

УДК 547.992.3:51-74

**ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ НЕЛИНЕЙНОЙ ДИНАМИКИ ДЛЯ АНАЛИЗА РЕЗУЛЬТАТОВ МОНИТОРИНГА СТОЧНЫХ ВОД\***

© *А.П. Карманов<sup>1</sup>, д-р хим. наук, проф., вед. науч. сотр.*

*Л.С. Кочева<sup>2</sup>, д-р хим. наук, руков. лаборатории*

*Т.Н. Щемелинина<sup>1</sup>, канд. биол. наук, науч. сотр.*

<sup>1</sup>Институт биологии Коми научного центра Уральского отделения Российской академии наук, ул. Коммунистическая, 28, г. Сыктывкар, Россия, 167982; e-mail: apk0948@yandex.ru

<sup>2</sup>Институт геологии Коми научного центра Уральского отделения Российской академии наук, ул. Первомайская, 54, г. Сыктывкар, Россия, 167982; e-mail: karko07@mail.ru

В комплексе мероприятий по снижению антропогенного загрязнения окружающей среды важная роль принадлежит мониторингу сточных вод предприятий, осуществляемому путем количественной оценки и анализа нормируемых показателей качества сточных вод на очистных сооружениях. Данная статья посвящена исследованию изменчивости состава сточных вод промышленного предприятия в различные периоды времени с помощью современных методов математического анализа временных рядов, характеризующих интегрально динамику процессов поступления и обезвреживания загрязняющих веществ. Основной задачей работы является реконструкция и количественная характеристика так называемого динамического аттрактора системы. Для решения поставленной задачи использовали результаты ежесуточных аналитических определений химического потребления кислорода, отражающего суммарное количество веществ, способных к химическому окислению. Для количественной характеристики и выявления закономерностей, связанных с динамикой системы, был проведен математический анализ геометрического образа динамического режима – аттрактора, представляющего собой притягивающее множество траекторий системы в  $D$ -мерном фазовом пространстве, для чего был использован аппарат фрактальной математики и химической синергетики с привлечением методов нормированного размаха и псевдофазового пространства Паккарда. В ходе исследований осуществлена реконструкция динамики системы по временным рядам показателя «химическое потребление кислорода» и установлены количественные характеристики динамического аттрактора системы. Полученные результаты позволяют утверждать, что изучаемые временные последовательности характеризуются наличием внутреннего порядка, который определяется в настоящее время как фрактальный. Это означает, что временная эволюция изучаемой системы представляет собой устойчивое динамическое состояние, называемое странным аттрактором. Проведена оценка показателей Херста и установлены значения корреляционных и фрактальных размерностей аттрактора в многомерных псевдофазовых пространствах. Показано, что в исследуемой системе происходят явления нелинейной динамической самоорганизации, что подтверждается также RS-анализом временных рядов. Использование алгоритма Грассберга–Прокаччи позволило установить конечную размерность пространства, в рамках которого функционирует аттрактор. Представленные результаты демонстрируют перспективность использования современных методов нелинейной динамики для анализа закономерностей функционирования сложных динамических систем, к которым относятся промышленные предприятия.

*Ключевые слова:* временной ряд, корреляционная размерность, показатель Херста.

\* Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований УрО РАН (код проекта 12-М-45-2012).

### *Введение*

В комплексе мероприятий по снижению антропогенного загрязнения природной среды лежит экологический мониторинг водной среды, основным элементом которого следует считать мониторинг сточных вод предприятий. Эта деятельность осуществляется посредством анализа нормируемых и контролируемых показателей качества сточных вод на входе и выходе с очистных сооружений, а в случае необходимости – по стадиям очистки. Такого рода ретроспективный анализ не позволяет в полной мере прогнозировать и управлять процессами загрязнения природных водоемов. На наш взгляд, для совершенствования мероприятий по защите водной среды необходим также математический анализ так называемых временных рядов [1], т. е. динамики состояния сточных вод на входе и выходе из очистных сооружений. Установление закономерностей изменения качества сточных вод в течение достаточно продолжительного периода позволит прогнозировать уровень загрязнения водной среды, что создаст дополнительные возможности по уменьшению рисков при принятии решений производственного характера.

Традиционный подход к анализу результатов наблюдений связан с использованием статистических методов, основными из которых являются регрессионный и дисперсионный. Указанные методы зачастую не приводят к положительным результатам, поскольку далеко не всегда удается найти прямую взаимосвязь между производственными процессами и уровнем загрязнения промышленных стоков. Показано, что более перспективным подходом является применение современных методов нелинейной динамики [2, 5].

В данной работе для анализа данных мониторинга сточных вод в виде временных рядов использован аппарат фрактальной математики и химической синергетики с привлечением методов Паккарда и Грассберга–Прокаччия. На первом этапе исследования в качестве критерия загрязненности сточных вод был использован так называемый показатель ХПК (химическое потребление кислорода), который дает суммарное количество загрязняющих веществ, способных к окислению.

### *Экспериментальная часть*

Для математического анализа использовали аналитические данные ежесуточных определений показателя ХПК на одном из предприятий лесопромышленного комплекса за два периода: с мая 1994 г. по май 1999 г.; с мая 2012 г. по ноябрь 2012 г. Места отбора проб: приемная камера (ПК) и пруд-аэрактор (ПА). Длина первого ряда для приемной камеры (ПК-1) составляла 1825 точек, второго ряда (ПК-2) – 183 точки; длины временных рядов для очищенных стоков ПА-1 – 1795 точек, ПА-2 – 191 точка.

### *Обсуждение результатов*

На рис. 1, а представлены данные мониторинга промышленных стоков за первый период наблюдений (1994 – 1999 гг.). Как видно из рис. 1, а, анализируемые динамические переменные ПК-1 и ПА-1 демонстрируют достаточно сильные колебания – флуктуации. Флуктуационная динамика данной сложной системы, наблюдаемая как временной ряд показателей ХПК, имеет характер «броуновского движения» относительно средней величины ХПК. Какие-либо видимые закономерности, в том числе периодические, связанные с сезонными периодами, отсутствуют. Максимальное значение показателя ХПК неочищенных сточных вод достигало 3600 мг О<sub>2</sub>/л, минимальное – 200 мг О<sub>2</sub>/л. Колебания значений ХПК очищенных вод имеют, естественно, меньшую амплитуду: минимальное – 50 мг О<sub>2</sub>/л, максимальное – не более 500 мг О<sub>2</sub>/л. Корреляции между ежедневными отсчетами (аналитическими определениями) ХПК по существу отсутствуют. В то же время между среднеквартальными значениями ПК-1 и ПА-1 определенная

взаимосвязь существует, причем выявляется некоторая тенденция к росту степени загрязненности промышленных стоков данного предприятия в период 1997–1999 гг.

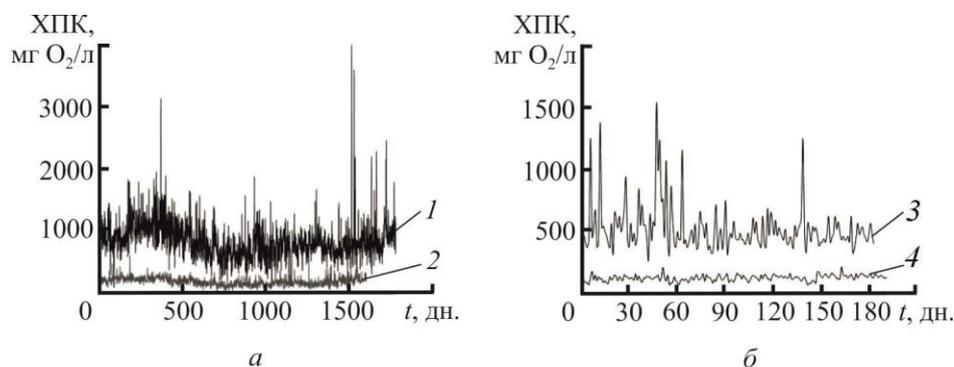


Рис. 1. Временная зависимость показателя ХПК сточных вод предприятия за период с мая 1994 г. по май 1999 г. (а) и с мая по ноябрь 2012 г. (б): 1 – ПК-1; 2 – ПА-1; 3 – ПК-2; 4 – ПА-2

Как видно из рис. 1, б, где представлены результаты определения показателя ХПК в 2012 г., уровень загрязненности сточных вод в приемной камере в 2012 г. заметно ниже, чем в 90-е гг.; максимальные значения ХПК находятся на уровне 1500...1700 мг  $O_2$ /л. Очищенные воды (ПА-2) также характеризуются более низкими значениями показателя ХПК по сравнению с предшествующими годами.

Универсальным инструментом исследования стационарных динамических процессов естественного и техногенного происхождения являются методы нелинейной динамики, позволяющие идентифицировать и охарактеризовать динамические системы любого происхождения. В частности, с их помощью можно определить является ли исследуемый режим (или процесс) случайным или представляет собой детерминированный хаос, который можно описать на языке дифференциальных уравнений. Как известно, во многих сложных системах довольно часто наблюдаются явления динамической самоорганизации, приводящие к образованию структур, в том числе временных фракталов. Следует отметить, что информация о параметрах таких временных фрактальных структур чрезвычайно важна для прогнозирования эволюции сложных технологических систем, предсказания катастрофических явлений и аварийных ситуаций.

Для количественной характеристики и выявления закономерностей, связанных с динамикой системы, необходим детальный анализ геометрического образа динамического режима – аттрактора, представляющего собой так называемое притягивающее множество траекторий системы в  $D$ -мерном фазовом (или псевдофазовом) пространстве. Координатами фазового пространства являются динамические переменные процесса. Каждому типу динамического поведения соответствует свой аттрактор и, естественно, его геометрический образ – фазовый портрет. Например, динамика обычной химической реакции отвечает аттрактору типа устойчивой точки. Регулярным колебаниям (периодические режимы реакции Белоусова–Жаботинского) соответствует устойчивый предельный цикл. Этим классическим аттракторам соответствуют классические геометрические области: точка, замкнутая кривая (окружность, эллипс и т.д.) или поверхность в форме тора. В противоположность этому неупорядоченные траектории фазового портрета указывают на наличие хаотического аттрактора. К этому классу аттракторов относится и

так называемый странный аттрактор, геометрическим образом которого в фазовом пространстве является фрактальный объект [4].

На рис. 2 представлен псевдофазовый портрет динамической системы, построенный в соответствии с методом временной сдвигки Паккарда по данным временного ряда ПК-1 (см. рис. 1, а).

Аналогичный вид имеет псевдофазовый портрет временного ряда ПА-1. Очевидно, что такого рода геометрические образы систем не отвечают представлениям о классических аттракторах, поэтому для выявления их природы

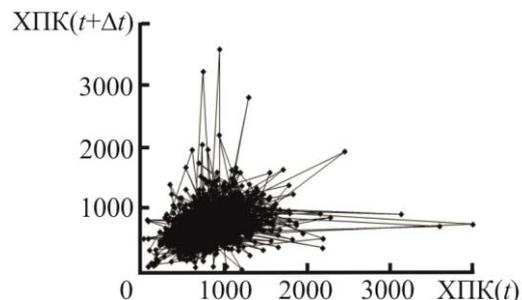


Рис. 2. Псевдофазовый портрет системы согласно ряда ПК-1

воспользуемся известным методом Грассберга–Прокаччия, в рамках которого используется следующая интегральная корреляционная функция:

$$C(r) = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i,j,i \neq j}^N \Theta(r - |x_i - x_j|),$$

где  $N$  – число точек;

$\Theta$  – функция Хевисайда;

$r$  – заданное расстояние от точки  $x_i$ , на котором ведется подсчет точек

$$\begin{cases} \Theta, \text{ если } (r - |x_i - x_j|) > 0; \\ \Theta, \text{ если } (r - |x_i - x_j|) \leq 0; \end{cases}$$

$|x_i - x_j|$  – расстояние (промежуток времени) от  $i$ -й до  $j$ -й точки;

$x_i$  – точка фазового пространства с координатами.

$$ХПК(x), ХПК(x + \Delta x), ХПК(x + 2\Delta x), \dots, ХПК(x + (D - 1)\Delta x).$$

Корреляционный интеграл  $C(r)$  – доля пар точек на аттракторе, расстояние между которыми меньше чем  $r$ . В пределе  $r \rightarrow 0$ ,  $N \rightarrow \infty$  и в отсутствие шума  $C(r) \sim r^{d_c}$ , где  $d_c$  – корреляционная размерность аттрактора.

Как показали расчеты, интегральная корреляционная функция анализируемого режима является инвариантной мерой (выполняется принцип скейлинга), что позволяет определить корреляционную размерность  $d_c$  геометрических образов аттракторов (см. таблицу на с. 135).

Установлено, что размерность для серии ПК-1 в двумерном (размерность пространства вложения  $D = 2$ ) псевдофазовом пространстве  $d_c = 1,92$  и в трехмерном ( $D = 3$ ) – 2,81. Для серии ПА-1 соответственно 1,93 и 2,91.

Метод Грассберга–Прокачиа позволяет также определить истинную размерность аттрактора ( $D_a$ ) и размерность пространства, в котором «живет» данный аттрактор. Для этого были построены фазовые траектории процесса в пространствах все большей размерности (до 35), определены их размерности  $d_c$  ( $\ln C(r) = d_c \ln(r)$ ). На рис. 3 представлен график зависимости размерности аттрактора  $d_c$  от размерности пространства вложения  $D$ .

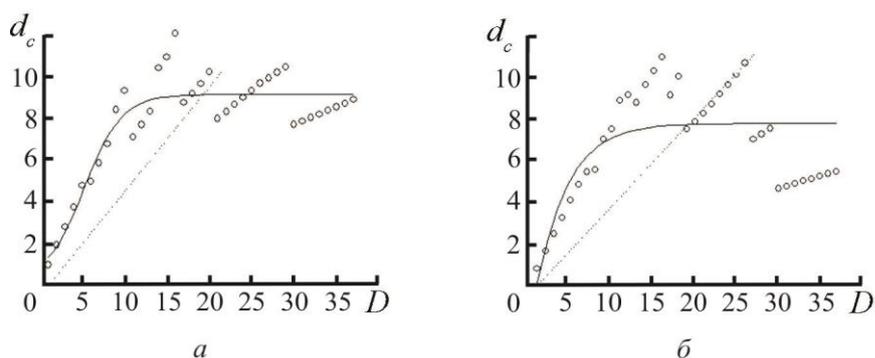


Рис. 3. Зависимость корреляционной размерности траекторий системы  $d_c$  от размерности пространства вложения  $D$ : *a* – по данным ПК-1; *б* – по данным ПА-1

Известно, для случайного процесса типа «белый шум» размерность фазовой траектории всегда равна размерности пространства вложения. Если же процесс имеет аттрактор, то зависимость размерности  $d_c$  от  $N$  должна выходить на плато. Согласно теоретическим представлениям [3], асимптотическое значение  $d_c$  представляет собой искомую величину размерности аттрактора  $D_a$ . Как видно из рис. 3, исследуемый процесс отнюдь не относится к классу случайного шума, поскольку зависимость выходит на плато. Оценка корреляционной размерности согласно теореме Такенса (пунктирная линия) дает для ряда ПК-1 размерность  $D_a = 8,9$ , для ряда ПА-1 – 8,8. Соответственно, размерность пространства, в котором функционируют оба аттрактора составляет 9. Полученные данные показывают, что загрязненность сточных вод в терминах ХПК характеризуется как чрезвычайно сложная динамическая система с фрактальными свойствами, наличие которых подтверждается RS-анализом.

Статистический RS-анализ является весьма эффективным методом обнаружения эффектов самоорганизации и долговременной памяти, а также обнаружения периодических и непериодических циклов [1]. Результат RS-анализа есть вычисление показателя Херста ( $H$ ), который является статистической характеристикой структуры и определяется для временных рядов по уравнению

$$R/S = (\tau/2)^H,$$

где  $R$  – нормированный размах вариации (разность максимального и минимального значений измеряемого параметра);

$S$  – стандартное отклонение (корень квадратный от дисперсии);

$\tau$  – период (длина ряда) наблюдений.

Значения  $0,5 < H < 1,0$  характерны для систем с так называемым детерминированным хаосом, т. е. для систем в которых имеется та или иная форма упорядоченности. В частности, для фрактальных процессов  $H = 0,8 \pm 0,1$ . Процесс характеризуется долговременной памятью. Это означает, что последующие показатели достаточно сильно зависят от предшествующих. Согласно Мандельброту, такие системы можно назвать инерционными.

Значения  $H$  в окрестностях  $0,5 \pm 0,1$  определяют собой область белого шума (например, броуновское движение), который соответствует «хаотичному» поведению. Соответственно, надежность прогнозов относительно данной системы стремится к минимуму.

Временные зависимости, характеризуемые показателем Херста в области  $0,3 \pm 0,1$ , типичны для так называемых антиперсистентных процессов (эргодические ряды).

Проведена оценка показателя  $H$  для всех исследуемых временных рядов. Показатель Херста определяется как угловой коэффициент наклона линии регрессии исследуемой зависимости, построенной в двойных логарифмических координатах (рис. 4).

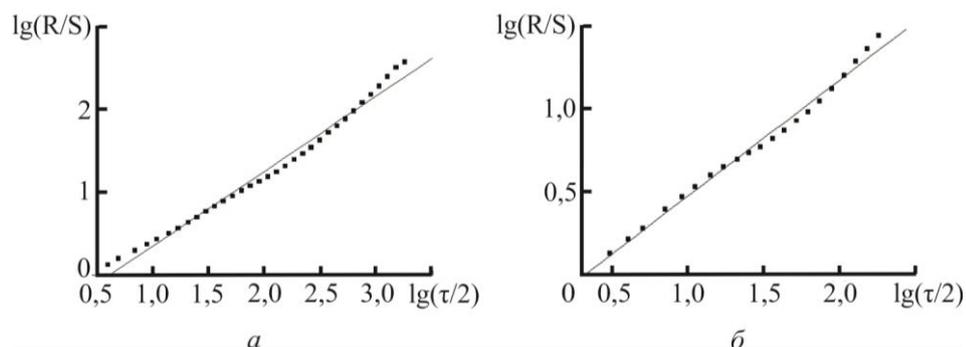


Рис. 4. Зависимость нормированного R/S размаха от временного промежутка  $\tau$ :  
 $a$  – для ряда ПК-1;  $b$  – ПК-2

Как видно из таблицы, для серии ПК-1 показатель  $H = 0,88$ ; практически аналогичное значение (0,90) получено для временной серии ПА-1.

Значения показателя  $H$  для всех четырех временных рядов укладываются в диапазон  $0,5 \dots 1,0$  характерный для систем, которые называют детерминированными хаотическими системами. Значения фрактальной и корреляционной размерностей, приведенные в таблице, позволяют утверждать, что изучаемые временные последовательности характеризуются наличием

**Скейлинговые индексы динамики ХПК сточных вод**

Временной ряд	Показатель Херста $H$	Фрактальная размерность $d_f$	Корреляционная размерность псевдофазового портрета размерности $d_c$	
			$D = 2$	$D = 3$

ПК-1	0,876±0,019	1,12	1,92	2,81
ПА-1	0,894±0,016	1,11	1,93	2,91
ПК-2	0,698±0,016	1,30	–	–
ПА-2	0,773±0,017	1,25	–	–

внутреннего порядка, который определяется в настоящее время как фрактальный, а временная эволюция изучаемой системы представляет собой устойчивое динамическое состояние, называемое странным аттрактором [3]. Поэтому в данном случае можно говорить об обнаружении явления нелинейной динамической самоорганизации, так как в системе самопроизвольно устанавливается некий внутренний порядок фрактального типа, причем, в отличие от других, более простых вариантов самоорганизации, сопровождаемых образованием тривиальных, например, периодических структур, фрактальная (временная) структура обнаруживается лишь в фазовом пространстве.

Одним из важных результатов, который можно сделать на основе математического анализа данных мониторинга сточных вод является то, что показатели Херста и скейлинговые индексы, т. е. размерности системы  $d_f$  и  $d_c$  до и после очистных сооружений практически одинаковы. Это означает, что собственно физико-химические процессы очистки сточных вод являются тривиальными и предсказуемыми, а сложность системы предопределяется сложным поведением производственной деятельности предприятия. Реконструкция аттрактора системы и определение его размерности позволили оценить меру этой сложности и установить минимально необходимое число дифференциальных уравнений для создания модели формирования загрязненности промстоков. Реконструкция математической модели системы по временным рядам, отслеживание изменения ее параметров и накопление массива аналитических данных позволят в перспективе предсказывать наступление аномальных режимов деятельности промышленных предприятий.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Безручко Б.П., Смирнов Д.А. Математическое моделирование и хаотические временные ряды. Саратов: ГосУНЦ Колледж, 2005. 320 с.
2. Малинецкий Г.Г., Потанов А.Б. Современные проблемы нелинейной динамики. М.: Эдиториал УРСС, 2000. 336 с.
3. Мун Ф. Хаотические колебания. М.: Мир, 1991. 312 с.
4. Рюэль Д., Такенс Ф. Странные аттракторы. М.: Мир, 1991. С. 117–151.
5. Секушин Н.А., Карманов А.П. Разработка новых подходов к описанию кинетики полихронного типа // Лесн. журн. 2006. №4. С. 120–131. (Изв. высш. учеб. заведений).

Поступила 29.01.14

УДК 547.992.3:51-74

#### Application of Non-Linear Dynamics Methods for Analysis of Results of Industrial Wastewater Monitoring

*A.P. Karmanov<sup>1</sup>, Doctor of Chemistry, Professor, Senior Research Scientist*

*L.S. Kocheva<sup>2</sup>, Doctor of Chemistry, Head of the Laboratory*

*T.N. Shchemelinina<sup>1</sup>, Candidate of Biology, Research Assistant*

<sup>1</sup>Institute of Biology, Komi Scientific Center, Ural Division, Russian Academy of Sciences, Kommunisticheskaya str., 28, Syktyvkar, 167982, Russia; e-mail: apk0948@yandex.ru

<sup>2</sup>Institute of Geology, Komi Scientific Center, Ural Division, Russian Academy of Sciences, Pervomaiskaya str., 54, Syktyvkar, 167982, Russia; e-mail: tatyanakomi@mail.ru

At the complex of measures to reduce the anthropogenic pollution the important role belongs to the monitoring of the enterprises wastewater, implemented by quantifying and analyzing of the indexes of standardized quality wastewater at the treatment plants. This article is devoted to the study of the variability of the composition of wastewater of industrial enterprises in different periods of time with the help of modern methods of mathematical analysis of time-series describing the integral dynamics of the processes of receipt and disposal of pollutants. The main idea of this paper is the reconstruction and quantitative characteristics of the so-called dynamic attractor of the system. To solve this problem we used the results of the daily analytical determinations of COD (chemical oxygen demand), reflecting, as it is known, the total number of substances capable of chemical oxidation. For the quantitative and identifying patterns associated with the dynamics of the system was carried out the mathematical analysis of the geometric image of the dynamic mode - an attractor, which attracts the set of trajectories of the system in the D-dimensional phase space. For this purpose the device of fractal mathematics and chemical synergy involving the methods of the standardized range and Packard's pseudo-relative space was used. At the research it was carried out the reconstruction of the dynamics of the system at the time-series of COD and established the quantitative characteristics of the dynamic attractor of the system. These results suggest that the studied time-series are characterized by the presence of internal order, which is determined at the moment as a fractal. It means that the time evolution of the system is the stable dynamic state called "a strange attractor". The estimation of the Hurst exponent and the values of the correlation and fractal dimension of the attractor in the multidimensional spaces pseudo-relative spaces were determined. Thus, it is shown that in this system there are phenomena of nonlinear dynamic self-organization, which is also confirmed by RS-analysis of time-series. The Grassberg-Procaccia algorithm helped to establish the final dimension of the space within the attractor functions. The presented results demonstrate the perspective of using of the modern methods of nonlinear dynamics for the analysis of the functioning of the complex dynamic systems, which include the industrial companies.

*Keywords:* time-series, correlation dimension, Hurst exponent.

#### REFERENCES

1. Bezruchko B.P., Smirnov D.A. *Matematicheskoe modelirovanie i haoticheskie vremennye rjady* [Mathematical Modeling and Chaotic Time Evolutions]. Saratov, 2005. 320 p.
  2. Malinetsky G.G., Potapov A.B. *Sovremennye problemy nelinejnoj dinamiki* [Modern Problems of Non-Linear Dynamics]. Moscow, 2000. 336 p.
  3. Mun F. *Chaotic Variations*. Moscow, 1991. 312 p.
  4. Rjuel D., Takens F. *Strange Attractors*. Moscow, 1991. pp. 117-151.
  5. Sekushin N.A., Karmanov A.P. *Razrabotka novyh podhodov k opisaniju kinetiki polihronnogo tipa* [Elaboration of New Approach for Description of Polychronic Type Kinetics]. *Lesnoy zhurnal*, 2006, no. 4, pp. 120-131.
-