

УДК [550.46+556.51]: 004.94

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОХИМИЧЕСКОГО СТОКА ГОРНЫХ РЕК. 2. ОЦЕНКА КАЧЕСТВА МОДЕЛЕЙ СТОКА МИНЕРАЛЬНОГО АЗОТА

© 2016 Ю.Б. Кирста

Институт водных и экологических проблем СО РАН

Статья поступила в редакцию 27.04.2016

Оценено качество математических моделей стока различных минеральных соединений азота ( $\text{NO}_2^-$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{NH}_4^+$ ) на примере 34 рек Алтае-Саянской горной страны. Определена чувствительность моделей к естественным вариациям факторов среды. Осуществлен полный компонентный анализ дисперсии их невязки. Рассчитанный коэффициент Нэша–Сатклифа  $\text{NSE}=0,66$  отвечает хорошему качеству моделей, что позволяет рассчитывать сезонную и многолетнюю динамику гидрохимического стока для различных рек Алтае-Саянской горной страны, в том числе при ограниченной гидрометеорологической и гидрохимической информации по речным бассейнам.

Ключевые слова: математическая модель, гидрохимический сток, азот, качество, чувствительность, Алтай, Саяны

При математическом моделировании сложно-организованных природных систем (гидрологических, гидрохимических, экологических и др.) большое значение придается оценке чувствительности к вариациям входных факторов и точности разрабатываемых моделей. Обзоры различных методов оценки чувствительности можно найти, например, в недавних публикациях [1-3]. Для прикладного использования результатов расчетов также важна погрешность моделей, тесно связанная с чувствительностью [4, 5]. В предлагаемой работе оценены и чувствительность, и погрешность моделей стока минеральных соединений азота ( $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}_3$ ,  $\text{NH}_4$ ), разработанных для рек Алтае-Саянской горной страны [6]. Использованы простой метод количественной оценки чувствительности моделей к естественным вариациям факторов среды и полный компонентный анализ дисперсии погрешности расчетов [7]. Оба метода дополняют системно-аналитическое моделирование (САМ) [8, 9], с помощью которого тестируемые модели были созданы.

**Исходные материалы.** В ходе САМ стока  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}_3$ ,  $\text{NH}_4$  использован значительный объем экспериментальных данных: несколько тысяч наблюдений за гидрохимическим стоком по 34 речным бассейнам Алтае-Саянской горной страны за 1951–2003 гг., значения месячных осадков и среднемесячных температур воздуха по территории за этот же период, ландшафтная структура бассейнов, площади и высота расположения ландшафтов (13 групп геосистем), площадь паш-ни и другие картографические характеристики [6]. При этом площади анализируемых водосборных бассейнов составляли от 177 до 21000 км<sup>2</sup>, что позволяет отнести тестируемые модели к универсальному типу.

Ранее для территории Алтае-Саянской горной страны был осуществлен пространственно-временной анализ ее метеорологических полей [10]. Внутригодичная и многолетняя динамика месячных осадков и среднемесячных температур воздуха оказалась единой по всей стране при нормировке осадков на их среднемноголетнее значение за июль «in situ», а температур – на их среднемноголетнее значение за январь (для X-IV месяцев) и июль (для V-IX) «in situ». Такие пространственно обобщенные нормированные характеристики уже не зависели от координат или высоты расположения анализируемых участков, были одинаковы для всех анализируемых речных бассейнов и,

поэтому применялись во всех дальнейших расчетах. В совокупности в моделях использовалось 636 значений обобщенных по территории Алтае-Саянской горной страны нормированных месячных осадков и 636 среднемесячных температур воздуха за период 1951–2003 годов.

С учетом внутригодовых особенностей речного стока на рассматриваемой территории были выделены 4 гидрологических периода/сезона: первый (зимняя межень, XII-III месяцы), второй (весенне-летний половодье, IV-VI), третий (летняя межень, VII-VIII), четвертый (осенняя межень с возможными паводками при сильных дождях, IX-XI). Наблюдения за гидрохимическим стоком были нерегулярны и поэтому их данные усреднялись по сезону каждого года для каждого речного бассейна. В среднем по всем 34 бассейнам массовые концентрации веществ составили для 1, 2, 3, 4-го сезонов соответственно: нитритов (по аниону  $\text{NO}_2$ ) 0,013, 0,014, 0,006, 0,007 мг/л, нитратов (по аниону  $\text{NO}_3$ ) 0,64, 0,39, 0,17, 0,32 мг/л и аммония (по катиону  $\text{NH}_4$ ) 0,14, 0,36, 0,20, 0,20 мг/л. В связи с тем, что в моделях использовались нормированные осадки и температуры воздуха, значения концентраций  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}_3$ ,  $\text{NH}_4$  также нормировались на их средние по речным бассейнам сезонные значения. В целом, база данных по гидрохимическому стоку включала 1320, 1440, 1400 средне-сезонных нормированных концентраций соответственно  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}_3$ ,  $\text{NH}_4$  в разные годы по 34 речным бассейнам, то есть 1320/4x330, 1440/4x360, 1400/4x350 величин для каждого сезона.

В ходе САМ проверялись различные физико-химически обоснованные варианты описания зависимостей между выходной переменной (гидрохимическим стоком) и факторами среды. Для облегчения поиска формы зависимостей процессов от факторов применялась кусочно-линейная функция  $H$ , состоящая из трех линейных фрагментов:

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

где  $X_1, X_2, Y_1, Y_2, Z_1, Z_2$  – параметры, определяемые в ходе САМ путем решения обратной задачи;  $X$  – какая-либо переменная моделей.

Кирста Юрий Богданович, доктор биологических наук, главный научный сотрудник. E-mail: kirsta@iwep.ru

Полученные математические модели гидрохимического стока дали наименьшую сумму квадратов разностей (невязку) между рассчитанными и наблюдаемыми значениями стока  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}_3$ ,  $\text{NH}_4$  [6]. В итоге сток оказался зависим от осадков и температур воздуха (влияющих на расчет водного стока [11]), ландшафтной структуры территории, поперечного уклона речных бассейнов и имеющих площадей пашни. Сток каждого минерального соединения  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}_3$  или  $\text{NH}_4$  рассчитывался по уравнениям:

- для первого гидрологического сезона

$$\text{Сток} = \sum_k a_k Q_k^i H(c_1, c_1, 1, 1, c_2, c_3, P) H \times$$

$\times (c_4, c_4, 1, 1, c_5, c_6, K^i) + bq^i + dS^i Q^i$   
- для второго, третьего и четвертого гидрологических сезонов

$$\text{Сток} = \sum_k a_k Q_k^i H(c_1, c_1, 1, 1, c_2, c_3, P) H \times$$

$\times (c_4, c_4, 1, 1, c_5, c_6, K^i) + bq^i + d\sqrt{S^i} Q^i$   
где  $P$  – обобщенные по территории Алтае-Саянской горной страны нормированные осадки [10] за IX-XI месяцы предшествующего года для 1-го сезона или за IV-VI, VII-VIII, IX-XI месяцы для 2, 3, 4-го сезонов соответственно;  $a_k$  – параметры, отвечающие постоянной среднесезонной концентрации вещества ( $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}_3$  или  $\text{NH}_4$ ) в расчетном водном стоке  $Q_k^i$ , формируемом  $k$ -й группой геосистем за счет осадков  $P$ ,  $k=1 \times 13$ ;  $b$  – 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 [6];  $H$  – кусочно-линейная функция (1);  $c_{1:6}$  – параметры, отражающие влияние на гидрохимический сток осадков  $P$  и уклона  $K^i$ ;  $d$  – параметр, характеризующий добавку к концентрации вещества от каждого процента площади  $S^i$  в расчетном водном стоке  $Q^i$ ;  $S^i$  – относительная площадь пахотных земель (в процентах от площади бассейна  $i$ ).

Вместе с подмоделью пространственного обобщения и нормировки среднемесячных температур и месячных осадков [6], подмоделью водного стока [11] уравнения (2а), (2б) составляют полную имитационную модель стока  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}_3$  или  $\text{NH}_4$ . Все параметры уравнений определены в ходе САМ через решение обратной задачи по ежегодно наблюдаемым среднесезонным стокам минеральных соединений азота, найденным как  $Q^i C^i$ . Величина  $Q^i$  характеризует среднесезонный водный сток для замыкающего створа бассейна с номером  $i=1 \div 34$  в текущем году, рассчитывается по подмодели водного стока и нормируется на свое среднесезонное наблюдаемое значение в конкретном бассейне  $i$  [11].  $C^i$  представляет собой наблюдаемые концентрации вещества в речном стоке, нормированные на их среднее значение для 34 бассейнов.

**Оценка чувствительности моделей к факторам среды.** Оценка чувствительности разработанных моделей основывается на предложенном ранее

универсальном критерии, характеризующем степень адекватности расчетных методов и моделей [7, 10]:

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

где  $A$  – 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 значений переменной с их наилучшим совпадением при  $A=0$ . Критерий  $A$  подобен показателю качества моделей RSR [12, 13] и критерию Нэша–Сатклифа NSE [13], с которыми связан зависимостями  $\text{RSR} = A\sqrt{2}$ ,  $\text{NSE} = 1 - \text{RSR}^2 = 1 - 2A^2$ .

Чувствительность  $FS$  рассчитывается на основе  $A$  по формуле [7]:

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

$$= \frac{2(S_{\text{факт}})^2}{2(S_{\text{набл}})^2} = \frac{(S_{\text{факт}})^2}{(S_{\text{набл}})^2} \quad (4)$$

где  $FS$  – чувствительность модели к естественным вариациям какого-либо входного фактора модели;  $A$  – 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 для разности расчетного и наблюдаемого значений выходной переменной (гидрохимического стока), рассчитываемая по уравнениям (2) с использованием 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 ее взаимного вычитания в числителе выражения (4) [7]. Тем самым  $FS$  оценивает чувствительность модели **непосредственно к естественным вариациям входного фактора**, исключая ошибки его наблюдений. Отметим, что чувствительность  $FS$  может быть выражена и через показатель RSR. Учитывая равенство  $\text{RSR} = A\sqrt{2}$ , имеем  $FS = [(\text{RSR}')^2 - (\text{RSR})^2]/2$ . Подобно  $A'$  в (4), показатель  $\text{RSR}'$  равен  $\text{RSR}$ , полученному через использование случайно перепутанных наблюдаемых значений выбранного входного фактора вместо первоначальных правильных. Очевидно,  $FS$  характеризует также относительную значимость факторов среды для моделей. Поскольку чувствительность  $FS$  согласно (4) выражается в долях от  $(S_{\text{набл}})^2$ , то ее можно выражать в %, умножая на 100. Выполненные оценки адекватности и чувствительности моделей гидрохимического стока по рядам рассчитанных и наблюдаемых стоков  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}_3$ ,  $\text{NH}_4$  приведены в табл. 1.

**Таблица 1.** Адекватность моделей (2) для стока NO<sub>2</sub>, NO<sub>3</sub>, NH<sub>4</sub> и их чувствительность к вариациям факторов среды

Характеристика	Гидрологические сезоны				Среднее
	1	2	3	4	
стандартное отклонение <sup>1</sup> S <sub>набл</sub> наблюдаемых стоков NO <sub>2</sub> /NO <sub>3</sub> /NH <sub>4</sub> , %	88 68 101	79 69 71	79 74 78	83 75 88	79
адекватность <sup>2</sup> A моделей стоков NO <sub>2</sub> /NO <sub>3</sub> /NH <sub>4</sub>	0,61 0,61 0,59	0,62 0,60 0,66	0,64 0,60 0,55	0,61 0,60 0,56	0,60
чувствительность <sup>3</sup> FS <sub>Q</sub> к водным стокам Q <sub>к</sub> с ландшафтов (то есть к ландшафтной структуре бассейнов), %	52 22 41	9 19 3	88 46 55	19 31 9	33
чувствительность FS <sub>K</sub> к поперечному уклону бассейнов K, %	6 14 9	5 9 2	2 0,5 9	10 15 19	8,4
чувствительность FS <sub>P</sub> к осадкам P, %	5 1 3	0,3 1 2	3 0,4 6	5 1 11	3,2
чувствительность FS <sub>S</sub> к площади пашни S, %	4 2 0,1	5 0 5	0,3 0 0	3 0 0	1,6

Примечание: <sup>1</sup> Рассчитано как среднее стандартное отклонение для нормированных наблюдаемых гидрохимических стоков 34 речных бассейнов и умножено на 100%; одновременно соответствует сезонным значениям S<sub>набл</sub> (%); <sup>2</sup> Выражается в долях единицы; <sup>3</sup> Оценивается по (4) и выражается в процентах от дисперсии (S<sub>набл</sub>)<sup>2</sup>.

Рассмотрим значения адекватности A анализируемых моделей (2) в табл. 1. Каждая из них включает подмодель пространственного обобщения температур с A=0,39 и осадков с A=0,62 [10] и подмодель водного стока с A=0,6 [11]. Согласно табл. 1 в среднем по гидрологическим сезонам адекватность A моделей (2) составит 0,60. По правилу сложения дисперсий погрешность расчета гидрохимического стока по уравнениям (2) должна быть заметно больше погрешностей расчета, как осадков, так и водного стока. В то же время полученный критерий A мало изменился по сравнению с его значениями для этих двух переменных модели. Отсюда можно сделать вывод, что уравнения (2а) и (2б) с достаточной степенью адекватности описывают гидрохимические процессы в речных бассейнах и дают малый собственный вклад в общую погрешность расчетов гидрохимического стока.

Из значений чувствительности моделей к факторам среды в табл. 1 видно, что основное влияние на стоки NO<sub>2</sub>, NO<sub>3</sub>, NH<sub>4</sub> оказывают водные стоки Q<sub>к</sub> с отдельных ландшафтов, то есть ландшафтная структура речных бассейнов. Несколько меньшую роль играет поперечный уклон. В табл. 1 обращает на себя внимание слабая зависимость гидрохимического стока от осадков. В соответствии с (2) эта зависимость характеризует, видимо, влияние уже содержащихся в осадках соединений NO<sub>2</sub>, NO<sub>3</sub>, NH<sub>4</sub> [14]. Влияние же осадков непосредственно на вынос растворимых минеральных соединений азота учитывается в (2) через ландшафтные водные стоки Q<sub>к</sub>, к которым модели чувствительны в наибольшей степени. Низкая чувствительность к площади пашни может объясняться незначительностью таких площадей в рассмотренных речных бассейнах Алтае-Саянской горной страны.

**Полный компонентный анализ дисперсии невязки моделей.** Чувствительность моделей стока NO<sub>2</sub>, NO<sub>3</sub>, NH<sub>4</sub> к вариациям факторов среды (табл. 1) позволяет найти все основные компоненты дисперсии невязки расчетов (S<sub>разн</sub>)<sup>2</sup>. Дисперсию со всеми ее компонентами мы будем далее **нормировать** на (S<sub>набл</sub>)<sup>2</sup> этих стоков по аналогии с (3). Модели стоков NO<sub>2</sub>, NO<sub>3</sub>, NH<sub>4</sub> включают подмодели (а) пространственного

обобщения и нормировки среднемесячных температур и месячных осадков, (б) водного стока и (в) непосредственно гидрохимического стока с уравнениями (2). Выходная переменная P у подмодели «а», как и Q<sub>к</sub>, Q у «б», являются входными факторами для «в». Вклады факторов в дисперсию невязки математических моделей складываются [7, 9]. С учетом этого сложения, нормировки факторов, чувствительности FS и адекватности A по (3), нормированная дисперсия невязки (S<sub>разн</sub>)<sup>2</sup> / (S<sub>набл</sub>)<sup>2</sup> = 2A<sup>2</sup> для полных моделей составит:

$$(S_{разн})^2 / (S_{набл})^2 \approx FS_P \times 2A_{a'}^2 + FS_Q \times 2A_{b'}^2 + 2A_{c'}^2 \approx 2A^2 \quad (5a)$$

где индексы «а», «б», «в» относятся к соответствующим подмоделям. В (5а) также учтено, что погрешность данных наблюдений за водными стоками Q и осадками P достаточно мала [7] и ее влиянием на значения A<sub>«б»</sub> и A<sub>«в»</sub> можно пренебречь.

Из (5а) легко найти адекватность A<sub>«в»</sub> для подмодели «в», состоящей из уравнений (2). Используя средние значения A<sub>«а»</sub>=0,62 [10], A<sub>«б»</sub>=0,6 [11] вместе с A=0,6, FS<sub>P</sub>=0,032, FS<sub>Q</sub>=0,33 из табл. 1, получаем:

$$0,032 \times 2(0,62)^2 + 0,33 \times 2(0,6)^2 + 2A_{c'}^2 = 2(0,6)^2$$

или A<sub>c'</sub> = 0,48. (5б)

Рассмотрим подмодели гидрохимического стока (2) с адекватностью A<sub>«в»</sub> подробнее. Для них входными факторами, помимо P, Q<sub>к</sub>, Q, являются поперечный уклон K речных бассейнов и площадь пашни S. Оба фактора вместе с погрешностью данных о концентрациях NO<sub>2</sub>, NO<sub>3</sub>, NH<sub>4</sub> и погрешностью самих уравнений (2) должны влиять на значение A<sub>«в»</sub>. Учтя вклады всех перечисленных характеристик в нормированную дисперсию невязки 2A<sub>c'</sub><sup>2</sup> подмоделей (2), можно записать в процентах:

$$D_K + D_S + D_M + D_C \approx 2A_{c'}^2 \times 100\% = 46\%, \quad (6)$$

где 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  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}_3$ ,  $\text{NH}_4$  в речном стоке.

**Расчет  $D_C$ .** Измерения концентраций веществ выполнялись государственным Управлением по гидрометеорологии и мониторингу окружающей среды на основе методик РД 52.24.381-95, РД 52.24.380-95 и РД 52.24.486-95. Погрешность  $E$  этих измерений зависела от значений концентраций и при доверительной вероятности 0,95 составила для  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}_3$ ,  $\text{NH}_4$  соответственно 53%, 25% и 29%, или  $E=(53+25+29)/3=36\%$  в среднем по соединениям. Поскольку на каждый сезон в большинстве случаев приходилось по одному измерению концентраций, то полученную погрешность  $E$  можно рассматривать и как их среднесезонную характеристику. 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, то есть 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 среднюю дисперсию  $(S_{\text{набл}})^2$  наблюдаемых гидрохимических стоков (см. среднее  $S_{\text{набл}}$  в табл. 1):

$$D_C \approx (E/2)^2 / (S_{\text{набл}})^2 \times 100\% = \\ = (36/2)^2 / (79)^2 \times 100\% \approx 5,2\%$$

**Расчет  $D_K$ .** При обсуждении выше уравнения (4) для чувствительности  $FS$  показано, что  $FS$  отражает влияние только естественных вариаций входного фактора и исключает случайные ошибки его наблюдений. Аналогичным образом в  $FS$  будут исключаться и вероятностные ошибки расчетных значений входного фактора. Например, в  $FS_K$ ,  $FS_S$  (табл. 1) будут исключаться ошибки, как картографических данных, так и самого расчета по ним поперечного уклона  $K$  и площади пашни  $S$ . Вклад  $D$  от таких ошибок в дисперсию невязки (6), очевидно, будет во столько раз меньше/больше значений  $FS$  настолько будет меньше/больше отношение дисперсии этих ошибок  $(S_{\text{ошиб}})^2$  к дисперсии естественных вариаций фактора  $(S_{\text{вар}})^2$  [7]:

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

Для определения в (6) вклада  $D_K$  необходимо знать  $S_{\text{ошиб}}$  и  $S_{\text{вар}}$  значений поперечного уклона  $K$ . Воспользуемся градацией крутизны склонов в горных регионах по Н.Л. Беручашвили [15], разработанной на большом эмпирическом материале. В каждом интервале этой градации, 0-4, 4-10, 10-20, 20-30, 30-45, >45°, находящиеся в его пределах уклоны поверхности не различаются между собой и относятся к одной категории. Иначе говоря, выделенные интервалы отражают объективную погрешность подобных оценок, возникающую из-за наличия на характеризуемой территории других уклонов, резко отличающихся от  $K$ . Например, это «пилообразный» профиль горного

рельефа, аппроксимируемый в рассматриваемых моделях прямой с заметно меньшим уклоном  $K$ . Средний для 34 речных бассейнов поперечный уклон  $K$  составил 14 промилле, то есть около 1°. Взяв отвечающий 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 процентах от среднего значения 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  $S_{\text{ошиб}} = E/2 \approx 50\%$  и  $(S_{\text{ошиб}})^2 \approx 2500$ .

Для расчета дисперсии  $(S_{\text{вар}})^2$  у естественных вариаций поперечного уклона  $K$  нам понадобится дисперсия  $D_{\text{разб}}$  у случайного разброса значений какого-либо фактора  $X$  от  $a$  до  $b$ . Формула для дисперсии случайной величины, равномерно распределенной на отрезке  $a \div b$ , имеет 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 отрезке  $a \div b$ ;  $\bar{X} = (a+b)/2$  – среднее значение величины. Поскольку нами используются относительные (нормированные) значения, то  $a$ ,  $b$  надо нормировать на среднее значение  $(a+b)/2$ . В результате получаем:

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

Минимальное значение уклонов  $K$  из рассчитанных для 34 речных бассейнов близко к 0, то есть можно положить  $a=0$ . Используя  $a=0$  в выражении для  $D_{\text{разб}}$ , рассчитываем  $(S_{\text{вар}})^2$ :

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

Наконец, по уравнению (7) находим вклад  $D_K$ , используя полученные значения  $(S_{\text{ошиб}})^2=2500$ ,  $(S_{\text{вар}})^2=3300$  и  $FS_K=8,4\%$  для поперечного уклона  $K$  (табл. 1):

$$D_K \approx 2500/3300 \times 8,4\% = 6,4\%.$$

**Расчет  $D_S$ .** По личному сообщению эксперта Д.В. Черных, 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 равна  $(S_{\text{вар}})^2 = 3300$ . Средняя чувствительность  $FS_S$  к площади пашни составляет 1,6% (табл.1). Учитывая уравнение (7) и приведенные оценки дисперсий, получаем значение  $D_S$ :

$$D_S \approx (S_{\text{ошиб}})^2 / (S_{\text{вар}})^2 \times FS_S = \\ = 25 / 3300 \times 1,6\% \approx 0\%$$

**Расчет  $D_M$ .** Теперь мы можем найти вклад  $D_M$ , подставляя в уравнение (6) найденные вклады  $D_K$ ,  $D_S$ ,  $D_C$  входных факторов уравнений (2):

$$D_M \approx 46\% - D_K - D_S - D_C = 46\% - 6,4\% - 0\% - 5,2\% \approx 34\%$$

Полученное значение  $D_M=34\%$  характеризует погрешность непосредственно разработанных моделей стоков  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}_3$ ,  $\text{NH}_4$  [6], нормированную на дисперсию  $(S_{\text{набл}})^2$  наблюдаемых гидрохимических стоков (табл. 1).  $D_M$  совпадает с аналогичным показателем для модели

водного стока [7] и для универсальных моделей весьма мало.

**Выводы:** в работе использован простой метод для оценки чувствительности математических моделей к естественным вариациям факторов среды. Он позволил охарактеризовать чувствительность разработанных моделей стока  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}_3$ ,  $\text{NH}_4$  и осуществить полный компонентный анализ дисперсии их невязки. Такой анализ дает более объективную и полную характеристику качества математических моделей по сравнению с традиционными критериями, например,  $\text{RSR} = S_{\text{разн}}/S_{\text{набл}}$  (отношение невязки  $S_{\text{разн}}$  к стандартному отклонению данных наблюдений  $S_{\text{набл}}$  – сравни уравнение (3)) или критерием Нэша–Сатклиффа  $\text{NSE} = 1 - \text{RSR}^2$  [13]. Это обусловлено тем, что в  $\text{RSR}$  и  $\text{NSE}$  невозможно отделить собственно погрешность модели от погрешностей наблюдений за ее входными факторами и выходной переменной.

По найденному вкладу  $D_M$  погрешности моделей гидрохимического стока в дисперсию их невязки легко рассчитать уже корректные значения  $\text{RSR}_M$  и  $\text{NSE}_M = 1 - (\text{RSR}_M)^2$ . В соответствии с (3) и (6),  $\text{RSR}_M$  связан с  $D_M$  соотношением  $\text{RSR}_M = \sqrt{D_M}$ . В нашем случае  $D_M = 34\%$ .

Отсюда получаем  $\text{RSR}_M = \sqrt{0,34} = 0,58$  и  $\text{NSE}_M = 1 - (\text{RSR}_M)^2 = 1 - 0,34 = 0,66$ . Согласно общепринятому рейтингу гидрологических моделей [13], их хорошему качеству соответствуют значения  $0,50 < \text{RSR} < 0,60$  и  $0,65 < \text{NSE} < 0,75$ . Таким образом, разработанные универсальные модели стока  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}_3$ ,  $\text{NH}_4$  имеют хорошее качество, что позволяет их практическое применение для рек Алтае-Саянской горной страны, а при их дополнительной идентификации (уточнении значений параметров) – для любых других горных территорий.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. *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 Research and Development Center, 2013. 19 p.
2. *Iooss, B.* A review on global sensitivity analysis methods / *B. Iooss, P. Lemaitre* // In: Uncertainty management in Simulation-Optimization of Complex Systems: Algorithms and Applications, C. Meloni and G. Dellino (Eds.). – Springer US, 2015. 264 p.
3. *Song, X.* Global sensitivity analysis in hydrological modeling: Review of concepts, methods, theoretical framework, and applications / *X. Song, J. Zhang, C. Zhan et al.* // Journal of Hydrology. 2015. Vol. 523. P. 739-757.
4. *Renard, B.* Understanding predictive uncertainty in hydrologic modeling: The challenge of identifying input and structural errors / *B. Renard, D. Kavetski, G. Kuczera et al.* // Water Resour. Res. 2010. 46, W05521, doi: 10.1029/2009WR008328.
5. *Beven, K.* Applied Uncertainty Analysis for Flood Risk Management / *K. Beven, J. Hall.* – Imperial College Press, London. 2013. 500 p.
6. *Кирста, Ю.Б.* Моделирование гидрохимического стока горных рек: 1. Сток минеральных соединений азота / *Ю.Б. Кирста, А.В. Пузанов* // Известия Самарского научного центра РАН. 2016. Т.18. №2. С.96-100.
7. *Кирста, Ю.Б.* Чувствительность моделей речного стока к факторам среды и ее количественная оценка // Известия Самарского научного центра РАН. 2015. Т. 17. №6. С. 97-103.
8. *Kirsta, Yu.B.* System-analytical modelling–Part I: General principles and theoretically best accuracies of ecological models. Soil-moisture exchange in agroecosystems // Ecol. Modelling. 2006. Vol. 191. P. 315–330.
9. *Кирста, Ю.Б.* Информационно-физический закон построения эволюционных систем. Системно-аналитическое моделирование экосистем / *Ю.Б. Кирста, Б.Ю. Кирста.* – Барнаул: Изд-во Алт. гос. ун-та, 2014. 283 с.
10. *Кирста, Ю.Б.* Пространственное обобщение климатических характеристик для горных территорий // Мир науки, культуры, образования. 2011. № 3(28). С. 330-337.
11. *Кирста, Ю.Б.* Имитационная математическая модель стока средних и малых рек для горных территорий / *Ю.Б. Кирста, А.В. Пузанов, О.В. Ловцкая* и др. // Известия Самарского научного центра РАН. 2012. Т.14. №1(9). С. 2334-2342.
12. *Moriasi, D.N.* Model evaluation guidelines for systematic quantification of accuracy in watershed simulation / *D.N. Moriasi, J.G. Arnold, M.W. Van Liew et al.* // Transactions of the ASABE. 2007. V. 50(3). P. 885-900.
13. *Koch, M.* SWAT-modeling of the impact of future climate change on the hydrology and the water resources in the upper blue Nile river basin, Ethiopia / *M. Koch, N. Cherie* // In: Proceedings of the 6-th International Conference on Water Resources and Environment Research, ICWRER 2013. Koblenz, Germany, June 3-7, 2013. P. 428-523.
14. *Савичев, О.Г.* Атмосферные выпадения в бассейне Средней Оби и их влияние на гидрохимический сток рек / *О.Г. Савичев, А.О. Иванов* // Известия РАН. Сер. геогр. 2010. №1. С. 63-70.
15. *Берущаивили, Н.Л.* Методы комплексных физико-географических исследований. Учеб. для вузов / *Н.Л. Берущаивили, В.К. Жучкова.* – М.: Изд-во Московского ун-та, 1997. 320 с.

## MODELING THE HYDROCHEMICAL DRAIN OF THE MOUNTAIN RIVERS.

### 2. ASSESSMENT THE QUALITY OF MODELS OF MINERAL NITROGEN DRAIN

© 2016 Yu.B. Kirsta

Institute of Water and Ecological Problems SB RAS

Quality of mathematical models of drain the various mineral compounds of nitrogen ( $\text{NO}_2$ -,  $\text{NO}_3$ -,  $\text{NH}_4$ +) on the example of 34 rivers of Altai-Sayan highland is estimated. Sensitivity of models to natural variations of factors of the environment is defined. The full component analysis of their discrepancy dispersion is carried out. The calculated Nash-Sutcliffe's coefficient of  $\text{NSE} = 0,66$  answers the high quality of models that it allows to count seasonal and long-term dynamics of hydrochemical drain for various rivers of Altai-Sayan highland, including at limited hydrometeorological and hydrochemical information on river basins.

Key words: *mathematical model, hydrochemical drain, nitrogen, quality, sensitivity, Altai, Sayan Mountains*