

УДК [550.46+556.51]:004.94

**СИСТЕМНО-АНАЛИТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ГИДРОХИМИЧЕСКОГО СТОКА ГОРНЫХ РЕК
НА ПРИМЕРЕ РАСТВОРЕННОГО ЖЕЛЕЗА**

© 2019 г. Ю. Б. Кирста^{1,2,*}, А. В. Пузанов¹

¹Институт водных и экологических проблем СО РАН
Россия 656038 Барнаул

²Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова
Россия 656038 Барнаул
*e-mail: kirsta@iwep.ru

Поступила в редакцию 19.08.2016 г.

Принята к публикации 29.12.2016 г.

На примере средних и малых рек Алтае-Саянской горной страны разработана имитационная балансовая модель сезонной и многолетней динамики стока общего растворенного железа. Входные факторы и переменные модели следующие: месячные осадки и среднемесячные температуры воздуха, нормированные и пространственно обобщенные по модели регионального климата; водные стоки, рассчитываемые для отдельных ландшафтов в речных бассейнах по модели водного стока горных рек; картографическая информация по речным бассейнам, площадь пашни. Определена чувствительность модели к природным вариациям входных факторов как вклад конкретного фактора в дисперсию наблюдаемых величин гидрохимического стока. Рассчитанные критерии $RSR = 0.57$ и Нэша–Сатклиффа $NSE = 0.67$ соответствуют хорошему качеству модели.

Ключевые слова: системно-аналитическое моделирование, гидрохимический сток, общее растворенное железо, горные реки, Алтай, Саяны.

DOI: 10.31857/S0321-0596462161-171

Решение проблем рационального использования водных ресурсов в современных условиях требует разработки адекватных математических моделей, количественно характеризующих качество этих ресурсов. Гидрохимический сток рек — одна из важнейших характеристик качества их вод, определяющих питьевое и хозяйственное водоснабжение населения. Он заметно различен для разных ландшафтно-климатических зон, так как зависит от биогеохимических процессов, ветровой эрозии, атмосферного переноса и выпадения химических веществ, антропогенных факторов на территории водосборных бассейнов. Анализ закономерностей формирования гидрохимического стока особенно трудоемок для горных территорий из-за их сложных гидрогеологических условий, разнообразного почвенно-растительного покрова, неоднородных климатических полей, а также больших материальных затрат на экспериментальные исследования подобных закономерностей. Поэтому здесь крайне затруднена количественная оценка воздействия на сток разных факторов. Эта сложная задача решается авторами статьи на примере

стока общего растворенного железа (Fe) путем создания имитационной балансовой модели, учитывающей одновременное воздействие различных природных факторов. Для ее разработки используются системный подход и метод системно-аналитического моделирования (САМ) с привлечением ГИС-технологий [4, 14]. Выбор для моделирования такого химического элемента, как Fe, обусловлен его распространенностью в земной коре, вовлеченностью в биогеохимические и биологические процессы, а также вкладом в антропогенное загрязнение поверхностных и подземных вод, например от горнодобывающей, металлургической и химической промышленности.

В химических соединениях Fe может иметь степень окисления +2 и +3 (более устойчиво). Из его трех водных миграционных форм — растворенной, коллоидной и взвешенной — выбрана первая как наиболее сложная для моделирования. К ней относится Fe в виде ионов, различных гидроксокомплексов или комплексных соединений с минеральными и органическими веществами. На формы соединений Fe влияют

pH вод, присутствие природных комплексообразователей (гуминовых и фульвокислот), содержание растворенного кислорода, сероводорода, диоксида углерода, а также деятельность микроорганизмов, окисляющих и восстанавливающих Fe.

Объем стока Fe речными водами обусловлен не только биогеохимическими процессами на водосборе, определяемыми геосистемой/ландшафтом, климатом и геологическим строением территории, но и его поступлением на поверхность водосбора путем “сухого” осаждения и “вымывания” осадками из атмосферы [10]. В связи с относительно малой плотностью населения на горных территориях можно полагать, что рассматриваемый сток будет определяться в этих условиях преимущественно природными факторами, а антропогенное влияние происходит опосредованно через сельскохозяйственную активность населения.

ИСХОДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

Выбранная для исследования территория Алтае-Саянской горной страны расположена между 49° и 56° с.ш., 82° и 90° в.д. и представляет собой часть мирового водораздела между гумидной областью Северного Ледовитого океана и аридной бессточной областью Центральной Азии. Высоты хребтов горных систем Саян достигают 3000–3500, Алтая – 3500–4500 м. Климат резко континентальный с холодной зимой и холодным летом. На территорию проникают атлантические циклоны. Распределение осадков по территории Алтае-Саянской горной страны исследовано недостаточно. Согласно наблюдениям на редких метеостанциях, годовое количество осадков меняется в широких пределах. Например, северные склоны гор на высотах > 3000 м получают 1200–2500 мм осадков за год, средние части до 600 мм и нижние ~200 мм. Для всех рек страны наибольший водный сток наблюдается в теплый период года и составляет до 80–90% годового. Последний формируется более чем на 50% за счет таяния снега.

Для выполнения САМ стока Fe средними и малыми реками страны взято 34 речных бассейна (рис. 1), для которых ранее была разработана имитационная балансовая модель водного стока [7]. Динамика водного и гидрохимического стока рассчитывалась для периода 1951–2003 гг. по четырем характерным гидрологическим периодам/сезонам: первый (зимняя межень, XII–III мес.), второй (весенне-летнее

половодье, IV–VI), третий (летняя межень, VII–VIII), четвертый (осенняя межень с возможными паводками при сильных дождях, IX–XI). Учитывалось, что для каждого выделенного сезона должно быть ≥ 1 экспериментальных измерений концентрации общего растворенного Fe. Измерения проводились УГМС. Концентрация Fe определялась по методике РД 52.24.358–95 [9] фотометрическим методом с 1,10-фенантролином и выражалась в миллиграммах на литр [9]. После осреднения данных этих измерений по сезонам были получены четыре среднесезонных концентрации для каждого года наблюдений. В среднем по всем 34 бассейнам концентрации Fe составили 0.066, 0.215, 0.063, 0.070 мг/л для 1, 2, 3, 4-го сезонов соответственно. Эти значения использованы для нормировки наблюдаемых величин концентраций и перевода в безразмерные единицы измерений.

Ранее для территории Алтае-Саянской горной страны была разработана модель регионального климата, основанная на пространственно-временном анализе метеорологических полей на территории страны [2]. Внутригодовая

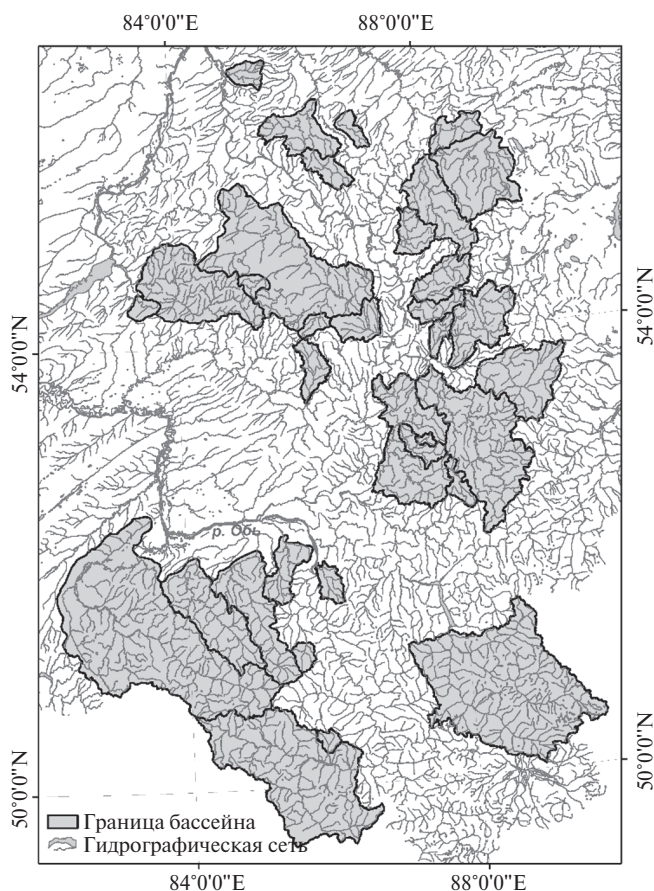


Рис. 1. Картограмма расположения 34-х модельных речных бассейнов Алтае-Саянской горной страны.

и многолетняя динамика месячных сумм осадков и среднемесячных значений температуры воздуха оказалась единообразной для всей территории страны при нормировке осадков на их среднемноголетнее значение за июль *insitu*, а температуры – на ее среднемноголетнее значение за январь (для месяцев X–IV) и июль (V–IX) *insitu*. Такие пространственно обобщенные нормированные характеристики уже не зависели от координат или высоты расположения исследуемых участков, были одинаковы для всех анализируемых речных бассейнов и, поэтому, применялись во всех дальнейших расчетах.

Для учета ландшафтной структуры речных бассейнов выделено 12 типологических групп геосистем и отдельно 13-я группа для аквальных ландшафтов, имеющих незначительную площадь (табл. 1) [5]. Для всех групп в каждом речном бассейне по модели водного стока горных рек рассчитаны формируемые ими вклады в этот сток [7].

В целом, база данных для разработки модели стока Fe включала в себя следующее:

– 1356 среднесезонных концентраций общего растворенного Fe в разные годы в водных стоках 34-х речных бассейнов, т.е. $1356/4 = 339$ величин для каждого сезона;

– расчетный вклад в водный сток каждой группы геосистем в каждом речном бассейне в каждый год гидрохимических наблюдений (3120, 3480, 3180, 3350 значений водных стоков для 1, 2, 3, 4-го гидрологических сезонов соответственно);

– обобщенные по территории Алтае-Саянской горной страны нормированные месячные суммы осадков и среднемесячные значения температуры воздуха за период 1951–2003 гг. (по 636 значений);

– площадь и средняя высота каждого из 34-х речных бассейнов, высота его замыкающего створа, длина речного русла (от истока до створа);

– доля площади пашни в каждом речном бассейне.

Таблица 1. Найденные в ходе САМ среднесезонные концентрации общего растворенного железа в водных стоках, поступающих с ландшафтов Алтае-Саянской горной страны, мг/л

Группа геосистем (ландшафт)	Гидрологические сезоны 1–4 (XII–III, IV–VI, VII–VIII, IX–XI мес.)			
	1	2	3	4
Гляциально-нивальные высокогорья (характеризуются параметром a_1 в (2))	0	0	0	0
Гольцово-альпинотипные высокогорья и среднегорья, псевдогольцовые низкогорья (a_2)	0	0	0	0.042
Тундрово-степные и криофитно-степные высокогорья (a_3)	0	0.205	0	0
Лесные высокогорья, среднегорья и низкогорья (a_4)	0.109	0.890	0.102	0.128
Экспозиционно-лесостепные и степные высокогорья и среднегорья (a_5)	0.009	1.075	0.010	0
Лесостепные, степные низкогорья и предгорья (a_6)	0.328	0.342	0.141	0.134
Межгорные котловины с различными вариантами степей и лесостепей (a_7)	0	0	0	0
Степные и лесостепные подгорные и возвышенные аккумулятивные равнины (a_8)	0.317	0	0.079	0.170
Недренируемые слабопроточные интразональные и интрапоясные ландшафты (a_9)	0	0	0	0
Долины горных рек (a_{10})	0	0	0	0
Долины равнинных рек (a_{11})	0.327	0.070	0.311	0.115
Лесные возвышенные и подгорные равнины (a_{12})	0	0	0	0.192
Аквальные ландшафты (a_{13})	0	1.075	0	0
Подземный сток (b в (2))	0.059	0.009	0.017	-0.040
Пашня (d в (2))	0.029	0.430	0	0.007

СИСТЕМНО-АНАЛИТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТОКА Fe

В основе САМ – определение структуры и параметров имитационных моделей сложноорганизованных природных систем путем решения обратной задачи оптимизационными методами (подробнее в [4, 7, 14]). Путем последовательной проверки различных непротиворечивых уравнений, описывающих формирование стока Fe под влиянием факторов среды, определяется система этих уравнений, дающая наименьшую квадратичную невязку (сумму квадратов разностей) между рассчитанными и наблюдаемыми концентрациями вещества в воде. Построение модели стока Fe выполняется в среде программирования MATLAB.

Для описания нетривиальных зависимостей процессов от факторов среды в САМ применяется универсальная функция H , задаваемая выражением:

$$H(X_1, X_2, Y_1, Y_2, Z_1, Z_2, X) = \begin{cases} Y_1 + Z_1 \times (X - X_1), & \text{если } X < X_1 \\ \frac{Y_2 - Y_1}{X_2 - X_1} (X - X_1) + Y_1, & \text{если } X_1 \leq X < X_2, \\ & X_1 \neq X_2 \\ Y_2 + Z_2 \times (X - X_2), & \text{если } X \geq X_2 \end{cases} \quad (1)$$

где $X_1, X_2, Y_1, Y_2, Z_1, Z_2$ – подбираемые в САМ параметры; X – какая-либо переменная модели. H – непрерывная кусочно-линейная функция из трех произвольных линейных фрагментов, она позволяет аппроксимировать широкий спектр различных зависимостей между переменными и факторами среды путем изменения значений своих параметров (рис. 2).

В результате САМ стока Fe получены следующие балансовые уравнения, описывающие этот сток:

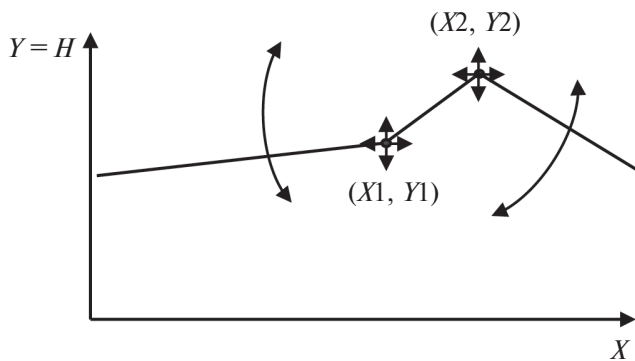


Рис. 2. Непрерывная кусочно-линейная функция H ($X_1, X_2, Y_1, Y_2, Z_1, Z_2, X$) из трех линейных фрагментов с произвольно меняемыми параметрами (уравнение (1)).

для первого гидрологического сезона

$$\text{Сток} = \sum_k a_k Q_k^i H(c_1, c_1, 1, 1, c_2, c_3, P) H(c_4, c_4, 1, 1, c_5, c_6, K^i) + bq^i + dSQ^i, \quad (2a)$$

для второго, третьего и четвертого гидрологических сезонов –

$$\text{Сток} = \sum_k a_k Q_k^i H(c_1, c_1, 1, 1, c_2, c_3, P) H(c_4, c_4, 1, 1, c_5, c_6, K^i) + bq^i + d\sqrt{SQ^i}, \quad (2б)$$

P – обобщенное по территории Алтае-Саянской горной страны нормированное количество осадков [2] за IX–XI мес. предшествующего года для 1-го сезона или за IV–VI, VII–VIII, IX–XI мес. для 2, 3, 4-го сезонов соответственно; a_k – параметры, соответствующие постоянной среднесезонной концентрации вещества (Fe) в расчетном водном стоке Q_k^i , формируемом k -й группой геосистем за счет осадков P , $k = 1 \div 13$; b – параметр, сопоставляемый с постоянной среднесезонной концентрацией вещества в расчетном приходящем (или уходящем) среднесезонном подземном водном стоке q^i , который формируется в бассейне i почвенно-грунтовыми водами и водами зон трещиноватых пород; K^i – средний поперечный уклон бассейна i , рассчитываемый по картографическим данным как тангенс угла наклона склонов относительно горизонтали (рис. 3) [6]; H – кусочно-линейная функция (1); $c_{1 \div 6}$ – параметры, выражающие влияние осадков P и уклона K^i на сток вещества; d – параметр, характеризующий увеличение концентрации вещества от каждого процента площади S^i в расчетном водном стоке Q^i ; S^i – относительная площадь пахотных земель (доли, %, площади бассейна i).

Вместе с моделью пространственного обобщения и нормирования среднемесячных значений температуры и месячных сумм осадков [2], моделью водного стока [7] балансовые уравнения (2a), (2б) составляют единый комплекс

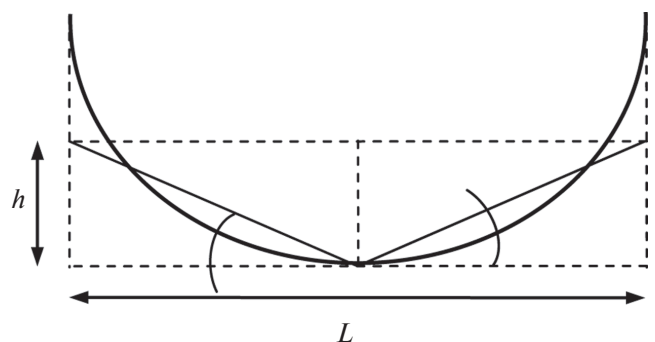


Рис. 3. Поперечный разрез речного бассейна и схема определения его среднего поперечного уклона K^i по средней высоте (h) и ширине (L).

моделей регионального климата, водного и гидрохимического стока горных рек. Все параметры уравнений (2) определены в ходе САМ через решение обратной задачи по ежегодным среднесезонным стокам вещества $Q^i C^i$. Величина Q^i характеризует среднесезонный водный сток для замыкающего створа бассейна с номером $i = 1 \div 34$ в текущем году, который рассчитывается по модели водного стока и нормируется на свое среднесезонное наблюдаемое значение в бассейне i [7]. C^i – наблюдаемые концентрации вещества в речном стоке для бассейна i , нормированные на их среднюю по 34-м бассейнам величину за конкретный сезон. Отметим, что в САМ одновременно выполняются идентификация и верификация разрабатываемой модели [4, 7].

Поперечный уклон K^i в (2) рассчитывается как тангенс угла между поверхностью бассейна и горизонталью (рис. 3) по формуле:

$$K^i = \frac{h}{L/2} = \frac{\text{(средняя высота бассейна } i) - \text{(высота створа)}}{1/2 \text{ (площадь бассейна } i) / \text{(длина речного русла)}}.$$

Такой расчет K^i формально исключал влияние геометрического уклона речного русла, который должен слабо влиять на гидрохимический сток с ландшафтов.

В правой части (2) суммируются вклады каждой группы геосистем в сезонный сток Fe, обеспечиваемые поверхностным, внутрипочвенным и подземным водным стоком. Влияние на вклад k -й группы геосистем от осадков P текущего гидрологического сезона учитывается через функцию $H(c_1, c_1, 1, 1, c_2, c_3, P)$, а через $H(c_4, c_4, 1, 1, c_5, c_6, K^i)$ – от поперечного уклона K^i речных бассейнов. По уравнениям (2) рассчитывается посезонная и многолетняя динамика стока Fe как для каждого ландшафта в каждом бассейне, так и для всего бассейна реки. В (2) выражена также роль пашни. Вклад bq^i учитывает приток или отток вещества при положительном или отрицательном q^i , рассчитываемом по модели водного стока. Величина q^i зависит от осадков предыдущего и текущего сезонов, а также от обмена влагой с почвенно-грунтовыми водами и водами зон трещиноватых пород [7].

В ходе САМ через решение обратной задачи по стоку Fe для каждого гидрологического сезона найдены все параметры – a , b , c , d в уравнениях (2) (табл. 1). Значения параметров a_k ($k = 1 \div 13$) характеризуют стабильные среднесезонные концентрации Fe в водном стоке от каждой из 13-ти групп геосистем Ал-

тае-Саянской горной страны. Отрицательное значение b в 4-м сезоне (осенней межени) определяется одновременными фильтрацией части речного стока в почвенно-грунтовые воды и их обратным поступлением в реки, но уже с более низкой концентрацией Fe. Иначе говоря, в пределах речного бассейна происходит частичное очищение речных вод от Fe за счет его связывания в почвогрунтах. Отметим, что какие-либо экспериментальные измерения концентраций Fe в водном стоке с ландшафтов не проводились, и a_k характеризуют их теоретические значения. Разделив правые части уравнений (2а) и (2б) на величину расчетного водного стока Q^i , получаем концентрацию Fe в речных водах.

В табл. 1 видна достаточно высокая концентрация Fe в водах, поступающих с лесных высокогорий, среднегорий и низкогорий (a_4), лесостепных, степных низкогорий и предгорий (a_6), долин равнинных рек (a_{11}). Это обусловлено тем, что для лесных ландшафтов Fe – один из типоморфных элементов [8]. Обращают на себя внимание высокие концентрации Fe в водах ряда ландшафтов (a_4 , a_5 , a_{13}) во второй сезон (весенне-летнее половодье). Для этого сезона характерно переувлажнение лесных почв со снижением концентрации кислорода, что приводит к установлению в почвах восстановительных геохимических условий. Это способствует образованию в ландшафтных водах растворимых соединений Fe и их выносу со стоком талых склоново-поверхностных вод в реки. В свою очередь, высокая концентрация Fe в водах аквальных ландшафтов (a_{13}) может объясняться аналогичным смещением окислительно-восстановительного равновесия в донных отложениях зимой. В весенне-летнее половодье увеличившийся на порядок водный сток [7] уносит образовавшиеся растворимые соединения Fe вместе с частью самих донных отложений.

В качестве примера на рис. 4 приведена типичная зависимость стока Fe (г/с) от осадков и поперечного уклона K^i речных бассейнов для четырех гидрологических сезонов года. Отметим, что для зимней межени (рис. 4а) приведены осадки за осенний сезон, так как зимой осадки остаются на поверхности в виде снега и не участвуют в формировании водного и гидрохимического стока зимней межени. Видно, что сток Fe в целом уменьшается при уменьшении количества осадков P . Эта зависимость очевидна, поскольку чем меньше количество осадков, тем

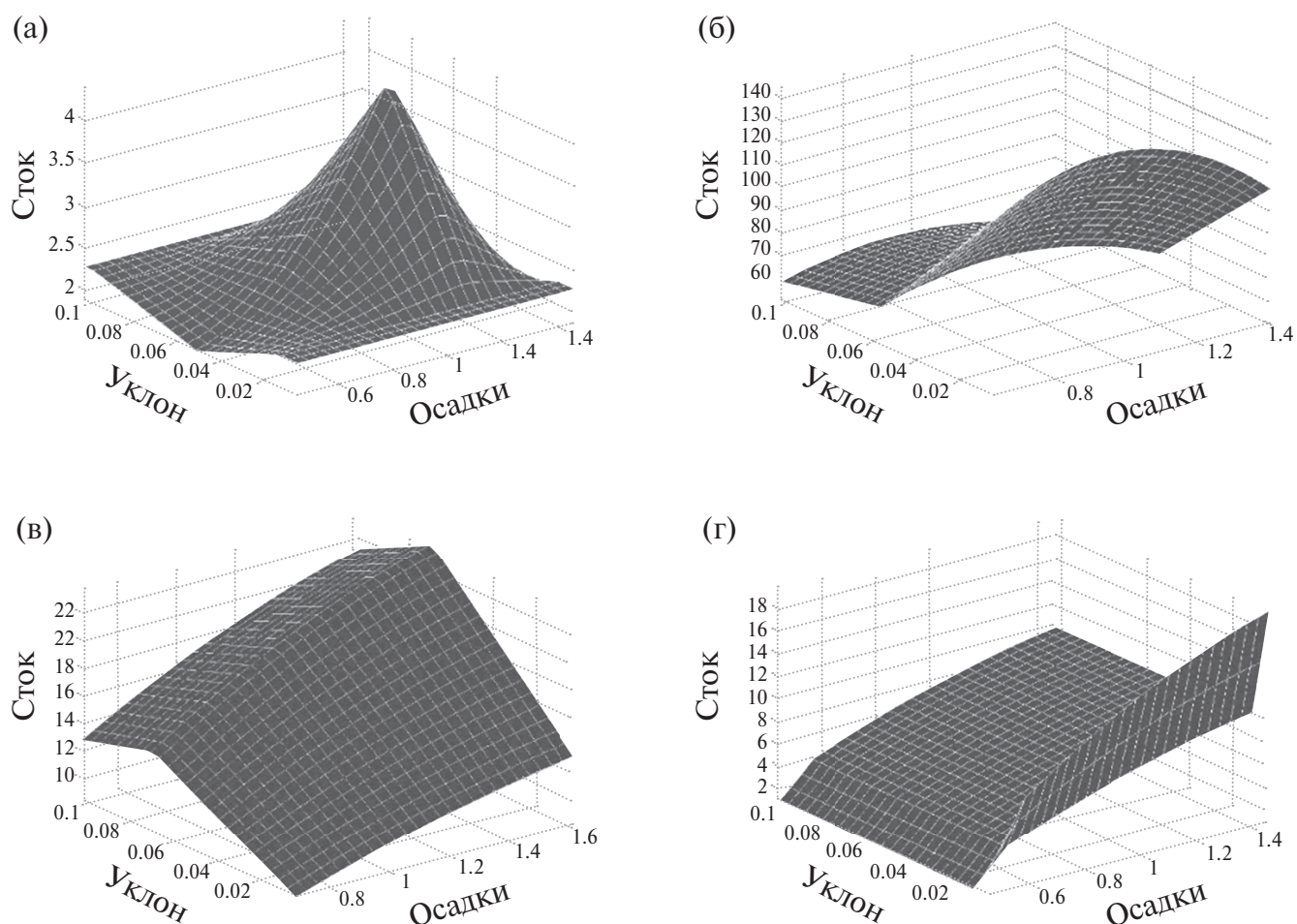


Рис. 4. Зависимость стока общего растворенного железа (г/с) от гипотетически разного поперечного уклона речного бассейна и нормированных на свое среднемноголетнее значение осадков для верховья р. Катунь (створ с. Тюнгур): а – зимняя межень (осадки за месяцы IX–XI предшествующего года), б – весенне-летнее половодье (осадки за месяцы IV–VI текущего года), в – летняя межень (осадки за месяцы VII–VIII), г – осенняя межень (осадки за месяцы IX–XI).

меньшее количество растворимых соединений Fe они вымывают из почв.

ОЦЕНКА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ МОДЕЛИ К ФАКТОРАМ СРЕДЫ

При математическом моделировании сложно организованных природных систем (гидрологических, гидрохимических, экологических и др.) большое значение придается оценке чувствительности разрабатываемых моделей к вариациям входных факторов и их точности. Обзоры различных методов оценки чувствительности можно найти, например, в публикациях [13, 19, 20]. Погрешность моделей тесно связана с их чувствительностью [12, 18] и весьма важна для прикладного использования результатов расчетов.

Оценка чувствительности модели стока Fe основывается на универсальном критерии, ха-

рактеризующем степень адекватности расчетных методов и моделей [2, 3]:

$$A = S_{\text{разн}} / (\sqrt{2} S_{\text{набл}}), \quad (3)$$

A – критерий адекватности, $S_{\text{разн}}$ – стандартное (среднеквадратичное) отклонение для разности сравниваемых расчетного и наблюдаемого рядов моделируемой характеристики, $S_{\text{набл}}$ – стандартное отклонение для наблюдаемого ряда, $1/\sqrt{2}$ – множитель.

Согласно (3), критерий A представляет собой погрешность модели, нормированную на стандартное отклонение данных наблюдений. Интервал значений $A = 0 \div 0.71$ характеризует различную степень адекватности/идентичности расчетных и наблюдаемых величин переменных, при их совпадении $A \sim 0$. Критерий A подобен традиционному показателю качества моделей RSR (RMSE-Standard deviation Ratio) [15, 16] и критерию Нэша–Сатклиффа (Nash-Sutcliffe

model Efficiency coefficient, $NSE = 1 - RSR^2$) [15], с которыми связан зависимостями $RSR = A\sqrt{2}$, $NSE = 1 - RSR^2 = 1 - 2A^2$.

Чувствительность FS рассчитывается на основе A по следующей формуле [3]:

$$FS = (A')^2 - (A)^2 = \frac{(S'_{\text{разн}})^2 - (S_{\text{разн}})^2}{2(S_{\text{набл}})^2} = \frac{2(S_{\text{факт}})^2}{2(S_{\text{набл}})^2} = \frac{(S_{\text{факт}})^2}{(S_{\text{набл}})^2}, \quad (4)$$

где FS – чувствительность модели к естественным вариациям ее какого-либо входного фактора; A – критерий (3); A' – значение A , получаемое при подстановке перепутанных случайным образом наблюдаемых значений выбранного входного фактора (имеющих, очевидно, прежнее статистическое распределение и дисперсию); $(S_{\text{разн}})^2$ – дисперсия разности расчетного и наблюдаемого значений выходной переменной (гидрохимического стока), рассчитываемая по уравнениям (2) при использовании в них наблюдаемых значений фактора; $(S'_{\text{разн}})^2$ – эта же дисперсия при подстановке в (2) случайно перепутанных значений фактора; $(S_{\text{факт}})^2$ – вклад естественных вариаций входного фактора в дисперсию выходной переменной (рассчитываемого стока); $(S_{\text{набл}})^2$ – дисперсия наблюдаемых значений выходной переменной, используемая для нормировки FS .

В (4) дисперсия, обусловленная ошибками наблюдений за входным фактором, будет присутствовать и в $(S'_{\text{разн}})^2$, и в $(S_{\text{разн}})^2$. Поэтому она не будет влиять на значение FS из-за взаимного сокращения в числителе выражения (4) [3]. Таким образом, FS оценивает чувствительность модели непосредственно к естественным/при-

родным вариациям входного фактора, исключая ошибки его наблюдений.

Отметим, что чувствительность FS может быть выражена и через показатель RSR . Учитывая равенство $RSR = A\sqrt{2}$, имеем $FS = [(RSR')^2 - (RSR)^2]/2$. Подобно A' в (4), показатель RSR' равен RSR , полученному при использовании случайно перепутанных наблюдаемых значений выбранного входного фактора вместо первоначальных правильных.

Очевидно, FS характеризует также относительную значимость факторов среды для модели. Поскольку чувствительность FS , согласно (4), выражается в долях $(S_{\text{набл}})^2$, то ее можно выражать в процентах, умножая на 100. Выполненные оценки адекватности и чувствительности модели гидрохимического стока по рядам рассчитанных и наблюдаемых стоков Fe приведены в табл. 2.

Рассмотрим значения адекватности A в табл. 2 для разработанной модели (2). Последняя объединена с моделью пространственного обобщения значений температуры ($A = 0.39$) и количества осадков ($A = 0.62$) [2] вместе с моделью водного стока ($A = 0.6$) [7] через использование результатов их расчетов в уравнениях (2). Согласно табл. 2, в среднем по гидрологическим сезонам адекватность A модели (2) составляет 0.62. При учете правила сложения дисперсий и пропорциональности стока Fe величинам Q_k погрешность расчета гидрохимического стока по (2) должна быть больше погрешности модели водного стока за счет ограниченной точности расчета других факторов и самих уравнений (2). Авторы статьи получили практически одинаково-

Таблица 2. Адекватность модели стока общего растворенного Fe и ее чувствительность к вариациям факторов среды

Характеристика	Гидрологические сезоны 1–4				Среднее
	1	2	3	4	
Стандартное отклонение* $S_{\text{набл}}$ наблюдаемых стоков Fe, %	94	84	74	77	82
Адекватность** A модели стока Fe	0.61	0.64	0.62	0.61	0.62
Чувствительность*** FS_Q к водным стокам Q_k с ландшафтов (то есть к ландшафтной структуре бассейнов), %	12	33	64	69	44.5
Чувствительность FS_K к поперечному уклону бассейнов K , %	10	4	6	9	7.2
Чувствительность FS_P к осадкам P ****, %	11	~0	6	8	6.2
Чувствительность FS_S к площади пашни S , %	~0	21	~0	~0	5.2

* Рассчитано как среднее стандартное отклонение для нормированных наблюдаемых стоков Fe в 34-х речных бассейнах и умножено на 100%; одновременно соответствует сезонным значениям $S_{\text{набл}}$, %.

** Выражается в долях единицы.

*** Оценивается по (4) и выражается в процентах от дисперсии $(S_{\text{набл}})^2$.

**** В первом сезоне (зимняя межень) осадки P взяты за месяцы IX–XI предшествующего года.

вые значения всех A . Отсюда следует, что уравнения (2а) и (2б) с большой точностью описывают соответствующие гидрохимические процессы в речных бассейнах и дают малый собственный вклад в общую погрешность расчетов стока Fe.

Из табл. 2 видно, что наибольшее влияние на сток Fe оказывают водные стоки Q_k с отдельных ландшафтов. Отвечающее им значение FS_Q получено случайным перепутыванием стоков Q_k по годам и речным бассейнам. Далее чувствительность уменьшается для поперечного уклона, осадков и площади пашни. Значение чувствительности для осадков (6.2%) показывает влияние на сток Fe также и Fe, содержащегося в твердых и жидких атмосферных осадках [10]. Этот вывод согласуется с принятым в [10] положением о значимом влиянии поступающих из атмосферы веществ на гидрохимический сток р. Оби, водосборный бассейн которой захватывает часть рассматриваемой Алтае-Саянской горной страны. Отметим, что совокупная чувствительность модели к вариациям входных факторов составляет $(44.5 + 7.2 + 6.2 + 5.2) \approx 63\%$ от общей дисперсии $(S_{\text{набл}})^2$ наблюдаемых стоков Fe.

ПОЛНЫЙ КОМПОНЕНТНЫЙ АНАЛИЗ ДИСПЕРСИИ НЕВЯЗКИ МОДЕЛИ

Чувствительность модели стока Fe (2) к вариациям факторов среды (табл. 2) позволяет найти все основные компоненты дисперсии невязки $(S_{\text{разн}})^2$ расчетов по ней. Дисперсию со всеми ее компонентами будем далее нормировать на $(S_{\text{набл}})^2$ стока Fe по аналогии с (3).

Модели (а) – пространственного обобщения и нормировки среднемесячных значений температуры и месячных осадков, (б) – водного и (в) – гидрохимического стока объединены, согласно уравнениям (2), в один комплекс. Выходная переменная осадков P у модели (а) и водных стоков Q_k и Q у (б) – входные факторы для (в). Вклады факторов в дисперсию невязки математических моделей складываются [2, 3]. С учетом этого сложения, нормировки факторов, чувствительности FS и адекватности A по (3) нормированная дисперсия невязки $(S_{\text{разн}})^2/(S_{\text{набл}})^2 = 2A^2$ для расчетов стока Fe составит:

$$(S_{\text{разн}})^2/(S_{\text{набл}})^2 \approx FS_p \times 2A_a^2 + FS_Q \times 2A_b^2 + 2A_b^2 \approx 2A^2, \quad (5a)$$

здесь индексы “а”, “б”, “в” относятся к соответствующим моделям. В (5а) также учтено, что погрешность данных наблюдений за водными

стоками Q и осадками P достаточно мала [3], и ее влиянием на значения A_b и A_a можно пренебречь.

A_b в (5а) отличается от A в табл. 2 тем, что характеризует адекватность расчетов стока Fe при использовании данных наблюдений за водным стоком и осадками вместо их расчета по моделям A_a и A_b . Это отвечает случаю, когда характеризуется конкретный речной бассейн с изученными режимами этих факторов. Используя средние значения $A_a = 0.62$ [2], $A_b = 0.6$ [7] вместе с $A = 0.62$ и выраженные в долях $FS_p = 0.062$, $FS_Q = 0.445$ (табл. 2), из (5а) легко находим A_b :

$$0.062 \times 2(0.62)^2 + 0.445 \times 2(0.6)^2 + 2A_b^2 = 2(0.62)^2 \text{ или } A_b \approx 0.45. \quad (5б)$$

Рассмотрим модель стока Fe (2) с адекватностью A_b подробнее. Для нее входные факторы, помимо P , Q_k , Q , – поперечный уклон K речных бассейнов и площадь пашни S . Два последних фактора вместе с погрешностью данных о концентрациях растворенного Fe и погрешностью самих уравнений (2) должны влиять на значение A_b . Для вкладов перечисленных характеристик в нормированную дисперсию невязки $2A_b^2$ можно записать:

$$D_K + D_S + D_M + D_C \approx 2A_b^2 \times 100\% = 40.1\%, \quad (6)$$

здесь вклад D_K обусловлен вариациями поперечного уклона K речных бассейнов, D_S – вариациями площадей пашни S , D_M – погрешностью самих уравнений (2), D_C – влияющей на невязку погрешностью данных о концентрациях Fe в речном стоке.

Расчет D_C

Измерения массовой концентрации растворенного Fe выполнялись в УГМС по методике РД 52.24.358-95 [9]. Погрешность E этих измерений при доверительной вероятности 0.95 составила $E \approx 20\%$. Поскольку на каждый сезон в большинстве случаев приходилось по одному измерению концентраций, то указанную погрешность E можно отнести и к среднесезонным концентрациям, используемым в качестве данных наблюдений при расчете невязки. В соответствии со стандартно принимаемой при измерениях доверительной вероятностью 0.95 в интервале от $-E$ до $+E$ в 95% случаев находится “истинная” концентрация. При нормальном распределении вероятностей в интервал $\pm 2 \times$ “стандартное отклонение” также попадает 95% значений многократно измеряемой характеристики, т.е. оба интервала совпадают. Поэтому для погрешности концентраций веществ можно

принять стандартное отклонение $E/2$ и дисперсию $(E/2)^2$. Отсюда находим D_c , как и раньше, нормируя $(E/2)^2$ на дисперсию $(S_{\text{набл}})^2$ наблюдаемого стока Fe (табл. 2):

$$D_c \approx (E/2)^2 / (S_{\text{набл}})^2 \times 100\% = \\ = (20/2)^2 / (82)^2 \times 100\% \approx 1.5\%.$$

Расчет D_K

Выше показано, что FS выражает влияние только естественных вариаций входного фактора и исключает случайные ошибки его наблюдений. Аналогичным образом из FS будут исключаться и вероятностные ошибки расчетных значений входного фактора. Например, в FS_K , FS_S (табл. 2) будут исключаться ошибки как картографических (ГИС) данных, так и самого расчета по ним поперечного уклона K и площади пашни S . Вклад D таких ошибок в дисперсию невязки (6), очевидно, будет во столько раз меньше/больше значений FS , насколько будет меньше/больше отношение дисперсии этих ошибок $(S_{\text{ошиб}})^2$ к дисперсии естественных вариаций фактора $(S_{\text{вар}})^2$ [3]:

$$D = (S_{\text{ошиб}})^2 / (S_{\text{вар}})^2 \times FS. \quad (7)$$

В уравнении (6) для определения вклада D_K необходимо знать $S_{\text{ошиб}}$ и $S_{\text{вар}}$ значений поперечного уклона K . Воспользуемся градацией крутизны склонов в горных регионах по [1], разработанной на основе большого эмпирического материала. В пределах каждого интервала этой градации: 0–4, 4–10, 10–20, 20–30, 30–45, > 45°, – уклоны поверхности не различаются между собой и относятся к одной категории. Иначе говоря, выделенные интервалы отражают объективную погрешность подобных оценок, возникающую из-за других уклонов на характеризуемой территории, заметно отличающихся от K . Например, это “пилообразный” профиль горного рельефа, аппроксимируемый в рассматриваемой модели (2) прямой с существенно меньшим уклоном K . Средний для рассматриваемых 34-х речных бассейнов поперечный уклон K составил 14‰, т.е. ~1°. Взяв соответствующий этому значению интервал крутизны 0 – 4°, находим отвечающую ему погрешность оценок $\pm E \approx \pm 4^\circ / 2 = \pm 2^\circ$ и выражаем ее в доле средней крутизны в данном интервале: $E \approx 2^\circ / ((4^\circ + 0^\circ) / 2) \times 100\% = 100\%$. Сопоставляя E и $S_{\text{ошиб}}$, как и в случае D_c , получаем:

$$S_{\text{ошиб}} = E/2 \approx 50\% \text{ и } (S_{\text{ошиб}})^2 \approx 2500.$$

Для расчета дисперсии $(S_{\text{вар}})^2$ естественных вариаций поперечного уклона K понадобится дисперсия $D_{\text{разб}}$ случайного разброса значений какого-либо фактора X от a до b . Формула для

дисперсии случайной величины, равномерно распределенной в интервале $a \div b$, имеет следующий вид:

$$D_{\text{разб}} = \int_a^b (X - \bar{X})^2 \frac{1}{b-a} dX = \frac{(b-a)^2}{12},$$

где a , b – границы вариаций случайной величины; $1/(b-a)$ – плотность равномерного распределения X на интервале $a \div b$; $\bar{X} = (a+b)/2$ – средняя величина. Поскольку в данном случае используются относительные (нормированные) значения, то a , b надо нормировать на среднее значение $(a+b)/2$. В результате получаем:

$$D_{\text{разб}} = \frac{(b-a)^2}{12} / \left(\frac{a+b}{2} \right)^2 = \frac{1}{3} \left(\frac{b-a}{a+b} \right)^2.$$

Минимальный уклон K , рассчитанный для 34-х речных бассейнов, близок к 0, т.е. можно положить $a \approx 0$. Используя $a \approx 0$ в выражении для $D_{\text{разб}}$, находим $(S_{\text{вар}})^2$:

$$(S_{\text{вар}})^2 \approx D_{\text{разб}} \times 100\% \times 100\% = \\ = \frac{1}{3} \left(\frac{b-0}{0+b} \right)^2 \times 10^4 \approx 3300.$$

Наконец, по уравнению (7) находим вклад D_K , используя полученные значения $(S_{\text{ошиб}})^2 = 2500$, $(S_{\text{вар}})^2 = 3300$ и $FS_K = 7.2\%$ для поперечного уклона K (табл. 2):

$$D_K \approx 2500/3300 \times 7.2\% = 5.5\%.$$

Расчет D_S

Согласно [11], погрешность E определения площадей для отдельных групп геосистем (ландшафтов) и пашни близка к 10%. Тогда дисперсия ошибок площадей, подобно случаю измерений концентраций веществ, составит $(S_{\text{ошиб}})^2 = (E/2)^2 = (10/2)^2 = 25$. Дисперсия же вариаций площадей, по аналогии с вариациями уклонов K речных бассейнов, будет: $(S_{\text{вар}})^2 = 3300$. Средняя чувствительность FS_S к вариациям площади пашни составляет 5.2% (табл. 2). Учитывая уравнение (7) и приведенные оценки дисперсий, получаем значение D_S :

$$D_S \approx (S_{\text{ошиб}})^2 / (S_{\text{вар}})^2 \times FS_S = 25/3300 \times 5.2\% \approx 0\%.$$

Расчет D_M

Теперь можно найти вклад D_M , подставляя в уравнение (6) найденные вклады D_K , D_S , D_c входных факторов модели (2):

$$D_M \approx 40.1\% - D_K - D_S - D_c = \\ = 40.1\% - 5.5\% - 0\% - 1.5\% \approx 33\%.$$

Полученная величина $D_M = 33\%$ характеризует вклад в дисперсию невязки расчетов от погрешности непосредственно самих уравнений (2) и выражена в процентах от дисперсии ($S_{\text{набл}}^2$) наблюдаемых значений стока Fe. D_M близка к аналогичному показателю для модели водного стока [3], что говорит об адекватности непосредственно разработанной модели стока Fe.

По вкладу D_M легко рассчитать более корректные значения RSR_M и $NSE_M = 1 - (RSR_M)^2$, характеризующие погрешность непосредственно самой модели стока Fe. В соответствии с (3) и (6),

RSR_M связан с D_M соотношением $RSR_M = \sqrt{D_M}$.

В настоящем случае $D_M = 33\%$. Отсюда получаем $RSR_M = \sqrt{0.33} \approx 0.57$ и $NSE_M = 1 - (RSR_M)^2 = 1 - 0.33 = 0.67$. Согласно общепринятому рейтингу гидрологических моделей [15], такие значения означают хорошее качество разработанной модели, которому отвечают диапазоны $0.50 < RSR \leq 0.60$ и $0.65 < NSE \leq 0.75$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Большинство современных математических моделей водного и гидрохимического стока представляет собой систему дифференциальных и/или алгебраических уравнений, имеющих фиксированную форму зависимости от входных факторов. В качестве примера можно указать известную модель SWAT [17]. Определяемые для конкретных объектов значения параметров уравнений указанную форму изменить не могут. В отличие от этого, разработанная модель стока Fe может видоизменять форму зависимостей переменных от факторов через функцию (1), что является ее существенным преимуществом при описании сложных многофакторных взаимодействий в геосистемах речных бассейнов. Именно такая особенность разработанной модели обеспечивает ее высокое качество и возможность применения для разнообразных ландшафтно-климатических зон горных территорий.

Предложенный комплекс моделей регионального климата (пространственного обобщения и нормировки среднемесячных значений температуры и месячных сумм осадков), водного стока и гидрохимического стока (уравнения (2)) позволяет рассчитать сезонную и многолетнюю динамику концентрации общего растворенного Fe в речных водах и его стока для любых речных бассейнов Алтае-Саянской горной страны даже при ограниченной гидрометеорологической

и гидрохимической информации. Необходима лишь ГИС-информация о ландшафтной структуре бассейнов, данные о среднемесячных значениях температуры воздуха и месячных суммах осадков, а также 1–2-летние наблюдения за водным стоком с целью расчета коэффициента перехода от его нормированных значений в модели водного стока к измерениям в $\text{м}^3/\text{с}$.

Использован простой метод оценки чувствительности математических моделей к естественным вариациям факторов среды. Он позволил охарактеризовать чувствительность модели стока растворенного Fe, а также осуществить полный компонентный анализ дисперсии ее невязки. Определяемая при таком анализе погрешность моделей обеспечивает более корректный расчет таких критериев, как RSR (отношение невязки $S_{\text{разн}}$ к стандартному отклонению данных наблюдений $S_{\text{набл}}$) и Нэша–Сатклиффа: $NSE = 1 - RSR^2$ [15]. При этом RSR и NSE уже учитывают собственно погрешность модели без влияния погрешности наблюдений ее входных факторов и выходной переменной.

Разработанная модель стока Fe имеет хорошее качество. Это неординарный показатель для модели с постоянными параметрами, одновременно характеризующей различные речные бассейны Алтае-Саянской горной страны. Достижение такого качества при расчете стока Fe для конкретного речного бассейна возможно при использовании в уравнениях (2) наблюдаемых сумм осадков P и водного стока Q вместо расчетных. Все это обеспечивает возможность практического применения модели для различных рек Алтае-Саянской горной страны, а также для рек других горных территорий после соответствующей идентификации параметров.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Беруашвили Н.Л., Жучкова В.К. Методы комплексных физико-географических исследований. Учебник для вузов. М.: Изд-во Московского ун-та, 1997. 320 с.
2. Кирста Ю.Б. Пространственное обобщение климатических характеристик для горных территорий // Мир науки, культуры, образования. 2011. № 3(28). С. 330–337.
3. Кирста Ю.Б. Чувствительность моделей речного стока к факторам среды и ее количественная оценка // Изв. СамНЦ РАН. 2015. Т. 17. № 6. С. 97–103.
4. Кирста Ю.Б., Кирста Б.Ю. Информационно-физический закон построения эволюционных систем. Системно-аналитическое моделирование экосистем. Барнаул: Изд-во АлтГТУ, 2014. 283 с.

5. *Кирста Ю.Б., Лубенец Л.Ф., Черных Д.В.* Типизация ландшафтов для оценки речного стока в Алтае-Саянской горной стране // Устойчивое развитие горных территорий. 2011. № 2(8). С. 51–56.
6. *Кирста Ю.Б., Пузанов А.В., Ловцкая О.В., Лубенец Л.Ф.* Универсальная математическая модель стока взвешенных веществ для бассейнов горных рек // Устойчивое развитие горных территорий. 2012. № 3–4 (13–14). С. 46–53.
7. *Кирста Ю.Б., Пузанов А.В., Ловцкая О.В., Лубенец Л.Ф., Кузьяк Я.Э., Пахотнова А.Ю.* Имитационная математическая модель стока средних и малых рек для горных территорий // Изв. СамНЦ РАН. 2012. Т. 14. № 1(9). С. 2334–2342.
8. *Перельман А.И., Касимов Н.С.* Геохимия ландшафта: Учеб. пособие. М.: Астрей-2000, 1999. 764 с.
9. РД 52.24.358-95. Руководящий документ. Методические указания. Методика выполнения измерений массовой концентрации железа общего в водах фотометрическим методом с 1,10-фенантролином. М.: Росгидромет, 1994.
10. *Савичев О.Г., Иванов А.О.* Атмосферные выпадения в бассейне Средней Оби и их влияние на гидрохимический сток рек // Изв. РАН. Сер. геогр. 2010. № 1. С. 63–70.
11. *Черных Д.В.* Пространственно-временная организация внутриконтинентальных горных ландшафтов (на примере Русского Алтая). Дис. ... докт. географ. наук. Томск: ТГУ, 2012. 312 с.
12. *Beven K., Hall J.* Applied Uncertainty Analysis for Flood Risk Management. London: Imperial College Press, 2013. 500 p.
13. *Iooss B., Lemaitre P.* A review on global sensitivity analysis methods // Uncertainty management in Simulation-Optimization of Complex Systems: Algorithms and Applications / Eds. Meloni C., Dellino G. New York: Springer, 2015. 264 p.
14. *Kirsta Yu.B.* System-analytical modelling – Pt. I: General principles and theoretically best accuracies of ecological models. Soil-moisture exchange in agroecosystems // Ecol. Modelling. 2006. V. 191. P. 315–330.
15. *Koch M., Cherie N.* SWAT-modeling of the impact of future climate change on the hydrology and the water resources in the upper blue Nile river basin, Ethiopia // Proc. 6th Int. Conf. Water Resour. Environ. Res. ICWRER 2013. Koblenz, Germany, 2013. P. 428–523.
16. *Moriasi D.N., Arnold J.G., Van Liew M.W., Bingner R.L., Harmel R.D., Veith T.L.* Model evaluation guidelines for systematic quantification of accuracy in watershed simulation // Transactions of the ASABE. 2007. V. 50(3). P. 885–900.
17. *Neitsch S.L., Arnold J.G., Kiniry J.R., Williams J.R.* Soil and Water Assessment Tool. Theoretical Documentation. Version 2009. Texas: Texas Water Resour. Inst., 2011. <http://swat.tamu.edu/media/99192/swat2009-theory.pdf>
18. *Renard B., Kavetski D., Kuczera G., Thyer M., Franks S.W.* Understanding predictive uncertainty in hydrologic modeling: The challenge of identifying input and structural errors // Water Resour. Res. 2010. 46. W05521. doi: 10.1029/2009WR008328
19. *Skahill B.E.* Practice driven and state-of-the-art methods to quantify hydrologic model uncertainty. ERDC/CHL CHETN-IV-87. Vicksburg, MS, U.S.: Army Engineer Res. Development Center, 2013. 19 p.
20. *Song X., Zhang J., Zhan C., Xuan Y., Ye M., Xu C.* Global sensitivity analysis in hydrological modeling. Review of concepts, methods, theoretical framework, and applications // J. Hydrol. 2015. V. 523. P. 739–757.

System-Analytical Simulation of the Hydrochemical Runoff of Mountain Rivers: Case Study of Dissolved Iron

Yu. B. Kirsta^{1,2,*}, A. V. Puzanov¹

¹ Institute for Water and Environmental Problems, SB RAS
Barnaul, 656038 Russia

² Polzunov Altai State Technical University
Barnaul, 656038 Russia

*e-mail: kirsta@iwep.ru

Received: 19.08.2016

Accepted: 29.12.2016

A water balance simulation model of seasonal and long-term flow dynamics of total dissolved iron has been developed using the example of the middle-size and smaller rivers of the Altai–Sayan highland. Model input factors and input variables included monthly precipitation and average monthly air temperatures (normalized and spatially generalized according to the regional climate model), water flows calculated for individual river basins (according to a discharge model for mountain rivers), and cartographic information on river basins and arable land area. The sensitivity of the model to natural variations of input factors was determined as the contribution of a specific factor to the variance of the observed values of hydrochemical runoff. The calculated criteria $RSR = 0.57$ and Nash–Sutcliffe Efficiency $NSE = 0.67$ indicate the good quality of the model.

Keywords: system-analytical modeling, hydrochemical runoff, total dissolved iron, mountain rivers, Altai, Sayan Mountains

DOI: 10.31857/S0321-0596462161-171