

ПРИМЕНЕНИЕ ДИАГНОСТИЧЕСКИХ КРИТЕРИЕВ КОНТРОЛЬНЫХ КАРТ В ОЦЕНКЕ СТАЦИОНАРНОГО СОСТОЯНИЯ ВОДНЫХ ОБЪЕКТОВ

Даниленко А.О., Косменко Л.С., Кондакова М.Ю., Решетняк О.С.

ФГБУ «Гидрохимический институт», г. Ростов-на-Дону

E-mail: a.danilenko@gidrohim.mecom.com

Водные объекты Российской Федерации формируются и функционируют в качественно различных условиях, и их состояние зависит от геохимических, климатических и других характеристик конкретного региона, а также от интенсивности, комплексности и аддитивности антропогенного воздействия. Поэтому при оценке их состояния и загрязнения необходимо учитывать, что естественные, ингерентные водному объекту концентрации растворенных веществ могут отличаться от нормативно закрепленных как в большую, так и в меньшую стороны. Однако вопрос установления таких естественных концентраций остается открытым, несмотря на множественность предложенных решений, что связано с наличием у каждого подхода не только положительных, но и отрицательных сторон. Несомненно одно: устанавливать естественные концентрации по ретроспективным наблюдениям за содержанием растворенных веществ разумно для тех водных объектов, состояние которых стабильно и (если рассматривать водный объект как открытую систему) стационарно.

Как открытые системы, водные объекты характеризуются большим количеством параметров состояния (температура, концентрации химических веществ и др.). Достижение водным объектом стационарного состояния должно сопровождаться неизменностью этих параметров в течение длительного времени. Как в любой другой открытой системе, в водном объекте постоянство концентраций растворенных веществ в каждый момент времени невозможно, однако средние значения за сравнительно большой промежуток времени могут оставаться неизменными, что достигается взаимной компенсацией поступления, удаления и превращения веществ (и энергии).

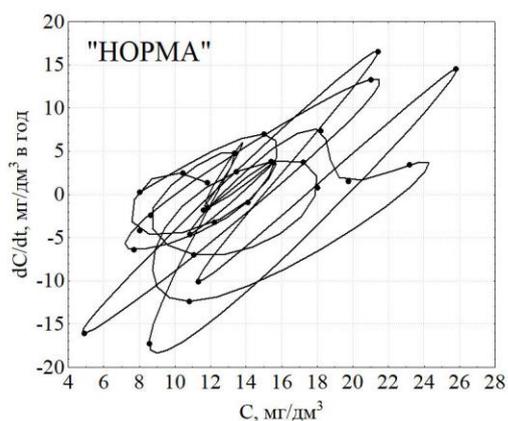
Несмотря на то, что природные воды непрерывно изменяют свой состав и свойства [1], эти изменения происходят в определенных границах, заданных сложным комплексом взаимосвязанных гидродинамических, физико-химических, гидробиологических и других природных процессов [2]. При антропогенном воздействии, не уравновешенном процессами самоочищения водного объекта, наблюдается смещение этих границ, как правило, в сторону более высоких концентраций, а также расширение амплитуды колебаний их значений. В то же время «взаимопогашение» отклонений концентраций в большую и меньшую стороны от опорного значения на избранном временном отрезке говорит о том, что результирующая скорость изменения концентраций химических веществ за это время равна нулю, то есть по данному параметру состояние характеризуется как стационарное.

Важно отметить, что стационарность состояния водного объекта по конкретному параметру тесно связана со статистической стационарностью временного ряда данных о значениях этого параметра. То есть в случае, если параметром состояния водного объекта выступает концентрация какого-то вещества, во временном ряду данных о концентрациях этого вещества не должно быть тренда. Поэтому оценка состояния водного объекта должна предшествовать расчетам естественных, свойственных конкретному водному объекту концентраций. Кроме того, стационарность состояния означает и стабильность функционирования, а поведение стабильных систем можно предсказывать, опираясь на прошлые данные [1].

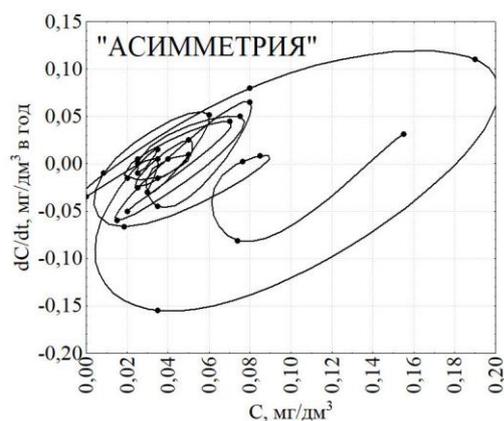
Оценить, стационарно ли состояние водного объекта по какому-либо параметру, можно при помощи динамического фазового портрета (ДФП) – диаграммы с областью, ограниченной осями концентрации растворенного вещества (ось абсцисс) и скорости её изменения (ось ординат). Таким образом, в плоскости ДФП («фазовом пространстве») движется так называемая «изображающая точка» с координатами (C ; dC/dt), описывая некоторую кривую («фазовую траекторию»). Совокупность фазовых траекторий является «фазовым портретом системы». Динамический фазовый портрет, построенный таким образом, представляет собой вариант реализованной динамики водной экосистемы в фазовой плоскости [3]. Визуально он выглядит как эллипсовидная многоцикловая траектория изображающей точки вокруг некоего опорного значения. Более подробно построение ДФП описано в [4].

На рисунке 1 приведены примеры четырех наиболее характерных типов ДФП: «норма», «асимметрия», «критическая точка» и «тренд». Подробнее их описание приведено в [5]. Здесь упомянем лишь существенные для понимания особенности этих ДФП. «Норма» – это ДФП системы в стационарном состоянии по конкретному параметру. Он формируется при симметричном (в том числе, нормальном) или близком к нему распределении как годовых медианных концентраций, так и скоростей их изменения. Именно такой вид траектории изображающей точки характеризует стационарность состояния водного объекта и постоянство пределов колебаний концентраций растворенных в его воде веществ. «Асимметрия» – это ДФП системы в нестационарном, но близком к нему состоянии. В определенном смысле показывает фактически достигнутый за выбранный интервал времени предел «выносливости» системы по исследуемому параметру, хотя он не всегда соответствует пределу перехода в новое стационарное состояние. Визуально такой портрет имеет петлю, далеко выходящую за пределы большей части фазовой траектории. «Критическая точка» – это ДФП системы, на котором отражаются два и более варианта состояний. Эти состояния по отдельности могут отвечать или не отвечать критериям стационарности, но параметры этих состояний различаются, скорость изменения параметра в масштабе анализируемого временного отрезка отличается от нуля, поэтому «критическая точка» свидетельствует о нестационарном состоянии за весь интервал времени. В отличие от «асимметрии», «критическая точка» дает наглядное представление о пределе, переход через который сопровождается установлением нового состояния. «Тренд» – это ДФП системы в нестационарном состоянии: исследуемый параметр меняется во времени, скорость его изменений отличается от нуля. Динамика концентраций при «тренде» носит сравнительно монотонный характер, что отличает этот ДФП от «критической точки».

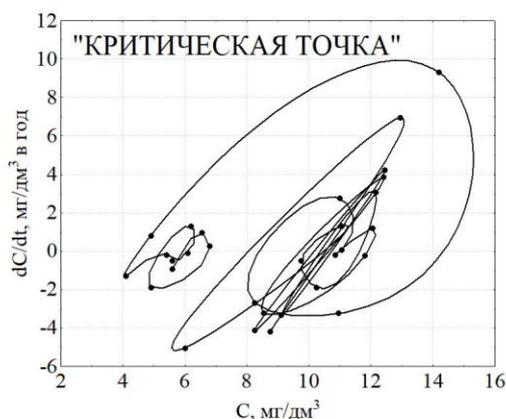
Таким образом, только ДФП типа «норма» отвечает критерию стационарности состояния водного объекта (и только по исследуемому параметру!), но на практике часто приходится сталкиваться с фазовыми траекториями, форму которых визуально оценить сложно, что значительно затрудняет внедрение в практику использование ДФП.



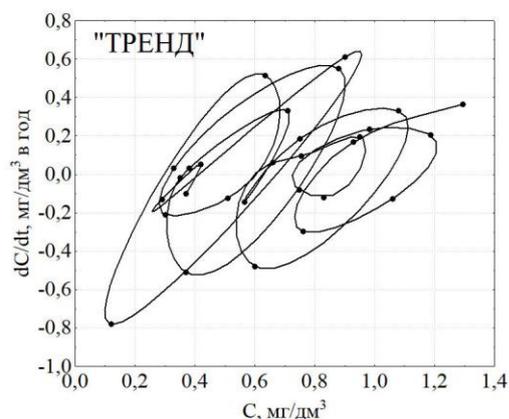
р. Золотица, д. Золотица (кальций)



р. Тосна, п. Усть-Тосно (азот аммонийный)



р. Ледь, д. Зеленинская (магний)



р. Вирма, с. Ловозеро (соед. железа общ.)

Рис 1 – Основные типы динамических фазовых портретов водных объектов

Требуются строгие критерии для того, чтобы однозначно судить о стационарности или нестационарности состояния исследуемому параметру. На наш взгляд, перспективами в этом отношении обладают диагностические критерии контрольных карт (КК), характеризующие статистически стабильный ряд. Контрольные карты Шухарта являются хорошо известным инструментом контроля стабильности (предсказуемости) процессов [6]. По сути ДФП является двумерной контрольной картой, которая по оси x построена как карта индивидуальных значений (карта положений), а по оси y - как карта скользящих размахов (карта изменчивости). В практике применения КК для количественных данных их почти всегда применяют и анализируют парами — карта положения процесса и карта изменчивости процесса. Таким образом, анализ ДФП – это одновременный анализ двух контрольных карт.

ДФП и контрольные карты имеют ряд сходств:

1. Для контрольных карт необходимы данные, получаемые выборочно через приблизительно равные интервалы [6]. В случае ДФП равенство интервалов (эквидистантность данных во времени) обеспечивается расчетом годовой медианной концентрации.

2. При построении контрольных карт объем подгрупп часто составляет 4-5 единиц. Подгруппы должны иметь одинаковую структуру и объем. Обычно 25 подгрупп объема 4 или 5 единиц рассматривают как приемлемое количество для получения оценок [6]. При

построении ДФП годовые медианные концентрации вычисляют не менее чем по 4-5 наблюдениям в году, которые получены по единой схеме внутригодовых отборов, а длительность временного ряда желательно иметь не менее 15-20 лет ретроспективных наблюдений.

3. КК изучают статистическую стабильность процесса. Межгодовые колебания концентрации того или иного вещества также отражают процесс, при этом статистически стабильным он будет при условии стационарности состояния водного объекта.

При этом ДФП нельзя считать простым совмещением контрольных карт положения и изменчивости. Они имеют и ряд отличий:

1. КК имеет центральную линию, соответствующую опорному значению характеристики - среднему арифметическому или медиане используемого статистического показателя, в ряде случаев опорное значение задается извне [6]. В ДФП таким опорным значением является концентрация, вычисленная по уравнению линейной регрессии $dC/dt=aC+b$, при условии, что $dC/dt=0$ (нулевая скорость изменения параметра).

2. Выбор коэффициентов при установлении контрольных границ также отличается. КК имеет две статистически определяемые контрольные границы по обе стороны от центральной линии на расстоянии 3σ , которые называются верхней и нижней контрольной границей. До контрольных границ строятся шесть зон: 2 зоны *C* на расстоянии $\pm 1\sigma$ от опорного значения характеристики, 2 зоны *B* на расстоянии от 1σ до 2σ , а зоны от 2σ до 3σ по обе стороны от центральной линии являются зонами *A* [6]. По аналогии с тремя зонами КК в ДФП также были добавлены дополнительные границы (изначально фазовая траектория очерчивалась доверительным эллипсом при $p=0,95$, см. рис.1). Однако в отличие от КК, границы зон ДФП базируются на вероятностях. Зоны *C* отсекаются границами $\pm 1,96\sigma$, что соответствует 5% вероятности выхода за их предел, зоны *B* – на уровне $\pm 2,6\sigma$, что соответствует 1% вероятности выхода за пределы, зоны *A* - на уровне $\pm 3,09\sigma$, что соответствует 0,01% (1 случай выхода за границу на 1000).

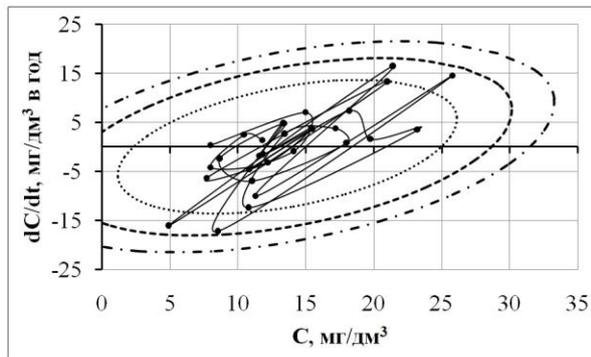
3. Последовательность работы с КК скользящих размахов и индивидуальных значений предполагает на первом этапе анализировать карту изменчивости, и только если она не соответствует ни одному из диагностических критериев переходить к анализу карты положений. При работе с ДФП такой анализ происходит одновременно.

Для анализа КК сформулированы критерии, позволяющие выявить типовые структуры точек, которые свидетельствуют о неслучайных причинах изменчивости процесса:

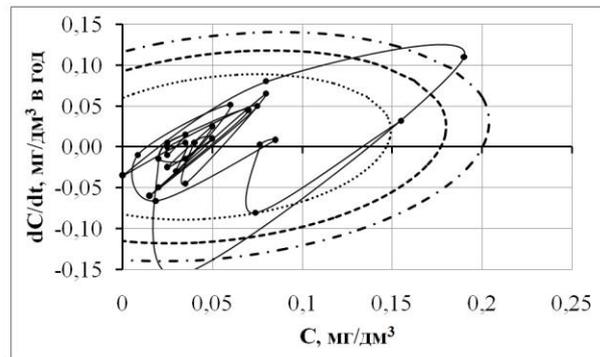
- a. критерий 1: одна точка вне зоны *A* (вне контрольных границ);
- b. критерий 2: семь или более последовательных точек расположены по одну сторону от центральной линии;
- c. критерий 3: тренд — семь последовательно возрастающих или убывающих точек;
- d. критерий 4: участок с явно неслучайным изменением значений.

Кроме четвертого критерия, остальные имеют точные формулировки, способствующие автоматизации исследования статистической стабильности временного ряда годовых медианных концентраций. Результаты применения трех первых критериев для оценки стационарности состояния приведенных на рисунке 1 водных объектов выглядели следующим образом (см. рис. 2). При отклонении ДФП от нормального типа по меньшей мере один из трех критериев срабатывает на обнаружение особых структур точек и позволяет признать состояние водного объекта нестационарным. В случае ДФП «асимметрия» и «критическая точка» зафиксирован как минимум один выход за границы

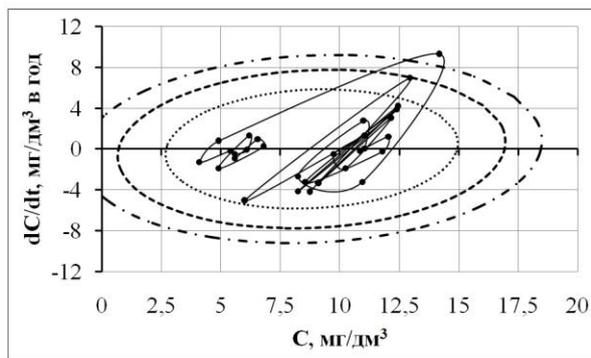
зоны *A* (обозначена штрихпунктирной линией). При «тренде» контрольные границы не нарушены, однако массив данных о концентрациях имеет последовательность из не менее, чем 7 возрастающих точек (критерий 3). Чтобы отклонить предположение о стационарности состояния по исследуемому параметру достаточно, чтобы сработал хотя бы один критерий. Использование трех критериев одновременно для опровержения стационарности состояния неоправданно, так как повышается вероятность ошибочного решения, что колебания концентраций вещества статистически стабильны.



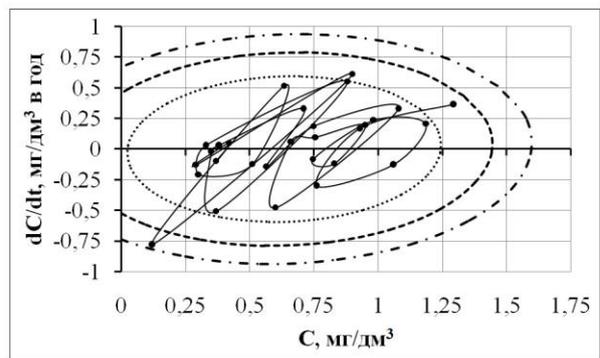
р. Золотица, д. Золотица (кальций)



р. Тосна, п. Усть-Тосно (азот аммонийный)



р. Ледь, д. Зеленинская (магний)



р. Вирма, с. Ловозеро (соединения железа)

Рис 2 – Результаты применения диагностических критериев контрольных карт при анализе ДФП

Следует также отметить, что перечисленный набор критериев расположения точек не следует рассматривать как установленный, а лишь как рекомендуемый. Правильным решением является определение критериев в соответствии с обычным состоянием процесса [6].

Выводы:

1. Устанавливать естественные концентрации растворенных веществ по ретроспективным наблюдениям целесообразно для водных объектов, состояние которых стабильно и стационарно.

2. Для оценки стационарности состояния водного объекта по отдельному параметру предлагается использование такого инструмента визуализации, как динамический фазовый портрет. Однако многообразие форм ДФП затрудняет их применение.

3. ДФП является своеобразной двумерной контрольной картой, и для его анализа подходят критерии выявления типовых структур точек, которые свидетельствуют о неслучайных причинах изменчивости концентраций веществ.

Список использованной литературы

1. Шейнкман Л.Э., Дергунов Д.В., Савинова Л.Н. Оценка накопления железа в подземных водах горнопромышленного региона с использованием контрольных карт Шухарта//Известия ТулГУ. Науки о Земле. – 2017. – Вып.4. С.67-88.
2. Тушинский С.Г. Об одном методе расчета системы наблюдений за параметрами качества воды // Гидрохимические материалы. Математические методы в гидрохимии. –1986. – Т. ХСIV. С. 10-18.
3. Трофимчук М.М., Бакаева Е.Н, Сухоруков Б.Л. Фазовые портреты водных объектов при натурном моделировании экосистемных процессов // Вестник Южного научного центра РАН. –2010. – Т.6, №2. С.28-27.
4. Даниленко А.О., Трофимчук М.М., Кондакова М.Ю., Косменко Л.С., Решетняк О.С. Фазовые портреты эмпирических и модельных распределений концентраций химических веществ в оценке качества водных ресурсов // В сб.: Водные ресурсы России: современное состояние и управление. Сборник материалов Всероссийской научно-практической конференции. – 2018. С. 167-173.
5. Даниленко А.О., Коваленко А.А., Косменко Л.С., Кондакова М.Ю., Решетняк О.С. Метод оценки стационарного состояния водных объектов на примере рек полуострова Камчатка // В сб.: Современные проблемы гидрохимии и мониторинга качества поверхностных вод. Часть 1. – 2020 – С. 34-39.
6. ГОСТ Р ИСО 7870-2-2015. Статистические методы. Контрольные карты. Часть 2. Контрольные карты Шухарта. – М.: Стандартиформ, 2019. 41 с.