. Жовта з концентрацією, що перевищує допустиму концентрацією $0,02 \text{ г/дм}^3$ у 19,5 разів.

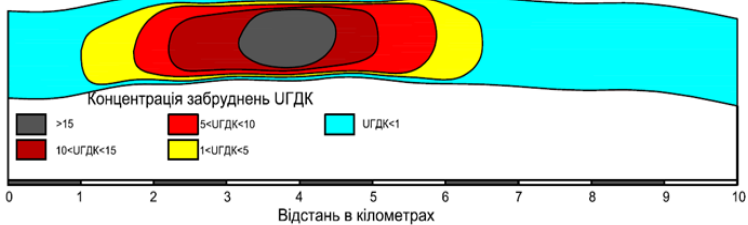


а



б

Поширення плями забруднень в р.Жовта на момент часу 4 години



в

Рис. 2. Поширення плями забруднень в р. Жовта та р. Інгулець за результатами моделювання: а — динаміка концентрацій в часі і по довжині р. Жовта; б — динаміка концентрацій в часі і по довжині ріки з перерахунком змішування потоків р. Жовта та р. Інгулець; в — просторове поширення плями забруднень в різні моменти часу

Сценарне моделювання показує, що за рахунок скиду в аварійній ситуації на протязі години шахтних вод з концентрацією, що перевищує допустиму в 19,5 разів, р. Жовта не зможе виконати розбавлюючу функцію та акумулювати в донні відклади значну кількість забруднюючих

речовин. Проте в р. Інгулець спостерігається різке зменшення концентрації, за рахунок значного розбавлення, а частково випадіння в донні відклади. При цьому в р. Інгулець концентрація зменшується до рівнів ГДК. Динаміка поширення забруднень вниз по р. Інгулець показує, що концентрація швидко наближається до фонових значень (рис. 2б).

Метод побудови нейронних мереж для системної класифікації якості води. Системну екологічну оцінку якості води в басейні, частині басейну, вздовж русла проводять (рис. 3) за ансамблем відповідних формальних нейронів. Як елемент візуалізації екологічної оцінки розробляється карта-схема басейну з нанесенням пунктів відбору проб. Особливістю системної моделі (рис. 3) є можливість повної екологічної оцінки за методикою [8], що враховує проміжні оцінки вихідних значень ансамблю нейронної мережі на всіх рівнях ієрархії (рис. 3).

Формалізація методу побудови нейронної мережі (рис.3) полягає в розробці алгоритму функціонування формальних нейронів перцептронного типу та їх взаємодії на рівні показників стану басейну ріки [2].

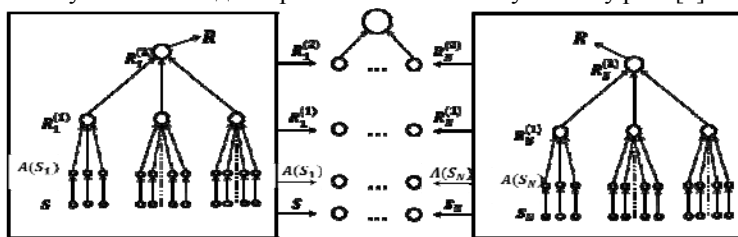


Рис. 3. Схема басейнових екологічних оцінок якості води за ансамблем нейронів перцептронного типу

Формальний нейрон являє собою елементарний перцептрон, тобто вирішувачу систему в окремій точці, що складається з кількох шарів, які утворені відповідно елементами трьох типів: сенсорних елементів, тобто рецепторів (S -елементів), що фіксують концентрації гідрохімічних показників в заданій точці; асоціативних елементів (A -елементів), які здійснюють пороговий відбір; R -елементів прийняття рішень, що реалізують інтегровані оцінки якості води (числові, графічні, логіко-лінгвістичні) за рівнями ієрархії.

На першому рівні ієрархії пред'являються гідрохімічні показники якості, представлені вектором їх концентрацій: для показників сольового блоку (S_{11}, S_{12}, S_{13}) ; для показників трофо-сапробіологічного блоку $(S_{21}, \dots, S_{2,n_2-1}, S_{2,n_2})$; для блоку показників забруднення води специфічними речовинами токсичної і радіаційної дії $(S_{31}, \dots, S_{3,n_3-1}, S_{3,n_3})$ [2].

На рівні A -елементів проводяться як числові, так і графічні та логіко-лінгвістичні оцінки за середніми та найгіршими значеннями

(на деякому проміжку часу) сенсорних елементів. За певними індексами дискретизації сигналу S_{ij} визначається числове значення класу

L^j категорії l^j якості води:

$$A(S_{ij}) = \begin{cases} L^j, l^j, & \text{якщо } P_{ij}^{k-1} \leq S_{ij} \leq P_{ij}^k \\ i = 1, 2, 3; j \in [1, 3] \cup [1, n_1] \cup [1, n_2]. \end{cases} \quad (9)$$

Вихідні сигнали A -елементів використовуються на другому рівні ієрархії для розрахунку інтегральних індексів за трьома блоками показників для середніх значень та для значень показників, які характеризують найгірші умови. Розрахунок проводять за формулами [8]:

$$Q_{R, \text{cep}} = \sum_{j=1}^{n_k} \alpha_j L^j / \sum_{j=1}^{n_k} \alpha_j, \quad q_{z, \text{cep}} = \sum_{j=1}^{n_k} \alpha_j l^j / \sum_{j=1}^{n_k} \alpha_j, \quad (10)$$

$$Q_{R, \text{max}} = \max L^j, \quad q_{z, \text{max}} = \max l^j, \quad j = 1, 2, \dots, n_k,$$

де $Q_{R, \text{cep}}, Q_{R, \text{max}}$ — середні та найгірші значення індексів кожного з блоків для визначення класів; $q_{z, \text{cep}}, q_{z, \text{max}}$ — середні та найгірші значення індексів для визначення категорій; α_j — вагові коефіцієнти:

$$\alpha_j = \begin{cases} 1, & \text{якщо показник відомий;} \\ 0, & \text{якщо показник невідомий, дані відсутні;} \end{cases}$$

R, r — поточні індекси за показниками трьох блоків $R = A, b, C$; $r = a, b, c$.

Дискретизація блокових індексів за інтервалами [8] дозволяє визначити класи і категорії якості води на другому рівні ієрархії. Значення блокових індексів можуть бути дробовими. Це дає змогу диференціювати оцінку якості води, зробити її точнішою для визначення субкатегорій якості води, а також проведення вербального опису якості води.

Останній ряд складається з одного R -елемента. На третьому рівні ієрархії обчислюють інтегральний індекс $(I_{E_{\text{cep}}} I_{E_{\text{max}}})$ об'єднаної екологічної оцінки за формулами [8]:

$$I_{E_{\text{cep}}} = \sum_{r=1}^3 q_{r \text{cep}} / 3; \quad I_{E_{\text{max}}} = \sum_{r=1}^3 q_{r \text{max}} / 3; \quad (11)$$

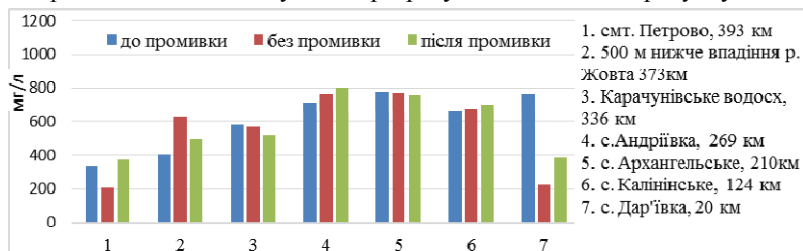
Пороговий відбір за інтервалами субкатегорій об'єднаної екологічної оцінки дозволяє визначати класи, категорії і субкатегорії якості води в пункті вимірювань гідрохімічних показників.

Так, матриця S , складена з сенсорних елементів кожної точки вимірювань визначає матрицю нейронної мережі $A(S)$ для $S - A$ зв'язків

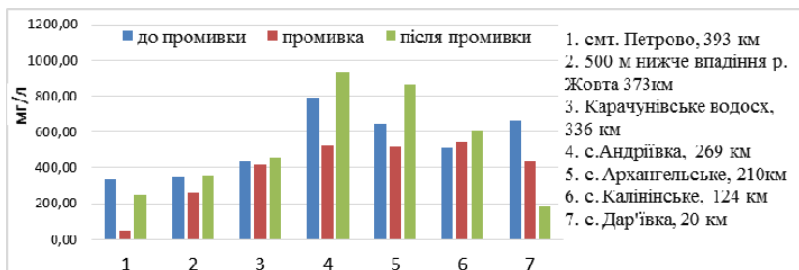
$$\left\| \begin{matrix} S_{11}, & \dots, & S_{1N}, \\ S_{21}, & \dots, & S_{2N}, \\ \dots & \dots, & \dots \\ S_{m_1}, & \dots, & S_{m_N}, \end{matrix} \right\| m = 3 + n_1 + n_2; \quad (12)$$

трансформації в матриці класів і категорій. На рівні реагуючих елементів $R^{(1)}$ формуються матриці блокових індексів та, в результаті порогових відборів, матриці класів і категорій для трьох блоків показників оцінки якості води. Об'єднана екологічна оцінка (рівень $R^{(2)}$) представлена вектором інтегральних оцінок та векторами субкатегорій, категорій та класів якості води. Системний просторово-часовий аналіз якості води за ансамблем нейронів перцептронного типу дає можливість виявити найбільш перспективні напрямки прийняття рішень для покращення якості води в басейнах річок.

Результати проведення досліджень якості води. Для реалізації методу нейронних мереж вибрано об'єкт р. Інгулець, на якому проведено порівняння якості води без промивок та з урахуванням промивок дніпровською водою. Результати розрахунків наведено на рисунку 4.



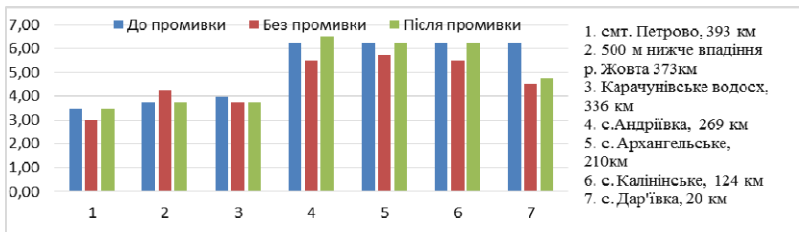
а



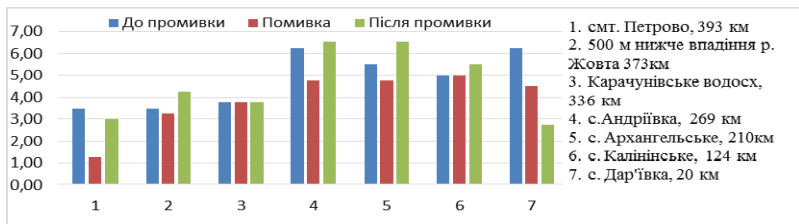
б

Рис. 4. Порівняльний аналіз зміни показників сульфатів за категоріями вздовж русла р Інгулець за середніми значеннями: а — без промивок в 2008 р.; б — з промивками в 2012 р.

Розрахунок проводився на першому рівні ієрархії та на рівні сольового блоку нейронної мережі. Результати порівняння графіків зміни показника сульфатів у 2008 та 2012 роках показують, що з пункту с. Андріївка (210,0 км) по пункт с. Дар'івка (20,0 км) прослідковується зниження показника у 2012 р за період промивки (червень-серпень), що підтверджує ефективність промивки дніпровською водою.



а



б

Рис. 5. Порівняльний аналіз зміни середніх значень категорій за блоком показників сольового складу вздовж русла р. Інгулець: а — без промивок в 2008 р.; б — з промивками в 2012 р.

Аналіз графіків зміни категорій якості води за показниками сольового блоку виявив тенденцію покращення якості води за середніми значеннями у 2012 в порівнянні з показниками 2008р. (рис. 5).

Висновки. Запропоновані методи і моделі вдосконалюють систему кризового моніторингу оцінки якості поверхневих вод. Формалізація тримірної по глибині потоку математичної моделі, з процесами сорбції і десорбції в системі «вода-завислі наноси» та завислі наноси-донні випадіння», дозволяє на основі математичної моделі адекватно розрахувати концентрації при поширенні та розбавленні забруднень, їх взаємодії з завислими наносами та донними відкладами.

Побудова нейронної мережі дає можливість проводити системну просторово-часову екологічну оцінку якості води в басейні, частині басейну, вздовж русла ріки. Апробація моделі для оцінки якості води в р. Інгулець виявила ефективність застосування промивок дніпровською водою.

Список використаних джерел:

1. Постанова КМУ від 20 липня 1996 р. № 815 Київ «Про затвердження Порядку здійснення державного моніторингу вод». (Абзац третій пункту 13 із змінами, внесеними згідно з Постановою КМ № 748 (748-2013-п) від 07.08.2013).
2. Kovalchuk P. I. Perceptron model of system environmental assessment of water quality in river basins: 4-th international conference on inductive modeling. Proceedings / P. I. Kovalchuk, A. V. Gerus, V. P. Kovalchuk. — Kyiv, 2013. — P. 279–284.
3. Регіональна доповідь про стан навколишнього природного середовища в Дніпропетровській області за 2011 рік. — Дніпропетровськ, 2012. — 193 с.
4. Галкин Л. М. Решение диффузионных задач методом Монте-Карло : монография / Л. М. Галкин. — М. : Наука, 1975. — 96 с.: ил.
5. Сизоненко В. П. Прогнозування впливу підприємств ядерно-паливного циклу на поверхневі водоймища на прикладі скидів шахти «Нова» / В. П. Сизоненко, О. Л. Шевченко, О. Г. Лисюк // Проблеми загальної енергетики. — 2010. — № 2 (22). — С. 45–52.
6. Караушев А. В. Модель распространения растворенных веществ в проточном водоеме / А. В. Караушев. — 1986. — Вып. 319. — С. 21–29.
7. Самарский А. А. Теория разностных схем : учебное пособие / А. А. Самарский. — М. : Наука, 1977. — 656 с.
8. Романенко В. Д. Методика екологічної оцінки якості поверхневих вод за відповідними категоріями: методика / В. Д. Романенко, В. М. Жукинський, О. П. Окснюк та ін. — К. : Символ-Т, 1988. — 28 с.

The mathematical model and methods of improving crisis monitoring surface for water quality assessment are proposed. The pollution spread in rivers mathematical model releases different scenarios of accidental discharges into the river system from the reservoir in the interaction with suspended sediments and sediments. Method of neural networks is used for the systematic environmental assessment of water quality.

Key words: *mathematical model, spreading pollution-nen, slick dirt, perceptron, environmental assessment, water quality.*

Отримано: 16.09.2014