

СИСТЕМНИЙ АНАЛІЗ ТА ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ У НАУКАХ ПРО ПРИРОДУ ТА СУСПІЛЬСТВО



НАУКОВИЙ ЖУРНАЛ
Заснований у 2011 році

1/2011

Донецьк, 2011

Розробки і досягнення факультету комп'ютерних наук і технологій

2009 р.

Підручник «Чисельні методи в інформатиці» та лабораторний практикум «Чисельні методи» для вищих навчальних закладів



Державна премія України в галузі науки і техніки присуджена за комплекс підручників «Інформатика» колективу авторів, у тому числі співробітникам ДонНТУ – професору Фельдману Л.П. та доценту Дмитрієвій О.А.

2010 р.

«Цифрове місто» – нова концепція та програма розвитку сфери інформатизації на території м. Донецька та прискорення інтеграції у світовий інформаційний простір

2007-2008 рр. Система «ОМОС» – регіональна автоматизована система екологічного моніторингу Донецької області

2003-2006 рр. Програмно-апаратний комплекс екологічного моніторингу атмосферного повітря Донецько-Макіївського регіону «АКІАМ»

1999-2004 рр. Державна премія України в галузі науки і техніки присуджена за розробку нового покоління комплексу дальньої радіотехнічної розвідки стратегічного призначення «Кольчуга» колективу авторів, у тому числі професору ДонНТУ Башкову Є.О.

1997-1999 рр. Автоматизована система розкрою прокату на безперервно-заготівельному стані блюмінгу

1970-1979 рр. «МіГ-29» – імітатор візуальної обстановки для навчального тренажера управління посадкою літака

1970-1975 рр. Система тестування типових елементів заміни (ТЕЗ) та система зондового пошуку несправностей цифрових ТЕЗ пересувного комплексу діагностики ЗРС «С-300»

Міністерство освіти і науки України
ДВНЗ «Донецький національний технічний університет»

**СИСТЕМНИЙ АНАЛІЗ
ТА ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ
У НАУКАХ ПРО ПРИРОДУ ТА СУСПІЛЬСТВО**

Присвячено 90-річчю

Донецького національного технічного університету

НАУКОВИЙ ЖУРНАЛ
Заснований у 2011 році

1/2011

Донецьк, 2011

УДК 001.5:004.9

Системний аналіз та інформаційні технології у науках про природу та суспільство (САІТ-2011). Випуск 1 – Донецьк: ДонНТУ, – 2011. – 214 стор.

Цей збірник є першим випуском наукових праць факультету комп'ютерних наук і технологій, який присвячено міждисциплінарним дослідженням у науках про природу та суспільство. Публікації охоплюють широке коло проблем – від фундаментальних питань системного аналізу до прикладних розробок у галузі інформаційних технологій. Матеріали збірки призначені для наукових співробітників, викладачів, інженерно-технічних працівників, аспірантів та студентів, наукові інтереси яких зосереджені в галузях системного аналізу, міждисциплінарних досліджень та інформаційних технологій.

Системный анализ и информационные технологии в науках о природе и обществе (САИТ-2011). Випуск 1 – Донецьк: ДонНТУ, – 2011. – 214 с.

System analysis and information technology in environmental and social sciences (2011).
Donetsk National Technical University. Volume 1. Donetsk, 2011. – 214 p.

РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ

чл.-кор. НАНУ Мінаєв О.А. (головний редактор), д.т.н., проф. Башков Є.О. (перший заступник головного редактора), д.т.н., проф. Аверін Г.В. (заступник головного редактора), к.т.н., доц. Анопрієнко О.Я., к.т.н., доц. Звягінцева Г.В. (відп. секретар випуску), к.т.н., доц. Беловодський В.М., к.т.н., доц. Губенко Н.Є., д.т.н., проф. Каргін А.О., д.т.н., проф. Недопьокін Ф.В., к.т.н., доц. Костюкова Н.С., д.т.н., проф. Святний В.А., д.т.н., проф. Фельдман Л.П., к.т.н., доц. Григор'єв О.В.

Адреса редакційної колегії: 83001, м. Донецьк, вул. Артема, 58, ДонНТУ
Тел. (062)301-08-51 E-mail: zviagintseva@cs.dgtu.donetsk.ua, averin@cs.dgtu.donetsk.ua
<http://publ.donntu.edu.ua>

Публікується згідно з рішенням Вченої ради Донецького національного технічного університету від 18.06.2010 року, протокол № 6

ЗМІСТ

Фундаментальні проблеми загальної теорії систем та системного аналізу

Аверин Г.В.

Об основаниях системодинамики 6

Системний аналіз та моделювання

Беловодский В.Н., Сухоруков М.Ю.

О новых решениях системы Матье-Дюффинга 54

Звягинцева А.В., Аверин Г.В.

Построение уравнений состояний сложных токсикологических систем 57

Павлий В.А.

Построение информационной модели расчета распространения примеси в приземном слое атмосферы над территориально-распределенными объектами 71

Звягинцева А.В., Аверин Е.Г.

Донецкая область в мировых координатах развития человеческого потенциала 82

Родригес Залепинос Р.А.

Данные и методы интеллектуального анализа данных для исследования окружающей природной среды 94

Аверин Г.В., Звягинцева А.В., Аверин Е.Г.

Методы системной динамики при анализе социально-экономического развития стран и регионов 108

Москалец В.М.

Научные аспекты анализа риска в промышленной безопасности 123

Романчук С.М.

Мониторинг и анализ данных в процессе управления водоснабжением города Донецка 133

Голубева Л.Г.

Обоснование методов моделирования и прогноза динамики качества воды рек регионов с высокой антропогенной нагрузкой 144

Дмитриева О.А., Куприй Я.А.

Генерация численных методов решения дифференциальных уравнений высоких порядков 152

Иващенко А.Б., Беловодский В.Н.

Синтез аппроксимирующей функции при неизвестной структуре модели 157

Інформаційні технології та автоматизовані системи

Ладигенський Ю.В., Серета А.О.

Алгоритмы поиска фрагментов изображения для отслеживания объектов в видеопотоке на параллельной архитектуре CUDA 168

<i>Бубличенко А.В., Беловодский В.Н.</i> Фрактальные алгоритмы сжатия, некоторый опыт их сравнения	173
<i>Бабков В.С., Семислав С.Я.</i> Средства компьютерной обработки показателей состояния пациента	180
<i>Губенко Н.Є., Хімка С.С.</i> Розробка імітаційної моделі захисту інформації для автоматизованої системи «Екологічний паспорт регіонів України»	185
<i>Беловодский В.Н., Сухоруков М.Ю.</i> AnalySys – пакет программ численного анализа динамических систем	189
<i>Харитонов А.Ю., Колесниченко Н.В.</i> Анализ энергоэффективности зданий на основе автоматизированной системы мониторинга энергопотребления муниципальных объектов	194
До 90-річчя Донецького національного технічного університету	
<i>Звягинцева А.В., Хоруженко А.С.</i> Кафедра компьютерных систем мониторинга: люди, факты, события	204

Розділ 1

Фундаментальні проблеми загальної теорії систем та системного аналізу

Об основаниях системодинамики

Аверин Г.В.

Донецкий национальный технический университет
 averin@cs.dgtu.donetsk.ua

Abstract

Averin G. "The grounds of systemdynamics" The peculiarities of method and mathematic apparatus of thermodynamics as special methodology of modeling physical nature processes were researched. On general conclusion of empiric appropriateness of toxicology the possibility of use this methodology to non physical nature processes was shown. A new direction of process modeling – system dynamics – is developing on the general theory positions. The beginning is formulating and principals of building mathematic apparatus system dynamics are considered.

Keywords: systemdynamics, thermodynamics, methodology of modeling processes.

Введение

Еще в 1959 году академик П.Л. Капица писал [1, стр. 420]: «Почему даже в наше время, которое многими называется временем научно-технической революции, общественные науки так слабо развиваются?... Ответ ясен: в науке об обществе нет объективного подхода. До тех пор, пока не удастся его создать, общественные науки будут развиваться с большим трудом. Этим, мне кажется, объясняется тот разительный контраст, который сейчас существует в масштабах развития естественных и социальных наук». Прошло пятьдесят лет. За это время мы пережили бурное развитие вычислительной техники, наблюдаем не менее бурное становление телекоммуникационных систем и информационных технологий, есть революционные открытия в физике, биологии, генетике, значительно продвинулись в развитии экономические науки, где появились целые новые научные направления, например, экономфизика, синергетическая экономика. Однако, до установления единых законов развития общества, о которых в свое время писал П.Л. Капица, еще далеко.

В современном понимании объективный подход предполагает использование методов, которые не зависят от воли и желаний субъекта, обеспечивают формализацию научного познания в области предмета исследования и применяют адекватные модели для описания объективных закономерностей реальности, а также дают инструменты для опытной проверки научных фактов и последующей их апробации на практике.

В целом ряде научных областей много внимания уделяется созданию универсальных методов моделирования. На повестке дня разработка общей методологии моделирования процессов различной природы, т.е. создание единой системы теорий разных областей знаний. Еще не ясно, где будет образовано необходимое качество, которое обеспечит прорыв в решении этой важной научной задачи.

Сейчас сложились три основных направления в развитии методологии моделирования. Здесь необходимо отметить, что изначально данная универсальная методология должна быть применима как к процессам физической, так и нефизической природы.

Сегодня в физике актуальной задачей является построение новой картины мира – общей теории, способной охватить многие виды взаимодействий. Это поле исследований квантовой и ядерной физики, астрофизики и близких наук. Другая важная область исследований – представление мира самоорганизующимся как в целом, так и на многих уровнях своего существования, и здесь «правят балом» синергетика, теория самоорганизации и физика неравновесных процессов. Третье направление – это использование естественнонаучных методов в описании живой и неживой природы, поиск общей теории, применимой во многих областях знаний – биологии, экологии, экономике, развитию человеческого потенциала, научном предвидении будущего и т.д. Именно это направление, связанное с системным анализом и общей теорией систем, является, наверное, наиболее перспективным путем к новой парадигме моделирования. Вполне очевидно, что в рамках одной научной области, охватывающей только физические или, например, только биологические науки, создание универсальной теории невозможно.

«Несомненно, что общая теория систем открывает перед нами новые горизонты, однако ее связь с эмпирическими данными пока еще остается весьма скудной» – отмечалось в работе Берталанди [2]. Прошло сорок лет с момента выхода в свет этой статьи, а качественного прорыва в формировании универсальной методологии общей теории систем не произошло, несмотря на надежды, что синтез знаний различных научных дисциплин может открыть широкие возможности в моделировании систем. Последнее время стало

очевидно, что отрыв от эмпирической базы стал усиливаться. Это привело к тому, что в общей теории систем стали развиваться философские направления и вакуум отсутствия базовой методологии, ориентированной на обобщение эмпирических фактов из различных областей знаний, стал заполняться общими рассуждениями. Основная причина этого связана с тем, что, пытаясь бессистемно охватить необъятное, общей теории систем становится все труднее устанавливать логические связи между процессами и объектами различной природы. Развитие эмпирической базы научных дисциплин формируется существенно более медленными темпами, чем устремления исследователей в построении теоретических моделей, причем не всегда подтвержденных практикой. Разрыв между теорией и экспериментом является симптомом серьезных нарушений нормального развития науки. Очевидно, что один из путей выхода из тупика – это создание крупных информационных баз данных по научным направлениям, что позволяет применить современные методы поиска закономерностей путем использования информационных технологий («Data mining/ интеллектуальный анализ данных»). Во многих областях знаний сегодня начинает развиваться это направление. Другой путь, который можно считать классическим – это поиск перспективных направлений в развитии методологии общей теории систем. В этом плане следует вспомнить, что все новое – это хорошо забытое старое, и, что старый друг лучше новых двух. Афоризм Я.И. Френкеля: «Не надо искать старое в новом, а надо находить новое в старом», как нельзя лучше характеризует суть данной статьи.

Здесь хотелось бы сказать, что в науке есть теория, претендующая на универсальность. Для этого приведем одно высказывание А.Эйнштейна: «Теория производит тем большее впечатление, чем проще её предпосылки, чем разнообразнее явления, между которыми она устанавливает связи, чем обширнее область её применения. Отсюда глубокое впечатление, которое произвела на меня термодинамика. Это единственная физическая теория универсального содержания, относительно которой я убежден, что в пределах применимости ее основных понятий она никогда не будет опровергнута». Однако, следует признать, что в своем современном виде, несмотря на основательность, теория термодинамики не является полной, многие ее аспекты противоречивы и запутаны, а ряд положений не имеет логической ясности. Тем не менее, термодинамика – это универсальная теория с большим потенциалом для развития.

Использование естественнонаучных методов в науках с абсолютно разными

объектами и предметами исследования является актуальной задачей общей теории систем. В этом плане хотелось бы в качестве примера показать возможности использования термодинамического метода в другой области знаний и, в первую очередь, в науке, в основе которой не лежит физическая теория. Если две абсолютно разные области знаний могут иметь общие теоретические подходы, то реализация этих подходов возможна и в третьей области, а дальше недалеко уже и до обобщений. Применение термодинамического метода лучше всего демонстрировать на примере, и для этого в данной статье выбрана достаточно далекая от термодинамики область – токсикология.

Почему изначально в данной статье предметом изучения термодинамики выбраны факты токсикологии, а не, например, фактические данные экологии, социологии, экономики или информатики? Наверное, это было бы не принципиально, но есть веские причины – доступность и достаточность опытных данных, позволяющих получать обобщенные закономерности на феноменологическом уровне, и наглядность первого применения аппарата термодинамики в качественно другой области научных исследований. Кроме этого есть еще несколько важных причин. Во-первых, хотя термодинамика и токсикология – это очень далекие друг от друга науки, но они имеют одно общее – громадный экспериментальный материал в области анализа свойств веществ, накопленный в процессе проведения именно активных, а не пассивных экспериментов. В этих науках эмпирическая база формируется непосредственно исследователями, а не пассивно отслеживается во времени. Во-вторых, эксперимент в токсикологии – это работа с живыми объектами и в основу этой науки положена нефизическая теория, в исследованиях используется биология, химия и медицина, хотя присутствуют элементы и математики, и физики. В-третьих, в токсикологии основной параметр состояния любой системы – это время. Эта наука оперирует с категориями “жизнь” и “смерть”, что пока невозможно в термодинамике.

И последнее, наиболее важное: в чем краеугольное отличие токсикологического эксперимента от термодинамического? Токсикология – это одна из тех немногих наук, где в опыте возможна непосредственная оценка вероятностей. И, в отличие от термодинамики, это делается экспериментально, а не путем теоретического применения статистических методов. К сожалению, в течение десятилетий за это знание заплачено миллионами жизней животных при проведении токсикологических экспериментов. В этих экспериментах живые

объекты, в основном белые мыши и крысы, выполняли функцию “измерительных приборов” (своего рода “термометров”), т.к. других достоверных способов оценки опасностей человечество пока не знает.

Именно указанные выше две последние особенности токсикологии (как бы странно это не звучало) в будущем могут методически «обогащать» термодинамику и дать импульс развитию общей теории систем на основе синтеза методологий.

Истоки подобного синтеза следует искать в теории термодинамики. Однако сегодня в ее методологии есть две нерешенные методологические проблемы. С одной стороны, классическая термодинамика уникальна: это единственный раздел физики, в основах теории которого не содержится время. Величина времени вводится в термодинамику противоречивым образом, через соотношение Гиббса. А без тщательного анализа парадигмы времени невозможно дальнейшее развитие термодинамики [3]. Сегодня уже ясно, что этот вопрос зашел в тупик, и основные причины проблемы связаны с отсутствием опытных данных в сфере изучения времени как термодинамической категории, а также методических идей в этой области. С другой стороны, статистическая механика и термодинамика – науки в чем-то родственные. Мостом между ними является соотношение, связывающее энтропию и термодинамическую вероятность системы. Законность указанной связи была доказана Н-теоремой Больцмана для идеального газа, где вероятности состояний для частей системы принимались независимыми, что экспериментально никак не было обосновано. Границы применимости этой гипотезы для других термодинамических систем также не были установлены. Никогда в термодинамике не ставился вопрос эмпирического определения вероятности состояния систем в том виде, как это делается в токсикологии – на основе оценки вероятности возникновения характерных событий, свойственных системе. На протяжении почти сотни лет вероятности состояний токсикологических систем и их связи с параметрами этих систем определялись на основе экспериментов, и этот опыт может быть очень ценным для методологии. В области развития понятия состояния системы, оценки его вероятности по характерным событиям и связи состояний с качествами и свойствами могут лежать ответы на вопросы: в чем суть отличия живого от неживого; на каком уровне организации живой системы возможно возникновение сознания; реально ли создание искусственного интеллекта? В долгосрочной перспективе именно на эти вопросы и должна

дать ответы общая теория систем.

Таким образом, развитие термодинамического метода или аналогичных ему подходов в других областях знаний является актуальной задачей при изучении сложных систем. Однако метод термодинамики не должен буквально переноситься в другую область исследований, идейно должна использоваться только логическая схема построения моделей, принятая в термодинамике. Концептуально пока не ясно, термодинамика – это явно физическая теория, или нечто большее – а именно, применение некой общей методологии моделирования к объектам физической природы. Это станет ясно только по мере устранения указанных выше методологических проблем термодинамики, накопления эмпирических фактов и развития универсальных методов моделирования в других областях знаний.

Построение любой теории основано на систематизации опытных данных, установлении базовых эмпирических закономерностей, а также разработке методологии, использующей математический аппарат. Математический аппарат термодинамики представляется достаточно простым по сравнению, например, с математическим аппаратом некоторых разделов теоретической физики. Основополагающая теория не должна быть слишком сложной. Поэтому, если математический аппарат термодинамики будет успешно применен в науках с абсолютно разными объектами и предметами исследования, то это даст возможность в будущем развить общую теорию систем до уровня «теории универсального содержания». Название такой теории возникает само собой и уже широко встречается в литературе – это *системная динамика или системодинамика*.

Логическая схема моделирования и метод термодинамики

В области термодинамики сегодня написаны тысячи книг. Считается, что это наука о закономерностях превращения энергии. Применение термодинамики необъятно – она фундамент множества прикладных наук. Термодинамические методы и идеи лежат в основе физики, глубоко проникают в химию и биологию. Последнее время появилось много работ, где термодинамические идеи формально переносятся в область социологии, экономики, экологии и т.д. Обоснование этих подходов встречает серьезные идейные и логические трудности. Во многих нефизических науках объем экспериментальных данных не дает возможности провести обобщения на феноменологическом уровне, а построение математических теорий «буксует» еще на этапе

выработки общих терминов и понятий и формулировки закономерностей. Однако процесс конвергенции наук уже идет и это требует от термодинамики непрерывного развития, т.к. термодинамический метод является одним из основных универсальных методов построения теорий.

Во многих источниках отмечается, что название «термодинамика» не совсем точно передает цель и предмет исследования этой науки. Классическая термодинамика изучает свойства равновесных физических систем. В основу термодинамики положены три основных закона (*начала термодинамики*), установленные опытным и практическим путем. Первый закон термодинамики представляет собой качественное и количественное выражение закона сохранения энергии. Хотя закон сохранения энергии применим только к физическим формам движения и не применим к другим высшим формам движения материи, считается, что этот закон имеет всеобщий естественно-научный характер. Второй закон устанавливает качественную сторону (направленность) процессов, происходящих в физических системах, и отражает весь опыт человечества, связанный с изучением различных явлений и процессов в природе. Третье начало термодинамики определяет, что при температурах, стремящихся к абсолютному нулю, равновесные изотермические процессы происходят без изменения энтропии. Используя эти законы, уравнения состояния и другие эмпирические соотношения можно получить все основные выводы термодинамики [4]. В отличие от многих областей физики и химии, термодинамика не связана с представлением о структуре вещества. Однако она построена так, что применение термодинамического метода в виде общей методологии позволяет учесть все феноменологические закономерности и макроскопические свойства вещества.

На фоне значительного количества опубликованных книг, в термодинамике мало работ, посвященных изучению ее методологии и основных теоретических основ. Процесс формирования основ термодинамики, ее первоначального становления, как особой системы научных знаний, находит полное отражение в работах Карно, Клаузиуса и Томсона. Своим последующим стремительным движением вперед термодинамика обязана многим другим выдающимся ученым, и в первую очередь Гиббсу [5]. Превратившись в систему научных знаний, термодинамика стала фундаментальной, но в тоже время в чем-то и консервативной наукой. В ее истории имеются и впечатляющие достижения и до сих пор до конца не проясненные парадоксы [6]. Именно основы термодинамики часто становятся

предметом глубоких обсуждений, т.к. у многих ученых возникают вопросы, связанные с неполной логической ясностью изложения некоторых основных положений ее теории. Особенно это касается положений неравновесной термодинамики [3, 5 – 7]. В свое время Фальк отмечал, что продуктивное исследование логической структуры термодинамики не в том, чтобы привести обычное построение теории в более строгую форму, а в отыскании новых путей.

В этом плане одним из наиболее важных направлений считается задача аксиоматизации учения об энтропии, которая не потеряла актуальности и в наше время [8]. Здесь следует отметить основополагающий труд в этой области [9] и последующие работы Борна и Ланде, которые существенно содействовали распространению новых идей в учении об энтропии [10], а также известную работу [11]. В свете данной статьи интересной является также работа [5], посвященная изучению логической структуры термодинамики и обсуждению исходных идей и основных принципов. Однако, следует признать, что сегодня в термодинамике отсутствует полная, замкнутая и логически ясная система аксиоматизации учения об энтропии.

Другая, пока не разрешимая проблема, формулируется как *время и классическая термодинамика*. Данной теме уделялось и уделяется много внимания, но из-за отсутствия продуктивных идей решения проблемы, эту брешь в теоретическом фундаменте термодинамики пока ликвидировать не удалось. Дуализм других серьезных проблем термодинамической науки, которые можно сформулировать в виде: «равновесность – неравновесность», «энтропия – время», «обратимость – необратимость», «классическая вероятность – термодинамическая вероятность» и т.д., определяет необратимый процесс генезиса термодинамики [3–7, 12, 13]. До решения этих проблем нельзя говорить о существовании единой непротиворечивой парадигмы термодинамики.

Если рассматривать возможность применения методологии термодинамики к процессам нефизической природы, то важным является максимальная формализация подходов и аппарата термодинамики, а также обобщение идей, формирующих систему основных понятий этой науки. В этом плане попытаемся выстроить структурно-логическую схему моделирования в термодинамике, выделяя наиболее важные этапы и элементы и по возможности отвлекаясь от физической сути процессов, при этом вполне понимая нетривиальность данной задачи.

На первом этапе в термодинамике выделяется смысловое содержание основных

элементов понятийно-категорийного аппарата, подлежащих в дальнейшем формализации в процессе построения моделей. Наиболее важные определения, имеющие значение в рамках данной статьи, приведены ниже.

Так как термодинамика изучает макросистемы – физические тела конечных размеров, то базовым понятием является определение термодинамической системы.

Термодинамическая система – это совокупность макроскопических тел и полей физической природы, которые могут представлять собой целостный объект и обмениваться энергией и веществом, как между собой, так и с внешней средой.

В термодинамическую систему обычно не включается внешняя среда, которая лежит за пределами границ рассматриваемой системы.

Состояние системы – это мгновенная оценка совокупности значений свойств, характерных для данной системы и называемых термодинамическими параметрами. Параметром может быть любое свойство, если оно количественно определено и рассматривается как независимая переменная, определяющая вместе с другими переменными состояние системы.

Состояния термодинамических систем могут быть *равновесными* и *неравновесными*. Если состояние системы не изменяется во времени, то считают, что система находится в равновесном состоянии. В термодинамике имеются явные отличия между понятиями равновесия и стационарности [5], однако останавливаться подробно на этом не будем, отсылая за пояснениями к указанной книге.

Переходы из одного состояния в другое определяют поведение системы и именуются *процессами*. Если хотя бы один из параметров состояния изменяется, то меняется в целом и состояние системы. Переход из одного равновесного состояния в другое является *неравновесным* процессом. Определенный период времени, за который осуществляется данный переход, называется *временем релаксации*. Условно считают, что если время релаксации бесконечно большое и в процессе перехода система проходит последовательный ряд равновесных состояний, то в системе протекает *равновесный* процесс. Введение понятия равновесного процесса является определенной умышленной «идеализацией» действительности, чтобы изначально отойти от сложности неравновесных процессов и не оперировать полями термодинамических величин, имеющими пространственное и временное распределение. Следует отметить, что, скорее всего, именно здесь заложен корень проблем, связанный с последующим противоречивым введением времени в

неравновесную термодинамику. С использованием понятия равновесного процесса на этапе становления термодинамики была исключена необходимость теоретического и экспериментального изучения особенностей протекания термодинамических процессов во времени. А многие экспериментальные положения классической термодинамики получены при проведении опытов с явно выраженной нестационарностью процессов [14].

Далее, термодинамические процессы могут быть *обратимыми* и *необратимыми*. Процессы, в результате совершения которых в прямом и обратном направлениях, термодинамическая система возвращается в исходное состояние называются обратимыми. Для необратимых процессов это утверждение неверно. Все естественные самопроизвольные процессы необратимы, обратимых процессов в природе не существует. С понятием обратимости в термодинамике связан ряд парадоксов, для знакомства с которыми отсылаем к работе [3].

Термодинамические величины бывают двух видов. Если изменение величины в каком-либо процессе не зависит от характера процесса и однозначно определяется начальным и конечным состоянием системы, то говорят, что данная величина является функцией состояния (функцией точки). Дифференциал любой функции состояния является полным дифференциалом. Если изменение термодинамической величины зависит от пути, по которому осуществляется термодинамический процесс, то говорят, что величина является функцией процесса (функцией линии). Дифференциал такой функции не является полным дифференциалом.

Наиболее важным в термодинамике является понятие *энергии*. В большинстве источников это понятие вводится параллельно с трактовкой первого закона термодинамики. Типичные определения сводятся к следующим формулировкам:

- теплота и работа являются формами передачи энергии;
- взаимодействие окружающей среды и термодинамической системы осуществляется путем подвода (отвода) к последней энергии в форме теплоты или работы;
- внутренняя энергия системы является суммой кинетической и потенциальной энергий микрочастиц (атомов и молекул);
- энергия является однозначной функцией состояния системы;
- любое взаимодействие имеет своим необходимым следствием изменение внутренней энергии системы на величину, равную количеству воздействия.

Благодаря историческим опытам Джоуля была установлена эквивалентность тепла и работы. Этот эмпирический факт стал первым шагом к формулировке закона сохранения энергии. Однако из большинства определений видно, что общее понятие энергии в термодинамике вводится через понятие видов энергии или ее форм. Общефилософское определение понятия энергии имеет вид: *энергия* – это общая мера различных форм материального движения. Исторически концепция энергетического взаимодействия сформулирована для физических систем и физических форм движения материи. Энергетический принцип является незыблемой основой научного мировоззрения в физике. Однако вопрос применимости этой концепции к нефизическим системам сегодня пока остается открытым. То, что должна существовать универсальная мера движения материи в любых системах, – не подвергается сомнению, но сводится ли эта мера только к формам обмена энергией – крайне непростой вопрос, также как и вопрос о всеобщности этой меры для различных форм движения материи.

Достаточно важным для дальнейших сопоставлений и обобщений является понятие фазы в термодинамике. Термодинамическая система называется *гетерогенной*, если она состоит из качественно различных по своим свойствам частей, разграниченных поверхностями раздела. При переходе через поверхность раздела хотя бы одно термодинамическое свойство изменяется скачкообразно: лед – вода, вода – пар и т.д. Система, в которой нет поверхностей раздела, называется *гомогенной*. Гомогенные системы однородны, но иногда бывают и неоднородными, что обусловлено непрерывным изменением свойств в пространстве. Части гетерогенной системы, разделенные поверхностями раздела, называются *фазами*. То есть гетерогенная система может состоять из гомогенных частей. Фазам присущи существенные, чаще всего качественные различия. Наиболее сильные и отчетливо выраженные фазовые различия характерны для агрегатных состояний вещества – твердого, жидкого и газообразного. Практически все вещества могут находиться в этих агрегатных состояниях. Таким образом, понятие фазы тесно связано с качественными признаками состояния систем. Данные состояния обладают существенными отличиями и могут меняться под действием внешних условий.

Уравнения, которые связывают между собой термодинамические параметры системы z_k в равновесном состоянии, называются *уравнениями состояния*. Данные уравнения записываются в виде:

$$F(z_1, z_2, \dots, z_n) = 0. \quad (1)$$

Уравнения состояния имеют эмпирический характер. Законы Чарльза и Гей-Люссака, объединенные с гипотезой Авогадро, дали известный газовый закон $p \cdot V = m \cdot R \cdot T$, который явился, возможно, первой важной зависимостью для свойств веществ в термодинамике. Отклонения от закона идеального газа, часто очень малые, были связаны с природой молекул. Уравнение Ван-дер-Ваальса, вириальное уравнение, а также другие уравнения состояния, которые количественно выражают эти отклонения, сильно повлияли на прогресс в развитии термодинамики [15]. Уравнения состояния обобщают опытные данные и являются в термодинамике связывающим звеном между теорией и экспериментом, причем эта связь осуществляется на уровне использования эмпирических закономерностей.

Базовым принципом в термодинамике является принятие гипотезы о существовании *энтропии*. Удивительно, но единого общепринятого определения энтропии в термодинамике нет. Можно привести более десятка известных определений, которые даны классиками термодинамики и различными авторами. Гипотеза о существовании энтропии в термодинамике – неоспоримый факт, тесно связанный со вторым началом, это один из «китов», на котором стоит «здание» этой науки. Объем опытных данных, которыми располагает термодинамика, оказывается достаточным для того, чтобы при их анализе на основе закона сохранения энергии сформировалась отчетливо выраженная гипотеза существования энтропии. Однако при современном уровне знаний принцип существования энтропии рассматривается как отдаленное логическое следствие закона сохранения энергии. Сегодня в термодинамике существование энтропии не постулируется в качестве самостоятельного принципа. Здесь согласимся с утверждением автора работы [5, с. 371], что такое решение проблемы в общепринятой системе изложения основ термодинамики ни в какой мере не подготовлено и не оправдано. Эта система даже не располагает понятиями и терминами, с помощью которых можно было бы кратко и ясно сформулировать самостоятельный принцип существования энтропии. Именно этот факт множественности определений энтропии, скорее всего, и приводит к вопросам, связанным с неполной ясностью в этой области.

Возможность существования равновесных состояний характеризуется *термодинамической вероятностью*. Здесь тоже не просто дать однозначное определение, так как оно тесно связано с методами оценки и подсчета этой величины. Причем, при

использовании понятия термодинамической вероятности нет явно выраженной связи с наблюдаемыми событиями, как это принято в теории вероятности. Данную вероятность в термодинамике определяют на основе использования теоретических методов статистической физики и «увязывают» с энтропией системы (уравнение Больцмана). Необходимость теоретического определения вероятностей состояний систем в равновесных условиях вызвана отсутствием возможности опытной оценки этой величины. В экспериментальной термодинамике ее можно косвенно оценить вычислением энтропии по температурному ходу теплоемкости на основе теплового закона Нернста. Однако, справедливость соотношения Больцмана в виде уравнения (8) для других термодинамических систем, кроме идеального газа, остается открытым вопросом, который без привлечения эмпирических данных не может быть решенным.

В термодинамике имеется также значительное количество других определений, однако они выходят за область исследований данной статьи и рассматриваться не будут, за исключением некоторых понятий, о которых будет сказано ниже.

На следующем этапе в термодинамике вводится ряд важных эмпирических и теоретических соотношений и закономерностей, имеющих существенный характер для ее методологии и последующей разработки математического аппарата.

На первое место в этом плане выходит закон сохранения и превращения энергии (первое начало термодинамики). Это универсальный закон, являющийся одним из краеугольных камней всего естествознания. Общий термодинамический метод, лежащий в основе исследования взаимодействий системы с окружающей средой [5], предполагает, что каждому взаимодействию особого рода приводится в соответствие некоторая физическая величина – координата состояния z_k . Общему покою системы (равновесию) отвечает постоянство координат состояния. Соответствующей координате отвечает одна степень свободы системы. Каждому воздействию данного рода и, следовательно, каждой координате, устанавливают в соответствие также некоторую физическую величину – потенциал взаимодействия P_k . Равенство потенциалов внешней среды и системы является необходимым и достаточным условием для равновесия. В условиях неравновесного взаимодействия потенциалы внешней среды и системы имеют различные значения. Таким образом, изменение координаты при воздействии возможно только

при наличии разности потенциалов. В каждом термодинамическом состоянии система обладает строго определенными свойствами и этому состоянию отвечает совокупность вполне определенных значений потенциалов и координат, которые являются, в свою очередь, также параметрами состояния системы. Среди множества всех процессов не все переходы из одного состояния системы в другое возможны.

Соответствующие координаты и потенциалы в виде уравнения $dE_k = P_k dz_k$ определяют вид переносимой энергии и входят в закон сохранения и превращения энергии в качестве параметров. Принятое в термодинамике определение энергии носит всеобщий характер. Различают следующие виды энергии: механическая, тепловая, внутренняя, электромагнитная, гравитационная, химическая, ядерная и т.д.

Основное уравнение для определения изменения внутренней энергии (U) системы в качестве фундаментального закона через потенциалы и координаты представляется в следующем виде:

$$dU = \sum_{k=1}^n P_k dz_k . \quad (2)$$

Понятие внутренней энергии в термодинамике имеет глубокий физический и математический смысл. Следствием этого является факт того, что существует однозначная функция координат состояния, полный дифференциал которой равен сумме всех элементарных количеств воздействий разного рода. Если внутренняя энергия известна как функция координат, т.е. определен вид зависимости $U = U(z_1, z_2, \dots, z_n)$, то потенциалы могут быть выражены через уравнения состояния:

$$P_k = P_k(z_1, z_2, \dots, z_n) = \left(\frac{\partial U}{\partial z_k} \right)_{z_i} . \quad (3)$$

При выводе термодинамических уравнений в качестве координат используются объем, масса, энтропия, а в качестве потенциалов – давление, химический потенциал, температура. Координаты обычно являются аддитивными величинами. Потенциалы в такой трактовке, в отличие от обычных термодинамических потенциалов (энергии, энтальпии, свободной энергии), не являются аддитивными величинами. В классическом виде уравнение сохранения и превращения энергии в термодинамике записывается в дифференциальной форме:

$$\delta Q = dU + p \cdot dV + \sum_{k=1}^n P_k dz_k , \quad (4)$$

где δQ – элементарное изменение количества тепла, поступившего в процессе изменения состояния системы; dU – полный дифференциал энергии системы; $\delta A = p \cdot dV$ – элементарная работа, совершенная в процессе изменения состояния системы; $dE_k = P_k dz_k$ – составляющие других определенных видов переносимой энергии.

Часто первое начало в термодинамике приводят в виде различных формулировок. Среди них можно выделить следующие варианты изложения первого начала:

- энергия не исчезает и не возникает вновь, она лишь переходит из одного вида в другой в различных физических и химических процессах;
- осуществление вечного двигателя первого рода невозможно;
- энергия является однозначной функцией состояния и не зависит от пути перехода системы из одного состояния в другое;
- бесконечно малое изменение внутренней энергии является полным дифференциалом.

В современном представлении, несмотря на простоту, глубокое содержание первого закона термодинамики нелегко сформулировать ясно и кратко [16]. Это основная причина того, что различные авторы по-разному формулируют первое начало. Более того, если математическая формулировка закона в классическом виде, связывающая теплоту, энергию и работу ($dQ = dU + dA$), является непосредственным обобщением опытных данных по тепловым взаимодействиям, то в принятом современном виде (4) – это уже результат логического обобщения всех имеющихся в физике экспериментальных данных и накопленного практического опыта.

В свое время Э. Нётер (теорема Нётер) показал существование связи между свойствами симметрии физической системы и законами сохранения, когда независимости свойств системы от выбора начала отсчета времени соответствует закон сохранения энергии. Физик А. Пуанкаре указывал на то, что выбор функции, которую называют энергией, оказывается условным и, единственная возможная формулировка первого закона для физических систем формулируется в виде «существует нечто остающееся постоянным». Данная формулировка охватывает как закон сохранения энергии, так и закон сохранения массы. Это «нечто» представляет собой математическую функцию, физический смысл которой интуитивно до конца не ясен [12, 17].

В свете использования метода термодинамики в нефизических науках, эта

формулировка закона сохранения выглядит наиболее общей.

Следующим фундаментальным законом термодинамики является ее второе начало. Содержание второго начала также невозможно определить сжатой формулировкой. В работе [7] дается анализ 18 важнейших формулировок этого закона, в работе [40] – 16 формулировок. Среди них выделим следующие наиболее распространенные изложения второго начала:

- невозможен процесс, имеющий единственным своим результатом превращение тепла в работу;
- теплота не может сама собой переходить от более холодного тела к более нагретому (Клаузиус);
- осуществление вечного двигателя второго рода невозможно (Оствальд);
- наибольший коэффициент полезного действия тепловой машины не зависит от природы рабочего тела и вполне определяется предельными температурами, между которыми машина работает (Карно);
- любой реальный самопроизвольный процесс является необратимым;
- энтропия всякой изолированной системы стремится к максимуму (Клаузиус);
- природа стремится от состояний менее вероятных к состояниям более вероятным (Больцман);
- энтропия является однозначной функцией состояния и не зависит от пути перехода системы из одного состояния в другое;
- бесконечно малое изменение тепла при равновесном процессе, деленное на абсолютную температуру тела, является полным дифференциалом энтропии;
- уравнение для бесконечно малого изменения теплоты в равновесных процессах вида (4) при любом числе независимых параметров состояния всегда голономно, причем интегрирующим делителем является абсолютная температура;
- в любой окрестности произвольно заданного начального состояния имеются состояния, которые нельзя как угодно точно аппроксимировать адиабатическими изменениями состояния (аксиома Каратеодори).

Для равновесных процессов второе начало термодинамики математически выражается уравнением энтропии:

$$dS = \frac{\delta Q}{T}, \quad (5)$$

при этом для любого равновесного термодинамического процесса справедливо уравнение:

$$\oint \frac{\delta Q}{T} = 0. \quad (6)$$

Здесь T – абсолютная температура.

Для неравновесных процессов содержание второго начала определяется неравенствами:

$$dS > \frac{\delta Q}{T} \text{ и } \oint \frac{\delta Q}{T} < 0. \quad (7)$$

Следует отметить, что одно из основных соотношений термодинамики, полученное Больцманом и связывающее термодинамическую вероятность W с энтропией системы S вида

$$S = k \cdot \ln W, \quad (8)$$

имеет фундаментальное значение для понимания многих процессов в общей теории систем. Соотношение (8) указывает на то, что существует некоторая однозначная аддитивная функция состояния, получаемая с помощью нелинейного преобразования распределения вероятностей состояния системы. В частном случае для идеального газа подобное преобразование имеет вид уравнения (8).

Для оценки термодинамической вероятности системы вводятся понятия макросостояний и микросостояний. Вероятность макросостояния (некоторого состояния системы) определяется по числу тех микросостояний, которые реализуют данное макросостояние [4, 7]. Термодинамическая вероятность в состоянии равновесия системы достигает максимальных значений.

Обычно за термодинамическую вероятность принимают относительную вероятность $W = P/P_0$, указывающую во сколько раз математическая вероятность P рассматриваемого макросостояния больше, чем математическая вероятность P_0 другого стандартного макросостояния, а именно такого макросостояния, которому отвечает только одно микросостояние. Принципом, позволяющим строго обосновать понятие термодинамической вероятности, является положение, что все микросостояния являются равновероятными с математической точки зрения. Это приводит к *эргодической гипотезе* – с течением времени система должна пройти через все микросостояния, отвечающие заданным макроскопическим условиям.

Для подсчета термодинамической вероятности существуют разные подходы. Известны способы определения этой величины по методам Больцмана, Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака, основанные на комбинаторной статистике [7]. Например, по методу Больцмана, если в системе N элементов (молекул), то число всех возможных перестановок как внутри групп элементов, так и между группами по теории сочетаний равно $N!$. Для определения термодинамической вероятности необходимо исключить все перестановки, которые происходят внутри групп элементов:

$$W = \frac{N!}{\prod_i N_i!}, \quad (9)$$

где N – общее число элементов системы; i – количество групп элементов в системе; N_i – количество элементов в i -той группе.

Однако главное место в статистической физике занимает метод ансамблей, предложенный Гиббсом. При использовании метода ансамблей рассматривают одновременно весьма большое число тождественных термодинамических систем, состояния которых отображаются в гиббсовом фазовом пространстве точками, а термодинамическую вероятность связывают с элементарным объемом фазового пространства и дифференциалом энергии.

В свое время Эйнштейн также предложил метод определения термодинамической вероятности, использующий общепринятые основы статистики. В этом случае под термодинамической вероятностью понимают отношение длительности осуществления данного макросостояния τ_i к общей длительности наблюдения τ , при условии, что общая длительность наблюдения чрезвычайно велика. Данный подход в термодинамике не получил математического развития, т.к. оказалось, что без дополнительных гипотез, исходя из обычной механической характеристики системы, невозможно вычислить термодинамическую вероятность по Эйнштейну. Такая оценка вероятностей широко используется в случаях, когда существует возможность длительного наблюдения за поведением системы. Подобный подход нашел распространение в социальных, экологических и экономических науках, а также в промышленной и экологической безопасности, где вероятность состояния системы оценивается по характерным событиям.

Методы определения термодинамической вероятности основаны на умозрительных гипотезах распределения молекул по фазовому пространству, отвечающих основным термодинамическим представлениям о существовании и поведении вещества.

В свое время Ф. Верле [18] отмечал явные недостатки понятия термодинамической вероятности. Практически термодинамическая вероятность сводится к определению числа благоприятных случаев, в то время как классическая вероятность представляет собой отношение наблюдаемых в опыте благоприятных исходов к общему числу всех возможных исходов. Исключение числа возможных исходов из расчетов оправдано только тогда, когда это число постоянно. Это как раз и имеет место в равновесном идеальном

газе. Поэтому при использовании понятия термодинамической вероятности нет явно выраженной связи с наблюдаемыми событиями, как это принято в теории вероятности.

Существование энтропии является фундаментальным принципом термодинамики, определяющим связь свойств и состояний системы. Следует отметить, что между множеством формулировок второго начала нет принципиальных различий и коренных противоречий. Все это – различные попытки изложения некоторого общего закона природы.

Если выходить за рамки термодинамики, то видно, что применение понятия энтропии необязательно [12, 19, 20]. Анализ состояния исследований в этой области указывает на то, что природа энтропии до конца пока не ясна, т.к. нет однозначного мнения по этому вопросу. Различные точки зрения на содержание понятия энтропии исходят из того, что она является: некоторой субстанцией, связанной с ходом времени; свойством, характеризующим процессы; характеристикой математической модели процесса; информационным параметром процесса [20]. Причины роста энтропии в изолированных системах также имеют несколько трактовок. Следствием этого является то, что авторы по-разному определяют смысл энтропии – мера необратимости процессов; мера структурированности системы; мера сложности системного описания объекта; мера неопределенности ситуации; мера разнообразия, хаотичности и т.д. Все это говорит о том, что второй закон термодинамики является отражением некоторого общего закона природы, который по аналогии с высказыванием А. Пуанкаре может быть сформулирован в следующем виде: в природе существует «нечто» неубывающее при осуществлении и моделировании процессов во времени.

Законы термодинамики, а также приведенные выше соотношения, дополненные методами определения термодинамической вероятности и целым рядом эмпирических закономерностей и уравнений состояний, образуют математический аппарат термодинамики. Теоретической базой большинства дифференциальных уравнений термодинамики является теория дифференциальных пфаффовых форм и соотношения дифференцирования для уравнений нескольких переменных [21]. Вытекающие как следствия дифференциальные соотношения являются основным инструментом термодинамического анализа.

Применение подобной общей методологии моделирования в других областях знаний является актуальной задачей при изучении сложных систем.

Эмпирические закономерности в токсикологии

Перед тем как перейти к развитию математических методов в токсикологии, обобщим основные эмпирические закономерности, которые имеются в этой науке и необходимы будут в дальнейшем.

Здесь по аналогии с предыдущим разделом вначале определим содержание основных элементов понятийно-категорийного аппарата, который будет использоваться для формализации в процессе построения моделей. В простейшем варианте токсикология оперирует сложными системами, в которые входит опасная среда и живой объект, находящийся под влиянием среды. Длительное или интенсивное действие опасной среды обычно приводит к необратимым последствиям у живого объекта. В данном случае опасная среда воздействует на живой объект через опасные факторы, в связи с чем у объекта могут появляться негативные эффекты и последствия в виде различных нарушений, заболеваний и смерти. Используем следующие определения из области опасности и риска, которые возьмем из работы [22].

Окружающая среда – совокупность химических, физических, биологических и др. условий, в которых находится живой объект.

Опасный фактор – химические, физические и биологические компоненты и условия окружающей среды, обладающие опасными свойствами и способные вызвать негативные эффекты и последствия у объектов воздействия при реализации опасности.

Объект воздействия – живые объекты, на которые воздействует опасный фактор окружающей среды.

Воздействие – действие опасного фактора окружающей среды на уровне, создающем негативные эффекты и последствия у объектов воздействия.

Таким образом, опасность окружающей среды реализуется через опасный фактор, который обладает определенными вредными для живого объекта свойствами и может характеризоваться несколькими параметрами.

Исходя из вышесказанного, сформулируем для нашего случая понятие опасной системы в следующем виде.

Опасная система – концептуальная совокупность окружающей среды, формирующей опасность, и объекта воздействия, находящегося под действием опасных факторов среды, которые с течением времени приводят к появлению у объекта негативных эффектов и последствий.

В общей теории систем, в отличие от термодинамики, принято, что состояния сложных систем определяются целым набором

свойств, которые характеризуются параметрами и динамически меняются во времени, поддерживая тем самым устойчивое состояние гомеостаза. Динамика гомеостаза в принципе не предусматривает возможности существования равновесных состояний. Известно, что гомеостаз представляет собой устойчивое динамическое равновесие, или, иначе, динамически относительное постоянство состава и свойств системы. В этом уже видно существенное концептуальное отличие рассматриваемых нами сложных систем от термодинамических систем.

Однако под действием опасного фактора относительное постоянство свойств системы может обладать трендом – изменяться во времени в сторону формирования у объекта воздействия негативных эффектов.

Далее будет показано, что в токсикологии можно построить теорию, учитывающую всю совокупность опытных результатов без разделения состояний системы на различные категории. Именно по этой причине в дальнейшем не используются понятия равновесных и неравновесных состояний. Это указывает на то, что в термодинамике разделение состояний на равновесные и неравновесные использовано для облегчения обоснования понятия обратимости, что в токсикологии в принципе не наблюдаемо.

Возникновение негативных эффектов характеризуется определенной вероятностью, которая в общем случае называется риском.

Риск – вероятность существования особых состояний сложной системы, при которых у объекта воздействия под действием опасного фактора возникают негативные эффекты и последствия.

В токсикологии оценку вероятностей состояний сложной системы основывают на проведении “активных” экспериментов. В этом случае изучают поведение ряда одинаковых по общим показателям живых объектов в искусственно созданных опасных условиях окружающей среды и сравнивают это поведение с поведением группы таких же объектов в обычных условиях (сравнение с контрольной группой или фоном):

$$W_i = \frac{i}{m}, \quad (10)$$

где i – число объектов, у которых наблюдаются негативные эффекты в опасных условиях, m – общее число объектов в опыте.

Например, при оценке ингаляционных токсических воздействий, подобный опыт проводится следующим образом [24]. Выбираются определенные концентрации вредного вещества C_1, C_2, \dots, C_p . В боксах создаются условия для поддержания воздушной

среды с такими концентрациями вещества. В каждый из боксов помещается группа однотипных живых объектов (биологический вид, род, возраст, вес и т.д.) и периодически во времени оценивается количество объектов, у которых возникают устойчивые негативные эффекты определенной степени тяжести. При этом рассматриваются следующие категории тяжести эффекта: “нет эффекта”, “слабый эффект”, “умеренный эффект”, “выраженный эффект”. Параллельно для оценки фоновых уровней проводится опыт с контрольной группой животных в безопасных условиях окружающей среды. Это позволяет в опыте оценить вероятности состояния системы по целой группе объектов путем регистрации характерных событий. При этом появление негативных эффектов не является равновероятным. В токсикологии, в отличие от термодинамики, статистическая оценка вероятностей состояний по характерным событиям проводится эмпирически на основе соотношения (10) без привлечения различных гипотез о взаимосвязи микро- и макросостояний.

Благодаря специальным методикам и масштабным опытам по анализу воздействий веществ на животных в токсикологии накоплен большой эмпирический материал по оценке вероятностей опасных событий.

Обычно опасность воздействия вещества характеризуется одним свойством среды (например, концентрацией вещества) и временем действия среды на объект. Время, как опасный параметр воздействия, присутствует во всех случаях реализации опасности.

Обработка опытных данных опасных воздействий на живой организм осуществляется для различных категорий токсических эффектов, имеющих разную степень тяжести последствий. Чаще всего – это хроническое, острое несмертельное или смертельное воздействие. При этом тяжесть эффектов связана с параметрами опасного фактора.

Опыт практической деятельности и анализ данных, характеризующих токсические воздействия, позволили выработать общую методику оценки опасности воздействий в токсикологии (см. рис. 1). Построение эмпирических моделей риска обычно проводится в координатах *пробит*- $\ln C$ или *пробит*- $\ln \tau$. Инверсное преобразование рисков в пробит-функции выполняется с учетом уравнения (11), которое определяет функцию нормального распределения:

$$W_k(\text{Pr}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\text{Pr}} \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right) dt. \quad (11)$$

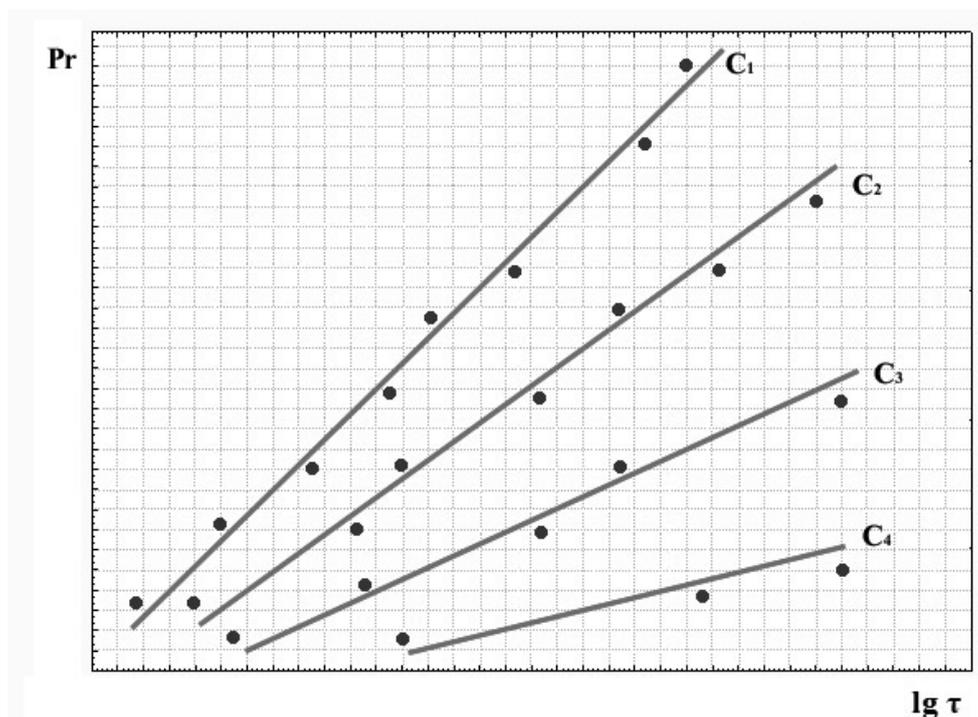


Рисунок 1. – Обработка опытных данных при оценке рисков негативных воздействий в токсикологии

Например, данная методика при обработке опытных данных позволяет получить линейные уравнения в преобразованной системе координат, где по оси ординат откладывается значение пробит-функции Pr , определенное через эмпирическое значение вероятности W_i , а по оси абсцисс – логарифм времени воздействия $\ln \tau$. Линейные зависимости строятся для разных значений концентраций вредных веществ (см. рис. 1).

Методика подобной обработки данных учитывает базовую эмпирическую закономерность, свойственную опасным процессам при воздействии химических веществ, которая имеет логарифмически-нормальное распределение вероятностей возникновения неблагоприятных событий.

Таким образом, при обработке данных широко применяется понятие комплексного показателя опасности, который задается пробитом.

Пробит эмпирически связывают с параметрами фактора опасности в виде [23]:

$$Pr = \alpha + \beta_\tau \cdot \ln C + \beta_c \cdot \ln \tau, \quad (12)$$

где C – концентрация, τ – время воздействия вредного вещества, β_τ и β_c – эмпирические константы.

Использование комплексного показателя опасности в виде (12) обосновано эмпирической закономерностью, суть которой заключается в том, что произведение концентрации, возведенной в степень, на время воздействия

есть величина постоянная при получении эффекта определенной степени тяжести [23]:

$$C^n \cdot \tau = const, \quad (13)$$

где n – характерный показатель степени для определенного опасного вещества.

Построение зависимостей вида (12) при воздействии вредных веществ на животных (см. рис. 1) осуществляется отдельно для каждой категории тяжести эффекта. Это связано с различиями в методах обработки данных по рискам негативных воздействий в хроническом, подостром и остром опыте [24].

Если рассматривать области хронического, острого несмертельного и смертельного воздействий, где значения времени воздействия и концентрации вредного вещества существенно отличаются, то напрашиваются определенные аналогии с фазами в термодинамике.

Вся область возможных воздействий от слабых до смертельных эффектов разбивается на фазовые области, где системе присущи существенные, в данном случае качественные различия. Однако, в отличие от термодинамики, которая изучает свойства веществ в различных агрегатных состояниях, фазовые области не имеют явно выраженных поверхностей фаз.

Покажем, что на основе использования приведенных эмпирических закономерностей вида (10) – (13) и математического аппарата термодинамики можно получить целый ряд новых закономерностей общего характера.

Основные соотношения и дифференциальные уравнения системодинамики для токсикологии

Данный раздел посвятим выводу основных соотношений и дифференциальных уравнений системодинамики для токсикологии, которые являются логическими аналогами соответствующих закономерностей в термодинамике. Этим на практике покажем реальную возможность применения метода термодинамики в науке, в основе которой лежит нефизическая теория. Все обобщения попытаемся сделать в следующем разделе, чтобы не усложнять изложение материала.

Эмпирические данные свидетельствуют о том, что токсикологические системы при внешних воздействиях и различных значениях параметров свойств в состояниях для которых справедливо условие $W = const$, обладают одним качеством – заданной категорией тяжести эффекта с четко определенной вероятностью возникновения этого эффекта. Данная вероятность находится согласно (10) по частоте возникновения характерных событий.

Такие состояния токсикологической системы согласно (11) и (12) характеризуются следующим тождеством:

$$Pr = \alpha + \beta_\tau \cdot \ln C + \beta_c \cdot \ln \tau = const. \quad (14)$$

Покажем, что в основе состояний системы с постоянной вероятностью эффекта лежит также и закономерность (13), где особенности категории тяжести эффекта (хроническое, острое несмертельное или смертельное) определены постоянными уравнения (12). Будем считать, что закономерность (13) имеет универсальный характер для этих категорий, а комплексный показатель опасности Pr существует, и ему присуща закономерность аддитивности в виде:

$$Pr(X) = Pr(\tau) + Pr(C), \quad (15)$$

где величина X является мультипликативной функцией длительности воздействия τ и концентрации вредного вещества C для определенной категории тяжести эффекта. В этом случае функциональный вид величины Pr определяется из решения уравнения вида [4]:

$$Pr''(X) \cdot X + Pr'(X) = 0. \quad (16)$$

Уравнение (16) получают путем дифференцирования зависимости (15) по τ и C с учетом закономерности (13). Согласно [4] решение (16) представляется в виде:

$$Pr = \alpha + \beta \cdot \ln X.$$

Тогда на линии, образованной движением фигуративной точки, которая обладает свойством постоянной вероятности состояния системы и при выполнении условия (13), функция Pr будет иметь вид:

$$Pr = \alpha + n \cdot \beta_c \cdot \ln C + \beta_c \cdot \ln \tau = const. \quad (17)$$

Из полученного результата следует, что существование показателя опасности вида (12) уже определяется закономерностью (13). Аналогичным образом в термодинамике уравнение адиабаты вида $p \cdot v^k = const$ определяет вид функции энтропии, которая является аддитивной величиной и также описывается логарифмической функцией относительно термодинамических параметров [4, 7]. В работе [7, стр. 29] представлен аналогичный вывод зависимостей, определяющих закономерности адиабатного процесса в термодинамике. Поэтому, если в каком-либо процессе изменения состояний системы устанавливается общая закономерность вида $z_1^n \cdot z_2 = const$, то для описания поведения этой системы может быть использован аналогичный математический аппарат.

Закономерность (13) определена однозначностью функции вероятности состояния системы при условии, что $W = const$. Если принять гипотезу, что существует однозначная функция вероятности для всех состояний системы, характеризующихся одной категорией тяжести эффекта, следующего вида

$$W = W_i(Pr), \quad (18)$$

то зависимость вида (14) следует из принципа, что при заданных условиях система не может одновременно находиться в двух разных состояниях. Это обосновано опытными данными и следует из эмпирической закономерности (11), где заданной вероятности состояния системы соответствует определенное значение пробита Pr , которое, в свою очередь, связано с параметрами системы согласно зависимости (12).

Вероятность состояний системы, определенная по характерным событиям, и её связь с параметрами состояния через эмпирическую функцию состояния Pr – это та основа, на базе которой могут быть получены основные соотношения. В этом плане следует ориентироваться на общую формулировку второго закона термодинамики, данной в свое время Больцманом: природа стремится от состояний менее вероятных к состояниям более вероятным.

Функция Pr является полным дифференциалом, т.к. учитывая (12) получим:

$$dPr = \beta_\tau \cdot \frac{dC}{C} + \beta_c \cdot \frac{d\tau}{\tau}. \quad (19)$$

На основе признака Эйлера для пфаффовых форм имеем:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\beta_\tau}{C} \right)_C = \frac{\partial}{\partial C} \left(\frac{\beta_c}{\tau} \right)_\tau = 0.$$

Смысл того, что величина dPr является полным дифференциалом (функцией состояния) заключен в том, что получение определенного

негативного эффекта для объекта воздействия не зависит от пути перехода объекта из состояния 1 в состояние 2. В качестве примера – смертельный эффект для заданных условий с определенной вероятностью (состояние 2) может быть достигнут разными путями перехода системы из состояния 1 в состояние 2.

Непосредственно измерить комплексный показатель опасности Pr нельзя, однако его можно определить расчетным путем через эмпирическое значение вероятности состояния. Для оценки опасности процессов представляет интерес не абсолютное значение показателя Pr , а его изменение при воздействиях. Поэтому необходимо пользоваться относительным значением Pr , заданным от некоторой произвольно выбранной точки отчета.

Если известно значение $Pr_0 = Pr_0(C_0, \tau_0)$ для начальной области той или иной категории эффекта, то комплексный показатель опасности с другими параметрами (например, при концентрации вредного вещества C и длительности воздействия τ) может быть определен из следующего соотношения:

$$Pr(\tau, C) = Pr_0 + \int_{\tau_0}^{\tau} \left(\frac{\partial Pr}{\partial \tau} \right)_C d\tau + \int_{C_0}^C \left(\frac{\partial Pr}{\partial C} \right)_{\tau} dC. \quad (20)$$

Первый интеграл в правой части этого уравнения представляет собой величину показателя опасности при изменении времени воздействия от τ_0 до τ . Второй интеграл представляет собой величину показателя опасности при изменении значения концентрации опасного вещества от C_0 до C . При этом для областей воздействий, которые характеризуют одну категорию эффекта, справедливы следующие уравнения:

$$\left(\frac{\partial Pr}{\partial C} \right)_{\tau} = \frac{\beta_{\tau}}{C} \quad \text{и} \quad \left(\frac{\partial Pr}{\partial \tau} \right)_C = \frac{\beta_C}{\tau}. \quad (21)$$

В этом случае изменение комплексного показателя опасности, с учетом (12), будет иметь следующий вид:

$$Pr - Pr_0 = \beta_{\tau} \cdot \ln \frac{C}{C_0} + \beta_C \cdot \ln \frac{\tau}{\tau_0}, \quad (22)$$

где C_0 , τ_0 – некоторые начальные значения концентрации и времени воздействия, характеризующие получение определенной категории тяжести эффекта с заданной вероятностью, например, смертельный эффект с вероятностью 5%. Таким образом, в качестве величины Pr_0 можно задавать значение этого показателя для определенных порогов воздействия соответствующей категории тяжести эффекта.

Из данных результатов следуют определенные аналогии с термодинамическими методами расчета энтропии вещества. По

крайней мере, при определении комплексного показателя опасности Pr может быть использована аналогичная логическая схема расчетов. Однако мы умышленно не ставим знак равенства между величиной Pr и энтропией, так как это пока преждевременно. Обратим внимание на то, что в показатель Pr входит величина времени, а также на то, что Pr – величина безразмерная.

Рассмотрим теперь всю область возможных воздействий на живой объект $\Psi(0 \leq \tau < \tau_0; 0 \leq C < \infty)$, где τ_0 – средняя продолжительность жизни биологического вида. Предположим существование на всей области определения концентрации и времени воздействия однозначной функции вероятности состояния системы, которая комплексно охватывает все категории тяжести неблагоприятных эффектов.

Так как уравнения вида (12) задаются для определенной категории тяжести эффекта, возникает необходимость построения более общих уравнений, например, уравнений следующего вида:

$$Pr = \alpha(\theta) + \beta_{\tau}(\theta) \cdot \ln C + \beta_C(\theta) \cdot \ln \tau. \quad (23)$$

В этом случае возможна оценка вероятности состояния системы по характерным событиям, наблюдаемым на всей области определения переменных τ и C , например, по смертельным эффектам. На основе такой оценки возможно установление соответствия между различными видами эффектов.

Введем уравнение (23) формально. При этом предположим, что величина Pr может иметь размерность. В данном случае переменная θ представляет собой относительный количественный показатель, комплексно характеризующий уровень опасности среды при воздействии. Логическим аналогом этого показателя в термодинамике является температура. Для того, чтобы описать на всей области возможных воздействий Ψ возникновение определенного качества (категории эффекта) необходимо принять гипотезу о существовании такого показателя, характеризующего уровень опасности при воздействии. К этому отметим, что смертельный эффект может наблюдаться также при безопасных концентрациях, но при времени, соизмеримом с максимальным биологическим возрастом вида. Даже при значениях $C = 0$ и $\tau = 0$ (момент рождения) существует определенная вероятность смерти объекта (перинатальная смертность), которая может быть эмпирически оценена.

Введение температуры дало возможность заменять одним измерением всю совокупность измерений всех величин, характеризующих состояние термодинамической системы. Если температура тела меняется, то должен

изменяться помимо температуры еще хотя бы один параметр состояния системы. Это приводит к теореме о существовании уравнения состояния, т.е. к утверждению, что для любой физической системы всегда существует некоторая функциональная зависимость между температурой и остальными параметрами, характеризующими состояние этой системы. Подобный логический подход может быть реализован и в токсикологии.

Таким образом, при создании теории мы подошли к необходимости построения на основе опытных данных уравнения состояния токсикологической системы и введения некоторого показателя, обобщенно характеризующего *уровень* опасности при воздействии. Так как этот вопрос сам по себе достаточно обширен, то его пришлось проработать отдельно в другой статье. Поэтому здесь примем факт существования такого показателя и соответствующих уравнений состояния токсикологической системы. Для ознакомления с методикой шкалирования опасности и построения таких уравнений отправляем к статье «Построение уравнений состояний сложных токсикологических систем», помещенной в этом сборнике.

Для дальнейших выводов используем простейшее эмпирическое уравнение состояния токсикологической системы, которое было получено в упомянутой статье в виде:

$$C \cdot \tau = R_i \cdot \theta. \quad (24)$$

В рамках данного исследования мы подошли к построению некоторого уравнения сохранения, которое может быть определено по аналогии с термодинамикой, как первое начало. Пока не делаем никаких предположений относительно этого уравнения и попробуем вывести его из имеющихся эмпирических соотношений.

Определим с учетом уравнений (19) и (24) количество воздействия в следующем виде:

$$dQ = \theta \cdot dPr = \theta \cdot \left(\beta_\tau \cdot \frac{dC}{C} + \beta_c \cdot \frac{d\tau}{\tau} \right) = \\ = \frac{1}{R_i} (\beta_\tau \cdot \tau \cdot dC + \beta_c \cdot C \cdot d\tau). \quad (25)$$

Преобразуя данное уравнение, получим следующее соотношение:

$$dQ = dU + C \cdot d\tau, \quad (26)$$

где величина dU равна:

$$dU = \frac{1}{R_i} (\beta_\tau \cdot \tau \cdot dC + \beta_c \cdot C \cdot d\tau) - C \cdot d\tau.$$

Применяя к последнему уравнению признак Эйлера для пфаффовых форм, получим, что dU является полным дифференциалом (функцией состояния) при выполнении следующего условия:

$$\beta_c - \beta_\tau = R_i. \quad (27)$$

Легко показать, что в этом случае $dU = \beta_\tau \cdot d\theta$, $d(U + C \cdot \tau) = \beta_c \cdot d\theta$ и $n = \beta_\tau / \beta_c$. То есть величины dU и $d(U + C \cdot \tau)$ зависят только от показателя уровня опасности θ .

В результате в нашем случае получен логический аналог уравнения Майера в термодинамике. Отметим, что на основе опытных данных всегда можно построить уравнения (12) и (24) так, что условие (27) будет выполняться с определенной степенью приближения.

Это возможно или путем определения регрессионных зависимостей вида (12), или за счет построения уравнения (24) и нахождения коэффициентов n в закономерности (13).

Далее в упомянутой выше статье этого сборника определяются величины R_i , n , β_τ и β_c для основных опасных веществ.

Обратим внимание, что мы пока умышленно не вводим никаких новых определений, так как суть величин U и $(U + C \cdot \tau)$ далека от соответствующих аналогов (энергия и энтальпия) в термодинамике. Например, размерности этих величин задаются как $[мг \cdot мин / м^3]$, а уравнение (26) является определенной формой закона сохранения массы и определяет интенсивность поглощения вредного вещества живым объектом.

Известно, что для каждого биологического вида имеются характерные показатели, отличающие данный вид от других видов. При оценке риска ингаляционных воздействий широко используют осредненные для живых объектов одного вида такие показатели как скорость дыхания V [$м^3 / мин$] и масса живого объекта M [$кг$], а также средняя продолжительность жизни биологического вида τ_0 [$мин$]. Стандартные значения этих величин приведены, например, в [23]. Умножив (26) на постоянную величину $\gamma = V/M$, представим уравнение (26) в виде закона сохранения дозы:

$$d\bar{Q} = d\bar{U} + \bar{I} \cdot d\tau, \quad (28)$$

где $\bar{Q} = Q \frac{V}{M}$, $\bar{U} = U \frac{V}{M}$, $\bar{I} = C \frac{V}{M}$, при этом \bar{Q} и \bar{U} имеют размерность дозы [$мг / кг$], а \bar{I} – интенсивности дозы [$мг / (кг \cdot мин)$].

После того, как показана справедливость уравнения (26), легко вывести целый ряд других дифференциальных соотношений. Например, логические аналоги термодинамических уравнений Максвелла в токсикологии могут быть получены из уравнений $dU = \theta \cdot dPr - C \cdot d\tau$, $d(U + C \cdot \tau) = \theta \cdot dPr + \tau \cdot dC$ и др. в виде:

$$\left(\frac{\partial \theta}{\partial \tau}\right)_{Pr} = -\left(\frac{\partial C}{\partial Pr}\right)_{\tau}; \left(\frac{\partial \theta}{\partial C}\right)_{Pr} = \left(\frac{\partial \tau}{\partial Pr}\right)_{C};$$

$$\left(\frac{\partial C}{\partial \theta}\right)_{\tau} = \left(\frac{\partial Pr}{\partial \tau}\right)_{\theta}; \left(\frac{\partial \tau}{\partial \theta}\right)_{C} = -\left(\frac{\partial Pr}{\partial C}\right)_{\theta}. \quad (29)$$

Из соотношения (12) с учетом (24) можно получить следующие уравнения:

$$Pr = \alpha' + \beta_{\tau} \cdot \ln \theta + (\beta_c - \beta_{\tau}) \cdot \ln \tau, \quad (30)$$

$$Pr = \alpha'' + \beta_c \cdot \ln \theta - (\beta_c - \beta_{\tau}) \cdot \ln C, \quad (31)$$

где α' и α'' – некоторые постоянные. Из уравнений (30) и (31) можно получить:

$$\beta_{\tau} = \theta \cdot \left(\frac{\partial Pr}{\partial \theta}\right)_{\tau} \text{ и } \beta_c = \theta \cdot \left(\frac{\partial Pr}{\partial \theta}\right)_{C}. \quad (32)$$

Дальше легко получить все другие логические аналоги уравнений термодинамики, которые изложены, например, в [21].

Из приведенного выше материала видны определенные системные аналогии в построении моделей в термодинамике и токсикологии. Нами практически построен математический аппарат токсикологии на основе использования эмпирической зависимости (12) применительно к вероятности состояний системы, а также простейшего уравнения состояния вида (24). Однако в данном примере некоторые положения были применены формально, исходя из аналогии с принятыми подходами в термодинамике. В дальнейшем обоснуем это более строго.

Сформулируем основные определения для полученных величин и приведем их размерности. При этом нам придется дать новые названия некоторым величинам. Используемые в статье величины сведены в таблицу 1.

Показатель уровня опасности при токсикологическом воздействии θ назван *вирулентурой* – от слова вирулентный (*лат. virulentus* – ядовитый), что означает болезнетворный, способный вызвать заболевание или смерть. Данный показатель является индексом, он определяет уровень опасности среды по комплексу опасных свойств и его шкала строится путем градации возможной области воздействия. Градация – это постепенный переход от одной ступени (этапа, эффекта) к другому, расчленение переходного процесса на последовательно расположенные области. Единица измерения показателя θ – градус опасности (*gradus* – ступень).

Каждый живой организм в заданном состоянии обладает внутренней мерой, определяющей его жизнеспособность, говоря простым языком «жизненной силой». Для оценки опасности это может быть общая мера жизнеспособности, относительное изменение которой следует вести от состояния «смерть объекта». Поэтому назовем эту меру *вирулентностью*, и определим ее как общую меру жизненной активности объекта.

Таблица 1. – Основные используемые величины и их размерности

Величина	Обозначение	Размерность
Концентрация	C	$мг/м^3$
Время	τ	$мин$
Масса биологического объекта	M	$кг$
Скорость дыхания объекта	V	$м^3/мин$
Биопоказатель вида	$\gamma = V/M$	$м^3/(мин \cdot кг)$
Вирулентура – уровень опасности при воздействии	θ	$^{\circ}\Gamma$, <i>градус опасности</i>
Пробит (размерный)	Pr	$мг \cdot мин / (м^3 \cdot ^{\circ}\Gamma)$
Вирулентность	\bar{U}	$мг/кг$
Количество воздействия	\bar{Q}	$мг/кг$
Доза	$\bar{I} \cdot \tau$	$мг/кг$
Интенсивность дозы	\bar{I}	$мг/(кг \cdot мин)$
Удельная вирулентность	$U = \bar{U}/\gamma$	$мг \cdot мин / м^3$
Удельное воздействие	$Q = \bar{Q}/\gamma$	$мг \cdot мин / м^3$
Вируемкость	$B = d\bar{Q}/d\theta$	$мг/(кг \cdot ^{\circ}\Gamma)$
Вируемкость при постоянном времени	B_{τ}	$мг/(кг \cdot ^{\circ}\Gamma)$
Вируемкость при постоянной концентрации	B_c	$мг/(кг \cdot ^{\circ}\Gamma)$
Удельная вируемкость	$\beta = B/\gamma$	$мг \cdot мин / (м^3 \cdot ^{\circ}\Gamma)$
Удельная вируемкость при постоянном времени	$\beta_{\tau} = B_{\tau}/\gamma$	$мг \cdot мин / (м^3 \cdot ^{\circ}\Gamma)$
Удельная вируемкость при постоянной концентрации	$\beta_c = B_c/\gamma$	$мг \cdot мин / (м^3 \cdot ^{\circ}\Gamma)$
Индивидуальная токсическая постоянная вещества	R_i	$мг \cdot мин / (м^3 \cdot ^{\circ}\Gamma)$

Вирулентность \bar{U} может комплексно характеризовать состояние живого объекта при токсическом воздействии. Как было показано выше, вирулентность является функцией состояния и величина $d\bar{U}$ представляет собой полный дифференциал. Поэтому изменение вирулентности $\Delta\bar{U}$ в каком-либо токсическом процессе зависит только от ее значений в начальном \bar{U}_1 и конечном \bar{U}_2 состояниях и не

зависит от характера этого процесса или от значений вирулентности в промежуточных состояниях данного процесса.

Химическое воздействие опасной окружающей среды на живой объект осуществляется путем поглощения им определенной дозы вредного вещества. Доза – это форма переноса вирулентности между живым объектом и опасной средой.

Поглощение дозы вредного вещества приводит к изменению вирулентности живого объекта. Доза является функцией токсического процесса и определяется произведением интенсивности дозы \bar{I} на время воздействия.

Не всякое поглощение дозы может привести к явно выраженному негативному воздействию на живой организм. В данном случае наличие воздействия мы понимаем как изменение негативного эффекта, то есть необратимый дрейф состояния живого объекта в шкале качеств и увеличение вероятности появления негативных эффектов. В этом случае дифференциал пробита положителен и отличен от нуля, а количество негативного воздействия определено соотношением $dQ = \theta \cdot dPr$. Поэтому второй формой изменения вирулентности является количество воздействия \bar{Q} , приводящее к изменению наблюдаемого негативного эффекта у объекта.

Таким образом, воздействие и доза не являются видами вирулентности, а представляются формами ее переноса. Первая величина определяет получение негативного эффекта объектом и, следовательно, нанесение ему ущерба, а вторая величина характеризует влияние внешних условий на живой объект.

Производная от количества воздействия \bar{Q} по вирулентуре, в каком-либо токсическом процессе названа *вируемкостью*:

$$V = dQ/d\theta.$$

Логическим аналогом этой величины в термодинамике является теплоемкость. Все другие определения сведены в таблицу 1.

В заключение раздела сформулируем начала системодинамики для токсикологии. В этом случае первый закон вида (28), определяющий количественную сторону процессов в токсикологии, имеет фундаментальное значение и гласит:

- вирулентность является однозначной функцией состояния и ее изменение не зависит от пути перехода системы из одного состояния в другое;

- бесконечно малое изменение вирулентности является полным дифференциалом.

Второй закон, определяющий качественную сторону процессов в

токсикологии, можно сформулировать в виде:

- необратимость токсических процессов определена необратимостью времени;

- пробит является однозначной функцией состояния и его изменение не зависит от пути перехода системы из одного состояния в другое;

- бесконечно малое изменение количества воздействия в токсическом процессе, деленное на вирулентуру, является полным дифференциалом пробита.

Таким образом, путем логической аналогии на основе применения термодинамического метода нами построен понятийно-категорийный и математический аппарат для описания токсических воздействий на живые объекты. Предложена система обоснования первого и второго начала в токсикологии. При этом существующий аппарат термодинамики открывает значительные возможности для математического описания токсикологических процессов.

Законы и постулаты системодинамики

«Истинная логика нашего мира –
правильный подсчет вероятностей»
Дж. К. Максвелл

Определим системодинамику как науку о закономерностях процессов развития и изменения сложных систем во времени.

Системодинамика будет рассматривать сложную систему в виде концептуальной совокупности окружающей среды и объектов воздействия, находящихся под действием факторов среды, которые обеспечивают при воздействии появление у объектов некоторых наблюдаемых изменений.

Изначально не делаем предположений о том, является ли изучаемая сложная система живой или не живой. Накладываем только ограничение, что данная система подвержена медленным и непрерывным (эволюционным) изменениям во времени. Нет ограничений на количество элементов, составляющих объект, а также условия их взаимодействия между собой и с окружающей средой. Однако исключены любые мгновенные и скачкообразные (революционные) изменения системы во времени.

Сформулируем теоретические основы системодинамики, исходя из фундаментальных закономерностей природы, которые можно представить в виде трех принципов.

Первый принцип – это объективность законов природы и относительность проводимых в процессе познания измерений, которые позволяют количественно описать закономерности, определяющие процессы

развития и изменения систем.

Второй принцип – эмпирический факт устойчивости частот для наблюдаемых природе событий.

Третий принцип – возможность количественной оценки качеств и свойств сложных систем.

Данные закономерности нашей действительности для большинства объектов, процессов и явлений подтверждены всем практическим опытом человечества.

Теперь нам предстоит переосмыслить содержание таких понятий как состояние системы, качества и свойства системы, вероятность состояния и энтропия, а также некоторых других величин.

Исходя из приведенного в предыдущем разделе примера видно, что основные закономерности поведения токсикологических систем могут быть получены из эмпирических зависимостей, определяющих формирование свойств и изменение вероятности характерных событий. Так как на основе экспериментальных данных о вероятности событий, связанных с состояниями токсикологической системы, нам удалось построить характерный для этой системы закон сохранения, то именно в этой области лежат основные принципы и исходные идеи, необходимые для описания поведения сложных систем.

Сегодня ряд авторов, начиная изложение материала в системном анализе и термодинамике, изначально вводят понятие состояния системы, которое определяется совокупностью значений характерных для данной системы величин, называемых параметрами состояния. Другие авторы изначально используют понятие параметров, которые являются характерными свойствами, определяющими состояние системы. Более четкого определения состояния системы нет. В лучшем случае в термодинамике даются пояснения на примере: вещества обычно пребывают в одном из трех основных состояний: в виде газа, жидкости или твердого тела [4]. Уже из этого пояснения видно, что состояния систем связаны с определенными качествами. В свое время Фальк [16] отмечал, что термодинамика занимается системами и их состояниями, и при любом построении теории роль состояния системы становится основным объектом этой теории.

Известно, что каждый предмет (объект) обладает определенным количеством основных свойств, единство которых и является его качеством. Таким образом, качественная определенность системы – это и есть одна из основ для характеристики ее состояния. Второй основой для характеристики состояния является количественная определенность системы,

связанная с ее свойствами.

При воздействии изменение качества системы обычно связано с событиями – соответствующими фактами, которые могут произойти или не произойти. Эти события характеризуют качественную сторону объекта, в отличие от свойств, которые определяют количественную сторону через параметры состояния. Поэтому состояния системы наряду с количественной определенностью, которая обычно подлежит измерению, должны обладать также и качественной определенностью, которая также может быть измерена или оценена. Говоря философским языком, единство определенного качества и количества, т.е. мера, и определяет состояние системы в заданных условиях.

Сделаем предположение, что вероятность характерных событий, которая связана с изменениями в состоянии сложной системы и множеством качественных признаков, будет выступать количественной оценкой состояния системы по классу качеств.

Таким образом, качественные признаки могут иметь количественное измерение, основанное на оценках вероятностей. Изменение этих признаков при воздействии связано с возникновением определенных событий, по частоте появления которых и может оцениваться состояние системы в процессе изменения ее качества при воздействии.

Сразу отметим, что количественная характеристика качественных признаков на основе оценки вероятностей – это не единственный способ определения качественного состояния системы. Существуют и другие величины для характеристики качества, например, различные комплексные показатели и индексы, которые непосредственно связаны с характерными событиями. Об этом более детально будет сказано далее.

Исходя из приведенного выше, изменение состояния системы можно описать следующей схемой: при воздействии внешних факторов изменяются количественные параметры системы, которые характеризуют определенные свойства этой системы. В свою очередь, изменение свойств системы приводит к созданию условий, при которых накапливаются качественные изменения в системе, которые оцениваются по определенным характерным признакам. При этом значимость признаков определяется по частоте возникновения событий или по изменению выбранных комплексных показателей, характеризующих качественную сторону системы.

В ранее рассмотренном нами примере опасное свойство среды при негативном

в пространстве n -измерений. Например, в интеллектуальном анализе данных широко применяются методы кластеризации и деревья классификации, дающие возможность сформулировать некоторые качественные образы среди объектов одного или разных классов. Здесь уже используются специальные алгоритмы, позволяющие установить связи между качествами и свойствами систем на основе анализа больших массивов информации, которая характеризует изучаемые системы. Однако в данной статье подобные подходы рассматривать не будем.

Вначале рассмотрим первый способ оценки качественного состояния систем.

В процессе анализа вероятность состояния системы может оцениваться на основе двух подходов: по одному или нескольким качественным признакам с получением одной общей оценки w_j . Сразу отметим, что для второго случая вероятность состояния системы в конкретный период времени может рассматриваться как вероятность совместных зависимых или независимых сложных событий (чаще всего зависимых), которые характеризуют определенные качественные признаки. Однако, такие оценки вероятностей состояния системы на основе данных опыта проводят редко. Вообще данный вопрос пока изучен крайне слабо и «шкалирование» полной вероятности состояния систем по различным качественным признакам требует отдельного подробного изучения.

На практике более распространен первый подход, когда вероятность состояния системы в опыте оценивают по одному качественному признаку. Следует отметить, что оценки w_j вида (33) могут даваться для различных качественных признаков в опытах на основе отличающихся методик. В этом случае в эксперименте изучают группу одинаковых по общим показателям объектов и определяют вероятность i -того состояния в виде:

$$W_i = \frac{i}{m}, \quad (34)$$

где i – число объектов, у которых при определенных параметрах системы регистрируются характерные события (наблюдаются различные эффекты) по выбранному качественному признаку; m – общее число объектов в опыте.

Так как обычно при подсчете вероятностей рассматривается весьма большое число тождественных сложных систем одного класса (m), то определенные i -ые состояния на всем множестве состояний отображаются фигуративными точками в n -мерном пространстве. При этом состояние системы

определяется n параметрами. Каждая точка характеризуется набором значений параметров и этой точке устанавливается в соответствие вероятность W_i , определенная по всем m системам в соответствии с уравнением (34). Соответствующее количество систем i , находящихся в определенном i -ом состоянии с параметрами $z_k + dz_k$ определяется эмпирически по опытным данным. Оценка вероятности W_i проводится динамически во времени при выбранных значениях показателей z_k до достижения всеми объектами определенного статистически значимого состояния (активный эксперимент) или ведется непрерывно в течении очень длительного времени с регистрацией событий и определением основных показателей (пассивный эксперимент, например, создание базы данных по землетрясениям или базы данных по социально-экономическим показателям стран и регионов). Подобные эксперименты проводятся для каждого качественного признака при определении чисел w_j функции состояния (33).

Сложность данной проблемы в системном анализе состоит в классификации характерных сложных событий, свойственных каждому j -тому качественному признаку, и определении соответствующих вероятностей на множестве большого количества разных событий.

При выводе основных соотношений системодинамики в качестве исходного положения примем предложенное Каратеодори [9] доказательство существования энтропии.

Предположим, что некоторая величина может быть представлена в виде:

$$dQ = Z_1 dz_1 + Z_2 dz_2 + \dots + Z_n dz_n, \quad (35)$$

где z_1, z_2, \dots, z_n – параметры состояния системы; Z_1, Z_2, \dots, Z_n – функции этих параметров.

В термодинамике величина Q – это количество теплоты, и возможность представления этой величины в виде (35) обеспечена известным объемом предварительных знаний, связанных с эмпирическими данными.

В нашем случае зададимся предположением, что для процессов различной природы некая аддитивная величина вида (35) может существовать. Данное выражение понимается как уравнение, которое служит для определения величины dQ через параметры системы в условиях некоторого процесса, медленно изменяющегося во времени.

При обосновании существования энтропии Каратеодори поставил вопрос об условиях, при которых возможно представление

dQ в форме $dQ = T \cdot ds$, где T является интегрирующим делителем, а величина ds – полным дифференциалом.

Для этого им была доказана лемма из теории пфаффовых уравнений: *если в окрестности любой точки n -мерного пространства есть точки, не достижимые вдоль кривых, удовлетворяющих уравнению*

$$Z_1 dz_1 + Z_2 dz_2 + \dots + Z_n dz_n = 0, \quad (36)$$

то уравнение вида (35) голономно, и для левой части уравнения обязательно существует множитель, обращающий его в полный дифференциал.

Далее, как универсальное свойство всех термодинамических систем постулируется «адиабатическая недостижимость» – существование в окрестности любого состояния точек, не достижимых вдоль кривых, удовлетворяющих уравнению (36). Вместе с доказанной леммой, это эквивалентно утверждению, что уравнение (36) безусловно голономно и для него существует интегрирующий делитель.

В результате была сформулирована вторая аксиома Каратеодори: «В любой окрестности произвольно заданного начального состояния имеются состояния, которые нельзя как угодно точно аппроксимировать адиабатическими изменениями состояния». Данная аксиома является одной из формулировок второго начала термодинамики.

Из самого факта голономности уравнения (35) Каратеодори выводит, что интегрирующим делителем для выражения элементарного количества теплоты является абсолютная температура [9].

В аксиоматическом направлении учения об энтропии задача обоснования существования энтропии в принципе была решена Каратеодори до конца. При этом к соответствующему математическому доказательству никакие физические гипотезы кроме постулата адиабатической недостижимости не привлекались. Считается, что формальный аппарат доказательства отличается безукоризненной строгостью. Однако, в чем физическая суть принципа адиабатической недостижимости Каратеодори не раскрывается.

Как справедливо утверждает в [5] А.Гухманом, система Каратеодори содержит интересную идею. В общем виде она формулируется следующим образом. Если некоторая величина dQ , о природе которой мы ничего не утверждаем, может быть представлена в виде (35), то присоединение постулата «недостижимости» приводит к заключению, что для dQ существует интегрирующий делитель. Другими словами, величина dQ может быть представлена в виде

$dQ = T \cdot ds$, где T является интегрирующим делителем, а величина ds – полным дифференциалом. В этом случае постулат «недостижимости» излагается согласно [5] следующим образом: если при переходе системы из данного состояния в смежное удовлетворяется требование $dQ \neq 0$, то восстановление первоначального состояния, без нарушения условия $dQ = 0$, невозможно.

Разработанная Каратеодори система обоснования математической структуры количества воздействия может быть непосредственно распространена на воздействия любого рода и любые сложные системы. Единственным ограничением является условие квазистатичности процессов. Это определяется тем, что в ходе развития процесса во времени внешние воздействия должны изменяться достаточно медленно. В этом случае состояниям системы присуща определенная однородность и непрерывность свойств и качеств.

Все сказанное выше, а также обобщение эмпирических закономерностей вида (10) – (13) позволяет нам сформулировать для токсикологических систем следующий постулат «недостижимости» – *токсикологические системы обладают свойством адиабатической недостижимости применительно к вероятности состояния этих систем.* Пока при определении мы пользуемся понятием «адиабаты», хотя в термодинамике оно связано с переносом теплоты. Понятие *адиабаты* мы рассматриваем в широком смысле от слова *adiabatos* «непереходимый» (*греч.*). В нашем случае адиабатная недостижимость – это такое свойство, при котором сложная система имеет четко заданную вероятность каждого состояния, зависящую от параметров состояния, в число которых входит время. То есть вероятность состояния системы представляется в виде непрерывной функции $W = W(z_1, z_2, \dots, z_n)$, которая оценивается по возникновению характерных неблагоприятных событий. Таким образом, в этом определении адиабата – это геометрическое место точек, для которых выполняется условие $W = const$. При этом вероятность связана с качественно определенными состояниями системы.

Теперь рассмотрим второй способ оценки качественного состояния системы с помощью применения различных комплексных показателей.

Обычно количественные знания о свойствах сложных систем представляются в виде уравнений состояния, которые устанавливают зависимости для параметров применительно к реально осуществимым состояниям той или иной системы. Считается,

что подобные уравнения должны существовать для любых систем, независимо от их индивидуальных особенностей. Уравнения состояния связывают свойства системы через параметры и несут эмпирические знания о поведении систем. Данные уравнения строятся исключительно на основе опытных данных, хотя для выбора вида зависимостей могут применяться те или иные теоретические обоснования.

В условиях медленных и постепенных количественных изменений для многих сложных систем как физической, так и нефизической природы, опытным путем установлен факт существования в каждом конкретном случае меры отклонения состояния системы от характерных состояний, которые выбраны в качестве опорных точек. Это позволяет предложить различные эмпирические способы измерения или определения показателей, характеризующих качественное состояние систем на основе метода градации. Опытный факт существования таких показателей приводит к утверждению, что для системы, отличающейся подобием свойств, всегда существует комплексный показатель в виде семейства функциональных зависимостей, связанный с основными свойствами данной системы, вида:

$$\theta = F(z_1, z_2, \dots, z_n). \quad (37)$$

Обратим внимание на то, что чаще всего для ряда квазистационарных физических систем уравнение состояния не зависит от времени, другими словами время по отношению к нему выступает параметром. Это возможно тогда, когда показатели качества состояния системы могут быть явно выражены относительно свойств. В ряде случаев время может выступать и свойством, например $z_0 = \tau$. Это наблюдается тогда, когда качества и свойства системы имеют необратимый дрейф во времени и время как параметр не может быть исключено из уравнения состояния.

В термодинамике в виде комплексного показателя θ выступает температура, шкалы которой привязывают к фазовым точкам состояния вещества, например, точке плавления льда и кипения воды при нормальном атмосферном давлении.

Основой для понятия температуры является эмпирический факт того, что когда два тела находятся в термическом равновесии с третьим, то они также находятся в термическом равновесии между собой [10]. Если одно из тел использовать как *термометр*, то эмпирическая температура определяется значением функции (37), что является опытным фактом существования уравнения состояния системы.

В том или ином виде показатели или индексы вида (37) используются и в других

областях знаний. Применяются разные методы измерения или расчета таких индексов. В упоминаемой ранее статье данного сборника показана возможность построения уравнения состояния и введения такого индекса для сложной нефизической системы. При этом для построения уравнения вида (37) использовалась логическая схема моделирования, принятая в термодинамике, а измерение опасности среды осуществлялось особым видом «термометров» – стандартизированными живыми объектами.

Однако на практике возможно использование и других подходов, которые позволяют ввести меру подобия свойств системы. В экономике широко распространены при анализе ценообразования биржевые индексы (индексы Доу-Джонса, Муди, фондовых бирж, сводные индексы ООН экспортных цен и т.д.). Фондовые индексы выражают в пунктах, а опорные точки привязывают к определенным временным интервалам (например, индекс Уилшир-5000 имеет базисное значение, установленное на 31 декабря 1980 года).

При оценке уровня развития стран эксперты ООН применяют различные индексы человеческого развития (индексы развития человеческого потенциала в целом и по группам доходов, индекс нищеты населения, индексы развития с учетом гендерного фактора и т.д.). Это так называемые методики ООН: ИРЧП, ИНН-1, ИНН-2, ИРГФ, ПРВЖ и другие [27].

В свою очередь, при анализе землетрясений, цунами, ураганов применяются шкалы интенсивности, которые измеряются в баллах; при оценке уровня загрязнения среды вводят различные комплексные индексы; в метеорологии используют бальную оценку явлений согласно специально созданных атласов, а при распознавании образов – индексы, объединяющие до 100 различных свойств объектов, и т.д.

В статье данного сборника «Методы системной динамики при анализе социально-экономического развития стран и регионов» показана возможность построения уравнения состояния вида (37) для описания процессов, определяющих развитие стран мира. В этом случае при построении моделей социально-экономических систем была использована логическая схема моделирования, принятая в термодинамике.

Таким образом, при построении уравнений состояний может использоваться принцип подобия в поведении системы относительно свойств, который устанавливает соответствие различных состояний системы по отношению к выбранным характерным состояниям. Данные состояния могут определяться как точки перехода из одного

качественно отличного состояния системы в другое, приниматься по соглашению или просто привязываться к выделенным во времени состояниям. В термодинамике эти состояния называются фазовыми точками. В философии – это узловые точки изменения меры, а система таких точек представляет собой узловую линию мер. Между двумя ближайшими узловыми точками вводится шкала комплексного показателя, однозначно связанного с основными свойствами системы, параметры которых определяются по показаниям прибора. Используя эти состояния системы как опорные, обычно строится линейная шкала комплексного показателя или индекса, охватывающего множество некоторых качественных состояний. Для этого первому состоянию ставится в соответствие значение, равное, например, 0, а второму состоянию – значение равное 100. Интервал между этими состояниями принимают за отрезок в 100. Специфику и меру воздействия на систему в данной шкале определяют на основании опытных данных. Измерение показателя или индекса может осуществляться в градусах, балах, процентах и т.д. Термодинамические диаграммы для различных веществ не только характеризуют состояние тела путем определения его свойств в создавшихся условиях, но и позволяют дать качественную характеристику – оценить области, где вещество находится в различных агрегатных состояниях. Это один из распространенных методов построения шкалы θ для уравнения (37).

Как указывалось, существует второй, широко применяемый, способ построения шкалы индекса, при котором опорное состояние привязывают к определенной временной дате. Принимая по соглашению определенную методику расчета индекса и устанавливая в соответствие этому состоянию значение равное, например, 100 пунктов, в дальнейшем отслеживают поведение системы с течением времени. Третий способ, используемый в теории безопасности и науках о природе, позволяет «увязывать» опорные состояния с безопасными, пороговыми или часто наблюдаемыми уровнями. Измерение осуществляется в долях предельно допустимых концентраций, процентах, балах, других относительных величинах и т.д.

Таким образом, предположим, что комплексный показатель, также как и вероятность появления характерных событий, может выступать в качестве одного из способов количественной оценки функции состояния системы вида (37). Функция (37) является непрерывной и на нее также может быть распространен принцип адиабатической недостижимости.

Теперь после сделанных выше пояснений перейдем от частных примеров к процессу анализа систем различной природы.

Обобщая все сказанное выше, первый основной постулат системодинамики, который затрагивает качественную и количественную стороны системы, можно сформулировать в следующем виде: *эволюционно развивающаяся сложная система, имеет однозначную непрерывную функцию состояния, которая может быть оценена путем измерения показателей, характеризующих качественные и количественные изменения в системе.*

Так как вероятность состояния системы определяется по характерным событиям, свойственным данному качественному признаку, то единственным ограничением является существование таких событий и наличие условий для их регистрации. При этом одним из основных параметров, используемых при регистрации событий, выступает время. Аналогичным образом, если существует возможность путем процедуры комплексного измерения поставить в соответствие каждому состоянию системы некоторое число, то это также дает возможность определить функцию состояния по факту качественных изменений в системе. В свою очередь предполагаем, что все основные свойства системы количественно измеряемы и могут быть параметризованы. Следствием первого постулата является то, что функция состояния системы вида (33) является дифференцируемой.

Второй постулат системодинамики сформулируем в следующем виде: *в любом процессе, протекающем в окрестности произвольно заданного и качественно однородного состояния, свойства сложной системы эволюционно развивающейся во времени подобны.*

Этим постулатом мы вводим определенное ограничение на поведение изучаемых сложных систем, при котором наблюдается медленное, постепенное и монотонное изменение качеств и свойств системы. То есть революционно развивающиеся системы, для которых при явно выраженных нестационарных процессах можно наблюдать разрывное или скачкообразное изменение качеств и свойств с нарушением однородности, исключаются из рассмотрения.

Третий постулат системодинамики сформулируем в общем виде: *в любой окрестности произвольно заданного состояния качества и свойства сложной системы однозначно связаны через функцию меры.*

Здесь в философском смысле можно сказать, что мера системы, определяющая органическое единство качественной и количественной определенности каждого состояния, должна обладать свойствами непрерывности и однозначности [25]. В процессе

развития переход от одной качественно отличной ступени процесса к другой должен соответствовать существующей узловой линии мер. При этом, как указывалось, процессы, обеспечивающие явно выраженные скачкообразные переходы, при которых нарушается однородность свойств и качеств системы и взаимосвязь между ними, не рассматриваются. Другими словами мы рассматриваем поведение системы между узловыми точками ее развития.

В процессе построения теории предполагаем, что определенному состоянию сложной системы может быть присуще множество различных качеств при одних и тех же свойствах системы, и рассматриваем максимально возможную область определения свойств системы. Считаем, что каждому качеству соответствует свой признак, который может быть связан с характерными событиями, если они наблюдаемы, или некоторыми комплексными показателями, если они измеряемы. При этом вопрос о том, что представляет собой функция меры (т.е. своеобразное «нечто», на которое указывал А.Пуанкаре) временно оставляем открытым.

Пока достаточно определить функцию меры как особый вид функции состояния системы, получаемой из уравнений вида (33) и определяющей органическую связь между качествами и свойствами системы. Тем самым мы предполагаем существование возможности перехода от внешних координат, используемых в (33), к некоторым внутренним координатам, которые и будут определять функцию меры системы.

Рассмотрим оба способа оценки функции состояния, о которых говорилось ранее.

Из первого способа следует существование однозначной, непрерывной и дифференцируемой функции, определяющей вероятность состояния системы и зависящей от параметров. Таким образом, для выделенного качественного признака на всей области определения свойств, характерных для данного признака, будем иметь следующую функцию вероятности состояния:

$$W = W(z_1, z_2, \dots, z_n), \quad (38)$$

где z_k – параметры состояния, $0 \leq W \leq 1$.

Обратим внимание на то, что вероятность состояния W однозначно связана со временем, т.к. определяется процессом возникновения событий. Поэтому в число параметров может входить время, например, $z_1 = \tau$.

Если рассматривать несколько качественных признаков, то в этом случае будем иметь семейство функций вида (38).

Предположим справедливость принципа «адиабатной недостижимости» применительно к

функции вероятности состояния сложных систем, который в дальнейшем определим как принцип *гомеостатической* недостижимости (от греч. *homoiós* – подобный, одинаковый; *státos* – неподвижный, стоящий). Сформулируем данный принцип в виде: *в любой окрестности произвольно заданного состояния A для функции вероятности состояния сложной системы есть точки, недостижимые без нарушения условия $dW = 0$.*

Как показано в [5, стр. 360; 10, стр. 203], данный принцип свойственен любой функции $\Phi(z_1, z_2, \dots, z_n)$ различных параметров в случае, если соответствующая пфаффа форма относительно этих параметров голономна.

Это означает, что если построить пространство S_{n+1} с n независимыми переменными (параметрами функции) и самой функцией в качестве декартовых координат, то полученные результаты можно будет представить в простой форме [5]:

$$\Phi(z_1, z_2, \dots, z_n) = C. \quad (39)$$

Следствием этого является то, что в пространстве состояний S_{n+1} каждому уравнению вида (39) отвечает некоторая гомеостатическая гиперповерхность, для которой параметром служит постоянная C . Различные поверхности, очевидно, не могут иметь общих точек. Если изменение состояния системы подчинено уравнению Пфаффа вида (36), где дифференциал функции $d\Phi$ представляется суммой в левой части, то линия процесса нигде не может выйти за пределы той гиперповерхности, к которой принадлежит начальная фигуративная точка. Ниже мы будем изучать процессы лишь в окрестности обыкновенных точек, т.е. особые точки исключаются из рассмотрения [29].

Таким образом, гомеостатическая недостижимость применительно к вероятности состояния – это такое свойство, при котором сложная система имеет четко определенную вероятность каждого состояния, зависящую от параметров состояния z_k . При этом функция вероятности W представима в виде:

$$W(z_1, z_2, \dots, z_n) = C, \quad (40)$$

где C – константа ($0 \leq C \leq 1$) и число таких констант бесконечно велико.

Соотношение (40) определяет для функции вероятности состояния системы уравнение поверхности в многомерном пространстве, которому соответствует семейство не пересекающихся между собой поверхностей. Фигуративная точка $W(z_1, z_2, \dots, z_n)$, соответствующая при своих перемещениях определенному множеству состояний сложной системы, заданных

условием $dW = 0$, может принадлежать только одной такой поверхности. Другими словами функция вероятности $W(z_1, z_2, \dots, z_n)$ формирует в пространстве S_{n+1} некоторое скалярное поле, для которого могут быть образованы поверхности уровня вида (40). Если через каждую точку пространства S_{n+1} проходит только одна гладкая поверхность уровня, то для любой точки скалярного поля может быть определен градиент функции $W(z_1, z_2, \dots, z_n)$.

Таким образом, если мы покажем, что дифференциал вероятности состояния системы представляется пфаффовым видом (36), то исходные предпосылки будут удовлетворять известной теореме Каратеодори из теории уравнений Пфаффа [9].

Сформулируем важное для системодинамики утверждение, которое изложим следующим образом: *при справедливости принятых постулатов в любом реализуемом процессе дифференциал вероятности состояния сложной системы при произвольном числе независимых параметров состояния всегда может быть представлен в виде суммы дифференциалов этих параметров, умноженных на соответствующие функциональные множители, зависящие от этих параметров.*

Из данного утверждения следует, что функцию вероятности состояния системы, определенную по характерным событиям для выбранного качественного признака, всегда можно представить в виде пфаффового вида:

$$dW = Z_1 dz_1 + Z_2 dz_2 + \dots + Z_n dz_n, \quad (41)$$

где Z_1, Z_2, \dots, Z_n – функции параметров состояния системы.

Поясним справедливость этого утверждения на примере токсикологической системы. Предположим, что динамически во времени проводится обычный токсикологический эксперимент, в котором m живых объектов помещены в опасную среду с определенными параметрами z_k . В начальный момент времени τ все объекты здоровы и отвечают заданным критериям [24]. Однако естественно, что объекты обладают свойственными им индивидуальными особенностями, т.к. в природе не может быть двух абсолютно одинаковых живых существ. Поэтому для каждого i -того объекта существует определенная вероятность получения негативного эффекта определенной категории тяжести $W_i(z_1, z_2, \dots, z_n)$, которая может быть представлена как функция времени $z_1 = \tau$ и параметров системы $z_k = \{z_2, \dots, z_n\}$. Оценить эмпирически эту вероятность за время Λ

можно, например, по методу Эйнштейна через определение вероятности состояния данного объекта по нескольким показателям и характеристикам организма и сравнение этих показателей с нормой или фоном. Однако, в данном случае, нам вполне достаточно предположения, что такая функция существует.

Обычно хронический эксперимент проводится путем нескольких испытаний. По истечении времени Λ_1 осуществляется первое испытание. Одновременно берутся все m объектов, проводятся токсикологические исследования и определяется различие методов существования эффектов определенной степени тяжести. После этого фиксируется количество объектов i_1 , у которых обнаружены негативные эффекты и все объекты возвращаются в опасную среду. Далее через время Λ_2 проводится второе аналогичное испытание и так далее до совершения R испытаний. Каждый раз по результатам эксперимента определяется эмпирическое значение вероятности $W_r = i_r/m$. Таким образом, основное событие испытания (событие A – получение объектами негативного эффекта определенной категории тяжести за период времени Λ_r) может быть представлено в виде комбинации более простых составляющих событий a_i . Данные события a_i – это получение каждым i -объектом в одном испытании негативного эффекта за период времени Λ_r . События a_i являются независимыми событиями с заданной вероятностью W_i . Так как все события a_i совместны, то по теореме умножения вероятностей [26] получим:

$$W_r(A) = \frac{k_r}{m} = W_1(a_1) \cdot W_2(a_2) \cdot \dots \cdot W_{m-1}(a_{m-1}) \times \times W_m(a_m). \quad (42)$$

Если учитывать зависимость вероятности от времени и параметров системы, то для каждого состояния системы в эксперименте будем иметь:

$$W = W_1 \cdot W_2 \cdot \dots \cdot W_{m-1} \cdot W_m, \quad (43)$$

где вероятности зависят от времени τ и других свойств z_k :

$$W = W(z_1, z_2, \dots, z_n); \quad W_i = W_i(z_1, z_2, \dots, z_n).$$

Аналогичным образом, если для какой-нибудь сложной системы в эксперименте оценка вероятности состояния по качественному признаку проводится путем регистрации несовместных событий, то

$$W = \sum_{i=1}^m W_i(z_1, z_2, \dots, z_n). \quad (44)$$

Подобные зависимости, основанные на

теоремах сложения и умножения вероятностей, можно получить и для случая, когда в эксперименте регистрируются совместные зависимые события и при расчете вероятностей сложных событий учитываются условные вероятности.

Например, в общем случае реализации опасностей для вероятностной оценки событий используют понятие риска. В классическом определении риск представляет собой вероятность реализации сложного события, приведшего к определенному ущербу или негативным последствиям, которая определяется по следующему уравнению:

$$R(j) = \sum_{i=1}^n W_j(I_i) \cdot P_j(I_i), \quad (45)$$

где $W_j(I_i)$ – условная вероятность нанесения вреда человеку (биосистеме, объекту) в случае реализации опасности величиной I_i при наступлении негативных событий j ; $P_j(I_i)$ – вероятность реализации опасности I_i при наступлении негативных событий j ; n – число возможных опасностей одного класса.

Как видно из зависимостей (43) – (45), в общем случае, вероятности состояний сложных систем, как результат реализации сложных событий, представляются аддитивно-мультипликативными соотношениями относительно вероятностей более простых событий. При этом события классифицируются по уровню сложности и в основе подсчета вероятностей лежат теоремы о сложении и умножении вероятностей событий. Эти теоремы являются основополагающими в теории вероятности. Таким образом, можно показать, что из (43) – (45) или аналогичных зависимостей можно получить дифференциал вероятности dW , который всегда представляется в виде уравнения (41). Для нас сейчас представляет интерес сам факт существования в каждом конкретном случае аддитивно-мультипликативных зависимостей для вероятности состояния системы относительно вероятностей более простых событий. Поэтому, согласно принятому принципу гомеостатической недостижимости и теореме Каратеодори, уравнение для дифференциала вероятности состояния системы вида (41) всегда голономно.

Исходя из этого, дифференциал вероятности состояния системы по выбранному качественному признаку может быть представлен в виде:

$$dW = \chi \cdot d\varphi, \quad (46)$$

где χ – интегрирующий делитель для функции вероятности состояния системы, а $d\varphi$ – полный дифференциал. Как видно из

зависимости (46), вероятность состояния системы является функцией процесса (функцией линии), а величина φ – функцией состояния (функцией точки).

Рассмотрим теперь второй способ оценки функции состояния системы вида (33). Для получения аналогичных выводов о существовании некоторой универсальной функции состояния (см. 46) будем использовать второй постулат системодинамики.

Примем гипотезу, что для любой сложной системы, отличающейся подобием свойств, существует показатель (семейство показателей), выступающий мерой отклонения системы по комплексу свойств от уровня, принятого за базовый. Назовем этот показатель *индексом* состояния системы. Индекс, по аналогии с вероятностью состояния системы, вносит эмпирические закономерности в поведение системы. Поэтому обычно индекс состояния однозначно связан с параметрами, характеризующими свойства системы, и, чаще всего, задается в относительных величинах в «привязке» к опорным уровням.

Данный показатель также как и вероятность появления характерных событий позволяет оценивать состояние системы по факту ее качественных изменений и может иметь целый ряд различных шкал измерения.

Таким образом, ко многим сложным системам можно применить второй постулат о подобии свойств, и в этих случаях возможно существование индекса состояния вида (37) и, как следствие этого, уравнения состояния системы.

Естественно распространить принцип гомеостатической недостижимости и на данный показатель. Будем считать, что индекс состояния системы обладает свойством гомеостатической недостижимости, при котором каждому состоянию сложной системы устанавливается в соответствие свое значение индекса θ . При этом, функция $F(z_1, z_2, \dots, z_n)$, согласно (37), представляется в виде:

$$F(z_1, z_2, \dots, z_n) = C, \quad (47)$$

где C – константа, и число таких констант бесконечно велико.

Для рассматриваемого случая данный принцип приведем в следующей формулировке: *в любой окрестности произвольно заданного состояния A для функции индекса состояния сложной системы есть точки, недостижимые без нарушения условия $d\theta = 0$.*

В термодинамике условие постоянства температуры определяет тепловое равновесие. В общем случае будем считать, что равенство индекса определяет условие равновесия в системе по комплексу свойств и качеств или то, что две системы являются тождественными

(похожими) по комплексу свойств и качеств.

Пусть осуществляется процесс, в результате которого при внешнем воздействии на систему можно перейти от любого заданного начального состояния к любому возможному конечному состоянию системы. Опыт построения функций состояния показывает, что свойства систем выражаются обычно в виде функций времени, то есть в процессе изменения состояния задают n функций вида:

$$z_1(\tau), z_2(\tau), \dots, z_n(\tau),$$

где время выступает параметром.

Учитывая все вышесказанное, будем считать, что реально осуществимые состояния системы однозначно определяются следующим уравнением состояния:

$$\theta(\tau) = F(z_1(\tau), z_2(\tau), \dots, z_n(\tau)). \quad (48)$$

Пусть также функция $F(M')$ определена и непрерывна в замкнутой области D и имеет непрерывные частные производные внутри этой области. В момент времени τ_0 происходит некоторый процесс изменения свойств системы, длительность которого составляет $\Delta\tau$. Будем считать, что этот интервал достаточно мал ($\Delta\tau \rightarrow 0$). Рассмотрим две точки из замкнутой области D :

$$A(z_1(\tau_0), z_2(\tau_0), \dots, z_n(\tau_0)) \text{ и} \\ B(z_1(\tau_0 + \Delta\tau), z_2(\tau_0 + \Delta\tau), \dots, z_n(\tau_0 + \Delta\tau)),$$

определяющие два смежных состояния данного процесса, и которые можно соединить линией процесса AB , целиком лежащей в области D . Исходя из принятого постулата подобия свойств будем иметь [28], что для любой точки M' , лежащей на данной линии, справедливо соотношение:

$$\overrightarrow{AM'} = k \cdot \overrightarrow{AB}. \quad (49)$$

Таким образом, согласно (49), в окрестности точки A n -мерные вектора параметров свойств вдоль линии процесса AB связаны подобным преобразованием, причем отношение подобия k меньше или равно единице. Как известно на основании [28], при подобном преобразовании справедливы следующие формулы для координат вектора:

$$z'_1 - z_{1a} = k \cdot (z_{1b} - z_{1a}), \quad z'_2 - z_{2a} = k \cdot (z_{2b} - z_{2a}), \dots \\ \dots, \quad z'_n - z_{na} = k \cdot (z_{nb} - z_{na}).$$

Таким образом, состоянию A свойственно уравнение $F(z_{1a}, z_{2a}, \dots, z_{na}) = \theta_a$, а состоянию B – аналогичное уравнение $F(z_{1b}, z_{2b}, \dots, z_{nb}) = \theta_b$. Все другие состояния, соответствующие линии процесса AB , будут определены уравнением $F(z'_1, z'_2, \dots, z'_n) = \theta'$.

Если представить отношение k как

$$k = \frac{\tau - \tau_0}{\Delta\tau}, \quad (50)$$

то фигуративная точка M' за время $\Delta\tau$

опишет линию AB , которая характеризует процесс изменения свойств системы. При этом индекс состояния системы определится для данной фигуративной точки как $\theta' = \theta_a + k \cdot (\theta_b - \theta_a)$.

Принимая точку A в качестве опорного состояния и размещая начало декартовой системы координат z_k в этой точке, получим следующую зависимость:

$$k \cdot \theta_b = F(k \cdot z_{1b}, k \cdot z_{2b}, \dots, k \cdot z_{nb}),$$

или, т.к. точка A выбиралась абсолютно произвольно, в общем случае:

$$k \cdot \theta = F(k \cdot z_1, k \cdot z_2, \dots, k \cdot z_n). \quad (51)$$

Из соотношения (51) следует, что в первом приближении функция индекса состояния для системы, которая обладает подобием свойств, в окрестности любого состояния является однородной [29]. При этом предполагается, что существование зависимости (37) является эмпирическим фактом, при котором эта зависимость может быть представлена на основе опытных данных, по крайней мере, в численном виде.

Теперь становится несколько более понятным характер влияния времени на функцию состояния. Так как величина k (см. уравнение 50) является по отношению к уравнению состояния (37) параметром однородной функции, то для определенных классов однородных функций параметрическое представление свойств относительно времени приводит к тому, что эти параметрические кривые образуют функцию состояния системы в явном виде [29]. Другими словами, если в окрестности точки A производные

$\frac{dz_1}{d\tau}, \frac{dz_2}{d\tau}, \dots, \frac{dz_n}{d\tau}$ одновременно не равны нулю,

то кривая в окрестности рассматриваемой точки представима явным уравнением (37), т.к. эта точка не является особой [29]. В конце данной статьи приводится краткий анализ такой возможности. Именно это характерно для уравнений состояний термодинамических систем, составленных для условий квазистационарных процессов.

Известно, что однородная функция, имеющая непрерывные частные производные, удовлетворяет формуле Эйлера [29]:

$$q \cdot \theta = z_1 \cdot F'_{z_1}(z_1, z_2, \dots, z_n) + z_2 \cdot F'_{z_2}(z_1, z_2, \dots, z_n) + \dots \\ \dots + z_n \cdot F'_{z_n}(z_1, z_2, \dots, z_n), \quad (52)$$

где q – степень однородной функции.

Полученные результаты имеют простую геометрическую интерпретацию в случае трех переменных. Зависимость вида $\theta = F(z_1, z_2)$ представляет собой поверхность в трехмерном пространстве относительно координат θ, z_1, z_2 . Уравнение (52) указывает на то, что в

окрестности опорного состояния поверхность, заданная явным уравнением $\theta = F(z_1, z_2)$ и проходящая через точку A , имеет касательную плоскость в этой точке. В данной плоскости лежат касательные ко всем линиям процессов, проведенным по поверхности θ через выбранную опорную точку.

Если продифференцировать уравнение (52), то можно получить следующее соотношение, представляющее собой пфаффову форму:

$$d\theta = Z_1 dz_1 + Z_2 dz_2 + \dots + Z_n dz_n. \quad (53)$$

Таким образом, при принятых исходных положениях индекс состояния системы в окрестности состояния A также можно представить в виде суммы дифференциалов параметров, умноженных на функциональные множители, зависящие от этих параметров.

Принимая во внимание теорему Каратеодори, получим, что уравнение для дифференциала θ вида (53) всегда голономно. Исходя из этого, дифференциал индекса состояния системы может быть представлен в виде:

$$d\theta = \lambda \cdot d\psi, \quad (54)$$

где λ – интегрирующий делитель для функции индекса состояния системы, а $d\psi$ – полный дифференциал.

Как видно из зависимости (54), индекс состояния системы является функцией процесса, а величина ψ – функцией состояния.

Соотношения (46) и (54) были получены нами разными путями. В первом случае использовались теоремы о сложении и умножении вероятностей событий, во втором случае – постулат о подобии свойств. Можно показать, что если для оценки функции состояния системы использовать понятие относительной вероятности $W' = W/W_a$, так как это делается в термодинамике, то постулат о подобии свойств может быть распространен на функцию W' . В этом случае обеспечивается существование величины, выступающей мерой отклонения системы по комплексу свойств от базового уровня. В качестве опорного состояния здесь выступает состояние A с вероятностью W_a . Тогда в окрестности состояния A по отношению вероятности W' сохраняется справедливость вывода соотношений (48) – (52).

Если обобщить все вышесказанное, то можно утверждать, что справедливость представления уравнений $\theta = F(z_1, z_2, \dots, z_n)$ и $W' = W(z_1, z_2, \dots, z_n)$ в виде (52) определяется существованием функций θ и W' и возможностью разложения этих функций в окрестности опорного состояния A в ряд по формуле Тейлора для случая нескольких

переменных. При этом уравнение (52) может рассматриваться в качестве первого приближения, когда всеми слагаемыми с производными вторых порядков и выше пренебрегают [29].

В соотношениях (46) и (54) величины χ и λ являются интегрирующими делителями, которые при умножении на константу k' сохраняют свои свойства, т.е. величины $k' \cdot \chi$ и $k' \cdot \lambda$ также являются интегрирующими делителями. Поэтому, если разделить уравнение (46) на W_a , то справедливость уравнения сохраняется. Другими словами, постулат о подобии свойств и его следствие в виде однородности функции состояния системы может быть распространен на эту функцию независимо от способа оценки этой величины.

Как следует из соотношений (46) и (54) величины φ и ψ являются функциями точки, значение которых при изменении состояния системы в процессе от начального (A) до конечного (B) состояния не зависит от того, по какому пути идет процесс $A-B$. Например, значение величины ψ определяется только разностью значений функции в начальном и конечном состоянии:

$$\int_{a-b}^b d\psi = \int_a^b d\psi = \psi_b - \psi_a. \quad (55)$$

В данном случае мы подошли к необходимости принятия гипотезы об аддитивности функций состояния φ и ψ , определяемых согласно (46) или (54). Обычно под аддитивностью подразумевают свойство, заключающееся в том, что некоторая величина для системы в целом равна сумме аналогичных величин, относящихся к отдельным частям, областям или элементам системы. Не всегда свойство аддитивности справедливо, но, например, для термодинамических систем большой массы нарушениями аддитивности энергии и энтропии пренебрегают. Аналогичным образом будем считать, что если сложная система обладает значительным числом элементов (объектов), то нарушением свойства аддитивности для функции состояния можно пренебречь.

По аналогии с [9] покажем, что в (54) интегрирующий делитель может быть представлен в форме произведения двух сомножителей. Для этого рассмотрим сложную систему, состоящую из двух произвольно выбранных простых подсистем. Условимся величины, относящиеся к подсистемам, отмечать индексами 1 и 2; величины без индексов относятся к системе в целом. Будем считать, что две подсистемы, имеющие равное значение индекса θ , являются тождественно

одинаковыми. Согласно (53) и принципа аддитивности функции состояния ψ , можно записать:

$$d\psi_1 = \frac{d\theta}{\lambda_1(\theta, z_1, \dots, z_n)}; d\psi_2 = \frac{d\theta}{\lambda_2(\theta, z_1, \dots, z_n)};$$

$$d\psi = \frac{d\theta}{\lambda(\theta, z_1, \dots, z_n)}; d\psi = d\psi_1 + d\psi_2. \quad (56)$$

Пусть в произвольном процессе система проходит путь от состояния A до состояния B . Очевидно по условию (так как подсистемы совершают один и тот же процесс), что индекс состояния системы на любом участке пути процесса $A-B$ изменяется на одну и ту же величину. Переходя к переменным θ , ψ_1 , ψ_2 и учитывая (56) получим:

$$d\psi = \left(\frac{\lambda(\theta, \psi_1, \psi_2)}{\lambda_1(\theta, \psi_1)} + \frac{\lambda(\theta, \psi_1, \psi_2)}{\lambda_2(\theta, \psi_2)} \right) d\theta.$$

Используя рассуждения, аналогичные [9 с.209; 5 с.365], можно показать, что λ/λ_1 и λ/λ_2 не зависят от величины θ . Откуда следует, что:

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\lambda}{\lambda_1} \right) = 0 \text{ и } \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\lambda}{\lambda_2} \right) = 0 \text{ или}$$

$$\frac{1}{\lambda} \frac{\partial \lambda}{\partial \theta} = \frac{1}{\lambda_1} \frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta}; \frac{1}{\lambda} \frac{\partial \lambda}{\partial \theta} = \frac{1}{\lambda_2} \frac{\partial \lambda_2}{\partial \theta}. \quad (57)$$

Согласно (56) отмечаем, что λ_1 не зависит от ψ_2 , а λ_2 от ψ_1 . Поэтому равенства (57) возможны только в случае, если выполняется следующее условие:

$$\frac{\partial}{\partial \theta} (\ln \lambda_1) = \frac{\partial}{\partial \theta} (\ln \lambda_2) = \frac{\partial}{\partial \theta} (\ln \lambda) = g_1(\theta). \quad (58)$$

Здесь $g_1(\theta)$ – некоторая функция, принимающая тождественное значение для обеих произвольно выбранных подсистем и для системы в целом.

Из уравнения (58) получим:

$$\lambda = \Phi_1(\psi) \cdot \exp \left(\int g_1(\theta) d\theta \right). \quad (59)$$

Следствием данного известного в термодинамике вывода [5, 9, 10] является то, что интегрирующий делитель λ представляет собой произведение двух сомножителей, один из которых является функцией индекса состояния θ , а другой – функцией второго параметра состояния системы ψ .

Окончательно, согласно (59), получим:

$$d\theta = \exp \left(\int g_1(\theta) d\theta \right) \cdot \Phi_1(\psi) d\psi. \quad (60)$$

Рассмотрим теперь уравнение (46). Как уже указывалось ранее, одним из основных законов диалектики является закон перехода количественных изменений в качественные. Согласно этому закону изменение качества объекта происходит тогда, когда накопление количественных изменений достигает

определенного предела. Данный закон вскрывает наиболее общий механизм развития природы и общества. В свою очередь, свойство устойчивости относительных частот – одно из основных проявлений закона перехода количественных изменений в качественные, одна из наиболее характерных вероятностных закономерностей. Относительной частотой события \bar{A} называют отношение числа исходов i , в которых появилось событие \bar{A} , к общему числу проведенных испытаний m :

$$p(A) = \frac{i}{m}.$$

Величину p называют статистической вероятностью события \bar{A} .

Если число испытаний невелико, то никакой закономерности в относительных частотах не существует, они целиком зависят от случая. При значительном увеличении числа испытаний относительная частота становится иной: она подчиняется закономерности, которой и является свойство устойчивости.

Многочисленные наблюдения случайных событий показывают, что для большинства событий существует такое число p (свое для каждого события), что относительная частота при достаточно большом числе испытаний мало отличается от этого числа p .

Таким образом, свойство устойчивости частот формулируют в виде: если проводить серии испытаний, в каждой из которых число однотипных опытов достаточно велико, то относительные частоты появления данного события в различных сериях мало отличаются друг от друга, причем это отличие тем меньше, чем больше испытаний в сериях.

Если серии испытаний привязать к различным однотипным системам, входящим в один класс систем, или частям этих систем, то свойство относительных частот будет присуще всем этим системам (подсистемам). При этом, если случайное событие имеет вероятность, то она одна и та же вне зависимости от способа ее нахождения. Вероятность является объективной числовой характеристикой события, выражающей численную меру степени возможности появления этого события.

Именно в этом заключена основная особенность в оценке вероятности состояния сложной системы по сравнению с общепринятым подходом оценки вероятности состояния термодинамической системы. Термодинамические вероятности состояния системы и ее частей определяются как вероятности совместных независимых сложных событий. Практически рассматриваются разные сложные события. На этом принципе построена зависимость Больцмана вида (8). В нашем случае ведется речь об одном и том же сложном

события, характерном для изучаемого качественного признака.

Исходя из сказанного выше, следует, что уравнение (46) должно быть справедливо для однородных систем одного класса, где вероятность одинаковых событий, характерных для качественного признака, оценивается в различных сериях испытаний. Поэтому, если рассмотреть сложную систему, состоящую из двух произвольно выбранных однородных систем одного класса, то, с учетом зависимости (46) и принципа аддитивности функции состояния, получим:

$$d\varphi_1 = \frac{dW_1}{\chi_1(W_1, z_1, \dots, z_n)}; \quad d\varphi_2 = \frac{dW_2}{\chi_2(W_2, z_1, \dots, z_n)};$$

$$d\varphi = \frac{dW}{\chi(W, z_1, \dots, z_n)}; \quad d\varphi = d\varphi_1 + d\varphi_2. \quad (61)$$

При справедливости указанного выше свойства устойчивости относительных частот для произвольного процесса, который одновременно совершают системы, можно записать следующее соотношение:

$$dW \approx dW_1 \approx dW_2.$$

По аналогии с (56) – (58) получим, что интегрирующий делитель в (46) также представляет собой произведение двух сомножителей, один из которых является функцией вероятности состояния системы W , а другой – функцией второго параметра состояния φ , т.е.:

$$\chi = \Phi_2(\varphi) \cdot \exp\left(\int g_2(W)dW\right). \quad (62)$$

Далее получим, что:

$$dW = \exp\left(\int g_2(W)dW\right) \cdot \Phi_2(\varphi) \cdot d\varphi. \quad (63)$$

Таким образом, для двух способов оценки качественных изменений в системе с помощью использования комплексных показателей и вероятности появления характерных событий получены похожие зависимости вида (60) и (63).

Для первого случая по аналогии с [9] представим (60) в виде:

$$d\theta = C_1 \exp\left(\int g_1(\theta)d\theta\right) \cdot \Phi_1(\psi) \frac{d\psi}{C_1} \quad (64)$$

и примем обозначение $\Phi_1(\psi) \frac{d\psi}{C_1} = ds'$,

где s' – энтропия системы, которая определена с точностью до аддитивной постоянной.

Выделим множитель, зависящий от индекса состояния системы (θ), в следующей форме:

$$T = C_1 \cdot e^{\int g_1(\theta)d\theta}. \quad (65)$$

Эта универсальная функция может быть принята в качестве абсолютного индекса состояния системы. Неопределенная константа C_1 находится из условий нормирования этой

величины. Согласно (65) абсолютный индекс в своих измерениях не может переходить через значение, равное нулю, – в зависимости от соглашения, он либо только положительный, либо только отрицательный.

Для второго случая представим (63) в виде:

$$dW = C_2 \exp\left(\int g_2(W)dW\right) \cdot \Phi_2(\varphi) \frac{d\varphi}{C_2} \quad (66)$$

и примем обозначение $\Phi_2(\varphi) \frac{d\varphi}{C_2} = ds''$, где s''

также определим как энтропию системы.

Выделим множитель, зависящий от вероятности состояния системы, в форме

$$P = C_2 \cdot e^{\int g_2(W)dW} \quad (67)$$

и определим его как плотность абсолютной вероятности состояния системы. Неопределенная константа C_2 находится из условий нормирования функции P по энтропии s'' . Согласно (67) функция плотности абсолютной вероятности может быть только положительна или равна нулю. Нормирование функции P может осуществляться на бесконечном, полубесконечном или конечном диапазонах. Наиболее распространенные случаи нормировки представляются в виде:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(s)ds = 1; \quad \int_0^{+\infty} P(s)ds = 1.$$

В первом приближении вид функции плотности абсолютной вероятности состояния системы может быть определен из эмпирического распределения вероятностей событий, характерных для выбранного качественного признака.

Таким образом, получено, что в обоих случаях интегрирующий делитель представляется в форме произведения двух сомножителей. Первый сомножитель представляет собой универсальную функцию, связанную с индексом или вероятностью состояния системы, позволяющими оценить поведение системы на основе эмпирических данных. Второй сомножитель связан с энтропией системы s , характеризующей качественные изменения в системе.

Теперь просматривается разница между понятием пробита в уравнениях (18) – (22) и величиной энтропии s , которая введена согласно (66). Величина s может представлять собой как размерную, так и безразмерную величину, в которой размерность вводится через постоянный коэффициент C путем процедуры нормирования и установления соответствия между качествами и свойствами системы.

Таким образом, мы подошли к введению понятия энтропии через функцию состояния системы. В общем случае энтропию можно

определить как *меру качественных изменений* в системе. При этом энтропия системы s вводится как однозначная функция, связанная с характерным числом, которое ставится в соответствие каждому состоянию системы согласно (33) и устанавливается опытным путем.

В нашем случае гомеостатическая недостижимость рассматривается как системный принцип, определяющий возможность существования состояний, при которых системе присуща одна и та же качественная определенность. Однако этот постулат применительно к функции индекса или функции вероятности состояния системы в пространстве n -измерений не обладает свойством самоочевидности. Даже в термодинамике постулат адиабатической недостижимости не выступает в качестве универсального физического принципа, а принимается как гипотеза, которая апостериори подтверждается опытом [5].

В свое время Планк отмечал, что проблема адиабатической недостижимости в термодинамике никогда не была предметом специального изучения, и никто не проводил соответствующих экспериментов. Вся аксиоматика Каратеодори строится на постулате, что пфаффовы формы от n переменных для простых термодинамических систем являются голономными. Это положение в теории Каратеодори недоказуемо, однако оно принимается в качестве первого шага при построении аксиоматики термодинамики.

Естественно, что для случая нефизических систем этот вопрос еще менее изучен. Тем не менее, имеющиеся эмпирические данные для многих сложных систем указывают на то, что реальные процессы протекают в направлении перехода систем от менее вероятных состояний к более вероятным при одновременном изменении качеств и свойств. Если рассматривать эти переходы на всем временном периоде существования системы как единого целого, то движение и развитие системы во времени можно рассматривать как процесс наиболее вероятных качественных изменений в создавшихся условиях. При этом существует множество состояний, при которых наблюдается некоторая постоянная качественная определенность системы при различных свойствах, причем эмпирические данные свидетельствуют о существовании уравнений вида (37) и (38), определяющих поверхности уровня в пространстве n -измерений.

Подведем итоги данного подраздела. Из полученных результатов следует, что в случае, если эмпирические данные для сложной системы могут быть представлены в виде

уравнений (37) и (38), то при справедливости первого и второго постулата системодинамики для системы существует функция состояния, которую называют энтропией.

Таким образом, сформулируем следствие первого и второго начал системодинамики в следующем виде.

Каждая сложная система, отличающаяся подобием свойств, обладает характеристической функцией, называемой энтропией (s), которая является мерой качественных изменений в системе. С течением времени каждому состоянию системы может быть поставлена в соответствие некоторая величина Θ в виде характерного числа, которое устанавливается опытным путем и является оценкой качественного состояния системы. Энтропия и величина Θ однозначно связаны между собой зависимостью вида $ds = \lambda(\Theta) \cdot d\Theta$, где λ – интегрирующий множитель, а ds – полный дифференциал.

В качестве характерного числа Θ могут выступать вероятность состояния системы, связанная с реализацией случайных событий, которые определяют изменение характерного признака системы, или индекс состояния системы, который является мерой отклонения системы по комплексу свойств от уровня принятого за базовый. Все это дает возможность сформулировать следствия, которые изложим в следующем виде.

Необратимость процессов в природе определена необратимостью времени. Движение и развитие системы в шкале времени происходит в направлении реализации наиболее вероятных качественных изменений. В пределах одной качественно отличной ступени развития энтропия системы возрастает. При коренном качественном изменении состояния системы в процессе ее перехода к другой ступени развития энтропия системы может изменяться скачком.

Данное утверждение следует из (66), где дифференциал вероятности состояния для характерного качественного признака всегда положителен. Однако при смене качественного признака в случае перехода системы на новую ступень развития, неизбежен скачок качественных изменений в результате количественных изменений в системе. Подобный скачок связан с появлением нового приоритетного качественного признака, связанного с ранее не наблюдаемыми событиями или состояниями. Другими словами в процессе описания состояния системы осуществляется переход к новой модели вида (37) и (38).

Теперь становится ясно, почему существует множество определений энтропии

[19, 20]. В литературе встречается понятие термодинамической и информационной энтропии, энтропии как меры неупорядоченности состояния системы, меры сложности и т.д. В каждом конкретном случае комплекс качеств системы предполагает наличие различных форм энтропии.

Именно поэтому второе начало термодинамики, несмотря на свою общепризнанность, оставляет у многих исследователей неудовлетворенность. Здесь идет речь не о сомнениях, а именно о неудовлетворенности в логической ясности положений, что связано с размытостью, запутанностью и «многовекторностью» понятия энтропии в современной науке, а также отсутствием общесистемного смысла этого понятия [30].

Из данного раздела уже виден важный научный факт, при котором энтропия является характеристикой математической модели процесса в пространстве n -измерений, и существование такого факта будет обосновано далее в следующем разделе.

Законы сохранения в системодинамике

Попытаемся обобщить результаты, полученные в предыдущем разделе, рассмотрев при этом ряд проблемных вопросов.

Наиболее важный вопрос – это обоснование характера связи между качествами и свойствами системы и определение функции меры. В термодинамике для физических систем обоснование такой связи основано на эмпирическом факте установления закона сохранения энергии вида (4). Что касается систем другой природы, то данный вопрос практически не изучен, и это может быть содержанием важного для системодинамики предмета исследования.

Прежде чем перейти к рассмотрению третьего постулата системодинамики, необходимо применительно к задачам термодинамики изучить следствия результатов, полученных в предыдущем разделе.

Предположим, что существует абсолютный индекс состояния системы T (или абсолютная плотность вероятности P), который может быть представлен в виде функции *независимых* переменных z_k . Данная гипотеза применительно к произвольной сложной системе может быть принята в качестве исходного положения в случае, если имеется эмпирический факт или предположение о существовании зависимостей вида (37) или (38). Далее будем вести речь об индексе состояния системы T .

Исходя из приведенных в предыдущем разделе допущений, индекс состояния $T = T(z_1, z_2, \dots, z_n)$ в многомерном пространстве переменных z_k будет иметь вид однородной функции степени q , удовлетворяющей формуле Эйлера:

$$T = \frac{1}{q} \left(z_1 \frac{\partial T}{\partial z_1} + z_2 \frac{\partial T}{\partial z_2} + \dots + z_n \frac{\partial T}{\partial z_n} \right). \quad (68)$$

Рассмотрим некоторое опорное состояние A с параметрами $z_k = z_{k0}$ и введем безразмерные переменные $\xi_k = z_k / z_{k0}$, тогда получим (68) в виде:

$$T = \frac{1}{q} \left(\xi_1 \frac{\partial T}{\partial \xi_1} + \xi_2 \frac{\partial T}{\partial \xi_2} + \dots + \xi_n \frac{\partial T}{\partial \xi_n} \right). \quad (69)$$

Исследование уравнения (69) следует начинать с анализа решения для случая двух переменных. С этой целью рассмотрим линейное уравнение в частных производных первого порядка вида:

$$\xi_1 \frac{\partial T}{\partial \xi_1} + \xi_2 \frac{\partial T}{\partial \xi_2} = q \cdot T. \quad (70)$$

Решение уравнения (70) может быть найдено различными методами, например, методом характеристик или при помощи операционного исчисления [30, 31].

В начале для получения решения (70) используем операционное исчисление двух переменных [30]. Делая замену переменных $x = q \cdot \ln \xi_1$, $y = q \cdot \ln \xi_2$, $s = \ln T$, получим более простое уравнение:

$$\frac{\partial s}{\partial x} + \frac{\partial s}{\partial y} = 1 \quad (71)$$

при следующих граничных условиях: $s(0, y) = a(y)$, $s(x, 0) = b(x)$. Согласно [30] решение уравнения (71) имеет вид:

$$s(x, y) = \begin{cases} b(x - y) + y & \text{при } x > y \\ a(y - x) + x & \text{при } x < y \end{cases}. \quad (72)$$

Предположим, что в окрестности точки A функции $a(y)$ и $b(x)$ могут быть представлены линейными уравнениями вида:

$$b(x) = \alpha_1 \cdot x + \beta_1; \quad a(y) = \alpha_2 \cdot y + \beta_2. \quad (73)$$

Переходя к прежним переменным в уравнении (72), получим:

$$\ln T = \begin{cases} \alpha_1 \cdot q \cdot \ln \frac{z_1}{z_{10}} + (1 - \alpha_1) \cdot q \cdot \ln \frac{z_2}{z_{20}} + \beta_1; \\ \alpha_2 \cdot q \cdot \ln \frac{z_2}{z_{20}} + (1 - \alpha_2) \cdot q \cdot \ln \frac{z_1}{z_{10}} + \beta_2. \end{cases} \quad (74)$$

Первое решение справедливо при $\frac{z_1}{z_{10}} > \frac{z_2}{z_{20}}$, второе решение – при $\frac{z_1}{z_{10}} < \frac{z_2}{z_{20}}$.

Функция T в точке A должна быть аналитической, поэтому при $z_1 = z_{10}$ и $z_2 = z_{20}$

будем иметь $\beta_1 = \beta_2 = \beta$. Из равенств (74) следует, что в этом случае функция $T(z_1, z_2)$ определена и непрерывна в области $\bar{Z}(z_{10} \leq z_1 < \infty, z_{20} \leq z_2 < \infty)$ и дифференцируема при $z_1/z_{10} > z_2/z_{20}$ и $z_1/z_{10} < z_2/z_{20}$. В общем случае, функции $a(y)$ и $b(x)$ не зависят друг от друга, полученное математическое решение предусматривает такую возможность. Существование и единственность аналитического решения уравнения (71) определяется только его граничным условием ($s(0, y) = a(y)$) на оси $x = 0$ или граничным условием ($s(x, 0) = b(x)$) на оси $y = 0$. Однако задание обеих функций $a(y)$ и $b(x)$ не противоречит данному факту, так как согласно (74) получается решение, которое не является аналитическим вдоль прямой $z_1/z_{10} = z_2/z_{20}$.

Если рассматривать уравнение (70) применительно к реальным системам, то соответствующее решение (74) на указанной прямой должно обладать свойством непрерывности.

Таким образом, общее решение (74) можно представить в виде:

$$T = \begin{cases} C \left(\frac{z_1}{z_{10}} \right)^{\alpha_1 \cdot q} \cdot \left(\frac{z_2}{z_{20}} \right)^{(1-\alpha_1) \cdot q} & \text{при } \frac{z_1}{z_{10}} > \frac{z_2}{z_{20}} \\ C \left(\frac{z_2}{z_{20}} \right)^{\alpha_2 \cdot q} \cdot \left(\frac{z_1}{z_{10}} \right)^{(1-\alpha_2) \cdot q} & \text{при } \frac{z_1}{z_{10}} < \frac{z_2}{z_{20}} \end{cases} \quad (75)$$

где $C = \exp(\beta)$ – константа.

Согласно (75) решение уравнения (68) для случая двух переменных $T = T(z_1, z_2)$ представляется однородной функцией q -ого порядка, причем из условия непрерывности этого решения следует, что $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$.

Рассмотрим полученные общие зависимости применительно к термодинамическим свойствам идеального газа. В этом случае $z_1 = \nu$ и $z_2 = p$, где ν – удельный объем и p – давление. Согласно эмпирическим законам Гей-Люссака и Шарля можно записать, что:

$$\frac{\nu}{\nu_0} = 1 + a \cdot \theta = a \cdot T; \quad p = \text{const}; \quad (76)$$

$$\frac{p}{p_0} = 1 + a \cdot \theta = a \cdot T; \quad \nu = \text{const}, \quad (77)$$

где θ – эмпирическая температура, $T = \theta + 1/a$ – абсолютная температура, а величина a по существующим данным для идеального газа равна $a = 0,003661$. В ранее принятых обозначениях имеем $z_1/z_{10} = a \cdot T$; $z_2/z_{20} = a \cdot T$ или $a(y) = \ln \frac{z_2}{z_{20}} + \ln \frac{1}{a}$; $b(x) = \ln \frac{z_1}{z_{10}} + \ln \frac{1}{a}$,

откуда $\beta = \ln \frac{1}{a}$; $q \cdot \alpha_1 = q \cdot \alpha_2 = 1$; $\alpha_1 = \frac{1}{2}$; $\alpha_2 = \frac{1}{2}$; $q = 2$. Таким образом, решение (75) для этого случая будет иметь вид:

$$T = \frac{1}{a} \cdot \frac{p \cdot \nu}{p_0 \cdot \nu_0}. \quad (78)$$

Применяя обозначения $R = a \cdot p_0 \cdot \nu_0$, получаем известное уравнение Клапейрона $p \cdot \nu = R \cdot T$ как следствие решения исходного уравнения (68), определяющего подобие свойств системы в случае двух переменных.

Таким образом, из условия подобия свойств может быть восстановлен абсолютный индекс состояния системы в виде интегральной гиперповерхности $T = T(z_1, z_2, \dots, z_n)$. Однако при этом необходимо иметь экспериментальные данные о поведении системы на границах изучаемого пространства координат $\Psi\{z_1, \dots, z_n\}$. В случае линейной зависимости индекса от параметров системы на границах пространства координат для двух переменных решение представляется мультипликативной функцией вида (78).

Для социально-экономических и экологических систем, в отличие от термодинамических, поведение системы на границах пространства Ψ , заданное уравнениями вида (76) – (77), обычно не известно. Имеются лишь экспериментальные (статистические) данные об изменении состояния системы в прошлом, при этом свойства систем могут быть представлены в виде параметрических зависимостей от времени. Известно, что для получения решений в этом случае может быть использован метод характеристик [31].

Интегральная поверхность уравнения (70) определена в пространстве $\Psi\{\xi_1, \xi_2, T\}$, при этом величины $\frac{\xi_1}{q}$, $\frac{\xi_2}{q}$ и T формируют некоторое поле направлений в этом пространстве. Другими словами в каждой фиксированной точке пространства $\Psi\{\xi_1, \xi_2, T\}$ имеется направление, направляющие косинусы которого пропорциональны $\frac{\xi_1}{q}$, $\frac{\xi_2}{q}$ и T . Интегральные кривые, соответствующие этому полю направлений, являются характеристиками уравнения (70) и определяются системой обыкновенных дифференциальных уравнений [31]:

$$q \cdot \frac{d\xi_1}{\xi_1} = q \cdot \frac{d\xi_2}{\xi_2} = \frac{dT}{T} = ds. \quad (79)$$

Если ввести параметр s , изменяющийся вдоль характеристической кривой, то дифференциальные уравнения (79) примут вид:

$$q \cdot \frac{d\xi_1}{ds} = \xi_1; \quad q \cdot \frac{d\xi_2}{ds} = \xi_2; \quad \frac{dT}{ds} = T. \quad (80)$$

Предположим, что существует некоторая функция воздействия на систему Q , однозначно связанная с абсолютным индексом состояния системы T эмпирической зависимостью:

$$\frac{dQ}{dT} = c_n, \quad (81)$$

где c_n – непрерывная функция. При этом значение величины c_n однозначно определено направлением единичного вектора \vec{n} в произвольной точке A .

В термодинамике величина c_n является теплоемкостью, а функция Q характеризует количество теплоты, которое передается в некотором направлении \vec{n} пространства $\{\xi_1, \xi_2, T\}$ при изменении температуры на величину dT в этом направлении. Известно, что теплоемкость c_n определяется эмпирически и зависит от характера процесса.

Согласно (81) в окрестности точки A имеем:

$$\frac{\partial Q}{\partial z_1} = c_1 \frac{\partial T}{\partial z_1}; \quad \frac{\partial Q}{\partial z_2} = c_2 \frac{\partial T}{\partial z_2} \quad (82)$$

и уравнение (70) можно представить в виде:

$$\frac{\xi_1}{c_1} \cdot \frac{\partial Q}{\partial \xi_1} + \frac{\xi_2}{c_2} \cdot \frac{\partial Q}{\partial \xi_2} = q \cdot T. \quad (83)$$

Характеристики уравнения (83) определяются системой обыкновенных дифференциальных уравнений вида:

$$q \cdot c_1 \frac{d\xi_1}{\xi_1} = q \cdot c_2 \frac{d\xi_2}{\xi_2} = \frac{dQ}{T} = ds. \quad (84)$$

Поэтому, если ввести переменную $ds = dQ/T$, то это уравнение будет иметь вид:

$$\frac{\partial s}{\partial x} + \frac{\partial s}{\partial y} = 1. \quad (85)$$

Здесь в качестве величин x, y принято $x = q \cdot c_1 \cdot \ln \xi_1$; $y = q \cdot c_2 \cdot \ln \xi_2$. Обратим внимание, что правая часть уравнения (84) представляет собой выражение для энтропии, принятое в термодинамике.

Зададим следующие граничные условия $s(0, y) = f(y)$ и $s(x, 0) = \varphi(x)$. Согласно [30] решение уравнения (85) представляется в виде уравнений:

$$s = \begin{cases} \varphi(x-y) + y & \text{при } x > y \\ f(y-x) + x & \text{при } x < y \end{cases}. \quad (86)$$

Предположим, что в окрестности точки A функции $f(y)$ и $\varphi(x)$ имеют вид:

$$\varphi(x) = \alpha_1 \cdot x + \beta_1; \quad f(y) = \alpha_2 \cdot y + \beta_2, \quad (87)$$

где коэффициенты α_i и β_i отличны от аналогичных коэффициентов в (73).

Тогда по аналогии с уравнениями (74) получим:

$$s = \begin{cases} \alpha_1 \cdot q \cdot c_1 \ln \frac{z_1}{z_{10}} + (1 - \alpha_1) \cdot q \cdot c_2 \ln \frac{z_2}{z_{20}} + \beta_1 \\ \alpha_2 \cdot q \cdot c_2 \ln \frac{z_2}{z_{20}} + (1 - \alpha_2) \cdot q \cdot c_1 \ln \frac{z_1}{z_{10}} + \beta_2 \end{cases} \quad (88)$$

Первое решение справедливо при $c_1 \ln \frac{z_1}{z_{10}} > c_2 \ln \frac{z_2}{z_{20}}$, второе решение – при $c_1 \ln \frac{z_1}{z_{10}} < c_2 \ln \frac{z_2}{z_{20}}$.

Так как общее решение однозначно определено начальными значениями z_1, z_2, s , то из условия $s(z_{10}, z_{20}) = s_0$ получим $\beta_1 = \beta_2 = s_0$.

Будем считать, что решение (88) на интегральной поверхности представлено одной зависимостью при любых z_1 и z_2 , тогда $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$ и данное решение имеет вид:

$$s - s_0 = \alpha_1 \cdot c_1 \cdot q \cdot \ln \frac{z_1}{z_{10}} + \alpha_2 \cdot c_2 \cdot q \cdot \ln \frac{z_2}{z_{20}}. \quad (89)$$

Для термодинамических процессов идеального газа $z_1 = \nu$; $z_2 = p$, а для изохорного и изобарного процессов соответственно будем иметь [7]:

$$s - s_0 = c_p \cdot \ln \frac{\nu}{\nu_0}; \quad s - s_0 = c_v \cdot \ln \frac{p}{p_0}, \quad (90)$$

где s – энтропия идеального газа, c_p – теплоемкость при постоянном давлении, c_v – теплоемкость при постоянном объеме.

В ранее принятых обозначениях имеем:

$$f(y) = q \cdot c_2 \cdot \alpha_2 \cdot \ln \frac{z_2}{z_{20}}; \quad \varphi(x) = q \cdot c_1 \cdot \alpha_1 \cdot \ln \frac{z_1}{z_{10}};$$

$$c_1 = c_p; \quad c_2 = c_v; \quad q \cdot \alpha_1 = q \cdot \alpha_2 = 1,$$

откуда $\alpha_1 = 1/2$ и $\alpha_2 = 1/2$, $q = 2$ и

$$s - s_0 = c_p \cdot \ln \frac{\nu}{\nu_0} + c_v \cdot \ln \frac{p}{p_0}. \quad (91)$$

Уравнение (91), которое получено методом операционного исчисления [30], представляет собой уравнение Пуассона для адиабаты идеального газа в переменных p, ν [7].

Таким образом, энтропия определена в виде параметра характеристики исходного уравнения (83). При этом согласно (84) энтропия термодинамической системы представляет собой длину дуги векторной линии, в связи с чем она обладает свойством аддитивности [29].

Следует сказать, что метод характеристик, в отличие от операционного метода, значительно быстрее дает необходимый результат: из соотношения (84) вытекает математическая формулировка второго закона термодинамики в виде $dQ = T \cdot ds$. В свою очередь, из системы уравнений (84) при $q = 2$ сразу получаем известное соотношение для термодинамических

систем:

$$ds = \frac{dQ}{T} = c_p \frac{dv}{v} + c_v \frac{dp}{p}. \quad (92)$$

Из этой зависимости для поверхности

$T = \frac{p \cdot v}{R}$ имеем уравнение Пфаффа вида:

$$dQ = \frac{c_p}{R} p \cdot dv + \frac{c_v}{R} v \cdot dp. \quad (93)$$

Теперь представим (93) в виде уравнения первого закона термодинамики:

$$dQ = du + p \cdot dv, \quad (94)$$

$$\text{где } du = \frac{c_p - R}{R} \cdot p \cdot dv + \frac{c_v}{R} \cdot v \cdot dp.$$

Применяя к величине du признак Эйлера, можно показать, что du является полным дифференциалом при условии: $c_p - c_v = R$. Последнее соотношение представляет собой известное в термодинамике уравнение Майера для идеального газа, при справедливости которого величина du равна:

$$du = \frac{c_v}{R} d(p \cdot v) = c_v \cdot dT. \quad (95)$$

Дадим характеристику любого процесса, протекающего в окрестности точки A . Из уравнения (84) с учетом (81) имеем следующий вид характеристических кривых для уравнения (83) в координатах $\{\xi_1, \xi_2, T\}$:

$$q \cdot c_1 \frac{d\xi_1}{\xi_1} = q \cdot c_2 \frac{d\xi_2}{\xi_2} = c_n \cdot \frac{dT}{T} = ds. \quad (96)$$

Далее из уравнения (78) для поверхности идеального газа получим, что

$$\frac{dT}{T} = \frac{dp}{p} + \frac{dv}{v}. \quad (97)$$

Введем следующие обозначения:

$$k = \frac{c_1}{c_2} = \frac{c_p}{c_v}; \quad n = \frac{c_n - c_1}{c_n - c_2} = \frac{c_n - c_p}{c_n - c_v}, \text{ тогда}$$

из (92) и (96) с учетом (97) при $q = 2$ имеем:

$$n \cdot \frac{dv}{v} = -\frac{dp}{p}, \text{ откуда } p \cdot v^n = const. \quad (98)$$

В результате из дифференциальных уравнений векторных линий получено уравнение политропы, в котором физический смысл показателя политропы n связан с полем теплоемкостей. При этом приведенное выше обозначение для величины n , можно преобразовать в виде:

$$c_n = c_v \frac{n - k}{n - 1}. \quad (99)$$

Данное уравнение представляет собой известное в термодинамике соотношение для теплоемкостей.

Известно, что вид адиабатного процесса определяется уравнением (92) при $ds = 0$. В этом случае в уравнении (98) показатель $n = k$.

Используя уравнения (92) – (99), в дальнейшем легко получить все основные соотношения термодинамики для любых видов процессов.

Таким образом, на основе постулата о подобии свойств и эмпирических зависимостей (76)–(77), (81) получены основные закономерности термодинамики, в том числе и первый закон термодинамики вида (94) применительно к идеальному газу.

Из приведенных выше результатов можно сделать два вывода. Первый вывод достаточно важен: термодинамика по форме представления математически может быть сведена к геометрии. В этом плане полученные результаты укладываются в программу геометродинамики Дж. Уиллера, которая гласит: «Физика есть геометрия». Вторым выводом важен для системной динамики, и он указывает на то, что полученные результаты свойственны любым сложным системам, для которых возможно эмпирически установить факт существования индекса состояния или вероятности состояния системы как функции двух переменных $\theta = F(z_1, z_2)$ или $W = W(z_1, z_2)$.

Исходя из этого, дадим геометрическую интерпретацию полученных результатов для трех независимых переменных, после чего перейдем к общему случаю. Рассмотрим трехмерное пространство $\Psi\{\xi_1, \xi_2, \xi_3\}$, где характеристические кривые (79) определяют векторное поле касательных к векторным линиям уравнения (70). Данное поле задается векторной величиной \vec{A} . В каждой точке пространства кроме указанного поля существует также векторное поле \vec{B} , определяемое векторными линиями уравнения (83) вида (96).

Если при этом ввести обозначения $\xi_3 = \frac{T}{T_0}$,

$T_0 = \frac{1}{a}$, $k_T = \frac{c_n}{c_2}$, то векторные поля $\vec{A}(M)$ и

$\vec{B}(M)$ для каждой точки M можно представить в виде:

$$\vec{A} = \frac{\xi_1}{q} \vec{i} + \frac{\xi_2}{q} \vec{j} + \xi_3 \cdot \vec{k}; \quad \vec{B} = \frac{\xi_1}{q \cdot k} \vec{i} + \frac{\xi_2}{q} \vec{j} + \frac{\xi_3}{k_T} \vec{k}.$$

Можно показать, что соответствующее векторное поле \vec{A} является потенциальным, так как вихрь поля равен нулю ($rot \vec{A} = 0$), поэтому возникает задача о нахождении семейства поверхностей $U_a = U_a(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = const$, которые ортогональны векторным линиям. Как известно, искомые поверхности уровня U_a удовлетворяют уравнению Пфаффа

$$\frac{\xi_1}{q} \cdot d\xi_1 + \frac{\xi_2}{q} \cdot d\xi_2 + \xi_3 \cdot d\xi_3 = 0, \quad (100)$$

и в случае потенциального поля определяются через криволинейный интеграл вида:

$$U_a = \int_{\{1,1,1\}}^{\{\xi_1, \xi_2, \xi_3\}} \frac{\xi_1}{q} \cdot d\xi_1 + \frac{\xi_2}{q} \cdot d\xi_2 + \xi_3 \cdot d\xi_3. \quad (101)$$

Криволинейный интеграл берется по любому пути между выбранной фиксированной точкой $\{1,1,1\}$ и точкой с переменными координатами $\{\xi_1, \xi_2, \xi_3\}$.

Интегрируя соотношение (101), например, по ломаной линии, состоящей из прямолинейных отрезков параллельных осям координат, и принимая, что $U_{a0}(1,1,1) = 0$, получим:

$$U_a = \frac{1}{2} \left(\frac{\xi_1^2}{q} + \frac{\xi_2^2}{q} + \xi_3^2 \right) - \frac{2+q}{2q}, \quad (102)$$

откуда $\vec{A} = \text{grad } U_a$.

Векторное поле \vec{B} также является потенциальным ($\text{rot } \vec{B} = 0$), а соответствующее уравнение Пфаффа имеет вид:

$$\frac{\xi_1}{q \cdot k} \cdot d\xi_1 + \frac{\xi_2}{q} \cdot d\xi_2 + \frac{\xi_3}{k_T} \cdot d\xi_3 = 0. \quad (103)$$

В случае потенциального поля \vec{B} поверхности уровня U_b определяются через соответствующий криволинейный интеграл и имеют вид:

$$U_b = \frac{1}{2} \left(\frac{\xi_1^2}{q \cdot k} + \frac{\xi_2^2}{q} + \frac{\xi_3^2}{k_T} \right) - \frac{k_T + k k_T + q k}{2 q k k_T}. \quad (104)$$

Для скалярной величины U_b векторная величина \vec{B} служит градиентом $\vec{B} = \text{grad } U_b$.

Таким образом, для соответствующего векторного поля энтропия s и потенциал U представляют собой соответственно векторную линию и поверхность уровня в трехмерном пространстве $\Psi\{\xi_1, \xi_2, \xi_3\}$, т.е. на их основе может быть построена ортогональная криволинейная система координат.

Обратим внимание, что потенциал U_b представляет собой не что иное, как безразмерную функцию воздействия на систему, а дифференциал этой функции определяет количество воздействия, т.е. $dU_b = \frac{dQ}{c_2 \cdot T_0} = k_T \cdot d\xi_3$.

Покажем, что уравнение сохранения энергии в термодинамике вида (94) является следствием существования дифференциальных уравнений векторных линий. Для этого представим уравнение (94) в безразмерных координатах относительно ξ_1, ξ_2, ξ_3 в следующем виде:

$$du' = \xi_3 \cdot ds' - \alpha \cdot \xi_2 \cdot d\xi_1, \quad (105)$$

где $du' = du/(c_v \cdot T_0)$ – некоторый безразмерный полный дифференциал энергии; $ds' = ds/c_v$ – безразмерная энтропия системы;

$\alpha = p_0 \cdot v_0 / (T_0 \cdot c_v)$ – константа.

Рассмотрим вначале случай векторного поля \vec{A} и интегральной поверхности вида (78), которую представим в безразмерном виде $\xi_3 = \xi_1 \cdot \xi_2$. Учитывая, что в этом случае

$$2 \frac{d\xi_1}{\xi_1} = 2 \frac{d\xi_2}{\xi_2} = \frac{d\xi_3}{\xi_3} = ds', \quad (106)$$

получим $du' = (1 - \alpha) \cdot \xi_2 \cdot d\xi_1 + \xi_1 \cdot d\xi_2$.

Согласно признаку Эйлера величина du' будет полным дифференциалом, если $\alpha = 0$. Откуда $du' = d\xi_3$ и имеем из (105) уравнение векторной линии (106): $ds' = d\xi_3 / \xi_3$.

Рассмотрим теперь случай векторного поля \vec{B} и поверхности $\xi_3 = \xi_1 \cdot \xi_2$. Учитывая, что в векторные линии поля \vec{B} определяются уравнениями

$$2 \cdot k \frac{d\xi_1}{\xi_1} = 2 \frac{d\xi_2}{\xi_2} = k_T \frac{d\xi_3}{\xi_3} = ds', \quad (107)$$

получим $du' = (k - \alpha) \cdot \xi_2 \cdot d\xi_1 + \xi_1 \cdot d\xi_2$ и, по аналогии с предыдущим выводом, $\alpha = k - 1$, откуда $\frac{R}{c_v} = \frac{c_p}{c_v} - 1$. В этом случае также

$du' = d\xi_3$ при $R = c_p - c_v$. В результате уравнение сохранения энергии (105) запишем в таком виде: $du' = \xi_3 \cdot ds' - (k - 1) \cdot \xi_2 \cdot d\xi_1$.

Рассмотрим теперь общий случай векторного поля \vec{B} и поверхности $\xi_3 = F(\xi_1, \xi_2)$. Для векторных линий (107) из уравнения (105) получим

$$du' = \left(k \frac{F(\xi_1, \xi_2)}{\xi_1} - \alpha \cdot \xi_2 \right) \cdot d\xi_1 + \frac{F(\xi_1, \xi_2)}{\xi_2} \cdot d\xi_2.$$

Согласно признаку Эйлера величина du' будет полным дифференциалом, если

$$\alpha = \frac{k}{\xi_1} \frac{\partial F}{\partial \xi_2} - \frac{1}{\xi_2} \frac{\partial F}{\partial \xi_1}. \quad (108)$$

Можно показать из (107), что интегральной поверхностью векторного поля \vec{B} является поверхность $\xi_3 = \frac{k}{\xi_1^{k_T}} \cdot \frac{1}{\xi_2^{k_T}}$. В этом случае $\alpha = 0$, $du' = k_T \cdot d\xi_3$ и имеем из (105) уравнение векторной линии (107): $ds' = k_T \cdot d\xi_3 / \xi_3$.

Таким образом, геометрически уравнение (105) определяет для векторных полей \vec{A} и \vec{B} семейство линий, ортогональных векторным линиям и принадлежащих поверхностям уровня.

Примеры из термодинамики позволяют наглядно продемонстрировать, как на основе закономерности (68) можно получить основные соотношения, связывающие переменные между собой. Отметим, что при определении индекса состояния системы не использовались другие

допущения кроме постулата подобия свойств при совершении в окрестности состояния A любых возможных квазистатических процессов. Поэтому в общем случае индекс $T = T(z_1, z_2, \dots, z_n)$ может быть найден из решения неоднородного дифференциального уравнения в частных производных с независимыми переменными [31].

Найдем решение неоднородного линейного уравнения первого порядка вида (68). Данное уравнение интегрируется путем сведения его к линейному однородному уравнению.

Система уравнений

$$\frac{dz_1}{z_1} = \frac{dz_2}{z_2} = \dots = \frac{dz_n}{z_n} = \frac{dT}{q \cdot T} = ds, \quad (109)$$

имеет следующие n первых независимых интегралов:

$$\frac{z_1}{z_n} = a_1, \frac{z_2}{z_n} = a_2, \dots, \frac{z_{n-1}}{z_n} = a_{n-1}, \frac{T}{q \cdot z_n^q} = a_n.$$

Здесь s – некоторый вещественный параметр.

В пространстве с координатами z_1, z_2, \dots, z_n эта система интегралов определяет n -параметрическое семейство линий, называемых характеристиками уравнения (68), при этом общее решение уравнения (68) определяется из уравнения

$$\Phi\left(\frac{z_1}{z_n}, \frac{z_2}{z_n}, \dots, \frac{z_{n-1}}{z_n}, \frac{T}{z_n^q}\right) = 0, \text{ откуда имеем}$$

$$T = z_n^q \cdot \Psi\left(\frac{z_1}{z_n}, \frac{z_2}{z_n}, \dots, \frac{z_{n-1}}{z_n}\right). \quad (110)$$

То есть решением является произвольная однородная функция q -й степени однородности, причем данная функция может использоваться в качестве первого приближения функции состояния системы независимо от способа ее оценки – как по вероятности появления характерных событий, так и путем измерения количественных показателей, комплексно характеризующих качественное состояние системы.

Исходя из приведенных выше результатов, можно предложить следующий способ построения моделей сложных систем, в том числе социально-экономической или экологической природы.

На первом этапе используется эмпирический факт или делается предположение о существовании индекса состояния $T = T(z_1, z_2, \dots, z_n)$ или вероятности состояния системы $W = W(z_1, z_2, \dots, z_n)$ в виде однородной функции переменных z_k . Предлагаются методы определения или измерения этих величин, а также проводится построение оценочных шкал. Предполагается, что в квазистатическом процессе любые изменения свойств социально-экономической или экологической системы подобны. В этом случае в первом приближении будет справедливо представление функции

состояния системы в виде решения неоднородного линейного уравнения первого порядка вида (68). Далее переменные z_k по опытным данным задаются в параметрическом виде относительно времени, после чего используется один из методов решения уравнения (68). Для построения параметрических уравнений и изучения изменения состояния системы во времени необходимо формирование обширных баз данных социально-экономических или экологических показателей. Адекватность и точность решения уравнения (68) оценивается путем сравнения прогнозных и опытных данных. На этой основе проверяется исходная гипотеза о существовании функции состояния системы в виде одного из решений уравнения (68). Точность модели может быть повышена путем применения более сложных уравнений, использующих решения (68) в качестве первого приближения по аналогии с тем, как это делается в термодинамике при построении уравнений состояния [15].

Таким образом, мы установили, что энтропия системы, которая является характеристической функцией состояния, может выступать мерой качественных изменений в системе. Представим потенциал функции состояния системы ($U = const$) как поверхность уровня, определяющую постоянное значение энтропии системы при изменении ее свойств. В данном случае потенциал U вводится как функция состояния, связанная с законом сохранения в системе. Потенциал может быть как безразмерным, так и размерным. В последнем случае единица измерения определяется принятой системой единиц измерения свойств. В термодинамике в качестве потенциала функции состояния системы выступает энергия в виде теплоты.

Подытожим все сказанное выше. Будем считать, что изменение энтропии определяет существование воздействий на систему, приводящих к изменению ее качественного состояния. В свою очередь, изменение параметров свойств системы на потенциальной поверхности при постоянной энтропии ($s = const$) определяет существование воздействий, приводящих к изменению только количественного состояния системы.

Теперь мы можем подойти к введению понятия *функции меры* через существование семейства функциональных соотношений, характеризующих законы сохранения и позволяющих обосновать характер связи между качественными и количественными изменениями в системе. Для этого сформулируем следствие третьего начала системодинамики в следующем виде.

Каждая сложная система, отличающаяся подобием свойств, обладает функцией состояния, называемой потенциалом

(U), которая характеризует при постоянной энтропии количественные изменения в системе. Энтропия системы и ее потенциал как естественные координаты однозначно связаны между собой через функцию меры, представляющую собой семейство функциональных соотношений, которые характеризуют законы сохранения в системе.

Таким образом, любое качественное состояние сложной системы однозначно определяется двумя функциями состояния – энтропией (s) и потенциалом (U). В первом случае имеем векторную линию, а во втором случае – потенциальную поверхность. Функциональная связь между свойствами и качествами системы характеризует класс сложности системы и определяет узловую линию мер. Задание местоположения точки на поверхности уровня требует введения координатных линий, принадлежащих этой поверхности.

Дадим для большей наглядности геометрическую интерпретацию связи между качественными и количественными изменениями в системе в случае трехмерного пространства переменных $\Psi\{\xi_1, \xi_2, \xi_3\}$. Можно представить, что в данном пространстве имеется векторное поле \vec{B} касательных к векторным линиям и ортогональных им поверхностей уровня. В пространстве имеется также множество интегральных поверхностей, покрытых семейством характеристик, а также может быть расположено множество произвольных поверхностей, заданных в явном $\xi_3 = F_m(\xi_1, \xi_2)$ или неявном $\Phi_k(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = 0$ виде и не ортогональных векторным линиям поля.

Для каждого состояния системы, представляющего собой точку A в трехмерном пространстве координат $\Psi\{\xi_1, \xi_2, \xi_3\}$, которая, в свою очередь, может принадлежать одной из поверхностей, энтропия s' является характеристикой, а поверхность уровня – потенциальной поверхностью U . Поэтому через произвольную точку A могут быть проведены координатные линии, пересекающиеся под прямым углом и принадлежащие потенциальной поверхности U . Вместе с энтропией s' данная система координатных линий $\{u', i'\}$ является криволинейной ортогональной системой координат.

Выберем координатные линии $\{u', i'\}$ на потенциальной поверхности таким образом, чтобы они были образованы пересечением данной поверхности с плоскостями, параллельными координатным плоскостям $\xi_2 O \xi_3$ и $\xi_1 O \xi_3$. На каждой из этих плоскостей координаты ξ_1 и ξ_2

сохраняют постоянное значение. В этом случае через произвольную точку A проходит координатная линия u' , которая образуется пересечением потенциальной поверхности U и плоскости $\xi_1 = const$, и координатная линия i' , образованная пересечением поверхности U и плоскости $\xi_2 = const$. В термодинамике координатная линия u' представляет собой энтропию, а координатная линия i' – энтальпию.

Таким образом, любые перемещения фигуративной точки в окрестности состояния A могут быть описаны с помощью изменения криволинейных координат s' , u' и i' . При этом координатные линии s' задаются системой уравнений (107), а зависимости для линий u' и i' в дифференциальной форме имеют вид:

$$du' = \frac{\xi_2}{q} \cdot d\xi_2 + \frac{\xi_3}{k_T} \cdot d\xi_3, \quad (111)$$

$$di' = \frac{\xi_1}{q \cdot k} \cdot d\xi_1 + \frac{\xi_3}{k_T} \cdot d\xi_3. \quad (112)$$

Из соотношений (111) – (112) имеем:

$$u' = \frac{1}{2} \left(\frac{\xi_2^2}{q} + \frac{\xi_3^2}{k_T} \right) - \frac{k_T + q}{2 \cdot q \cdot k_T}, \quad (113)$$

$$i' = \frac{1}{2} \left(\frac{\xi_1^2}{q \cdot k} + \frac{\xi_3^2}{k_T} \right) - \frac{k_T + q \cdot k}{2 \cdot q \cdot k \cdot k_T}. \quad (114)$$

Согласно уравнений (104), (111) – (112) при значении $\xi_1 = const$ получим $dU = du'$, $k_T = 1$, $ds' = d\xi_3/\xi_3$ и $dU = d\xi_3$. В свою очередь при значении $\xi_2 = const$ будем иметь $dU = di'$, $k_T = k$, $ds' = k \cdot d\xi_3/\xi_3$ и $dU = k \cdot d\xi_3$. Из системы (107) при $\xi_1 = const$ получим $\xi_2/\xi_3 = const$, а при $\xi_2 = const$ имеем $\xi_1/\xi_3 = const$. Эти выражения совпадают с известными термодинамическими соотношениями для изохорного и изобарного процессов, если считать, что $z_1 = v$, а $z_2 = p$. Для поверхностей уровня связь между безразмерными координатами u' и i' может быть задана в виде:

$$di' = du' + \frac{1}{2 \cdot q} d \left(\frac{\xi_1^2}{k} - \xi_2^2 \right). \quad (115)$$

Рассмотрим теперь процесс, при котором $\xi_3 = const$. В этом случае $d\xi_3 = 0$, $dU = \xi_3 \cdot ds'$, $k_T = \pm \infty$, $ds' = k \cdot (d\xi_1/\xi_1) + d\xi_2/\xi_2$. В частном случае для поверхности $\xi_3 = \xi_1 \cdot \xi_2$ имеем $dU = k \cdot \xi_2 \cdot d\xi_1 + \xi_1 \cdot d\xi_2$. Добавим и вычтем из этого выражения величину $\alpha \cdot \xi_2 \cdot d\xi_1$, в результате получим, что при $k - \alpha = 1$ изменение потенциала на этой поверхности при $\xi_3 = const$ равно $dU = \alpha \cdot \xi_2 \cdot d\xi_1$, т.к. $d(\xi_1 \cdot \xi_2) = 0$. В

результате получаем известные термодинамические зависимости для идеального газа, описывающие изотермические процессы.

В более общем случае для других видов поверхностей (т.к. $\xi_3 = const$) можно записать, что $dU = dl$, где l представляет собой некоторую функцию координат ξ_1 и ξ_2 ($l = L(\xi_1, \xi_2)$). В термодинамике функция l определена как работа системы над окружающей средой. При этом работа зависит от вида функции $\xi_3 = F(\xi_1, \xi_2)$, расположенной в пространстве Ψ .

Теперь термодинамическую форму закона сохранения энергии можно получить вычислением криволинейного интеграла для потенциальной функции U по любому пути между выбранной фиксированной точкой A с координатами $\{\xi_1, \xi_2, \xi_3\}$ и точкой C с координатами $\{\xi_1 + d\xi_1, \xi_2 + d\xi_2, \xi_3 + d\xi_3\}$. Между этими точками изменение потенциала по кратчайшему пути, который является векторной линией, имеет вид $dU = \xi_3 \cdot ds'$. В свою очередь это же изменение потенциала по пути, когда линия интегрирования ε лежит в плоскостях $\xi_1 = const$ и $\xi_3 = const$, может быть представлено в виде $dU = dU' + dU'' = du' + dl_{u'}$. Если же взять путь, когда линия ε лежит в плоскостях $\xi_2 = const$ и $\xi_3 = const$, то $dU = dU' + dU'' = di' + dl_{i'}$.

Из приведенных соотношений для случая поверхности $\xi_3 = \xi_1 \cdot \xi_2$ (уравнение состояния идеального газа) получим известные зависимости, определяющие в безразмерном виде количественную форму закона сохранения энергии:

$$du' = \xi_3 \cdot ds' - \alpha \cdot \xi_2 \cdot d\xi_1, \quad (116)$$

$$di' = \xi_3 \cdot ds' + \alpha \cdot \xi_1 \cdot d\xi_2, \quad (117)$$

где $\alpha = p_0 \cdot v_0 / (T_0 \cdot c_v)$ – константа, характеризующая некоторое опорное состояние системы.

Связь между безразмерными координатами u' и i' на поверхности $\xi_3 = \xi_1 \cdot \xi_2$ имеет вид:

$$di' = du' + \alpha \cdot d(\xi_1 \cdot \xi_2). \quad (118)$$

Уравнение (118) представляет собой в дифференциальной форме известное в термодинамике соотношение, связывающее энтальпию и энергию в размерном виде: $i = u + p \cdot v$.

Таким образом, в термодинамике уравнение сохранения энергии является одной из форм представления уравнения Пфаффа для потенциального векторного поля через энтропию и координатные линии поверхностей уровня.

Обобщая все сказанное выше, можно утверждать, что в любой окрестности произвольно заданного состояния A функция меры может быть выражена в виде линейных зависимостей вида:

$$dU = \xi_3 \cdot ds' = du' + \delta l_{u'}, \quad (119)$$

$$dU = \xi_3 \cdot ds' = di' + \delta l_{i'}, \quad (120)$$

где $\xi_3 = F(\xi_1, \xi_2)$, $l_{u'} = L_u(\xi_1, \xi_2)$, $l_{i'} = L_i(\xi_1, \xi_2)$ – некоторые функции параметров ξ_1 и ξ_2 для заданной сложной системы, а ds' , du' , di' – полные дифференциалы.

В свое время Каратеодори для простых термодинамических систем сделал попытку теоретического обоснования связи (119), используя экспериментальные зависимости для температуры [9]. Им было показано, что с помощью обратимых процессов внутренняя энергия определяется с точностью до линейной функции энтропии.

В дальнейшем будем придерживаться определений, принятых в термодинамике. Нам необходимо установить вид функции меры для многих переменных. Для этого воспользуемся подходом, предложенным в свое время Гухманом [5], интерпретируя его для наших условий. Суть идеи заключается в существовании единообразной формы уравнения сохранения.

Будем считать, что в процессе взаимодействия сложной системы с окружающей средой в системе возникают изменения. Данные изменения могут иметь количественный или качественный характер. В случае, если потенциал системы не изменяется, то взаимодействие приводит только к количественным изменениям свойств в системе без изменения качественных характеристик. Энтропия системы при этом остается постоянной. При изменении потенциала системы взаимодействие переходит в воздействие, которое выражается в изменении качественной и количественной определенности системы. Результатом этого воздействия при количественной характеристике состояния системы является изменение потенциала и энтропии системы. Количественно интенсивность воздействия выражается зависимостью изменения потенциала от энтропии системы в виде функции меры. Теперь итог изложенного можно сформулировать следующим образом.

Для любой сложной системы, отличающейся подобием свойств, всякое воздействие имеет своим необходимым следствием изменение потенциала и энтропии системы. При этом в любых процессах изменение потенциала (dU) линейно связано с изменением энтропии системы (ds') через функцию меры $dU = T \cdot ds'$.

В общем случае функция меры определяет один из законов сохранения (законы сохранения энергии, массы, стоимости и т.д.).

Предположим, что в пространстве n –

измерений существует некоторая функция воздействия на систему Q , однозначно связанная с изменением потенциала системы $dU = dQ$. Будем считать, что количество воздействия dQ в первом приближении линейно зависит от изменения абсолютного индекса системы dT :

$$\frac{dQ}{dT} = \alpha_n, \quad (121)$$

где α_n – непрерывная функция многих переменных, которая определяется исходя из направления единичного вектора \vec{n} в произвольной n -мерной точке A .

Согласно (121) в окрестности точки A имеем:

$$\frac{\partial Q}{\partial \xi_1} = \alpha_1 \frac{\partial T}{\partial \xi_1}; \quad \frac{\partial Q}{\partial \xi_2} = \alpha_2 \frac{\partial T}{\partial \xi_2}, \dots, \frac{\partial Q}{\partial \xi_n} = \alpha_n \frac{\partial T}{\partial \xi_n},$$

тогда уравнение (69) можно представить в виде:

$$\frac{\xi_1}{\alpha_1} \cdot \frac{\partial Q}{\partial \xi_1} + \frac{\xi_2}{\alpha_2} \cdot \frac{\partial Q}{\partial \xi_2} + \dots + \frac{\xi_n}{\alpha_n} \cdot \frac{\partial Q}{\partial \xi_n} = q \cdot T. \quad (122)$$

Характеристики уравнения (122) определяются системой обыкновенных дифференциальных уравнений вида:

$$ds' = q\alpha_1 \frac{d\xi_1}{\xi_1} = q\alpha_2 \frac{d\xi_2}{\xi_2} = \dots = q\alpha_n \frac{d\xi_n}{\xi_n}, \quad (123)$$

где полная энтропия системы равна $ds' = \frac{dQ}{T}$.

Из зависимостей для характеристик при значении $q = n$ получим:

$$ds' = \alpha_1 \frac{d\xi_1}{\xi_1} + \alpha_2 \frac{d\xi_2}{\xi_2} + \dots + \alpha_n \frac{d\xi_n}{\xi_n}. \quad (124)$$

Таким образом, с учетом (123) и (124), элементарные изменения потенциала могут быть представлены суммой соответствующих количеств воздействий [5], т.е.:

$$dU = \sum_{k=1}^n dQ_k, \quad dQ_k = T \cdot \alpha_k \frac{d\xi_k}{\xi_k} = T \cdot ds'_k. \quad (125)$$

Сумма в правой части первого уравнения (125) дает полное количество воздействия в элементарном процессе, определяющее изменение потенциала системы. Потенциал формируется под действием различных форм воздействий, каждому из которых отвечает одно из слагаемых dQ_k . Однако между изменениями потенциала, с одной стороны, и величинами dQ_k , с другой, не существует взаимно однозначного соответствия: данной совокупности dQ_k отвечает вполне определенное значение dU , но заданное изменение потенциала (dU) может быть реализовано в форме самых различных комбинаций величин dQ_k .

Из уравнения (125) следует, что полная энтропия системы, которая отличается

подобием свойств, аддитивна относительно частных энтропий, связанных с изменением

свойств, т.е. $ds' = \sum_{k=1}^n ds'_k$. Теперь видно, что

геометрический смысл индекса состояния системы T может быть определен как отношение элементарного приращения потенциала, связанного со свойствами системы, к элементарному приращению энтропии в наблюдаемом процессе. То есть, индекс состояния является производной для функции меры, т.к. из (125) получаем известное соотношение термодинамики:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial s'_k} \right)_{\xi_1, \dots, \xi_n} = T. \quad (126)$$

Таким образом, видна определенная закономерность, важная для построения моделей сложных систем. Согласно (37) и (38) в основу теории может быть положен принцип, заключающийся в том, что для многих сложных систем существуют эмпирические функции, которые обобщают опытные факты в поведении систем. Данные функции определяют реально наблюдаемые состояния системы на всей области определения свойств в пределах одной качественно отличительной ступени развития системы. При этом для простейших систем каждое состояние системы может быть связано по параметрам, по крайней мере, двумя ограничительными условиями – уравнением состояния и зависимостью для вероятности состояния системы. Эти условия являются различными способами оценки качественных изменений в наблюдаемых состояниях системы. Естественно, что для сложных систем как физической, так и нефизической природы подобных условий может быть существенно больше, если исходить из общего определения функции состояния системы вида (33).

Известно, что в любой системе в случае медленных, постепенных количественных изменений происходит эволюционное накопление качественных изменений. В этих условиях исходные функциональные соотношения могут быть представлены аддитивными суммами вида (41) и (53).

При справедливости принципа гомеостатической недостижимости относительно величин θ и W уравнения (41) и (53), а также подобные им уравнения, вытекающие из условий построения функции состояния вида (33), имеют интегрирующий множитель. В этом случае они могут быть выражены через естественные переменные системы – энтропию s' и координатные линии потенциальной поверхности U . Принцип существования недостижимых состояний в каждой окрестности состояния системы,

отличающейся подобием свойств, производит впечатление глубокого топологического свойства пространства n -измерений [8]. Данное свойство хотя и касается узкого класса гиперповерхностей, однако оно определяется единственностью решения задачи Коши для уравнений в частных производных первого порядка в случае многих переменных [31]. Данное свойство может выступать в качестве основного допущения при описании поведения многих сложных систем.

Далее естественно предположить, что для произвольно выбранного состояния системы дифференциалы энтропии и потенциала будут связаны между собой функцией меры. В первом приближении эта связь может быть линейной. Однако не исключается возможность наличия для сложных систем функций меры и нелинейного вида. По крайней мере, линейность относительно свойств должна нарушаться при осуществлении явно нестационарных процессов, когда параметр времени уже нельзя исключить из функции состояния системы в связи с нелинейностью процессов. Кроме того естественно, что не все векторные поля пространства состояний сложных систем могут быть потенциальными. Во многих случаях необходимо произвольный вектор поля \vec{V} представить в виде суммы потенциального и соленоидального векторов. В результате приходим к задачам решения дифференциальных уравнений в частных производных второго порядка вида $\Delta U = \text{div } \vec{V}$. Все это указывает на то, что в сложных случаях в окрестности произвольного состояния при определении функции меры следует учитывать бесконечно малые величины более высоких порядков, а также особенности процессов изменения состояний сложных систем как во времени, так и в пространстве свойств.

Исходя из данного выше пояснения, можно объяснить факт так называемой «переопределенности» системы термодинамики.

Известно, что ряд авторов отмечали в свое время данную особенность построения термодинамической теории [5, 9]. Например, Каратеодори сформулировал положения термодинамики, не привлекая понятия теплоты и количества тепла. В свою очередь Гухман сделал попытку формулировки термодинамических положений только на основе использования первого закона термодинамики, представленного в единообразной форме, без первоначального постулирования существования энтропии.

Практически при формулировке основ термодинамики привлекаются два опытных факта: существование уравнения состояния в виде зависимости температуры, как индекса состояния системы от его параметров, и закон

сохранения и превращения энергии в виде эмпирически установленного уравнения. Второй закон термодинамики является в принципе следствием первых двух эмпирических фактов, т.к. вероятность состояния термодинамической системы не определяется опытным путем. Общие теоретические представления позволяют методами статистической физики обосновать связь энтропии и вероятности состояния системы, оставив при этом определенную свободу выбора системы отсчета. Однако при этом накладывается еще одно дополнительное условие на поведение системы.

В случае если как в термодинамике использовать для построения теории все три факта – задание функции вероятности и уравнения состояния системы, а также эмпирическую форму функции меры в виде закона сохранения, – то тем самым изначально осуществляется «переопределение» задачи относительно функции состояния, т.к. имеется одно лишнее условие.

Теперь понятно, почему для случая токсикологической системы базовый закон сохранения в виде функции меры является следствием уравнения состояния и закономерности изменения вероятности состояния системы.

Таким образом, полученные результаты позволяют подойти с иных позиций к формулировке законов сохранения как особого класса принципов, отображающих единство движения материи. Исходя из этого, просматривается идея представления функции меры в виде единообразной структуры, где каждый следующий шаг приводит эту структуру к той же самой форме, но на более высоком уровне иерархии. Если для j -того качественного признака и n свойств уравнение для функции меры представляется следующим соотношением:

$$dU_j = T_j \cdot \sum_{k=1}^n ds'_{k,j}, \quad (127)$$

то, учитывая (124) и (125), это уравнение приводится к виду

$$dU_j = T_j \cdot \sum_{k=1}^n ds'_{k,j} = du'_{k,j} + \delta l_{k,j}, \quad (128)$$

где $u'_{k,j}$ – координатная линия n -мерной потенциальной поверхности U_j , которая соответствует k -тому свойству системы и является полным дифференциалом; $l_{k,j} = L_j(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ – некоторая функция свойств системы, определяемая при условии интегрирования $T_j = F_j(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) = \text{const}$.

В свою очередь, учитывая уравнение (123) и свойство аддитивности уравнения (128),

для k -го свойства системы получим:

$$n \cdot T_j \cdot ds'_{k,j} = du'_{k,j} + \delta l_{k,j}. \quad (129)$$

Исходя из сказанного выше следует, что для любой сложной системы на определенном уровне иерархии, который определяется числом степеней свободы n , из соотношений (127)–(129) вытекает следующее общее уравнение:

$$T_j \cdot ds'_j = du'_j + \delta l_j, \quad (130)$$

$$\text{где } ds'_j = \sum_{k=1}^n ds'_{k,j}, \quad du'_j = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n du'_{k,j},$$

$$\delta l_j = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \delta l_{k,j}.$$

Данное уравнение для p качественных признаков можно представить в виде:

$$T \cdot ds' = du' + \delta l, \quad (131)$$

$$\text{где } ds' = \sum_{j=1}^p ds'_j, \quad du' = \sum_{j=1}^p du'_j, \quad \delta l = \sum_{j=1}^p \delta l_j, \text{ а}$$

индекс состояния системы определяется из

$$\text{условия: } T = \frac{1}{ds'} \sum_{j=1}^p T_j \cdot ds'_j.$$

Определим функционалы ds' и du' , соответственно как изменение общей энтропии и общей меры состояния системы. Так как сумма полных дифференциалов также является полным дифференциалом, то величины ds' и du' являются полными дифференциалами.

Из данных результатов видна структура уравнений сохранения, где каждый функционал подчиняется аддитивным закономерностям, а добавление новой переменной преобразует его в функционал более высокого уровня иерархии, причем все получаемые структуры имеют единообразную форму. Таким образом, функционалы ds' и du' образуются процедурой рекурсии и могут обладать фрактальными свойствами. В свое время один из основоположников фрактальной геометрии Б.Мандельброт называл фракталом структуру, состоящую из частей, которые в каком-то смысле подобны целому.

Закон сохранения энергии в термодинамике имеет вид именно структуры (131), где абсолютная температура является индексом состояния физической или химической системы, для которых характерны энергетические взаимодействия.

Изучение структур вида (127) – (131) приводит к парадоксальному выводу относительно сути понятия энтропии, которая является фактически «сверткой» свойств системы, т.е. единство присущих системе свойств и является ее качеством. Другими словами можно сказать, что привнесение

параметров свойств объекта в виде системы координат извне (внешний способ задания координат) заменяется на внутренний способ введения координат, где параметры свойств преобразуются с учетом особенностей объекта в параметры его качеств. Данный способ основан на оценке множества состояний всей системы относительно выбранных подмножеств этой системы, например, когда векторное пространство любых воздействий на вещество оценивается по отношению к поверхности, определяющей состояние заданного вещества и т.п. В этом случае появляется необходимость введения внутренних (естественных) координат множества. Таким образом, термодинамика по своей сути сводится к геометрической системе преобразования координат на многообразии, допускающем введение параметризации.

В заключение раздела отметим, что эффективная теория должна приводить к широкому развитию практических приложений, а также открывать возможности для расширения всевозможных направлений исследований.

Методы системодинамики позволяют вплотную подойти к описанию биологических и социально-экономических систем. Возможности практического применения полученных результатов показаны на примере решения двух задач, связанных с построением уравнений состояния токсикологических систем и развитием методов оценки человеческого потенциала. Этим вопросам посвящены две последующие статьи данного сборника, на которые ранее делались ссылки в данной работе. В прикладном плане применение методов системодинамики возможно в исследовании социально-экономических процессов, изучении эволюции видов, обработке информации и т.д.

Следует также отметить несколько перспективных научных направлений исследований, позволяющих развить методологию системодинамики.

Важное направление исследований связано с установлением класса зависимостей, которые позволяют реализовать функции состояния сложных систем. В свое время Борн отмечал исключительный произвол в выборе шкал температур в термодинамике. Им было подчеркнуто, что на данном этапе развития термодинамической теории нельзя логически обосновать то, что температурой газа считают как раз произведение $\theta = p \cdot v$, а не какую-нибудь функцию этой величины, хотя бы $\theta = (p \cdot v)^2$ или $\theta = \sqrt{p \cdot v}$. Факт вида зависимости $\theta = p \cdot v$ основан на эмпирических данных. Однако постулат о подобии свойств дает возможность развить теоретическое направление в определении функций состояния

систем. Сегодня в термодинамике принято, что эти уравнения присоединяются извне, как известные эмпирические знания о свойствах системы. Это является основополагающим принципом, однако установление видов функций состояния может осуществляться на основе теоретических предпосылок и данных об изменении свойств во времени или на границах области определения состояний системы.

Изучение особенностей качественных и количественных изменений сложных систем во времени позволит разрешить дилемму о существовании обратимых и необратимых процессов. Эта область исследований всегда привлекала ученых [3, 5, 11, 32, 33]. Из анализа полученных закономерностей видно, что необратимость тесно связана с течением времени, количеством свойств и уровнем качеств, присущих сложной системе. Уже очевидно, что обратимых процессов в технике и природе нет. Даже для простейших термодинамических систем параметрическое представление свойств как функций времени τ и энтропии s' приводит к тому, что параметрические кривые образуют функцию состояния системы. Например, для трехмерной системы и любого процесса l свойства z_1 , z_2 и индекс T можно представить семейством характеристических кривых $z_1 = z_1(\tau, s')$, $z_2 = z_2(\tau, s')$ и $T = T(\tau, s')$. Данные кривые образуют поверхность $T = T(z_1, z_2)$, если на кривой l якобиан $\Delta = z'_{1s} \cdot z'_{2t} - z'_{1t} \cdot z'_{2s}$ не обращается в нуль. Это основное условие единственности решения задачи Коши для квазилинейных дифференциальных уравнений первого порядка с двумя независимыми переменными [31]. Данное условие выполняется всегда, если кривая l не является характеристикой. Здесь уже виден естественный способ введения времени в теорию классической термодинамики, через возможность параметрического представления процессов относительно времени. При этом свойство необратимости времени накладывает ряд жестких ограничений на осуществление процессов и характер изменения энтропии.

Далее, применение методов теории поля позволяет по иному подойти к изучению различных термодинамических циклов, которые встречаются в природе и технике, а также различных абстрактных циклов, которые могут описываться математическими выражениями. Известно, что потенциальное поле характеризуется условием, при котором циркуляция вектора по простому замкнутому контуру l всегда будет нулем. При этом линейный интеграл по кривой, соединяющей любые две точки поля, оказывается не

зависящим от формы кривой. Потенциальная функция при этом определяется криволинейным интегралом:

$$\oint_l \frac{\xi_1}{q \cdot k} d\xi_1 + \frac{\xi_2}{q} d\xi_2 + \frac{\xi_3}{k_T} d\xi_3 = \oint_l dU = \oint_l T \cdot ds' = 0$$

Из этого уравнения для контура из двух изотерм и двух адиабат, который расположен на произвольной поверхности с обыкновенными точками, легко получить коэффициент полезного действия цикла, равный к.п.д. цикла Карно. В данной области возникает ряд абсолютно новых задач – изучение работоспособности « n -мерных» циклов и циклов, использующих особые рабочие тела, возможность осуществления циклов или процессов вблизи областей, которые захватывают особые точки или линии ветвления (характеристические кривые), и т.д. Например, абстрактный спиральный цикл, расположенный на поверхности шара или тора, поверхности которых, в свою очередь, определяют уравнение состояния рабочего тела. В этом случае или рабочее тело не будет устойчиво, или оно будет представлять собой вещество, в котором протекает циклическая химическая реакция. Реализация « n -мерных» циклов предполагает использование рабочих тел, которые могут характеризоваться значительным количеством свойств. Методов анализа подобных процессов или циклов пока не существует.

Теория поля позволяет также подойти к изучению сложных систем, образующих векторные поля состояний, которые не являются потенциальными. В этом случае использование математического аппарата уравнений в частных производных открывает широкие возможности для исследования сложных систем.

Важное направление анализа сложных систем связано с изучением их поведения вблизи особых точек. Например, третий закон термодинамики затрагивает именно этот вопрос. Из дифференциальной геометрии известно, что вблизи особой точки параметрическая кривая любого процесса не представима явным уравнением. Существуют различные особые точки – изолированная, двойная, точка возврата, тройная, n -кратная точка. Для изучения поведения кривых вблизи таких точек в математике существует целая теория. В свою очередь, функции состояния реальных сложных систем могут иметь множество различных особых точек и пограничных кривых, при этом изучение поведения систем вблизи областей с особенностями представляет собой важную задачу системодинамики.

Следующая область исследований связана с оценкой состояния термодинамических систем на основе определения математической вероятности

характерных событий, свойственных данным системам. При определении уровня воздействия окружающей среды на множество молекул измерение температуры является косвенным методом, который позволяет оценить усредненное состояние этого множества по качественному признаку – интенсивности хаотического движения молекул в определенных условиях. Данный признак позволяет найти отличия в поведении одинаковых молекул. В этом случае в процессе оценки воздействия среды на молекулу как объект наблюдения в качестве характерного события может выступать факт существования молекул, обладающих различными скоростями движения или различными запасами кинетической энергии. Закон распределения скоростей Максвелла гласит, что в общем числе молекул N , находящихся в устойчивом состоянии, количество молекул, которые обладают результирующими скоростями в диапазоне значений c и $c + dc$, будет составлять dn , при этом известно, что $dn = N \cdot f(c) dc$.

Таким образом, для оценки качественного состояния термодинамической системы, например, идеального газа, возможно использование закона Максвелла, согласно которому вероятность состояния, определенная по характерным событиям, может быть найдена из уравнения [14]:

$$W = \frac{n}{N} = 4\pi \cdot A \int_0^c c^2 \exp(-hmc^2) dc, \quad (132)$$

где m – масса молекулы, а A и h – константы, определяемые нормировкой функции вероятности системы. Данный подход позволяет установить связь вероятности состояния системы, которая определяется по сложным событиям, характеризующим отличия в состоянии молекул, с параметрами окружающей среды.

Таким образом, законы кинетической теории газов, методики и схемы опытов по экспериментальной проверке закона Максвелла, позволяют по аналогии с токсикологией построить эмпирические зависимости вида:

$$Pr = \alpha_0 + \alpha_v \cdot \ln p + \alpha_p \cdot \ln v,$$

где α_i являются безразмерными константами, а величина Pr определяется исходя из выбранного вероятностного закона распределения скоростей при обработке опытных данных.

С другой стороны кинетическая теория газов может дать целый пласт теоретических подходов, методов и аналогий для статистического изучения объектов наблюдений в токсикологии. Это путь установления фундаментальных констант в живой природе,

например, аналогов константы Больцмана в физике.

Сегодня сущностная природа процессов развития сложных систем затрагивается многими исследователями; типичные подходы приведены, например в [34 – 40]. Однако без глубокой теории подобный перенос принципов термодинамической науки на процессы нефизической природы не выдерживает критики. Построение такой теории – это долгий и трудоемкий процесс, но на этом пути возможны интересные открытия.

Заключение

Подведем итоги данной работы. Как видно из примера в начале статьи, применение термодинамического метода по отношению к опытным фактам токсикологии позволяет получить закономерности фундаментального характера. Обобщение полученных результатов дает возможность сформулировать законы и постулаты системодинамики в следующем виде. Качественные признаки сложных систем могут иметь количественное измерение, основанное на оценках вероятностей или значений индексов. Изменение этих признаков при воздействии связано с возникновением определенных событий, по частоте появления которых и может оцениваться состояние системы в процессе изменения ее качества. С другой стороны, состояние системы определяется ее свойствами, которые количественно характеризуются параметрами. Это позволяет сформулировать первый постулат системодинамики о состоянии сложной системы и существовании функции состояния системы, которая может быть оценена путем измерения количественных показателей, характеризующих как качественные признаки, так и свойства системы. Так как вероятности сложных событий представляются в виде аддитивно-мультипликативных соотношений, то построение теории может быть основано на известной теореме Каратеодори о существовании энтропии для физических систем, обладающих свойством, которое известно как постулат «адиабатической недостижимости». Показано, что данный постулат может быть заменен более общим постулатом: в любом процессе, протекающем в окрестности произвольно заданного и качественно однородного состояния, свойства сложной системы, эволюционно развивающейся во времени, подобны. Еще один постулат формулируется в виде: в любой окрестности произвольно заданного состояния качества и свойства сложной системы однозначно связаны через функцию меры.

Дальнейшая система доказательств приводит к следующим выводам. Энтропия

системы является характеристической функцией состояния системы (семейством характеристик) и может выступать мерой качественных изменений в системе. Любое множество качественно одинаковых состояний системы, которое оценивается по характерному качественному признаку, однозначно определяется двумя функциями состояния – энтропией и потенциалом. В первом случае имеем векторную линию, а во втором случае – потенциальную поверхность. При этом энтропия в параметрическом представлении является длиной дуги векторной линии. Уравнение сохранения энергии в термодинамике для потенциального векторного поля, определяющего воздействие, является одной из форм представления уравнения Пфаффа через координатные линии поверхности уровня и энтропию. Термодинамика по своей сути сводится к геометрической системе преобразования координат на многообразии, допускающем введение параметризации. Другими словами, привнесение параметров свойств объекта в виде системы координат извне (внешний способ) заменяется на внутренний способ введения координат, где параметры свойств преобразуются с учетом особенностей объекта естественные координаты этого объекта. Данный способ основан на оценке множества состояний системы относительно выбранных подмножеств этой системы, например, когда векторное пространство любых воздействий на вещество оценивается по отношению к характеристической поверхности, определяющей состояние этого вещества, и т.п. Именно здесь лежит естественный способ введения времени в термодинамику за счет параметрического представления любых процессов (кривых) относительно времени, а уравнений состояний (интегральных поверхностей) – относительно времени и энтропии. При этом необратимость времени накладывает ряд жестких условий на осуществление процессов и характер изменения энтропии. Кроме того, все естественные процессы в природе при нарушении равновесия протекают в направлении наиболее вероятных качественных изменений, поэтому вероятности событий, связанные с качественными признаками, будут возрастать. В связи с тем, что вероятность события величина положительная, а энтропия согласно (109) – это параметр вида $ds = dW/(q \cdot W)$, то в любом природном процессе $ds \geq 0$. Здесь уже видна связь второго закона термодинамики с базовыми положениями теории вероятности. Из приведенной зависимости видна также справедливость формулировки второго закона, которая дана в свое время Больцманом.

Таким образом, термодинамика математически может быть сведена к дифференциальной геометрии однородных пространств состояний сложных систем. А если это так, то единая теория моделирования сложных систем может быть построена на наблюдениях событий во времени, что является предметом теории вероятности, и использовании G -пространств состояний, когда G -группа геометрических преобразований переводит множество свойств системы в подобное множество относительно качеств системы, а это является уже предметом исследования дифференциальной геометрии многообразий. Известно, что кроме преобразования подобия, которое использовано в этой работе, существует еще 14 бесконечно малых преобразований. Здесь мы отсылаем к интересной работе К. Каратеодори [41]. Скорее всего, существуют классы сложных систем, которым свойственны различные группы преобразований пространства состояний, что приводит к разным геометриям, которые введены Ф. Клейном в рамках Эрлангенской программы.

В процессе подготовки этой статьи появился ряд новых вопросов и идей. Например, что представляет собой общая энтропия состояния системы с точки зрения обобщения множества различных свойств и качеств, присущих системе? Какие базовые законы сохранения определяют поведение биологических, экологических, социальных или экономических систем? Какой смысл мы должны вкладывать в понятие потенциала системы в каждом конкретном случае? И, наконец, время – это просто параметр, определяющий момент воздействия на объект, или нечто большее? Если объекты исследования термодинамики являются неживыми, а токсикологии – живыми объектами, причем модели имеют общую математическую основу, то в чем суть отличия живого от неживого, и какое свойство или качество (или комплекс этих категорий) определяет это отличие?

Возникали также вопросы почти философского плана. Например, что такое “смерть” объекта? – Причем не только живого. Не результат ли это последовательности наиболее вероятных качественных изменений в состоянии системы при воздействии по шкале энтропии, но до тех пор, пока это возможно. А может быть это закономерный результат эволюционного дрейфа потенциала в шкале времени? Рождение и смерть объекта – это особые точки или фазовые переходы особого рода? Не присущи ли эти особые точки или фазовые переходы всем объектам природы? – Только масштабы времени существования объектов часто несоизмеримы. Именно по этому

понятие обратимости для природы неприемлемо, т.к. после любого процесса, а тем более фазового перехода, невозможно воссоздать первоначальный объект неживой природы, даже если он очень примитивный. Может быть, именно в области изменения качеств и свойств на грани рождения или смерти, и лежит ответ на вопрос – в чем суть отличия живого от неживого? Так как принятые нами постулаты системодинамики не привязаны к виду объекта – живой или не живой, то ответ на этот вопрос может лежать в весомости качеств и количестве свойств сложной системы. Причем в диапазоне между особыми точками, где существует объект, видна необходимость использования в моделях «собственного» времени, характерного для данного объекта или вида. Здесь мы с одной стороны приходим к причинно-следственной картине жизни, где события, которые тесно связаны со временем, определяют жизнь. С другой стороны модель объекта будет определяться временем его существования, количеством свойств и качеств, уровнем сложности и множеством возможных связей объекта, что естественно.

Возникали и другие интересные идеи, например, можно ли “математизировать” некоторые области философии или истории? По крайней мере, не исключен путь построения теории перехода количественных изменений в качественные на основе расширения аксиоматики теории вероятностей, предложенной в свое время А.Н.Колмогоровым, и постулирования ряда положений. Или, например, путь построения теории потенциалов применительно к развитию человеческого общества за счет обобщения исторических данных и событий. Применение методов системодинамики приводит к идеям о возможности построения теории развития сложных систем как системной науки о сложности.

Интересные идеи лежат в области информатики и изучения искусственного интеллекта. Во-первых, исходя из полученных результатов, возникает вопрос – как определить понятие информации применительно к сложной системе? Возможно это знание о множестве состояний системы и о множестве реализуемых процессов в окрестности произвольного состояния, а также моделях, особенностях и закономерностях формирования состояний и осуществления процессов. Тогда актуален вопрос – как количественно и интегрально измерить это знание? Во-вторых, если жизнь и разум рассматривать как закономерные этапы (узловые точки меры) организации сложной системы в шкале бесконечного или счетного количества свойств и качеств системы, то возможны аналогии между живой и неживой природой, между биологическими и иными

формами жизни.

Может возникнуть много новых вопросов и идей, если математический аппарат термодинамики и ее метод будут успешно применены на практике в научных областях с абсолютно разными объектами и предметами исследования и качественно отличающимися сегодня методологиями. Это был бы уже успех в развитии системной динамики, причем при использовании методов классической термодинамики. Уже видны все сложности этого пути, которые определены медленным накоплением множественных и систематизированных данных в различных областях знаний.

Заканчивая статью, обратим внимание на высказывание А. Эйнштейна, приведенное во введении, о том, что термодинамика никогда не будет опровергнута. Все в этом мире подвержено непрерывному развитию, поэтому и термодинамика может перерасти в своем качестве в новую науку – системодинамику, которая в своей основе будет иметь уже не только физическую теорию. Это был бы закономерный результат колоссального труда поколений ученых, создавших классическую термодинамику.

Литература

1. Капица П.Л. Эксперимент, теория, практика. – М: Наука, 1981. – 495 с.
2. Берталанфи Л. Общая теория систем – Критический обзор. – General Systems, Vol. VIII, 1962: P. 1 – 20.
3. Венгеров И.Р. Хроноартефакты термодинамики. – Донецк: Норд-пресс, 2005. – 235 с.
4. Кирилин В.А., Сычев В.В., Шейндлин А.Е. Техническая термодинамика. – М.: Энергия, 1974. – 448 с.
5. Гухман А.А. Об основаниях термодинамики. – М.: Энергоатомиздат, 1986. – 383 с.
6. Базаров И.П. Термодинамика. – Изд-е 4-е. – М.: Вс. шк., 1991. – 376 с.
7. Путилов К.А. Термодинамика. – М: Наука, 1971. – 375 с.
8. Франкфурт У.И. К истории аксиоматики термодинамики. – В кн.: Развитие современной физики: Пер. с нем. М.: Наука, 1964. – С. 257 – 292.
9. Каратеодори К. Об основах термодинамики. – В кн.: Развитие современной физики: Пер. с нем. М.: Наука, 1964. – С. 188 – 222.
10. Борн М. Критические замечания по поводу традиционного изложения термодинамики. – В кн.: Развитие современной физики: Пер. с нем. М.: Наука, 1964. – С. 223 – 256.
11. Афанасьева-Эренфест Т.А. Необратимость, односторонность и второе начало термодинамики // Журн. прикл. физики,

- 1928.– Т. 5, вып. 3 – 4. – С. 3 – 30.
12. Шамбадаль П. Развитие и приложение понятия энтропии. – М.: Наука, 1967. – 280 с.
 13. Петров Н., Бранков Й. Современные проблемы термодинамики. – М.: Мир, 1986. – 285 с.
 14. Роберте Дж. Теплота и термодинамика. Пер. с англ. – М.: Техн. лит-ра, 1950. – 592 с.
 15. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. Пер. с англ. – 3-е изд. – Л.: Химия, 1982. – 592 с.
 16. Falk G. Die Rolle der Axiomatik in der Physik, erlautert am Beispiel der Thermodynamik / Die naturwissenschaften, 46, 1959, № 16: P. 480 – 486.
 17. Пуанкаре А. О науке. – Пер. с франц. – М.: Наука, 1983. – 560 с.
 18. Wehrle P. L'Univers aleatoire. – Paris, Dunod, 1956.
 19. Morowitz H. J. The Second Law of Thermodynamics. – <http://www.panspermia.com/seconlaw.htm> (12.12.09).
 20. Коганов А.В. Реферативный обзор семестра «Время и энтропия». Семинар «Изучение феномена времени» – http://www.chronos.msu.ru/greports/koganov_referativny_obzor.htm (05.12.09).
 21. Сычев В.В. Дифференциальные уравнения термодинамики – М.: Вс. шк., 1991.– 214 с.
 22. Аверин Г.В., Звягинцева А.В. Закономерности формирования опасных процессов в сложных системах // Наукові праці ДонНТУ, Серія «Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка», вип. 9 (132), Донецьк. – С. 221 – 232.
 23. Основы оценки риска для здоровья населения при воздействии химических веществ, загрязняющих окружающую среду / Г.Г. Онищенко и др. – М.: НИИ ЭЧ и ГОС, 2002. – 408 с.
 24. Временные методические указания по обоснованию предельно допустимых концентраций (ПДК) загрязняющих веществ в атмосферном воздухе населенных мест – М.: МЗ СССР, ГСЭУ, 1989. – 111 с.
 25. Философский словарь / Ред. И.Т. Фролов. – М.: Политиздат, 1989. – 444 с.
 26. Венцель Е.С. Теория вероятности. М.: Наука, 1971. – 576 с.
 27. Доклад о развитии человека 2006. Что кроется за нехваткой воды: Власть, бедность, глобальный кризис водных ресурсов / Пер. с англ. – М.: Весь мир, 2006. – 440 с.
 28. Мусхелишвили Н.И. Курс аналитической геометрии. М.: Вс. шк., 1967. – 655 с.
 29. Фихтенгольц Г.М. Курс дифференциального и интегрального исчисления. Том 1. М.: Наука. 1969. – 608 с.
 30. Диткин В.А., Прудников А.А. Операционное исчисление. М.: Вс. шк., 1975. – 407 с.
 31. Кошляков И.С. Уравнения в частных производных математической физики. М.: Вс. шк., 1970. – 712 с.
 32. Гельфер М. История и методология термодинамики и статистической физики. – 2-е изд-е, перер. и доп. – М.: Вс. шк., 1981. – 536 с.
 33. Базаров И.П. Методологические проблемы статистической физики и термодинамики. – М.: МГУ, 1979. – 87 с.
 34. Мельник Л.Г. Фундаментальные основы развития. – Сумы: ИТД «Университетская книга», 2003. – 288 с.
 35. Ю.А. Урманцев. Общая теория систем: состояние, приложения и перспективы. – <http://www.sci.aha.ru> (11.11.09).
 36. Прангишвили И.В. Энтропийные и другие системные закономерности. – М.: Наука, 2003. – 428 с.
 37. Бурдаков В.П. Эффективность жизни (введение в экоматерику). – М.: Энергоатомиздат, 1997. – 304 с.
 38. Райхлин Р. Систематика социологии и социальная динамика. – <http://www.israel.net/raikhlin/> (05.01.10).
 39. Вейник А.И. Термодинамика реальных процессов. – Мн.: Наука і техника, 1991. – 576 с.
 40. Хазен А.М. Разум природы и разум человека. – М.: РИО «Мособлполиграфиздат», 2000. – 600 с.
 41. Каратеодори К. К аксиоматике специальной теории относительности. – В кн.: Развитие современной физики: Пер. с нем. М.: Наука, 1964.– С. 167 – 187.

Розділ 2

Системний аналіз та моделювання

О новых решениях системы Матье-Дуффинга

Беловодский В.Н., Сухоруков М.Ю.

Донецкий национальный технический университет,

belovodskiy@cs.dgtu.donetsk.ua

Abstract

Belovodskiy V.N., Suhorukov M.I. "On new solutions of the Mathieu-Duffing system" It is described some of new stationary solutions of the Mathieu-Duffing equation in the first principal zone of unstability. The analytic results are verified by numerical simulation.

Key words: dynamical system, Mathieu-Duffing equation, stationary solution, numerical analysis.

Введение

Поведение нелинейных динамических систем своим многообразием постоянно привлекает внимание исследователей. Открытие сложных (суб- и супергармонических) резонансов в 30-е годы XX века [1] и последовавшее их изучение, сменилось открытием хаотических движений в 60-е годы [2] и интенсивным исследованием их проявлений во вполне детерминированных системах. Обычно, новые явления в нелинейной динамике вскрываются, а затем изучаются, на базе простых характерных моделей, — парадигм. К числу таковых относится и уравнение Матье с полиномиальной нелинейностью, — уравнение Матье-Дуффинга. Пожалуй, не будет большим преувеличением сказать, что редкий номер авторитетного журнала «Nonlinear Dynamics» обходится без публикаций, посвященных различным модификациям этого уравнения. И целью данной работы является изложение результатов исследования вопросов существования некоторых его новых решений.

Исзуемое уравнение

Ниже рассматривается уравнение вида

$$\ddot{x} + \beta \dot{x} + \omega_0^2 (1 - 2\mu \cos 2\omega t)x + \delta x^3 = 0. \quad (1)$$

Оно относится к классу динамических систем с гармоническим параметрическим возбуждением и кубической характеристикой восстанавливающей силы. Уравнение (1), очевидно, имеет тривиальное решение, однако при определенных соотношениях между коэффициентами возбуждения μ и сопротивления β в определенных частотных диапазонах положение покоя становится неустойчивым и происходит возбуждение параметрических резонансов. В плоскости $\mu, \frac{\omega_0}{\omega}$ зоны неустойчивости представляют собой клиновидные области. Наиболее широкая из них, главная, при $\beta=0$ примыкает к точке

$\frac{\omega_0}{\omega} = 1$. Одной из особенностей этих колебаний

является то обстоятельство, что при $\delta=0$ их амплитуды нарастают экспоненциально и даже наличия линейного сопротивления недостаточно для их ограничения. По этой причине возбуждение параметрических колебаний в реальных конструкциях может оказаться крайне опасным для их прочности. Так, например, ряд исследователей [3] результаты знаменитой катастрофы Такомакого моста в 1940 году в США объясняют именно эффектом возбуждения изгибно-крутильных параметрических колебаний в его конструкции при периодических изменениях боковой ветровой нагрузки. Однако при наличии плавной нелинейности, в данном случае $\delta \neq 0$, параметрические колебания имеют ограниченную амплитуду.

Пожалуй, с работ В.В. Болотина [4], который при анализе колебаний внутри зон неустойчивости исходил из характера этих колебаний на их границах, традиционно считается, что при главном параметрическом резонансе происходит деление частоты возбуждения в два раза и период стационарных колебаний в два раза превышает период возбуждения. И, даже, более поздние открытия хаотических движений в таких системах сохранили прежние представления для малых значений параметров системы. Однако проведенные еще в 80-е годы экспериментальные исследования показали, что это не всегда так [5]. По этим соображениям нами и была предпринята попытка комбинированного численно-аналитического исследования данного вопроса [6].

Исзуемые решения, порядок исследования, результаты

В качестве аналитических методов исследования были приняты методы усреднения и гармонического баланса и получены, по существу, идентичные результаты. Так, рассматривая колебания в главной зоне

неустойчивости и ориентируясь на её середину, т.е. полагая $\omega_0^2 = 1$, $\omega = 1$, а также предполагая моногармонический характер колебаний, решение описывалось в виде

$$x_{an}(t) = A_0 + A_1 \cos 2t + B_1 \sin 2t, \quad (2)$$

где в случае гармонического баланса коэффициенты разложения (2) являются постоянными. Заметим, что характер предполагаемого решения отличается от традиционных представлений и его период равен периоду параметрического возбуждения. После подстановки (2) в (1) и выполнения обычных тригонометрических преобразований для определения A_0 , A , B была получена система уравнений:

$$\begin{cases} A_0 - \mu A_1 + \delta \left(A_0^3 + \frac{3}{2} A_0 A_1^2 + \frac{3}{2} A_0 B_1^2 \right) = 0, \\ -3 A_1 + 2 \beta B_1 - 2 \mu A_0 + \delta \left(3 A_0^2 A_1 + \frac{3}{4} A_1^3 + \frac{3}{4} A_1 B_1^2 \right) = 0, \\ -3 B_1 - 2 \beta A_1 + \delta \left(3 A_0^2 B_1 + \frac{3}{4} A_1^2 B_1 + \frac{3}{4} B_1^3 \right) = 0. \end{cases} \quad (3)$$

Её решение проводилось в программной системе Matlab с использованием процедуры solve и при $\beta = 0,001$, $\mu = 0,3$, $\delta = 1/3$ были получены следующие решения:

$$\begin{aligned} x_{1,2} &= \pm(0,1478 + 3,4556 \cos 2t + 0,2710 \sin 2t), \\ x_{3,4} &= \pm(0,0116 + 0,2703 \cos 2t + 3,4536 \sin 2t). \end{aligned} \quad (4)$$

Апробация результатов (4) проводилась путем непосредственного численного интегрирования уравнения (1). Наличие первой пары решений подтвердилось и при численном моделировании, однако решения $x_{3,4}$ такого подтверждения не получили. Попытка объяснить данное обстоятельство неустойчивостью этой пары решений и, в силу этого, отсутствием численной наблюдаемости, своего подтверждения также не получила. Выполненный расчет мультипликаторов системы в вариациях, построенной для решений $x_{3,4}$, наоборот, показал устойчивость полученных решений, т.к. соответствующий набор мультипликаторов оказался равным $\rho_{1,2} = 0,8167 \pm 0,5759i$, т.е. $|\rho_{1,2}| = 0,9987 < 1$. Напомним, что согласно теории Флоке-Ляпунова [3] именно отрицательный знак $\ln|\rho_{3,4}|$ и определяет устойчивость тривиального решения системы с периодическими коэффициентами. Таким образом, сложилось явное противоречие между численным и аналитическими результатами. Перебор процедур решения (решателей ОДУ) из имеющихся в арсенале MATLAB и варьирование их управляющих параметров указанного противоречия не разрешил.

Дополнительные гипотезы, исследования, результаты

После тщательного анализа полученных результатов удалось сформулировать, на наш взгляд, пожалуй, единственную правдоподобную гипотезу, объясняющую полученное противоречие. Она состояла в следующем: колебания типа $x_{3,4}$ всё-таки существуют, однако несмотря на практически моногармонический их характер система уравнений (3) для определения коэффициентов A_0 , A_1 , B_1 , составленная исходя из моногармонических представлений, оказывается слишком грубой, в результате чего коэффициенты A_0 , A_1 , B_1 определяются недостаточно точно и, в силу этого, неадекватным оказывается уравнение в вариациях и, как следствие, — расчет его мультипликаторов.

Если это предположение справедливо, то тогда уточнения и более согласованных результатов можно ожидать при большем учете гармонических составляющих в искомым решениях. Для проверки этой гипотезы была использована комплексная форма рядов Фурье. Искомое решение в этом случае имело вид

$$x_{an}(t) = \sum_{n=-N}^N c_n e^{i2nt}, \quad (5)$$

где параметр N регулирует число гармоник, учитываемых в решении. После подстановки (5) в (1), проведения очевидных преобразований и приведения подобных получаем следующую систему уравнений для определения коэффициентов c_n и c_{-n}

$$\begin{cases} (1 - 4N^2 - i2\beta N)c_{-N} - \mu c_{-N+1} + \delta f_{-N} = 0, \\ (1 - 4n^2 + i2\beta n)c_n - \mu c_{n-1} - \mu c_{n+1} + \delta f_n = 0, \\ n = -N+1, \dots, N-1, \\ (1 - 4N^2 + i2\beta N)c_N - \mu c_{N-1} + \delta f_N = 0, \end{cases} \quad (6)$$

где

$$f_n = \sum_{k=-N}^N \sum_{m=-N}^N c_k c_m c_{n-k-m}.$$

Решение системы (6) при различных значениях N было выполнено уже при помощи системы Maple, которая, в отличие от Matlab, позволила получить весь спектр решений.

При изменении параметра N от 1 до 10 динамика в получаемых решениях оказалась следующей. Действительно, первоначально произошло существенное, до 40%, уточнение младших коэффициентов A_0 , A_1 , B_1 разложения и последующая их стабилизация при дальнейшем изменении N . Характер колебаний, по-прежнему, остался практически моногармоническим. Приведем для иллюстрации уточненные решения $x_{3,4}$, полученные при $N = 10$, коэффициенты разложения указаны с точностью до пяти знаков после запятой:

$$\begin{aligned}
x_{an}(t) = & \pm(0,00884 + 0,19389 \cos 2t + 3,39108 \sin 2t - \\
& - 0,01156 \cos 4t - 0,10594 \sin 4t - \\
& - 0,01887 \cos 6t - 0,10917 \sin 6t + \\
& + 0,00142 \cos 8t + 0,00612 \sin 8t + \\
& + 0,00096 \cos 10t + 0,00327 \sin 10t - \\
& - 0,00010 \cos 12t - 0,00028 \sin 12t - \\
& - 0,00004 \cos 14t - 0,00009 \sin 14t + \\
& + 0,00001 \cos 16t + 0,00001 \sin 16t).
\end{aligned}$$

Достигнутые уточнения в решениях $x_{3,4}$ повлекли соответствующие уточнения и в значениях мультипликаторов. Их повторный расчет для уточненного уравнения в вариациях при $N = 10$ показал, что $\rho_1 = 1,3510$, $\rho_2 = 0,7394$. Таким образом, в силу $|\rho_1| > 1$ решения $x_{3,4}$ являются всё-таки неустойчивыми и отсутствие их численной наблюдаемости теперь становится вполне естественным.

На рис. 1 приводится одно из решений $x_{an}(t)$ (знак "+") при различных значениях N , там же, — результаты непосредственного численного интегрирования уравнения (1). Значения мультипликаторов показаны на рис. 2, где они представлены на комплексной плоскости и расположены относительно единичной окружности.

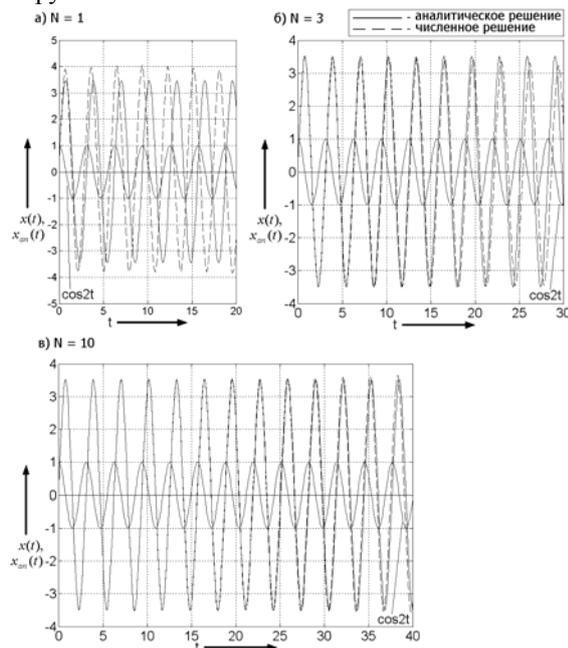


Рисунок 1. — Сравнение численного решения $x(t)$ уравнения (1) и аналитического $x_{an}(t)$ для различных значений N

Таким образом, представленные иллюстрации демонстрируют уже согласованность полученных при $N = 3$, $N = 10$ результатов. С одной стороны, они показывают постепенный уход численного решения от аналитического, с другой, — позволяют данный факт объяснить неустойчивостью этих решений.

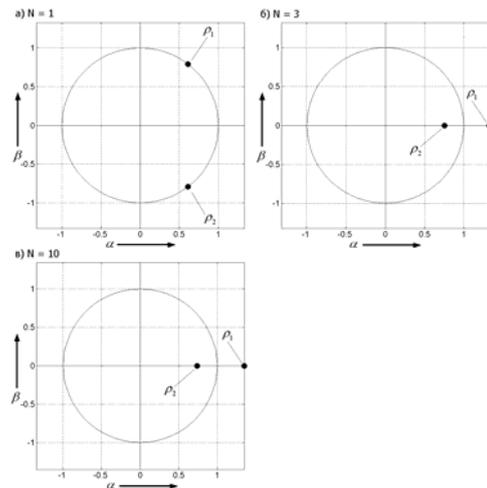


Рисунок 2. — Расчет мультипликаторов $\rho = \alpha + i\beta$

Выводы

Проведённые исследования подтверждают факт существования в системе Матье-Дуффинга в зоне главного параметрического резонанса стационарных движений с частотой равной частоте параметрического возбуждения и, на наш взгляд, демонстрируют эффективность численно-аналитического подхода к анализу нелинейных динамических систем. Это, в свою очередь, ставит задачу разработки специальных инструментальных средств, облегчающих процесс анализа. В частности, такими средствами могут быть программные модули, реализующие отдельные аналитические методы исследования. В целом, это серьезная задача, однако, по крайней мере, для систем с полиномиальными нелинейностями она представляется вполне реальной.

Литература

1. Мандельштам Л.И., Папалекси Н.Д. О явлениях резонанса n-го рода. — Полн. собр. трудов Мандельштама Л.И., М.: АН СССР, 1947. — Т. 2. — С. 13 — 62.
2. Lorenz E.N. Deterministic Nonperiodic Flow. — J. Atmos. Sci. — 1963. — V. 20, № 2. — P. 130 — 141.
3. Якубович В.А., Старжинский В.М. Линейные дифференциальные уравнения с периодическими коэффициентами и их приложения. — М.: Наука, 1972. — 720 с.
4. Болотин В.В. Динамическая устойчивость упругих систем. — М.: Гостехиздат, 1956. — 600 с.
5. Belovodsky V.N., Tsyfansky S.L., Beresnevich V.I. The Dynamics of a Vibromachine with Parametric Excitation. — Journal of Sound and Vibration (2002), 254(5). — P. 897 — 910.
6. Беловодский В.Н., Сухоруков М.Ю. «Нетрадиционные» решения уравнения Матье-Дуффинга: существование и устойчивость. — Труды ИПММ НАН Украины, 2007. Т. 14. — С. 8 — 13.

Построение уравнений состояний сложных токсикологических систем

Звягинцева А.В., Аверин Г.В.

Донецкий национальный технический университет,

Zviagintseva@cs.dgtu.donetsk.ua

Abstract

Averin G., Zviagintseva A. "Similarity methods application at working out of complex systems constitutive equation" A procedure of danger scale construction by the example of negative influences on mice is offered. A danger level parameter at toxicological influence, by analogy to temperature in thermodynamics, is introduced. Constitutive equations of toxicological systems at strong and weak influences of harmful substances on living organisms are offered.

Введение

В настоящее время большое внимание уделяется разработке общих методов описания сложных систем. Обычно под сложной системой понимается любая вещественно-энергетическая или концептуальная совокупность взаимосвязанных составляющих, объединенных прямыми и обратными связями в некоторое единство (Н.Ф. Реймерс).

Сложные системы могут качественно отличаться по своей сущности – быть физической, экономической, социальной, экологической и др. природы, однако все они представляют собой некоторый целостный объект, который взаимодействует с окружающей средой. Каждая из систем характеризуется определенным набором свойств и закономерностей, а также особенностями перехода из одного состояния в другое.

Ключевым понятием в системном анализе является состояние системы. Любая система в заданный момент времени характеризуется определенным состоянием. Считается, что взаимодействие с внешней средой ведет к изменению состояния системы.

Состояния системы определяются параметрами, которые характеризуют свойства системы. Параметр – это величина, изменение которой является наиболее непосредственным и характерным проявлением реакции системы на воздействие, и поэтому он имеет смысл количественной меры изменения состояния системы под влиянием этого воздействия. В термодинамике к параметрам относят массу, объем, давление, температуру и т.д.; в демографии – количество населения, рождаемость, смертность; в токсикологии – время воздействия, концентрации (дозы) вредных веществ и т.д. Заданием всех значений параметров, характеризующих основные свойства, однозначно определяется состояние системы. Это ключевое определение свойственно

многим системам, поведение которых может быть описано математическими методами.

Следующим понятием из класса закономерностей является уравнение состояния. Огромный объем количественных знаний о свойствах и закономерностях поведения различных систем обычно представляется в форме уравнений, где одни параметры системы выражаются через другие. Это своего рода ограничительное условие, определяющее поведение конкретной системы в пространстве любых состояний. Уравнения состояния строятся на основе эмпирических данных. Такого рода уравнения, задаваемые дополнительно, независимо от содержания исследуемой задачи, в принципе должны существовать для любой системы, каковы бы ни были её индивидуальные особенности. Данный факт отражает эмпирический опыт человечества в области изучения сложных систем. Ограничением в этом случае является возможность количественного измерения или определения параметров системы, а также построение уравнения состояния достаточной степени точности, что не всегда реализуемо на практике. Обычно уравнение состояния представляется в виде:

$$\psi_i(z_1, z_2, z_3, \dots, z_n) = 0. \quad (1)$$

При этом всегда существует характерная ошибка, определяющая степень точности данного уравнения, тем не менее зависимость вида (1) может быть построена во многих случаях.

Согласно уравнения (1) параметры z_n , характеризующие свойства, совокупностью которых определяется состояние системы, связаны друг с другом: с изменением одного из них изменяется, по крайней мере, еще одно.

Вследствие взаимосвязи между свойствами системы для определения её состояния достаточно указать лишь некоторое число свойств. Так, термодинамическое состояние газа можно считать заданным, если

указаны два параметра, например, температура и давление: значение объема определится из уравнения состояния $\psi(V, P, T) = 0$. Графически данная зависимость является уравнением поверхности, построенной относительно трех взаимно перпендикулярных осей координат, каждая из которых соответствует одному характерному параметру. Поэтому любое состояние системы, задаваемое некоторой совокупностью числовых значений параметров, изобразится точкой, лежащей на полученной поверхности. Такая точка называется фигуративной, а поверхность – характеристической. При изменении состояния системы точка во времени перемещается по поверхности, описывая некоторую кривую. Характеристическая поверхность (в общем случае многомерная гиперповерхность) представляет собой геометрическое место точек, отображающих состояния системы в зависимости от изменения параметров.

Таким образом, через уравнения состояния в процессе моделирования вносятся закономерности реальных систем. В термодинамике применяемый математический аппарат позволяет ассоциировать эти соотношения с первым и вторым началом, благодаря чему сразу получаются феноменологические закономерности и следствия.

Методы построения уравнений состояний

Сегодня наиболее проработаны методы построения уравнений состояния различных веществ. В термодинамике известно более 150 видов уравнений, предложенных целым рядом исследователей. Здесь следует отметить уравнение состояния идеального газа, уравнение Ван-дер-Ваальса, вириальное уравнение и т.д. Наиболее полное изложение существующих уравнений дано в [1, 2]. В основу построения уравнений положен принцип соответственных состояний. В термодинамике этот принцип является обобщением того положения, что те свойства, которые зависят от межмолекулярных сил, связаны с некоторыми характерными (опорными) свойствами для всех веществ одинаково. При реализации этого принципа в процессе построения уравнений параметры критической точки выбираются в качестве опорных и все остальные свойства соотносятся с этой точкой. Практика подтверждает, что единое выражение для приведенного свойства относительно параметров критической точки хорошо описывает опытные данные для целого ряда веществ. Теория соответственных состояний – это теория подобия в термодинамике. Гиббс считал, что эта теория имеет важное значение и

хотел дать строгое развитие учения о подобии. В том или ином виде это учение широко используется в термодинамике.

Обобщая принцип соответственных состояний для различных сложных систем можно получать уравнения состояния этих систем. Для этого необходимо использовать те или иные опорные точки или некие характерные состояния системы, которые определяются заданными значениями параметров и которые можно считать “критическими”, то есть с явно выраженными особыми свойствами. Принцип соответственных состояний – это не что иное, как закон подобия для сложных систем одного класса, суть которого заключается в том, что уравнение (1) имеет один и тот же вид для различных состояний системы в случае правильно выбранных опорных точек. При этом обобщенные параметры таких точек комплексно характеризуют сложную систему и являются данными для “настройки” уравнения (1).

Кроме этого могут использоваться и другие методы, позволяющие формировать уравнения состояния, исходя из принципа подобия поведения системы в определенных условиях. Например, в термодинамике эту цель выполняет такой параметр, как температура. Использование линейной шкалы температур, связывающей свойства, и привязанной к опорным точкам – это тоже своего рода установление эмпирическим способом подобия между состояниями термодинамических систем, причем с учетом изменения их качественных признаков. Введение третьей координаты в уравнение состояния, которая является линейной относительно фазовых точек, повышает точность уравнения и существенно расширяет область его определения. Температура количественно характеризует качественные области состояний системы при изменении физических условий. При этом опорной точкой служат состояния системы, свойственные нормальным условиям, которые условно фиксированы. Единица шкалы температуры определяется, исходя из условной длины шкалы в 100° между точками плавления льда и кипения воды.

Скорее всего, данные методы применимы ко многим классам сложных систем, которые отличаются однородностью свойств.

В основе методов подобия лежит опытный факт того, что для многих сложных систем возможно использование некоторого комплексного показателя θ , однозначно связанного со свойствами системы через уравнение (1). Данный показатель может измеряться, рассчитываться, определяться экспериментальным путем или приниматься по соглашению на основе опытных или статистических данных. Численное задание

показателя θ однозначно определяет состояние системы или множество состояний, отличающихся зависимостью свойств. Причем это множество охватывает состояния, которые отличаются крайне различными свойствами и качественными характеристиками. Например, в термодинамике изотерма может проходить через области существования твердого тела, жидкости и газа в процессе изменения давления среды и объема тела.

Покажем возможность использования методов подобию в процессе построения уравнений состояния при воздействии опасных веществ на живые организмы. Эта область знаний (токсикология) крайне далека от термодинамики как по предмету, так и методом исследований, так как изучает совсем другой класс сложных систем, нежели термодинамика.

Уравнение состояния идеальной токсикологической системы

Рассмотрим систему, включающую опасную воздушную среду, которая содержит вредный газ, и объект воздействия – живые организмы. Теория описания такой системы должна основываться на использовании уравнений состояния. Примем гипотезу о существовании комплексного показателя θ , определяющего состояние опасной системы при воздействии. Эта гипотеза имеет фундаментальное значение и подлежит проверке опытом. Будем считать, что величина θ является мерой состояния системы по комплексу параметров, заданной в относительных величинах, для которой логическим аналогом в термодинамике является температура.

Известно, что в термодинамике есть относительная величина – температура, которая является комплексным параметром состояния системы и определяет уровень нагрева тела. Все эксперименты в области термодинамики тем или иным образом касаются измерений температуры. Уровень нагрева тела является относительной величиной, так как термодинамические шкалы температур привязываются к определенным опорным точкам. Построение линейных температурных шкал основано на применении метода двух точек. Например, в стоградусной шкале (шкале Цельсия) точка кипения воды при атмосферном давлении принимается за 100°C , а точка плавления льда – за 0°C . Термодинамические шкалы температур бывают различными, например: Цельсия ($^{\circ}\text{C}$), Фаренгейта ($^{\circ}\text{F}$), Ренкина ($^{\circ}\text{Ra}$), Реомюра ($^{\circ}\text{R}$), абсолютная шкала температур Кельвина ($^{\circ}\text{K}$). Опорные точки выбираются, исходя из факта изменения качественных признаков системы, в термодинамике – это изменения фазового

состояния (преимущественно агрегатного состояния вещества).

Основой для понятия температуры является эмпирический факт того, что когда два тела находятся в термическом равновесии с третьим, то они состоят в термическом равновесии и друг с другом. При этом условие равновесия для двух тел можно всегда представить в виде:

$$F_1(z_1', z_2', \dots, z_n') = F_2(z_1'', z_2'', \dots, z_n''),$$

где z_n' и z_n'' – параметры первого и второго тела.

Одно из двух тел можно использовать в качестве экспериментального прибора – *термометра* и рассматривать значение функции $\theta = F_2(z_1'', z_2'', \dots, z_n'')$ как *эмпирическую температуру*. Тогда условие равновесия означает, что первое тело находится в равновесии с термометром, если существует следующая зависимость:

$$\theta = F_1(z_1', z_2', \dots, z_n').$$

В термодинамике именно это соотношение называется уравнением состояния, и факт его существования подтверждается всеми существующими опытными данными.

Таким образом, из применения шкал температур следует, что все термодинамические воздействия системно оцениваются по уровню нагрева тела с помощью относительной величины, которая называется температурой. Эта величина определяет существование воздействий на систему и их уровень по изменению комплекса свойств данного состояния по отношению к некоторому опорному состоянию стандартизированной системы. В равновесном состоянии постоянное значение температуры указывает на отсутствие любых некомпенсируемых воздействий и постоянство всех других параметров системы. Обобщая вышесказанное, можно сделать вывод, что температура представляет собой комплексный показатель, который позволяет оценить воздействие окружающей среды на объект в сравнении с ее уровнем воздействия на стандартизированный термометр. Примем данную логическую схему для введения показателя состояния опасной системы θ .

Теперь проведем аналогии. Как было отмечено выше, величина температуры измеряется с помощью термометров, применение которых основано на том, что два соприкасающихся тела в условиях общей окружающей среды через некоторое время приходят к состоянию теплового равновесия и принимают одинаковую температуру. В свою очередь, если живой объект поместить в опасную среду, то по истечении определенного времени у него возникают неблагоприятные

эффекты, тем опаснее, чем опаснее окружающая среда. В термометрии, если термометр, приводимый в соприкосновение с различными телами, дает одно и то же показание, то говорят, что эти тела имеют одинаковую температуру. В свою очередь, в токсикологии опасность среды “измеряют” с помощью особых “термометров” – живых объектов, в качестве которых чаще всего выступают белые мыши и крысы. Данные “термометры” (назовем их биоиндикаторами) можно “градуировать” по неблагоприятным эффектам на основе токсикологических экспериментов. Поэтому, если такой биоиндикатор, помещенный в атмосферу с различными опасными газами, будет давать одинаковое показание (будет наблюдаться одинаковый негативный эффект), то можно говорить, что среды при заданных параметрах имеют одинаковую опасность. Понятие эффекта носит в токсикологии комплексный характер и обычно может учитывать целый ряд показателей и характеристик организма. Оценка опасности среды кроме этого имеет вероятностный характер, поэтому чаще всего изучают данные по группе живых объектов. Это связано с тем, что неопределенность данных в токсикологии существенно более выражена, чем в термодинамике.

Исходя из сделанного выше пояснения, можно принять следующую схему оценки уровня опасности окружающей среды. Предположим, что опасность среды измеряется особым видом “термометров”, а именно специальным образом стандартизированными живыми объектами – биоиндикаторами, к которым выдвигаются определенные требования (по виду, полу, массе, возрасту и т.д.). Опасность шкалируется по явно выраженным негативным эффектам, которые могут возникать у этих биообъектов при действии опасной среды. Воздействие среды на различные живые объекты оценивается путем установления относительного соответствия между параметрами среды, состоянием биоиндикатора и другими живыми объектами. При этом в процессе анализа опасности необходимо использовать сравнительную шкалу для измерения параметров состояния опасной системы. Эта шкала является эмпирической, так как должна быть связана с оценкой появления негативных эффектов у биоиндикаторов. В процессе построения уравнения состояния, оценки опасности среды по эмпирической шкале должны связываться с параметрами окружающей среды.

Таким образом, комплексный показатель состояния системы θ также как и температура может быть относительной величиной и тоже должен привязываться к определенным опорным точкам или характерным состояниям.

Без введения этой величины нельзя связать качественные признаки состояния опасной системы с параметрами окружающей среды на всей области определения воздействий, когда время и концентрация вредного вещества изменяются в широких пределах. Например, при заданных значениях времени воздействия и концентрации опасного вещества, которым соответствует определенное значение θ , может быть получен смертельный эффект с вероятностью 5, 50 и 100%. В другой категории эффекта (например, хроническое воздействие, которое естественно менее опасное, чем смертельное) при тех же значениях θ также можно получить определенные вероятности возникновения хронического заболелания. Причем это будет наблюдаться при иных временах воздействия и концентрациях опасного вещества. Кроме того для живых организмов смертность 50% наблюдается также при безопасных значениях концентрации вредного вещества, но при среднем времени жизни биологического объекта данного вида. Поэтому для параметрического описания состояний системы необходимо использовать три параметра, а именно величину времени воздействия τ , концентрацию вредного вещества C и показатель состояния опасной системы θ . Определим показатель θ как индекс состояния опасной системы. Поскольку все параметры системы “равноправны” с точки зрения задания состояния системы, то её поведение будет однозначно определено уравнением состояния вида:

$$f(\tau, C, \theta) = 0. \quad (2)$$

Таким образом, для решения задачи определения состояния системы необходимо по аналогии с температурой ввести относительную шкалу, характеризующую опасную окружающую среду, для чего установить соответствие индекса θ и определенных опорных точек. Например, при $\tau = 0$ и $C = 0$ следует принять $\theta = 0^\circ$ опасности, а для эталонного опасного вещества и значений τ и C , при которых наблюдается определенный выраженный эффект, принять $\theta = 100^\circ$ или $\theta = 1000^\circ$ опасности. Назовем данную шкалу θ абсолютной и будем считать, что индекс θ характеризует состояние опасной окружающей среды. Все остальные вещества необходимо “привязать” по вызываемым категориям эффектов к шкале индекса θ . Для этого следует использовать эмпирическую шкалу опасности φ , построенную с учетом воздействий на живой объект, выступающий в качестве биоиндикатора. Эмпирическая шкала опасности должна градуироваться по негативным эффектам, которые наблюдаются у

биоиндикатора при действии опасной среды. Специфику и меру опасного воздействия различных веществ в эмпирической шкале φ следует определить по опытным данным, получаемым при использовании определенного вида биоиндикаторов – белых мышей, как наиболее распространенных экспериментальных животных. Это позволит путем установления соответствия эмпирической шкалы опасности φ и абсолютной шкалы θ , связанной с параметрами окружающей среды, получить уравнение состояния для сложной системы, опасность которой определена ингаляционными токсическими воздействиями на биоиндикаторы. После этого возможно измерение опасности в полученной шкале путем оценки уровня опасности среды для характерных точек (смертность 50%, пороговые уровни и т.д.), определяющих негативные эффекты для других биологических видов (например, человека).

Для анализа экспериментальных данных и построения шкал θ и φ примем в качестве опорной точки область 50% смертности мышей при определенном времени воздействия опасного вещества. В данном случае категория эффекта “смерть объекта” однозначно характеризует переход системы в новое качество. Таким образом, между двумя опорными точками (точка A “нет воздействия” ($\tau = 0$ и $C = 0$) и точка B “50% смертность объектов”) возможно построение только линейной шкалы. Значение величины θ в точке B при заданных значениях концентрации C_0 и определенном времени воздействия τ_0 , определим в 100° опасности. Выбор величин C_0 и τ_0 представляет собой важную задачу в области шкалирования опасности.

Математически уравнение состояния опасной системы может быть построено различными способами. Например, представим уравнение состояния вида (2) некоторой поверхностью в декартовой системе координат относительно параметров τ , C , θ . В общем случае эта поверхность, определяемая явным уравнением $\theta = F(\tau, C)$, будет являться линейчатой поверхностью n -мерного порядка [5], так как образуется относительно θ прямолинейными образующими, проходящими через точку A ($\theta = 0$, $\tau = 0$, $C = 0$).

Уравнение $\theta = F(\tau, C)$ удовлетворяет также следующим условиям:

- а) если $\tau = 0$, то $\theta = 0^\circ$ при любых C ; (3)
- б) если $C = 0$, то $\theta = 0^\circ$ при малых значениях τ ; (4)
- в) если $\tau = 0$ и $C = 0$, то $\theta = 0^\circ$. (5)

Обобщая все вышесказанное, а также учитывая условия (3) – (5) и раскладывая

$F(\tau, C)$ в ряд Тейлора, получим уравнение состояния опасной системы в следующем виде:

$$\theta = F(\tau, C) = B_1 \cdot \tau \cdot C + B_2 \cdot \tau^2 \cdot C + B_3 \cdot \tau \cdot C^2 + B_4 \cdot \tau^2 \cdot C^2 + \dots, \quad (6)$$

где B_i – постоянные коэффициенты.

Если ограничиться одним членом ряда в правой части равенства (6), то получим уравнение состояния опасной системы в приближенном виде:

$$\tau \cdot C = R_i \cdot \theta, \quad (7)$$

где константа $R_i = 1/B_1$ должна являться индивидуальной токсической постоянной для данного опасного вещества. Логическим аналогом уравнения (7) в термодинамике является уравнение Клапейрона для идеальных газов.

В таблице 1 приведены основные параметры, характеризующие опасность веществ в соответствии с данными источника [4].

Если для определения токсической постоянной использовать характерное состояние, соответствующее точке B , то уравнение (7) представится в виде:

$$\tau \cdot C = \frac{\tau_0 \cdot C_0}{100} \cdot \theta. \quad (8)$$

Так как в уравнении (7) принят во внимание только один член ряда (6), то соотношение (8) приближенно справедливо при малых значениях комплекса $\{C \cdot \tau\}$. Обратим внимание на основополагающую закономерность в области токсических воздействий на живые организмы. Эта закономерность заключается в том, что при оценке воздействий опасных веществ применяется пороговый принцип, определяющий границу опасного процесса.

Порог действия применительно к определенному эффекту индикаторно характеризует переход системы из безопасного в опасное состояние:

$$HC_i = C_i/P_i, \quad (9)$$

где P_i – порог (уровень) воздействия для i -того вещества, заданный в тех же единицах, что и концентрация C_i . При возникновении опасного воздействия $HC_i > 1$.

Для большинства веществ для каждого негативного эффекта опасное или вредное воздействие на живой объект начинает наблюдаться только при достижении определенного минимального значения концентрации вредного вещества. Это значение концентрации и называется пороговым уровнем.

В общем случае пороги связаны со временем действия вещества. Они характерны для всех видов эффектов (смертельное, острое, хроническое), однако существует порог, при котором воздействие на живой объект на всем протяжении жизни не является опасным. Это

так называемый безопасный уровень, который для экспериментальных животных, представляет собой максимально неэффективную концентрацию (*МНК*), определяемую в хроническом эксперименте.

Таблица 1. – Опасность вредных веществ при ингаляционных токсических воздействиях на мышей

Вещество	CL_{50}^{20}	Lim_{ac}	Lim_{ch}
1,3 хлорбромпропан	7260	410	45
Азота диоксид	900	--	--
Аммиак	4600	--	--
Ангидрид метакриловой кислоты	440	9,8	2
Бензол	45000	1100	20
Бромацетопропил ацетат	100	7	3
Бромбензол	21000	250	20
Гексахлорацетон	890	20	5
Гидразин	1000	15	1
Диметиламин	100	5	4
Диметилацетамид	17300	1230	340
Диметилформамид	9600	1200	80
Диметилэтанолламин	3240	1200	50
Диоксан	43000	500	100
Дитолилметан	40	6	5
Диэтиламин	5600	600	300
Диэтилхлортиофосфат	700	196	20
Диэтилэтанолламин	4880	1100	610
Изопропилнитрит	2740	300	5
Изопропилхлоркарбонат	230	32	9
Метилфуран	8290	75	10
Моноизопропиламин	1920	10	3
Озон	3	1	0,8
Оксид углерода	2250	--	--
Пентахлорацетон	430	20	3
Пиперидин	6200	20	2
Сероводород	1200	20	14
Сероуглерод	1040	1000	13
Тиофен	9400	1500	180
Толуол	32000	700	50
Триэтиламин	6000	100	50
Фенол	300	--	--
Формальдегид	300	--	--
Фуран	2300	100	4
Фурфурол	12220	400	50
Хлорангидрид трихлоруксусной кислоты	460	10	0,3
Хлористый бензил	390	100	1
Хлористый метил	5300	230	20
Хлористый метилен	63000	1000	250
Хлорметилтрихлорсилан	60	10	7
Цианамид кальция	369	90	10
Цианистый бензил	100	7	3
Циклопентадиен	1400	5000	350
Этиленмин	400	10	0,4

Здесь CL_{50}^{20} – половинная смертельная концентрация для белых мышей при экспозиции 120 мин и температуре 20 °C, мг/м³; Lim_{ac} – пороговый уровень острого несмертельного воздействия, мг/м³; Lim_{ch} – пороговый уровень хронического воздействия, мг/м³.

Эта величина может быть приближенно оценена по методике [6] с использованием данных о значениях предельно допустимых концентраций.

Исходя из сказанного выше следует важный для дальнейшего вывод, заключающийся в том, что воздействие на живой объект в течение всей жизни абсолютно не зависит от вида вещества при условии, что его концентрация меньше самого малого значения *МНК* среди всех вредных веществ.

Следовательно, в пределе уравнение (7) для всего периода жизни живого объекта имеет вид:

$$\lim_{C \rightarrow 0} (\tau \cdot C) = R_i \cdot \theta. \quad (10)$$

Таким образом, опорную точку *B* необходимо “увязать” с состоянием, определяемым параметрами $\tau = \tau_0$ и $C = C_0$, для которого наблюдается 50% смертность мышей от старости при достижении средней продолжительности жизни.

Будем считать, что в точке *B* индекс состояния системы θ равен 100° опасности. За величину τ_0 примем среднее время жизни биологического вида, которое для самцов мышей составляет 24 месяца, а значение C_0 определим соответственно равным *МНК*. В этом случае получим для определения величины R_i уравнение:

$$\lim_{C \rightarrow 0} (\tau \cdot C)_\theta = \lim_{C \rightarrow 0} (\tau \cdot C)_B \cdot \frac{\theta}{100}, \quad (11)$$

где $(\tau \cdot C)_B$ является значением $(\tau \cdot C)_\theta$ в опорной точке *B*. Из уравнения (11) получим:

$$R_i = \frac{1}{100} \cdot \lim_{C \rightarrow 0} (\tau \cdot C)_B. \quad (12)$$

Величина R_i является индивидуальной токсической постоянной, численное значение которой зависит от выбора единиц измерения для концентрации, времени и индекса θ . Принимая для этих величин соответственно единицы измерения мг/м³, мин и градус опасности (°Г), получим размерность коэффициента R_i в виде: $(\text{мг} \cdot \text{мин}) / (\text{м}^3 \cdot \text{°Г})$.

Таким образом, индивидуальные токсические постоянные могут быть найдены экспериментальным путем.

Мы хотим построить универсальную шкалу индекса θ , которая характерна для всех вредных веществ. Уравнение (7) связывает параметры токсикологической системы для определенного вещества. Поэтому соответствующая шкала индекса должна быть “привязана” как к опорным точкам, так и к виду вещества. Предположим, что имеются два вредных вещества, для которых при низких концентрациях справедливы следующие соотношения:

$$\tau_1 \cdot C_1 = R_1 \cdot \theta \quad \text{и} \quad \tau_2 \cdot C_2 = R_2 \cdot \theta.$$

Исходя из этого, для универсальной шкалы θ при одинаковом индексе состояния имеем следующее равенство:

$$\frac{\tau_1 \cdot C_1}{(\tau \cdot C)_{1B}} = \frac{\tau_2 \cdot C_2}{(\tau \cdot C)_{2B}} = \frac{\tau_i \cdot C_i}{(\tau \cdot C)_{iB}} = const. \quad (13)$$

Таким образом, шкала индекса θ должна быть также привязана к одному определенно выбранному веществу. Для нахождения характерного значения $\lim_{C \rightarrow 0} (\tau \cdot C)_B$ используем

данные для одного из веществ, опасность которого будет условно фиксирована. Для того, чтобы в дальнейшем установить аналогии с термодинамическими свойствами веществ, это должно быть сравнительно известное неорганическое вещество. Примем для этой цели водород фосфористый (PH_3), значение MHK которого достаточно мало по сравнению с другими опасными веществами. В результате этого для фосфористого водорода получим следующее значение токсической постоянной:

$$R_{PH_3} = \frac{1}{100} \lim_{C \rightarrow 0} (\tau \cdot C)_B = 62,208 \frac{мг \cdot мин}{м^3 \cdot \text{°Г}}$$

Введем понятие относительной опасности вещества при низких концентрациях $\mu_i = \frac{MHK_i}{MHK_{PH_3}}$ и назовем эту величину

токсическим весом вещества. Величина μ_i будет являться в токсикологии своего рода логическим аналогом молекулярного веса вещества в термодинамике.

Токсический вес показывает, во сколько раз при воздействии низких концентраций на протяжении всей жизни объекта данное вещество является менее опасным, чем фосфористый водород.

Из уравнения (13) следует, что при одинаковых индексах состояния системы (θ) и одинаковых концентрациях веществ (C) $\tau / \mu = const$. Отметим, что это отношение не зависит от вида опасного газа или пара.

Таким образом, индивидуальная токсическая постоянная будет равна $R_i = \mu_i \cdot R_{PH_3}$, откуда уравнение (7) представится в виде:

$$C \cdot \tau = R_i \cdot \theta = \mu_i \cdot R \cdot \theta. \quad (14)$$

Здесь R является универсальной токсической постоянной, $R = R_{PH_3}$.

Индивидуальные токсические постоянные R_i , величины μ_i и максимально неэффективные концентрации MHK для различных веществ приведены в таблице 2. При этом отметим, что при воздействии на уровне $C = MHK$ и $\tau = \tau_0$ для любых вредных веществ абсолютный индекс состояния опасной системы $\theta = 100^\circ$ опасности. Это естественно, так как в этом

состоянии наблюдается смертность 50 % биоиндикаторов от старости.

Теперь можно определить идеальную токсикологическую систему, как опасную систему строго подчиняющуюся уравнению (7). При этом вредный газ термодинамически удовлетворяет законам поведения идеального газа, так как выполняется условие $C \rightarrow 0$.

Токсикологические эксперименты проводятся при атмосферном давлении (p_*) и температуре около 20°C , поэтому, считая опасное вещество при малых концентрациях в воздухе идеальным газом, можно записать, что:

$$p_i = C_0 \cdot R_{Ti} \cdot T, \quad (15)$$

где R_{Ti} – индивидуальная газовая постоянная вредного вещества, $Дж/(кг \cdot \text{°К})$; p_i – парциальное давление газа, Па; T – абсолютная температура, равная $293,15^\circ\text{K}$.

Уравнение (15) является следствием уравнения Клапейрона вида:

$$p_i \cdot v_0 = R_{Ti} \cdot T. \quad (16)$$

Индивидуальную газовую постоянную R_{Ti} вычисляют на основе экспериментальных данных по плотности газа (ρ_*) при нормальных условиях по формуле:

$$R_{Ti} = \frac{p_* \cdot v_*}{273,15} = \frac{p_*}{273,15 \cdot \rho_*}, \quad (17)$$

где $p_* = 1,01325 \cdot 10^5$ Па, а v_* – удельный объем (объем 1 кг газа при давлении 1 атм и температуре $t = 0^\circ\text{C}$).

В таблице 2 для основных вредных веществ приведены значения молекулярных масс (M_i) и величин индивидуальных газовых постоянных (R_{Ti}).

С учетом (17) можно записать, что:

$$R_i = K \cdot \frac{C_0}{\rho_*} \cdot \frac{1}{R_{Ti}} \quad \text{или} \quad R_i \cdot R_{Ti} = const, \quad (18)$$

где ρ_* – плотность газа или пара, $кг/м^3$ (при давлении 1 атм. и температуре $t = 0^\circ\text{C}$), C_0 – значение максимально неэффективной концентрации для данного газа или пара, заданное в единицах измерения $кг/м^3$ ($C_0 = MHK$), а константа K равна:

$$K = \frac{\tau_0 \cdot p_* \cdot 10^{-2}}{273,15} = 3,846 \frac{мин \cdot Па}{\text{°К} \cdot \text{°Г}} \cdot \frac{мг}{кг}$$

При этом R_{Ti} измеряется в $Дж/(кг \cdot \text{°К})$, а R_i – $мг \cdot мин/(м^3 \cdot \text{°Г})$.

Соотношение (18) устанавливает аналогию между токсическими и термодинамическими свойствами опасного вещества через опорные точки абсолютной температурной шкалы (T) и абсолютной шкалы индекса состояния опасной системы (θ).

Таблица 2. – Характеристика опасности и термодинамические свойства веществ при ингаляционных воздействиях на мышей

Вещество	M_i	R_{Ti}	MHK	μ_i	R_i
1,3-бутадиен	54,1	153,68	3	500	1244,16
N-Метиламин	31,07	267,59	0,18	30	3110,4
Азота диоксид	46,01	180,70	0,24	40	2488,32
Азота оксид	30,01	277,04	0,27	45	2799,36
Акролеин	56,07	148,28	0,18	30	1866,24
Аммиак	17,04	487,91	0,12	20	1244,16
Анилин	93,14	89,263	0,18	30	1866,24
Ацетальдегид	44,06	188,70	0,045	7,5	466,56
Бензол	78,12	106,43	0,6	100	6220,80
Бромбензол	157,01	52,952	0,18	30	1866,24
Водород бромистый	80,91	102,76	0,45	7,5	4665,6
Водород фосфористый	34,00	244,53	0,006	1,0	62,208
Водород фтористый	20,01	415,49	0,03	5	311,04
Водород цианистый	27,03	307,58	0,06	10	622,08
Диметиламин	45,08	184,43	0,03	5	311,04
Диметилацетамид	87,14	95,410	0,036	6	373,248
Диметилформамид	73,04	113,83	0,18	30	1866,24
Диметилэтанолламин	89,16	93,248	0,18	30	1866,24
Диоксан	88,10	94,370	0,42	70	4354,56
Диоксид серы	64,06	129,78	0,225	37,5	2332,80
Дитолилметан	196,31	42,352	0,18	30	1866,24
Диэтиламин	73,14	113,67	0,15	25	1555,20
Диэтилхлортио-фосфат	204,62	40,631	0,06	10	622,08
Диэтилэтанолламин	117,21	70,933	0,18	30	1866,24
Йод	253,8	32,76	0,18	30	1866,24
Кислота уксусная	60,06	138,43	0,27	45	2799,36
Метилфуран	82,11	101,25	0,09	15	933,12
Моноизопропиламин	31,07	267,59	0,045	7,5	466,56
M-хлоранилин	112,61	73,83	0,075	12,5	777,6
Нафталин	128,18	64,862	0,009	1,5	93,312
Озон	48	173,21	0,225	37,5	2332,8
Оксид углерода	28,01	296,82	9,0	1500	93312
Пиперидин	85,15	97,639	0,075	12,5	777,6
П-хлоранилин	112,61	73,83	0,06	10	622,08
Серная кислота	98,08	84,768	0,6	100	6220,8
Сероводород			0,048	8	497,664
Сероуглерод	76,13	109,21	0,03	5	311,04
Скипидар			3	500	3110,4
Спирт n-бутиловый	74,14	112,14	0,45	7,5	4665,6
Стирол	104,16	79,820	0,012	2	124,416
Толуол	92,14	90,232	2,7	450	27993,6
Трихлорэтилен	131,53	63,21	4,5	750	46656
Триэтиламин	101,22	82,138	0,63	105	6531,84
Фенол	94,12	88,334	0,018	3	186,624
Формальдегид	30,03	276,86	0,018	3	186,624
Фуран	68,08	122,12	0,06	10	622,08
Фурфурол	96,09	86,523	0,225	37,5	2332,8
Цианистый бензил	117,15	70,969	0,045	7,5	466,56
Циклопентадиен	70,14	118,53	0,3	50	3110,4
Хлор	71,00	117,10	0,18	30	1866,24
Хлорбензол	112,51	73,90	0,45	7,5	4665,6
Хлористый бензил	126,59	65,677	0,375	62,5	3888
Хлороводород	36,46	228,03	1,2	200	12441,6
Этилацетат	88,12	94,35	0,3	50	3110,4
Этилен	28,06	296,29	13,5	2250	139968
Этиленмин	43,07	193,03	0,0075	1,25	77,76

Здесь M_i – молекулярная масса вещества, кг/кмоль; R_{Ti} – индивидуальная газовая постоянная вещества, Дж/кг·°K; μ_i – безразмерный токсический вес вещества; R_i – индивидуальная токсическая постоянная вещества, (мг·мин)/(м³·°G); MHK – максимально неэффективная (недействующая) концентрация вредного вещества, мг/м³.

Построение эмпирической шкалы индекса опасности для идеальной токсикологической системы

Построим эмпирическую шкалу индекса опасности токсикологической системы φ , исходя из негативных эффектов, наблюдаемых у биоиндикаторов, и свяжем данную шкалу с абсолютной шкалой индекса состояния этой системы, который определяется параметрами окружающей среды вида:

$$\theta = \frac{\tau \cdot C}{R_i} \quad (19)$$

В физике измерение температуры основано на принципе замещения ее как объекта измерения некоторой другой физической величиной. Примем подобный подход при построении эмпирической шкалы индекса опасности системы φ . В качестве объекта измерения величины φ используем вероятность возникновения определенной категории негативного эффекта W у биоиндикаторов, которая тесно связана со временем действия вещества. При этом мы имеем возможность для различных областей воздействий построить несколько шкал величины φ , например, при хроническом, стром или смертельном ингаляционном воздействии, при смертельном пероральном воздействии и т.д.

В токсикологии обработка опытных данных проводится путем установления зависимости «доза-эффект», которая определяет связь между дозой (концентрацией) и степенью выраженности эффекта в экспонируемой группе (популяции). В большинстве случаев график зависимости представляет собой S-образную кривую логарифмически нормального распределения, симметричную относительно средней точки, определяющей 50%-эффект. Обычно кривая «доза-эффект» преобразуется в линейную зависимость путем ее представления в координатах $\log C$ – *пробит*. В этом случае концентрация токсиканта дается в логарифмах, а выраженность эффекта – в пробитах.

Для рассматриваемой токсикологической системы пробит определяется на основе использования инверсной функции нормального распределения, то есть:

$$W = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\text{Pr}} \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right) dt \quad (20)$$

Построим эмпирическую шкалу при смертельном ингаляционном воздействии, так как в этом случае имеются наиболее достоверные данные.

Для линии постоянной вероятности негативного эффекта (постоянного пробита) справедлива закономерность следующего вида [7]:

$$C^n \cdot \tau = const. \quad (21)$$

Среднее значение показателя n может быть установлено согласно закономерности (21) заданием двух характерных точек, определяющих среднесмертельные эффекты:

$$n = \frac{\ln \tau_0 - \ln \tau_d}{\ln C_d - \ln C_0}, \quad (22)$$

где $C_d = CL_{50}^{20}$ – среднесмертельная концентрация вредного вещества; $\tau_d = 120$ мин (см. табл. 1); $\tau_0 = 1036800$ мин – среднее время жизни мышей (самцов); $C_0 = MHK$.

В свою очередь вероятность смертельных эффектов W_s , связанных только с возрастом биологического объекта при условии, что концентрация $C \rightarrow 0$, может быть определена как вероятность естественной смерти мышей, которую можно представить как функцию времени. Известно, что на момент рождения вероятность смертности мышей составляет приблизительно $W_p = 0,04 \div 0,06$ (перинатальная смертность), а в момент времени $\tau = 24$ месяца величина вероятности смерти равна $W_0 = 0,5$. Таким образом, таблицы смертности могут служить основой для построения эмпирической шкалы индекса опасности системы. При этом объектом измерения будет выступать время на всем интервале жизни биоиндикатора.

На рисунке 1 представлена зависимость вероятности естественной смертности самцов мышей от времени, которая аналитически может быть дана в виде:

$$Pr_s = -1,64485 + 1,55806 \cdot 10^{-9} \cdot \tau^{3/2}. \quad (23)$$

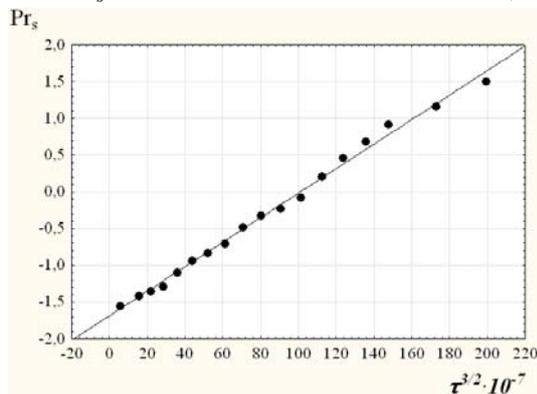


Рисунок 1. – Зависимость вероятности $Pr_s = f(W_s)$ естественной смертности самцов мышей от возраста τ_s

Уравнение (23) построено согласно данным [8], при этом пробит определяется в соответствии с (20), а время задается в минутах.

Построим шкалу индекса φ , для чего используем линейное уравнение и две реперные точки. Так как вести измерения вероятности в пробитах неудобно, используем для этого

шкалу, градуированную в градусах опасности. В качестве первой точки для градуировки шкалы примем значение $\varphi_p = 0^\circ$ при вероятности смертельных эффектов W_p ($Pr_p = -1,64485$) на начало жизни. Для упрощения определим время оценки перинатальной смертности $\tau = 120$ мин после рождения объектов.

Вторую реперную точку эмпирической шкалы φ совместим с опорной точкой абсолютной шкалы θ , для которой вероятность среднесмертельных эффектов от старости равна $W_0 = 0,5$ ($Pr_0 = 0$). Будем считать, что в этом случае $\varphi_0 = 100$ градусов опасности. В результате получаем линейную эмпирическую шкалу индекса φ при $C \rightarrow 0$ в виде:

$$\varphi = 100 + 60,7957 \cdot Pr(\tau). \quad (24)$$

Для установления при низких концентрациях соответствия абсолютной шкалы θ , определенной согласно (19), и эмпирической шкалы φ (см. формулу (24)) рассмотрим воздействие в области максимально недействующих концентраций, когда опасная система является идеальной. Определяя величины φ и θ как функции времени при $C = C_0 = MHK$, получим зависимость между абсолютной и эмпирической шкалами опасности, которая имеет вид:

$$\theta = 4,642 \cdot (\varphi + 1,2452 \cdot 10^{-4})^{2/3}, \quad \varphi \geq 0. \quad (25)$$

Индексы θ и φ имеют одинаковую размерность градуса опасности ($^\circ\Gamma$), при этом уравнение состояния (7) для идеальной токсикологической системы может быть представлено через индекс опасности φ в виде:

$$\theta = 4,642 \cdot (\varphi + 1,245 \cdot 10^{-4})^{2/3} = C \cdot \tau / R_i \quad (26)$$

Результаты обработки данных для области слабых воздействий ($C \rightarrow 0$) приведены на рисунке 2.

Таким образом, понятие идеальной токсикологической системы следует рассматривать в качестве предельной закономерности для реальных процессов. При увеличении концентрации вредного газа будут наблюдаться отклонения в состоянии системы от уравнения вида (7), однако для области слабых воздействий ($C \rightarrow 0$) идеальная токсикологическая система строго подчиняется уравнению состояния (26).

Если рассматривать интервалы времени несколько удаленные от момента рождения ($\varphi \geq 1^\circ\Gamma$, $\tau \geq 1$ мес.), то со степенью точности $1,25 \cdot 10^{-4}$ уравнение (26) можно представить в виде:

$$\theta = 4,642 \varphi^{2/3} = C \cdot \tau / R_i. \quad (27)$$

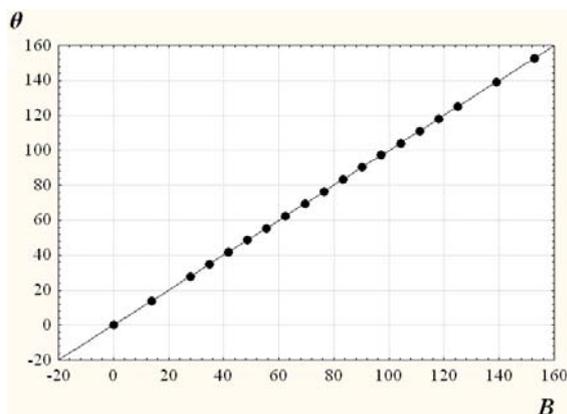


Рисунок 2. – Зависимость между абсолютной шкалой (θ) и эмпирической шкалой опасности (φ) для идеальной токсикологической системы,

$$B = 4,642 \cdot (\varphi + 1,245 \cdot 10^{-4})^{2/3}, C = \text{МНК}.$$

Проблема построения эмпирической шкалы индекса опасности представляет исключительный интерес, так как её решение создает реальную возможность измерения опасности путем установления связи между принудительной и естественной смертностью биоиндикатора.

Универсальное уравнение состояния токсикологической системы

В общем случае уравнение (26) является приближенным вне области слабых воздействий, где токсикологическая система является идеальной, и это может вносить заметные ошибки в оценку уровня опасности.

Когда концентрация вещества C при данном времени воздействия τ находится существенно выше максимально неэффективной концентрации МНК , а шкалой индекса состояния системы необходимо охватить все категории эффектов (хронический, острый и смертельный), не исключена необходимость внесения в уравнение (26) поправок. При определении порога хронического действия Lim_{ch} время воздействия в эксперименте составляет до 4 месяцев, а при оценке эффектов в области острых воздействий может составлять несколько часов. Аналогичные значительные изменения характерны и для пороговых значений концентраций вредных веществ при различных видах воздействий (см. табл. 1).

Таким образом, при средних концентрациях и временах действия вредных веществ могут наблюдаться отклонения от уравнения состояния, которое получено путем обработки данных для областей слабых воздействий. Для уточнения уравнения состояния можно по аналогии с термодинамикой

искать уравнения регрессии в виде:

$$Z = \frac{\tau \cdot C}{R_i \cdot \theta} = f(\theta_*, C_*, \tau_*), \quad (28)$$

$$\text{где } \theta_* = \frac{\theta}{\theta_d}; \quad C_* = \frac{C}{CL_{50}^{20}}; \quad \tau_* = \frac{\tau}{120} -$$

приведенные токсические свойства вещества. При этом индекс состояния θ следует определять согласно уравнений (25) или (27).

В данном случае для уточнения уравнения применяется метод соответственных состояний. Этот метод использует положение, которое в токсикологии можно сформулировать следующим образом: токсические свойства веществ связаны с характерными свойствами для всех опасных веществ одинаково. В качестве характерной опорной точки можно использовать область 50% смертности мышей при концентрации CL_{50}^{20} и времени действия вредного вещества 2 часа (точка d имеет координаты $\theta = \theta_d; C_d = CL_{50}^{20}; \tau_d = 120$).

Данная гипотеза требует экспериментального подтверждения, которое основывается на возможности построения уравнений вида (28) для различных вредных веществ.

Другой метод позволяет получить логический аналог вириального уравнения состояния в термодинамике, для чего уравнение регрессии можно искать в виде:

$$Z = \frac{\tau \cdot C}{R_i \cdot \theta} = 1 + B_2(\theta) \cdot C + B_3(\theta) \cdot C^2 + \dots \quad (29)$$

Третий метод позволяет получить логический аналог уравнения Ван-дер-Ваальса.

Обращая внимание на вид уравнения (6) и учитывая две характерные закономерности, о которых будет сказано ниже, запишем уравнение состояния в виде:

$$(C - C_r) \cdot (\tau - \tau_r) = R_i \cdot \theta. \quad (30)$$

Первая закономерность состоит в том, что при любом времени τ , даже в случае если $C = 0$, существует определенная вероятность спонтанных эффектов, то есть реализация опасности как бы “запаздывает” при любом времени воздействия. Эта вероятность обычно определяется в хроническом эксперименте по оценке возникновения неблагоприятных эффектов в контрольной группе животных при отсутствии воздействия $C = 0$. Спонтанные эффекты возрастают с течением времени и достигают максимальных значений вероятности при времени, соизмеримом с биологическим возрастом вида. Принимая квадратичную зависимость эффектов во времени, получим, что τ_r пропорционально τ^2 .

Вторая закономерность связана с тем, что для различных категорий эффектов пороги

воздействия при определенном времени действия быстро возрастают с ростом концентрации, поэтому здесь можно принять параболическую зависимость коэффициента C_r от концентрации. В результате зависимость (30) представим в виде:

$$(C - a \cdot C^2) \cdot (\tau - b \cdot \tau^2) = R_i \cdot \theta. \quad (31)$$

Уравнение (31) совпадает с (6), если в последнем случае ограничиться четырьмя членами ряда.

Таким образом, можно искать уравнение состояния в виде:

$$R_i \cdot \theta = b_1 \cdot C \cdot \tau + b_2 \cdot C \cdot \tau^2 + b_3 \cdot C^2 \cdot \tau + b_4 \cdot C^2 \cdot \tau^2 + \dots, \quad (32)$$

где $b_1 = 1,0$, $b_2 = 0$, так как при $C \rightarrow 0$ уравнение (32) должно строго переходить в уравнение (7).

В термодинамике существуют методики построения уравнений (28) – (30), однако нет экспериментальных методик, позволяющих установить связи между вероятностью состояния системы, которая определяется по характерным событиям и параметрами окружающей среды. В токсикологии же наиболее распространенный подход основан на установлении в экспериментах соответствия вероятности возникновения негативных эффектов у биообъектов с параметрами окружающей среды. Поэтому для построения универсального уравнения состояния системы следует распространить экспериментальный метод оценки индекса состояния на всю область токсикологических воздействий.

На линии постоянной вероятности негативного эффекта ($Pr = const$) значение θ согласно (7) и (21) может быть определено из следующего условия:

$$\theta = \theta_s (C_0/C)^{n-1}. \quad (33)$$

Здесь θ_s – значение θ при $C \rightarrow 0$, которое определяется согласно уравнения (25). Предположим, что показатель n в процессе, когда наблюдается постоянная вероятность $W = const$, в области наблюдаемых смертельных эффектов при высоких концентрациях постоянен. В общем случае эта величина должна определяться опытным путем на всей возможной области воздействия. Для смертельных, острых и хронических эффектов в соответствующих токсикологических экспериментах показатель степени n связан с наклоном прямой, сглаживающей опытные данные в координатах $Pr - \ln C$ и может отличаться для различных областей воздействия, а также различных токсикологических признаков. При этом в области острых и хронических эффектов необходим перевод соответствующих

эмпирических шкал опасности на эмпирическую шкалу φ_s , определяющую смертельные эффекты.

Таким образом, каждой точке возможной области исходных параметров ($0 \leq C < \infty$ и $0 < \tau < \tau_0$) может быть поставлено в соответствие значение индекса эмпирической шкалы φ . В свою очередь этой же точке может быть поставлено в соответствие значение индекса θ согласно уравнения (19). Исходя из связи эмпирического индекса опасности φ и индекса θ возможно построение уравнения состояния токсикологической системы при любых значениях величин τ и C .

В качестве примера, для установления соответствия индексов θ и φ рассмотрим область смертельных эффектов.

Как было показано ранее в первой статье данного сборника, закономерность (21) является следствием следующего уравнения:

$$Pr - Pr_0 = \beta_\tau \cdot \ln \frac{C}{C_0} + \beta_c \cdot \ln \frac{\tau}{\tau_0}, \quad (34)$$

$$\text{где } \beta_c - \beta_\tau = R_i \text{ и } \beta_\tau = n \cdot \beta_c.$$

Перейдем к безразмерной величине пробита ($Pr_\theta = Pr/\beta_c$) и примем, что $Pr_0 = f(\tau)$ при $C = C_0$, тогда для оценки состояния окружающей среды:

$$Pr_\theta = f(\tau) + n \cdot \ln \frac{C}{C_0} + \ln \frac{\tau}{\tau_0}. \quad (35)$$

В свою очередь, на линии постоянного пробита, где выполняется закономерность (21), при $C \rightarrow 0$ должно выполняться условие $Pr_s = \lim_{C \rightarrow C_0} Pr_\theta$, где Pr_s определяется согласно

(23). Таким образом, с учетом (23) и (35) получаем универсальное уравнение состояния вида:

$$Pr_\theta = Pr_s + n \cdot \ln \frac{C}{C_0} + \ln \frac{\tau}{\tau_s}. \quad (36)$$

Здесь Pr_s – пробит естественной смерти при данном значении τ_s , который вычисляется согласно (23), τ – время воздействия опасной среды на биондикатор.

В общем случае коэффициент n для выбранной точки $\{C, \tau\}$ определяет некоторое поле направлений опасных процессов около этой точки и зависит от вида протекающего процесса: при постоянной концентрации ($n = n_c$), при постоянном эффекте ($n = n_{Pr}$), при постоянном времени ($n = n_\tau$, идеальный случай резкого роста концентрации) и т.д. Таким образом, в общем случае можно ввести понятие политропного опасного процесса (греч. *polytropos* – многообразный).

Уравнение (36) через шкалу φ можно представить следующим образом:

$$\varphi = \varphi_s + 60,7957 \left(\ln \frac{\tau}{\tau_s} + n \cdot \ln \frac{C}{C_0} \right). \quad (37)$$

Таким образом, для любой точки возможной области воздействия может быть найдено значение индекса опасности φ , связанного с принудительной смертью объекта, через значение индекса φ_s , которое определяет опасность естественной смерти этого объекта в случае отсутствия негативного воздействия. При этом, если $\tau = \tau_s$, то на любой линии $\tau = const$ имеем:

$$\varphi = \varphi_s + 60,7957 \cdot n_\tau \cdot \ln \frac{C}{C_0}. \quad (38)$$

В свою очередь, если $\varphi = \varphi_s$ ($Pr_\theta = Pr_s$), то на линии постоянной вероятности негативного эффекта время воздействия и концентрация вредного вещества связаны соотношением:

$$\tau = \tau_s \left(\frac{C_0}{C} \right)^{n_{Pr}}. \quad (39)$$

Как видно из (38) и (39) параметр n может быть найден как для линии $\tau = const$, так и для линии $Pr_\theta = const$. Так как данный параметр определяет направление протекания процессов в окрестности выбранного исходного состояния биообъекта, то его среднее значение может быть найдено эмпирически. Например, для точек линии $Pr_\theta = const$ $d\{\tau = 120 \text{ мин}, C = C_d, \varphi = 100^\circ \Gamma\}$ и $O\{\tau_s = \tau_0, C = C_0, \varphi = \varphi = 100^\circ \Gamma\}$ из уравнения (39) получаем зависимость (22), откуда легко определяется значение n_{Pr} для случая среднесмертельных эффектов $Pr_\theta = Pr_s = 0$. В свою очередь из уравнения (38) для линии $\tau = const$ и точек $d\{\tau = 120 \text{ мин}, C = C_d, \varphi = 100^\circ \Gamma\}$ и $p\{\tau = 120 \text{ мин}, C = C_0, \varphi = 0^\circ \Gamma\}$ получим значение n_τ . Эмпирические значения n_{Pr} и n_τ для различных вредных веществ приведены в таблице 3.

С учетом уравнений (39) и (23) мы можем построить единую однозначную шкалу индекса опасности φ . При этом оценки индекса опасности φ согласно этой шкалы должны совпадать с оценками согласно уравнения (38), для чего следует определить значение n_τ для каждой линии $\tau = const$. Факт построения такой шкалы в виде диаграмм на основе имеющихся опытных данных иллюстрируется рисунком 3.

После того как определен способ измерения величины φ не представляет сложности повысить точность уравнений,

характеризующих состояние опасной системы. Покажем это на примере определения негативных эффектов для области, характеризующей пороговый уровень хронического воздействия. Для данной области концентрации вредных веществ определяются значением Lim_{ch} (см. табл. 1), а время воздействия $\tau = \tau_s$ составляет 4 месяца. Найдем значение величины θ согласно уравнения (19), а значение индекса опасности φ определим согласно уравнения (38). При этом для уравнения (38) сформулируем дополнительные условия: при $C = C_0$, имеем $\varphi = \varphi_s$ и при

$$\tau_s = \tau_0 \left(\frac{C_0}{C} \right)^{n_{Pr}} = 172800 \text{ мин} \rightarrow \varphi = 100^\circ \Gamma.$$

Таблица 3. – Параметр n_{Pr} уравнения (39), характеризующий среднесмертельные эффекты, и параметр n_τ уравнения (38) для времени воздействия $\tau = 120 \text{ мин}$

Вещество	n_{Pr}	n_τ
Азота диоксид	1,1014	0,1999
Азота оксид	1,1031	0,2002
Аммиак	0,8589	0,1559
Бензол	0,8075	0,1465
Бромбензол	0,7769	0,1410
Диметиламин	1,1174	0,2028
Диметилацетамид	0,6928	0,1257
Диметилформамид	0,8328	0,1511
Дитолилметан	1,6774	0,3044
Диэтилхлортиофосфат	0,9679	0,1756
Диметилэтанолламин	0,9251	0,1679
Диэтиламин	0,8610	0,1562
Диэтилэтанолламин	0,8880	0,1611
Диоксан	0,7857	0,1426
Диоксид серы	1,1618	0,2108
Метилфуран	0,7930	0,1439
Моноизопропиламин	0,8502	0,1543
Озон	3,4993	0,6350
Оксид углерода	1,6416	0,2979
Пиперидин	0,8005	0,1453
Сероводород	0,8950	0,1625
Сероуглерод	0,7125	0,1293
Толуол	0,9663	0,1753
Триэтиламин	0,9894	0,1795
Фенол	0,9324	0,1692
Формальдегид	0,9324	0,1692
Фуран	0,8588	0,1558
Фурфурол	0,8314	0,1509
Циклопентадиен	0,8431	0,1530
Цианистый бензил	1,1762	0,2134
Хлористый бензил	1,3048	0,2368
Этиленмин	0,8328	0,1511

На рисунке 4 для 22 вредных веществ приведена регрессионная зависимость индекса θ от индекса опасности φ для области, характеризующей пороговый уровень хронического воздействия. Данная зависимость имеет вид:

$$\theta = \frac{C\tau}{R_i} = \exp(2,9459 + 0,02061\varphi). \quad (40)$$

Данное уравнение регрессии является значимым, при этом коэффициент корреляции достаточно высок и составляет 0,93.

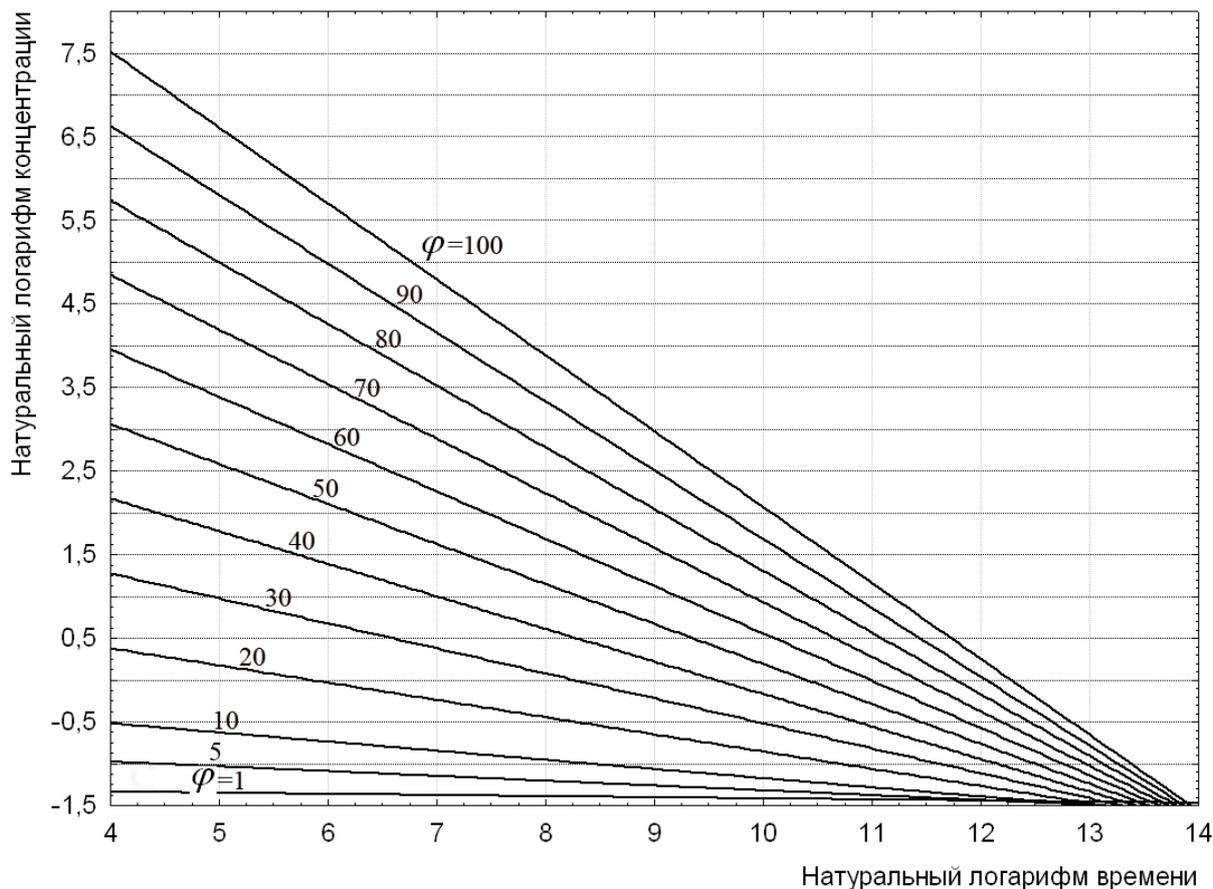


Рисунок 3. – Диаграмма опасности диоксида азота при ингаляционных воздействиях на мышей

Обратим внимание, что уравнение (40) имеет вид подобный уравнению, которое определяет связь между абсолютной (T) и эмпирической (t) температурами в термодинамике: $T = const \cdot e^{\int g(t) dt}$.

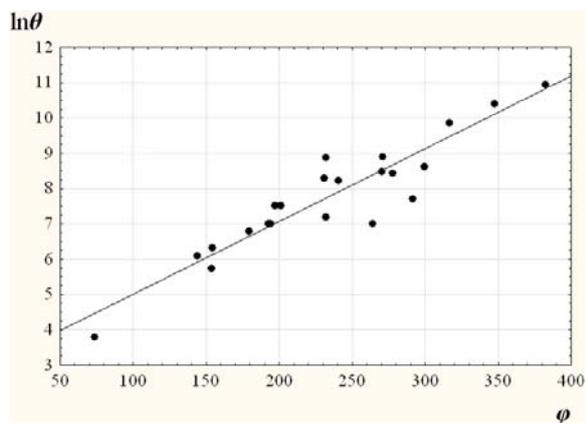


Рисунок 4. – Зависимость индекса состояния системы $\theta = C\tau/R_i$ от индекса опасности φ для области, определяющей пороговый уровень хронического воздействия

Таким образом, для установления соответствия между абсолютным индексом состояния системы θ и эмпирическим значением индекса опасности φ , который связан с вероятностью наблюдаемого смертельного эффекта у биоиндикаторов, нами использован принцип, широко применяемый в термодинамике. Этот принцип заключается в совместном рассмотрении результатов теоретического и эмпирического определения некоторого эффекта, наблюдаемого в системе. Данный эффект может быть количественно оценен как по данным опыта, так и по теоретическим данным.

При установлении теоретической закономерности нами было использовано решение (34), вытекающее из постулата подобия изменения свойств токсикологической системы во времени. С другой стороны использованы опытные данные об естественной и принудительной смертности, позволяющие оценить вероятность возникновения смертельных эффектов у биообъектов. Это дало возможность установить связь между параметрами опасной среды и вероятностью возникновения негативных эффектов у биоиндикаторов в виде уравнения состояния системы.

Таким образом, используя опытные данные по оценке смертельных воздействий, можно определить состояние системы на всей области опасных воздействий, то есть построить эмпирическую шкалу индекса опасности. Однако построение шкалы требует наличия достоверных экспериментальных данных по негативным эффектам и значениям концентраций вредных веществ C и времени воздействия τ . При этом построение шкал индексов и диаграмм опасности для различных веществ должно проводиться с учетом обработки максимально возможного количества экспериментальных данных. Однако следует отметить достаточно существенную неопределенность опытных данных в токсикологии. Например, согласно [3] для оксида углерода величина CL_{50}^{20} для белых мышей равна 2230 мг/м^3 , а согласно данным [4] соответствующее значение CL_{50}^{20} составляет 3970 мг/м^3 . Аналогичная ситуация наблюдается и для многих других опасных веществ. Поэтому тщательное определение на основе экспериментов показателей, характеризующих опасность веществ, представляет собой важную задачу в области шкалирования опасности, так как любая универсальная шкала формируется путем установления к ней требований как к объекту стандартизации.

Выводы

Предложенный метод позволяет производить оценку опасности среды путем установления связи между принудительной и естественной смертностью биоиндикатора. Это дает возможность обобщить опытные данные и получить универсальную методику оценки опасности среды при ингаляционных воздействиях. В данном случае опасность среды тестируется по живым объектам – белым мышам. Возможно также путем использования данных о хронических и острых воздействиях и применения шкалы опасности возникновения смертельных эффектов у биоиндикаторов установить соответствие между различными категориями негативных эффектов. Полученные результаты позволяют разработать универсальные диаграммы для определения опасности среды и в перспективе перейти к оценке опасности воздействий на другие живые объекты, в том числе и на человека.

Подобные диаграммы вида “ $P_{r\theta} - \varphi$ ” будут являться логическими аналогами диаграмм “энтропия-температура”, которые применяются в термодинамике для обобщения экспериментальных данных по термодинамическим свойствам различных веществ.

Систематизация опытных данных даст возможность в перспективе предсказывать значения предельно допустимых концентраций вредных веществ, используя методологию, аналогичную методологии определения термодинамических свойств веществ [1].

Таким образом, в данной статье показана возможность применения принятой в термодинамике логической схемы построения уравнений состояния систем для качественно иной области исследований, в данном случае – токсикологии.

Литература

1. Р. Рид., Дж. Праусниц, Т. Шервуд. Свойства газов и жидкостей. Л.: Химия, 1982. – 592 с.
2. М.П. Вукалович, И.И. Новиков. Уравнения состояния реальных газов. М.-Л.: Госэнергоиздат, 1948.
3. Вредные химические вещества. Неорганические соединения элементов V-VIII групп. Справочник / В.А. Филон. – Л.: Химия, 1989. – 592 с.
4. И.В. Саноцкий, И.П. Уланова. Критерии вредности в гигиене и токсикологии при оценке опасности химических соединений. М.: Медицина, 1975. – 328 с.
5. Н.И. Мухелишвили. Курс аналитической геометрии. М: Вс. шк., 1967. – 655 с.
6. Временные методические указания по обоснованию предельно допустимых концентраций (ПДК) загрязняющих веществ в атмосферном воздухе населенных мест. – М, 1989. – 110 с.
7. Г.Г. Онищенко, С.М. Новиков, Ю.А. Рахманин, С.Л. Авалиани, К.А. Буштуева. Основы оценки риска для здоровья населения при воздействии химических веществ, загрязняющих окружающую среду. М.: НИИ ЭЧ и ГОС, 2002. – 408 с.
8. David E. Harrison et al. Rapamycin fed late in life extends lifespan in genetically heterogeneous mice // Nature (16 July 2009). V. 460. P. 392–395. Doi:10.1038/nature08221.

Построение информационной модели расчета распространения примеси в приземном слое атмосферы над территориально-распределенными объектами

Павлий В.А.

Донецкий национальный технический университет,

pavliy@cs.dgtu.donetsk.ua

Abstract

Pavliy V. "Development of an information model for pollutants' distribution estimation in atmosphere bottom layer above territorially-distributed objects" An analysis of existing methods and software for pollutants' distribution estimation in atmosphere bottom layer is carried out. An information model for pollutants' distribution estimation in atmosphere bottom layer above territorially - distributed objects on real data obtained by ecological monitoring subjects is offered.

Keywords: Information model, air pollution, common diffusion equation, pollutants concentration short-term prediction, fields concentration restoring, expert prediction estimation.

Введение

В последнее время наблюдается увеличение количества публикаций, посвященных поиску новых методов прогнозирования распространения примесей в атмосферном воздухе. Однако количество публикаций по данному направлению в странах Восточной Европы, включая Россию и Украину, в целом значительно уступает количеству аналогичных публикаций в западных странах. Вместе с тем, за последние 10 лет, как в западных, так и в восточных странах существующие методики расчета распространения загрязнений в атмосфере существенно не обновлялась. В Украине, России, Белоруссии и странах СНГ продолжает действовать общенормативный документ ОНД-86 [1], а в США и ряде других западных стран используются официальные программы Агентства защиты ОПС (EPA) [2].

Несмотря на большое количество существующих публикаций по данному направлению практическое использование полученных научных результатов развито достаточно слабо. В настоящее время существует около 15 специализированных программных продуктов для прогноза распространения примесей в атмосферном воздухе. Среди отечественных программных продуктов наибольшее распространение получили "ЭОЛ", "Пленэр", УПРЗА "Эколог", "Кедр" и др., а зарубежные страны используют программные продукты семейства "CalPuff", "Plume", "TAPM", а также продукты EPA [2].

Сегодня очевидно, что построение нового поколения программных продуктов и развитие методов прогноза загрязнения атмосферного воздуха является актуальной задачей. При этом должны использоваться последние достижения

в области информационных технологий и современные способы "добычи" данных, такие как нейросетевой, спектральный и структурный анализ, позволяющие установить многие закономерности в случае, если имеются значительные массивы данных.

Методы и средства прогнозирования и загрязнения атмосферы

Сегодня специалистами в области экологического мониторинга и контроля качества ОПС при разработке новых методов распространения примесей в атмосферном воздухе рассматривается несколько подходов. Наибольшее распространение получили аналитико-эмпирические методы, основанные на аналитическом решении общего уравнения диффузии. Не менее широко распространены численные методы, основанные на приближенном решении общего уравнения диффузии с применением вычислительных методов. Применяются также и статистические методы, основанные на статистическом анализе данных наблюдений субъектов экологического мониторинга и т.п.

В основе большинства аналитико-эмпирических методов лежит общее уравнение диффузии (1):

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial \tau} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = \\ = k_{T,x} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + k_{T,y} \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \\ + k_{T,z} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + Q(\tau, x, y, z) - ac, \end{aligned} \quad (1)$$

где c – концентрация; τ – время; x, y, z – координаты; u, v – профили скорости ветра по

горизонтальным координатам x, y как функции высоты z ; w – скорость оседания ($w < 0$) или всплывания ($w > 0$) примеси; $k_{T,x}, k_{T,y}, k_{T,z}$ – горизонтальные (вдоль x и y) и вертикальный (вдоль z) коэффициенты турбулентной диффузии; a – константа, обуславливающая разложение примеси вследствие процессов фотосинтеза, химических реакций и т.п.; $Q(\tau, x, y, z)$ – функция источника примеси.

В настоящее время существует большое количество моделей, основанных на использовании соотношения (1). Среди работ советских авторов следует отметить работы Берлянда [3] и др., а наиболее известными зарубежными моделями являются модели Гиффорда [4], Гиффорда-Ханна. При поиске аналитического решения соотношения (1) функция источника примеси $Q(\tau, x, y, z)$ обычно считается заданной, а различие подходов для определения коэффициентов $k_{T,x}, k_{T,y}, k_{T,z}, a$ формирует разнообразие моделей. В работе [3] для легких стойких примесей, не имеющих собственной скорости всплывания или оседания ($w \approx 0$), а также не подлежащих разложению ($a = 0$) для точечного источника высотой H и условиях $z = 0$, $\frac{\partial c}{\partial \tau} \approx 0$ было получено решение (2):

$$C(x, y, 0) = \frac{Q(x, y, 0)}{2(1+n)k_1 \sqrt{\pi k_0} x^3} \cdot \exp\left(-\frac{u_1 H^{(1+n)}}{(1+n)^2 k_1 x} - \frac{y^2}{4k_0 x}\right), \quad (2)$$

где n, u_1, k_1, k_0 – параметры модели.

Для случая тяжелых примесей, имеющих собственную скорость оседания ($w < 0$) в [3] приводится следующее решение (3):

$$C(x, y, 0) = \frac{Q(x, y, 0) H^{w(1+n)} u_1^w}{2(1+n)^{1+2w} \Gamma(1+w) (k_1 x)^{1+w}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi k_0} x} \exp\left(\frac{u_1 H^{(1+n)}}{(1+n)^2 k_1 x} - \frac{y^2}{4k_0 x}\right), \quad (3)$$

где w – скорость оседания сферических частиц, которая определяется в соответствии с формулой Стокса (4):

$$w = 1.3 \cdot 10^{-2} \rho_n r_n^2, \quad (4)$$

где ρ_n – плотность частиц примеси, r_n – средний радиус частиц.

Используя принцип суперпозиции, в [3] также были получены решения для случая линейного и площадного источников.

Существует альтернативное решение задачи прогноза распространения загрязняющих веществ в атмосферном воздухе, приведенное в [1]. Методика [1] является общепризнанной и на

настоящий момент является официальным документом, действующим на Украине, России, Белоруссии. В [1, 3, 4] отмечено, что одной из особенностей распределения наземной концентрации является наличие максимума $C_m(x_m, y, z)$, достижимого на расстоянии x_m от источника, причем для определения $C_m(x_m, y, z)$ и x_m используется условие $\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial c}{\partial y} = 0$. Это позволило получить решение для $C_m(x_m, y, z)$ и x_m в виде (5):

$$C_m(x_m, y, 0) = \frac{AFmn\eta}{H^2 \sqrt[3]{V_1 \Delta T}} Q(x_m, y, 0), \quad (5)$$

$$x_m = \frac{5-F}{4} dH,$$

где A – коэффициент, значение которого лежит в пределах от 140 до 250 и определяется в зависимости от климатических особенностей местности; F – коэффициент, определяющий оседание вредного вещества (для легких примесей $F = 1$); m, n – коэффициенты, учитывающие условия выхода примеси; η – коэффициент, учитывающий рельефные особенности местности, V_1 – расход примеси, ΔT – разность температур примеси и атмосферного воздуха; d – коэффициент, зависящий от параметров $V_1, \Delta T, H$; H – высота источника.

В источниках [1, 3] также имеются аналогичные решения для линейных и площадных источников.

Поскольку методика [1] является практическим руководством по расчету максимальных концентраций на территории стран СНГ, многие коэффициенты уравнений были получены эмпирическим путем для климатических особенностей этих стран.

Документ [1] как практическое руководство, стал основой большинства отечественных программных продуктов, которые используются в настоящий момент для расчета загрязнения атмосферного воздуха промышленными предприятиями и получения разрешений на выбросы. Наиболее распространенными программными продуктами, разработанными на основе ОНД-86, являются “ЭОЛ”, “Пленэр”, УПРЗА “Эколог”, “Кедр” и др.

Программные продукты семейства “ЭОЛ” [5] разработаны ООО “Софт Фонд” и представляют собой автоматизированную систему расчета выбросов вредных веществ в атмосферном воздухе. Расчетная модель реализована на основе [1]. Расчет загрязнений при помощи “ЭОЛ” состоит из нескольких этапов, включающих заполнение таблиц НСИ,

формирование задания на расчет, проведение расчета. Результатом работы являются таблицы концентраций. В Windows-версиях “ЭОЛ 2000”, “ЭОЛ 2000[h]” существует возможность формирования карт загрязнения атмосферы на основе растровых карт местности. Основными недостатками продукта “ЭОЛ” являются все недостатки [1], а достоинствами – наличие словарей ПДК и групп суммации веществ.

УПРЗА “Эколог” [6] разработан фирмой “Интеграл” и позволяет рассчитать приземные концентрации загрязняющих веществ в атмосфере в соответствии с [1]. Программный продукт официально рекомендован для применения на территории России и полностью реализует положения документа [1], а также содержит ряд дополнений, разработанных НИИ “Атмосфера” с 1990 по 2007 год, устраняющих часть недостатков [1], например, позволяет проводить расчет с учетом застройки местности. В отличие от “ЭОЛ”, данный программный продукт имеет модульную структуру, что позволяет внедрять дополнительные расчетные блоки. Основным недостатком программного продукта является отсутствие интеграции с другими продуктами, а также невозможность расчета вертикальной составляющей концентрации, а достоинствами продукта, кроме модульности, являются Windows-интерфейс и наличие справочников ПДК и групп веществ.

Основой **численных** моделей является приближенное решение общего уравнения диффузии (1) с использованием численных методов, при этом предполагается задание ряда допущений, накладывающих меньшее число ограничений по сравнению с аналитико-эмпирическими моделями. При этом постановка задачи моделирования становится существенно более общей, однако сложность решения возрастает. Разнообразие численных моделей расчета концентрации примеси достаточно велико и определяется в основном различием подходов, которые используются при задании коэффициентов $k_{T,x}, k_{T,y}, k_{T,z}, a$. Наиболее известными моделями являются модели Лагранжа и Эйлера [7, 8]. Однако, в отличие от аналитико-эмпирического подхода, задание коэффициентов $k_{T,x}, k_{T,y}, k_{T,z}, a$ не предполагает поиск точного решения, а основывается на наличии закономерностей, обнаруженных для конкретного исследуемого объекта, а также ряда гипотез, наиболее известными из которых являются гипотезы турбулентности Прандтля, Буссинеска, Колмогорова. Функция источника примеси $Q(\tau, x, y, z)$ в большинстве моделей также является заданной, причем для нестационарных моделей в основном используется ее численное представление, например, в виде временного табличного ряда.

Численная модель Лагранжа [7] представляет собой однослойную двумерную модель расчета распространения примеси и определяется соотношением (6):

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} = Q(\tau, x, y, z) - ac. \quad (6)$$

Данная модель имеет существенные упрощения, в частности, отсутствует вертикальная составляющая $w \frac{\partial c}{\partial z}$, вместо которой вводится понятие вертикальной колонны воздуха, а также предполагается, что изменение концентрации $\frac{dc}{d\tau}$ в течение всего времени моделирования задается в виде (7):

$$\frac{dc}{d\tau} = F - R, \quad (7)$$

причем параметры F, R определяются в соответствии с [7].

Результатом расчета является осредненное значение концентрации по всей высоте колонны. Это не позволяет достаточно точно определять приземные концентрации, а отсутствие коэффициентов турбулентной диффузии $k_{T,x}, k_{T,y}, k_{T,z}$ в соотношении (6) приводит к большим ошибкам расчета в приземном слое.

Численная модель Эйлера [8] в отличие от модели Лагранжа представляет собой многослойную трехмерную модель расчета распространения примеси и определяется следующей системой соотношений (8):

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial \tau} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} = \\ = k_{T,xy} \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) - ac + Q(\tau, x, y, z). \\ \frac{\partial c}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial z} \left(k_{T,z} \frac{\partial c}{\partial z} \right) \end{cases} \quad (8)$$

Данная модель также имеет ряд допущений, влияющих на степень ее адекватности в меньшей степени по сравнению с моделью Лагранжа. Наиболее важными допущениями являются разбиение общего уравнения диффузии (1) на вертикальную и горизонтальную составляющие для упрощения процедуры поиска численного решения. Кроме того, предполагается, что коэффициенты турбулентной диффузии по осям x, y одинаковы, т.е.: $k_{T,x} = k_{T,y} = k_{T,xy} = const$.

При изучении процессов распространения примеси по высоте при помощи модели Эйлера обычно выделяют несколько горизонтальных слоев, при этом система (8) решается отдельно для каждого слоя. Параметр модели $k_{T,xy}$ определяется

эмпирическим путем, а параметр $k_{T,z}$ зависит от турбулентных характеристик взятого слоя. Так, для слоя атмосферы $z < 100$ параметр $k_{T,z}$ определяется в соответствии с (9), а для остальных слоев рассчитывается в зависимости от устойчивости атмосферы: для нейтральных и неустойчивых слоев используется формула (10), для устойчивых слоев расчет ведется в соответствии с (11):

$$k_{T,z}(z) = \chi u_* z / \Phi \left(\frac{z}{L_*} \right), \quad (9)$$

$$k_{T,z}(z) = \chi u_* z e^{-4z/H} / \Phi \left(\frac{z}{L_*} \right), \quad (10)$$

$$k_{T,z}(z) = \chi u_* z e^{-z/H} / \Phi \left(\frac{z}{L_*} \right), \quad (11)$$

где L_* – параметр Монины-Обухова, $\chi = 0.43$ – постоянная Кармана; u_* – динамическая скорость примеси; параметры $u, v, \Phi \left(\frac{z}{L_*} \right)$ определяются в соответствии с [8].

После задания указанного набора параметров модель (8) решается численно на сетке, размеры ячейки при этом составляют 50×50 км. Для численного решения дифференциальных уравнений сегодня используются методы Рунге-Кутты, лежащие в основе решателей, разработанных на языках Фортран, Си. Результатом решения является поле концентраций загрязняющего вещества, полученных в узлах сетки.

По мнению многих специалистов, модель Эйлера допускается использовать только на крупных сетках (25×25 км и более), в то время как на более мелких она дает лишь приблизительные результаты. Для крупных сеток задание источников выбросов $Q(\tau, x, y, z)$ производится путем осреднения концентрации всех источников, приходящихся на указанную ячейку сетки. С уменьшением величины ячейки процесс задания функции $Q(\tau, x, y, z)$ усложняется, что приводит к существенным ошибкам задания исходных данных. Это не позволяет использовать указанную модель для территориально-распределенных объектов сравнительно небольших размеров (городов, районов и т.д.).

Несмотря на указанные недостатки, численные модели лежат в основе большинства существующих сегодня программных продуктов преимущественно зарубежного происхождения. Наиболее распространенными зарубежными продуктами являются “EMEP”, “CalPuff”, “AerMod”, “TAPM”, “Chimere”, а из отечественных продуктов существует ЭПК

“Zone”, обновление которого не производилось с 2003 года.

Интернет-версия программного продукта “EMEP” [9] разработана метеорологическим центром прогноза (MSC-e) в Великобритании и ориентирована, в первую очередь, на расчет распространения тяжелых металлов и ЛОС в атмосфере. Основой расчетной модели EMEP является модель Эйлера с некоторыми модификациями, позволившими сократить ошибку расчета. Интернет-версия модели не предполагает задание исходных данных пользователями, так как сопровождение модели осуществляется сотрудниками MSC-e. На настоящий момент модель позволяет строить карты распространения тяжелых металлов и ЛОС по данным 2006 года для 49 стран Восточной Европы, включая Россию, Украину, Белоруссию. Для построения карты достаточно выбрать страну и указать тип примеси. Модель использует крупную сетку 50×50 км, что позволяет получить приблизительные данные о состоянии воздуха. Крупным недостатком программного продукта “EMEP” является невозможность построения карт для неорганических соединений.

Программный продукт “CalPuff” [10] разработан компанией “Earth Tech” (Concord) и представляет собой комплексную систему прогноза метеорологических показателей и расчета распространения загрязнений в атмосферном воздухе. В состав продукта входят три главных компонента: CalMet, CalPuff, CalPost. Метеорологический препроцессор CalMet используется для моделирования полей температуры и направления ветра в зависимости от условий региона и рельефных особенностей местности. Транспортно-дисперсионная модель CalPuff предназначена для расчета распространения примеси, а модель постобработки CalPost необходима для визуализации результатов расчета.

Расчетная модель каждой из компонент системы реализована численно на языке Фортран и распространяется с открытыми исходными кодами. Обмен исходной информацией между компонентами системы осуществляется при помощи текстовых файлов. Система имеет ряд преимуществ по сравнению с отечественными программными продуктами, так как учитывает динамику метеорологических показателей. Недостатки системы сводятся к усложненной процедуре ввода исходных данных и отсутствию встроенных средств их редактирования. Ограниченное быстродействие (для 218 источников и 425 узлов расчет производится около 95 часов [11]), а также неопределенность исходных данных не позволяют использовать данный продукт на территории Украины, где для среднего

промышленного района количество источников может составлять сотни тысяч.

В основе **статистических** моделей лежат решения дифференциального уравнения (1), полученные по подобию известных аналитико-эмпирических решений, причем коэффициенты определяют либо эмпирическим путем, анализируя большие объемы исходных данных, либо используют известные теории (Тейлора, Гаусса и др.). Как в первом, так и во втором случае для определения эмпирических коэффициентов могут использоваться любые статистические методы, например, спектральный анализ Фурье, метод АРСС, регрессионный анализ, а также изучение описательных статистических характеристик. Существенным недостатком статистических моделей является зависимость от рельефных, промышленных, климатических особенностей конкретной местности, что не позволяет применить разработанную модель даже на соседних территориях (как правило, для этого может потребоваться значительная адаптация).

Наиболее известными моделями, использующими указанный подход, являются модели факела “Лагранжа – Гаусса”, а также наиболее простые зависимости вида (12), учитывающие только дисперсионные коэффициенты:

$$C(x, y, z) = \frac{Q(x_i, y_i, z_i)}{2\pi^{3/2}\sigma_x\sigma_y\sigma_z} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2} - \frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right), \quad (12)$$

где $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ – дисперсионные коэффициенты, учитывающие характер распределения примеси по осям x, y, z в зависимости от климатических, промышленных, рельефных и др. особенностей местности и определяющиеся эмпирическим путем.

Ошибка данной модели существенно зависит от правильности подбора параметров $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$. В ряде случаев, особенно для слабо шероховатых незастроенных поверхностей и ограниченного числа источников модель имеет достаточно высокую достоверность.

Другой распространенной моделью, наиболее часто используемой в программных продуктах, является модель факела “Лагранжа-Гаусса” (13):

$$C(x, y, z) = \frac{Q(x_i, y_i, z_i)}{2\pi\sigma_x\sigma_y\sigma_z} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{z-H}{\sigma_z}\right)^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{z+H}{\sigma_z}\right)^2\right). \quad (13)$$

В данной модели учитывается высота источника H , а также средняя скорость ветра u по направлению оси x , что приводит к

получению более достоверных результатов в сравнении с (12). Основными недостатками модели является сложность определения коэффициентов $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$.

Описанные модели, а также основанная на них официальная методика ISC3 получила широкое распространение в ряде зарубежных стран, так как является практической основой расчета концентраций примеси для разработки программных продуктов. Рассмотренный ранее программный продукт “CalPuff” также реализует данные модели.

Автором были также проанализированы основные возможности и других продуктов расчета распространения примеси в атмосфере. Сравнительная характеристика их возможностей показана в таблице 1.

Таблица 1. – Сравнение возможностей программных средств для расчета распространения примесей в атмосфере

Сравнительная характеристика	“ЭОЛ2000”	“Пленер”	УПРЗА “Эколог”	КИС “Кедр”	“ЕМЕР”	“CalPuff”	“AerMod”	“TAPM”	“Chimere”
Интернет-версия					+				+
Сеансовость	+		+			+	+	+	
Модульность			+	+		+	+	+	
Наличие справочников	+	+	+	+					
Поддержка картографии	+		+	+	+	+	+	+	+
Возможность печати	+		+	+		+	+	+	
Импорт и экспорт				+		+	+	+	
Базы данных				+	+				+
Точность расчета	±	±	±	±	-	+	+	+	-
Скорость расчета	+	+	+	+	+	±	±	±	+
Метеорологический препроцессор						+	+	+	
3D - визуализация	-	-	-	-	-	+	+	-	-

Анализ данных таблицы 1 показывает, что немногие программные продукты применяют современные технологии (например, поддержку сеансовости, баз данных и т.п.). Сравнительно малое количество программных продуктов позволяет осуществлять прогноз метеорологических показателей, также слабо развит ввод географической информации, а возможностью 3D-визуализации не обладает ни один из отечественных аналогов.

Таким образом, существующие сегодня средства прогноза состояния атмосферного воздуха не позволяют эффективно решать основные задачи экологического мониторинга, предусмотренные законодательством Украины. Связано это с различием используемых подходов и получаемых результатов. Неоднородность исходных данных, а также отсутствие ряда показателей, необходимых для расчета концентрации загрязняющего вещества с использованием того или иного подхода, характерно для большинства существующих методов. В определенных случаях это не позволяет использовать часть методов вообще, другие методы требуют предварительной адаптации к конкретному объекту путем эмпирического уточнения коэффициентов уравнений, лежащих в основе метода, третьи не учитывают климатические и рельефные особенности местности или дают значительные погрешности расчета, соизмеримые с исходными значениями концентраций.

Рассмотренные в рамках различных подходов методы и средства предполагают, что выбросы вредных веществ для каждого из источников известны. На практике, однако, количество стационарных источников для промышленного города средних размеров может составлять до 100 тыс., причем выбросы большинства из них не контролируются субъектами мониторинга, а определяются предприятиями самостоятельно на этапе инвентаризации выбросов. Исходя из этого, рассмотренные методы и средства, в основе которых положено общее уравнение диффузии (1), оказываются неприменимы. Это является **главной причиной** невозможности использования программных средств. Таким образом, поиск новых методов прогноза распространения примесей в атмосфере, ориентированных на значительное сокращение объемов исходных данных, имеющих низкую достоверность, является актуальной задачей.

Постановка задачи и разработка информационной модели расчета распространения примеси

При разработке новых методов расчета распространения примеси в атмосфере необходимо использовать данные наблюдений за состоянием атмосферного воздуха, собираемых субъектами экологического мониторинга (областными и региональными гидрометеоцентрами, СЭС и др.). Сегодня в городах Украины на стационарных постах контроля загрязнения атмосферного воздуха собирается значительный объем экологической информации. В год общее количество наблюдений на этих постах включает от 5 до 10 тыс. для одного загрязняющего вещества. Для

ряда крупных городов количество наблюдений уже составляет более 100 тыс. наблюдений в год, а для Украины в целом – 5-10 млн. в год. Кроме информации о концентрациях примеси имеется существенно больший объем метеорологических наблюдений. Таким образом, количество имеющейся экологической информации очень значительно, что дает возможность построения прогнозных моделей распространения примесей в атмосферном воздухе. Однако, для разработки информационных моделей необходим поиск закономерностей в имеющихся базах данных экологической информации.

Для поиска закономерностей в указанных объемах информации необходима единая информационная модель для ее обработки, которая позволит объединить в единое целое комплекс новых и имеющихся методов прогноза и оценки состояния атмосферного воздуха. Эта модель является инструментальной базой для проведения дальнейших исследований.

Программные продукты, разработанные на основе предлагаемой модели, должны обеспечивать возможность решения следующих задач:

- накопление, хранение, предобработка исходных данных, собираемых субъектами экологического мониторинга;
- проведение анализа исходных данных и представление ее в удобном для пользователя формате;
- проведение прогнозов распространения примеси в атмосферном воздухе по реальным данным субъектов мониторинга;
- обеспечение помощи в принятии решений экспертами (например, при выдаче разрешений на выбросы).

Исходя из поставленных задач, информационная модель должна обладать следующим набором функций:

- формировать набор исходных данных с внутренней структурой представления на основе данных, предоставляемых субъектами экологического мониторинга в форматах обмена экологической информацией (АСОИЗА, SQL);
- обеспечивать простоту интеграции любого из методов расчета распространения примеси;
- обеспечивать предобработку исходной информации и определять базовый набор статистических, динамических и других показателей, которые необходимы для работы большинства методов;
- сохранять информацию, полученную на промежуточных шагах обработки;
- восстанавливать результаты расчета, если используемый набор исходных данных ранее уже обрабатывался конкретным методом;

- производить оценку качества прогноза каждого из методов, интегрированного в информационную модель путем определения критериев значимости;

- предоставлять методам информацию о значимости, позволяющий автоматически корректировать его внутренние параметры с целью уменьшения ошибки прогноза;

- информировать о проводимой оценке качества работы метода;

- выполнять постобработку выходной информации.

Информационная модель должна использовать три группы исходных данных:

- метеорологическая информация;

- информация о концентрациях примеси, собираемая субъектами экологического мониторинга;

- географическая информация.

Информационная модель должна предоставлять следующие виды выходной информации:

- временные ряды прогнозных значений концентрации примеси, полученные с использованием методов краткосрочного и долгосрочного прогнозирования;

- восстановленные поля концентраций загрязняющих веществ, полученные путем использования методов пространственной аппроксимации, представленные в виде пространственных графиков и изображений поля с возможностью наложения и топографической привязки географических карт, экспортированных из распространенных ГИС систем;

- резюмирующая информация для экспертов в области охраны ОПС, позволяющая оценивать принятые решения.

Для реализации рассмотренных функций была разработана структура информационной модели расчета загрязнения атмосферы (см. рис. 1), которая включает 3 стадии обработки экологической информации: предобработку, обработку и постобработку. Предлагаемая структура содержит:

- *модуль импорта информации*. Данный модуль используется для перевода информации, предоставленной субъектами экологического мониторинга из распространенных форматов в формат внутреннего представления в виде SQL команд. Сегодня существует несколько подобных форматов, однако на Украине используется, в основном, формат АСОИЗА. Модуль импорта также позволяет преобразовывать географическую информацию, которая представляет собой векторные карты конкретного территориально-распределенного объекта, например, в формате MIF (MapInfo Interchange Format);

- *база исходных данных*. Представленная в виде SQL запросов информация в зависимости от ее типа распределяется на три блока: информация о концентрациях загрязняющих веществ, метеорологическая и географическая информация. Следует отметить, что для представления информации в двух первых блоках могут быть использованы стандартные типы данных, в то время как для представления географической информации необходимы особые типы данных, не входящие в спецификацию языка SQL, что ограничивает выбор средств реализации. При разработке модели также учитывалась возможность ее применения в многопользовательской Интернет-среде. Во избежание известных ошибок (взаимоблокировка, “борьба за ресурсы” и т.п.), неизбежно возникающих при выполнении подобных приложений был предложен следующий принцип: любые данные, исходящие от субъектов мониторинга, не подлежат модификации и удалению. С этой целью в структуру информационной модели вводится еще один дополнительный блок, данные в который заносятся на этапе предварительной обработки исходных данных и которые определяются системой автоматически. Блок дополнительной информации содержит, например, значения статистических показателей или расстояний между постами экологического мониторинга и другие данные, которые используются большинством методов. При определении аномальных значений данный блок содержит ссылки на элементы, которые следует считать аномальными, при этом сами значения не удаляются, что способствует целостности исходных данных;

- *сортировка*. Так как исходные данные от субъектов мониторинга могут поступать в неопределенном порядке, необходимо выполнять сортировку каждый раз при добавлении новых данных в базу, так как для большинства методов прогнозирования важен порядок наблюдения во времени. Перечень полей, по которым выполняется сортировка, зависит от структуры базы данных конкретного программного обеспечения, однако порядок сортировки определяется следующим образом: по дате наблюдения, по постам наблюдения, по ингредиентам, по метеорологическим данным;

- *удаление аномальных наблюдений*. На данном этапе предварительной обработки производится исключение из дальнейшей обработки или коррекция исходных данных, которые являются аномальными. Аномальными наблюдениями считаются: дуближи, которые могут возникать при повторном импорте данных, наблюдения, выходящие за допустимые границы диапазона, а также наблюдения,

выходящие за пределы, определяемые аномальными критериями;

- *инициализация параметров.* Данный этап предусматривает расчет и инициализацию параметров, которые не зависят ни от времени, ни от пространственных характеристик, а зависят только от типа территориально-распределенного объекта и являются общими для большинства методов расчета. Большая часть статистических методов используют ряд эмпирических и статистических параметров и закономерностей. Такими параметрами, в первую очередь, являются скорость оседания или всплывания для тяжелых примесей, определяемая в соответствии с (4), а также основные статистические показатели, которые также используются в ряде методов. Существует возможность определить указанные параметры для наиболее распространенных примесей заранее с целью сокращения времени расчета;

- *расчет осредненных месячных и годовых концентраций и метеорологических параметров.* Среднемесячные и среднегодовые концентрации используются при поиске закономерностей изменения концентраций в окрестности стационарного поста мониторинга для выявления трендов, всплесков и сезонных составляющих. В результате осреднения концентраций за счет уменьшения объема информации удаляются и характерные шумы, всегда присутствующие в исходных временных рядах концентраций загрязняющих веществ. Среднемесячные и среднегодовые данные могут быть использованы также при долгосрочных прогнозах (от 5 лет и более). В некоторых методах долгосрочного прогнозирования требуется определять эмпирическим или расчетным путем некоторое приближение прогнозного значения на конце интервала прогноза. Кроме того, за счет сокращения набора данных становится доступным также и визуальное изучение среднемесячных и среднегодовых концентраций в виде графиков, таблиц, а поэтому указанная информация может быть доступна на пользовательском уровне;

- *расчет пространственных отношений.* Для методов пространственной аппроксимации исходных данных крайне важно знать пространственные отношения, связывающие между собой посты и источники выбросов. Подобные отношения чаще всего представляют собой географические координаты местности, все остальные характеристики являются производными. Для определения координат в настоящее время используются современные ГИС с использованием GPS технологии. Точность GPS систем определяется количеством спутников, видимых с точки расположения GPS-приемника и ошибок эфирометра

(неточностей данных расположения спутника), и лежит в пределах от 6 до 12 метров.

Производными пространственными характеристиками, определяемыми на основе географических координат, являются:

1) декартовы координаты всех постов наблюдения и источников выбросов, определенные относительно некоторой точки, называемой точкой привязки;

2) расстояния от точки привязки до всех постов наблюдения и источников выбросов;

3) расстояния от постов и источников выбросов между собой;

4) азимуты углов между постами и источниками выбросов и выбранного направления.

Для расчета расстояний и определения декартовых координат может использоваться модифицированная формула гаверсинусов [12], а для определения азимута – формулы (14):

$$A^i = \begin{cases} \arccos\left(\frac{D_x^i}{D_{nt}^i}\right), D_x^i \geq 0, D_y^i \geq 0 \\ \pi - \arccos\left(\frac{D_x^i}{D_{nt}^i}\right), D_x^i < 0, D_y^i \geq 0 \\ \frac{\pi}{2} - \arccos\left(\frac{D_x^i}{D_{nt}^i}\right), D_x^i \geq 0, D_y^i < 0 \\ \frac{\pi}{2} - \arccos\left(\frac{D_x^i}{D_{nt}^i}\right), D_x^i < 0, D_y^i < 0 \end{cases}, \quad (14)$$

$$D_{nt}^i = \sqrt{D_x^i + D_y^i},$$

где D_x^i, D_y^i – проекции координат i -той точки на оси выбранной системы координат;

- *аппроксимация.* В связи с большой неоднородностью исходных данных субъектов мониторинга на последнем этапе предобработки выполняется приближенная в узлах аппроксимация. Неоднородность исходных данных (пропуски значений и др.) возникает в случае отсутствия наблюдений за некоторый период времени, либо при удалении аномальных значений. Однако условие однородности исходных данных зачастую является обязательным для построения моделей краткосрочного прогноза, в которых каждое последующее значение зависит от значений, полученных на предыдущих шагах. Наибольшее распространение получили полиномиальные функции Ньютона и Лагранжа, которые обладают высокой точностью;

- *краткосрочное прогнозирование.* На данном этапе предполагается осуществлять краткосрочный прогноз путем использования одного из методов краткосрочного прогнозирования (см. рис. 1). Входная информация для любого из методов является одинаковой и представлена временными рядами

концентраций одной или нескольких примесей, выбираемых пользователями, временными рядами метеорологических показателей и таблицами блока дополнительной информации, в которых хранятся результаты, полученные на стадии предобработки.

Любой метод может также использовать экспертную информацию, которая представляет собой набор показателей для оценки качества его работы. Как правило, показатели представляют собой зависимости, задаваемые в виде таблиц (например, зависимость общей ошибки прогноза от глубины прогноза). На основе указанных зависимостей каждый метод может корректировать окончательный результат прогноза с целью уменьшения общей ошибки. Однако, поскольку не каждый метод позволяет корректировать результат своего прогноза, на рис. 1 данная возможность обозначена штрихпунктирной линией.

Выходная информация каждого из методов прогноза представлена временными рядами прогнозных значений, который вместе с набором пользовательских параметров (начало прогноза, конец прогноза, набор загрязняющих веществ, название метода прогноза и т.д.) заносится в таблицы информационного блока результатов прогноза, что необходимо для исключения повторного прогнозирования одинаковых входных данных;

- *долгосрочное прогнозирование.* На данном этапе выполняется долгосрочный прогноз изменения концентраций загрязняющих веществ (сроком на 5 и более лет) на постах экологического мониторинга путем применения одного из методов долгосрочного прогноза. Входной информацией для большинства методов являются осредненные концентрации загрязняющих веществ и их статистические характеристики, полученные ранее. Применение экспертной информации, как и в методах краткосрочного прогнозирования, состоит в программной коррекции результатов прогноза с целью уменьшения общей ошибки прогноза. Выходная информация методов долгосрочного прогноза, как и выходная информация методов краткосрочного прогноза, представляет собой временной ряд прогнозных значений, который вместе с набором пользовательских параметров заносится в таблицы информационного блока результатов прогноза;

- *восстановление поля концентраций.* На данном этапе предполагается построение полей концентраций примеси над территориально-распределенным объектом по исходным данным субъектов экологического мониторинга путем использования методов восстановления полей концентраций (см. рис. 1). Эти данные представляют собой реальные наблюдения, субъектов экологического мониторинга, либо

прогнозные значения, полученные ранее. Входная информация для каждого из методов восстановления поля концентраций представлена в виде:

- 1) концентраций примеси на всех постах мониторинга за указанную дату;
- 2) таблиц блока географической информации;
- 3) месторасположения стационарных постов наблюдений;
- 4) таблиц блока дополнительной информации;
- 5) метеорологической информации за указанную дату.

Кроме этого, каждый из методов может также использовать экспертную оценку пространственного прогноза, формируемую соответствующим блоком, для коррекции результата с целью уменьшения общей ошибки работы метода.

Выходная информация методов восстановления полей концентраций представляет собой массив данных, который представляет собой координаты и рассчитанное значение концентрации для точек восстановления;

- *экспертная оценка прогноза.* На данном этапе формируются показатели, позволяющие эксперту оценить качество прогноза каждого из методов в отдельности применительно к рассматриваемому объекту. При этом для повышения качества прогноза методов наиболее важной считается апостериорная оценка. Оценивается качество прогноза, как правило, при помощи интегрального метода, причем наиболее важными критериями считаются: общая ошибка прогноза, качество исходных данных, качество метода оценки, качество подбора весовых коэффициентов для формирования общей оценки и т.п.;

- *экспертная оценка пространственной аппроксимации.* Для проведения экспертной оценки пространственной аппроксимации предполагается формирование набора показателей. Качество прогноза оценивается экспертом по указанному набору, причем наиболее важными критериями считаются: общая ошибка аппроксимации, характеристики метода, перечень используемых наборов исходных данных, количество точек с известными значениями концентрации (постов мониторинга и источников выбросов), качество исходных данных, качество подбора весовых коэффициентов для формирования общей оценки и т.п.;

- *формирование графиков.* По запросу пользователя на данном этапе предполагается формирование графиков временных рядов по результирующим данным. Для визуализации апостериорной оценки качества прогноза

предусматривается возможность наложения результатов прогноза на реальные данные, собранные субъектами мониторинга. Для оценки качества состояния атмосферного воздуха на графиках поверх выходной информации могут выводиться критерии качества (ПДК, среднее значение и т.п.), обеспечивая возможность анализа данных;

- *формирование таблиц.* На данном этапе по соответствующему запросу пользователя могут быть получены таблицы, содержащие результаты прогноза, что является менее наглядным, но более информативным способом представления выходной информации. На данном этапе может также выполняться экспорт информации с использованием стандартных интерфейсов для согласования с другими программными продуктами обработки данных;

- *формирование результатов экспертной оценки прогноза и пространственной аппроксимации.* Данный этап предусматривает выдачу результатов экспертной оценки прогноза и пространственной аппроксимации эксперту в виде графиков, таблиц и др. для визуальной оценки работы каждого из методов прогноза и пространственной аппроксимации;

- *формирование полей.* На данном этапе производится формирование поля концентрации в виде статического или анимированного изображения по данным, полученным в результате пространственной аппроксимации;

- *формирование карт.* Данный этап предполагает построение географических и топологических карт, которые служат базовой подложкой при нанесении данных пространственной аппроксимации и облегчают взаимодействие пользователя с системой;

- *модуль визуализации* обеспечивает вывод готового изображения на экран ПК;

- *модуль управления* обеспечивает взаимодействие пользователя с системой и управляет работой системы в целом.

В дальнейшем представленную информационную модель можно использовать в качестве основы для построения информационно-аналитических программных комплексов прогнозирования распространения загрязняющего вещества над территорией произвольного объекта.

Выводы

Выполнен анализ существующих методов и средств расчета распространения примеси в приземном слое атмосферы. В результате анализа установлено, что существующие сегодня программные продукты не позволяют в полном объеме решать задачи экологического мониторинга, определенных в соответствии с законодательством Украины. Основным

недостатком всех проанализированных методов и средств является необходимость задания функции источника примеси, которая сегодня достоверно не определяется для большинства источников. Исходя из этого, была предложена информационная модель расчета распределения примеси в приземном слое атмосферы по реальным данным, собираемым субъектами экологического мониторинга.

Литература

1. Методика расчета концентраций в атмосферном воздухе вредных веществ, содержащихся в выбросах предприятий ОНД-86.– Л.: Гидрометеиздат, 1987. – 68 с.
2. US EPA: United States Environmental Protection Agency // Эл. ресурс. URL: <http://www.epa.gov>.
3. Берлянд М. Е. Прогноз и регулирование загрязнения атмосферы. – Л.: Гидрометеиздат, 1985. – 272 с.
4. Атмосферная диффузия и загрязнение воздуха // Под ред. А.С. Моница. М.: Ин. лит., 1962. – 512 с.
5. СФ Продукты – экология: ЭОЛ, ЭОЛ 2000, ЭОЛ 2000[h] // Эл. ресурс. URL: <http://www.sfund.kiev.ua/rus/products/>.
6. Унифицированная программа расчета загрязнения атмосферы “Эколог”. Версия 3.0. Руководство пользователя // Эл. ресурс. URL: <http://integral.ru/Integral/userguides>.
7. Tsyro S.G. The EMAP Lagrangian Acid Deposition Model (LADM) // El. resource. URL: <http://www.emep.int/acid/ladm.html>.
8. Travnikov O., Ilyin I. Regional model MSCE-HM of heavy metal transboundary air pollution in Europe. MSC-E Technical Report // El. resource. URL: http://www.msceast.org/events/review/hm_description.html.
9. Meteorological Synthesizing Centre – East – Countries – Ukraine // El. resource. URL: <http://www.msceast.org/countries/Ukraine/>.
10. Scire J. S., Strimaitis D. G., Yamartino R. J. A User’s Guide for the CALPUFF Dispersion Model (Version 5). Earth Tech, Inc., Concord, 2000.
11. Павлий В.А., Аверин Г.В. Информационно-аналитические модели переноса примесей над территориально-распределенными объектами // Тези доп. міжнар. наук. конф. “Інтелектуальні системи прийняття рішень та прикладні аспекти інформаційних технологій” (ISDMIT 2006), Євпаторія, 2006. – С. 108 – 111.
12. GIS-Lab: Вычисление расстояния и начального азимута между двумя точками на сфере // Эл. ресурс. URL: <http://gis-lab.info/qa/great-circles.html>.

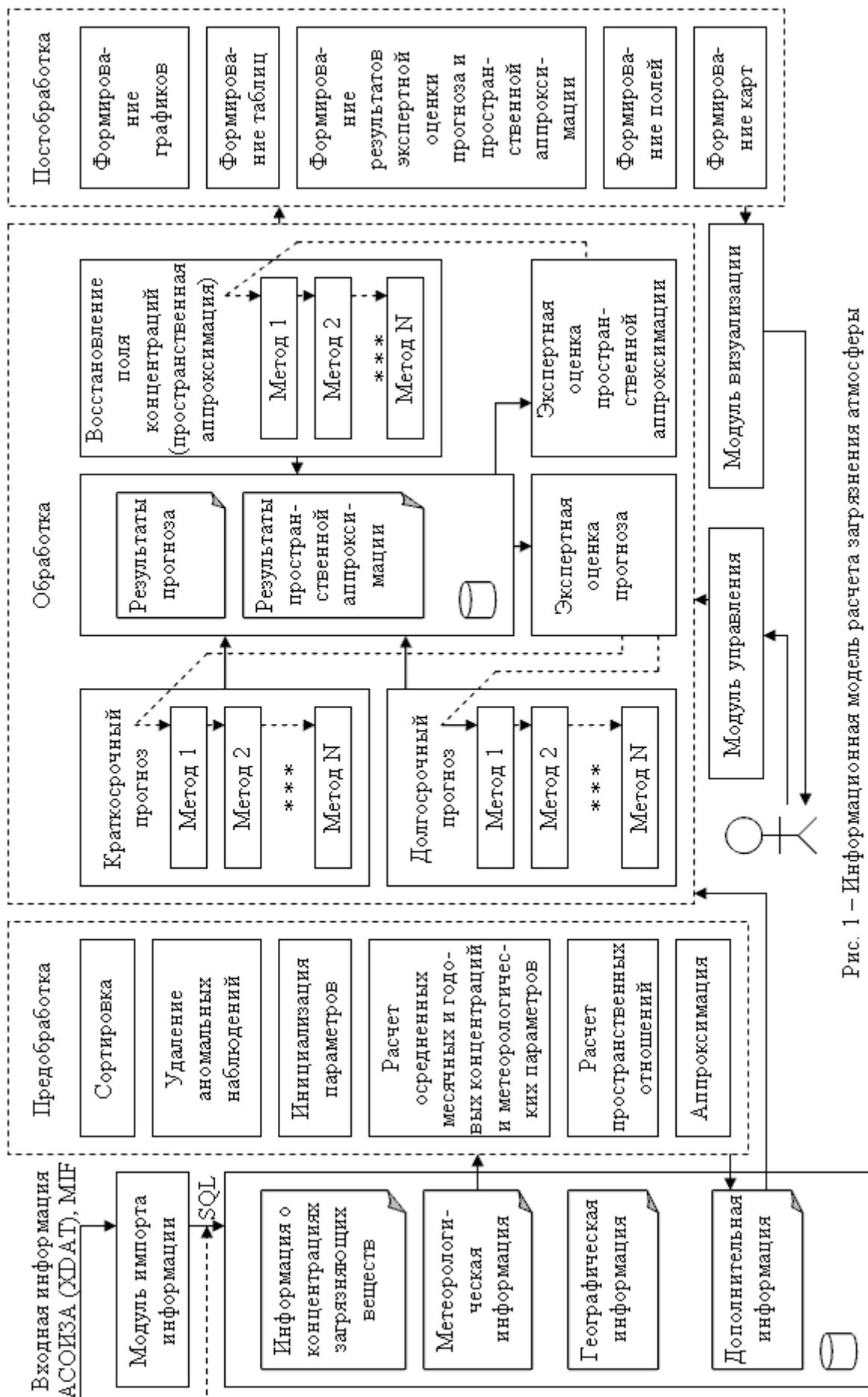


Рис. 1 – Информационная модель расчета загрязнения атмосферы

Донецкая область в мировых координатах развития человеческого потенциала

Звягинцева А.В., Аверин Е.Г.
Донецкий национальный технический университет,
Zviagintseva@cs.dgtu.donetsk.ua

Abstract

Zviagintseva A., Averin E. "Donetsk area in global coordinates of human potential development" Description of socio-economic development analysis methods for cities and regions is given. The comparative assessment of socio-economic state of Donetsk area and regions of Ukraine in global coordinates is executed. Results of estimation of following indicators are presented: Human Development Index (HDI) and Human Poverty Index for selected OECD countries (HPI-2) for regions of Ukraine in 2006.

Введение

Развитие общества характеризуется множеством количественных и качественных показателей, среди которых наиболее значимыми являются экологические, экономические и социальные факторы. Известно, что для анализа развития городских агломераций и территориальных природно-промышленных комплексов используется различная статистическая информация, обобщающая сотни показателей. Отбор и обоснование параметров в качестве определяющих признаков социально-экономического состояния городов и регионов проводится на основе изучения информационных показателей, рекомендуемых экспертами. Считается, что данные показатели позволяют не только отслеживать и оценивать ход осуществления экологической, социальной, экономической политики, но и помогают совершенствовать её. Они также способствуют установлению приоритетов и целевых функций, помогают судить об эффективности выполнения принятых правительством или местными властями обязательств.

В качестве информационных показателей обычно выступают индикаторы и индексы, с помощью которых обобщается информация для лиц, принимающих решения. Проблема оценки уровня развития стран признана в настоящее время столь важной, что ряд стран (Бельгия, Англия, США, Кения и др.) открыли специальные институты, занимающиеся разработкой и обоснованием информационных показателей [1] и их практическим применением. Цель использования индикаторов и индексов в основном связана с оценкой ситуации (состояния, обстановки) по различным направлениям деятельности общества. Например, при экологической оценке на

основании такого анализа для системы поддержки принятия решений может быть дан прогноз возможного развития событий и разработаны рекомендации по обеспечению устойчивого развития.

Стратегическая оценка осуществляется практически во всех развитых странах, так как позволяет прогнозировать процессы социально-экономического и экологического развития. Основой анализа является принцип, что при упреждающей стратегической оценке легче выявить и предотвратить негативные последствия для населения и окружающей природной среды на стадии принятия решений, чем их обнаружить и исправлять на стадии осуществления. Методы стратегической оценки крайне разнообразны, однако, в настоящее время не существует общей теории, которая характеризовала бы социально-экономическое и экологическое развитие городов и регионов. Каждый город и административный район страны во исполнение закона Украины «О государственном прогнозировании и разработке программ экономического и социального развития Украины» регулярно формирует годовые и перспективные программы социально-экономического развития. Однако основной принцип создания таких программ – планирование от достигнутого в рамках имеющихся средств. При этом количество оцениваемых социально-экономических показателей может достигать несколько сотен. Несмотря на важность данного вопроса в этой области практически отсутствуют методы и средства поддержки принятия решений.

В основе стратегической оценки состояния систем с использованием индикаторов и индексов лежат преимущественно экспертные методы [1-8]. При этом вопрос об информативности индикаторов и индексов, а также их связей между собой при описании процессов развития систем остается

открытым. Например, принцип аддитивности индикаторов с учетом весов показателей, принятый при анализе устойчивого развития стран, регионов и территорий, не всегда дает объективную оценку и теоретически не обоснован. Современные методики, такие как ИРЧП, ИНН-1, ИНН-2, ИРГФ¹, оценки экологического следа, оценки риска негативных последствий [5, 6, 14] и другие методики, могут использовать множество показателей, которые обычно компонуются в несколько групп. Большинство из этих показателей зависят друг от друга и некоторые из них обладают выраженной мультиколлинеарностью, в связи с чем получаемые статистические модели являются слабо устойчивыми. В данной теории отсутствуют базовые методические предпосылки, связанные с использованием тех или иных законов сохранения или специальных форм уравнений состояний, которые отличались бы системным единообразием, а также обоснованным перечнем исходных независимых показателей для стратегической и экологической оценки.

Согласно определению – индикатор – это доступная наблюдению и измерению характеристика изучаемого объекта или система признаков, позволяющих оценить состояние системы. Он количественно определяет меру качества, меру величины или меру процесса [1, 2]. В целом индикаторы позволяют проводить обобщения сложной информации, а также способствуют сравнению различных объектов по показателям развития [1-8]. В качестве индикатора может быть взята как размерная, так и безразмерная величина, причем индикатор может быть представлен скаляром, вектором или матрицей.

Например, индикаторами социально-экономического развития и уровня жизни являются реальные доходы на душу населения, пенсии, пособия, стипендии, заработная плата по слоям населения, поступления доходов от вторичной занятости, от реализации продукции личного подсобного хозяйства, дивидендов (по акциям и облигациям), процентов по вкладам населения и т.д. С помощью этих индикаторов изучаются и прогнозируются уровень, динамика и структура доходов из различных источников. Индикаторы являются исходными величинами, на основе которых формируются индексы.

Индекс – это мера отклонения системы по комплексу свойств от уровня, принятого за базовый [2]. В качестве примера можно привести следующие индексы, построенные из

индикаторов: индекс конкурентоспособного развития, индекс экономической свободы, индекс экологического измерения (ESI), индекс качества и безопасности жизни, индекс человеческого развития, экономический индекс Доу-Джонса, биржевой индекс Nikkei. В экологической и промышленной безопасности применяют комплексный индекс загрязнения атмосферы; индекс пороговой массы опасных веществ для объектов повышенной опасности; суммарный индекс опасности отдельных компонентов, загрязняющих ту или иную биогеохимическую среду (водную, воздушную среды и грунты) и т.д. Индексы количественно свертывают информацию, которая может помочь обнаружить сложные явления или дать однозначные оценки.

Сегодня научные работы в данном направлении ведутся в области исследования индикаторов и индексов в рамках общей теории систем Берталанфи [1, 2, 13]. В результате совместных усилий ученых многих стран мира при активном участии 58-го комитета СКОПЕ (ISEM, г. Найроби, Кения) при UNEP и Комиссии по устойчивому развитию (CSD) научной общественности удалось достичь согласия относительно общих базовых свойств, которыми должны обладать индикаторы и индексы. Таковыми приняты чувствительность, способность к агрегированию, простота интерпретации и научная обоснованность [4, 7, 8].

Недавно Всемирный банк заявил об открытии свободного доступа более чем к 2000 показателям развития стран, многие из которых имеют ретроспективу до 50 лет (<http://data.worldbank.org>). База данных содержит индикаторы в области мирового развития (WDI), индикаторы в области финансов (GDF), базы данных глобального экономического мониторинга (GEM) и др.

Считается, что удачно выбранные индикаторы и индексы дают возможность перейти к разработке системы моделей, позволяющих обработать целый спектр информации о состоянии процессов социально-экономического и экологического развития. Данная информация обычно обрабатывается экспертами и представляется в виде, удобном для графической и картографической визуализации. Сегодня такая интегрированная информация является оптимальной для передачи в систему поддержки принятия решений.

¹ ИРЧП – индекс развития человеческого потенциала, ИНН – индекс нищеты населения, ИРГФ – индекс развития с учетом гендерного фактора.

Социально-экономическое развитие Донецкой области

В настоящее время на территории Донецкой области 22 населенных пункта территориально и хозяйственно образуют 7 крупных промышленно-городских агломераций. Оценка территориального развития области с позиций реализации социально и экологически направленной политики представляет собой сложную многоплановую задачу. Изменения в экономике за последние 15-20 лет привели к увеличению в промышленном производстве доли металлургии, энергетики, добывающей промышленности и тяжелого машиностроения, в то время как доля легкой и пищевой промышленности, а также сельского хозяйства существенно уменьшилась [3]. Все это способствовало тому, что в городах, где расположены крупные предприятия тяжелой индустрии, стал наблюдаться экономический рост, тогда как в небольших городах, не имеющих такой промышленности (Дружковка, Красный Лиман, Харцызск и т.д.), стал происходить резкий спад в развитии экономики. Кроме того преобладание тяжелой промышленности в отдельных городах приводит к противоречию между экономическим развитием и защитой окружающей природной среды. Данные тенденции на современном этапе, несмотря на их негативный характер, являются неуправляемыми и ведут к значительной дифференциации в развитии административных районов. Сложившаяся в настоящее время специализация районов, а также экологическая и социальная ситуация зачастую являются ограничивающими факторами, которые определяют специфическое развитие промышленно-городских агломераций. Наблюдаемые различия в развитии основных городов области характеризуются информацией, представленной в таблицах 1 – 3. Сегодня только два города Донецкой области (Донецк и Мариуполь) обеспечивают основные доходы региона (около 95 %), и только пять городов (Донецк, Мариуполь, Краматорск, Красноармейск и Кировск) имели в 2008 году промышленное производство на уровне 1990 года. Во всех остальных городах произошло значительное падение промышленного производства. Неравномерность социально-экономического развития территорий области за 2007-2009 годы существенно усилилась. Например, по городам области максимальный индекс роста промышленного производства отличается от минимального в 7 раз, по уровню безработицы – в 14 раз, по плотности населения – в 4 раза. Все это приводит к миграции населения и ухудшает показатели развития региона в целом.

Еще более явные диспропорции наблюдаются при сравнении экологических показателей: максимальное значение валовых

выбросов вредных веществ отличается от минимального более чем в 20 раз, по объемам сброса сточных вод – более чем в 50 раз, по наличию отходов – более чем в 1540 раз, по затратам на охрану окружающей среды – в 15 раз и т.д. [3, 10].

Многие из показателей, приведенных в таблицах 1 – 3, используются в качестве индикаторов при оценке уровня развития городов и регионов.

На протяжении длительного времени среди моделей социально-экономического развития преобладали те, в которых основное внимание было уделено экономическому росту и способам его ускорения. Считалось, что достижение экономического подъема автоматически способствует росту уровня человеческого развития, да и в целом прогрессу государства.

Однако теория прямо пропорциональной связи между экономическим ростом и развитием человеческого потенциала себя не оправдала на примере ряда государств. Поэтому в конце XX-ого века приобрела популярность концепция развития человеческого потенциала, разработанная экспертами ООН.

Оценка индекса человеческого развития сегодня в том или ином виде проводится во многих странах мира [5, 6, 8, 14, 15]. В Украине подобная оценка развития регионов ведется с 1999 года [4].

Сегодня Донецкая область является одним из наиболее экономически развитых регионов страны, который обеспечивает более 13 % ВВП Украины. Область находится по этому показателю на втором месте после города Киева. Однако следует отметить, что достаточно высокий уровень материального благополучия² и рынка труда³ не способствуют демографическому развитию, повышению уровня образования и здоровья населения, а также улучшению условий проживания и социальной среды.

При определении уровня человеческого развития регионов Украины используется методика [4] и статистические данные приблизительно по 100 показателям в девяти группах. Групповые составляющие индекса регионального человеческого развития (ИРЧР) приведены в таблице 4. Считается, что документ [4] решает те же задачи, что и методика, используемая при оценке индекса человеческого развития стран мира [5, 6]. В этом случае применяется уже более 100 показателей, скомпонованных в 15-20 групп, а анализ состояния объектов ведется путем комплексной оценки.

² По этому показателю Донецкая область занимает 4-ую позицию из 27 в общем рейтинге среди областей Украины, а также городов Киев и Севастополь.

³ Четвертая позиция Донецкой области в общем рейтинге среди областей Украины, а также городов Киев и Севастополь.

Таблица 1. – Сравнительная оценка экономических показателей городов Донецкой области

Показатели по состоянию на 2006 год	Ма-кеевка	Донецк	Гор-ловка	Ена-киевево	Крама-торск	Мари-уполь
Финансовый результат от обычной деятельности до налогообложения, млн. грн.	-217,7	6371,2	-390,9	349,1	363,3	3622,6
Финансовый результат деятельности малых предприятий до налогообложения, тыс. грн.	-3074	685223	2002	2408	80966	-29500
Кредиторская задолженность на конец года, млн. грн.	5180,4	446182	7520,4	3321,5	1603,0	9175,8
Дебиторская задолженность на конец года, млн. грн.	2194,9	36879,4	4519,2	3308,4	1071,3	8262,5
Индексы продукции промышленности в % к 2005 г.	123,3	105,8	104,5	114,7	116,4	101,7
Индексы инвестиций в основной капитал в % к 2005 г.	153,6	123,2	108,3	95,9	163,5	89,9
Экспорт, в % к общему объему в тыс. дол. США	2,72	20,58	5,01	7,45	3,12	44,84
Импорт, в % к общему объему в тыс. дол. США	10,48	41,62	4,77	1,65	3,20	24,14
Розничный товарооборот предприятий, млн. грн.	711,0	5802,1	449,2	159,3	363,4	1505,8
Объем услуг населению (в среднем на 1 чел. в год), грн.	215	1907	213	184	301	333,7
Доля продукции малых предприятий в общих объемах реализации продукции, %	1,8	2,7	3,0	0,9	7,8	2,0
Количество малых предприятий на 10 тыс. населения, в % к среднему показателю по области	58,9	207,1	69,6	37,5	103,6	125,0
Убыточные предприятия в % к общей численности	33,4	34,0	33,7	31,6	27,2	33,9
Экологические платежи за загрязнение природной среды, млн. грн.	16,1	24,0	4,7	6,1	2,5	44,4
Капитальные инвестиции на охрану природной среды, млн. грн.	21,0	82,7	0,5	45,5	29,1	163,9

Таблица 2. – Сравнительная оценка социальных показателей городов Донецкой области

Показатели по состоянию на 2006 год	Ма-кеевка	До-нецк	Гор-ловка	Ена-киевево	Крама-торск	Мари-уполь
Демографические показатели						
Население, тыс. чел.	409,8	1004,6	293,4	144,2	205,8	499,6
Плотность населения, чел./км ²	963	1760	695	339	963	2048
Природный прирост (на 1 тыс. населения)	-9,8	-6,8	-10,7	-12,2	-8,4	-7,4
Рождаемость, случаев (на 1 тыс. населения)	8,3	8,0	8,3	7,9	9,3	8,1
Смертность, случаев (на 1 тыс. населения)	18,1	14,8	19,1	20,1	17,7	15,5
Показатели образования						
Кол-во детей в дошкольных заведениях (на 1 тыс. населения)	19,5	22,0	21,1	20,8	22,4	26,8
Количество учеников в дневных общеобразовательных учебных заведениях (на 1 тыс. населения)	76,9	79,0	79,4	84,6	87	81,1
Показатели здоровья населения ⁴						
Младенческая смертность (на 1 тыс. рожденных живыми)	11,0	16,7	14,3	7,6	9,0	8,9
Распространенность заболеваний (на 10 тыс. населения)	15948	19528	16727	18990	17730	17151
Заболеваемость (на 10 тыс. населения)	5172	7067	6603	7346	6903	7388
Заболевшие туберкулезом (на 100 тыс.)	419,9	249,4	318,4	479,7	271,9	226,3
Смертность от туберкулеза (на 100 тыс.)	55,5	32,4	32,9	35,9	41,2	30,8
Общий уровень травматизма (на 10 тыс.)	572,4	431,0	527,8	711,2	910,9	724,6
Уровень травматизма у детей (на 10 тыс. детского населения)	408,7	280,7	559,1	450,0	1078	468,5
Другие показатели						
Уровень безработицы, %	1,1	0,7	1,9	1,1	2,2	0,4
Среднемесячная номинальная заработная плата, грн.	1034	1275	1019	1006	1280	1539
Количество потерпевших от производственного травматизма (на 1 тыс. работающих)	8,4	4,0	6,4	7,2	2,9	2,4
Количество погибших от производственного травматизма (на 100 тыс. работающих)	13,2	17,5	15,7	27,1	3,6	8,5
Обеспечение населения жильем (в среднем на 1 чел.), м ² общей площади	18,7	19,9	24,7	24,7	23,9	19,6
Количество зарегистрированных преступлений (на 1 тыс. чел.)	11,4	11,6	10,9	9,37	9,8	13,2

⁴ Данные, приведенные за 2004 год.

Таблица 3. – Сравнительная оценка экологических показателей городов Донецкой области

Показатели по состоянию на 2006 год	Ма-кеевка	До-нецк	Гор-ловка	Ена-киеве	Крама-торск	Мари-уполь
Выбросы вредных веществ в атмосферный воздух						
Выбросы загрязняющих веществ от стационарных источников, тыс. тонн	123,5	140,0	44,2	62,9	13,4	397,3
суспензированных твердых частиц	17,6	5,3	2,5	5,1	2,9	14,8
соединений азота	8,4	5,6	3,0	1,2	1,6	24,1
соединений серы	11,9	6,7	3,3	5,7	0,8	22,8
Выбросы загрязняющих веществ от передвижных источников, тыс. тонн	17,2	71,2	9,4	6,2	10,3	32,7
Количество предприятий, имеющих выбросы от стационарных источников	90	169	84	34	35	52
Уровень загрязнения атмосферного воздуха в долях ПДК_{с.с.}						
диоксид азота	2,0	2,5	2,2	1,8	1,4	1,5
пыль	2,7	1,7	2,7	2,7	0,5	1,5
диоксид серы	0,3	0,15	0,7	0,4	0,15	0,15
оксид углерода	0,7	0,4	1,2	1,1	0,25	0,3
формальдегид	2,7	2,0	4,0	4,2	3,8	4,2
фенол	0,3	0,3	1,7	1,7	1,3	1,0
Показатели водопользования						
Забор воды из природных источников, млн. м ³	60,3	69,2	32,4	52,8	46,0	1004,7
Использование свежей воды, млн. м ³	50,3	126,8	28,8	22,9	58,8	1029,3
Сброс загрязненных сточных вод в поверхностные водные объекты, млн. м ³	48,0	57,1	43,7	19,2	12,4	898,3
Сброс нормативно очищенных сточных вод в поверхностные водные объекты, млн. м ³	28,3	103,9	1,8	6,1	8,9	49,9
Показатели образования отходов						
Накоплено опасных отходов, тыс. тонн	5406,4	191,8	83,5	91,4	11,9	149,2
Образовано опасных отходов, тыс. тонн	377,20	93,935	3,039	1,117	0,798	152,60
Использовано отходов I-III классов опасности, тыс. тонн	1,590	3,543	1,387	0,643	0,196	68,495
Растительные ресурсы						
Леса и другие лесопокрываемые земли, га	5137	6174	4143	4688	1699	351
Площадь фактической рубки леса, га	--	188	168	--	--	146
Лесовосстановление на землях лесного фонда, га	10	55	62	--	--	52

Методика [4] разработана Госкомстатом Украины совместно с Институтом демографии и социальных исследований НАН Украины. Принятый подход позволяет производить сопоставления как по интегральному индексу, так и по девяти интегральным индексам отдельных групповых составляющих человеческого развития. Каждой из групповых составляющих соответствует отдельный блок показателей, формирующих систему индикаторов человеческого развития регионов. Данная методика ориентирована на использование информационной базы Госкомстата Украины – данных государственных статистических наблюдений.

Методически оценка индекса человеческого развития проводится на основе следующих зависимостей:

$$y_i = \frac{z_i - z_{i,\min}}{z_{i,\max} - z_{i,\min}}, \quad (1)$$

где z_i – значения i -ого показателя в определенном регионе; $z_{i,\min}$, $z_{i,\max}$ – соответственно минимальное и максимальное значения этого показателя в изучаемой группе регионов; y_i – соответствующий индикатор.

Для показателей-дестимуляторов, рост которых способствует снижению индекса человеческого развития, индикатор определяется по формуле (2):

$$y_i = \frac{z_{i,\max} - z_i}{z_{i,\max} - z_{i,\min}}. \quad (2)$$

Расчеты интегральных индексов $I_{k,j}$, характеризующих групповые составляющие человеческого развития, производятся по формуле (3).

Таблица 4. – Рейтинги индексов групповых составляющих человеческого развития для различных областей Украины за 2006 год, оцененные согласно методике [4]

№ п.п.	ИРЧР и групповые составляющие индекса человеческого развития	Весовые коэффициенты блока, W_k	Рейтинг					
			Донецкая	Харьковская	Запорожская	Львовская	Одесская	г. Киев
1	Демографическое развитие	0,172	23	6	12	2	22	1
2	Развитие рынка труда	0,105	4	6	16	11	10	2
3	Материальное благосостояние	0,163	4	8	3	11	15	1
4	Условия проживания населения	0,111	22	5	6	11	9	1
5	Уровень образования	0,113	26	3	9	18	7	1
6	Состояние и охрана здоровья	0,126	23	12	13	8	22	6
7	Социальная среда	0,042	21	8	26	4	22	25
8	Экологическая ситуация	0,090	27	14	25	20	19	26
9	Финансирование человеческого развития	0,078	15	21	5	26	13	1
	Рейтинг регионального человеческого развития		27	3	11	5	20	1

$$I_{k,j} = \sum_{i=1}^{i=n} y_{i,j} \cdot W_i, \quad (3)$$

где $y_{i,j}$ – нормированный i -ый показатель человеческого развития в определенном j -ом регионе; W_i – вес показателя при расчете группового индекса $I_{k,j}$; n – число индикаторов в группе; k – число групп (см. табл. 4).

Интегральный ИРЧР для каждого региона I_j рассчитывается, исходя из индексов отдельных его составляющих $I_{k,j}$ по формуле:

$$I_j = \sum_{k=1}^9 I_{k,j} \cdot W_k, \quad (4)$$

где W_k – весовые коэффициенты блока (см. табл. 4).

Следует отметить, что согласно рассчитанным по методике [4] ИРЧР, Донецкая область на протяжении 1999-2007 годов была признана регионом-аутсайдером, стабильно отстающим от большинства регионов Украины. Так, в соответствии с индексом регионального человеческого развития Донецкая область занимает одну из двух последних позиций в Украине: в 1999-2002 и в 2004 гг. – 26 место из 27 (включая г. Киев и г. Севастополь), в 2003, 2005-2007 гг. – 27 место.

Этот парадоксальный вывод авторов методики имеет больше политический контекст, чем отражает реальное состояние дел. Положения методики [4] системно обеспечивают реализацию подходов, когда промышленный и экономический рост являются тупиковой ветвью развития общества. В данном случае одна крайность – экстенсивный рост – заменена другой – депрессивное развитие.

В методике [4] полностью исключены из анализа экономические показатели регионов, в связи с чем нарушено основное требование

ООН, что экономический рост региона должен обеспечивать развитие человеческого потенциала.

При расчете региональных индексов по методике [4] индикаторы каждой из составляющих (см. табл. 4) включаются в расчет ИРЧР с учетом своих весовых функций. Так наибольший вклад в определение места региона по единой шкале ИРЧР вносят информационные показатели следующих групповых составляющих: демографическое развитие, материальное благосостояние, состояние и охрана здоровья. Суммарная весовая доля этих составляющих достигает 50 %.

Если обратить внимание на таблицу 4, можно увидеть, что низкий рейтинг Донецкой области обеспечивают шесть групп показателей: демографическое развитие, уровень образования, состояние и охрана здоровья, условия проживания населения, сложившаяся экологическая ситуация, а также социальная среда (рейтинг выше 20 баллов).

Индексный показатель демографического развития согласно методике [4] учитывает средний возраст населения, средний размер домохозяйства, суммарный коэффициент рождаемости, коэффициенты смертности младенцев⁵, смертности детей до 5 лет и перинатальной смертности, сальдо миграции, коэффициент интенсивности миграции, среднюю ожидаемую продолжительность жизни населения⁶ при рождении и достижении 15, 45 и

⁵ Так, в 1999 году коэффициент смертности младенцев (до 1 года) на 1000 рожденных (живорожденных) в Донецкой области составил 13,9, в 2003 – 11,3, в 2006 – 11,0 (для примера, в Полтавской области 7,1, Харьковской – 7,7, в городе Киеве 8,1, в Севастополе 6,3) и, в свою очередь, в 2007 году – 13,8 тогда как средний коэффициент смертности младенцев по Украине в 2006 году составлял 9,8.

⁶ Так, в 1999 году средняя продолжительность жизни населения Донецкой области составила 67,2 года, в 2003 – 66,8 года, в 2006 – 66,7 лет, в то время, как средний

65 лет. Из изложенного видно, что составляющая демографического развития перегружена разноплановыми показателями, которые, в свою очередь, не нормируются и не сравниваются с базовыми уровнями. Каждый из данных показателей требует тщательного анализа и последующего применения методов комплексной оценки. Сведение показателей к одному индексу, в котором веса принимаются постоянными, никогда не даст адекватной оценки демографического развития территории. Подобный подход является типовым и реализован во всех расчетах индексов групповых составляющих при оценке ИРЧР по методике [4].

Ключевым элементом в обеспечении развития человеческого потенциала является образование, так как именно от него зависит будущий интеллектуальный потенциал страны. Сегодня по уровню образования Донецкая область занимает 26 место. При расчете интегрального показателя образования за основу берутся следующие восемь показателей: посещение детьми дошкольных заведений, охват детей образованием (начальным, базовым средним, полным средним), численность студентов ВУЗов, средняя продолжительность обучения, доля лиц с высшим образованием среди населения старше 25 лет. Наибольший негативный вклад в общий рейтинг региона вносит низкий уровень охвата детей образованием. Так, согласно данным Госкомстата, Донецкая область занимает 27 место в Украине по охвату детей начальным, базовым средним и полным средним образованием: эти показатели составляют 81,3, 87,4 и 42 % соответственно при средних показателях по Украине 89, 93,3 и 49,1%. Образование в Украине является сильно централизованной отраслью общественной жизни, поэтому основная доля управленческих решений формируется на государственном уровне. Исходя из этого, регионы страны имеют существенно меньше возможностей в формировании образовательной политики и, чаще всего, только отслеживают сложившуюся ситуацию.

Показатель, характеризующий состояние и охрану здоровья согласно методике [4] учитывает: численность потерпевших на производстве; среднюю продолжительность пребывания больного в стационаре; долю детей до 2 лет с прививками против дифтерии, коклюша, полиомиелита, кори, туберкулеза; индекс условного здоровья; численность врачей всех специальностей в расчете на 10000 населения, а также количество станций скорой медицинской помощи в расчете на 100 000 населения. Таким образом, общая характеристика

состояния здоровья населения региона и уровня развития охраны здоровья дается по результатам анализа десяти индикаторов, характеризующих не столько заболеваемость населения, сколько усилия медицинских структур по предупреждению заболеваемости и охвату детей прививками.

Наиболее острые проблемы развития Донецкой области определяются также неблагоприятной экологической ситуацией (27 позиция в общем рейтинге). Индексный показатель, характеризующий экологическую ситуацию, рассчитывается согласно методике [4] на основе следующих семи показателей: количество промышленных токсических отходов в хранилищах в расчете на 1 тыс. кв. км, выбросы серы в расчете на 1 чел., выбросы азота в расчете на 1 чел., количество тяжелых металлов в сточных водах в расчете на 1000 кв. км, выбросы вредных веществ от передвижных источников загрязнения в расчете на 1 чел., выбросы свинца в расчете на 1 чел., удельный вес сброшенной неочищенной воды в общем объеме сточных вод.

В данном случае согласно методике [4] развитая тяжелая промышленность ряда регионов (Донецкая, Запорожская, Днепропетровская области), обеспечивающих значительную долю ВВП страны, предопределяет их низкий рейтинг в экологической составляющей ИРЧР.

Конечно, приоритеты региональной социально-экономической политики в Донбассе должны быть ориентированы на устранение негативных тенденций в указанных выше групповых составляющих человеческого развития. Не вызывает сомнения также необходимость оценки уровня регионального развития, но вряд ли такую адекватную оценку можно получить по методике [4], где при анализе исключен ряд важных показателей. При оценке ИРЧР не учитывается региональный ВВП, вклад регионов в формирование бюджета страны, объемы изъятия финансовых ресурсов из пяти центральных и восточных регионов страны и дотации остальным 22 регионам, особенности перераспределения ресурсов в нашем унитарном государстве и т.д. Допущен ряд методологических ошибок. В методике используется целый ряд показателей, которые не рекомендованы международными руководствами [6–8], сравниваются между собой объекты разных классов (например, города и области), используется масса разноплановых показателей в групповых составляющих при отсутствии теоретического обоснования такой возможности, часто вместо одного применяются два-четыре подобных индикатора для оценки одного определенного аспекта и т.д. Международно признанные и апробированные методики не сводят оценку территорий по десяткам показателей к одному

показатель по Украине составляет 68,1 года. В Донецкой области для женщин эта величина равна 72,0 года, а для мужчин – 59,2 года.

индексу, чаще всего проводится комплексная оценка – дается характеристика, полученная в результате комплексного исследования. Известно, что комплексная оценка – это одновременное и согласованное изучение совокупности показателей, отражающих все (или многие) аспекты социально-экономических и экологических процессов. Обычно оценочный доклад по результатам комплексной оценки исследователю обобщающие выводы о результатах исследования развития территории или объекта.

Именно по указанным выше причинам методика [4] не дает адекватной оценки развития регионов Украины. Сегодня также отсутствуют обоснованные оценочные доклады развития страны и её регионов, построенные на основе принципов комплексной оценки и которые были бы доступны общественности.

Сравнительная оценка регионов Украины в мировых координатах развития человеческого потенциала

Концепция развития человеческого потенциала введена в международную политическую и научную сферы в рамках подготовки ежегодных глобальных Докладов о человеческом развитии [5, 6, 14, 15]. Считается, что в современном мире качество человеческого потенциала определяет развитие общества. При этом уровень развития характеризуется расширением жизненноважных возможностей людей и, в первую очередь, длительной продолжительностью жизни, высоким уровнем образования и охраны здоровья, достойными доходами и качеством уровня жизни.

Специалисты ООН ежегодно на основе оценки ИРЧП публикуют Доклады о состоянии человеческого потенциала стран мира [5, 6, 14 – 16]. Данный индекс оценивает возможности долгой и здоровой жизни, получения образования и поддержания достойного жизненного уровня. Эти аспекты измеряются соответственно показателем средней ожидаемой продолжительности жизни при рождении, уровнем грамотности взрослого населения, охвата населения начальным, средним и высшим образованием, а также показателем ВВП на душу населения (определяемого с учетом паритета покупательной способности (ППС) для различных стран).

Методика определения индекса была разработана в 1990 г. пакистанским экономистом Махбуб-уль-Хаком, по словам которого: «Основная цель развития общества – создать среду, благоприятствующую тому, чтобы люди могли наслаждаться долгой, здоровой и созидательной жизнью».

При оценке ИРЧП специалисты крайне осторожно относятся к увеличению количества разноплановых индикаторов, так как опытный факт того, что общий индекс $I = f(z_1, z_2, \dots, z_n)$,

заданный в виде аддитивной функции, может представлять собой поверхность в n-мерном пространстве для данных, собранных по значительному количеству объектов одного класса, пока абсолютно недоказуем. Поэтому в основе анализа развития стран сегодня преобладают методы комплексной оценки, когда исследование объектов проводится по комплексу показателей без их сведения к одному индексу. Исключение составляет расчет ИРЧП, который включает агрегативную оценку по трем индикаторам в сфере образования, экономического и социального развития, а также индексы ИНН-1, ИНН-2, ИРГФ и т.д., где используются от трех до пяти индикаторов. Это общепринятые международные методики. В свою очередь, методики, где применяются десятки индикаторов, и которые рекомендованы отдельными научными коллективами, пока не имеют широкой области применения.

Поэтому на фоне значительного увеличения количества индикаторов и многообразия методов оценки весовых функций, возникают сомнения в правильности принятого в Украине направления развития методологии оценки ИРЧП [4]. Вопрос обоснования выбора перечня индикаторов в том или ином социально-экономическом процессе является вообще неизученным, здесь пока согласованное мнение экспертов является определяющим. Кроме того, резкое увеличение количества индикаторов при оценке одного интегрального индекса ведет к потере адекватности и достоверности экспертных методов. Это общепринятый научный факт в системном анализе.

В этом плане анализ социально-экономического развития может осуществляться только путем формирования баз данных статистической информации и подготовкой на их основе оценочных докладов в сфере развития общества. Этот путь и был избран экспертами ООН [15, 16]. При этом ИРЧП является только одним из инструментов для подготовки таких докладов на фоне применения целого ряда комплексных методов оценки процессов развития.

В последние годы в мире развиваются новые направления в области информационных поисковых систем. Объединение поисковых систем с большими базами статистических данных является перспективным путем развития региональных информационно-аналитических систем. Подобные системы позволяют хранить десятки миллионов данных. Создание таких систем является первым шагом к разработке научно-обоснованных методов оценки социально-экономического развития регионов и позволяет привлечь широкую научную общественность для анализа данных. Это создает условия для формирования новых знаний и качественного изменения ситуации в

данной области. Принципиальным отличием таких систем является широкий доступ научной общественности к социально-экономической, экологической, демографической и другой статистической информации. Примерами таких систем могут служить: база данных GEODATA [17], целью которой является обеспечение общественности информацией при подготовке оценочных докладов о состоянии окружающей среды; система Eionet [18], обеспечивающая взаимодействие между европейскими странами в области мониторинга среды; обширные базы данных ООН [15, 16], UNEP, Всемирной организации здравоохранения, Всемирного банка и т.д. Разработка и предоставление общественности подобных баз данных имеет большое значение, так как они являются инструментом поддержки принятия управленческих решений, осуществляемых властью на местном и региональном уровне.

Выполним оценку развития регионов Украины согласно методике расчета ИРЧП, предложенной ООН, и сравним результаты с данными, полученными при расчетах согласно методике [4].

Для получения ИРЧП необходимо рассчитать три основных параметра – индикаторы продолжительности жизни (I_1), образования (I_2) и ВВП (I_3). Для каждого из них устанавливаются общемировые минимальные и максимальные значения (планки) [5, 6].

Интегральный индекс человеческого развития (I) вычисляется по формуле (5):

$$I = \sum_{i=1}^3 \alpha_i \cdot I_i, \quad \alpha_i = 1/3. \quad (5)$$

Каждый из индикаторов ИРЧП выражается величиной от нуля до единицы, и рассчитывается по формулам (6) – (8).

Индикатор продолжительности жизни определяется следующим образом:

$$I_1 = \frac{X - X_{\min}}{X_{\max} - X_{\min}}, \quad (6)$$

где X – ожидаемая продолжительность жизни по исследуемому региону, при этом X_{\max} принимают равным 85, а X_{\min} равным 25 (лет).

Индикатор образования имеет вид:

$$I_2 = \frac{2}{3} X_1 + \frac{1}{3} X_2, \quad (7)$$

где X_1 – доля грамотного взрослого населения (от 15 лет и старше, доли ед.); X_2 – доля обучающихся в начальных, средних и высших учебных заведениях в возрасте от 5 до 23 лет, доли ед.

При расчете показатель дохода (ВВП на душу населения) корректируется, так как при достижении достойного уровня развития человеческого потенциала не требуется неограниченного дохода. Поэтому при расчете

соответствующего индикатора используются логарифмы дохода:

$$I_3 = \frac{\log(X) - \log(X_{\min})}{\log(X_{\max}) - \log(X_{\min})}, \quad (8)$$

где $X_{\max} = 40000$ дол. США по ППС, а $X_{\min} = 100$ дол. США по ППС. Паритет покупательной способности (ППС) представляет собой обменный курс, отражающий ценовую разницу в зависимости от страны и позволяющий осуществлять международные сопоставления реальных показателей производительности и доходов. С учетом ППС курса доллара США, 1 доллар США имеет такую же покупательную силу в условиях внутренней экономики страны, как и 1 доллар США в Соединенных Штатах Америки. Методика оценки ППС приведена на сайте Всемирного банка [19].

Методика ИРЧП широко применяется при оценке человеческого потенциала разных стран [5, 7, 15].

Аналогичным образом ООН рассчитываются индексы нищеты населения (ИНН-1, ИНН-2). Если ИРЧП измеряет средний уровень достижений, то ИНН-1 измеряет уровень бедности населения согласно следующей формуле:

$$\text{ИНН-1} = \left[\frac{1}{3} (P_1^\alpha + P_2^\alpha + P_3^\alpha) \right]^{1/\alpha}, \quad (9)$$

где P_1 – доля населения, которая, как ожидается при рождении, не доживет до 40 лет, в %; P_2 – доля неграмотного взрослого населения, в %; P_3 – невзвешенное среднее арифметическое доли населения, не имеющего устойчивого доступа к улучшенным источникам воды, и доли детей с пониженной для своего возраста массой тела, в %; $\alpha = 3$.

Индекс ИНН-1 используется при расчете уровня нищеты населения развивающихся стран.

Методика оценки ИНН-2 позволяет измерить уровень лишений по четырем направлениям жизни людей. Индекс ИНН-2 рассчитывается по следующей формуле:

$$\text{ИНН-2} = \left[\frac{1}{4} (P_1^\alpha + P_2^\alpha + P_3^\alpha + P_4^\alpha) \right]^{1/\alpha}, \quad (10)$$

где P_1 – доля населения, которая, как ожидается при рождении, не доживет до 60 лет, %; P_2 – доля функционального неграмотного взрослого населения, %; P_3 – доля населения, живущего ниже черты бедности по доходу (50% от медианного скорректированного располагаемого дохода домашнего хозяйства), %; P_4 – уровень застойной безработицы (в течение 12 или более месяцев), %; $\alpha = 4$.

Методику оценки ИНН-2 применяют при определении уровня нищеты населения стран с высоким и средним уровнем развития человеческого потенциала.

Значения показателей, используемых для измерения уровня лишений согласно методике оценки ИНН, уже нормализованы в пределах от 0 до 100 (поскольку выражены в процентах), и

поэтому нет необходимости рассчитывать индексы по отдельным индикаторам, как в случае ИРЧП.

Используя методику оценки ИРЧП, разработанную ООН, был выполнен анализ развития человеческого потенциала регионов Украины в 2006 году. Полученные результаты приведены в таблице 5.

Таблица 5. – Результаты оценки человеческого потенциала регионов Украины в 2006 году

Области и города Украины	Оценка уровня развития человеческого потенциала					
	согласно методике расчета ИРЧП (ООН)		согласно методике расчета ИРЧР ([4])		согласно методике расчета ИНН-2 (ООН)	
	индекс	рейтинг	индекс	рейтинг	индекс	рейтинг
Автономная Республика Крым	0,760	22	0,495	9	32,796	12
Винницкая	0,764	20	0,441	24	37,423	20
Волынская	0,764	19	0,484	17	38,178	24
Днепропетровская	0,801	5	0,484	15	28,350	3
Донецкая	0,792	7	0,397	27	26,690	2
Житомирская	0,750	26	0,460	22	38,398	26
Закарпатская	0,751	25	0,507	7	35,262	16
Запорожская	0,803	4	0,489	11	28,491	4
Ивано-Франковская	0,784	9	0,484	16	32,770	11
Киевская	0,768	17	0,489	13	30,474	5
Кировоградская	0,753	24	0,437	25	37,427	21
Луганская	0,772	14	0,412	26	31,204	7
Львовская	0,795	6	0,521	5	32,683	10
Николаевская	0,767	18	0,485	14	33,289	14
Одесская	0,782	11	0,469	20	33,237	13
Полтавская	0,809	3	0,528	4	32,261	9
Ровенская	0,776	12	0,516	6	34,411	15
Сумская	0,772	15	0,471	18	35,654	17
Тернопольская	0,788	8	0,469	19	39,054	27
Харьковская	0,815	2	0,556	3	31,617	8
Херсонская	0,750	27	0,468	21	37,912	23
Хмельницкая	0,769	16	0,496	8	37,452	22
Черкасская	0,775	13	0,493	10	35,857	18
Черновицкая	0,761	21	0,489	12	36,203	19
Черниговская	0,756	23	0,450	23	38,340	25
г. Киев	0,890	1	0,695	1	15,018	1
г. Севастополь	0,784	10	0,579	2	30,738	6

В процессе расчетов валовой региональный продукт на душу населения в областях Украины пересчитывался в долларах США по паритету покупательской способности (ППС) с учетом имеющих средние данные этой величины по Украине в целом [5]. Из приведенных в таблице 5 данных видны значительные расхождения в оценке развития человеческого потенциала регионов Украины. В мировых координатах развития г. Киев имеет значение ИРЧП, характерное для стран с высоким уровнем развития человеческого потенциала (значение ИРЧП=0,890 соответствует уровню развития стран – Чешская Республика, Кувейт, которые занимали 32 и 33 место в мире в 2005 году).

В свою очередь Харьковская, Полтавская, Запорожская и Днепропетровская области также имеют значение ИРЧП, характерное для стран с высоким уровнем развития, однако диапазон значений ИРЧП в мировых координатах соответствует 57-69 местам в мире.

Индекс развития всех других регионов Украины соответствует странам со средним уровнем развития человеческого потенциала. В мировых координатах человеческого развития значение ИРЧП Донецкой и Львовской областей соответствует диапазону индекса 0,790-0,795, который согласно Доклада ООН за 2007-2008 год [5] имеют страны мира, занимающие 72-74 места (Сент-Люсия, Казахстан). Уровень развития человеческого потенциала

Житомирской, Херсонской и Закарпатской областей, занимающих последние места среди регионов Украины, соответствует значению ИРЧП стран, имеющих 96-97 места в мире.

В свою очередь оценка ИРЧР согласно [4] не позволяет провести аналогии по развитию регионов Украины в мировых координатах ИРЧП, что противоречит общей методологии оценки развития человеческого потенциала, принятой ООН. Кроме того по сравнению с общепринятыми подходами методика [4] дает неадекватную оценку развития регионов Украины в 70 % случаев (см. табл. 5).

Аналогичным образом выполнена оценка уровня лишений и бедности для регионов Украины, для чего использован индекс нищеты населения и бедности по доходам ИНН-2. Результаты расчетов согласно данной методике ООН приведены в таблице 5.

Расчет индекса ИНН-2 проводился согласно зависимости (10), при этом учитывался показатель (P_3) – доля населения, живущая ниже мировой черты бедности (4 \$ США в день на человека). Приближенная оценка данной величины проводилась по статистическим данным для регионов страны с учетом имеющихся данных для Украины в целом [5].

Самый низкий уровень бедности населения наблюдается в г. Киеве, а также в Донецкой, Днепропетровской и Запорожской областях, самый высокий – в Тернопольской, Житомирской и Черниговской областях.

Данные ИРЧП, полученные для регионов Украины, сопоставлялись с аналогичными значениями ИРЧР для оценки обоснованности методики [4].

При анализе г. Киев был исключен из выборки данных, так как имеет значение ИРЧП, далеко отстоящее от среднего показателя, что нарушает однородность данных. Сравнение города Киева по ИРЧП должно проводиться путем сопоставления с показателями столиц государств Восточной и Юго-восточной Европы. Аналогичным образом исключен и город Севастополь, так как является объектом, несопоставимым с областями Украины.

Для регионов Украины ИНН-2 имеет высокую корреляцию с индексом ИРЧП (см. рис. 1; значимый коэффициент корреляции равен 0,7).

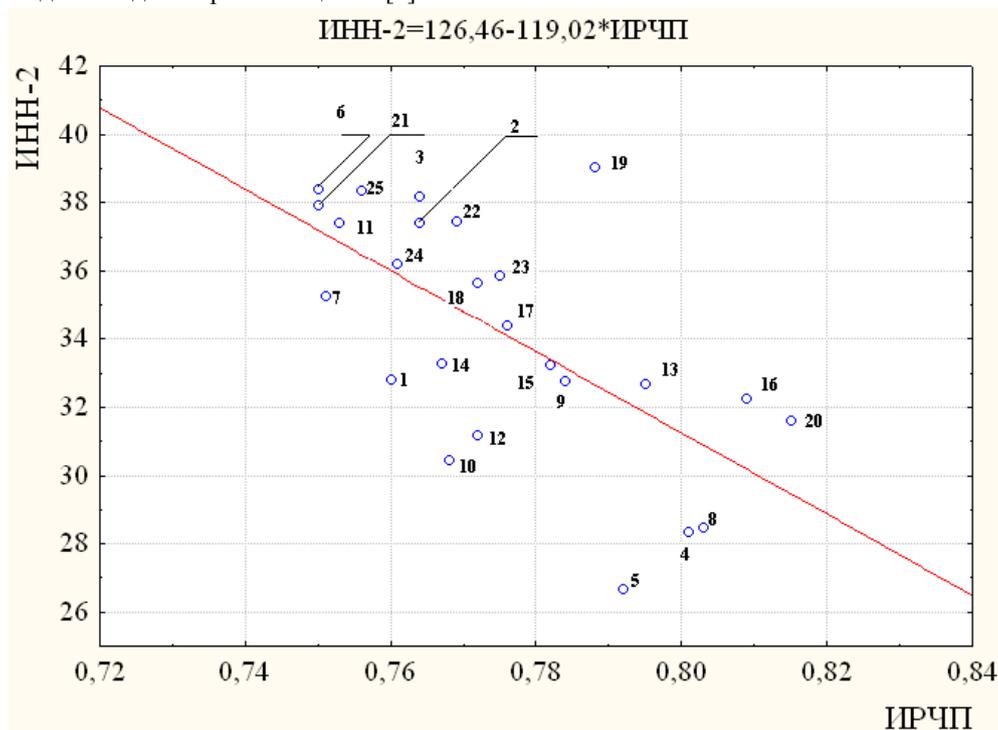


Рисунок 1. – Зависимость $ИНН-2 = f(ИРЧП)$ для регионов Украины; расчетные данные согласно формул (5) и (10) для административных территорий (точки):

- | | | |
|---------------------------------|----------------------------|--------------------------------|
| 1 – Автономная Республика Крым; | 2 – Винницкая область; | 3 – Волынская область; |
| 4 – Днепропетровская область; | 5 – Донецкая область; | 6 – Житомирская область; |
| 7 – Закарпатская область; | 8 – Запорожская область; | 9 – Ивано-Франковская область; |
| 10 – Киевская область; | 11 – Кировоградская; | 12 – Луганская область; |
| 13 – Львовская область; | 14 – Николаевская область; | 15 – Одесская область; |
| 16 – Полтавская область; | 17 – Ровенская область; | 18 – Сумская область; |
| 19 – Тернопольская область; | 20 – Харьковская область; | 21 – Херсонская область; |
| 22 – Хмельницкая область; | 23 – Черкасская область; | 24 – Черновицкая область; |
| 25 – Черниговская область. | | |

В свою очередь индекс ИНН-2 не имеет корреляции с индексом ИРЧР, который определяется согласно методике [4]. Аналогичным образом отсутствует корреляция значений ИРЧР и ИРЧП для регионов Украины.

Все это указывает на слабую связь методики [4] с рекомендуемыми ООН методами оценки развития человеческого потенциала, что говорит о недостаточной обоснованности этой методики и нарушении базового принципа оценки человеческого развития, в котором экономический рост, доходы региона и возможности в трудовой деятельности должны, в первую очередь, обеспечивать качественный уровень жизни людей.

Выводы

Таким образом, индекс регионального человеческого развития, определяемый согласно методике [4], неадекватно оценивает состояние регионов, не учитывает сложившиеся десятилетиями условия и результаты текущей экономической деятельности; для его расчета выбрано чрезмерное количество показателей, некоторые индикаторы часто дублируют друг друга. Методика расчета ИРЧР является несопоставимой с международной практикой комплексной оценки и разработки оценочных докладов и не дает возможности вести анализ развития регионов в мировых координатах человеческого развития; отсутствуют определенные нормативы и опорные уровни человеческого развития, по которым можно сравнивать развитие регионов.

Сегодня является актуальным совершенствование национальных методик оценки развития человеческого потенциала с учетом рекомендаций ООН, а также выполнение систематических оценок, позволяющих проводить сопоставительный анализ регионов Украины в мировых координатах развития человеческого потенциала. Не менее актуальный вопрос создания национальных баз данных социально-экономических и экологических индикаторов регионов и обеспечение доступа к ним научной общественности.

Кроме того, оценку развития регионов Украины следует основывать на оценочных докладах, подобных докладам ООН [5, 7, 16], которые дают всесторонний анализ развития человеческого потенциала, основанный на индикаторах [8, 20, 21, 22]. Именно этому вопросу следует уделить внимание на государственном уровне, так как это важное направление анализа стратегического развития страны.

Литература

1. А.А. Музалевский. Индикаторы и индексы экодинамики. С.-Пб. // <http://inftech.webservis.ru/it/conference/scm/2000/plenum/muzalev.htm> (15.09.08).
2. Е.А. Яйли. Метод оценки качества компонентов окружающей среды на основе индикаторов и индексов устойчивого развития // Экологическая химия, 2005, 14(4). С. 266 – 274.
3. Доклад о состоянии окружающей среды в Донецкой области // С. Третьяков, Г. Аверин. Донецк, 2007. – 116 с.
4. Методика вимірювання людського розвитку регіонів України. К. 2001. – 36 с.
5. Доклад о развитии человека 2007/2008. Борьба с изменениями климата: Человеческая солидарность в разделенном мире / Пер. с англ. – М.: Весь мир. 2007. – 400 с.
6. Доклад о развитии человека 2006. Что кроется за нехваткой воды: власть, бедность и глобальный кризис водных ресурсов / Пер. с англ. – М.: Весь мир. 2006. – 423 с.
7. Защита окружающей среды Европы – Четвертая оценка. 2007. – 452 с.
8. Руководящие указания по применению экологических показателей в странах восточной Европы, Кавказа и Центральной Азии. – Женева. 2006. – 105 с.
9. Показники здоров'я населення та діяльності медичних установ Донецької області за 2004 рік (статистичні матеріали). Донецьк. 2005. – 294 с.
10. Статистичний щорічник Донецької області за 2006 рік. Донецьк: Головне управління статистики у Донецькій області. 2006. – 397 с.
11. Статистичний щорічник Донецької області за 2007 рік. Донецьк: Головне управління статистики у Донецькій області. 2008. – 459 с.
12. Guidelines for Ecological Risk Assessment/U.S. Environmental Protection Agency. – Washington, DC, 1998. – 114 p. (<http://cfpub.epa.gov/ncea/cfm/recordisplay.cfm?deid=12460>).
13. Берталанфи Л. Общая теория систем – Критический обзор. – General Systems, Vol. VIII, 1962. P 1 – 20.
14. Доклад о развитии человека 1995. Положение женщин и развитие человеческого потенциала // <http://hdr.undp.org> (01.10.09).
15. База данных ДРЧ. http://hdr.undp.org/reports/view_reports.cfm. (11.10.09).
16. Национальные ДРЧ. <http://hdr.undp.org/nhdr/> (11.10.09).
17. <http://geodata.grid.unep.ch>. (10.08.2009).
18. <http://www.eionet.europa.eu>. (15.08.2009).
19. <http://www.worldbank.org/data/icp> (15.10.2009).
20. Indicators of Sustainable Development: Framework and Methodologies (1996) United Nations, New York.
21. Environmental Indicators for Agriculture. Vol. 3. Methods and Results. (OECD, 2001).
22. World Bank, World Development Indicators (issued annually).
23. United Nations, Indicators of Sustainable Development: Guidelines and Methodologies (2001).
24. Environmental Health Indicators: Framework and Methodologies. Prepared by D. Briggs, Occupational and Environmental Health. WHO, 1999.

Данные и методы интеллектуального анализа данных для исследования окружающей природной среды

Родригес Залепинос Р.А.

Донецкий национальный технический университет,
rodrigues@csm.donntu.edu.ua

Abstract

Rodriges Zalipynis R.A. Data and data mining methods for natural environment research. This paper gives a comprehensive survey of the state-of-the-art data mining techniques developed to help Earth scientists to advance in their efforts to better understand the environment. The paper also tries to bridge the interdisciplinary gap between computer and Earth scientists by reasoning the application of data mining techniques and explaining mechanisms of the underlying environmental phenomena. First, author analyzes available environmental data along with the ways of collecting, storing and processing it, including Ukrainian network for collection of meteorological data, ground, marine and satellite data sources, vegetation indices and reanalysis archives. Other sections are devoted to the discovery of teleconnections with shared nearest neighbor clustering algorithm and deriving association rules between anomalous events abstracted from meteorological parameters and vegetation indices with Apriori algorithm. The paper can serve as a good place to start from learning about this interdisciplinary research.

Введение

Данная статья является первым обзором данных и методов интеллектуального анализа данных для исследования окружающей природной среды. Во-вторых, для исследуемых климатических феноменов и рассмотренных методов, приводятся их описания и обоснование применения, синтезированные из многих источников по климатологии и метеорологии, на которые не ссылались оригинальные статьи. С точки зрения автора, это поможет сократить междисциплинарный разрыв между исследователями в области компьютерных наук и наук о Земле.

Тот факт, что погода в одном районе может быть связана с погодой где-то ещё, довольно далеко от данного места, всегда привлекал внимание людей. Многие экстремальные явления можно предугадать, анализируя такие дальние корреляционные связи и закономерности их появления. Это позволяет вовремя принять соответствующие меры по эвакуации людей, спасая их жизнь и имущество при возникновении чрезвычайных ситуаций (ураганы, наводнения, оползни и т.п.).

В разделе «Данные» проанализирована организация глобальной системы наблюдений всемирной службы погоды, географическое распределение метеостанций, система сбора метеоданных в Украине, спутниковые методы сбора данных, на основе которых можно вычислять индексы растительности, и архивы повторного анализа с открытым доступом.

Методы получения таких связей и описа-

ния закономерностей их появления рассмотрены в разделе «Поиск телеконнекций». Телеконнекции существенно влияют на местную погоду, часто вызывая засухи, ливни, наводнения, периоды сильной жары и холода, что наносит вред сельскому хозяйству, водоснабжению и рыболовству. Более того, они могут влиять на качество воздуха, пожароопасность, энергоснабжение и здоровье людей [6, стр. 286].

Знание о существовании телеконнекций, их характере, изучение их природы и изменений в их поведении служат ключом в понимании изменений и изменчивости регионального климата.

Климат является сложной системой, компоненты которой взаимодействуют друг с другом иногда неожиданным образом. В разделе «Ассоциативный анализ» приводится подход, позволяющий получить закономерности между аномальными значениями метеорологических величин (температуры, осадков и солнечной радиации) и индексов растительности, рассчитанных на основе спутниковых данных.

Разделы «Поиск телеконнекций» и «Ассоциативный анализ» независимы, однако для понимания обоих обязательен раздел «Данные».

Проблематика

Представьте себе шар радиусом более 6000 км, с желобами до 11 км и пиками до 9 км, площадью 510×10^6 км², 3/4 поверхности которого занимает среда, в глубинах которой побывало меньше человек, чем в космосе, заполненная наименее химически изученным веществом на планете. Оставшаяся территория крайне не-

равномерно устлана почти 300 000 видами растений, льдом, асфальтом, песком и населена более 1.2×10^6 видами животных. Представьте также, что шар окутывает слой толщиной 3000 км и массой $5,27 \times 10^5$ тонн разных газов, которые вместе вращаются вокруг оси шара со скоростью более 1500 км/час. Все это неравномерно нагревается ядерным реактором (Солнце) на расстоянии 150×10^6 км.

Задача исследования климата состоит в том, чтобы как можно больше узнать обо всех описанных компонентах и процессах, их взаимодействиях, особенностях и закономерностях, понять все это и описать математическими зависимостями.

Задача прогноза климата и погоды состоит в том, чтобы используя полученные закономерности и всю доступную на текущий момент информацию предсказать состояние атмосферы на месяц, сезон, год и 100 лет вперед.

Погода – это совокупность значений метеорологических параметров и явлений, которые характеризуют состояние атмосферы в конкретном регионе планеты в определенный момент времени [1].

Климат – «средняя» погода: средние значения метеорологических величин и степень их изменчивости за определенный период времени (обычно от месяца до миллионов лет) [6, стр. 96].

Интеллектуальный анализ данных (data mining) – «статистика в масштабе, скорости и простоте» [2, слайд 4] – процесс автоматического извлечения интересных, скрытых, неявных и потенциально полезных закономерностей из больших объемов данных [3]. Если данные описывают процессы и объекты, имеющие географические и временные размеры, то для них разрабатывают методы пространственно-временного интеллектуального анализа данных [52, стр. 240].

Современный мир испытывает взрывообразный рост количества данных, генерируемых быстрее, чем их успевают проанализировать. Науки о Земле не являются исключением.

Более чем за сто лет (1901–2008 гг.) Национальный климатический центр данных США накопил 1.7×10^9 измерений от 30×10^6 приборов [4, слайд 21].

Спутники НАСА наблюдения за землей (Earth Observing Satellites, EOS) собирают около 1-го терабайта данных ежедневно [52, стр. 237].

Несколько терабайт данных – типичный выход модели прогноза климата на 100 лет с 6-ти часовым шагом для более 100 переменных глобальной решетки $1.4^\circ \times 1.4^\circ$. Для получения правдоподобного прогноза необходимо несколько сотен прогонов модели [5, стр. 2].

Ценность имеющейся информации на порядок ниже без эффективных методов ее анали-

за. Обширные базы климатических данных предоставляют беспрецедентные возможности для поиска интересных и полезных закономерностей, однако в этой области традиционный ручной подход «гипотеза–проверка» существенно ограничен в силу своей трудоемкости.

Методы интеллектуального анализа данных предоставляют автоматические, но при этом осмысленные подходы к генерации гипотез и их проверке, а также эффективные средства работы с массивами данных, которые не помещаются в оперативную память вычислительных систем.

Применение методов интеллектуального анализа данных позволяет получить известные закономерности, подтверждая тем самым адекватность разработанных подходов, а также ранее неизвестные закономерности, которые могут быть потенциально новыми природными феноменами.

Данные

В этом разделе анализируются доступные на сегодняшний день данные для изучения окружающей природной среды, способы их сбора и обработки. В литературе можно найти историю развития метеонаблюдений в России [7, стр. 6], синоптической метеорологии 19–20 вв. [8, стр. 27–35] и в античное время [9].

В 1967 г. Всемирный метеорологический конгресс принял план Всемирной службы погоды (ВСП). С тех пор и по настоящее время ВСП состоит из трех основных компонентов [8, стр. 53; 10, стр. 8], являясь частью Глобальной системы систем наблюдения за землей (ГЕОСС) [11]: глобальной системы телесвязи (ГСТ), глобальной системы обработки данных (ГСОД) и глобальной системы наблюдений (ГСН).

Глобальная система наблюдений ВСП.

Стационарные наземные метеостанции проводят наблюдения за атмосферным давлением, температурой и влажностью воздуха, скоростью и направлением ветра, формой облаков, количеством осадков, атмосферными явлениями (туман, гололед и т.п.). Эти же параметры измеряются на различных высотах наземными аэрологическими станциями вертикальным зондированием атмосферы с помощью радиозондов.

Автоматизированные метеостанции – компактные устройства для измерения метеопараметров в автоматическом режиме через заданные промежутки времени. Они могут передавать измерения посредством подключения к ЭВМ либо удаленными средствами связи.

На кафедре компьютерных систем мониторинга Донецкого национального технического университета установлена автоматическая метеостанция (см. рис. 1), измеряющая температуру, относительную влажность, атмосферное давление, направление и скорость ветра, коли-

чество осадков каждые 10 минут. Имеется также автоматический газоанализатор, измеряющий концентрации веществ NO_2 , CO_2 , SO_2 . Графики доступны в системе ОМОС (Областная система мониторинга окружающей среды в Донецкой области) [12]. Станция не входит в ГСН ВСП.



Рисунок 1. – Автоматическая метеостанция кафедры КСМ ДонНТУ

По данным Национального климатического центра данных США (NCDC) [13] на территории современной Украины за 73 года (1936–2009 гг.) функционировало всего 202 метеостанции. Из них сегодня в действии только 47 со средней историей измерений в 60 лет (не считая 9-ти, которые работают с 2004 г.).

Для сравнения можно привести погодную службу Испании, у которой доступны данные по нескольким параметрам почвы, осадкам, максимальной и минимальной дневной температуре по 6750-ти станциям Испании и Португалии (Иберийский полуостров) и Балеарских островов с 1970 г. по настоящее время. Станции равномерно распределены по территории на расстоянии от 63 метров до 1 км друг от друга (2005 г.). В Польше таких станций 61, функционирующих с 1999 г. [14, стр. 220]. Не все станции входят в ГСН ВСП. Для сравнения: площадь Иберийского полуострова вместе с Балеарскими островами соизмерима с площадью Украины в отношении 0,997, а Польша почти в 2 раза меньше Украины [15].

В Украине наземная метеостанция представляет собой помещение и площадку с оборудованием для измерения метеопказателей, а также персональным компьютером с программным продуктом «АРМ Метеоролога» [16], разработанным Харьковской компанией АО «Специальные системы связи».

Станция обслуживается человеком-оператором, который регулярно снимает метеопказания с приборов на площадке наблюдения.

АРМ Метеоролога разработан с использованием языка программирования Delphi. Это

графическое Windows приложение, которое облегчает ввод метеоинформации и передачи данных на региональный сервер. Например, на формах размещены списки множественного выбора для ввода категориальных признаков, обеспечивается контроль числовых параметров. Получаемые от оператора значения сохраняются в локальную базу данных под управлением MySQL. При отправке метеоданные кодируются в метеотелеграмму – строку цифр, букв и некоторых других символов для минимизации трафика.

Каждые 6 часов все наземные метеостанции мира одновременно в регламентированное международными соглашениями фиксированное время по Гринвичу передают свои измерения через Глобальную систему телесвязи (ГСТ) ВСП, которая имеет три уровня [10, стр. 11]. В итоге измерения от всех станций, входящих в сеть ВСП, поднимаясь от уровня к уровню, концентрируются в трех мировых центрах данных.

Со дня основания ВСП были учреждены три мировых метеорологических центра данных: в Москве, Вашингтоне и Мельбурне.

Национальный климатический центр данных США (National Climatic Data Center, NCDC) является одним из мировых центров данных по метеорологии. Он хранит архивы приземных, спутниковых и морских климатических данных приборов, входящих в ГСН ВСП [13]. В частности, через Интернет доступны измерения более 20 000 метеорологических станций (см. рис. 2) с 1901 г. по настоящее время с шагом до 1-го часа.

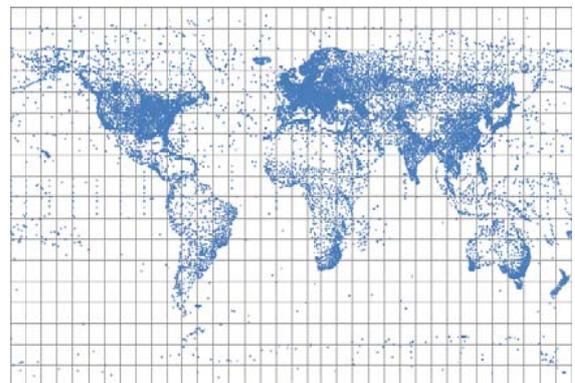


Рисунок 2. – Карта метеостанций, измерения которых находятся в базе данных NCDC [4, слайд 21]

Уровень национальной сети метеорологической телесвязи функционирует в пределах каждой страны. Например, метеостанции Донецкой области передают свои измерения в Донецкий гидрометеоцентр. Также в Донецк поступают данные из Луганского гидрометеоцентра. Данные из Донецка поступают в Харьков, а оттуда в Киев [17].

Уровень региональных сетей метеороло-

гической телесвязи объединяет национальные сети, а уровень главной сети телесвязи представляет собой высокоскоростную сеть, которая связывает три мировых центра данных и ряд узлов региональных сетей.

Связь в пределах Украинской национальной метеосети осуществляется по арендованным аналоговым телефонным линиям в режиме точка-точка. Для областных метеостанций также реализована возможность передачи данных на региональный сервер по GSM связи посредством мобильного телефона (покупается у мобильных операторов на общих условиях). Для передачи метеоданных по каналам связи Украинской национальной метеосети был разработан специальный протокол.

На областном сервере установлен программный комплекс «Бриз» [18], работающий под управлением Linux системы CentOS. «Бриз» осуществляет прием метеотелеграмм от областных метеостанций и передает их на следующий уровень национальной метеосети. При этом выполняется проверка метеотелеграмм на искажения при передаче, привлекая оператора, в случае необходимости. Также «Бриз» выполняет мониторинг состояний линий связи и участвует в приеме данных для «АРМ Синоптика».

Российская Федерация получила финансирование от Международного банка реконструкции и развития (МБРР) в сумме, эквивалентной 80 млн. долларов США [19] на техническое перевооружение всей наземной метеорологической наблюдательной сети Росгидромета.

По результатам конкурса исполнителем проекта является компания ЛАНИТ. Конкурс проводился Фондом "Бюро экономического анализа".

Проектом предусмотрены поставка оборудования для наблюдательной сети, состоящей из более 1900 объектов, и проведение работ на 240 площадках по всей территории РФ. ЛАНИТ обязуется поставить 210 автоматических станций и более 1600 автоматизированных метеорологических комплектов. Для измерения солнечной радиации будет установлена одна актинометрическая станция. В рамках проекта будет проведена автоматизация 85 региональных метеорологических центров, модернизация более 40 центральных и кустовых радирующих станций. Будет установлен широкий спектр современных средств связи: телефонные модемы, GPRS-модемы, устройства широкополосного доступа, низкоорбитальные спутниковые модемы, VSAT-терминалы, радиомодемы и др. на смену обыкновенной телеграфной и междугородней телефонной связи и каналам радиосвязи

Подобные проекты в таком масштабе в России ранее никогда не проводились [20].

Сбор метеоданных об океане. Мировой океан, занимая 3/4 поверхности планеты, играет

ключевую роль в атмосферной циркуляции. Считается, что при долгосрочном прогнозе климата¹, взаимодействие между атмосферой и океаном служит наибольшим источником точности прогноза (skill) [35, стр. 498], поскольку океан – главный источник влаги, поступающей в атмосферу и огромный тепловой резервуар [8, стр. 42].

В океане метеоданные получают с островных гидрометеорологических станций (в основном не отличаются наземных станций), судов погоды (оснащены необходимой аппаратурой и средствами связи) [8, стр. 42], судов добровольного наблюдения и разного вида буев [21, стр. 147].

Дрейфующие буи измеряют температуру и горизонтальную скорость поверхности океана. Они следуют за поверхностными течениями и передают данные своих измерений через спутниковую систему АРГОС.

Заякоренные буи измеряют температуру, соленость, горизонтальное течение и биологические параметры на различных глубинах. Вертикальные профили температуры и солености измеряются обрывным батитермографом во время океанографических рейсов.

Вертикально ныряющие буи Арго измеряют профили температуры и солености, по мере того, как они опускаются и поднимаются в океане. Данные передаются через АРГОС во время нахождения буя на поверхности.

Хотя и реализуются многочисленные программы по контактному наблюдению за океаном, все же горстка существующих буев не позволяет выполнить глобальный комплексный мониторинг океана.

Спутниковые наблюдения предоставляют информации об океане и суше, собрать которую с поверхности планеты невозможно. Эти системы обладают широким обзором территории.

Космический компонент ГСН ВСП состоит из трех типов спутников: метеорологические низкоорбитальные, геостационарные и экспериментальные [10, стр. 9]. Спутники ТОПЕКС/Посейдон, Ясон-1, ЕРС-2, ЕНВИСАТ способны измерять цвет океана (концентрацию зоопланктона на поверхности) и уровень моря.

Большой интерес для исследования окружающей природной среды представляют спутники Национального управления США по исследованию океанов и атмосферы (National Oceanographic and Atmospheric Administration, NOAA). Спутник NOAA имеет высоту орбиты 870 км, совершает один виток за 102 мин., при котором удается получить информацию с поверхности около 3 000 × 7 000 км [22, стр. 120–

¹ Вероятностный прогноз на месяц с периодом упреждения 1/2 месяца и на 3 месяца с периодами упреждения от 1/2 месяца до 12,5 месяцев с шагом в 1 месяц [35, стр. 496].

122].

На борту спутника установлен усовершенствованный радиометр с очень высоким разрешением, AVHRR (Advanced Very High Resolution Radiometer).

Прибор способен принимать сигнал в окне прозрачности атмосферы 10-12 мкм, что позволяет оценивать температуру поверхности океана. Он также принимает сигнал в видимой и ближней инфракрасной областях спектра, что позволяет рассчитывать индексы растительности.

При этом прибор имеет разрешение 1.1×1.1 км и ширину полосы обзора 2800 км. Он способен составить полное изображение земли за одни сутки [22, стр. 94–96].

NDVI (Normalized Difference Vegetation Index) – нормализованный относительный индекс растительности, показатель количества фотосинтетически активной биомассы (обычно называемый вегетационным индексом). Данный индекс используется для решения задач оценки растительного покрова [23]. Вычисляется по формуле $NDVI = (NIR - RED) / (NIR + RED)$, где NIR и RED – отражения в ближней инфракрасной и красной области спектра соответственно.

Расчет основан на том, что в красной области спектра (0,6-0,7 мкм) лежит максимум поглощения солнечной радиации хлорофиллом высших сосудистых растений, а в инфракрасной области (0,7-1,0 мкм) находится область максимального отражения клеточных структур листа.

Области со здоровой либо густой растительностью поглощают большую часть видимого света и отражают большую долю инфракрасного излучения, а нездоровая либо разреженная растительность отражает больше видимого света и меньше инфракрасного. NDVI позволяет различать и анализировать виды растительности [24], см. рис. 3.

Первичная нетто-продукция (Net Primary Production, NPP) выражает количество CO_2 , которое поглощается из атмосферы и перерабатывается растениями [25]. Временные ряды NPP для территорий отражают изменения в землепользовании (например, застройку территории), реакцию растительности на изменчивость климата (в том числе пожары и засухи) и изменения в объеме биомассы, которая является индикатором пищевой безопасности региона [26].

Потенциальная эвапотранспирация (Potential Evapotranspiration, PET) – количество воды, которое может быть испарено растениями при ее достаточном наличии. Измеряя PET можно неявно оценить показатели, от которых она зависит: тип почвы, глубины влаги в ней и тип растительности [27].

Спутниковые данные позволяют NASA реализовывать общественно полезные проекты.

Например, анализатор условий произрастания сельскохозяйственных культур по всему миру (Crop Explorer), глобальная модель и система прогнозирования оползней, система предупреждения о пожарах, мониторинг наличия воды вдоль маршрутов перемещения скота для обеспечения сохранности пастбищ и другие проекты [28, стр. 26].

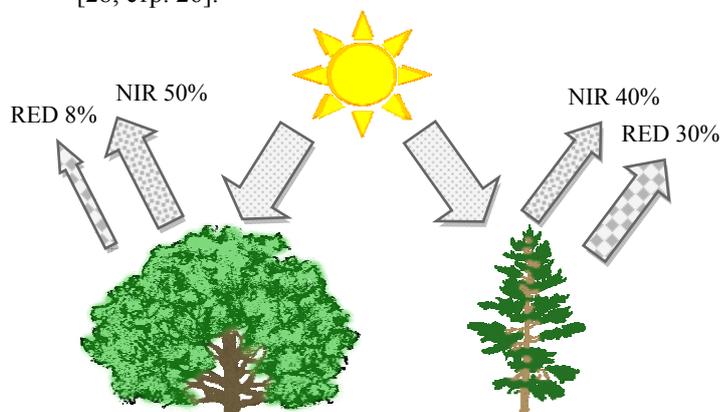


Рисунок 3. – Степень поглощения и отражения видимого красного (RED) и инфракрасного (NIR) излучений разными видами растительности

Проект Crop Explorer предоставляет открытый доступ к данным по атмосферным осадкам по всему миру, в том числе и по Украине. Данные можно визуализировать в системе Google Планета Земля в трехмерном режиме [29].

Архивы повторного анализа (reanalysis archives). Данные за историю метеонаблюдений получены разными приборами и способами, имеют разный характер (например, температура почвы в точке и температура водяного пара облаков над территорией), неравномерно распределены во времени и в пространстве и хранятся в разных форматах. Кроме того, в данных могут присутствовать неточности, погрешности и пробелы.

Весь набор информации трудно использовать, не проведя ее систематизацию.

Концепция архива повторного анализа возникла из потребности предоставить сообществу исследователей климата целостный ретроспективный ряд метеорологических состояний планеты, восстановленных на основе всех собранных данных за десятки лет метеонаблюдений.

В 1996 г. появился первый в своем роде архив повторного анализа NCEP/NCAR Reanalysis версии 1 (R1) [30, 31], созданный совместными усилиями Национальных Центров США по Предсказанию Окружающей Среды и Исследованию Атмосферы (National Center for Environmental Prediction, NCEP and National Center for Atmospheric Research, NCAR).

Были восстановлены поля атмосферных

переменных на регулярной широтно-долготной многоуровневой сетке, охватывающей всю планету при помощи ассимиляции данных, собранных с приборов на суше, кораблях, вертикального зондирования атмосферы (с помощью водородных баллонов), самолетах, спутниках и других данных (см. рис. 4).

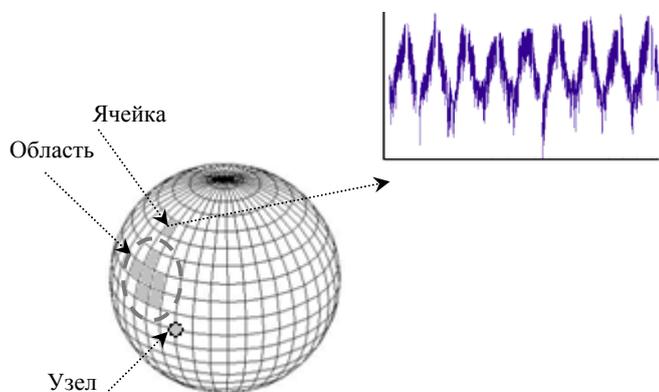


Рисунок 4. – Упрощенная иллюстрация представления данных на широтно-долготной решетке

Усвоение (ассимиляция) данных (data assimilation) – набор статистических и численных методов комбинирования всех доступных метеоданных для их интерполяции на регулярную широтно-долготную решетку.

Цель усвоения данных – как можно точнее определить состояние атмосферы в заданный момент времени [32, стр. 136].

Полный объем архива составляет 2.9 Терабайта (по состоянию на август 2009 г.). Архив содержит более 80 различных переменных (включая атмосферное давление на уровне моря, влажность воздуха, солнечную радиацию) в нескольких координатных системах с 1948 г. по настоящее время [31].

Вторая версия архива под названием NCEP–DOE AMIP R2 отличается исправленными ошибками и использованием новых систем ассимиляции данных [33]. При этом архив содержит данные для более короткого срока – с 1979 г.

Поиск телеконнекций

В метеорологии телеконнекция (teleconnection, дальняя корреляционная связь) – существенное одновременное колебание климата в разных довольно далеко расположенных друг от друга географических районах [34, стр. 38].

Знания о телеконнекциях используются Центром Прогноза Климата (Climate Prediction Center, CPC) для сезонного и долгосрочного прогноза климата [35, стр. 497], изучения и прогноза загрязнений атмосферного воздуха [36], построения систем оповещения о приближении суровых погодных условий [37].

Самой знаменитой телеконнекцией считается Эль-Ниньо (El Niño, с исп. «младенец Христос») – появление аномально теплой воды на поверхности океана у берегов Перу в декабре или на Рождество (отсюда и название) [38, стр. 153]. Точность сезонного прогноза климата в большой степени зависит от точности прогноза наступления и степени Эль-Ниньо [39]. Большинство телеконнекций связано с океаном, поэтому он вызывает основной интерес при их поиске.

Механизм происхождения Эль-Ниньо таков. Мировой океан опоясывают особые северные и западные ветры (см. рис. 5).

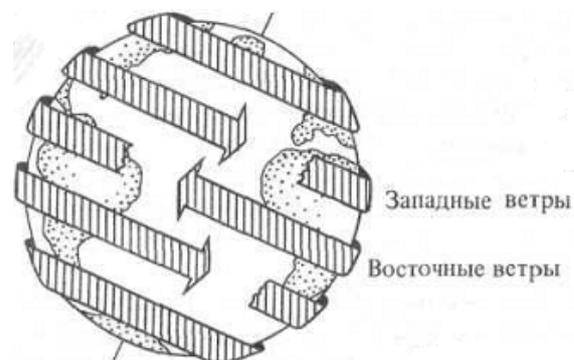


Рисунок 5. – Пояса ветров над Мировым океаном [38, стр. 29]

Восточные ветры, дующие примерно над экватором называются пассатами. В обычное время они перемещают теплую воду вдоль экватора к Азиатскому континенту, где уровень моря повышается примерно на 1 м по отношению к Американскому побережью [38, стр. 152], а на место ушедшей теплой воде из глубин поднимается холодная вода (см. рис. 6).



Рисунок 6. – Повышение уровня моря под действием пассатов [38, стр. 152]

Бывают периоды, когда происходит резкое ослабление пассатов. Большая возвышенность теплой воды у Азиатских берегов более не может удерживаться такими слабыми ветрами и устремляется назад. Для Индонезии, Австралии и юго-восточной Африки значительные явления Эль-Ниньо вызывают суровые засухи и опустошительные лесные пожары. Для Эквадора, Перу

и Калифорнии оно приводит к обильным ливням и ураганам, которые часто вызывают наводнения и оползни. Сильные всплески Эль-Ниньо приносят тысячи смертей, разрушают дома людей и причиняют миллиарды долларов убытка мировой экономике [40]; конкретный пример в [38, стр. 153] для Эль-Ниньо 1972 г.

Программный продукт NASA World Wind [41] способен в анимированном трехмерном режиме визуализировать аномалии температуры океана, полученные со спутника, во время Эль-Ниньо.

Сам Эль-Ниньо является следствием ещё более крупномасштабного Южного колебания (Southern Oscillation) – тенденции повышения атмосферного давления над Тихим океаном, при его падении над Индийским океаном [42] (что и вызывает ослабление пассатов). В свою очередь, Южное колебание вызывается процессами планетарного масштаба: взаимным расположением планет, солнца и луны [43, стр. 679–682].

Для наглядного представления поведения известных колебаний и вызываемых ими телекоммуникаций пользуются простыми в построении климатическими индексами океана – временными рядами климатических переменных, измеренных для участков океана, в которых периодически проявляются аномалии климата [6, стр. 287–295].

Индексы, построенные на основе температуры поверхности океана либо давления на уровне моря, называют климатическими индексами океана (Ocean Climate Indices, OCI).

Например, для Южного колебания традиционно используется разница атмосферного давления на уровне моря между Дарвином (Австралия) и Таити (см. рис. 7); отрицательные значения индекса соответствуют появлению феномена Эль-Ниньо.

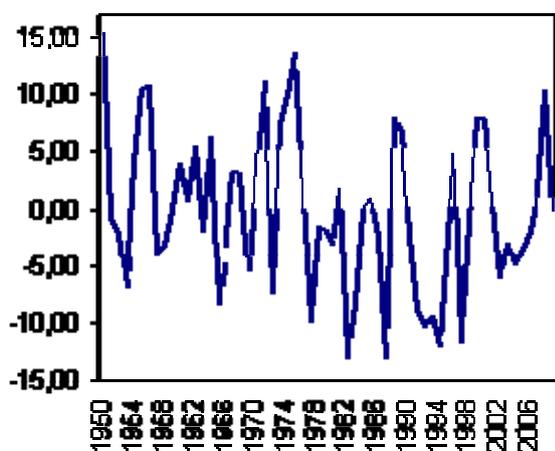


Рисунок 7. – Индекс Южного колебания (по данным Метеорологического Бюро Австралийского Национального Климатического Центра [44])

Климатическая система может содержать потенциально неизвестные ученым телекоммуникации, для поиска которых климатологи использовали эмпирические ортогональные функции (Empirical Orthogonal Functions, EOF) [34, стр. 44–47].

В работах [45, 46] выполнен поиск телекоммуникаций с помощью кластеризации. Подход мотивируется тем, что возникающий климатический феномен захватывает существенную область океана либо суши, величина атмосферного давления либо температуры в которой однородна.

Кластеризация разбивает множество объектов на группы (кластеры), таким образом, чтобы объекты в одном кластере были более близки друг к другу, чем к объектам из других кластеров [47, стр. 490].

Значения временных рядов климатической переменной для ячеек широтно-долготной решетки представляются в виде векторов и подаются на вход алгоритму кластеризации SNN. Хотя вектора не содержат информации о координатах своих ячеек, в один кластер попадают соседние ячейки, формируя непрерывные регионы благодаря пространственной автокорреляции.

Алгоритм кластеризации SNN (Shared Nearest Neighbor) представляет вектора в виде вершин графа и определяет меру близости между двумя вершинами на основе количества их общих ближайших соседей. Плотность региона вокруг вершины оценивается её суммарной близостью к своим ближайшим соседям. На основе этого алгоритм сохраняет ребра в однородных по плотности районах и удаляет ребра в переходных зонах. Для одного кластера определяются несколько представительных вершин (имеющие наибольшую связность) [48, стр. 3–4].

Перечисленные особенности позволяют находить кластеры различных плотностей (как регионы с однородной плотностью), форм и размеров. Алгоритм также не кластеризует все вершины, классифицируя некоторые как шумы и выбросы, и автоматически определяет «естественное» количество кластеров в зависимости от данных и заданных параметров.

Алгоритм использует пороги $k, \theta_1, \theta_2, \theta_3$ (подробнее шаги 2, 5, 6, 7 соответственно) и работает следующим образом [48, 49, 50].

1. Построение графа подобия. Вычислить расстояние между всеми парами входных векторов и построить полный граф, в котором вершины представляют собой вектора, а веса ребер – расстояние между ними.

Пусть $Adj[i]$ – список смежности вершины i , $|Adj[i]|$ – количество элементов в списке $Adj[i]$, $Adj[i][j]$ – индекс вершины на позиции j в списке смежности вершины i , $w(i, j)$ – вес ребра (i, j) .

2. Разрежение графа подобия. Для каждой вершины i упорядочить список $Adj[i]$ по возрастанию весов ребер: $w(i, Adj[i][j]) \leq w(i, Adj[i][j+1])$, $j = 0..|Adj[i]| - 1$. Удалить хвост списка $Adj[i]$, оставив первые k элементов.

3. Построение графа Общих Ближайших Соседей. Удалить вершину i , из списка $Adj[j]$, если $j \notin Adj[i]$ (такие случаи довольно часты после шага 2, особенно на границах соседних кластеров с разной плотностью). Назначить каждому ребру новый вес: $w(i, j) = \sum_{m,n: Adj[i][m]=Adj[j][n]} [(k+1-m)(k+1-n)]$.

4. Для каждой вершины i вычислить общий вес ребер, инцидентных ей: $ОВР(i) = \sum_{j=0..|Adj[i]|-1} w(i, Adj[i][j])$.

5. Найти вершины-представители кластеров $\{i: ОВР(i) > \theta_1\}$.

6. Найти вершины, представляющие собой шум и выбросы $\{j: ОВР(j) < \theta_2\}$ и удалить их из графа.

7. Удалить все ребра с весом $< \theta_3$.

8. Удалить все вершины, которые не являются вершинами представителями, либо не соединены хотя бы с одной из них. Найти все связные компоненты графа. Они будут результирующими кластерами.

Время работы алгоритма (из-за шага 1) есть $O(|N|^2)$, где N – количество входных векторов, поскольку для многомерных данных нет общей методики быстрого определения k ближайших соседей. Для определенных предметных областей возможны методы оптимизации [48].

Центроид кластера – вектор, полученный усреднением всех векторов, вошедших в кластер. Пусть C_i – множество векторов кластера i , тогда $c_{ij} = \frac{\sum_{y_i \in C_i} y_{ij}}{|C_i|}$, где c_{ij}, y_{ij} – j -й элемент вектора центроида c_i и вектора y_i кластера C_i соответственно.

Используя в качестве климатической переменной давление на уровне моря, удалось получить временной ряд, коррелирующий с индексом Южного колебания в размере 0.78 [46, стр. 7] путем вычитания из центроида кластера 15 центроид кластера 20 (см. рис. 8). Аналогично разница центроидов кластеров 13 и 25 коррелирует в размере 0.81 с индексом Североатлантического колебания (North Atlantic Oscillation, NAO) – одного из важнейших климатических феноменов, оказывающее ключевое влияние на климат Европы и Северной Америки [43, стр. 536–539]. Индекс Североатлантического колебания определяется как нормализованная разница давлений на уровне моря между Ponta Delgada (столица Азорских островов) и Stykkisholmur (Исландия).

Существуют также индексы, основанные на температуре поверхности океана. Например, NINO1+2 вычисляется на основе температуре региона в районе 80° З.Д. – 90° З.Д. и 5° Ю.Ш. – 5°С.Ш, а NINO3.4 в 120° З.Д. – 170° З.Д. и 5° Ю.Ш. – 5°С.Ш [45, стр. 3].

Используя вместо давления температуру поверхности океана, было получено 107 кластеров (см. рис. 9).

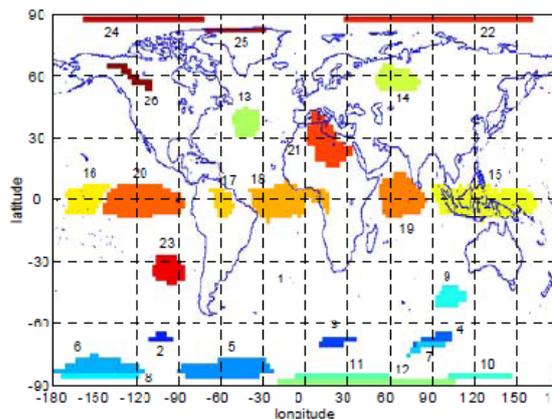


Рисунок 8. – Кластеры давления на уровне моря за 1982–1993 гг., полученные алгоритмом SNN [46, стр. 4, рис. 5]

Чтобы оценить влияние центроида кластера температуры на сушу, для него вычисляется сумма абсолютных значений его корреляций со всеми временными рядами ячеек суши.

С помощью описанного подхода, удалось получить кластеры (группа G0), центроиды которых коррелируют с индексами NINO1+2, NINO3, NINO3.4 и NINO4 в размере > 0.9 [45, стр. 7].

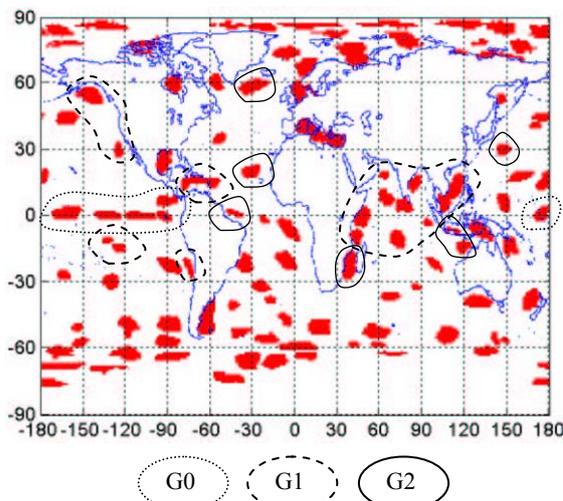


Рисунок 9. – Кластеры температуры поверхности океана за 1958–1998 гг., полученные алгоритмом SNN [45, стр. 6, рис. 7]. Разделены на 3 группы: G0, G1 и G3. Число кластеров–107

Также были получены альтернативные версии существующих индексов – центроиды кластеров группы G1, которые вероятно, относятся к тем же климатическим феноменам. Их центроиды более коррелируют с некоторыми областями суши, чем известные индексы.

Наконец, получены кластеры группы G3, которые слабо коррелируют с известными индексами, но имеют более высокую корреляцию с некоторыми областями суши, чем существующие индексы, а значит, могут представлять потенциально новые климатические феномены.

К ограничениям описанного подхода можно отнести кластеризацию только по одной переменной и то, что в основном коррелируют только экстремальные явления.

Например, корреляция центроидов кластеров 20 и 15, в момент проявления Эль-Ниньо высока и гораздо ниже в обычное время. При этом некоторые менее явные либо более кратковременные телеконнекции могут быть не обнаружены данным подходом.

Одним из решений может быть сравнение только определённых частей временных рядов. Также могут оказаться более адекватными подходы, основанные на событиях, например, ассоциативный анализ (описан в следующем разделе).

Еще одна особенность телеконнекций – мобильные кластеры, которые также затрудняют обнаружение климатических феноменов [51, стр. 3]. Например, НАО возникает через нерегулярные интервалы времени и точное расположение этого феномена изменяется от месяца к месяцу. Одним из решений по [51] может быть разработка алгоритмов поиска кластеров, которые изменяются во времени.

Ассоциативный анализ

Традиционно ассоциативные правила определяются на примере потребительской корзины (market basket) – набора товаров и услуг, приобретаемых на рынке, следующим образом [47, стр. 329–330; 52, стр. 258; 53, стр. 139; 54, стр. 207].

Транзакцией называется набор товаров, приобретенных покупателем за визит. Пусть Y – множество всех транзакций, $count(Q) = |\{T: T \in Y, Q \subseteq T\}|$ – количество транзакций, в которых содержится набор товаров Q .

Ассоциативное правило – отношение вида $A \rightarrow B$, где A и B – наборы товаров, $A \neq \emptyset$, $B \neq \emptyset$, $A \cap B = \emptyset$. Ассоциативное правило характеризуется *поддержкой* (support), $sup(A \rightarrow B) = count(A \cup B)/|Y|$ и *достоверностью* (confidence),

$conf(A \rightarrow B) = count(A \cup B)/count(A)$. Для некоторых порогов $minsup$ и $minconf$ правило $A \rightarrow B$ называют *часто встречающимся* (frequent), если $sup(A \rightarrow B) \geq minsup$, а если вдо-

бавок $conf(A \rightarrow B) \geq minconf$ то и *сильным* (strong).

Например, если $A = \{\text{Масло, Молоко}\}$, $B = \{\text{Хлеб}\}$, $sup(A \rightarrow B) = 0.45$, $conf(A \rightarrow B) = 0.75$, то это можно интерпретировать так: «в 45% случаев покупатель приобретает масло, молоко и хлеб, причем, если покупатель приобретает масло и молоко, то в 75% случаев он также приобретает хлеб».

Ассоциативное правило вида $A \rightarrow B$ не выражает причинную связь, для утверждения существования которой необходимо знание причинно-следственных отношений. Напротив, оно свидетельствует о частом появлении элементов множества $A \cup B$ вместе.

В работе [55] впервые был выполнен ассоциативный анализ климатических данных. Рассматривались временные ряды температуры, количества осадков, солнечной радиации, а также NDVI, NPP, PET и FPAR (Fractional Intercepted Photosynthetic Active Radiation), измеренные в ячейках широтно-долготной сетки планеты.

Индекс FPAR вычисляется на основе NDVI. Аномально высокие значения FPAR означают, что растительность проявляет больше светособирающей фотосинтетической активности, чем обычно.

Наряду с изучением обычного хода природных процессов, климатологи заинтересованы в изучении явлений, которые являются отклонением от нормы. Поэтому из временных рядов выделяются аномальные события, определяемые как превышение либо падение значения климатической переменной выше либо ниже $\mu \pm 2\sigma$, где μ – математическое ожидание, а σ – среднеквадратическое отклонение. Будем обозначать эти события префиксами «Выс-» и «Низ-» соответственно.

Нас интересуют ассоциативные правила вида «для рассматриваемой территории характерны высокие значения PET наряду с низкими значениями Температуры, которые сопровождаются высокими значениями Солнечной радиации в 99.4% случаев».

При поиске ассоциативных правил, совокупность аномальных событий для региона представляется в виде транзакций с потребительскими корзинами. Главное преимущество такого подхода в том, что можно использовать существующие алгоритмы.

Приведенное выше правило можно записать в виде {Выс-PET, Низ-Температура} \rightarrow {Выс-Солнечная рад}, $conf = 99.4\%$.

Пусть транзакцией будет набор аномальных событий $z_t = \{E_1, E_2, \dots, E_N\}$, которые имели место в момент времени t на интересующей нас территории (считается, что все эти события произошли одновременно). Тогда база данных транзакций будет состоять из всех z_t .

Алгоритм *Apriori* использует простое свойство меры поддержки: если множество Q является часто встречающимся, то любое его подмножество $Q' \subseteq Q$ является также часто встречающимся. Действительно, Q' содержится, по крайней мере, во всех множествах, в которых содержится и Q , значит $count(Q') \geq count(Q)$.

Ниже представлено переработанное описание алгоритма на основе [47, стр. 332–349; 56, стр. 1–12]. Обозначим через $Q[i]$ элемент множества Q , который находится на i -й позиции в лексикографически упорядоченной последовательности элементов Q .

```

1  k = 1
2  F1 = {f: f ∈ Y, |f| = 1, count(f)/|Y| ≥ minsup}
3  повторять
4  Ck+1 = {X ∪ Y: X, Y ∈ Fk, X[i] = Y[i], i =
   1, ..., k - 1, X[k] ≠ Y[k]}
5  для ∀c ∈ Ck+1
6     Kc = {s: s ⊂ c, |s| = k}
7     для ∀s ∈ Kc
8         если s ∉ Fk
9             то удалить c из Ck+1
10  положить count(c) = 0 для ∀c ∈ Ck+1
11  для ∀T ∈ Y
12     CT = {c: c ∈ Ck+1, c ⊂ T}
13     увеличить count(c) на 1 для ∀c ∈ CT
14  Fk+1 = {c: c ∈ Ck+1, count(c)/|Y| ≥ minsup}
15  k = k + 1
16  до тех пор, пока Fk ≠ ∅
17  Результат = ∪ Fk

```

Рисунок 10. – Алгоритм *Apriori*

Вначале (строка 2) генерируются часто встречающиеся синглтоны. Каждая итерация алгоритма (строки 3–16) генерирует множество F_k – часто встречающиеся множества мощностью k (ЧВМ _{k}).

Алгоритм расширяет найденные ЧВМ _{k} таким образом, чтобы не упустить ни одного ЧВМ _{$k+1$} и при этом сгенерировать как можно меньше $k + 1$ множеств, которые заведомо не являются часто встречающимися.

Для этого в строке 4 генерируются кандидаты в ЧВМ _{$k+1$} следующим образом. Элементы множеств из ЧВМ _{k} упорядочиваются в лексикографическом порядке и отыскиваются все пары ЧВМ _{k} , которые отличаются одним последним элементом. Кандидатами в ЧВМ _{$k+1$} являются объединения найденных пар множеств.

Можно было бы расширять каждое ЧВМ _{k} каждым ЧВМ₁, получая в итоге $|F_k| \times |F_1|$ кандидатов. Если множество $\{A, B, C\} \in \text{ЧВМ}_3$, то обязательно также существуют $\{A, B\}, \{A, C\} \in \text{ЧВМ}_2$. Поэтому нет необходимости расширять $\{A, B\} \in F_2$ множеством $\{C\} \in F_1$ либо объединять $\{A, B\}, \{B, C\} \in \text{ЧВМ}_2$.

Описанный подход в разы уменьшает количество кандидатов $|C_{k+1}|$ в ЧВМ _{$k+1$} , которое

существенно влияет на время выполнения остальной части алгоритма.

Можно отсеять некоторых кандидатов в ЧВМ _{$k+1$} без обращения к базе данных транзакций. Для $Q \in \text{ЧВМ}_{k+1}$ обязательно, чтобы все подмножества Q мощностью k (генерируются в строках 5–6), были ЧВМ _{k} (проверяется в строках 7–9). Заметим, что $|K_c| = k + 1$, считая те два множества, объединением которых был получен кандидат.

Если все подмножества мощностью k кандидата Q в ЧВМ _{$k+1$} являются ЧВМ _{k} , то это не гарантирует $Q \in \text{ЧВМ}_{k+1}$. Для проверки оставшихся кандидатов, выполняется сканирование всей базы данных транзакций (строки 11–13) и подсчет количества транзакций, в которых содержатся кандидаты.

В строке 14 отбираются только те кандидаты, встречаемость которых удовлетворяет пороговому значению поддержки.

Алгоритм завершается, если не было найдено ни одного ЧВМ _{$k+1$} (строка 16), а значит ЧВМ _{$k+i$} = ∅ для $\forall i > k + 1$ (гарантируется монотонность меры поддержки). Результат работы алгоритма – все часто встречаются вместе наборы товаров.

Простым перебором всех товаров $X \in Q$ легко получить из набора $Q \in \text{ЧВМ}_{|Q|}$ все правила вида $Q - X \rightarrow X$ при $|X| = 1$, проверяя при этом условие $minconf \leq conf(Q - X \rightarrow X) = count(Q)/count(Q - X)$. Случай $|X| > 1$ описан в [47, 54].

В результате были получены следующие ассоциативные правила (показаны первые 4 с наиболее высокой достоверностью) [55, стр. 9].

1. {Выс-ПЕТ, Выс-Осадки, Выс-FPAR, Выс-Температура} → {Выс-NPP}, conf = 100%.
2. {Выс-ПЕТ, Низ-Температура} → {Выс-Солнечная рад}, conf = 99.4%.
3. {Выс-ПЕТ, Выс-Осадки, Выс-FPAR} → {Выс-NPP}, conf = 98.6%.
4. {Низ-NPP, Низ-ПЕТ, Выс-Температура} → {Низ-Солнечная рад}, conf = 98.0%.

Используя вместо меры поддержки корреляцию $corr(A, B) = P(A \cup B) - P(A)P(B) / \sqrt{P(A)(1 - P(A))P(B)(1 - P(B))}$, где $P(Q) = count(Q)/|Y|$, удалось получить такие правила:

1. {Низ-FPAR} → {Низ-NPP},
corr = 0.4327.
2. {Выс-FPAR} → {Выс-NPP},
corr = 0.4013 (см. рис. 11).
3. {Низ-Solar} → {Низ-ПЕТ},
corr = 0.2752.
4. {Низ-ПЕТ, Низ-FPAR} → {Низ-NPP},
corr = 0.1966.

Интересна закономерность, когда аномально высокие значения FPAR ведут к выше

обычным значениям NPP (см. рис. 11). Большинство регионов, которые проявляют такую закономерность, в основном соответствуют полусухим ежегодным пастбищам – типу растительности, которое способно к более быстрому извлечению пользы от периодически сильных осадков, чем леса.

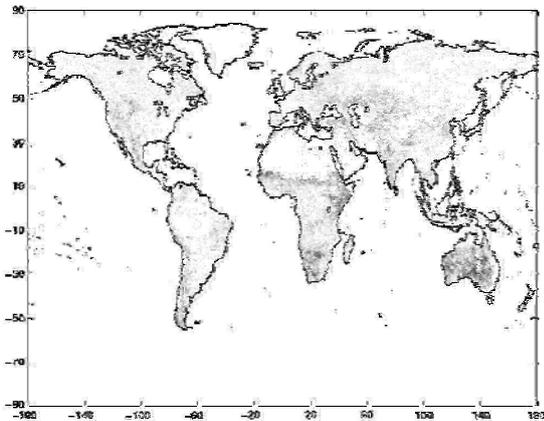


Рисунок 11. – Регионы, для которых {Выс-FPAR} → {Выс-NPP} [55, стр. 10, рис. 13]

Заключительные замечания

Когда исследователь в области компьютерных наук проводит эксперименты с алгоритмом, то он может изменить его входные параметры и повторить эксперимент еще раз. В климатологии такой характер познания невозможен. На сегодняшний день считается, что оптимальным способом познания окружающей среды является сбор максимального количества сведений о ней в единицу времени.

Метеорологические данные поступают со стационарных наземных метеорологических и аэрологических станций, островных станций в океане, погодных судов, судов добровольного наблюдения, различного вида подводных и поверхностных буев.

Наибольшее количество информации поступает со спутников, на борту которых установлены приборы дистанционного измерения температуры, влажности, рельефа, цвета и других параметров, позволяя узнавать о Земле из космоса больше, чем находясь на ней.

Например, спутник Национального управления США по исследованию океанов и атмосферы (NOAA) оснащён усовершенствованным радиометром с очень высоким разрешением (AVHRR) – 1.1×1.1 км. Прибор способен оценивать температуру поверхности океана и принимать излучения в видимом красном и инфракрасном областях спектра, позволяя рассчитывать индексы растительности, например NDVI.

Индекс NDVI позволяет узнать о типе растительности, почвы, и влаги в ней, характере землепользования, объеме биомассы.

Прибор AVHRR 4-х функционирующих спутников NOAA, имеет 10-битное квантование по 5 спектральным каналам и составляет полную картину земли за сутки, собирая таким образом почти 1.5 Гб данных в день.

Спутник NASA EOS Landsat 7 генерирует 7 Гб/день, а спутник Terra 194 Гб/день. В открытом доступе находится около 284 Терабайт данных, собранных спутниками NASA EOS [57].

Широтно-долготная 17-ти уровневая решетка с разрешением $2.5^\circ \times 2.5^\circ$ со значениями метеовеличин в узлах занимает 194.99 Гб и составляет всего 6.6% от общего объема архива повторного анализа NCEP/NCAR версии 1.

Учитывая, что скорость чтения с диска составляет около 75 Мб/сек, потребуются более 40 минут, чтобы только загрузить эту решетку с диска в последовательном режиме в оперативную память.

При таких объемах данных вычисление тривиального арифметического выражения, например, среднего, уже является далеко не тривиальной задачей.

Телеконнекции представляют собой одновременное изменение климата в разных далеко расположенных друг от друга географических районах. От поведения Североатлантического колебания зависит климат Северной Америки и Европы, а от Эль-Ниньо жизни и имущество тысяч людей Южной Америки и Австралии.

Наиболее раннее упоминание об Эль-Ниньо приходится на конец 19 в., когда перуанские моряки окрестили этим именем появление у берега необычно теплой воды на Рождество. Сегодня учет этого феномена является ключевым при сезонном прогнозе климата.

Для описание телеконнекций климатологи разрабатывают климатические индексы. Например, индекс Южного колебания, который коррелирует с периодами и степенью Эль-Ниньо, доступен с 1876 г. и представляет собой разность атмосферного давления на уровне моря между Дарвином (Австралия) и Таити.

Несмотря на кажущуюся зрелость и полноту данных о телеконнекциях, до сих пор ведется поиск новых индексов и телеконнекций.

Дело в том, что до эры дистанционных спутниковых измерений, приходилось пользоваться данными стационарных островных метеостанций.

Официальной методики вычисления конкретных индексов, признаваемых большинством исследователей и организаций нет [34, стр. 50].

С доступностью глобальных данных об океане высокого разрешения и открытых архивов повторного анализа, начали появляться дискуссии об адекватности используемых индексов: скорее всего, существуют другие участки океана, на основе которых можно построить

лучшие индексы. Поэтому стали применяться дополнительные индексы, например, NINO1+2, NINO3.4, которые рассчитываются на основе температуры определенных участков океана, при этом индекс Южного колебания стал утрачивать свою популярность [34, стр. 50–51].

В связи с этим, степень корреляции новых индексов для Эль-Ниньо и других климатических феноменов с индексом Южного колебания не свидетельствует о степени адекватности новых индексов. Сам индекс Южного колебания служит лишь описанием феномена Эль-Ниньо, существуя сам по себе.

Сегодняшний объем данных не позволяет вручную найти все полезные закономерности. В связи с этим, был выполнен поиск телеконнекций с помощью кластеризации. Вся территория океана автоматически, но при этом осмысленно разделяется на области (кластеры) с относительно однородным климатическим поведением. Центроиды найденных кластеров представляют собой временные ряды, в среднем характеризующие поведение соответствующих им областей.

Одни, из полученных таким образом, центроиды представляют собой уже известные климатические индексы океана и служат подтверждением правильности предложенного подхода, другие являются альтернативой известным индексам, которые имеют лучшую прогнозную способность для некоторых регионов, а третьи потенциально представляют собой новые климатические феномены.

Спутниковые данные позволили больше узнать о характере растительного покрова и его реакции на изменчивость климата.

С помощью алгоритмов ассоциативного анализа были обнаружены взаимоотношения между аномальными значениями метеорологических величин и индексов растительности (превышение либо падение значения выше либо ниже заданного порога).

Ассоциативные правила представлялись в виде транзакций с потребительскими корзинами, что позволило использовать существующие алгоритмы поиска ассоциативных правил, например *Apriori*.

Полученные таким образом правила представили интерес для климатологов и требуют дальнейшего исследования.

Однако используемый подход приводит к плотным матрицам транзакций и, следовательно, занимает существенное время.

Также при использовании стандартных мер важности ассоциативных правил не удается получить все интересные и потенциально полезные закономерности. Например, при использовании корреляции вместо меры достоверности были получены другие важные закономерности.

Проанализированный подход может быть расширен поиском трендов в обнаруженных ассоциативных правилах.

Территория Украины также находится под влиянием телеконнекций. При этом особое воздействие на Украину оказывает Североатлантическое колебание [58, 59]. Проанализированные в этой статье методы кластеризации и поиска ассоциативных правил могут найти новые потенциально полезные взаимосвязи между крупномасштабными процессами и региональным климатом Украины. Это позволит использовать их для своевременного прогноза паводок, заморозков, засух и других чрезвычайных климатических ситуаций на территории Украины.

В 2001 г. группа исследователей в области компьютерных наук университета Миннесоты (США) получили грант НАСА для проведения первого в своем роде исследования климата с помощью интеллектуального анализа данных. Их цель «помочь ученым в области наук о Земле в их усилиях лучше понять» климатическую систему планеты не просто не утратил актуальности за прошедшие десять лет, но и получил новое развитие благодаря совершенствованию способов мониторинга природы нашей планеты.

Выводы

Впервые в одной статье проанализированы данные и методы их интеллектуального анализа для исследования окружающей природной среды.

Наиболее познавательным источником об окружающей среде являются данные дистанционного зондирования Земли, которые позволяют узнать из космоса больше, чем находясь на самой планете.

Разработка систем поддержки принятия решений на основе ДЗЗ – наиболее активная область исследований климата.

В Украине развивается система Geo-UA. Целями системы будут оценки возникновения чрезвычайных ситуаций, анализ и прогноз окружающей среды, выработка рекомендаций относительно рационального природопользования и решение другие стратегически важных управленческих задач [60, слайд 28].

По перечисленным задачам существует довольно разреженное множество методов интеллектуального анализа данных ДЗЗ. Это обусловлено тем, что до недавнего времени их решение не позволяло детально проанализировать интересующие аналитиков объекты (например, отдельные сельскохозяйственные поля и городские водоемы).

Большие объемы данных (сотни терабайт), актуальность задач поддержки принятия управленческих решений и недостаток методов интеллектуального анализа данных дистанцион-

ного зондирования Земли определяют высокопроизводительные вычисления и методы обнаружения изменений (change detection) [61] наиболее актуальными для дальнейшего исследования.

Поскольку в контексте программы Geo-UA Украина в этом году (2010) выведет на орбиту собственный спутник дистанционного зондирования Земли Сич-2 [62] с высоким пространственным разрешением (7 метров), то Донецкий национальный технический университет способен сделать существенный вклад в развитие программы устойчивого развития страны благодаря новым высокопроизводительным ресурсам (кластер из 200 ядер по 2.8 ГГц).

Литература

1. Что мы понимаем под погодой? // El. resource. URL: http://meteoprog.ua/blogs/mavis/2008/09/05/what_is_wheat/ (10.10.2010).
2. Data Mining: Overview // El. resource. URL: <http://ocw.mit.edu/NR/rdonlyres/Sloan-School-of-Management/15-062Data-MiningSpring2003/E738593F-0DF6-47B7-9171-A39839F160AE/0/Lecture1Slides.pdf> (10.10.2010).
3. Data Mining: Definition from Answers.com // El. resource. URL: <http://www.answers.com/topic/data-mining> (10.10.2010).
4. Zhizhin M. et al., Parallel storage, mining and visualization of environmental data archives, ER Symposium, 2009.
5. Ganguly A. and Steinhilber K., Data Mining for Climate Change and Impacts, ICDM-SSTD, 2008.
6. IPCC, 2007: Climate Change 2007: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change [Solomon S. et al. (eds.)]. Cambridge University Press, NY, USA, 996 pp.
7. Беловодський В.М. и Соавторы. Звіт про науково-дослідницьку роботу М2-08 «Изучение возможности разработки модели краткосрочного прогноза погоды для Донецкого региона», Донецкий национальный технический университет, кафедра компьютерных систем мониторингу, 2008.
8. Зверев А.С. Синоптическая метеорология, 2-е изд., перераб. и доп. Л.: Гидрометеоиздат, 1977 – 712 с., ил.
9. Гордин В.А. Из чего делают прогноз погоды // El. resource. URL: <http://edu.mccme.ru/Project/OL/chelifel.htm> (10.10.2010).
10. Хейс Дж. Всемирная служба погоды сегодня, Бюллетень ВМО, 57(1), стр. 8–16, 2008.
11. Моура А.Д. Вклад ВМО в GEOCC и GEOНетКаст, Бюллетень ВМО, 55(4), 2006.
12. Система мониторинга окружающей среды в Донецкой области - Метеопоказатели - Графики // El. resource. URL: http://www.omos.org.ua/graph_meteo.php (10.10.2010).
13. NCDC: Online Climate Data Directory // El. resource. URL: <http://lwf.ncdc.noaa.gov/oa/climate/climatedata.html> (10.10.2010).
14. Cofiño A.S. et al. Implementation of data mining techniques for meteorological applications, Realizing Teracomputing. W. Zwielfhofer and N. Kreitz, eds., World Scientific, pp. 215–240, 2005.
15. Geo-Data: The World Geographical Encyclopedia / John F. McCoy, project editor. -- 3rd ed., ISBN 0-7876-5581-3, 717 pp., 2003.
16. АРМ «Метеоролога». АО «Специальные системы связи» // El. resource. URL: http://www.ssc.com.ua/index.php?option=com_content&task=view&id=22&Itemid=15 (10.10.2010).
17. Создание национальной сети передачи гидрометеорологических данных (АСПД). АО «Специальные системы связи» // El. resource. URL: http://www.ssc.com.ua/index.php?option=com_content&task=view&id=38&Itemid=46 (10.10.2010).
18. Программно аппаратный комплекс метеорологической телесвязи «Бриз», АО «Специальные системы связи» // El. resource. URL: http://www.ssc.com.ua/index.php?option=com_content&task=view&id=17&Itemid=17 (10.10.2010).
19. Бюро Экономического Анализа :: Общее объявление о творах // El. resource. URL: http://www.beafnd.org/ru/projects/project_rosgidromet/notice_haggle/NHMP_GPN_2006/ (10.10.2010).
20. ЛАНИТ модернизирует метеорологическую сеть Росгидромета // El. resource. URL: <http://job.lanit.ru/article/225> (10.10.2010).
21. Бахурел П. и Соавторы, Усвоение данных об океане в прогностической системе Меркатор Океан, Бюллетень ВМО, стр. 144–151, 2007.
22. Калинин Н.А., Толмачева Н.И. Космические методы исследований в метеорологии, учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по специальности «Метеорология», ГОУВПО «Пермский государственный университет», 2005.
23. GIS-Lab: NDVI – [теория] и практика // El. resource. URL: <http://gis-lab.info/qa/ndvi.html> (10.10.2010).
24. Measuring Vegetation (NDVI & EVI): Feature Articles // El. resource. URL: http://earthobservatory.nasa.gov/Features/MeasuringVegetation/measuring_vegetation_2.php (10.10.2010).
25. Primary Production, Photosynthetically Active Radiation (PAR) and Light Use Efficiency (LUE) // El. resource. URL: http://www.ccpo.odu.edu/SEES/veget/class/Chap_4/4_6.htm (10.10.2010).
26. Биологическая продуктивность // El. resource. URL: <http://forest.geoman.ru/forest/item/f00/s00/e0000219/index.shtml> (10.10.2010).
27. Evapotranspiration // El. resource. URL: <http://en.wikipedia.org/wiki/Evapotranspiration> (10.10.2010).
28. Хабиб Ш. и Соавторы. Наблюдения за Землей из космоса на благо общества, Бюллетень ВМО, 57(1), стр. 22–28, 2008.
29. USDA Crop Explorer: Global Crop Condition and Commodity Production Analysis from the USDA/Production Estimates and Crop Assessment Division (PECAD) // El. resource. URL: <http://gcmd.gsfc.nasa.gov/KeywordSearch/Metadata.do?Portal=GCMD&KeywordPath=Parameters%7CCCLIMATE+INDICATORS%7CRefineBy+Locations%7CCONTINENT%7CEUROPE%7CEASTERN+EUROPE%7CUKRAINE&OrigMetadataNode=GCMD&EntryId=USDA0557&MetadataView=Full&MetadataType=0&lnode=mdlb1> (10.10.2010).
30. Kalnay E. et al. The NCEP/NCAR 40-Year Reanalysis Project, Bull. Amer. Meteor. Soc., 77, 437–472, 1996.
31. CISL RDA: ds090.0 Home Page // El. resource. URL: <http://dss.ucar.edu/datasets/ds090.0/> (10.10.2010).
32. Kalnay E. Atmospheric modeling, data assimilation and predictability, Cambridge University Press, ISBN-13 978-0-511-07784-5, 369 pp., 2003.
33. Kanamitsu M. et al. NCEP–DOE AMIP-II Reanalysis (R2), Bull. Amer. Meteor. Soc., 1631–1643, 2002.
34. Huug van den Dool. Empirical Methods In Short-Term Climate Prediction, Oxford University Press, ISBN 0-19-920278-8, 215 pp., 2007.
35. O’Lenic E. A. et al. Developments in operational long-range climate prediction at CPC, Weather and Forecasting, 23, 496–515.
36. Погода, климат и воздух, которым мы дышим, Бюллетень ВМО, Том 58(1), Январь 2009.
37. Корпе С. et. al. Периоды сильной жары: угрозы и ответные меры, Серия «Здоровье и глобальное изменение окружающей среды», № 2, ВОЗ, 2005.

38. Нешиба С. Океанология. Современные представления о жидкой оболочке Земли: пер. с англ. – М.: Мир, 1991. – 414 с., ил.
39. van Oldenborgh G. J. et al. Did the ECMWF seasonal forecast model outperform statistical ENSO forecast models over that last 15 years?, 2005.
40. Conlan R. and Service R., El Nino and La Nina: Tracing the Dance of Ocean and Atmosphere // El. resource. URL: www.nationalacademies.org/opus/elnino (10.10.2010).
41. NASA World Wind Java Demo Applications and Applets // El. resource. URL: <http://worldwind.arc.nasa.gov/java/demos/> (10.10.2010).
42. Сэр Гильберт Т. Волкер. Climate Variability and El Nino, 1924.
43. Oliver J. E. (editor). Encyclopedia of World Climatology, Springer, ISBN-10 1-4020-3266-8 (e-book), 874 pp., 2005.
44. Monthly Southern Oscillation Index // El. resource. URL: <ftp://ftp.bom.gov.au/anon/home/ncc/www/sco/soi/soiplaintext.html> (10.10.2010).
45. Steinbach M. et al. Discovery of Climate Indices using Clustering, KDD 2003, 2003.
46. Steinbach M. et al. Data Mining for the Discovery of Ocean Climate Indices, The Fifth Workshop on Scientific Data Mining (2nd SIAM International Conference on Data Mining), 2002.
47. Tan P. N., Steinbach M., Kumar V. Introduction to Data Mining, Addison-Wesley, ISBN 0-321-32136-7, 2005.
48. Ertoz L. et al. Finding Clusters of Different Sizes, Shapes, and Densities in Noisy, High Dimensional Data, SIAM International Conference on Data Mining (SDM '03), 2003.
49. Ertoz L. et al. A New Shared Nearest Neighbor Clustering Algorithm and its Applications, Workshop on Clustering High Dimensional Data and its Applications at 2nd SIAM International Conference on Data Mining, 2002.
50. Ertoz L. et al. Finding Topics in Collections of Documents: A Shared Nearest Neighbor Approach, Clustering and Information Retrieval, Kluwer Academic Publishers, 2003.
51. Steinbach M. et al. The Application of Clustering to Earth Science Data: Progress and Challenges, 2005.
52. Shekhar S., Chawla S. Spatial Databases: A Tour, Prentice Hall, ISBN 013-017480-7, 2003.
53. Барсегян А.А., Куприянов М.С. Степаненко В.В., Холлод И.И., Методы и модели анализа данных: OLAP и Data Mining. – СПб.: БХВ-Петербург, 2004. – 336 с.: ил.
54. Agrawal R., Imielinsky T., Swami A. Mining Association Rules Between Sets of Items in Large Databases, In Proc. ACM SIGMOD Intl. Conf. Management of Data, 207–216, Washington, DC, 1993.
55. Tan P. et al. Finding Spatio-Temporal Patterns in Earth Science Data, KDD Workshop on Temporal Data Mining, 2001.
56. Agrawal R., Srikant R. Fast Algorithms for Mining Association Rules, IBM Almaden Research Center, 1994.
57. EOSDIS - Wikipedia, the free encyclopedia // El. resource. URL: <http://en.wikipedia.org/wiki/EOSDIS> (10.10.2010).
58. Семёнова И.Г. Циркуляционные условия атмосферы в периоды катастрофических летних паводков на Дунае, Вестник Одесского государственного экологического университета, вып. 6, стр. 103–109, 2008.
59. Ефимов В.А., Ивус Г.П. Хаджи-Страти Е.Д., Кумулятивные процессы и атмосферная телеконнекция на территории Украины, Научные работы УкрНГТМИ, вып. 256, стр. 155–165, 2007.
60. Федоров О.П. Исследование Земли из космоса: опыт Украины и ближайшие планы, 2007 // El. resource. URL: http://d33.infospace.ru/d33_conf/2007_pdf/plenar/fedorov.pdf (10.10.2010).
61. Boriah S., Kumar V., Steinbach M., Potter C., Klooster S. Land Cover Change Detection: A Case Study, Proceedings of the 14th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, 2008.
62. Подробности.UA Украинский спутник "Сич 2" выведут на орбиту в октябре // El. resource. URL: <http://podrobnosti.ua/technologies/2010/04/13/678730.html> (10.10.2010).

Методы системной динамики при анализе социально-экономического развития стран и регионов

Аверин Г.В., Звягинцева А.В., Аверин Е.Г.

Донецкий национальный технический университет,
averin@cs.dgtu.donetsk.ua, Zviagintseva@cs.dgtu.donetsk.ua

Abstract

Averin G., Zviagintseva A., Averin E. "Methods of system dynamics at the analysis of social and economic development of countries and regions" The characteristic of methods of the analysis of social and economic development of the countries and regions is given. The objective social and economic development estimation method based on countries' human potential status equations is offered. The generalized criteria for a comprehensive estimation of complex systems state are formulated.

Введение

Научные методы стратегического прогнозирования и планирования крайне разнообразны, однако, в настоящее время не существует фундаментальной теории, которая характеризовала бы социально-экономическое и экологическое развитие стран и регионов. Сегодня каждый город и административный район страны во исполнении закона Украины «О государственном прогнозировании и разработке программ экономического и социального развития Украины», регулярно разрабатывает годовые и перспективные программы социально-экономического развития. Однако основной принцип создания таких программ – планирование от достигнутого в рамках имеющихся средств. При этом количество требующих анализа социально-экономических, демографических, экологических и др. показателей может достигать несколько сотен. Несмотря на важность данного вопроса, в этой области практически отсутствуют методы и средства поддержки принятия решений. В научном и практическом плане сейчас основным инструментом планирования являются процедуры стратегической оценки – учет комплекса требований при принятии стратегических решений о социально-экономическом и экологическом развитии. Однако, на современном уровне становления научной теории вопрос о том, при каких условиях сложная система может удовлетворять выставленному комплексу требований, остается открытым.

Принятый в первом чтении Закон Украины «О государственном прогнозировании и стратегическом планировании в Украине» предполагает повсеместное использование системного подхода при государственном прогнозировании и разработке программ

экономического и социального развития страны. Принцип системности предусматривает реализацию требований общей теории систем, когда социально-экономическая система государства рассматривается как большая сложная система, которая, в свою очередь, является частью более общей сложной системы – международной глобальной организации человеческого общества [1]. Принцип научной обоснованности декларирует, что в основу прогнозирования и планирования должен быть положен учет законов развития (экономического, социального, демографического, экологического и т.п.) как объекта планирования, так и практики планирования (принимаемых решений). Таким образом, проект закона рассматривает объект планирования как управляемую систему, где принимаемые решения могут приводить к различным сценариям развития этой системы [1].

Декларировать в документах подобные положения легче, чем осуществить это на практике. В настоящее время в науке об экономике и обществе не используется объективный подход, так как законы развития экономических и общественных сложных систем не установлены. Кроме того, сегодня отсутствуют единые базы данных социально-экономических, финансовых, демографических, экологических и др. показателей объектов планирования (областей, территорий, страны в целом), доступные широкой научной общественности и дающие возможность поиска подобных законов. Именно поэтому в стратегической оценке применяются преимущественно экспертные методы. Хотя экспертные методы в своей реализации представляются достаточно простыми, их недостатком является выраженный субъективный подход эксперта при прогнозировании и планировании, а также

фактор “утопизма” – подспудное желание выдать ожидаемое за действительное.

В настоящее время основной прогресс в совершенствовании теории прогнозирования развития стран и регионов связан с использованием индикаторов и индексов. Эти величины считаются обобщенными показателями, которые характеризуют состояние и динамику социально-экономических и экологических систем. Изучение различных индикаторов позволяет оценить уровень социальных, экологических и техногенных воздействий и проанализировать их последствия. При этом вопрос об информативности индикаторов и индексов при описании процессов развития, а также их связей между собой и с поведением системы в целом остается пока открытым.

В данной теории отсутствуют базовые методические предпосылки, связанные с использованием тех или иных законов сохранения или специальных форм уравнений состояний, которые отличались бы системным единообразием, а также обоснованным перечнем исходных независимых показателей для оценки.

Таким образом, развитие системы государственного прогнозирования и планирования должно осуществляться путем совершенствования методологии стратегической оценки [2, 3] и особенно, используемых в ней системных методов анализа.

Совершенствование методологии анализа социально-экономического и экологического развития

Анализ процессов развития и стратегическое прогнозирование сегодня осуществляются практически во всех странах мира как упреждающий инструмент социальной и экологической политики. При этом практическим инструментом анализа в процедурах стратегической оценки выступают методы прогностики [4], которые отличаются крайне широким разнообразием экспертных подходов, а также существующие методы комплексной оценки.

В системной динамике оценка социально-экономического и экологического развития представляет собой не что иное, как задачу распознавания образов по комплексу показателей среди значительного числа объектов одного класса. При этом существующая методология сравнительного анализа предполагает выбор опорного состояния определенного объекта и ранжирование состояний всех других объектов относительно него. Соответствующие методы позволяют преобразовать матрицы данных к интегральным

индексам или набору комплексных показателей, по которым и может проводиться оценка. Существует множество алгоритмов для распознавания образов, относящихся к явлениям различной природы.

Создание информационных баз данных социально-экономических и экологических показателей стран и регионов дает возможность применить современные методы поиска закономерностей в массивах информации (Data mining – интеллектуальный анализ данных). Методы анализа данных (кластеризация, процедуры поиска телеконнекций, ассоциативный анализ, регрессионные деревья, метод аналогий и т.д.) широко применяются в фундаментальной физике, климатологии, биоинформатике, компьютерных сетях и Интернет, медицине, вычислительном эксперименте в физике и технике, анализе социальной преступности и т.д.

Данный путь позволяет также вести разработки информационных систем, отличающихся расширенными прогнозными и поисковыми возможностями для стратегического планирования. Разработка подобных систем в политическом плане имеет большое значение, так как они в будущем могут стать инструментом поддержки принятия управленческих решений, осуществляемых властью на местном, государственном и глобальном уровне.

Для теоретического обоснования методов анализа социально-экономического и экологического состояния объектов воспользуемся системным подходом [5] и методологией системодинамики, которая обосновывается в статьях данного сборника.

Подобные подходы имеют важное значение в интеллектуальном анализе данных, так как позволяют формулировать объективные методы анализа поведения систем n -мерной размерности.

Базовые идеи [5] для физических систем основаны на том, что термодинамическая форма уравнения сохранения энергии отличается полным единообразием структуры всех входящих в его состав слагаемых, которые относятся к явлениям различной физической природы. Впервые эта идея была предложена Гухманом.

Данный подход имеет значение и для стратегической оценки, если предположить существование некоторой универсальной функции состояния экосистемы (определим экосистему как экологическую, экономическую или социальную систему), которая, конечно же, не будет являться энергией в обычном физическом понимании. Таким образом, в основу теории предполагается положить методические предпосылки, связанные с

применением специальных форм уравнений сохранения количества воздействий, которые отличались бы системным единообразием.

Обычно под воздействием понимают любое действие на объект, которое влияет на него и приводит к наблюдаемым изменениям. В свою очередь, количество воздействия определяется как количественный параметр, позволяющий оценить уровень действия внешних сил на объект. При этом наблюдаемые изменения в экосистеме – это качественная или количественная переменная свойств экосистемы в результате осуществляемых на нее воздействий.

В системном анализе и общей теории систем количество воздействия, которое оказывает влияние на объект или систему при изменении z_k -ого свойства, определяется в виде [5]:

$$dQ_k = P_k \cdot dz_k, \quad (1)$$

где P_k – потенциалы; z_k – координаты.

Координаты – это независимые переменные, определяющие свойства, изменение которых является наиболее характерным проявлением реакции системы на воздействие. Потенциалы характеризуют взаимодействие системы с окружающей средой.

Основное дифференциальное уравнение для определения функции состояния системы u в качестве фундаментального закона (например, в физике – это первое начало термодинамики) через потенциалы и координаты представляют в следующем виде:

$$du = \sum_{k=1}^n P_k \cdot dz_k, \quad (2)$$

где n – число степеней свободы системы, которое определяется количеством свойств, подверженных изменению.

Таким образом, предположим, что существует универсальная функция состояния экосистемы (u), которая однозначно связана с координатами состояния. Будем считать, что в любом состоянии экосистемы данная функция может иметь только одно определенное значение. Ранее эта функция была названа общей мерой состояния системы. Будем считать эту величину безразмерной. Иными словами, общая мера системы вполне определяется заданием ее состояния. Для этого необходимо определить значения всех координат состояния системы. Таким образом, общая мера является однозначной функцией координат состояния вида (3):

$$u = u(z_1, z_2, \dots, z_n). \quad (3)$$

Сформулируем следующую гипотезу. Будем считать, что мера u является функцией состояния, для которой изменение величины в каком-либо процессе не зависит от характера процесса и определяется только начальным и конечным состоянием системы, т.е. величина

du является полным дифференциалом. На основе изложенного элементарные изменения функции состояния du экосистемы непосредственно могут быть поставлены в связь с соответствующими количествами воздействия dQ_k . Другими словами имеем зависимость вида:

$$du = \sum_{k=1}^n dQ_k = \sum_{k=1}^n P_k \cdot dz_k = \sum_{k=1}^n \frac{\partial u}{\partial z_k} \cdot dz_k. \quad (4)$$

Теперь итог изложенного можно коротко сформулировать следующим образом: любое взаимодействие системы с окружающей средой имеет своим необходимым следствием изменение общей меры системы на величину, равную количеству воздействия. При этом понятие количество воздействия может быть поставлено в связь только с процессом изменения состояния системы.

Таким образом, целью моделирования системы любой природы является построение закономерности вида (4), которая представляет собой некоторый закон сохранения или точнее зависимость для общей меры системы. Причем построение такой зависимости предполагает, что на всем возможном множестве состояний системы выполнено некоторое преобразование координат, при котором определяются подмножества состояний, обладающие качественно однородными признаками.

Далее используем первый постулат системодинамики. Так как социально-экономические и экологические системы в своем подавляющем большинстве являются квазистатическими системами, то будем считать, что их свойства *подобны* при любых эволюционных изменениях состояний во времени относительно выбранного опорного состояния. Кроме этого предположим, что существует абсолютный индекс системы T , который в общем случае может быть представлен в виде функции независимых переменных z_k . Данный индекс комплексно характеризует качественное состояние системы и является функцией процесса. Будем считать, что он может быть теоретически определен и в последующем количественно измерен или оценен в балах или пунктах при длительном наблюдении за поведением системы или путем сравнения значительного количества объектов между собой. В этом случае величина $T = T(z_1, z_2, \dots, z_n)$ определяет уравнение состояния системы в координатах z_1, \dots, z_n , в отличие от уравнения (4), которое дает базовый закон для меры системы. Исходя из этих допущений и первого постулата системодинамики, абсолютный индекс системы $T = T(z_1, z_2, \dots, z_n)$ в многомерном пространстве переменных z_k будет иметь вид однородной

функции степени q , удовлетворяющей формуле Эйлера:

$$T = \frac{1}{q} \left(z_1 \frac{\partial T}{\partial z_1} + z_2 \frac{\partial T}{\partial z_2} + \dots + z_n \frac{\partial T}{\partial z_n} \right). \quad (5)$$

В идеальном случае данное уравнение определяет связь между оценкой качества и наблюдаемыми свойствами для любого состояния системы, которое может быть реализовано и свойства которого могут быть параметризованы.

Для случая двух переменных данное линейное уравнение в частных производных первого порядка будет иметь вид:

$$z_1 \frac{\partial T}{\partial z_1} + z_2 \frac{\partial T}{\partial z_2} = q \cdot T. \quad (6)$$

Решение $T = T(z_1, z_2)$ уравнения (6) при заданных граничных условиях геометрически представляет собой поверхность в пространстве z_1, z_2, T . Эта поверхность является интегральной поверхностью. Функции $z_1, z_2, q \cdot T$ определяют некоторое поле направлений в указанном пространстве, а именно: в каждой фиксированной точке пространства имеется направление, направляющие косинусы которого пропорциональны $z_1, z_2, q \cdot T$. Согласно метода характеристик [6] интегральные кривые, соответствующие этому полю направлений, определяются системой обыкновенных дифференциальных уравнений вида:

$$\frac{dz_1}{z_1} = \frac{dz_2}{z_2} = \frac{dT}{q \cdot T} = ds. \quad (7)$$

Эти интегральные кривые называются характеристиками уравнения (6). Введем параметр s , изменяющийся вдоль характеристики. В результате система дифференциальных уравнений (7) примет вид:

$$\frac{dz_1}{ds} = z_1, \quad \frac{dz_2}{ds} = z_2, \quad \frac{dT}{ds} = q \cdot T. \quad (8)$$

Решением системы уравнений (7) являются следующие независимые интегралы:

$$\frac{z_1}{z_2} = C_1, \quad \frac{T}{z_2^q} = C_2, \quad \text{откуда} \quad (9)$$

$$T = \frac{C_2}{C_1} z_2^{q-1} \cdot z_1. \quad (10)$$

Для определения вида уравнения состояния системы введем ограничивающие условия. Так как z_1 и z_2 являются произвольными независимыми переменными, то из условия симметрии решения имеем:

$$z_2^{q-1} z_1 = z_1^{q-1} z_2. \quad (11)$$

Выполнение условия (11) возможно при $q = 2$. Таким образом, решение уравнения (6) можно представить в виде:

$$T = \frac{z_1 \cdot z_2}{R}, \quad (12)$$

где R – константа, которая определяется по опытным данным в процессе построения шкалы абсолютного индекса системы T .

Можно показать, что решение (12) характеризует линейное изменение свойств системы во времени в окрестности опорного состояния, когда $z_1 = z_{10}$; $z_2 = z_{20}$. Параметрическое решение системы уравнений (8), выраженное через начальные значения переменных z_1, z_2, T будет [6]:

$$T = T_\tau \cdot e^s; \quad z_1 = z_{1\tau} \cdot e^{s/2}; \quad z_2 = z_{2\tau} \cdot e^{s/2}. \quad (13)$$

Предположим, что процесс изменения свойств в окрестности опорного состояния $\{z_{10}, z_{20}, T_0\}$ определяется как:

$$z_{1\tau} = z_{10}(1 + \beta_1 \cdot \tau); \quad z_{2\tau} = z_{20}(1 + \beta_2 \cdot \tau), \quad (14)$$

тогда количественная оценка качественного состояния системы будет иметь

$$\text{вид: } T_\tau = \frac{z_{1\tau} \cdot z_{2\tau}}{R}.$$

Подставим (14) в (13) и найдем определитель

$$\Delta = z_{1\tau}' \cdot z_{2s}' - z_{1s}' \cdot z_{2\tau}' = \frac{\beta_1 - \beta_2}{2} \cdot e^s \cdot z_{10} \cdot z_{20} \neq 0,$$

который не обращается в нуль при $s = 0$. Исключая s и τ , получим интегральное уравнение (12) в явном виде, где $R = z_{10} \cdot z_{20}$ [6].

Используем сформулированную ранее гипотезу существования общей меры системы (u) в виде уравнения (4). В этом случае величина du должна являться полным дифференциалом, и к ней может быть применен принцип Эйлера [7], позволяющий определить справедливость того, является ли форма (6) полным дифференциалом, или нет. Для двух независимых переменных необходимое и достаточное условие, при котором форма (1) $du = P_1 dz_1 + P_2 dz_2$ является полным дифференциалом, имеет вид:

$$\left(\frac{\partial P_1}{\partial z_2} \right)_{z_1} = \left(\frac{\partial P_2}{\partial z_1} \right)_{z_2}. \quad (15)$$

При выполнении условия (15) мера системы u будет являться функцией состояния, значение которой не зависит от вида процесса при переходе системы из состояния A в состояние B .

По аналогии с термодинамикой введем величину α , которая будет связывать количество воздействия Q , полученное экосистемой с изменением абсолютного индекса T в любом процессе l :

$$\alpha_l = \frac{dQ}{dT}. \quad (16)$$

Данная гипотеза предполагает, что в окрестности каждого состояния элементарное

изменение индекса экосистемы dT линейно относительно общего элементарного воздействия, действующего на экосистему dQ .

Также как и в термодинамике предположим, что величина α_l может определяться экспериментально и зависит от направления процесса l (процесс AB) в окрестности состояния A . Будем считать α_l безразмерной величиной. Тогда в окрестности состояния A имеем:

$$\frac{\partial Q}{\partial z_1} = \alpha_1 \frac{\partial T}{\partial z_1}; \quad \frac{\partial Q}{\partial z_2} = \alpha_2 \frac{\partial T}{\partial z_2}. \quad (17)$$

В соответствии с (17) уравнение (6) для воздействия Q относительно свойств z_1 и z_2 можно представить в виде:

$$\frac{z_1}{\alpha_1} \cdot \frac{\partial Q}{\partial z_1} + \frac{z_2}{\alpha_2} \cdot \frac{\partial Q}{\partial z_2} = q \cdot T. \quad (18)$$

В идеальном случае данное уравнение определяет связь между оценкой качества системы, её свойствами и возможным воздействием в окрестности любого состояния системы при осуществлении процессов, которые могут быть реализуемы.

Характеристики уравнения (18) определяются системой обыкновенных дифференциальных уравнений вида:

$$q \cdot \alpha_1 \frac{dz_1}{z_1} = q \cdot \alpha_2 \frac{dz_2}{z_2} = \frac{dQ}{T} = ds. \quad (19)$$

По аналогии с термодинамикой введем переменную $ds = \frac{dQ}{T}$. Определим величину s как безразмерную энтропию экосистемы. Как следует из (19), энтропия системы может быть представлена в виде характеристики уравнения (18). При этом получаем следующие закономерности.

Во-первых, элементарное количество воздействия dQ через энтропию экосистемы может быть представлено в виде $dQ = T \cdot ds$. Во-вторых, из (19) при $q=2$ получаем соотношение для определения энтропии системы относительно переменных z_1 и z_2 .

$$ds = \frac{dQ}{T} = \alpha_1 \frac{dz_1}{z_1} + \alpha_2 \frac{dz_2}{z_2}. \quad (20)$$

Применяя к уравнению (20) признак Эйлера (15), можно показать, что ds является полным дифференциалом.

Уравнение (20) подобно уравнению энтропии, которое применяется в термодинамике, однако величина s в данном случае является безразмерной. Используя уравнение (12) и уравнение (20), построим общую меру системы u в виде:

$$\begin{aligned} du &= dQ - z_2 \cdot dz_1 = T \cdot ds - z_2 \cdot dz_1 = \\ &= \frac{\alpha_1 - R}{R} z_2 \cdot dz_1 + \frac{\alpha_2}{R} z_1 \cdot dz_2. \end{aligned} \quad (21)$$

Применяя к величине du признак Эйлера (13), можно показать, что du является полным дифференциалом при условии:

$$\alpha_1 - \alpha_2 = R. \quad (22)$$

Последнее соотношение представляет собой аналог известного в термодинамике уравнения Майера. При справедливости уравнения (22) величина du будет иметь вид:

$$du = \frac{\alpha_2}{R} d(z_1 \cdot z_2) = \alpha_2 \cdot dT. \quad (23)$$

Таким образом, на основе уравнений (6), (12), (20), (23) может быть построена идеальная модель оценки состояния экосистемы в случае двух независимых переменных. При этом из экспериментальных данных должны определяться постоянная R , характеризующая изменение свойств экосистемы относительно выбранного опорного состояния, и постоянная α_2 , связывающая количество воздействия с абсолютным индексом системы T при $z_1 = const$. В элементарной окрестности опорного состояния данная модель является абсолютно точной, при удалении от опорного состояния погрешность модели будет возрастать.

Построим общую меру состояния системы для случая трех переменных, для чего рассмотрим уравнение (5) вида:

$$z_1 \cdot \frac{\partial T}{\partial z_1} + z_2 \cdot \frac{\partial T}{\partial z_2} + z_3 \cdot \frac{\partial T}{\partial z_3} = q \cdot T. \quad (24)$$

Решим систему характеристических уравнений:

$$\frac{dz_1}{z_1} = \frac{dz_2}{z_2} = \frac{dz_3}{z_3} = \frac{dT}{q \cdot T} = ds. \quad (25)$$

Данная система уравнений имеет следующие независимые интегралы:

$$\begin{aligned} \frac{z_1}{z_3} &= C_1, \quad \frac{z_2}{z_3} = C_2, \quad \frac{T}{z_3^q} = C_3, \text{ откуда} \\ T &= \frac{C_3}{C_1 \cdot C_2} \cdot z_3^{q-2} \cdot z_1 \cdot z_2. \end{aligned} \quad (26)$$

$$\text{Из условия симметрии решения} \\ z_3^{q-2} \cdot z_1 \cdot z_2 = z_1^{q-2} \cdot z_2 \cdot z_3 = z_2^{q-2} \cdot z_1 \cdot z_3$$

получим, что $q=3$.

Таким образом, решение уравнения (24) можем представить в виде мультипликативной функции:

$$T = \frac{z_1 \cdot z_2 \cdot z_3}{R}. \quad (27)$$

Теперь построим модель оценки состояния системы при воздействии в случае трех переменных. В окрестности состояния A имеем:

$$\frac{\partial Q}{\partial z_1} = \alpha_1 \frac{\partial Q}{\partial z_1}; \quad \frac{\partial Q}{\partial z_2} = \alpha_2 \frac{\partial Q}{\partial z_2}; \quad \frac{\partial Q}{\partial z_3} = \alpha_3 \frac{\partial Q}{\partial z_3}.$$

Из (24) получаем следующее уравнение:

$$\frac{z_1}{\alpha_1} \frac{\partial Q}{\partial z_1} + \frac{z_2}{\alpha_2} \frac{\partial Q}{\partial z_2} + \frac{z_3}{\alpha_3} \frac{\partial Q}{\partial z_3} = q \cdot T, \quad (28)$$

для которого характеристические уравнения имеют вид:

$$q \cdot \alpha_1 \frac{dz_1}{z_1} = q \cdot \alpha_2 \frac{dz_2}{z_2} = q \cdot \alpha_3 \frac{dz_3}{z_3} = \frac{dQ}{T} = ds.$$

Из этой системы при $q=3$ получаем соотношение для энтропии экосистемы в случае трех переменных z_1, z_2, z_3 :

$$ds = \frac{dQ}{T} = \alpha_1 \frac{dz_1}{z_1} + \alpha_2 \frac{dz_2}{z_2} + \alpha_3 \frac{dz_3}{z_3}. \quad (29)$$

Для построения общей меры системы u , используем уравнения (27) и (29), для чего определим элементарное количество воздействия dQ :

$$dQ = T \cdot ds = \alpha_1 \frac{z_2 z_3}{R} dz_1 + \alpha_2 \frac{z_1 z_3}{R} dz_2 + \alpha_3 \frac{z_1 z_2}{R} dz_3. \quad (30)$$

Форма (30) не является полным дифференциалом, так как $\alpha_1 \neq \alpha_2 \neq \alpha_3$. Преобразуем зависимость (30) таким образом, чтобы получить как слагаемое полный дифференциал du_1 вида (21). Для этого добавим и вычтем в правой части уравнения (30) величину $z_2 z_3 dz_1$. После преобразования получим:

$$dQ = \alpha_2 z_3 d\left(\frac{z_1 z_2}{R}\right) + \frac{\alpha_3}{R} z_1 z_2 dz_3 + z_2 z_3 dz_1 \quad (31)$$

На следующем шаге выделим полный дифференциал du , добавив и исключив в (31) величину $z_3 d(z_1 z_2)$, тогда

$$dQ = \left(\frac{\alpha_2}{R} - 1\right) z_3 d(z_1 z_2) + \frac{\alpha_3}{R} z_1 z_2 dz_3 + z_3 d(z_1 z_2) + z_2 z_3 dz_1. \quad (32)$$

Выделим в (32) дифференциал du вида:

$$du = \left(\frac{\alpha_2}{R} - 1\right) z_3 d(z_1 z_2) + \frac{\alpha_3}{R} z_1 z_2 dz_3. \quad (33)$$

К пфаффово́й форме du может быть применен принцип Эйлера [7], позволяющий определить справедливость того, является ли форма (33) полным дифференциалом или нет. Для трех независимых переменных необходимое и достаточное условие, что форма $du = P_1 dz_1 + P_2 dz_2 + P_3 dz_3$ является полным дифференциалом, имеет вид:

$$\left(\frac{\partial P_1}{\partial z_2}\right)_{z_1, z_3} = \left(\frac{\partial P_2}{\partial z_1}\right)_{z_2, z_3}; \quad \left(\frac{\partial P_2}{\partial z_3}\right)_{z_1, z_2} = \left(\frac{\partial P_3}{\partial z_2}\right)_{z_1, z_3};$$

$$\left(\frac{\partial P_1}{\partial z_3}\right)_{z_1, z_2} = \left(\frac{\partial P_3}{\partial z_1}\right)_{z_2, z_3}. \quad (34)$$

Применяя к (33) признак Эйлера, можно показать, что du будет полным дифференциалом при условии $\alpha_2 - \alpha_3 = R$, в этом случае

$$du = \frac{\alpha_3}{R} d(z_1 z_2 z_3) = \alpha_3 dT.$$

Окончательно (30) представим в виде:

$$dQ = du + 2z_2 z_3 dz_1 + z_3 z_1 dz_2. \quad (35)$$

Таким образом, в случае трех независимых переменных справедливо представление общей меры состояния системы u в виде уравнения единообразной структуры типа (4):

$$du = \left(\frac{\alpha_1 z_2 z_3}{R} - 2z_2 z_3\right) dz_1 + \left(\frac{\alpha_2 z_1 z_3}{R} - z_1 z_3\right) dz_2 + \alpha_3 \frac{z_1 z_2}{R} dz_3. \quad (36)$$

При этом согласно признаку Эйлера (34), величина du является полным дифференциалом при выполнении ранее полученных условий:

$$\begin{cases} \alpha_1 - \alpha_2 = R \\ \alpha_2 - \alpha_3 = R. \end{cases} \quad (37)$$

Потенциалы взаимодействий в случае системы с тремя переменными согласно (36) равны:

$$\begin{aligned} P_1(z_1, z_2, z_3) &= \frac{\alpha_1 z_2 z_3}{R} - 2z_2 z_3, \\ P_2(z_1, z_2, z_3) &= \frac{\alpha_2 z_1 z_3}{R} - z_1 z_3, \\ P_3(z_1, z_2, z_3) &= \frac{\alpha_3 z_1 z_2}{R}. \end{aligned} \quad (38)$$

Таким образом, и для случая трех переменных может быть построена модель состояния экосистемы, которая в элементарной окрестности опорного состояния $A\{z_{10}, z_{20}, z_{30}\}$ будет строгой.

Количественная оценка состояния социально-экономических и экологических систем проводится на основе использования целого ряда индикаторов и показателей [8–13]. Например, при определении индекса развития человеческого потенциала (ИРЧП) индикатор образования определяется по двум показателям, а индикаторы продолжительности жизни и ВВП соответственно – по одному [14, 15]. В целом ИРЧП в окончательном виде находится по трем сводным индикаторам. Аналогичную структуру определения имеет и индекс нищеты населения (ИНН-1). В свою очередь, индекс развития с учетом гендерного фактора (ИРГФ) имеет структуру определения, при которой три составляющих определяются по двум индикаторам и затем они сводятся в один общий индекс из трех компонентов [14, 15]. Всего в

докладах о развитии человека используется более 120 индикаторов, объединенных в 15 групп.

Аналогично, при экологической оценке индикаторы формируются в следующих областях: социально-экономическое развитие, здоровье населения, качество атмосферного воздуха и поверхностных вод, изменение климата, воздействие отраслей экономики на окружающую природную среду. В разных методиках используются от десяти до ста различных показателей, позволяющих оценить развитие стран или регионов. Например, при оценке экологического развития стран могут использоваться около 70 индикаторов, объединенных в 14 групп, которые комплексно характеризуют социально-экономическую и экологическую ситуацию в странах Европы, а также безопасность жизнедеятельности [16]. Украинская методика социально-экономической оценки развития регионов [17] использует статистические данные приблизительно по ста индикаторам, которые объединены в девять групп. Российская методика оценки социально-экономического развития субъектов федерации применяет 295 индикаторов, которые сведены в 9 разделов.

В свою очередь, российская методика оценки экологического состояния территории [18] использует 45 индикаторов для оценки изменения среды обитания, состояния здоровья населения, оценки нарушения природной среды, деградации наземных экосистем, биогеохимической оценки территории и т.д.

Базовый перечень показателей для экологической оценки разработан ЕЭК ООН и применяется на практике при оценке развития стран ЕС. Базовый перечень социально-экономических показателей для оценки общего развития стран мира разработан Всемирным банком [11].

В настоящее время метод индикаторов и индексов применяют не только при экологической оценке и устойчивом развитии, но и при измерении уровня глобализации стран. Наиболее известны две системы количественного и качественного измерения глобализации [19, 20], которые позволяют ежегодно рассчитывать индекс глобализации. По первой системе (система КОФ), этот индекс рассчитывается для 123 стран мира, а по второй системе (СЕИР) – для 62. Методология расчета индекса глобализации такая же, как и при оценке ИРЧП, хотя имеет свои особенности.

В мировой экономике и оценке развития стран сегодня также широко применяют индекс конкурентоспособности развития (<http://www.weforum.org>), состоящий из 47 наборов данных, индекс экономической свободы, включающий 50 наборов данных (<http://www.heritage.org>), индекс экологического

измерения (<http://www.yale.edu/esi>), обобщающий 76 наборов данных, индекс качества и безопасности жизни (6 индикаторов, <http://www.eu.wikipedia.org>) и т.д. В экономике используют фондовые индексы, различные индексы ценообразования и т.д. Широкое применение метод индексов получил в климатологии, оценке растительности и биомассы Земли, анализе состояния атмосферы, океана, почв и т.д. В этих областях определение индексов, характеризующих качественное состояние системы, основывают на методах дистанционного зондирования Земли. Например, индекс растительности (NDVI), который оценивается по данным дистанционного определения степени поглощения и отражения видимого красного (RED) и инфракрасного (NIR) излучения разными видами растительности. Таким образом, метод индикаторов и индексов широко применяется в экологической и стратегической оценке и науках о Земле.

Если применить принцип суперпозиции, то при определении индекса с любым количеством индикаторов, можно построить схему на основе использования решений уравнения (5) для двух и трех независимых переменных. Это приводит к необходимости построения методики определения индекса состояния экосистемы, где индикаторы при расчетах необходимо компоновать по двум или трем показателям в группы, характеризующим ту или иную область деятельности человека.

В основе построения такой методики для любой экосистемы может лежать гипотеза существования, абсолютного индекса T , который является мерой оценки качественного состояния системы по комплексу её свойств z_k . Величина T обобщенно отражает динамику процессов, происходящих во времени в исследуемой системе. Для измерения величины T необходимо построить шкалу и провести ее градуировку, другими словами, – сформировать стандартную эмпирическую шкалу индекса (или комплекс шкал) состояния экосистемы определенного класса. Первое, что необходимо сделать при построении шкалы, – это выбрать два значения индекса T , которые легко определяются, и принять интервал между ними за стандартный, равный, например, 100 или 1000 баллам. В дальнейшем будем рассматривать экосистемы, в которых свойства могут быть скомпонованы в группы с двумя или тремя переменными. В качестве переменных будут выступать экологические индикаторы, социально-экономические показатели и другие величины. При этом группы индикаторов могут охватывать инфраструктурные, социальные, территориальные, демографические, экологические, экономические, политические и другие свойства экосистем.

Существующая система оценки развития человеческого потенциала

В настоящее время систематическая оценка индекса человеческого развития ведется для 177 стран мира; почти для 100 стран такая оценка дается с 1975 года [15]. С 1990 года оценка индекса человеческого развития ведется почти для 140 стран мира и результаты анализа публикуются в открытой печати.

Существующие таблицы показателей развития человека дают глобальную оценку достижений страны в различных областях развития общества. Таблицы содержат данные по 177 странам, т.е. по всем странам, для которых может быть рассчитан индекс развития человеческого потенциала.

Страны, для которых рассчитывается ИРЧП, подразделяются по уровню развития человеческого потенциала на три группы: страны с высоким уровнем развития человеческого потенциала (ИРЧП составляет 0,800 и выше), страны со средним уровнем развития (0,500-0,799) и страны с низким уровнем развития человеческого потенциала (менее 0,500).

При оценке развития стран на основе методики ИРЧП в качестве основных свойств используются индикаторы продолжительности жизни (I_1), образования (I_2) и ВВП (I_3) – для каждого из которых устанавливаются общемировые минимальные и максимальные значения (планки) [14, 15].

Интегральный индекс человеческого развития (I), вычисляется по формуле:

$$I = \sum_{i=1}^3 \beta_i \cdot I_i, \quad \beta_i = 1/3. \quad (39)$$

Каждый из индикаторов ИРЧП выражается величиной от нуля до единицы и рассчитывается по следующим формулам.

Индикатор продолжительности жизни определяется в виде:

$$I_1 = \frac{X - X_{\min}}{X_{\max} - X_{\min}}, \quad (40)$$

где X – ожидаемая продолжительность жизни в стране, при этом X_{\max} принимают равным 85, а X_{\min} равным 25 (лет).

Индикатор образования определяется следующим образом:

$$I_2 = \frac{2}{3} X_1 + \frac{1}{3} X_2, \quad (41)$$

где X_1 – доля грамотного взрослого населения (от 15 лет и старше, доли ед.); X_2 – доля обучающихся в начальных, средних и высших учебных заведениях в возрасте от 5 до 23 лет, доли ед.

При расчете показатель дохода (ВВП на душу населения) корректируется, так как при достижении достойного уровня развития человеческого потенциала не требуется

неограниченного дохода. Поэтому при расчете соответствующего индикатора используются логарифмы дохода:

$$I_3 = \frac{\log(X) - \log(X_{\min})}{\log(X_{\max}) - \log(X_{\min})}, \quad (42)$$

где $X_{\max} = 40000$ дол. США по ППС, а $X_{\min} = 100$ дол. США по ППС. Паритет покупательной способности (ППС) представляет собой обменный курс, отражающий ценовую разницу в зависимости от страны и позволяющий осуществлять международные сопоставления реальных показателей производительности и доходов. С учетом ППС курса доллара США, 1 доллар США имеет такую же покупательную силу в условиях внутренней экономики страны, как и 1 доллар США в Соединенных Штатах Америки. Методика оценки ППС приведена на сайте Всемирного банка [21].

Методика ИРЧП имеет много недостатков, однако сегодня она широко применяется при оценке человеческого потенциала разных стран мира [14, 15, 22, 23, 24].

Построение уравнения состояния человеческого потенциала

Возможность построения абсолютной шкалы индекса T для группы свойств экосистемы покажем на примере формирования такой шкалы для оценки состояния развития человеческого потенциала разных стран мира. При соответствующей корректировке данная методика может быть применена во всех случаях той или иной группировки свойств экосистемы. Выделенную группу свойств будем называть соответствующим компонентом системы, например, демографический компонент, экономический компонент и т.д.

Адаптацию теоретической модели (27) – (38) по статистическим данным проведем путем установления связи между абсолютной шкалой индекса T , которая может быть определена согласно уравнения (27), и эмпирической шкалой индекса t , методика определения которой будет приведена ниже. Примем в качестве независимых переменных для модели стратегической оценки индикаторы I_1, I_2, I_3 . Базы данных значений показателей для расчета ИРЧП приведены за многие годы в источниках [14, 15, 22, 23] и др. За последние несколько лет подобные таблицы данных приведены в Докладах [14, 15, 24].

В отличие от (39) – (42) определим индикатор I_i как отношение переменной z_i к некоторому опорному состоянию z_{i0} , то есть $I_i = z_i / z_{i0}$. В соответствии с данными [14, 15] в таблице 1 приведены значения переменных z_i для некоторых стран мира в 2004 году.

Таблица 1. – Показатели развития человеческого потенциала стран мира в 2004 году

Страны мира	N	S	z_1	z_{21}	z_{22}	z_3
Норвегия	4,6	323,8	79,6	99,0	100	38454
Австралия	19,9	7686,9	80,5	99,0	100	30331
Швеция	9,0	450,3	80,3	99,0	96	29541
США	295,4	9363,0	77,5	99,0	93	39676
Финляндия	5,2	338,2	78,7	99,0	100	29951
Франция	60,3	551,5	79,6	99,0	93	29300
Испания	42,6	505,4	79,7	98,0	96	25047
Германия	82,6	357,0	78,9	99,0	89	28303
Израиль	6,6	20,8	80,0	97,1	90	24382
Словения	2,0	20,3	76,6	99,0	95	20939
Венгрия	10,1	93,0	73,0	99,0	87	16814
Польша	38,6	312,7	74,6	99,0	86	12974
Эстония	1,3	45,2	71,6	99,8	92	14 555
Литва	3,4	65,3	72,5	99,6	92	13107
Словакия	5,4	49,0	74,3	100,0	77	14623
Болгария	7,8	111,0	72,4	98,2	81	8078
Румыния	21,8	238,4	71,5	97,3	75	8480
Россия	143,9	17098	65,2	99,4	88	9902
Беларусь	9,8	207,6	68,2	99,6	88	6970
Венесуэла	26,3	912,1	73,0	93,0	74	6043
Таиланд	63,7	514,0	70,3	92,6	74	8090
Украина	47,0	603,6	66,1	99,4	85	6394
Казахстан	14,8	2724,9	63,4	99,5	91	7 440
Армения	3,0	29,8	71,6	99,4	74	4101
Китай	1308	9597,0	71,9	90,9	70	5896
Турция	72,2	783,6	68,9	87,4	69	7753
Грузия	4,5	69,7	70,6	100,0	75	2844
Алжир	32,4	2381,7	71,4	69,9	73	6603
Египет	72,6	1001,5	70,2	71,4	76	4211
Молдова	4,2	33,8	68,1	98,4	70	1729
ЮАР	47,2	1219,9	47,0	82,4	77	11192
Индия	1087,1	3287,6	63,6	61,0	62	3139
Пакистан	154,8	803,9	63,4	49,9	38	2 225
Конго	3,9	2345,4	52,3	83,0	52	978
Уганда	27,8	236,0	48,4	66,8	66	1478
Йемен	20,3	528,0	61,1	49,0	55	879
Кения	33,5	582,7	47,5	73,6	60	1140
Гаити	8,4	27,8	52,0	52,0	48	1892
Нигерия	128,7	923,8	43,4	67,0	55	1 154
Ангола	15,5	1246,7	41,0	67,4	26	2180
Замбия	11,5	752,6	37,7	68,0	54	943
Мозамбик	19,4	801,6	41,6	46,0	49	1237
Эфиопия	75,6	1127,1	47,8	42,0	36	756
Чад	9,4	1284,0	43,7	25,7	35	2090
Нигер	13,5	1267,0	44,6	28,7	21	779

Здесь N – общая численность населения, млн. чел.; S – площадь страны, тыс. км²; z_1 – ожидаемая продолжительность жизни при рождении, лет; z_{21} – уровень грамотности взрослого населения (от 15 лет и старше), %; z_{22} – общий показатель обучающихся в начальных, средних и высших учебных заведениях, %; z_3 – ВВП на душу населения, в долл. США (по ППС).

Выберем одну из наименее развитых стран в качестве базы для проведения сравнения. Опорные свойства, определяющие развитие человеческого потенциала, определим по состоянию на конец 2004 года. Тогда значения z_{i0} будут соответствовать данным страны Нигер: $z_{10}=44,6$ лет; $z_{21,0}=28,7\%$; $z_{22,0}=21\%$; $z_{30}=779$ \$ США (по ППС).

Определим показатель I_2 , который характеризует уровень образования населения, согласно (41) в виде
$$I_2 = \frac{2}{3} \left(\frac{z_{21}}{z_{21,0}} \right) + \frac{1}{3} \left(\frac{z_{22}}{z_{22,0}} \right),$$

тогда оценку человеческого развития стран мира, как и в методике ИРЧП, разработанной ООН, можно будет вести по трем независимым переменным I_1, I_2, I_3 .

Дадим формальное определение абсолютной шкалы индекса T для случая оценки ИРЧП. Согласно (27) для любого выбранного объекта при изменении свойств системы с тремя независимыми переменными справедлива следующая зависимость $I_1 \cdot I_2 \cdot I_3 = R_k \cdot T$.

Значение индекса T связано с уровнем воздействия окружающей среды на объект оценки. Можно считать, что чем выше уровень урбанизации страны, тем выше и уровень её развития. Сегодня города являются центрами, где сосредоточена половина населения Земли, им принадлежит ведущая роль в современной жизни. По прогнозам ООН в течение следующих двух десятилетий 60% населения мира будет проживать на урбанизированных территориях. Города являются крупными промышленными и транспортными узлами, центрами экономики, торговли и образования, сосредоточием социальной и культурной жизни в различных странах. Выполненная оценка взаимосвязи индикаторов I_i с долей городского населения стран указывает на достаточно высокую корреляцию между переменными. При этом уравнения регрессии являются линейными, а их коэффициенты корреляции лежат в пределах от 0,60 до 0,63.

Исходя из этого, сформулируем следующую гипотезу: при одинаковых значениях индикаторов I_i абсолютный индекс состояния T выше у той страны, у которой выше уровень урбанизации. Примем в качестве меры для оценки уровня урбанизации страны долю городского населения, которую будем определять по отношению к общему населению страны. Данная гипотеза должна подтверждаться результатами обработки статистических данных, при этом уравнение (27) можно представить в виде:

$$T = \mu_k \frac{I_1 \cdot I_2 \cdot I_3}{R_1} = \frac{I_1 \cdot I_2 \cdot I_3}{R_k}, \quad (43)$$

где $\mu_k = \alpha_k / \alpha_1$, α_k – доля городского населения k -ой страны в 2004 году; α_1 – доля городского населения страны Нигер в 2004 году, $\alpha_1 = 16,7\%$.

Величину $R_1 = 0,01$ [1/балл] определим из условия, что в 2004 году абсолютный индекс T для страны Нигер условно был равен 100 баллов. Результаты оценки индекса T для стран мира в 2004 году даны в таблице 2.

При построении эмпирической шкалы индекса t в качестве объекта непосредственной оценки этой величины может быть принята любая величина ρ при условии, что индекс t связан с ней как взаимно однозначные функции. Подобный подход дает возможность построить несколько эмпирических шкал величины t . Например, если актуален вопрос изучения общего развития стран, то в качестве величины ρ можно принять потребление энергии на душу населения. Если предполагается изучение демографических тенденций, то в качестве величины ρ может выступать плотность населения, процент населения определенного возраста, смертность или рождаемость. При оценке уровня развития здравоохранения это может быть: количество врачей, коэффициент младенческой или детской смертности, распространение туберкулеза или ВИЧ. В свою очередь, при изучении технологического развития – количество патентов, число абонентов сотовых телефонов или пользователей Интернет (на 1 тыс. чел.), при экономической оценке – изменение индекса цен или темпы роста, доля импорта или экспорта в ВВП страны; при оценке неравенства – коэффициент Джинни и т.д.

Значение индекса t для примера свяжем с уровнем потребления энергии на душу населения [14, 15, 24]. Если эту величину принять в качестве показателя ρ , то возможно градуирование эмпирической шкалы индекса t . В этом случае, величина ρ легко статистически определяема (измеряема) для любой страны. Построение шкалы индекса t будем основывать на методе двух точек. Реперной точке A поставим в соответствие значение величины $t = 0$ пунктов, реперной точке B – значение, равное в 100 пунктов. Шкалу t примем линейной относительно данных реперных точек.

Точку A определим как состояние системы при отсутствии потребления энергии ($\rho = 0$).

Таблица 2. – Результаты определения показателей, необходимых для построения уравнения состояния человеческого потенциала стран мира

Страны мира	T	t	R_k	R_k^*
Норвегия	158509	63238	0,00216	0,00542
Австралия	143941	28615	0,00190	0,00955
Швеция	131463	41508	0,00199	0,00629
США	161083	35143	0,00207	0,00951
Финляндия	96482	42778	0,00273	0,00616
Франция	116109	20798	0,00218	0,01219
Испания	100153	15813	0,00218	0,01381
Германия	107302	18145	0,00222	0,01315
Израиль	113448	17108	0,00182	0,01209
Словения	53575	17773	0,00328	0,00989
Венгрия	51311	10128	0,00253	0,01284
Польша	37902	9255,0	0,00269	0,01103
Эстония	46896	15235	0,00242	0,00744
Литва	41164	8632,5	0,00251	0,01196
Словакия	37308	13443	0,00297	0,00825
Болгария	25095	11838	0,00239	0,00507
Румыния	19292	6102,5	0,00312	0,00987
Россия	30142	15758	0,00228	0,00437
Беларусь	21826	8470,0	0,00233	0,00599
Венесуэла	23580	8775,0	0,00180	0,00483
Таиланд	10431	4740,0	0,00522	0,01148
Украина	18013	9207,5	0,00247	0,00483
Казахстан	17434	10285	0,00292	0,00496
Армения	11318	3437,5	0,00260	0,00856
Китай	9300,4	3600,0	0,00423	0,01092
Турция	19221	4947,5	0,00250	0,00971
Грузия	6346,6	3915,0	0,00320	0,00519
Алжир	14153	2322,5	0,00267	0,01626
Египет	6232,6	3350,0	0,00391	0,00728
Молдова	3205,4	4750,0	0,00359	0,00242
ЮАР	16719	11488	0,00284	0,00413
Индия	2354,6	1485,0	0,00586	0,00929
Пакистан	1478,2	1232,5	0,00484	0,00581
Конго	1451,5	515,0	0,00279	0,00787
Уганда	400,59	147,5	0,01336	0,03628
Йемен	500,79	530,0	0,00621	0,00587
Кения	509,3	385,0	0,00815	0,01078
Гаити	1272,6	152,5	0,00438	0,03658
Нигерия	991,9	405,0	0,00353	0,00865
Ангола	1606,0	445,0	0,00317	0,01144
Замбия	521,1	1577,5	0,00479	0,00158
Мозамбик	551,8	997,5	0,00496	0,00274
Эфиопия	151,3	82,5	0,01064	0,01950
Чад	449,9	27,5	0,00673	0,11017
Нигер	100,0	100,0	0,01000	0,01000

Здесь T – абсолютный индекс для каждой страны в 2004 году, балл; t – эмпирический индекс, определенный по уровню потребления энергии в стране в 2004 году, пункт; R_k – постоянная в уравнении (43), 1/балл; R_k^* – скорректированная постоянная в уравнении (46), 1/пункт.

Реперную точку B эмпирической шкалы t совместим с реперной точкой абсолютной шкалы T . Для этого используем данные по потреблению энергии страны Нигер в 2004 году ($\rho = 40$ кВт·час/чел).

В результате получаем простую линейную эмпирическую шкалу для определения индекса t вида:

$$t = 2,50 \cdot \rho, \quad (44)$$

где размерность потребления энергии ρ задается в удельных единицах [кВт·час/чел], а размерность величины t задается в пунктах относительно показателей страны Нигер в 2004 году.

При этом отметим, что цена деления одного балла абсолютной шкалы T отличается от цены деления одного пункта эмпирической шкалы t .

Таким образом, мы определили линейную эмпирическую шкалу индекса t , при этом обеспечили возможность ее измерения на основе использования статистических данных по каждой стране.

Используя шкалу (44), определим индекс t для каждой страны в 2004 году. Результаты выполненных расчетов приведены в таблице 2.

Проверку адекватности модели проведем путем сравнения расчетных значений абсолютной шкалы T согласно (27) и эмпирической шкалы t . Зависимость величины T от индекса t представлена на рисунке 1. Линейное уравнение регрессии в этом случае имеет вид:

$$\begin{aligned} \ln T &= 1,15089 + \ln t \quad \text{или} \\ T &= 3,161 \cdot t. \end{aligned} \quad (45)$$

При обработке данных коэффициент корреляции является значимым и составляет 0,93, что указывает на существование очень тесной связи между данными величинами.

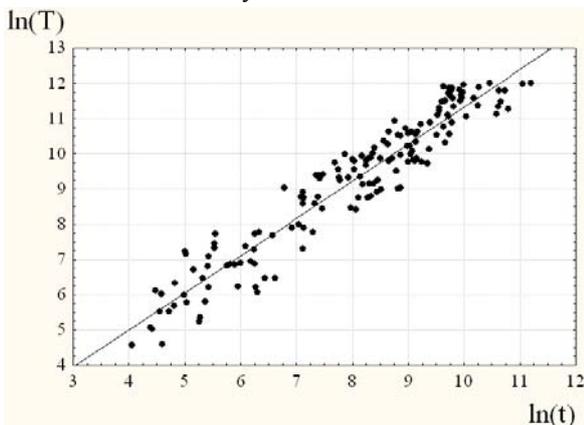


Рисунок 1. – Зависимость величины T , рассчитанной согласно (43), от индекса t , определенного с учетом шкалы (44)

Исходя из полученных результатов, приведем универсальное уравнение состояния системы, где абсолютный индекс T может

находиться по эмпирической шкале в зависимости от уровня потребления энергии на душу населения страны. При этом пересчитаем цену деления абсолютной шкалы, задав ее в пунктах эмпирической шкалы. В этом случае переопределим постоянные R_k^* таким образом, чтобы уравнение (43) было абсолютно строгим. В результате получаем следующее уравнение:

$$I_1 \cdot I_2 \cdot I_3 = R_k^* \cdot T, \quad (46)$$

где абсолютный индекс T определяется по простой формуле относительно эмпирической шкалы:

$$T = t. \quad (47)$$

В данном случае абсолютный индекс T и величина t измеряются в одинаковых единицах – пунктах, при этом, значения индекса t определяются согласно эмпирической шкалы (44). В свою очередь значения величины R_k^* для различных стран приведены в таблице 2.

Модель (46) – (47) для стран мира в 2004 году является абсолютно точной. Если использовать данную модель в качестве основы, то возможно построение уравнения состояния системы для всех периодов оценки развития человеческого потенциала стран мира.

В этом случае при наличии достаточного объема статистических данных, модель (46)–(47) может быть обобщена на другие годы. Например, в термодинамике, обобщение подобных моделей на всю область определения переменных осуществляется путем введения дополнительных корректирующих членов вида:

$$\begin{aligned} Z = \frac{I_1 \cdot I_2 \cdot I_3}{R_k^* \cdot T} &= 1 + a_1 \cdot f_1(I_1, I_2, I_3) + \\ &+ a_2 \cdot f_2(I_1, I_2, I_3) + \dots \end{aligned} \quad (48)$$

Часто правую часть уравнения (48) представляют в виде полинома относительно величин I_i .

Таким образом, если имеется достаточно большой массив статистических данных по индикаторам, полученным в различные годы и характеризующим определенный компонент состояния системы, то возможно построение уравнений состояния развития человеческого потенциала для каждой страны мира на весь период оценки, например, 1990-2010 годы. Однако, при этом, сложность модели для оценки состояния системы возрастает.

Подобный подход может быть использован и при других способах построения шкалы t , когда применяются различные индикаторы для оценки состояния системы.

Например, если в качестве величины ρ использовать младенческую смертность, то эмпирическая шкала индекса t может быть определена в виде:

$$t = 0,6579 \cdot \rho. \quad (49)$$

Здесь в качестве величины ρ используется статистика по показателю младенческой смертности в странах мира [кол-во смертей на 1 тыс. живорожденных]. Для страны Нигер в 2004 году эта величина равна $\rho = 152$.

В этом случае вид уравнения (43) сохраняется, а зависимость связи абсолютной шкалы индекса T представляется следующим образом:

$$T = 5,934 \cdot 10^5 \cdot t^{-1,5}. \quad (50)$$

Коэффициент корреляции данной зависимости также высокий ($r=0,92$), что указывает на тесную связь между переменными. Результаты обработки данных в этом случае даны на рисунке 2.

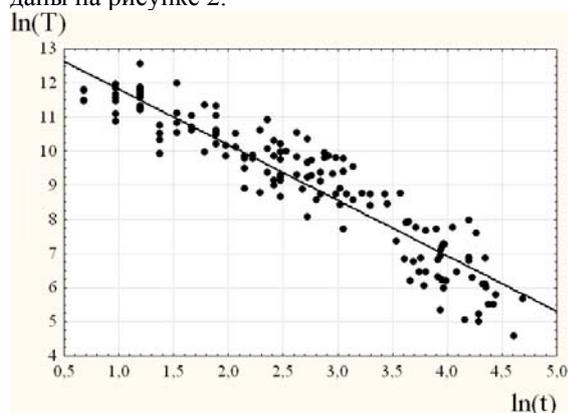


Рисунок 2. – Зависимость величины T , рассчитанной согласно (43) от индекса t , определенного с учетом шкалы (49)

Таким образом, видна возможность построения эмпирических шкал индекса t и уравнений состояния системы.

В заключение отметим, что модель (46)-(47) является идеальной моделью развития мира, которая характерна для стран в 2004 году. Для других периодов времени на основе имеющихся данных возможно уточнение модели (см. например, уравнение (48)). Это дает возможность построить для каждой страны уравнение состояния человеческого потенциала, а по мере увеличения объема статистических данных систематически осуществлять его корректировку.

Аналогичным образом, возможно создание шкалы абсолютного индекса T для любого компонента системы, включающего два или три индикатора. При стратегической оценке экосистемы, в которой выделяется несколько компонентов, необходимо для каждого из компонентов системы построение соответствующих шкал абсолютного индекса T . Из приведенного материала виден путь построения уравнений состояний вида «экологический компонент – экономический компонент» или «экономический компонент – социальный компонент» и т.д. С этой целью

необходимо на основе статистических данных установить связи между абсолютными шкалами T , построенными для каждого из компонентов экосистемы. Разработка шкал индекса T является первым этапом в построении моделей для стратегической оценки состояния экосистем, так как они позволяют практически найти матрицы уравнений состояния экосистемы.

Критерии комплексной оценки состояния экосистем

Учитывая результаты теоретических исследований, в качестве обобщенных критериев для комплексной оценки состояния экосистем следует принять энтропию системы s и общую меру состояния u . Наряду с абсолютным индексом T данные две величины однозначно характеризуют любое состояние экосистемы на поверхности, которое определяется уравнением состояния вида $T = F(I_1, I_2, I_3)$. При этом, энтропия системы будет определять в криволинейных координатах (s, u) удаленность точки, характеризующей состояние экосистемы, по линии характеристики от выбранного начала координат. В свою очередь общая мера состояния u будет определять поверхность уровня, перпендикулярную линиям характеристики в каждой точке поверхности $T = F(I_1, I_2, I_3)$.

При обосновании критериев для комплексной оценки важным является построение линий постоянной энтропии. Существуют различные способы экспериментального определения положений линий, соответствующих уравнению $s = const$. Наиболее распространенный метод основан на понятии адиабатического процесса. Адиабатическим процессом называется такой процесс, при котором на систему не оказывается воздействия. Исходя из уравнения (29), для любого адиабатического процесса, можно написать:

$$\alpha_1 \frac{dI_1}{I_1} + \alpha_2 \frac{dI_2}{I_2} + \alpha_3 \frac{dI_3}{I_3} = 0. \quad (51)$$

При отсутствии воздействия на систему $dQ = 0$, откуда в идеальном случае величина $ds = 0$. Это означает, что система при любых изменениях показателей I_1, I_2, I_3, T находится в состоянии отсутствия внешних воздействий, т.е. каждая точка линии $s = const$ в криволинейных координатах (s, u) равноудалена от начала координат, например, точки $I_1 = 0, I_2 = 0, I_3 = 0$. При этом все линии лежат на поверхности $T = (I_1 \cdot I_2 \cdot I_3) / R_k^*$.

Определим значения констант α_1 , α_2 , α_3 в уравнении (51). Для этого предположим, что в состоянии A все объекты системы имеют параметры, наблюдаемые в 2004 году. При отсутствии внешнего воздействия (условия быстрого регресса) объекты за различный период времени перейдут в состояние P , которое наблюдалось в человеческом обществе, например, в далеком прошлом, когда в слабо цивилизованном обществе продолжительность жизни, образование и доходы населения были низкими. Нижними планками в этом случае можно принять для средней продолжительности жизни значение, равное 25 лет, в свою очередь для ВВП на душу населения – значение 100 \$ США [14, 15, 24]. Оценки грамотности населения в прошлом достаточно неоднозначны. Для России в 1860 году уровень грамотности составлял всего 5 % населения, в США и Европе грамотность населения в 1870 была существенно выше – 60 – 80 %. В те времена неграмотность населения рассматривалась как функциональная неграмотность. Известно, что в 1950 году 50 % населения мира было неграмотно. Учитывая эти данные, а также другие оценки, можно нижнюю шкалу грамотности населения мира к концу XIX века приблизительно принять 10 %. Таким образом, естественное состояние мира в прошлом в слабо цивилизованном обществе может характеризоваться следующими оценочными значениями индикаторов:

$$I_{1p} = 0,561; I_{2p} = 0,348; I_{3p} = 0,128.$$

Более правильно было бы определить величины I_{1p} , I_{2p} , I_{3p} для каждой страны в прошлом, однако сейчас для большинства стран мира подобные данные отсутствуют.

Проинтегрируем уравнение (51) с учетом зависимостей (37) от состояния A (значения I_1 , I_2 , I_3 в 2004 году) до состояния P . В результате получим систему уравнений для определения констант α_1 , α_2 , α_3 для каждой страны мира. Результаты расчетов даны в таблице 3. Из уравнения (51) видно, что уравнение адиабатического процесса для стран мира имеет вид:

$$I_3 = I_1^{k_1} \cdot I_2^{k_2}, \quad (52)$$

$$\text{где } k_1 = |\alpha_1/\alpha_3|; k_2 = |\alpha_2/\alpha_3|.$$

Из данного уравнения следует, что рост ВВП стран однозначно связан с увеличением продолжительности жизни и уровня образования населения, т.е. рост благосостояния определяет социальное развитие и наоборот.

После определения величин α_i можно найти для каждого объекта функцию энтропии системы (s) и общую меру состояния системы (u). Данные функции состояния и будут

выступать в качестве обобщенных критериев для комплексной оценки экосистем по уровню развития человеческого потенциала. Относительно выбранного состояния стран мира в 2004 году имеем безразмерные зависимости для определения этих величин согласно уравнений (53) и (54):

$$S - S_0 = \ln I_3 - k_1 \cdot \ln I_1 - k_2 \cdot \ln I_2, \quad (53)$$

$$U - U_0 = T - T_0, \quad (54)$$

где $S = s/\alpha_3$ и $U = u/\alpha_3$.

Таблица 3. – Результаты определения констант α_i для стран мира в 2004 году

Страны мира	Константы в уравнении (51)		
	α_1	α_2	α_3
Норвегия	0,00814	0,00273	-0,00269
Австралия	0,01421	0,00467	-0,00488
Швеция	0,00936	0,00307	-0,00322
США	0,01437	0,00486	-0,00465
Финляндия	0,00920	0,00303	-0,00313
Франция	0,01816	0,00598	-0,00621
Испания	0,02045	0,00664	-0,00717
Германия	0,01960	0,00645	-0,00670
Израиль	0,01790	0,00581	-0,00628
Словения	0,01461	0,00472	-0,00517
Венгрия	0,01892	0,00608	-0,00676
Польша	0,01604	0,00501	-0,00602
Эстония	0,01091	0,00347	-0,00397
Литва	0,01743	0,00548	-0,00648
Словакия	0,01207	0,00383	-0,00442
Болгария	0,00724	0,00217	-0,00290
Румыния	0,01416	0,00430	-0,00557
Россия	0,00638	0,00201	-0,00236
Беларусь	0,00854	0,00255	-0,00344
Венесуэла	0,00679	0,00197	-0,00286
Таиланд	0,01651	0,00502	-0,00646
Украина	0,00689	0,00206	-0,00278
Казахстан	0,00716	0,00220	-0,00276
Армения	0,01179	0,00323	-0,00534
Китай	0,01541	0,00448	-0,00644
Турция	0,01400	0,00429	-0,00542
Грузия	0,00697	0,00179	-0,00340
Алжир	0,02323	0,00698	-0,00928
Египет	0,01014	0,00286	-0,00441
Молдова	0,00315	0,00073	-0,00169
ЮАР	0,00637	0,00224	-0,00190
Индия	0,01299	0,00370	-0,00559
Пакистан	0,00804	0,00223	-0,00358
Конго	0,01026	0,00239	-0,00548
Уганда	0,05003	0,01375	-0,02253
Йемен	0,00742	0,00156	-0,00431
Кения	0,01456	0,00378	-0,00700
Гаити	0,05152	0,01494	-0,02164
Нигерия	0,01196	0,00332	-0,00533
Ангола	0,01701	0,00557	-0,00587
Замбия	0,00221	0,00063	-0,00095
Мозамбик	0,00391	0,00117	-0,00157
Эфиопия	0,02595	0,00644	-0,01306
Чад	0,16719	0,05702	-0,05316
Нигер	0,01400	0,00400	-0,00600

Будем считать, что в состоянии, свойственном параметрам $(I_{10}, I_{20}, I_{30})=1$ система имеет значение энтропии $S_0=0$ и общей меры $U_0=0$. Результаты расчетов приведены в таблице 4.

Таблица 4. – Значения обобщенных критериев S и U для комплексной оценки и рейтинги стран мира в 2004 году

Страны мира	S	U	Ранг стран		
			по ИРЧП согласно:		по темпам развития
			[14]	(54)	
Норвегия	0,769	63138	1	2	6
Австралия	0,642	28515	3	11	12
Швеция	0,641	41408	5	6	9
США	0,836	35043	8	10	16
Финляндия	0,667	42678	11	5	10
Франция	0,655	20698	16	18	30
Испания	0,576	15713	19	32	19
Германия	0,658	18045	21	22	53
Израиль	0,572	17008	23	26	39
Словения	0,544	17673	27	24	28
Венгрия	0,518	10028	35	46	51
Польша	0,364	9155	37	50	49
Эстония	0,462	15135	40	35	45
Литва	0,394	8533	41	54	46
Словакия	0,442	13343	42	40	37
Болгария	0,180	11738	54	43	23
Румыния	0,232	6003,5	60	69	67
Россия	0,405	15658	65	33	22
Беларусь	0,165	8370,0	67	55	31
Венесуэла	0,049	8675,0	72	53	43
Таиланд	0,245	4640,0	74	78	87
Украина	0,166	9107,5	77	51	42
Казахстан	0,289	10185	79	45	36
Армения	-0,138	3337,5	80	93	58
Китай	0,066	3500,0	81	91	65
Турция	0,275	4847,5	92	76	61
Грузия	-0,309	3815,0	97	88	50
Алжир	0,189	2222,5	102	105	93
Египет	-0,038	3250,0	111	94	100
Молдова	-0,519	4650,0	114	77	40
ЮАР	1,139	11388	121	44	47
Индия	-0,010	1385,0	126	115	95
Пакистан	-0,094	1132,5	134	119	102
Конго	-0,511	415,0	140	135	94
Уганда	-0,124	47,5	145	158	158
Йемен	-0,674	430,0	150	132	114
Кения	-0,279	285,0	152	139	113
Гаити	0,054	52,5	154	156	160
Нигерия	-0,098	305,0	159	138	126
Ангола	0,625	345,0	161	137	123
Замбия	-0,008	1477,5	165	112	74
Мозамбик	0,178	897,5	168	125	153
Эфиопия	-0,383	-17,5	170	167	122
Чад	0,899	-72,5	171	171	152
Нигер	0,000	0,0	177	163	130

Таким образом, мы получили оценки величин S и U для всех стран мира в 2004 году. Безразмерные энтропия системы S и общая мера U показывают, на сколько изучаемый объект в криволинейных координатах (U, S) на семействе поверхностей $T = f_k(U, S)$ удален от опорного состояния. При этом чем больше U , тем дальше объект находится от этого состояния. Дифференциал общей меры dU показывает темпы развития объекта в криволинейных координатах. По данным функциям могут быть определены ранги объекта, которые характеризуют место каждого объекта по уровню развития человеческого потенциала среди стран мира.

Полученные результаты позволяют ответить на ряд актуальных вопросов. Например, может ли Украина за десять лет попасть в тридцать наиболее развитых стран мира? На этот вопрос можно ответить отрицательно, так как (см. табл. 4) из 50 стран, которые находятся по уровню развития выше Украины, 33 страны имели в 2004 и 2005 годах более высокие темпы развития.

Данный метод позволяет оценивать сценарии развития путем изучения процессов, характеризующих переходы объектов с течением времени в новые состояния. Наиболее эффективный путь развития страны определяется вектором характеристики, который можно найти из характеристической системы дифференциального уравнения (28).

Для Украины в 2004 году система характеристических уравнений имела вид:

$$2,483 \frac{dI_1}{I_1} = 0,742 \frac{dI_2}{I_2} = \frac{dI_3}{I_3}. \quad (55)$$

При этом, если темпы роста продолжительности жизни в стране почти оптимально соответствуют темпам роста ВВП, то изменение показателей в области образования не является оптимальным. Это связано с относительно низким охватом молодого населения начальным, средним и высшим образованием по сравнению с развитыми странами.

Подобные подходы к анализу процессов развития стран можно реализовать для систем различной сложности на основе изучения многих компонентов и соответствующих наборов индикаторов. Однако, с увеличением числа индикаторов свыше 8 – 10 аналитические зависимости для анализа процессов развития становятся слишком сложными, в связи с чем при стратегической оценке необходимо использовать матричный анализ, алгоритмические методы и вычислительную технику. Кроме того, из-за значительного количества оцениваемых вариантов может потребоваться применение параллельных вычислений.

Выводы

Таким образом, в результате исследований были сформулированы обобщенные критерии для комплексной оценки состояния экосистем. Данные критерии позволяют провести ранжирование объектов, в качестве которых выступают страны мира, по уровню развития человеческого потенциала. Предложенный метод дает возможность найти уравнение состояния для любого компонента системы, включающего два или три индикатора. Так как полученные функции состояния (полные дифференциалы) обладают свойством аддитивности, то при стратегической оценке экосистем, в которой выделяется несколько компонентов, возможно суммирование данных величин по каждому из компонентов системы. Это дает возможность сформулировать объективный метод оценки состояния экосистем.

Таким образом, формирование баз данных статистических показателей в комплексе с использованием новых методов и средств работы с данными позволит на практике подойти к разработке моделей социально-экономического и экологического развития стран и регионов. В основе получения таких моделей будет лежать уже объективный, а не экспертный подход.

Литература

1. Проект закона Украины “Про державне прогнозування та стратегічне планування в Україні”.
2. Руководство по проведению стратегической экологической оценки / Ред. Горкина И., Максименко Ю., Сенгени И. М.: ИД РПОИ, 2006. – 71 с.
3. Справочное пособие по экологической оценке. Т.1.: Политика, процедуры, проблемы, общие для разных отраслей. Т.2.: Инструкции к различным видам хозяйственной деятельности. Т.3.: Инструкция по экологической оценке проектов в области энергетики и промышленного производства – World Bank, Washington, 1991.
4. Прогностика. Общие понятия. Объект и аппарат прогнозирования. Терминология. М.: Наука, 1978. – 32 с.
5. А.А. Гухман. Об основах термодинамики. М.: Энергоатомиздат, 1986. – 383 с.
6. Н.С. Кошляков и др. Уравнения в частных производных математической физики. М.: Вс. шк., 1970. – 712 с.
7. Г.М. Фихтенгольц. Курс дифференциального и интегрального исчисления. Том 1. М.: Наука. 1969. – 607 с.
8. Руководящие указания по применению экологических показателей в странах восточной Европы, Кавказа и Центральной Азии. – Женева. 2006. – 105 с.
9. Indicators of Sustainable Development: Framework and Methodologies United Nations, New York, 1996.
10. Environmental Indicators for Agriculture. Vol. 3. Methods and Results, OECD, 2001.
11. World Bank, World Development Indicators (issued annually) //http://www.worldbank.org/ (10.03.10).
12. United Nations, Indicators of Sustainable Development: Guidelines and Methodologies, 2001.
13. Environmental Health Indicators: Framework and Methodologies. Prepared by D. Briggs, Occupational and Environmental Health. WHO, 1999.
14. Доклад о развитии человека 2006. Что кроется за нехваткой воды: власть, бедность и глобальный кризис водных ресурсов / Пер. с англ. – М.: Весь мир. 2006. – 423 с.
15. Доклад о развитии человека 2007/2008. Борьба с изменениями климата: Человеческая солидарность в разделенном мире / Пер. с англ. – М.: Весь мир. 2007. – 400 с.
16. Защита окружающей среды Европы. Четвертая оценка. – ЕАОС, Копенгаген, 2007. – 452 с.
17. Методика вимірювання людського розвитку регіонів України. – Київ, 2001. – 36 с.
18. Критерии оценки экологической обстановки территорий для выявления зон чрезвычайной экологической ситуации и зон экологического бедствия (утв. Минприроды РФ 30.11.1992).
19. Система количественного и качественного измерения глобализации // Эл. ресурс. URL: www.kof.ch/globalization (10.06.2010).
20. Международная организация CEIP // Эл. ресурс. URL: www.atkearney.com (20.06.2010).
21. <http://www.worldbank.org/data/icp> (15.10.2009).
22. База данных ДРЧ. http://hdr.undp.org/reports/view_reports.cfm (11.10.09).
23. Национальные ДРЧ. <http://hdr.undp.org/nhdr/> (11.10.09).
24. Доклад о развитии человека 2009. Преодоление барьеров: человеческая мобильность и развитие / Пер. с англ. – М.: Весь мир. 2009. – 217 с.

Научные аспекты анализа риска в промышленной безопасности

Москалец В.М.

Донецкий национальный технический университет

moskaletsvm@list.ru

Abstract

Moskalets V. "Scientific aspects of the risk evaluation of the industrial safety"

The risk control & risk evaluation questions of the enterprise are observed by the hazardous exposure system analysis.

Key words: risk analysis, accident, complex system, productivity index.

Введение

Анализ и управление рисками являются на сегодняшний день основополагающими мероприятиями в области промышленной безопасности.

Эти процедуры позволяют анализировать процессы реализации нежелательных событий, планировать и осуществлять меры по их предотвращению.

Сегодня в промышленной и экологической безопасности понятие риска стало слишком емким, при этом специалисты часто трактуют его по-разному, забывая, что в базовом определении риск является вероятностью нанесения вреда с учетом тяжести последствий [1].

По данным Международной организации труда [2] в 1998 г. опасность реализовалась в смертельные случаи на производстве, риск возникновения которых составлял: в Европе – $8,6 \cdot 10^{-5}$ (1 случай на 11636 работающих); в Америке – $1,4 \cdot 10^{-4}$ (1:6974); в Азии – $1,5 \cdot 10^{-4}$ (1:6746); в Африке – $1,8 \cdot 10^{-3}$ (1:547); в бывших социалистических странах Европы – $1,3 \cdot 10^{-4}$ (1:7567); в Индии – $1,1 \cdot 10^{-4}$ (1:8709); в Китае – $1,05 \cdot 10^{-4}$ (1:9506); в мире в целом – $1,6 \cdot 10^{-4}$ (1:6102). В 2001 г. в Украине опасность реализовалась в смертельные случаи с частотой $9,6 \cdot 10^{-5}$ (1 случай на 10425 работающих).

Анализ приведенных данных показывает, что показатели смертельного травматизма в Европе – наименьшие, в Африке – наибольшие, в Украине – близки к Европейским, однако реальную оценку может дать только обработка достоверных статистических данных за достаточно большой промежуток времени.

Динамика аварийности и смертельного производственного травматизма в Германии представлена на рис. 1 [3], соответственно в России – на рис. 2.

Распределение риска возникновения смертельных несчастных случаев по основным отраслям национальной экономики (по состоянию на 2005г.) приведено в таблице 1 [4].

Таблица 1. – Распределение риска возникновения смертельных несчастных случаев по отраслям экономики Украины

Отрасль экономики	Вероятность смертельного случая
Металлургическая	$1,6 \cdot 10^{-4}$
Химическая	$3,0 \cdot 10^{-4}$
Угольная	$8,8 \cdot 10^{-4}$
Энергетическая	$2,3 \cdot 10^{-4}$
Строительная	$1,8 \cdot 10^{-4}$
Машиностроительная	$7,1 \cdot 10^{-5}$
Транспортная	$1,7 \cdot 10^{-4}$
Связь	$1,6 \cdot 10^{-5}$
ЖКХ	$8,1 \cdot 10^{-5}$
АПК	$1,9 \cdot 10^{-4}$

При анализе риска возникновения смертельных случаев с учетом рекомендуемых приемлемых норм рисков, предложенных Национальным научно-исследовательским институтом охраны труда (ННИИОТ) [4], можно сделать вывод о том, что из отечественных отраслей только угольная работает в границах недопустимого риска ($8,8 \cdot 10^{-4}$ при неприемлемом риске $5,001 \cdot 10^{-4}$). Величины приемлемых рисков в Украине в настоящее время законодательно не установлены.

Динамика смертельного производственного травматизма и техногенных чрезвычайных ситуаций (ЧС) в Украине представлена на рис. 3. Приведенные данные отражают тенденцию снижения смертельного производственного травматизма и техногенных ЧС [5].

Динамика смертельного производственного травматизма и техногенных аварий в мире неоднозначна. Наряду с относительно постоянными и невысокими показателями в странах ЕС (например, в Германии – в период с 1995÷2003 – от 13 до 26 крупных аварий в год, при этом число погибших составляло от 1 до 10 чел./год [3]) наблюдается высокий уровень аварийности и травматизма в странах с развивающейся экономикой. Особенно высокими показателями отличается угольная отрасль КНР и Украины.

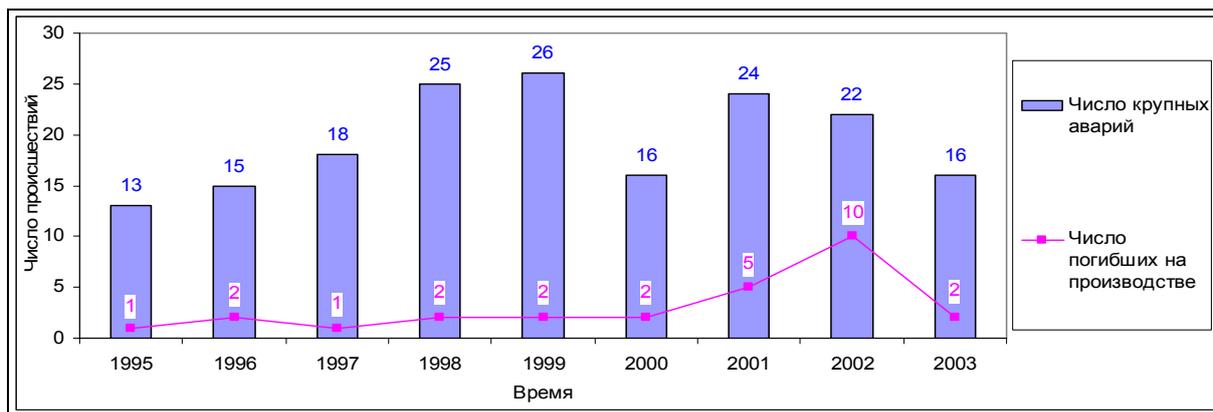


Рисунок 1. – Динамика аварийности и смертельного производственного травматизма в Германии

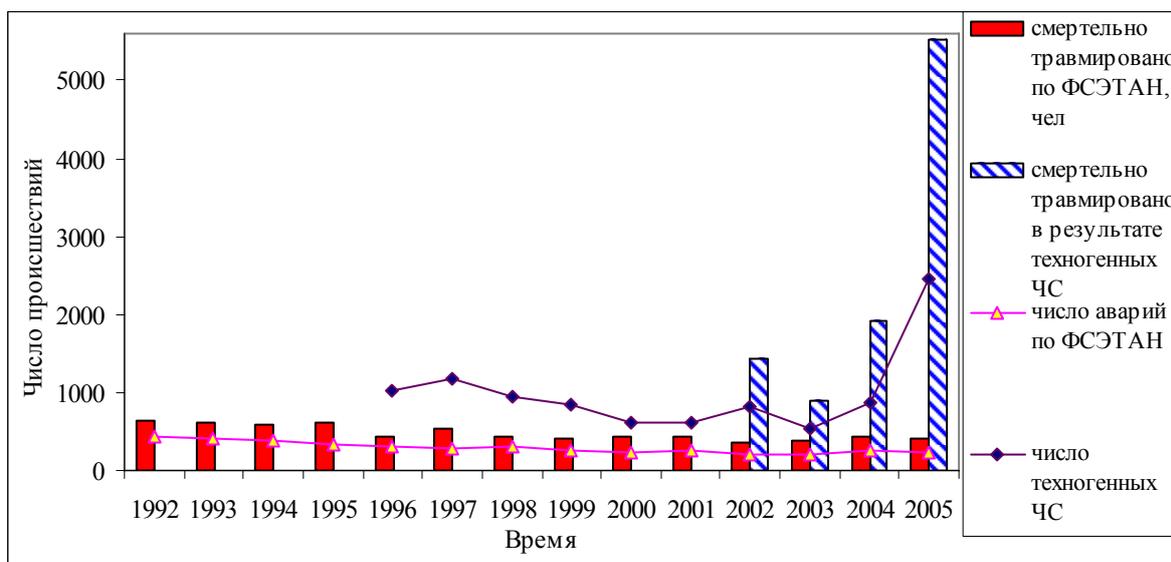


Рисунок 2. – Динамика аварийности, смертельного производственного травматизма и техногенных ЧС (ТЧС) в России (в т.ч. по данным Федеральной службы по экологическому, технологическому и атомному надзору – ФСЭТАН)

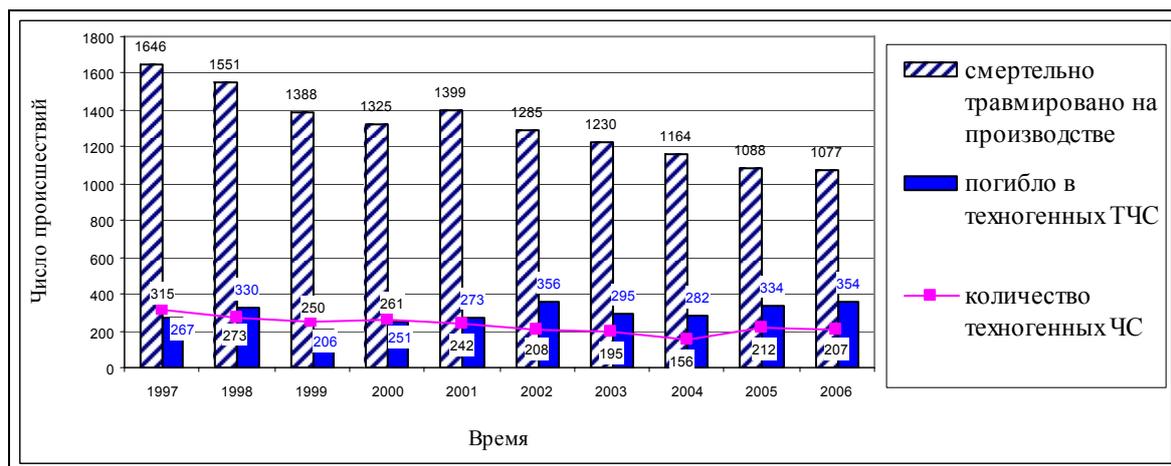


Рисунок 3. – Динамика смертельного производственного травматизма и техногенных ЧС в Украине

Для динамики смертельного производственного травматизма на предприятиях металлургической отрасли в Украине и России, а также ЕС и др. развитых стран характерна тенденция снижения смертельного производственного травматизма.

В основе оценки риска в промышленной безопасности лежит системный анализ технологического объекта вместе с окружающей средой, в которой он находится, и с которой взаимодействует (воздействует, загрязняет, является угрозой и т.д.).

Риск присутствует в любой деятельности человека. Он может относиться к здоровью и безопасности (учитывая, например, как немедленные, так и долгосрочные последствия для здоровья от воздействия токсичных химических веществ или других опасных воздействий). Риск может быть экономическим, например, приводящим к уничтожению оборудования и продукции вследствие пожаров, взрывов или других аварий. Он может учитывать неблагоприятные воздействия на окружающую среду и соответствующие негативные последствия. Задачей управления рисками является контроль, предотвращение или сокращение случаев гибели людей, снижение заболеваемости, уменьшение ущерба, а также предотвращение неблагоприятного воздействия на окружающую среду. Результаты анализа риска могут использоваться специалистами, принимающими решение при оценке допустимости риска, а также при выборе между потенциальными мерами по снижению или устранению риска [6].

Общей задачей анализа риска является обоснование решений, касающихся риска. Эти решения могут приниматься как часть более крупного процесса управления рисками посредством сопоставления результатов анализа риска с критериями допустимого риска. Во многих ситуациях возникает необходимость оценивания преимуществ того или иного решения. В целом установление критериев допустимого риска является сложной задачей, особенно в социальной, экономической и производственной сферах.

Анализ риска применяется на различных стадиях жизненного цикла технологического объекта: проектирование, строительство, эксплуатация и техническое обслуживание, прекращение эксплуатации и его ликвидация.

В процессе анализа риска устанавливают пределы и эффективные границы риска, выявляют закономерности и определяют вероятность появления и воздействия неблагоприятных событий.

Цель оценки риска состоит в том, чтобы проанализировать и оценить идентифицированные виды риска и определить, требуются ли мероприятия по минимизации риска.

Анализ риска может быть проведен каче-

ственными или количественными методами. Предварительный качественный анализ может быть выполнен на ранних этапах проектирования, когда отсутствуют необходимые данные или их очень мало. Количественный анализ применяют, когда имеется большое количество необходимых данных.

На практике используют следующие методы анализа риска:

- анализ «дерева событий»;
- анализ видов и последствий отказов, а также анализ видов, последствий и критичности отказов;
- анализ «дерева неисправностей»;
- анализ опасности и работоспособности;
- анализ влияния человеческого фактора;
- предварительный анализ опасности;
- структурная схема надежности;
- классификация групп риска по категориям;
- ведомости проверок;
- общий анализ отказов;
- модели описания последствий;
- метод Делфи;
- индексы опасности;
- метод Монте-Карло и другие методы стохастического моделирования;
- парные сопоставления;
- обзор данных по эксплуатации;
- анализ скрытых процессов;
- Марковские методы анализа надежности.

В промышленной безопасности на сегодняшний день наметились два принципиальных подхода для управления рисками: оценка риска профессиональной деятельности и оценка риска аварий и их последствий для объектов повышенной опасности и потенциально-опасных объектов.

Системный анализ опасных воздействий предприятия

Реализация процедур системного анализа применительно к опасным воздействиям промышленных предприятий осуществляется в декларациях безопасности объектов повышенной опасности с использованием вышеуказанных методов анализа риска. В настоящее время методы анализа риска промышленных производств отличаются исключительно высокой трудоемкостью, существенной неопределенностью данных, наличием субъективных оценок и требуют достаточно высокой квалификации экспертов. Несмотря на значительное количество методов анализа риска, объективные подходы в области оценки риска, основанные на эмпирических данных, развиваются крайне слабо. Для решения данной проблемы необходимо определить структуру и связи возможных опасных воздействий на предприятиях и оценить имеющийся объем опытных данных.

При анализе риска в промышленной безопасности чаще всего опираются на теорию эргатических систем, которая, в общем, сводится к рассмотрению свойств человеко-машинной системы [7,8]. Это только одна из составляющих риска промышленного предприятия, однако, для анализа его риска необходим комплексный учет наиболее характерных его опасных свойств. Решением этой задачи может стать применение принципов общей теории систем при анализе опасностей предприятия, которые получают развитие в последнее время.

На рис. 4 представлена упрощенная схема



Рисунок 4. – Упрощенная схема опасного предприятия как сложной системы

Современное промышленное предприятие — это сложная система, все звенья которой тесно связаны между собой единством производственного процесса, конкретизированного в плане предприятия, планах его конкретных подразделений, графиках выпуска продукции, технических и технологических условиях производства и т.д. В этой связи исследование процесса функционирования предприятия требует применения системного подхода, фокусирующего внимание не только на самом предприятии, но и на окружающей его среде, и на его производстве.

В этом случае предприятие рассматривается не как изолированная и независимая структура, а как открытая экономическая система и как органическая часть общества, отдающая в процессе своей деятельности приоритет потребителю и постоянно находящаяся в динамическом развитии.

функционирования опасного предприятия как сложной системы [9]. Применительно к промышленному предприятию можно использовать следующие определения. Система (от греч. σύστημα, «составленный») – это объект или совокупность объектов, выделенных для исследования, множество взаимосвязанных объектов и ресурсов, организованных процессом системогенеза в единое целое и противопоставляемое окружающей среде. Система в системном анализе – совокупность сущностей (объектов) и связей между ними, выделенных из среды на определенное время и с определенной целью.

Для построения системной модели опасного предприятия необходимо выделить его опасные свойства и состояния, в процессе которых могут возникать качественно новые неблагоприятные эффекты.

В качестве свойств опасного предприятия (например, металлургического или коксохимического производства) можно выделить следующие: «персонал», «жизненный цикл», «опасность», «технология» и «территория предприятия» (в т.ч. санитарно-защитная зона - СЗЗ).

Персонал определяет интенсивность производства, размеры предприятия, экономическую эффективность его деятельности. Для его оценки применяется параметр «численность».

Жизненный цикл определяет такие параметры как «время существования предприятия» и «количество оборудования», в т.ч. оборудования повышенной опасности.

Опасность предприятия определяют такие параметры, как количество хранимых и пе-

перерабатываемых взрывопожароопасных и токсичных веществ, выбросов в окружающую среду, расстояние до населенных пунктов, соседних предприятий, объектов «заботы» общества и т.п. так называемых «третьих лиц».

Такое свойство системы как технология производства является довольно обширным понятием. Вид технологии определяет практически все параметры опасного предприятия, перечисленные на рис. 4, при этом конечным результатом применения любой технологии является «производительность по выпускаемой продукции».

В территориальном отношении промышленное предприятие занимает определенное пространство, используя земельные и природные ресурсы. В техническом отношении предприятие состоит из промышленных объектов, использующих различную энергоемкую технику и оборудование. В ориентационном плане работа предприятия обеспечена единством технологического процесса и производственного цикла при участии производственного персонала. Территория опасного предприятия определяет такие параметры, как его площадь, в т.ч. площадь СЗЗ, расстояние до «третьих лиц».

На потенциально опасном предприятии существуют определенные качественные состояния, по которым можно судить о возможности его перехода в опасное состояние.

Персонал характеризуется такими качественными признаками, как «стаж и опыт работы», «квалификация», «профессионализм». Они являются важными составляющими при анализе опасности предприятия, т.к. влияют на поведение персонала в опасной или критической ситуации или на провоцирование возникновения самой ситуации.

Эти качественные признаки можно определять некоторыми событиями, которыми как индикаторами можно оценивать риск того или иного производства. Так качества персонала, наряду и в тесном взаимодействии с остальными качествами (в т.ч. человеко-машинной системы), влияют на вероятность или интенсивность возникновения всех опасных событий, представленных на рис. 4.

Реализация связи «События ↔ Качества» выражается определенным риском – вероятностью нанесения ущерба с учетом его тяжести [1]. Аналогичным образом существует связь «Параметры ↔ Свойства».

Например, вероятность возникновения аварии связана с частотой (интенсивностью при показательном распределении):

- допускаемых ошибок персонала, которая определяется стажем, опытом, квалификацией, профессионализмом и культурой производства (нарушения правил безопасности и т.п. – человеческий фактор)
- отказов оборудования, определяющей износ основных фондов.

Риск аварии – мера опасности, характеризующая возможность возникновения аварии на опасном производственном объекте и тяжесть ее последствий [10]:

$$R = \sum_{i=1}^n P(B_i) \cdot y_i, \quad (1)$$

где $P(B_i)$ – вероятность причинения ущерба y_i при эксплуатации ОПО.

Оценка риска аварии – процесс определения вероятности (или ожидаемой частоты) и степени тяжести последствий аварий для здоровья человека, имущества и/или окружающей природной среды [10].

При рассмотрении рисков событий (рис. 4) определены следующие основные моменты. Составляющими риска аварии являются технический, индивидуальный, коллективный, территориальный, социальный риски и математическое ожидание величины ущерба от аварии. Вероятность аварий с учетом вероятности спровоцированного ими травматизма и негативного воздействия на окружающую среду определяет также риски травматизма и негативного воздействия на окружающую среду от аварий. При этом они являются составной частью общих рисков травматизма и негативного воздействия на окружающую среду, поскольку их причиной далеко не всегда могут оказаться аварии. В свою очередь последние являются составляющими риска промышленного предприятия (рис. 5).

Планировка предприятия наряду с видом производства (рис. 4) определяет вероятность индивидуума оказаться в зоне влияния негативных факторов аварии, определяя его индивидуальный риск гибели или травматизма от аварии. Для двух и более индивидуумов риск гибели или травматизма от аварии уже становится коллективным [1], составляя, наряду с другими рисками добровольный (профессиональный) риск персонала, который, в свою очередь, является составляющей частью риска промышленного предприятия, или принудительный риск для «третьих лиц» – населения и др.

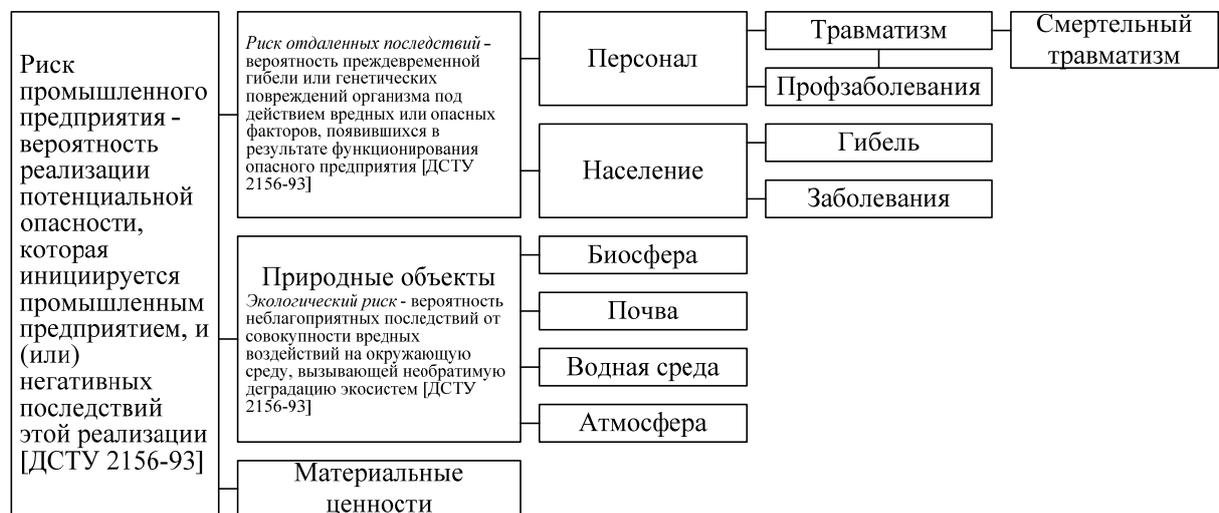
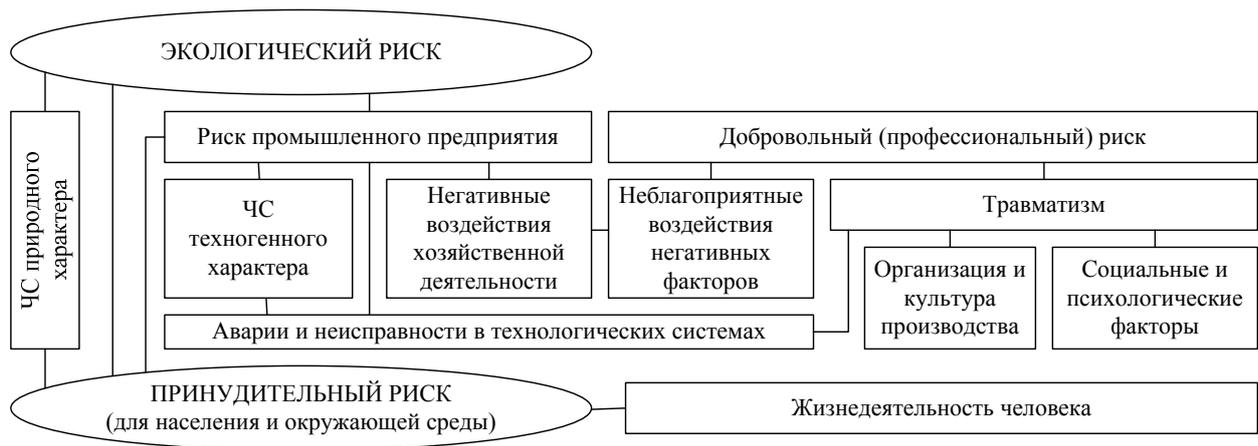


Рисунок 5. – Риск промышленного предприятия

На сегодняшний день оценка риска промышленного предприятия производится частично, в узкой специализации: необходимость выполнения количественной оценки рисков законодательно закреплена только для объектов повышенной опасности 1-го класса опасности. При этом разработанные декларации практически не учитывают воздействие на окружающую среду при возникновении аварий, отсутствуют требования анализа таких воздействий и методики оценки экологических рисков.

Оценка профессиональных рисков входит в задачи СУОТ, однако реализуется на практике только за рубежом, а методология [11] учитывает множество факторов типа наличия инструкций и журналов, однако не учитывает коллективного риска гибели или травмирования персонала при авариях, и др. факторы влияния, представленные на рис. 4.

Проследим возможное влияние «параметров», представленных на рис. 4, на «события». Учет факторов влияния на риск промышленной безопасности предприятия можно реализовать с помощью введения определенных индексов по каждому фактору. Исходя из совокупного влияния факторов друг на друга возможно определить общий показатель (индекс) опасности и безопасности предприятия и отрасли в целом.

Для реализации расчета по каждому индексу воспользуемся методикой [12]:

$$I = \frac{\text{фактическое_значение} - \text{минимальное_значение}}{\text{максимальное_значение} - \text{минимальное_значение}}, \quad (2)$$

где I – индекс по определенному параметру.

С учетом наличия собранных статистических данных по металлургическим и коксохимическим предприятиям Донецкой области был реализован расчет индексов таких «событий», как интенсивность возникновения аварий, смертельного травматизма и травматизма без летального исхода в результате аварий, а также совокупного показателя «аварийности-травматизма» (среднее арифметическое индексов) за 1995÷2007г.г. Результаты расчетов в виде диаграмм приведены на рис. 6.

Путем сравнения показателей можно сравнивать уровень опасности предприятия с общим показателем по отрасли. Например, в 1998г. для Авдеевского коксохимического завода, на котором в результате произошедшей аварии в коксовом цехе погиб 1 и травмировано 24 работника, индекс опасности предприятия составил 0,61, в то время как по отрасли он составлял в 1998г. – 0,26, а в период 1995÷2007 – 0,21.

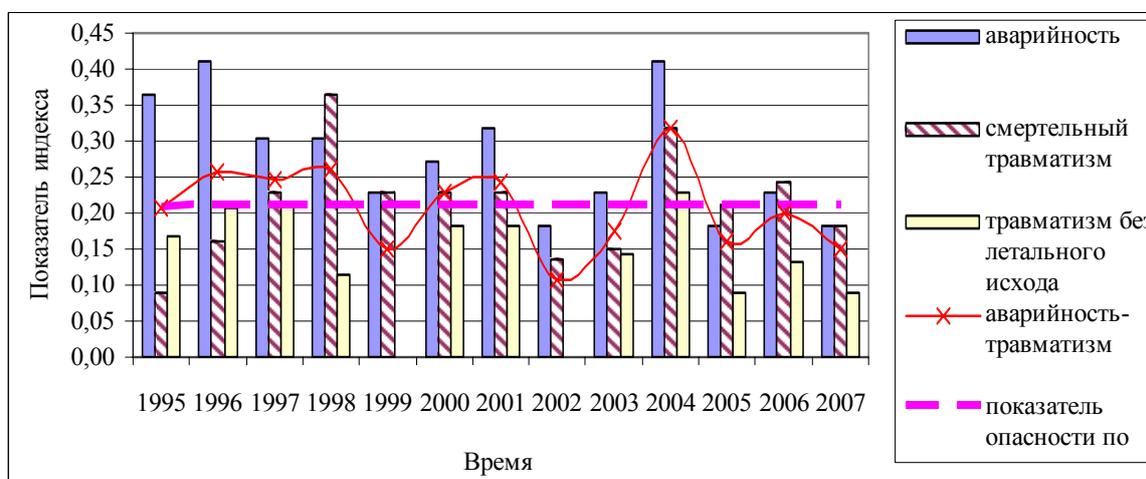


Рисунок 6. – Динамика изменения показателей (индексов) аварийности и травматизма на предприятиях металлургической отрасли Донецкой области

Значение отраслевого индекса «аварийности-травматизма» 0,21 (рис. 6) можно использовать как опорную точку отсчета для оценки опасности предприятий отрасли, приняв ее за 1 (100%). Исходя из этого, опасность Авдеевского коксохимического завода в 1998г. по отношению к отраслевому индексу была превышена на 93,5%.

Статистический анализ полученных индексов подтверждает наличие зависимости ава-

рийности от травматизма (рис. 6). Определена полиномиальная регрессионная зависимость со степенью точности модельного описания процесса R -квадрат = 0,9, что говорит о высокой точности аппроксимации (модель хорошо описывает явление). Достоверность по уровню значимости 0,004 указывает на значимость модели. Регрессионная зависимость может быть выражена формулой:

$$I_A = 0,43 - 2,53 \cdot I_{CT} + 5,54 \cdot I_{CT}^2 - 0,04 \cdot I_T + 4,69 \cdot I_T^2, \quad (3)$$

где I_A – индекс «аварийности»;

I_{CT} – индекс «смертельного травматизма»;

I_T – индекс «травматизма без летального исхода».

Проследим изменение совокупных индексов опасности предприятий по «событиям» в зависимости от факторов опасности, определяющих «параметры» опасности (см. рис. 4). В

результате сбора информации о таких «параметрах», как численность персонала, время существования, печной фонд (количество доменных печей или коксовых батарей), количество опасных веществ, расстояние до «третьих лиц», производительность по выпускаемой продукции (чугуну и коксу) и площади предприятий по описанной выше методике были определены индексы по каждому «параметру». Результаты представлены на рис. 7.

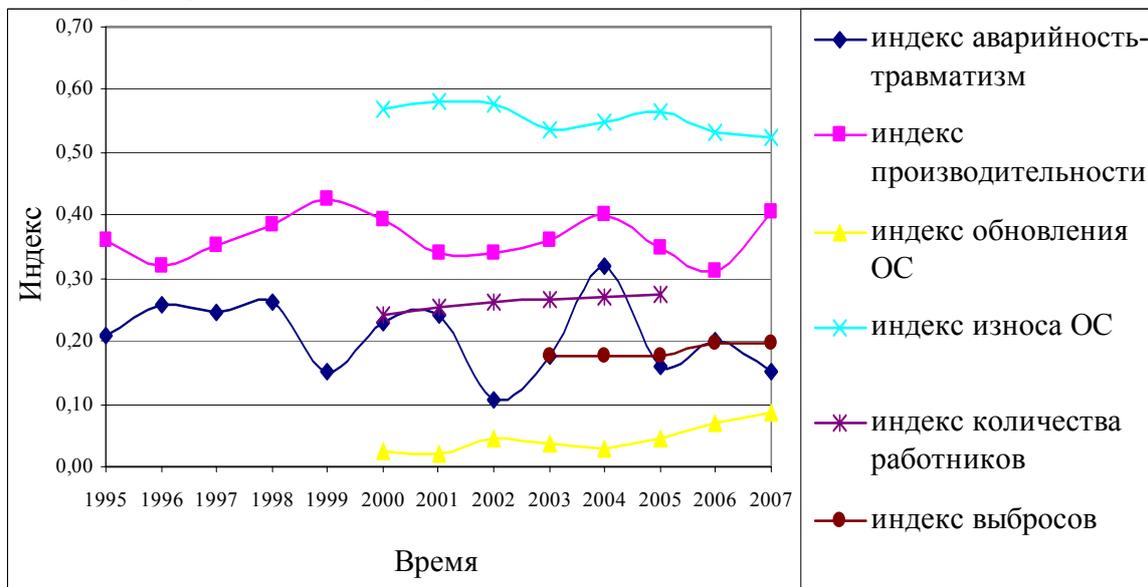


Рисунок 7. – Динамика изменения показателей (индексов) на предприятиях металлургической отрасли Донецкой области

При помощи статистической обработки данных исследовалась регрессионная зависимость совокупного показателя «аварийности-травматизма» (по «событиям») от индексов таких изменяющихся во времени «параметров», как среднегодовая производительность, обновление и износ основных средств, количество работников, количество выбросов веществ. Получена полиномиальная регрессионная зависимость со степенью точности модельного описания процесса R -квадрат = 1, что говорит о высокой точности аппроксимации. Достоверность по уровню значимости 0 указывает на значимость модели. Предиктором (определяющей переменной) модели выявлен «параметр» (индекс) производительности. Регрессионная зависимость может быть выражена формулой:

$$I_{AT} = 5,0218 - 28,7905 \cdot I_p + 42,5848 \cdot I_p^2, \quad (4)$$

где I_{AT} – совокупный показатель «аварийности-травматизма»;

I_p – индекс «производительности».

Показатель (индекс) безопасности можно принять равным:

$$I_6 = 1 - I_o, \quad (5)$$

где I_6 – показатель «безопасности»;

I_o – показатель «опасности».

Для предприятий металлургической отрасли Донецкой области показатель безопасности $I_6 = 1 - 0,21 = 0,79$. В данный индекс уже можно закладывать наличие инструкций, журналов [11] и др. мероприятий по охране труда и промышленной безопасности, а значение показателя может четко определять эффективность функционирования СУОТ на предприятии.

К сожалению, автор данной статьи не располагал статистическими данными по всем выше обозначенным факторам («параметрам» – рис. 4), влияющим на опасность предприятия. Количество выбросов веществ в окружающую среду учтено в период 2003÷2007, износа и обновления основных средств – в период 2000÷2007, количества работников – в период 2000÷2005, не учтено количество всего функционирующего в определенный год опасного оборудования (рис. 7). Поэтому рассчитанные показатели (индексы) не являются окончательными. Однако даже по имеющимся данным прослежена зависимость аварийности и травматизма от определенных «параметров», и при

наличии достоверной информации возможно более четкое представление об опасности предприятий и отрасли в целом для принятия дополнительных мер по улучшению состояния безопасности.

Проследим зависимость индекса производительности от вероятности возникновения нежелательных событий для каждого из рассматриваемых предприятий металлургической области за определенный период времени (13 лет – с 1995 по 2007 г.г.).

Статистическая обработка данных позволила получить регрессионные зависимости индекса производительности от вероятностей возникновения аварий, вызванного ими смертельного травматизма и травматизма без летальных последствий при достаточной точности аппроксимации и значимости моделей.

Зависимость вероятности возникновения аварий от индекса производительности может быть выражена следующей формулой:

$$NobrFa = -1,2186 + 0,45 \cdot I_p, \quad (6)$$

где $NobrFa$ – инверсная функция для нормального распределения вероятности возникновения аварий.

Зависимость вероятности возникновения смертельного травматизма при авариях от индекса производительности может быть выражена следующей формулой:

$$NobrFs = -3,5528 - 0,3228 \cdot I_p, \quad (7)$$

где $NobrFs$ – инверсная функция для нормального распределения вероятности смертельного травматизма при возникновении аварии.

Зависимость вероятности возникновения травматизма без летальных последствий при авариях от индекса производительности может быть выражена следующей формулой:

$$NobrFt = -3,1344 - 0,759 \cdot I_p, \quad (8)$$

где $NobrFt$ – инверсная функция для нормального распределения вероятности травматизма без летальных последствий при возникновении аварии.

Графическое отображение зависимости производительности от вероятностей возникновения нежелательных событий представлено на рис. 8.

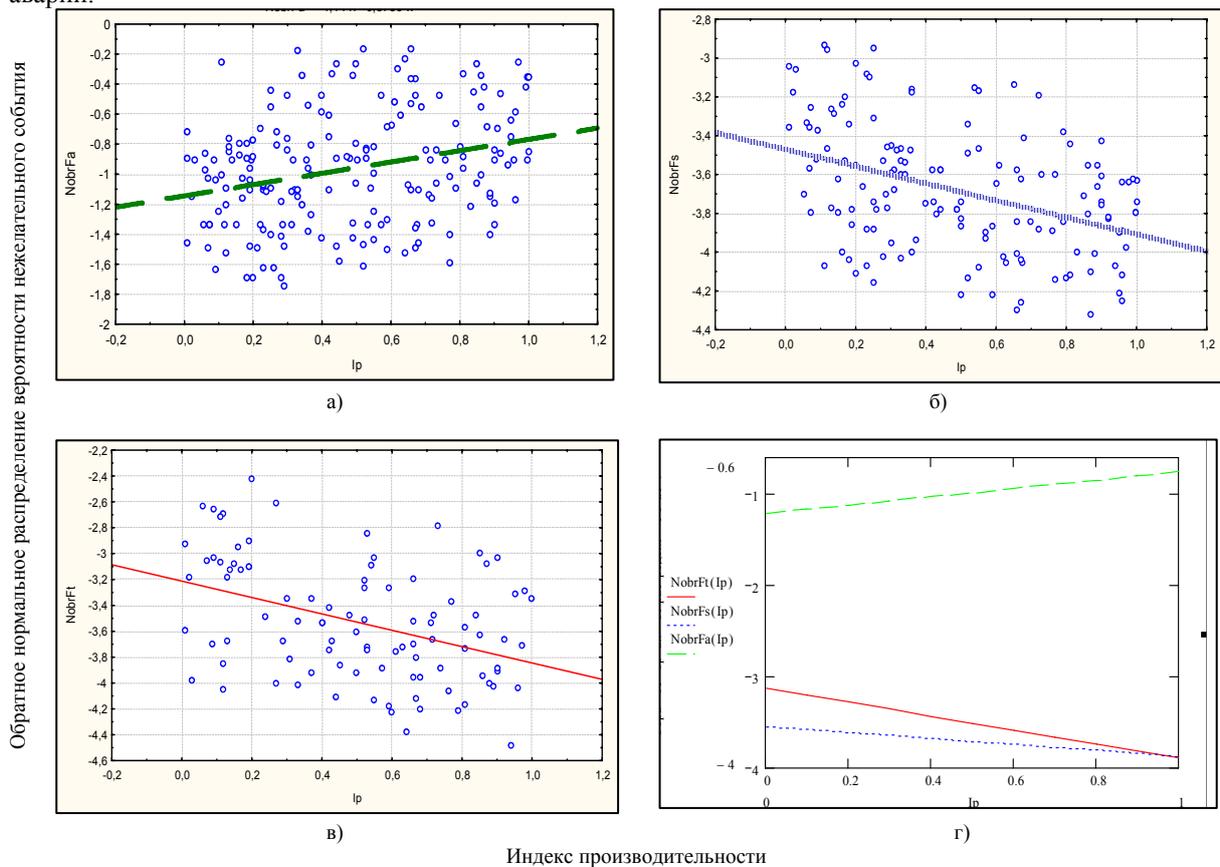


Рисунок 8. – Зависимости производительности от вероятностей возникновения нежелательных событий на предприятиях металлургической отрасли Донецкой области: а) возникновения аварий; б) смертельного производственного травматизма, возникшего в результате аварий; в) производственного травматизма без летального исхода, возникшего в результате аварий; г) обобщенные графики зависимостей

Анализ графиков зависимостей показывает линейную возрастающую зависимость вероятности возникновения аварий от производительности. При этом анализ зависимости количества аварий от производительности также указывает на линейную возрастающую зависимость, т.е. с ростом производительности увеличивается количество возникающих аварий.

Если проследить зависимость вероятностей смертельного травматизма и травматизма без летальных последствий, вызванных возникновением аварий, от производительности, наблюдается линейная убывающая зависимость. При этом анализ зависимости количества травмируемых при авариях от производительности указывает на линейную возрастающую зависимость. В данном случае прямая убывающая зависимость отражает более реальную картину, т.к. численное значение вероятности травматизма приведено к общему количеству персонала на предприятии. Т.е. при увеличении производительности на единицу персонала более крупного предприятия приходится меньшее количество травмируемых, чем для менее крупного завода. В итоге укрупнение производства приводит к уменьшению количества травмируемых при авариях. Также данная зависимость объясняется тем, что опыт персонала крупных производств в большей степени обеспечивает его готовность к локализации и ликвидации аварийных ситуаций и аварий.

Вывод

Системный анализ опасных воздействий предприятия применим не только для аварий, но и для оценки риска профессиональной деятельности в целом, равно как и для оценки риска негативных воздействий на окружающую среду.

Поскольку при расчете индексов опасности учтены факторы, которые могут влиять на масштабы причиненного предприятием ущерба, данные индексы теоретически могут быть применены при расчете риска аварий с учетом их последствий.

Без учета всех факторов и составляющих невозможно установить риск промышленного предприятия для возможности его оценки и управления рисками.

Анализ статистических и экспериментальных данных подтверждает реалии более точного прогнозирования аварийности на производстве с помощью экспертных методов. Пока не появится возможность регистрации и централизованной обработки всех аварийных случаев и отклонений от регламентируемых параметров, экспертный анализ будет оставаться единственным инструментом оценки опасно-

стей. Совершенствование методологии экспертной оценки безопасности производственных систем в настоящее время – одна из главных задач экспертов в области технологической безопасности.

Литература

1. ДСТУ 2293-99. Охорона праці. Терміни та визначення основних понять.
2. Лесенко Г. Професійний ризик виробництва та виробничий травматизм // Охорона праці. – 2003. – №4. – С. 36 – 38.
3. Азаров Н.И., Давидюк О.В., Лисанов М.В. Предупреждение промышленных аварий на основе директив Севезо //Безопасность труда в промышленности – 2006. – №12. – С. 42 – 47.
4. Система попередження нещасних випадків на виробництві та професійних захворювань. Методичний посібник ННДІОП. 2005 р. – 64 с.
5. Аверин Г.В., Москалец В.М. Закономерности опасных производственных процессов в техносфере Украины //Вестник Донецкого университета. Серия А. Естественные науки – 2007. – №1. – С. 378 – 383.
6. ГОСТ Р 51901.1-2002 Менеджмент риска. Анализ риска технологических систем.
7. Белов П.Г. Системный анализ и моделирование опасных процессов в техносфере: Учеб. пособие для студ. высш. учеб. заведений / Петр Григорьевич Белов. – М.: Издательский центр «Академия», 2003. – 512 с.
8. Павлов В.В. Системы человек – машина: проблемы и синтез: – К.: Вища шк. Головное изд-во, 1987. – 55 с.
9. Л. фон Берталанфи. Общая теория систем – критический обзор (L. von Bertalanffy, General System Theory – A Critical Review, «General Systems», vol. VII, 1962, p. 1 – 20. Перевод Н.С. Юлиной/), <http://macroevolution.narod.ru/bertalanfi.htm>.
10. Методические указания по проведению анализа риска опасных производственных объектов: РД 03-418-01: утв. Госгортехнадзором России Постановлением от 10.07.2001 №30: введ. в действие с 01.09.01.
11. Лесенко Г. Підготування документів для оцінки ступеню професійного ризику виробництва // Охорона праці. – 2004. – №5. – С. 39 – 40.
12. Доклад о развитии человека 2006. Что кроется за нехваткой воды: власть, бедность и глобальный кризис водных ресурсов / Пер. с англ. – М.: Весь Мир, 2006. – 440 с.

Мониторинг и анализ данных в процессе управления водоснабжением города Донецка

Романчук С.М.

Донецкий национальный университет,

СКТБ «Турбулентность»

romanchuksm@rambler.ru

Abstract

Romanchuk S. "Monitoring and data analysis in the process of Donetsk water supply management" This paper gives the characteristic of data monitoring system in industrial control city water supply, operational measurement instruments, data transfer systems and control modes. Methods for monitored data processing and mining in city water supply databases are proposed.

Keywords: monitoring, data mining, city water supply systems.

Введение

Вода имеет важнейшее значение для здоровья и благополучия населения, она также необходима для ведения сельского хозяйства и осуществления других видов хозяйственной деятельности человека. Безопасный и устойчивый доступ к воде – в широком смысле слова обеспечение водной безопасности – составляет одно из главных условий человеческого развития [1].

Ежегодно в атмосферу Земли выбрасываются миллионы тонн углекислого газа, что приводит к глобальному изменению климата. В свою очередь климатические изменения несут потенциальную опасность снижения уровня грунтовых вод и нарушения водоснабжения во многих регионах планеты.

Согласно прогнозам повышение среднегодовых температур на юго-востоке Европы к 2050 году может составить $1,4 \div 2,2^\circ\text{C}$. К 2080 году региональное потепление в этом районе может привести к снижению количества среднегодовых осадков примерно на $3 \div 5\%$, при этом ожидается увеличение осадков зимой и сокращение их летом.

Климатические изменения оказывают значительные воздействия на водные ресурсы. За последние десятилетия сток рек в Европе существенно сократился летом и увеличился зимой. По прогнозам годовой сток рек в юго-восточной части Европы уменьшится к 2070 году на $10\text{--}25\%$, что приведет, по всей видимости, к дефициту водных ресурсов.

В свою очередь, по прогнозам ученых в течение следующих 40 лет численность городского населения Земли должна увеличиться вдвое, при этом потребление энергии муниципальными компаниями, обеспечивающими водоснабжение и водоотведение в городах, также возрастет как минимум в два раза. В настоящее время сети централизованного водоснабжения охватывают только половину городского населения Земли. В связи ростом численности населения в 2010

году среднегодовое количество возобновляемой воды в мире, приходящееся на одного человека, снизилось на 45 процентов по сравнению с 1970 годом. По мере того, как численность населения будет неуклонно расти, водные ресурсы Земли также будут неумолимо истощаться [1].

Все это в будущем может привести к росту во всем мире стоимости воды и повышению энергоемкости и капиталоемкости процесса водоснабжения. По прогнозам специалистов общее мировое потребление электроэнергии в секторе водоснабжения и очистки сточных вод возрастет на 33% в течение следующих 20 лет.

Известно, что до 7-ми процентов всей энергии, потребляемой мировым сообществом, используется для подачи и очистки воды с целью обеспечения нужд жителей городов и промышленности. Энергетическое потребление большинства водохозяйственных систем во всем мире можно сократить, по крайней мере, на 25 процентов за счет осуществления экономически выгодных мероприятий по повышению эффективности систем водоподдачи и водораспределения [2].

Как отмечает Альянсом за сбережение энергии¹, подавляющее большинство городских водораспределительных и канализационных компаний во всем мире не принимают никаких мер по снижению потребления энергии. Очень часто руководство этих компаний не обладает необходимым запасом технических знаний и средств для того, чтобы реализовать многочисленные потенциальные возможности экономии энергии и воды.

Во многих случаях не хватает необходимого контрольно-измерительного оборудования для мониторинга показателей и характеристик.

¹ Alliance to Save Energy – коалиция лидеров деловых и правительственных кругов, природоохранных и потребительских организаций, выступающих за эффективное и экологически чистое использование энергии во всем мире в интересах потребителей, окружающей среды, экономики и безопасности / Web: www.ase.org

Практика показывает, что создание программно-технических управляющих систем для реализации современных технологий энергосбережения требует значительных затрат средств, в связи с чем многие компании откладывают реализацию подобных проектов.

В других случаях отсутствуют службы и группы энергоменеджмента в компаниях. Тенденция, когда низкая эффективность работы систем перекладывается в виде дополнительной финансовой нагрузки на потребителя, как ни странно, сегодня преобладает во многих компаниях. Тем не менее, в ряде крупных муниципальных компаний мира существуют примеры эффективного менеджмента в области управления энергией и ресурсами.

Специалистами отмечается, что решающими условиями эффективной работы является обеспечение водораспределительных и водоподающих систем средствами для измерения и контроля параметров энерго- и водопотребления, обучение персонала методам эффективного использования энергии, а также наличие необходимых инвестиций в запланированные проекты. Установка контрольно-измерительного оборудования и систем мониторинга режимов работы позволяет снизить расходы на энергоснабжение на 10 процентов только благодаря изменению привычных подходов и повышению уровня технического обслуживания.

Мониторинг параметров режимов работы систем в течение их эксплуатации является превосходным способом оценки выполнения мероприятий, направленных на повышение эффективности использования энергии [2]. Основной первоначальной задачей системы мониторинга крупной компании является внедрение технологий контроля и анализа данных в масштабе всего предприятия, включая средства измерения и передачи данных, компьютеры, программные средства, базы данных и генераторы отчетов. После создания инфраструктуры системы мониторинга можно переходить к анализу данных и выполнению работ по целенаправленной оптимизации систем водоснабжения.

Современные системы мониторинга являются важной составной частью общей системы энергоменеджмента многих крупных предприятий, обеспечивающих водоснабжение городов и населенных пунктов, так как позволяют вывести работу предприятий на качественно новый технологический уровень.

Важным фактором энергосбережения является своевременная реконструкция объектов водоснабжения на фоне изменившихся условий водопотребления, а также предвидение изменений, которые могут возникнуть в ближайшем будущем.

Прогнозы формирования водных ресурсов Донецкого региона

Донецкая область является одним из самых малообеспеченных пресной водой регионов Украины.

В регионе существует острая проблема дефицита качественных пресных вод для хозяйственно-питьевого водоснабжения населения, сельского хозяйства и перерабатывающей промышленности.

Общий сток воды рек региона колеблется в пределах $1,5 \div 2,0$ км³/год. В современных условиях режим практически всех рек в области изменен за счет создания искусственных водоемов – ставков и водохранилищ. Всего в области создано 157 водохранилищ, из них одно с полным объемом 162,0 млн. м³ воды, 15 – с объемом 427,8 млн. м³, остальные – 285,7 млн. м³ воды [3, 4, 5].

В целом водообеспеченность на одного жителя области составляет 180 м³, что в 5 раз меньше, чем в среднем по Украине. Бытовое потребление воды в расчете на одного человека за последние 18 лет уменьшилось с 135 м³ в 1990 году до 58 м³ в 2008 году.

По городу Донецку забор воды из близлежащих природных водных объектов осуществляется в количестве 61 млн. м³. Всего с учетом воды поставляемой по каналу «Северский Донец – Донбасс», потребление воды достигает 113,2 млн. м³. За последние девять лет эта цифра снизилась на 22 %. В свою очередь водоотведение по городу достигает 147,5 млн. м³. Донецк использует на хозяйственно-бытовые цели свежую воду в количестве 78,8 м³/чел. После городов Мариуполь и Селидово город Донецк по этому показателю находится на третьем месте в области [5].

Прогнозы показывают, что к 2020 году потребление воды по городу Донецку может снизиться еще на $20 \div 25$ % и составить $110 \div 120$ млн. м³. После 2020 года уровень потребления воды должен стабилизироваться на указанном значении.

На фоне снижения потребления свежей воды большую роль в водоснабжении будут иметь объемы доступных для использования водных ресурсов, которые имеются в регионе.

Сегодня в юго-восточном регионе Украины не наблюдается явно выраженного потепления. Хотя среднегодовые температуры превышают в отдельные годы норму, тенденция эта не является устойчивой. Однако учеными достоверно установлено, что последние десятилетия климат Земли меняется. В мировых масштабах средняя температура воздуха увеличилась на 0,8°C по сравнению с доиндустриальным периодом (1850 – 1919 гг.).

В Европе изменения температуры воздуха более выражены, так как за этот период наблюдается рост примерно на $1,4^{\circ}\text{C}$. В нынешнем веке ожидается повышение средних глобальных температур на $1,8 \div 4,0^{\circ}\text{C}$. На востоке и юге Европы, вероятнее всего, станет существенно теплее. Это на фоне того, что последнее десятилетие в Европе было самым теплым за 150 лет, а 1998 и 2005 годы зарегистрированы как самые теплые периоды за это время.

Согласно долгосрочным прогнозам повышение среднегодовых температур в Украине к 2050 году может составить $1,4 \div 2,2^{\circ}\text{C}$, а к 2080 – 2100 годам соответственно $2,7 \div 4,0^{\circ}\text{C}$. К концу века на территории страны возможно снижение количества среднегодовых осадков примерно на $3 \div 5\%$.

За последние десятилетия сток рек в Европе существенно сократился летом и увеличился зимой. По прогнозам годовой сток рек в Украине уменьшится к 2070 году на $10 \div 25\%$ [7].

Данные наблюдений метеорологической сети свидетельствуют о том, что региональное изменение климата влияет на ряд метеорологических характеристик: изменились сроки образования и продолжительность залегания устойчивого снежного покрова, увеличилась интенсивность неблагоприятных метеорологических явлений, наблюдаются нехарактерные для Донецкого региона экстремально низкие зимние температуры и устойчиво высокие летние в сочетании с повышающимся до 2006 года уровнем осадков.

Динамика среднегодового количества осадков в 1936–2006 гг. в Донецкой области согласно данным [4] показана на рисунке 1. Как видно из полученного тренда, за этот период количество осадков увеличилось с 500 до 615 мм. Однако по цикличности водоносности лет в настоящее время формируется маловодный период, который начался в 2006 г. и продлится до 2030–2040 гг. (см. рис. 2). Это указывает на то, что ближайшие десятилетия на территории региона будут засушливы.

Данные многолетних наблюдений свидетельствуют о наличии тенденции к небольшому изменению климата в Донецкой области. При этом потепление в регионе выражено слабо, в то время как уменьшение количества осадков в ближайшие 10 – 20 лет ожидается существенное. Эти и другие изменения, в том числе снижение стока рек, увеличение числа опасных погодных явлений будут характерны для Донецкой области.

Сценарии возможного изменения климата на территории Донецкой области даны во втором национальном сообщении по вопросам изменения климата в Украине [6] и

следующих документах [7 – 9].

Большинство современных моделей, к сожалению, пока не обладает достаточной региональной детализацией для построения комплексных прогнозов изменения климата для конкретной, небольшой по площади, территории. Поэтому приведенные ниже оценки отражают либо общий тренд для регионов Украины, в целом, либо прогнозы для Донецкой области даются с учетом наблюдаемых и ожидаемых тенденций регионального распределения тех или иных параметров климатической изменчивости в юго-восточной Европе или Западной России.

Как показывают выполненные оценки за последние сто лет северные регионы Украины потеплели в зимние месяцы приблизительно вдвое больше глобального уровня, который совпадает со средним в Украине (примерно $0,58^{\circ}\text{C}$ за 100 лет). В южных и юго-восточных регионах средняя месячная температура летних месяцев почти не изменилась или даже немного снизилась. Это совпадает с данными для Донецкой области. Таким образом, по мере повышения температуры воздуха в северных регионах Украины и России, в Донецкой области будет наблюдаться по крайней мере средний тренд роста температуры воздуха характерный для Украины – $0,4 \div 0,6^{\circ}\text{C}$ за сто лет. Поэтому на территории области к середине нынешнего столетия рост среднегодовой температуры воздуха будет совпадать со средним глобальным трендом ($0,5^{\circ}\text{C}$) или будет чуть ниже его.

Одним из важнейших экологических последствий глобального потепления, имеющих социально-экономическую значимость, является трансформация поля интенсивности атмосферных осадков в регионе. Южные регионы Украины (особенно юго-восточные области и Крым) относятся к зоне недостаточного увлажнения. Исследования [6] показывают, что потепление в регионе до $1 \div 2^{\circ}\text{C}$ является чрезвычайно благоприятным для экономики Украины, так как оно выравнивает поле годового количества атмосферных осадков на территории страны. В юго-восточных регионах годовое количество осадков повышается на $10 \div 15\%$, а в северо-западных – снижается на $5 \div 10\%$.

В настоящее время в Украине особенности циркуляции атмосферы и влияние разных местных факторов приводят к резкому общему снижению средней годовой интенсивности осадков на территории.

Среднее годовое количество атмосферных осадков в Украине равняется примерно $580 \div 600$ мм/год, что на $1/3$ меньше среднего значения уровня осадков для этого широтного пояса Земли.

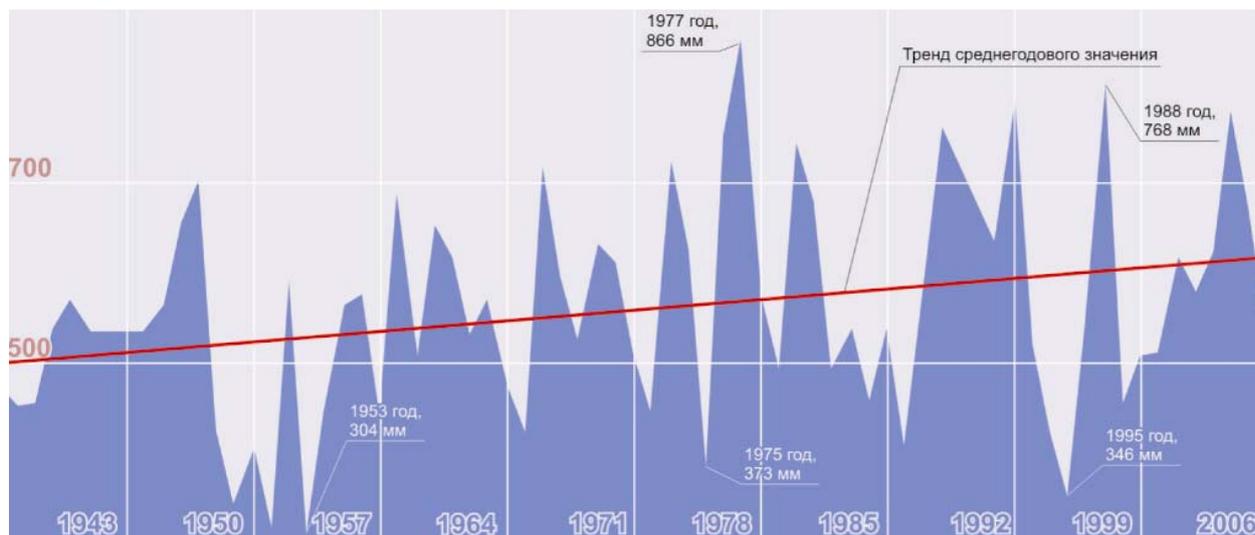


Рисунок 1. – Динамика среднегодового количества осадков в Донецкой области в 1936 – 2006 годах



Рисунок 2. – График изменения накопления осадков по данным метеостанций региона

За последние 100 лет в тех регионах, где годовое количество осадков было малым (юго-восточные области, т.е. зона недостаточного увлажнения), оно существенным образом увеличилось, а там, где оно было относительно высоким (северо-западные области, т.е. зона чрезмерного увлажнения) – снизилось.

Установленный эффект трансформации поля годового количества осадков в Украине под влиянием глобального потепления является социально значимым. Однако увеличение роста количества осадков будет сдерживаться цикличностью водоносности, которая с 2006 года начинает уменьшаться. После 2035 – 2040 годов на территории области возможен рост осадков и это может благоприятно сказаться на экономике области. Поэтому лишь к середине XXI века проявится более-менее определенная

тенденция в изменении режима осадков. Наибольшее их увеличение ожидается зимой. Менее четкая картина дается на летний период. Для Донецкой области увеличение количества осадков в холодное время года может составить $15 \div 20\%$ по сравнению с 1970 – 2000 гг., а в летнее время – $5 \div 10\%$.

По прогнозам Укргидрометеоцентра и Росгидромета, уже к 2015 – 2020 году в юго-восточной части Европы ожидается увеличение запасов водных ресурсов на $5 \div 10\%$, а рост водообеспеченности на $10 \div 15\%$. Это приведет к увеличению зимнего и летнего стока рек на $5 \div 20\%$.

Таким образом, в Донецком регионе в перспективе до 2050 года не должно наблюдаться резкого изменения запасов водных ресурсов, возможно даже небольшое

увеличение этих запасов. На фоне снижения потребления свежей воды это может положительно сказаться на деятельности водоснабжающих предприятий. Однако после 2050 года ситуация может резко измениться.

Краткая характеристика объекта автоматизации и системы мониторинга

В городе Донецке работы по созданию эффективной системы мониторинга городской сети водоподачи и водораспределения ведутся с 2004 года. Сейчас водоснабжение города обеспечивается предприятием КП «Донецкгорводоканал». Объем подачи воды для города составляет около 510 тыс. м³/сут. На балансе КП «Донецкгорводоканал» находятся:

- 9 водопроводных узлов (ВУ), общей проектной мощностью 1136 м³/сут.;
- 125 подкачивающих насосных станций (ПНС);
- 3114 км водопроводных сетей;
- 1400 км канализационных сетей;
- Донецкие очистительные сооружения, производительностью 500 тыс. м³/сут.;
- 17 канализационных насосных станций (КНС).

Водопроводные узлы и ПНС относятся к числу наиболее энергоемких технологических объектов в коммунальном хозяйстве. Годовое потребление электроэнергии предприятием «Донецкгорводоканал» достигает 80 млн. кВт·час при общей мощности оборудования 11175 кВт.

В 2004–2009 годах для снижения потребления энергии на предприятии проведен целый ряд мероприятий по реконструкции и модернизации производственных объектов за счет значительных капиталовложений. В качестве первоочередных мероприятий произведена замена насосных агрегатов на водопроводных узлах, подкачивающих насосных станциях и в канализационном хозяйстве. На водопроводных узлах и КНС был установлен 21 преобразователь частоты большой мощности и модернизировано 29 насосов. На подкачивающих насосных станциях установлено 69 преобразователей частоты и проведена замена 76 насосных агрегатов. Это позволило более чем на четверть уменьшить энергоемкость основного оборудования.

Одновременно с модернизацией основного оборудования велось создание автоматизированной системы мониторинга. В этот период основные технологические объекты были оснащены датчиками, исполнительными механизмами и другой аппаратурой, которые позволяют реализовать следующий комплекс

функций контроля и управления режимами работы технологических систем:

- сбор и первичная обработка технологической информации, которая поступает от датчиков и первичных преобразователей;
- контроль основных параметров технологических процессов;
- дистанционное управление процессами из центрального диспетчерского пункта, а также автоматическое управление исполнительными механизмами на локальном уровне на основе оперативного анализа собранной технологической информации;
- визуализация и регистрация информации о технологических процессах;
- выявление, регистрация и сигнализация в процессе возникновения нерасчетных эксплуатационных режимов;
- распознавание и регистрация аварийных ситуаций.

Система мониторинга и управления водоснабжением города Донецка состоит из следующих подсистем:

- геоинформационная система (ГИС);
- система сбора и передачи информации с удаленных объектов;
- система дистанционного управления технологическим оборудованием.

На основе геоинформационной системы был создан единый программный комплекс инвентаризации сетей и расчета гидравлических режимов. Важным этапом развития системы мониторинга КП «Донецкгорводоканал» явилось внедрение системы сбора и передачи информации с удаленных объектов с использованием радиоканала и GSM-модемов. На текущий момент данная система охватывает 138 объектов: все водопроводные узлы, 86% ПНС и целый ряд контрольных точек (КТ) на водопроводных сетях. В процессе мониторинга контролируются расход воды и давление по напорным трубопроводам, уровни воды в приемных резервуарах, потребляемый насосными агрегатами ток, потребленная объектами электроэнергия и др.

В качестве источников информации используются следующие контрольно-измерительные приборы:

- ультразвуковые измерители расхода питьевой воды и сточных вод;
- водомеры с импульсным выходом;
- датчики абсолютного и избыточного давления;
- датчики уровня ультразвуковые и гидростатические;
- счетчики электроэнергии.

Вся информация о технологических параметрах по радиоканалу или с помощью GSM-модемов передается на центральный

диспетчерский пункт (ЦДП) – в базу данных эксплуатируемой ГИС. Пользуясь запросами к серверной части и к базе данных, диспетчер ЦДП и диспетчера районных служб водоканализационных систем (ВКС) могут контролировать в реальном времени обстановку на водопроводных и канализационных сетях, водопроводных узлах и канализационных насосных станциях города. Программа предоставляет пользователю удобный интерфейс для работы и отображает информацию в понятной и удобной форме.

Система мониторинга и управления технологическими режимами является трехуровневой. Верхний уровень системы создан в виде центрального диспетчерского пункта (ЦДП). В состав ЦДП входит:

- подсистема формирования и передачи управляющих сигналов (управляющий компьютер с мнемосхемами узлов, ПНС и районов);
- подсистема анализа и принятия решений (компьютер аналитического отдела с программами ГИС и системой гидравлического моделирования);
- подсистема контроля (46-ти дюймовые настенные мониторы для отображения мнемосхем).

Средний уровень системы представлен локальными диспетчерскими на водопроводных узлах и ПНС. В состав любой локальной диспетчерской входит промышленный компьютер, который обеспечивает поддержку работы диспетчера.

Нижний уровень системы организован на базе промышленных контроллеров, где осуществляется обработка информации и управление в режиме реального времени. Контроллер сбора данных принимает информацию с датчиков, переключателей, преобразователей. Контроллер поддерживает давления управляет частотным преобразователем. Контроллер управления задвижками управляет электроприводами задвижек. Промышленный компьютер и контроллеры объединены в сеть с помощью индустриальной шины и работают под управлением операционной системы реального времени. Алгоритм управления водоснабжением выглядит следующим образом.

Информация о технологических параметрах со всех контрольных точек, ПНС и водопроводных узлов передается на ЦДП. Аналитическая группа ведет анализ эффективности работы сети в текущий момент времени. С помощью программ ГИС и гидравлического моделирования принимаются решения об изменении режимов работы оборудования в случае необходимости. Это реализуется с помощью подсистемы

формирования и передачи управляющих сигналов.

В частности, в текущий момент времени диспетчер из ЦДП может дистанционно управлять задвижкой на приходе и частотным преобразователем на СВУ, частотными преобразователями на 8-ми ПНС. Ведется расширение набора функций управления по целому ряду технологических объектов КП «Донецгорводоканал».

Опытная эксплуатация системы мониторинга и дистанционного управления распределенными объектами системы водоснабжения Киевского района города дала экономию электроэнергии – 18% и экономию воды – 8%.

Существующая на перспективу программа технологической модернизации предприятия предусматривает поэтапное развитие системы мониторинга и управления на все девять районов города. Предполагается, что комплекс внедряемых мероприятий позволит снизить энергетическое потребление системы водоснабжения города на 20%.

Однако, несмотря на успехи в развитии системы мониторинга и управления водоснабжением города, сегодня видны общие методические проблемы, свойственные практически всем системам мониторинга в различных областях человеческой деятельности.

Мониторинг данных в АСУ ТП водоснабжения городов

Кратко основные методические проблемы в области мониторинга систем можно перечислить в виде:

- контрольно-измерительные средства и сети мониторинга;
- базовые критерии и системы показателей для оценки работы объектов;
- методики аудита режимов работы объектов применительно к автоматизированным системам контроля и управления;
- системы анализа данных и оперативного принятия решений.

Качество данных в значительной степени зависит от количества, качества и расположения контрольно-измерительного оборудования. Развитие контрольной сети системы мониторинга представляет собой важную задачу, однако после первого этапа создания такой сети всегда закономерно возникает проблема оптимизации измерительной сети. Создание избыточной измерительной сети мониторинга достаточно дорогостоящее мероприятие как по капитальным, так и по эксплуатационным затратам. Даже минимальная сеть требует создания эксплуатационной группы, обеспечивающей работу оборудования.

Главной задачей при развитии контрольно-измерительной системы является создание сети первичных и вторичных измерительных приборов для контроля давления, расхода воды и электроэнергии. Такая сеть должна обеспечивать измерение количества воды и энергии, поступающей в систему, и расчет количества воды, доставляемой потребителям. В наилучшем варианте контрольно-измерительная система должна охватывать всю водохозяйственную систему города вплоть до мест потребления воды и энергии, однако при этом она должна быть оптимальной по стоимостным параметрам и эксплуатационным затратам.

Как правило, существует несколько типов контрольно-измерительных приборов и средств технологического мониторинга, позволяющих производить однотипные измерения. Поэтому в практической деятельности перед компаниями остро стоит задача выбора оборудования, наиболее подходящего для выполнения определенных видов мониторинга технологических режимов.

В таблице 1 приведен краткий перечень, используемых в КП «Донецкгорводоканал», КИП и средств измерений. Принятые к эксплуатации марки КИП являются следствием практического опыта длительной эксплуатации различных типов оборудования.

Ряд данных о режимах работы оборудования и водораспределительных сетей необходимо получать на основе расчетов с использованием измеряемых параметров. Например, для определения перепадов высот между источником водоснабжения и потребителем, с которыми связаны напорные характеристики сетей, следует иметь данные об измерениях перепадов давления, информацию о геометрических характеристиках участков водопроводных сетей и результаты оценки профиля земной поверхности. Аналогичным образом, необходимо выполнение расчетов для определения скоростных характеристик потоков воды и оценки гидравлического сопротивления трубопроводов.

Важной задачей является правильное определение участков, на которых будут проводиться измерения. Измерение расходов, давлений воды и энергопотребления электродвигателей, как правило, производится вблизи главных насосов ВУ и ПНС с целью оценки их эффективности. На локальном уровне может потребоваться дальнейший анализ характеристик главных насосов для определения оптимальных рабочих режимов. Это возможно путем применения микропроцессорной техники, использования данных измерений и выполнения расчетов. Контроль давления и расхода на участках

трубопроводной сети необходим в узловых точках для анализа эффективности работы водопроводной сети, оценки утечек воды, определения количества воды, подаваемой потребителям, оценки оптимальности совместных режимов работы сетей и насосов и т.д. Средства мониторинга и КИП являются основой АСУ ТП любого предприятия.

Таблица 1. – Измерение параметров технологических процессов в системах водоснабжения

Параметры	Типовые КИП	Принятые марки КИП
Расход воды	Дифференциальные КИП Счетчики расхода Расходомеры объемного типа	Дифманометры ДМ-3583 Ультразвуковые накладные «Акрон-01» Ультразвуковые врезные «Sonokit»
Давление воды	Манометры Сильфоны Диаграммы Пьезорезистивные датчики	Тензодатчики ИД-01
Мощность электродвигателей	Амперметры Вольтметры Измерители коэффициента мощности	Анализатор сети DIRIS A40
Частоты вращения насосов для оценки КПД	Стробоскопические источники света	Тахометр ИП-114
Объемы накопленной воды	Датчики уровня	Ультразвуковые ЭХО-Р-01
Напорные характеристики	Алгоритмические расчеты согласно данным КИП	Автономные измерители давления
Номинальные показатели оборудования для оценки оптимального КПД	Комплекс КИП	«Акрон-01» Тензодатчики ИД-01 Анализатор сети DIRIS A40

Важным фактором при оценке эффективности систем водоснабжения является разработка комплекса показателей и индикаторов, характеризующих водо- и энергопотребление на технологический объектах и предприятии в целом. Выбор и оценка значений таких показателей позволяет определить базовые уровни для последующего сравнения данных показателей с показателями, которые имеют аналогичные объекты, а также контроля количественного изменения их

значений с течением времени. Подобные показатели являются важным инструментом при разработке программ развития предприятия и поэтапной модернизации производства. Контроль показателей использования воды и энергии позволяет получить важную информацию относительно эффективности работы всей системы водоснабжения и реализации конкретных мероприятий по энергосбережению. Показатели эффективности и качества технологических процессов производства должны включаться в технологические регламенты работы оборудования, паспорта оборудования и участков инженерных сетей.

В таблице 2 приведен краткий перечень, используемых показателей и индикаторов для оценки эффективности работы систем водоснабжения и канализации, а также контроля эффективности водо- и энергосбережения.

Частью процесса определения комплекса мероприятий по снижению эксплуатационных расходов является проведение на технологических объектах энергоаудита. Имеется целый ряд руководств по аудиту в системах водоснабжения и канализации [10–15], однако в них недостаточно информации о методах аудита применительно к системам водоснабжения, которые оборудованы автоматизированным системам контроля и управления. Каждое предприятие, использующее АСУ ТП при водоснабжении объектов, в качестве стандарта предприятия должно разработать ведомственную методику аудита режимов работы объектов применительно к автоматизированным системам контроля и управления. Такая методика должна охватывать все оборудование и приборы, которые используются в процессе технологической обработки, подачи и очистки воды и которые входят в АСУ ТП.

После внедрения системы мониторинга практически сразу возникает проблема внедрения максимально эффективной методики использования получаемых данных. Для определения оптимального энергопотребления обычно проводят текущие расчеты, выполняют сравнение полученных данных с паспортными данными производителей оборудования, показателями и индикаторами, принятыми в качестве стандартов предприятия, а также сравнивают данные с наиболее эффективными показателями, достигнутыми на данный момент в отрасли.

Технические средства анализа данных, такие как номограммы и характеристики насосов, программные средства оптимизации и гидродинамических расчетов, относятся к первичным средствам анализа информации.

Эти средства позволяют провести

техническую оценку ВУ, ПНС и КНС, а также отдельных частей системы водоснабжения. Примерами подобных средств являются программные продукты вида [16 – 21].

Таблица 2. – Показатели и индикаторы контроля эффективности работы систем водоснабжения и канализации

Показатели и индикаторы	Единица измерения	Базовые значения
Для всего предприятия в целом		
1. Производственная мощность системы водоснабжения	млн. м ³ /сут	1,136
2. Подано воды в сеть водоснабжения	млн. м ³	137,0
3. Отпущено воды всем потребителям	млн. м ³	74,4
4. Бытовое водопотребление в расчете на душу населения	м ³ /год·чел	48,5
5. Уровень потерь воды в водопроводных сетях	%	45,7
6. Уровень потерь воды в канализационных сетях	%	Данных нет
7. Доля проб, не отвечающих нормам качества питьевой воды, в общем количестве проб	%	0
8. Установленная пропускная способность канализации (очистных сооружений)	тыс. м ³ /сут	475,0
9. Количество отведенных сточных вод	тыс. м ³	67,5
10. Пропущено сточных вод через канализацию (очистные сооружения)	тыс. м ³	96,5
11. Доля загрязненных сточных вод в общем объеме стоков	%	0,89
12. Ежегодный объем потребления электроэнергии	млн. кВт	80,7
13. Энергоемкость: (отношение между годовым потреблением электроэнергии и годовым объемом подачи воды)	кВт·час/м ³	0,59
Для ВУ, ПНС и КНС		
1. Ежегодный объем потребления насосами электроэнергии	млн. кВт·час/мес.	1,644
– ВУ		0,245
– ПНС		4,472
– КНС		
2. Фактический к.п.д насосных систем	%	
– Двигатели		0,9–0,95
– Насосы		0,7–0,8
Для участков водопроводных и канализационных сетей		
1. Уровень потерь воды в водопроводных сетях	%	28,9

Система компьютерного моделирования водопроводных сетей Mike Net [16] представляет собой программный комплекс разработанный компанией DHI Water & Environment. Система Mike Urban – интегрированная моделирующая среда для городских систем водоснабжения и водоотведения с использованием ГИС [16].

В свою очередь система Mike Urban Model Manager содержит три инструмента в одном пакете: ПО для моделирования работы сетей водоснабжения и водоотведения на основе GYS; интегрированный пакет моделирования стоков с помощью SWMM5; интегрированный пакет моделирования сетей водоснабжения с помощью Epanet.

Известными автоматизированными системами с развитыми функциями мониторинга и управления являются созданная ОАО "Уралмонтажавтоматика" АСУ ТП диспетчерского контроля и управления водоснабжения на базе программного комплекса Trace Mode 5.10 [17] и Единая АС диспетчерского контроля и управления городским хозяйством города Москвы.

Следует отметить также разработки компании Ensys Technologies, ряда западных университетов и т.д. [18 – 21].

Программные средства существенным образом автоматизируют технические расчеты и позволяют в процессе накопления информации разработать стандарты предприятий и обновлять информацию в паспортах оборудования и технологических регламентах.

Интеллектуальный анализ данных в АСУ ТП водоснабжения городов

Методы системного и интеллектуального анализа данных используются в АСУ ТП водоснабжения городов пока слабо. Однако создание крупных баз данных, содержащих информацию о режимах работы городских систем водоснабжения, закономерно ставит вопрос о выборе методов интеллектуального анализа данных для изучения постоянно растущих объемов информации.

Известно, что интеллектуальный анализ данных – позволяет выявить скрытые закономерности в больших объемах информации. Буквально за несколько месяцев опытной эксплуатации АСУ ТП водоснабжения города Донецка был накоплен объем информации позволяющий говорить об использовании методов интеллектуального анализа данных.

Данные методы дают возможность в автоматическом режиме получать закономерности, определяющие формирование технологических режимов городских систем водоснабжения. Преимуществом таких

подходов является отказ от использования методов гидравлических и энергетических расчетов, которые требуют большого количества исходных данных, имеющих достаточно высокую погрешность. При этом на смену традиционным методам приходят адаптивные методы, когда простые зависимости с небольшим количеством входных и выходных переменных получают путем обработки больших объемов данных мониторинга режимов работы систем водоснабжения.

На рис. 3 представлен промышленный участок системы водоснабжения города Донецка, на котором осуществлялся сбор данных о технологических режимах работы системы в соответствии с информацией, приведенной в таблице 3.

Расчетные модели ВУ, ПНС и КНС, определяющие напорные характеристики, могут быть заменены простыми регрессионными моделями одного временного ряда относительно другого. Наиболее распространенный метод построения регрессии одного ряда на другой – это метод распределенных лагов [22, 23].

Общая модель распределенных лагов имеет вид:

$$P_2(t) = a_0 \cdot P_1(t) + a_1 \cdot P_1(t-1) + \dots + a_n \cdot P_1(t-n), \quad t = 1, 2, \dots, n \quad (1)$$

где $P_2(t)$ – зависимый ряд наблюдений, $P_1(t)$ – независимый ряд, t – время, n – лаг запаздывания.

Данный метод – это один из распространенных методов системного анализа, имеющий перспективы при установлении закономерностей в базах данных, которые отличаются пространственно-временным распределением.

Основной целью построения модели опытного участка системы водоподачи Киевского района города Донецка является существенное снижение количества исходных данных, которые обладают значительной неопределенностью. Традиционные расчетные методики требуют задания многих параметров: диаметров трубопроводов, коэффициентов гидравлических сопротивлений участков, данных о перепадах высот, скоростных характеристик сетей, данных о местных сопротивлениях и т.д. Вся эта информация применительно к длительно эксплуатирующимся системам водоснабжения обладает невысокой достоверностью и значительной неопределенностью.

Снижение количества исходных данных возможно путем удаления из расчетов наиболее неопределенных участков сетей и представления их моделями, описывающими напорные и расходные характеристики. Это позволяет с высокой достоверностью построить

модель центральной части системы водоподачи, охватывающую сеть, где размещены основные насосные системы водораспределительных узлов и подкачивающих насосных станций, которые потребляют основные объемы энергии.

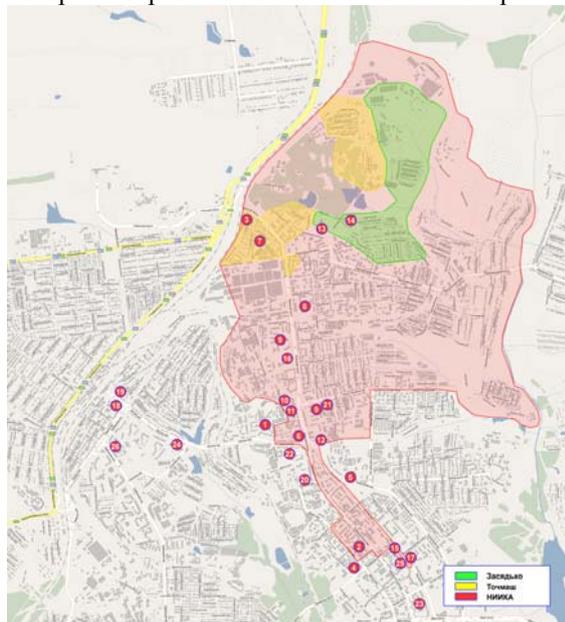


Рисунок 3 – Опытный участок водоснабжения Киевского района города Донецка.

8 – объект системы мониторинга и контроля технологических параметров (таблица 3).

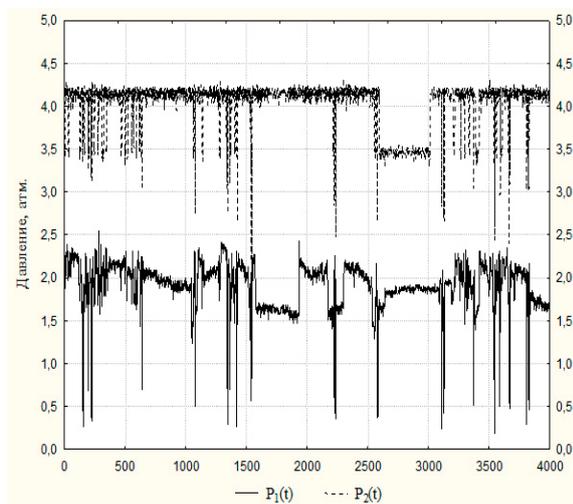


Рисунок 4 – Временные ряды входного и выходного давления для ПНС Квартал 196. Один лаг временного ряда – 10 минут

В таблице 4 для примера приведены модели распределительных лагов для некоторых ПНС, показанных на рис. 4. Модели являются практически функциональными зависимостями, т.к. коэффициенты корреляции достаточно высоки.

Данные зависимости могут быть использованы при разработке программного обеспечения, которое в реальном времени по

Таблица 3. – Измерение параметров технологических процессов в системах водоснабжения

№	Наименование объекта	Адрес	КИП
Водопроводный узел Северный			
14	ПНС м-р Домостроитель	ул. Листопрокатчиков, 13	Два ДД
1	ПНС Квартал 234	ул. Артема, 181б	Два ДД, Акрон, АПЧВН
2	ПНС Квартал 735	ул. Университетская, 94а	Два ДД, Акрон, АПЧВН
3	ПНС ул. Стратонавтов	ул. Стратонавтов, 121	Два ДД, Акрон, АПЧВН
4	ПНС Квартал 203	ул. Р. Люксембург, 103а	Два ДД, Акрон, АПЧВН
5	ПНС м-р Ветковский	ул. Челоскинцев, 275	Два ДД, Акрон, АПЧВН
6	ПНС Квартал Синтетика	пр. Киевский, 2а	Два ДД, Акрон, АПЧВН
7	КТ Башня Точмаш	Точмаш	Один ДД
8	ПНС Квартал 268	пр. Киевский, 55г	Два ДД, Акрон, АПЧВН
9	ПНС Квартал 238	пр. Киевский, 5	Два ДД, Акрон, АПЧВН
10	ПНС Киевский-4	пр. Киевский, 4	Два ДД, Акрон, АПЧВН
11	ПНС Киевский-2	пр. Киевский, 36г	Два ДД, Акрон, АПЧВН
12	ПНС Квартал Дончанка	ул. Университетская, 105	Два ДД, Акрон, АПЧВН
13	КТ Квартал 287	ул. Чапаева, 8а	Один ДД
14	ПНС Взлетный	ул. Взлетная, 11	Два ДД
15	ПНС Квартал 198а	ул. Челоскинцев, 212	Два ДД, Акрон, АПЧВН
16	ПНС м-р Киевский-1	пр. Киевский, 36г	Два ДД, Акрон, АПЧВН
17	ПНС ТП 198	ул. Артема, 151а	Два ДД
18	КТ УЖД, Квартал 438	ул. Артема, 282а	Два ДД
19	КТ Артема 279	ул. Артема, 279	Один ДД
20	ПНС м-р Шахтерский-1	ул. Тренева, 1	Два ДД, Акрон, АПЧВН
21	ПНС Квартал 628	ул. Поповича, 37а	Один ДД
Водопроводный узел Центральный			
22	ПНС м-р Шахтерский-2	ул. Артема, 154а	Два ДД, Акрон, АПЧВН
23	ПНС м-р Артема 102б	ул. Артема, 102б	Два ДД, Акрон, АПЧВН
24	ПНС м-р Привокзальный-2	ул. Артема, 198а	Два ДД, Акрон, АПЧВН
25	ПНС Квартал 196	ул. Артема, 108а	Два ДД, Акрон, АПЧВН
26	ПНС м-р Привокзальный-1	ул. Куйбышева, 246б	Два ДД, Акрон, АПЧВН

Здесь ДД – датчик давления; Акрон-1 – счетчик расхода; АПЧВН – автоматический преобразователь частоты.

данным мониторинга позволяет прогнозировать текущее потребление энергии системой.

Таблица 4. – Параметры модели распределенных лагов для некоторых ПНС города Донецка

Наименование объекта	Вид модели	Коэф-т корреляции
ПНС Квартал 234	$P_2(t) = 0,919P_1(t) + 0,904P_1(t-1)$	0,956
ПНС Квартал 735	$P_2(t) = 0,976P_1(t) + 0,890P_1(t-1)$	0,991
ПНС ул. Стратонавтов	$P_2(t) = 0,919P_1(t) + 0,904P_1(t-1)$	0,989
ПНС м-р Ветковский	$P_2(t) = 0,854 \cdot P_1(t)$	0,990
ПНС Квартал Синтетика	$P_2(t) = 1,056P_1(t) + 0,924P_1(t-1)$	0,995
ПНС Квартал 238	$P_2(t) = 1,755P_1(t-1)$	0,991
ПНС Киевский-4	$P_2(t) = 1,874P_1(t-1)$	0,975
ПНС Киевский-2	$P_2(t) = 1,696P_1(t-1)$	0,986
ПНС Квартал 628	$P_2(t) = 0,919 \cdot P_1(t)$	0,998
ПНС Квартал 196	$P_2(t) = 1,367P_1(t) + 0,713P_1(t-1)$	0,993

Выводы

Таким образом, создание баз данных мониторинга режимов работы городских систем водоснабжения дает возможность использовать методы интеллектуального анализа данных, которые позволяют повысить достоверность прогнозных показателей. Данный путь дает возможность разработать адаптивные алгоритмы для оценки работы систем водоснабжения, которые позволят на объектном и центральном уровне систем вести непрерывную оценку эффективности водораспределения и экономичности работы насосного оборудования.

Литература

1. Доклад о развитии человека 2006. Что кроется за нехваткой воды: Власть, бедность, глобальный кризис водных ресурсов / Пер. с англ. – М.: Весь мир, 2006. – 440 с.
2. Watergy. Возможности эффективного использования энергии и воды в муниципальных водохозяйственных системах / Alliance to Save Energy, Washington, 2002. – 143 с.
3. Доклад о состоянии окружающей природной среды города Донецка в 2006 – 2007 годах / Под ред. А. Лукьянченко. Донецк, 2008. – 112 с.
4. Земля тревоги нашей. По материалам Докладов о состоянии окружающей природной среды в Донецкой области в 2007 - 2008 годах / Под ред. С. Третьякова, Г. Аверина, Донецк, 2009. – 124 с.
5. Статистичний збірник «Довкілля Донеччини 2008» – Донецьк: Гол. Упр. Статистики. 2009. – 177с.
6. Второе национальное сообщение по вопросам изменения климата в Украине. Рамочная конвенция по изменению климата ООН, 2005г.
7. Защита окружающей среды Европы. Четвертая оценка. Европейское агентство по окружающей среде. Копенгаген, 2007.
8. Стратегический прогноз изменений климата Российской Федерации на период до 2010-2015 гг. и их влияния на отрасли экономики России. М.: Росгидромет, 2005.
9. Оценочный доклад об изменениях климата и их последствиях на территории России, М.: Росгидромет, 2009.
10. Water Audits and Leak Detection. – <http://www.waterwiser.org>.
11. Руководство по энергетическому аудиту для систем водоснабжения и канализации. – <http://www.epri.com>.
12. Мониторинг и средства контроля работы насосных систем. – <http://www.oit.doe.gov/bestpractices>.
13. Комплексная система управления качеством энерго и водоснабжения / Awwa Research Foundation.– <http://www.awwarf.com>.
14. Руководящие принципы планирования экономного водопотребления. Документ 832/D-98-001. – <http://www.epa.gov/owm>.
15. Thumann A. Учебник по энергоаудиту / USA, Lilburn: Fairmont Press, 1995 – 444 P.
16. Система компьютерного моделирования водопроводных сетей. – <http://www.volgaltd.ru/software/>.
17. <http://www.oaourma.ru/>.
18. <http://www.ensyst.ru/services/9.php>.
19. Комплекс ПО «Irrisoft» Кассельского университета. – http://www.wizuni-kassel.de/kww/irrisoft/pipe/pipe_i.html.
20. Центр водных систем университета г. Эксетер. – <http://www.ex.ac.uk/WaterSystems/>.
21. Программное обеспечение для гидрологических и гидравлических расчетов Инженерного корпуса США. – <http://www.waterengr.com/>.
22. Боровиков В.П. Ивченко Г.И. Прогнозирование в системе Statistica в среде Windows. М: Финансы и статистика, 1999. – 382 с.
23. Драймз Ф. Распределенные лаги. Проблема выбора и оценивания модели. – М.: Финансы и статистика, 1982.

Обоснование методов моделирования и прогноза динамики качества воды рек регионов с высокой антропогенной нагрузкой

Голубева Л.Г.

Донецкий национальный технический университет,
lg@cs.dgtu.donetsk.ua

Abstract

Golubeva L. "Validation of methods for rivers' water quality changes modelling and forecast in regions with high anthropogenous loading" Various methods of time series analysis are considered and the estimation of their efficiency for modelling and forecast of rivers' water quality changes in regions with high anthropogenous loading is carried out. Procedure of forecasting of rivers' water quality changes by Group Method of Data Handling (GMDH) is developed.

Keywords: time series analysis, water quality modeling, GMDH method.

Введение

Ухудшение состояния водных ресурсов в регионах с развитой промышленностью является в последние десятилетия одной из важнейших экологических проблем. Проблема нехватки пресной воды приемлемого качества для нужд промышленности и хозяйственно-питьевого водоснабжения является одной из основных в Донецкой области. Состояние экономики региона напрямую зависит от количества и качества природных ресурсов и степени рациональности их использования. Рациональное использование предполагает доскональное знание особенностей функционирования водных объектов, установление зависимости их состояния от динамики множества природных и антропогенных факторов, прогноз состояния водных ресурсов для предупреждения нежелательных изменений водных экосистем.

Исследования по моделированию динамических рядов показателей природных сред используют различные методы, в том числе факторный и регрессионный анализ, методы самоорганизации прогнозирующих моделей. Сравним их эффективность при решении задач моделирования качества речной воды для условий Донецкой области. Данный регион отличается малой обеспеченностью речным стоком, высокой минерализацией речной воды, нерегулярным характером сбросов, неконтролируемым поверхностным стоком.

Использование регрессионных методов для моделирования динамики качества воды

С целью оценки эффективности различных прогнозных методов была проанализирована информация о загрязнении водных объектов бассейна р. Кальмиус в

среднем по 17 показателям на 17 постах с 1995 по 2008 г. по данным Северско-Донецкого бассейнового управления водных ресурсов. Данные о качестве воды представляли собой двумерные массивы 166×17 , содержащие временные ряды показателей загрязнения воды.

Сравнивалась эффективность авторегрессионного, множественного регрессионного и факторного анализа, а также метода группового учета аргументов для прогнозирования качества воды водных объектов. Модели были построены для первых 139 наблюдений ряда (данные за 1994 – 2005 гг.), затем ошибки прогноза были исследованы на контрольной выборке – следующих 27 наблюдениях ряда (2007 – 2008 гг.).

Анализ корреляционной матрицы оцениваемых переменных показал, что наибольшей корреляцией, помимо переменных коррелирующих «по определению», т.е. отражающие одни и те же процессы (сухой остаток – сульфаты, хлориды, кальций, жесткость; жесткость – кальций, магний), высокую положительную корреляцию имеют следующие переменные: содержание солей аммония и взвешенных веществ (коэффициент парной корреляции 0,73), БПК и концентрация нефтепродуктов (0,56), БПК и содержание солей аммония (0,53).

Факторный анализ [1] показал наибольший вклад в динамику зависимой переменной БПК двух факторов:

1) для фактора 1 (характеризующего общее солесодержание) наибольшие значения факторных нагрузок имеют следующие показатели: жесткость (значение факторной нагрузки 0,85), содержание хлоридов (0,79), сухой остаток (0,74), содержание магния, сульфатов, кальция;

2) фактор 2 (характеризует процессы биотрансформации веществ) включает содержание солей аммония (0,83), взвешенных веществ (0,81), нефтепродуктов, нитритов, нитратов и железа.

Полученная модель имеет следующий вид:

$$x_{БПК} = 0,268 f_1 + 0,173 f_2,$$

где f_1 - значения первого фактора, f_2 - значения второго фактора.

Показатель БПК-5 описывается следующей моделью авторегрессии и проинтегрированного скользящего среднего [2]:

$$x_{БПК} - x_{БПК(t-1)} = 0,7192x_{БПК(t-1)} - 0,3539x_{БПК(t-2)} + \varepsilon_t + 0,7371\varepsilon_{t-1},$$

где $x_{БПК}$ - зависимая переменная (БПК); t - время.

Для множественной регрессионной модели значимым оказался вклад семи показателей качества воды:

$$x_{БПК} = 0,6427 x_{амм} + 0,0077 x_{сульф} + 0,0149 x_{хлор} - 0,3329 x_{фосф} + 0,6159 x_{рН} + 0,1765 x_{раств O_2} - 1,5455 x_{щел},$$

где $x_{амм}$ - концентрация солей аммония,

$x_{сульф}$ - сульфатов, $x_{хлор}$ - хлоридов,

$x_{фосф}$ - фосфатов соответственно, $x_{рН}$ - значение водородного показателя, $x_{раств O_2}$ -

содержание растворенного кислорода, $x_{щел}$ - значение щелочности речной воды.

Процедура МГУА для моделирования динамики качества воды рек

В подавляющем большинстве случаев реальные задачи моделирования природных процессов сложны и неадекватны предлагаемым описаниям. Для получения высокой точности моделирования необходима достаточно большая сложность описаний. Сложные оптимальные описания можно получить только в том случае, если вернуться к исходным идеям кибернетики. Методы комбинаторики и массовой селекции лучших комбинаций (с учетом методов регуляризации решений) позволяет получить единственное и достаточно сложное описание. Эта идея реализуется в виде метода группового учета аргументов (МГУА).

Системы эвристической самоорганизации (частным случаем которых является МГУА) содержат генераторы случайных комбинаций (гипотез) и несколько рядов селекций полезной

информации. Сложность комбинаций от ряда к ряду возрастает, а точность решения повышается до тех пор, пока не будет получен оптимальный по сложности алгоритм переработки информации [3-6].

Для получения моделей на данных, представляющих собой большое количество связанных аргументов, измеренных с ошибками, предложено использовать алгоритм МГУА с усредненными эффектами аргументов. Основная идея метода состоит в том, что вместо выделения индивидуального влияния каждого из аргументов, связанных между собой устойчивыми связями, выделяется условное индивидуальное влияние каждого из аргументов x_i ($i = 1, \dots, n$). То есть выделяется информация, которая статистически связана только с x_j , и часть общей информации, условно относящаяся к нему. Информативность аргумента определяется по суммарному значению "индивидуального" и "общего" вкладов в изменение дисперсии, чем придается большее значение добавочной информации, вносимой только этим аргументом.

На первом этапе в качестве меры вклада аргумента x_i в дисперсию результирующего показателя y принимается уменьшение его дисперсии на проверочной выборке, полученное с помощью уравнения $y = f(x_i)$, коэффициенты которого определены на обучающей выборке, здесь f - функции практически любого вида, являющиеся внутренне линейными. Если дисперсия не уменьшается, то вклад считается нулевым и испытывается следующий аргумент. В качестве меры информативности следующего аргумента x_k ($k \neq i$), рассматриваемого на втором шаге, принимается величина уменьшения дисперсии отклонений Δy на проверочной выборке моделью $y - f(x_i) = f(x_k)$, построенной на обучающей выборке. Процедура оканчивается рассмотрением последнего аргумента x_n . Вклад аргумента, стоящего на последнем месте, считается его индивидуальным вкладом. Величины вкладов существенно зависят от порядка их включения в модель. Поэтому порядок следования случайным образом изменяется для различных вариантов. Число перестановок мест n аргументов равно $n!$. Для уменьшения числа исследуемых вариантов используется выборочный метод оценки среднего значения в генеральной совокупности. Перебор вариантов заканчивается, если точность определения вклада аргументов в дисперсию y превышает заданную величину δ

(число вариантов обозначим nn).

Для получения коэффициентов модели по каждому аргументу выбирается единственное преобразование.

1) задается предварительное количество вариантов перебора порядка включений аргументов в модель $nn0 (nn0 < n!)$ и необходимая точность определения ошибки модели на проверочной выборке δ ;

2) генерируется $nn0$ наборов случайных чисел от 1 до n для перебора вариантов;

3) для любого варианта на данных обучающей выборки A определяются нормированные коэффициенты частного описания для i -го аргумента на j -м шаге его включения в l -ю модель последовательных включений

$$d(i, j, l) = (x_A^T(i) x_A(i))^{-1} x_A^T(i) W_A(i, j-1, l)$$

где i - номер аргумента; j - порядковый номер включения i -го аргумента в модель; l - номер модели, в которую i -й аргумент был включен на j -м месте; $x_A(i)$ - i -й столбец матрицы нормированных аргументов; $W_A(i, j-1, l)$ - нормированные отклонения расчетных значений функции от фактических, полученных в l -й модели на $j-1$ -м шаге включений (примем, что на первом шаге $W_A(i, j-1, l)$ равно нормированному значению выходной переменной $W_A(i, j-1, l) = y_{норм}$):

$$W_A(i, 0, l) = y_{норм}$$

$$W_A(i, 1, l) = W_A(i, 0, l) - x_A^T(i) x_A(i)^{-1} x_A^T(i) W_A(i, 0, l),$$

...

$$W_A(i, j, l) = W_A(i, j-1, l) - x_A^T(i) x_A(i)^{-1} x_A^T(i) W_A(i, j-1, l),$$

...

$$W_A(i, n, l) = W_A(i, n-1, l) - x_A^T(i) x_A(i)^{-1} x_A^T(i) W_A(i, n-1, l);$$

4) на каждом шаге последовательного включения аргумента в модель проверяется качество полученной модели на проверочной выборке B . Если для критерия регулярности

$$\Delta_j^2(B) = \frac{1}{NB} \sum_1^{NB} W_{AB}^2(i, j, l),$$

вычисленного на данных выборки B , выполняется неравенство

$$\Delta_j^2(B) \geq \Delta_{j-1}^2(B),$$

то полагаем

$$W_A(i, j, l) = W_A(k, j-1, l); \quad d(i, j, l) = 0$$

и продолжаем процедуру включения новых аргументов в модель.

Здесь NB - количество наблюдений в проверочной выборке; $W_A(k, j-1, l)$ - отклонения, полученные на предыдущем варианте, давшем положительный результат;

$W_{AB}(i, j, l)$ - отклонения на B , вычисленные с помощью модели, коэффициенты которой вычислены на A ;

5) коэффициенты всех $nn0$ частных описаний для каждого i -го аргумента усредняются по j -му месту включения:

$$a(i, j) = \frac{1}{nn0} \sum_{l=1}^{nn0} d(i, j, l).$$

6) коэффициенты для i -го аргумента в окончательной модели усредняются по всем местам j :

$$\hat{b}_{nn0}(i) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n a(i, j)$$

и вычисляется ошибка модели средних вкладов на данных проверочной выборки $\sigma_B(nn0)$;

7) количество вариантов перестановки увеличивается на 10000 - $nn1 = nn0 + 10000$ и повторяются пп. 1 - 4 процедуры для $nn1$;

8) вычисляются коэффициенты $\hat{b}_{nn0}(i)$ для $nn1$ вариантов и ошибка модели средних вкладов на проверочной выборке $\sigma_B(nn1)$;

9) если $|\sigma_B(nn0) - \sigma_B(nn1)| \leq \sigma$, то расчеты прекращаются. Если это неравенство не выполняется, то повторяются шаги 1 - 4 и 6 для $nn2 = nn1 + 10000$,

$nn(k+1) = nnk + 10000$. Количество перебираемых вариантов наращивается до тех пор, пока ошибка на данных проверочной выборки $\sigma_B(nnk)$ значительно уменьшается.

10) модель, полученная по nnk вариантам, считается окончательной. Для нее вычисляются коэффициенты модели средних и индивидуальных вкладов в натуральном масштабе (для данных выборки A):

$$b_{i,cp} = \hat{b}_{nn0}(i) \cdot \frac{\sigma_y}{\sigma_{xi}}$$

$$b_{0,cp} = \bar{y} - \sum_{i=1}^n \hat{b}_{nnk}(i) \cdot \frac{\sigma_y}{\sigma_{xi}}$$

$$b_{i,unn0} = a(i, n) \cdot \frac{\sigma_y}{\sigma_{xi}}, \quad b_{0,unn0} = \bar{y} - \sum_{i=1}^n a(i, n) \cdot \frac{\sigma_y}{\sigma_{xi}}$$

здесь \bar{y} - среднее значение, σ_{xi} , σ_y - средние квадратичные отклонения.

Модель, полученная методом ГУА для гидрохимических данных, имеет вид:

$$x_{БПК} = 4,384 + 0,742 x_{NH_4} - 3,036 x_{Fe} - 0,002 x_{Mg} + 0,115 x_{NO_2} + 0,002 x_{SO_3} + 0,002 x_{Cl} + 2,083 x_{oil} + 0,001 x_{res} + 0,037 x_{PO_4} - 0,044 x_{susp} - 0,3 x_{pH} + 0,022 x_{hard} - 0,025 x_{O_2},$$

где x_{NH_4} - концентрация солей аммония, x_{Fe} - железа общего, x_{Mg} - магния, x_{NO_2} - нитритов, x_{SO_3} - сульфатов, x_{Cl} - хлоридов, x_{oil} - нефтепродуктов, x_{res} - вес сухого остатка, x_{PO_4} - фосфатов соответственно, x_{susp} - взвешенных веществ, x_{pH} - значение водородного показателя, x_{hard} - значение жесткости речной воды, x_{O_2} - содержание растворенного кислорода.

Вклад в модель таких переменных, как содержание нитратов, кальция и щелочность воды, алгоритм счел близким к нулю и потому они не включены в модель.

Анализ остатков моделей показал (см. рис. 1), что наименее эффективным методом для данного типа объектов является факторный анализ (среднее остатков -2,81 при среднем значении прогнозируемого показателя 5,66), далее по точности следует авторегрессия (ошибка прогноза 2,42) и наименее грубо прогнозируют множественная регрессионная модель (ошибка прогноза -0,69) и МГУА (-0,12).

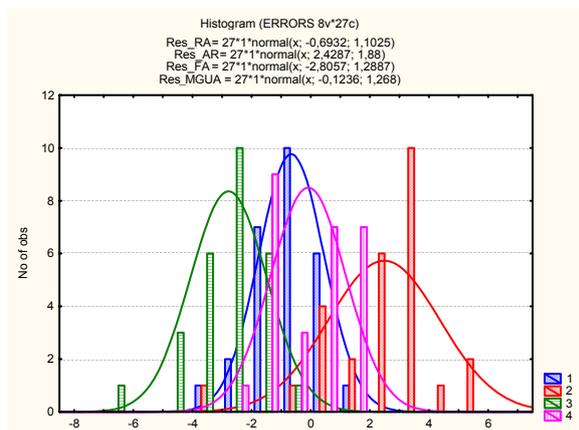


Рисунок 1. - Гистограммы остатков моделей БПК, полученных с помощью различных методов: 1 – регрессионного анализа, 2 – авторегрессии, 3 – факторного анализа, 4 – МГУА

Таким образом, множественные регрессионные модели и модели МГУА могут быть использованы для прогноза загрязнения

бассейна реки с повышенной антропогенной нагрузкой.

Оценка качества воды по комплексу гидрохимических показателей

Основные виды оценки качества воды водных объектов по комплексу гидрохимических показателей в своей основе имеют сумму значений показателей, нормированных по предельно допустимым концентрациям. Гидрохимический индекс загрязнения воды (ИЗВ) установлен Госкомгидрометом СССР [7] и относится к категории показателей, наиболее часто используемых для оценки качества водных объектов. Этот индекс является типичным аддитивным коэффициентом и представляет собой среднюю долю превышения ПДК по строго лимитированному числу индивидуальных ингредиентов:

$$ИЗВ = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n \frac{C_i}{ПДК_i}, \quad (1)$$

где C_i – концентрация компонента (в ряде случаев – значение физико-химического параметра); n – число показателей, используемых для расчета индекса, $n = 6$; $ПДК_i$ – установленная величина норматива для соответствующего типа водного объекта.

Для расчета индекса загрязнения вод для всего множества нормируемых компонентов, включая водородный показатель рН, биологическое потребление кислорода БПК₅ и содержание растворенного кислорода, находят отношения $C_i / ПДК_i$ фактических концентраций к ПДК и полученный список сортируют. ИЗВ рассчитывают по шести показателям (азот аммонийный и нитритный, нефтепродукты, фенолы, растворенный кислород, БПК-5), имеющим наибольшие значения приведенных концентраций. В зависимости от величины ИЗВ участки водных объектов подразделяют на классы.

Показатель химического загрязнения воды (ПХЗ-10) - суммарный показатель химического загрязнения вод, названный авторами [8] "формализованным", рассчитывается по десяти соединениям, максимально превышающим ПДК с использованием аналогичной (1) формулы суммирования воздействий:

$$ПХЗ-10 = (C_1/ПДК_1 + C_2/ПДК_2 + \dots + C_{10}/ПДК_{10}),$$

где $ПДК_i$ – рыбохозяйственные нормативы; C_i – концентрация химических веществ в воде.

При определении ПХЗ-10 для химических веществ, по которым "относительно удовлетворительный" уровень загрязнения вод

определяется как их "отсутствие", отношение С/ПДК условно принимается равным 1. Для установления ПХЗ-10 рекомендуется проводить анализ воды по максимально возможному числу показателей.

В гидрохимической практике используется и несколько измененный, по сравнению с ИЗВ, метод интегральной оценки качества воды, по совокупности находящихся в ней загрязняющих веществ и частоты их обнаружения - комбинаторный индекс загрязненности [9]. В этом методе для каждого ингредиента на основе фактических концентраций рассчитывают баллы кратности превышения ПДК_{вр} - K_i, повторяемости случаев превышения Н_i, а также общий оценочный балл В_i:

$$\begin{aligned} K_i &= C_i / \text{ПДК}_i \\ H_i &= N_{\text{ПДК}_i} / N_i \\ B_i &= K_i \cdot H_i, \end{aligned}$$

где C_i - концентрация в воде i-го ингредиента; ПДК_i - предельно допустимая концентрация i-го ингредиента для водоемов рыбохозяйственного назначения; N_{ПДК_i} - число случаев превышения ПДК по i-му ингредиенту; N_i - общее число измерений i-го ингредиента.

Ингредиенты, для которых величина общего оценочного балла больше или равна единицы, выделяются как лимитирующие показатели загрязненности (ЛПЗ). Комбинаторный индекс загрязненности рассчитывается как сумма общих оценочных баллов всех учитываемых ингредиентов. По величине комбинаторного индекса загрязненности устанавливается класс загрязненности воды.

Методика НИИ гигиены им. Ф.Ф. Эрисмана [10] предполагает для определения степени загрязнения использование четырех критериев вредности, по каждому из которых сформирована определенная группа веществ и специфических показателей качества воды:

— критерий санитарного режима (W_с), где учитывается растворенный кислород, БПК₅, ХПК и специфические загрязнения, нормируемые по влиянию на санитарный режим;

— критерий органолептических свойств (W_ф), где учитывается запах, взвешенные вещества, ХПК и специфические загрязнения, нормируемые по органолептическому признаку вредности;

— критерий, учитывающий опасность санитарно-токсикологического загрязнения (W_{ст}), где учитывается ХПК и специфические загрязнения, нормируемые по санитарно-токсикологическому признаку;

— эпидемиологический критерий (W_э), учитывающий опасность микробного загрязнения.

Одни и те же показатели могут входить одновременно в несколько групп. Комплексная оценка вычисляется отдельно для каждого лимитирующего признака вредности (ЛПВ) W_с, W_ф, W_{ст} и W_э по традиционной формуле "псевдокомпенсации":

$$W = 1 + \frac{\sum_{i=1}^n (\delta_i - 1)}{n}, \quad \delta_i = \frac{C_i}{N_i},$$

где W - комплексная оценка уровня загрязнения воды по данному ЛПВ, n - число показателей, используемых в расчете; N_i - нормативное значение единичного показателя (чаще всего N_i = ПДК_i). Если

$\delta_i < 1$, т.е. концентрация менее нормативной, то принимается $\delta_i = 1$.

По особым формулам рассчитываются вклады для содержания растворенного кислорода и взвешенных веществ. Растворенный кислород нормируется по нижнему уровню значения, т.е. его содержание должно быть меньше 4 мг/л, поэтому при C_i < 4 для него принято $\delta_i = 1 + 10(N_i - C_i) / N_i$.

Метод классификации качества вод по В.П. Емельяновой [11] предполагает вообще обойтись без вычисления баллов по отдельным показателям. Комплексная оценка загрязнения воды определяется как относительное число показателей, превышающих тот или иной уровень концентрации: ПДК, 10ПДК, 30ПДК и т. д. Предложенный способ обобщения сразу избавляет от всех проблем, связанных с определением балльных оценок. Правда, при этом не учитывается различие биологического воздействия веществ. В целом же способ очень прост и может оказаться эффективным.

Экотоксикологический критерий по Т.И. Моисеенко [12] рассчитывается следующим образом: степень загрязнения токсическими веществами оценивается традиционной суммой превышений концентрации соответствующих элементов (C_i) к их предельно допустимым концентрациям (ПДК_i):

$$X_{\text{токс}} = \sum C_i / \text{ПДК}_i.$$

Особым образом оценивается группа следующих показателей: сульфат-ионов, содержания взвешенных веществ и общей минерализации, по которым кратность превышения концентраций относится не к ПДК, а к максимальным фоновым значениям:

$$X_{\text{ф-х}} = \sum (C_i / C_{\text{фон.maxi}} - 1).$$

Для оценки эвтрофирования вводится специальный показатель эвтрофикации

$$X_{\text{эвт}} = K \cdot (C_{\text{фос}} / C_{\text{фон.фос}} - 1),$$

где $C_{\text{фос}}$ и $C_{\text{фон.фос}}$ – анализируемые и фоновые значения концентраций минерального фосфора, K – дополнительный коэффициент, зависящий от оценки состояния водоема (для мезотрофных водоемов $K = 2$, а для эвтрофных $K = 3$).

Общий индекс загрязнения определяется по вполне ожидаемой формуле:

$$X_{\text{сум}} = X_{\text{токс}} + X_{\text{ф-х}} + X_{\text{эвт}}.$$

В методе комплексной оценки загрязненности вод по Г.Т. Фрумину и Л.В. Баркану [13] для каждого ингредиента рассчитывается частная функция желательности

Харрингтона по формуле: $d_i = e^{-e^{P_i}}$.

Показателем степени этой функции является безразмерная величина P_i , рассчитываемая с помощью выражения:

$$P_i = b_0 + b_1 \cdot C_i / \text{ПДК}_i,$$

где C_i и ПДК_i – наблюдаемая и предельно допустимая концентрации i -го ингредиента, b_0 и b_1 – специально рассчитанные коэффициенты, зависящие от типа ингредиента и класса качества воды.

Обобщенная функция Харрингтона D определяется как среднегеометрическое частных показателей желательности

$$D = (d_1 d_2 d_3 \dots d_n)^{1/n}.$$

Согласно принципу мажоритарности средних, среднегеометрическая по численному значению меньше, чем среднеарифметическая, поэтому описанный подход дает более жесткую оценку качества воды, чем, например, традиционно используемый индекс загрязненности вод ИЗВ.

Одной из первых попыток создания глобальных классификаций, построенных по экосистемному принципу, когда в классификационный рубрикатор включаются как гидрофизические и гидрохимические показатели (абиотическая составляющая), так и характеристики гидробионтов (биологическая составляющая экосистем), стала разработка Института гидробиологии НАН Украины [14, 15]. В сущности, авторы предложили не единую классификацию, а три самостоятельных классификации: единую пятиклассно-девятиразрядную классификацию для трех групп "экологических" показателей и две классификации по минеральному составу воды, не совместимые ни с первой, ни друг с другом.

Введение столь запутанной эколого-санитарной классификации качества вод из двух параллельных систем градаций (из пяти классов и из девяти разрядов) разработчики обосновывают тем, что в условиях огромного многообразия вод оценки по пяти- и шестиразрядным системам недостаточны для детальной характеристики и назрела потребность в дробном подразделении вод по

более узким градациям качества. Тезис о необходимости точных оценок качества вод решается вполне банально – переходом от системы целочисленных градаций к непрерывной шкале качества с дробными значениями любой точности, избежав громоздкого деления на диапазоны. Более удобно и точно будет представить зависимость категории качества вод от величины каждого показателя в виде уравнения регрессии. К недостаткам подобных комплексных оценок относится и недостаток данных для их проведения, особенно гидробиологических, у современных субъектов мониторинга. Обилие показателей, которые предлагается контролировать, наводит на мысль о миллионах долларов дотаций на лабораторное обеспечение системы мониторинга.

Общепринятый подход особенно неудобен в ситуациях, когда происходит многократное превышение ПДК по отдельным показателям при низких показателях для концентраций остальных ингредиентов, например, в случаях аварийных сбросов загрязняющих веществ предприятиями. Данная ситуация особенно характерна для промышленных регионов с высокой антропогенной нагрузкой на водные объекты. Следовало увеличить чувствительность показателя комплексной оценки для расчета антропогенной нагрузки на водный объект в подобных ситуациях.

Кроме того, требовалось разработать процедуру оптимизации числа показателей качества воды для каждого конкретного типа водотока. Попытки подобного рода уже предпринимались [16, 17], но, вследствие чисто механического применения методов МГУА без учета специфики гидрохимических показателей и особенностей водного объекта, оказывались не слишком эффективными.

Перед процедурой оценки качества воды водного объекта предлагается определять базисный набор показателей качества речной воды с помощью модели МГУА.

Для оценки качества воды в водотоке с повышенной антропогенной нагрузкой предложено вычислять интегральный показатель (индекс) загрязнения K_t по формуле:

$$K_t = \sum_{i=1}^m x_{it} \cdot W(x_{it}) + x_{it\max} \cdot (1 - W(x_{it\max})),$$

где x_{it} – значение i -го показателя в долях эквивалента летальной концентрации в момент времени t , $x_{it\max}$ – максимальное значение i -го показателя в долях летальной концентрации в момент времени t , $W(x_{it})$ – вес i -го показателя в момент времени t , вычисляемый по формуле:

$$W(x_{it}) = \begin{cases} 0 & \text{при } x_{it} \leq 0,5x_{ПДК(i)}, \\ \frac{(x_{it} - 0,5x_{ПДК(i)})}{e^{(x_{it} - 0,5x_{ПДК(i)}) - 1}} \cdot \frac{e^{-0,5x_{ПДК(i)}}}{(1 - 0,5x_{ПДК(i)})} & \text{при } 1 > x_{it} > 0,5x_{ПДК(i)}, \\ 1 & \text{при } x_{it} \geq 1, \end{cases}$$

где $x_{ПДК(i)}$ - значение предельно допустимой концентрации в долях эквивалента летальной концентрации (LC_{100}) для i -го показателя качества воды.

Динамика изменения интегрального показателя во времени за последние 10 лет на примере одного из участков р. Кальмиус показана на рис. 2.

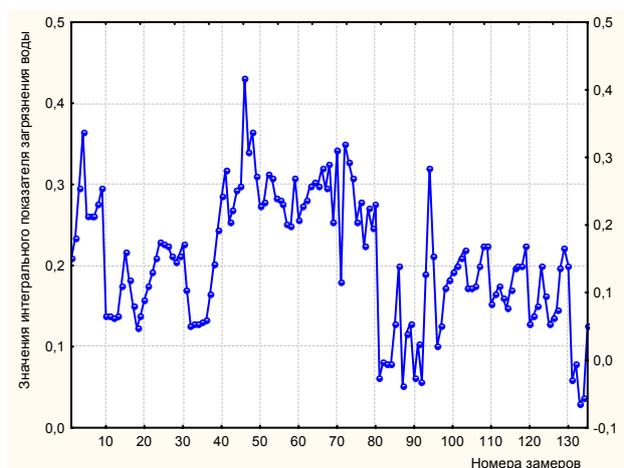


Рисунок 2. – Динамика интегрального показателя загрязнения воды р. Кальмиус за 1995 – 2008 гг

Рассматриваемый показатель отличается от общепринятого большей чувствительностью к сверхпороговым значениям, т.е. более четко отражает опасную ситуацию, увеличиваясь тем резче, чем более концентрация отдельного ключевого загрязнителя превышает установленные нормативы. Были рассчитаны значения индекса загрязнения K_t по 17 показателям качества речной воды.

Заключение

Разработанная методика может быть положена в основу разработки технических предложений по созданию региональной системы экологического мониторинга с ориентацией на использование принципов и методов комплексной оценки антропогенных воздействий на водные объекты.

Дальнейшие исследования будут направлены на поиск оптимальных моделей для водотоков различного типа и более совершенных методов прогноза в указанной группе методов.

Системы мониторинга, использующие прогнозные методы, наиболее эффективные для данных объектов исследования, позволят с максимальной точностью прогнозировать непосредственные и опосредованные последствия хозяйственной деятельности в подобных регионах.

Литература

1. Главные компоненты и факторный анализ - <http://www.statsoft.ru/home/textbook/default.htm> (10.09.2008).
2. ARIMA methodology / ARIMA (Box & Jenkins) and autocorrelations. - <http://www.statsoft.com/textbook/sttimser.html#aarima> (12.09.2008).
3. Ивахненко А.Г., Юрачковский Ю.П. Моделирование сложных систем по экспериментальным данным. — М.: Радио и связь, 1987. — 120 с.
4. Ивахненко А.Г. Комбинированные имитационно-индуктивные методы моделирования экологических систем // Автоматика. — 1979. - № 5. - С 8 – 17.
5. Ивахненко А.Г., Мюллер И.А. Самоорганизация прогнозирующих моделей. К.: Техника, 1984. —350 с.
6. Ивахненко А.Г., Зайченко Ю.П., Димитров В.Д. Принятие решений на основе самоорганизации. М.: Сов. радио, 1976. — 280 с.
7. Временные методические указания по комплексной оценке качества поверхностных и морских вод. Утв. Госкомгидрометом СССР 22.09.1986 г. № 250-1163. — М.: 1986. — 5 с.
8. Критерии оценки экологической обстановки территорий для выявления зон чрезвычайной экологической ситуации и зон экологического бедствия. Утверждено Приказом Минприроды РФ от 30 ноября 1992 г. — 51 с.
9. Васильева Е.А., Виниченко В.Н, Гусева Т.В. и др. Как организовать общественный экологический мониторинг / Под ред. М.В. Хотулевой. — М.: СоЭС - Методический центр “Эколайн”, 1998. - www.cci.glasnet.ru/mc/books/monitor (12.09.2008).
10. Новиков Ю.В., Плитман С.И., Ласточкина К.С. и др. Оценка качества воды по комплексным показателям // Гигиена и санитар. 1987. № 10. С. 7-11.
11. Емельянова В.П., Данилова Г.Н., Родзиллер И.Д. Способ обобщения показателей для оценки качества поверхностных вод // Гидрохим. материалы. 1980. Т. 77. С. 88-96.
12. Моисеенко Т.И. Методические подходы к нормированию антропогенных нагрузок на

- водоемы Субарктики (на примере Кольского севера) // Проблемы химического и биологического мониторинга экологического состояния водных объектов Кольского севера. – Апатиты: Кольский науч. центр, 1995. С. 7-23.
13. Фрумин Г.Т., Баркан Л.В. Комплексная оценка загрязненности Ладожского озера по гидрохимическим показателям // Водн. ресурсы. 1997. Т. 24. № 3. С. 315-319.
 14. Романенко В.Д., Жукинський в.М., Оксіюк О.П., Яцик А.В., Чернявська А.П., Васенко О.Г. та інші. Методика екологічної оцінки якості поверхневих вод за відповідними категоріями. К.: Символ-Т., 1998. – 28 с.
 15. Романенко В.Д., Жукинський В.М., Оксіюк та інші. Методика встановлення і використання екологічних нормативів якості поверхневих вод суші та естуаріїв України. – К., 2001. – 48 с.
 16. Ивахненко А.Г., Кротов Г.И. Моделирование загрязнения среды при отсутствии информации о выбросах источников загрязнения // Автоматика. – 1977. – № 5. – С. 14 – 31.
 17. Ивахненко А.Г., Сарычев А.П., Светальский Б.К. Определение базисного множества наблюдаемых переменных в задаче управления качеством воды. // Автоматика, 1984. – № 6. – С. 3 – 7.

Генерация численных методов решения дифференциальных уравнений высоких порядков

Дмитриева О.А., Куприй Я.А.

Кафедра ПМиИ, ДонНТУ

E-mail: dmitriv@r5.dgtu.donetsk.ua, kupriy.yana@mail.ru

Abstract

Dmitrieva O.A., Kupriy Y.A. Generation of numerical methods for high order differential equation solving. Creation of effective algorithms of differential equations solving is important problem in theory of dynamic modeling and application programming. At this article a method of 'rooted trees' for creating differential equation solvers of high order is considered as a way aiming at rising computational precision of differential equations.

Key words: numerical methods, ordinary differential equation, dynamic modeling, stability.

Введение

Расширение круга задач, описывающих поведение реальных динамических систем, породило новую волну конструирования и исследования численных методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Ранее известные методы были детально изучены и обобщены, построены новые классы методов, созданы методы, ориентированные на решение задач со специальными свойствами, например, так называемых жестких систем [1]. Но при том, что на поведение реальных систем влияет множество факторов, существующие математические модели, описывающие динамику таких систем, как правило, учитывают только наиболее существенные факторы, что, в первую очередь, оправдывается ограниченностью вычислительных ресурсов. Параллельные компьютерные системы позволили существенно ускорить вычисления, усложнить модели, повысить точность решения.

Одним из способов повышения точности и устойчивости численного решения является использование неявных методов или методов интегрирования высоких порядков. При этом, как правило, специфика решаемой задачи требует использования методов, позволяющих учитывать имеющиеся особенности. Данная статья посвящена вопросам генерации таких методов с использованием «помеченных деревьев» [2].

Общий вид методов решения

Рассматривается ОДУ вида (1):

$$f(t, y, y', \dots, y^{(m)}) = 0, \quad (1)$$

с начальными условиями (2):

$$\begin{aligned} y(t_0) &= y_0, \\ y'(t_0) &= y'_0, \\ &\dots \\ y^{(m-1)}(t_0) &= y_0^{(m-1)}, \end{aligned} \quad (2)$$

где f – некоторая функция, связывающая независимую переменную t , искомую функцию $y(t)$ и ее производные до m -го порядка включительно. Пусть u_t – приближенное решение задачи (1) в момент времени t .

Общий вид s -этапного метода типа Рунге-Кутты представлен соотношениями (3) [2, 3]:

$$\begin{aligned} u_{n+1} &= u_n + h \cdot \varphi_s(u_n, t_n, h) \\ \varphi_s(u_n, t_n, h) &= b_1 k_1 + b_2 k_2 + \dots + b_s k_s \\ k_1 &= f(t_n, u_n), \\ k_2 &= f(t_n + c_2 h, u_n + a_{2,1} k_1 h), \\ &\dots \\ k_s &= f(t_n + c_s h, u_n + a_{s,1} k_1 h + a_{s,2} k_2 h + \dots + a_{s,s-1} k_{s-1} h), \end{aligned} \quad (3)$$

где a_{ij} , b_i , c_i – вещественные константы, которые и определяют метод [4, 5]. Метод (3) также можно представить в виде матрицы коэффициентов (4):

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ c_2 & a_{21} & & & \\ c_3 & a_{31} & a_{32} & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{s,s-1} \\ \hline & b_1 & b_2 & \dots & b_{s-1} & b_s \end{array} \quad (4)$$

При этом справедливо условие

$$c_i = \sum_j a_{ij}. \quad (5)$$

Условия, позволяющие вычислить значения констант, определяющих метод, формируются путем сопоставления

приближенного решения (3) с производными точных решений. Подобные вычисления являются очень трудоемкими, особенно для методов высоких порядков. Метод помеченных деревьев, изложенный в [2] позволяет значительно упростить вывод определяющих условий.

Метод помеченных деревьев

Для определения метода порядка q необходимо сформировать все абстрактные (непомеченные) деревья порядка $\leq q$. Каждое из таких деревьев tr определяет одно условие метода вида (6):

$$\Phi(tr) = \frac{1}{\gamma(tr)}, \quad (6)$$

где $\Phi(tr)$ – некоторая комбинация коэффициентов дерева tr ;

$\gamma(tr)$ – коэффициент, определяемый как произведение весовых коэффициентов вершин дерева.

Рассмотрим дерево $tr1$, изображенное на рис. 1

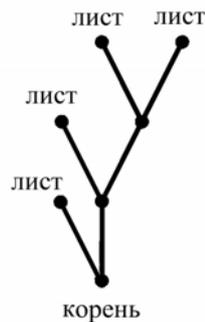


Рисунок 1. – Общий вид дерева

Поставим в соответствие корню дерева коэффициент b , листьям – коэффициенты c , а промежуточным вершинам – коэффициенты a . Полученное дерево изображено на рис. 2.

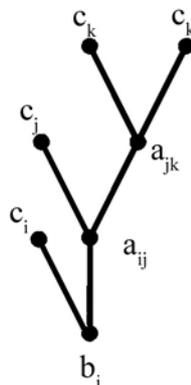


Рисунок 2. – Помеченное дерево порядка 7

Для данного дерева функция $\Phi(tr)$ примет вид (7):

$$\Phi(tr) = \sum_{i,j,k} b_i c_i a_{ij} a_{jk} c_k^2, \quad (7)$$

Для определения коэффициента $\gamma(tr)$ поставим в соответствие каждой вершине, являющейся «листом» дерева, весовой коэффициент, равный 1, а всем остальным вершинам – весовой коэффициент, равный сумме весов исходящих вершин плюс один. Формирование весовых коэффициентов для дерева $tr1$ приведено на рис. 3

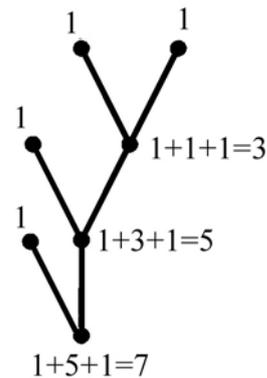


Рисунок 3. – Формирование весовых коэффициентов дерева

Таким образом, $\gamma(tr1) = 1*1*1*3*1*5*1*7=105$ и дереву $tr1$, изображенному на рис. 2, соответствует условие (8):

$$\sum_{i,j,k} b_i c_i a_{ij} a_{jk} c_k^2 = \frac{1}{105}. \quad (8)$$

Аналогичным образом формируются условия для произвольного дерева tr .

Генерация помеченных деревьев

Как уже отмечалось, определение коэффициентов метода порядка q , требует формирования всех абстрактных деревьев, порядок которых укладывается в интервал от 1 до q . В [1] для генерации набора абстрактных деревьев произвольного порядка был предложен следующий подход:

- 1) формируются все возможные наборы абстрактных деревьев с общим порядком $q-1$;
- 2) деревья внутри каждого набора объединяются путем добавления общего корня.

Рассмотрим формирование деревьев порядка 3. Существует два возможных набора деревьев с суммарным порядком, равным двум. Это два дерева порядка 1 и одно дерево порядка 2. Формирование деревьев порядка 3 путем добавления корня к каждому набору деревьев приведено на рис. 4.

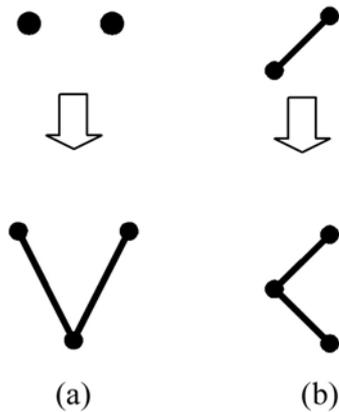


Рисунок 4. – Формирование деревьев порядка 3

Для формирования функции $\Phi(\text{tr})$ нового дерева перейдем от индексов i, j, k, l, \dots к индексам i_1, i_2, i_3, i_4 и т.д. Для нового дерева порядка q , формируемого из m деревьев, условие (6) будет определяться соотношением (9):

$$\sum b_{i_1} \prod_{j=1}^m \tilde{\Phi}(\text{tr}_j) = \frac{1}{q \prod_{j=1}^m \gamma(\text{tr}_j)}, \quad (9)$$

где $\tilde{\Phi}(\text{tr})$ – это преобразование функции $\Phi(\text{tr})$ по правилу (10)

$$\begin{aligned} b_{i_n} &\rightarrow a_{i_n, i_{n+1}} \\ a_{i_n, i_{n+1}} &\rightarrow a_{i_{n+1}, i_{n+2}} \\ c_{i_n} &\rightarrow c_{i_{n+1}} \end{aligned} \quad (10)$$

Рассмотрим формирование функций $\Phi(\text{tr})$ для деревьев третьего порядка, изображенных на рис. 4. Для дерева tr_1 (рис. 4 (a)), имеющего порядок, равный единице $\Phi(\text{tr}_1) = b_{i_1}$. Дерево третьего порядка формируется путем добавления корня к двум деревьям порядка 1. Функция $\Phi(\text{tr})$ будет иметь вид (11):

$$\Phi(\text{tr}) = \sum_i b_{i_1} a_{i_1 i_2}^2 \quad (11)$$

или с учетом (5):

$$\Phi(\text{tr}) = \sum_i b_{i_1} c_{i_1}^2 \quad (12)$$

При этом $\gamma(\text{tr}) = q \cdot \gamma(\text{tr}_1) = 3 \cdot 1 \cdot 1 = 3$.

Для дерева tr_2 второго порядка (рис. 4 (b)) $\Phi(\text{tr}_2) = b_{i_1} c_{i_1}$. Функция $\Phi(\text{tr})$ будет иметь вид

$$\Phi(\text{tr}) = \sum_i b_{i_1} a_{i_1 i_2} c_{i_2} \quad (13)$$

При этом $\gamma(\text{tr}) = q \cdot \gamma(\text{tr}_2) = 3 \cdot 2 = 6$.

Коэффициенты метода Рунге-Кутты третьего порядка определяются системой уравнений, включающих условие первого порядка (14), условие второго порядка (15) и, определяемые с помощью формул (12)-(13), условия третьего порядка (16):

$$\sum_i b_{i_1} = 1 \quad (14)$$

$$\sum_i b_{i_1} c_{i_1} = \frac{1}{2} \quad (15)$$

$$\sum_i b_{i_1} c_{i_1}^2 = \frac{1}{3}$$

$$\sum_i b_{i_1} a_{i_1 i_2} c_{i_2} = \frac{1}{6} \quad (16)$$

Аналогичным образом формируются условия для метода любого порядка.

Конструирование методов высоких порядков

Рассмотрим зависимости, связывающие порядок и число стадий метода Рунге-Кутты с точностью получаемых решений. Сравним результаты численных реализаций, полученные с помощью классических четырехэтапных методов Рунге-Кутты третьего порядка, определяемых коэффициентами (17) и (18) с решениями, полученными сгенерированными методами. Для этого на основании описанного выше подхода были сгенерированы шестиэтапные методы (19) и (20) пятого порядка и семиэтапные методы шестого порядка (21) и (22).

Четырехэтапные методы:

0				
0,5	0,5			
0,5	0	0,5		
1	0	0	1	
	1/6	2/6	2/6	1/6

0				
1/3	1/3			
2/3	-1/3	1		
1	1	-1	1	
	1/8	3/8	3/8	1/8

Шестиэтапные методы:

0						
1/4	1/4					
1/4	1/8	1/8				
1/2	0	0	1/2			
3/4	3/16	-3/8	3/8	9/16		
1	-3/7	8/7	6/7	-12/7	8/7	
	7/90	0	16/45	2/15	16/45	7/90

$$\begin{array}{c|cccccc}
 0 & & & & & & \\
 1/3 & 1/3 & & & & & \\
 2/5 & 4/25 & 6/25 & & & & \\
 1 & 1/4 & -3 & 15/4 & & & \\
 2/3 & 2/27 & 10/9 & -50/81 & 8/81 & & \\
 4/5 & 2/25 & 12/25 & 2/15 & 8/75 & 0 & \\
 \hline
 & 23 & 0 & 125 & 0 & -27 & 125 \\
 & 192 & & 192 & & 64 & 192
 \end{array} \quad (20)$$

Семиэтапные методы:

$$\begin{array}{c|cccccc}
 0 & & & & & & \\
 1 & 1 & & & & & \\
 3 & 3 & & & & & \\
 2 & 0 & 2 & & & & \\
 3 & 3 & 3 & & & & \\
 1 & 1 & 1 & -1 & & & \\
 3 & 12 & 3 & 12 & & & \\
 5 & 25 & 55 & 35 & 15 & & \\
 6 & 48 & 24 & 48 & 8 & & \\
 1 & 3 & 11 & 1 & 1 & 1 & \\
 6 & 20 & 24 & 8 & 2 & 10 & \\
 1 & 261 & 33 & 43 & 118 & 32 & 80 \\
 \hline
 & 260 & 13 & 156 & 39 & 195 & 39 \\
 & 13 & 0 & 11 & 11 & 4 & 4 & 13 \\
 & 200 & & 40 & 40 & 25 & 25 & 200
 \end{array} \quad (21)$$

$$\begin{array}{c|cccccc}
 0 & & & & & & \\
 2 & 2 & & & & & \\
 5 & 5 & & & & & \\
 4 & 0 & 4 & & & & \\
 5 & 5 & 5 & & & & \\
 2 & 169 & 110 & 65 & & & \\
 9 & 1458 & 729 & 1458 & & & \\
 8 & 44 & 88 & 76 & 336 & & \\
 15 & 675 & 175 & 351 & 325 & & \\
 0 & 21 & 0 & 105 & 324 & 45 & \\
 & 106 & & 689 & 689 & 106 & \\
 1 & 2517 & 55 & 10615 & 567 & 7245 & 2597 \\
 & 4864 & 38 & 31616 & 7904 & 4864 & 2432 \\
 \hline
 & 0 & 0 & 1375 & 6561 & 3375 & 53 & 19 \\
 & & & 4992 & 20384 & 12544 & 768 & 294
 \end{array} \quad (22)$$

Конструирование блочных методов

Блочные методы позволяют реализовать решение ОДУ на параллельных компьютерах. Основная идея таких блочных методов заключается в одновременном получении приближений точного решения в равноотстоящих точках блока. Если допустить, что приближения могут соответствовать неравноудаленным точкам блока, то можно свести решение к получению аппроксимаций, вычисляемых как в методе Рунге-Кутты.

Блочный s-этапный блочный метод задается (23) с матрицей коэффициентов (24) [9-11]:

$$Y^{(i)} = A_i Y_n + h \sum_{j=1}^s A_j f(Y^{(i)}), \quad i=1, \dots, s; \quad (23)$$

$$Y_{n+1} = B_0 Y_n + h \sum_{j=1}^s B_j f(Y^{(i)}), \quad n=0, 1, \dots,$$

$$y_{n+1} := (e_k)^T Y_{n+1},$$

где k – число аппроксимаций решения;

A_i, A_{ij}, B_0 и B_j – матрицы коэффициентов, размерностью r^*k, r^*r, k^*k и k^*r ;

e_k – k-й единичный вектор;

$$Y_{n+1} := (y_{n+c_1}, y_{n+c_2}, \dots, y_{n+c_k})^T \quad - \quad k\text{-мерный}$$

блочный вектор, компонентами которого являются приближения значений точного решения $y(t_n+c_j h)$. При этом, $c_k = 1$, другие значения c_j – могут быть положены равными любому действительному значению.

Рассмотрим двухэтапный блочный метод, заданный матрицей коэффициентов (24):

$$\begin{array}{c|cc}
 1 & 0 & \\
 0 & 1 & \\
 5 & -4 & 1 \quad 2 \\
 28 & -27 & 6 \quad 9 \\
 \hline
 0 & 1 & -1/48 \quad 13/48 \quad 13/48 \quad -1/48 \\
 0 & 1 & 0 \quad 1/6 \quad 2/3 \quad 1/6 \\
 \hline
 & & c = (1/2, 1)^T
 \end{array} \quad (24)$$

Численные эксперименты

В качестве тестового рассмотрим решение уравнения, приведенного в [9]:

$$y'(t) = \sin(y^5) - \sin(\sin^5(t)) + \cos(t), \quad y(0) = 0 \quad (25)$$

с известным точным решением $y(t) = \sin(t)$.

На интервале $[0, 1]$ все методы дают достаточно хорошее решение даже при шаге $h=0,5$ (см. табл. 1). Однако с увеличением интервала при шаге $h=0,2$ хорошее решение дают только методы высоких порядков (см. табл. 2).

Таблица 1. – Абсолютная погрешность методов в точке 1 с точным решением 0,84147

Метод	h=0,01	h=0,1	h=0,2	h=0,5
2х-этапн.				
блочный (24)	0,0043	0,0197	0,1393	0,5957
4х-этапн. (17)	0,00001	0,0001	0,0007	-0,003
4х-этапн. (18)	0,00001	0,0001	0,0005	0,007
6ти-этапн. (19)	0,000002	0,00001	0,0001	0,001
6ти-этапн. (20)	0,000003	0,00001	0,0002	0,001
7ми-этапн. (21)	0,0000001	0,000001	0,00001	-0,0001
7ми-этапн. (22)	0,0000001	0,000001	0,00001	-0,0002

Таблица 2. – Абсолютная погрешность методов в точке 7 с точным решением 0,65699

Метод	h=0,1	h=0,2	h=0,5
2х-этапный блочный (24)	0,4314	1,0285	1,2988
4х-этапный (17)	-0,0220	-0,2970	-1,5119
4х-этапный (18)	-0,0086	-0,1125	-0,9263
6ти-этапный (19)	-0,0001	-0,0051	-0,7511
6ти-этапный (20)	0,0001	-0,0083	-0,2202
7ми-этапный (21)	-0,00002	-0,0009	-0,07117
7ми-этапный (22)	-0,00002	-0,0009	-0,05935

Методы высоких порядков (пятого или шестого) позволяют при шаге интегрирования $h=0,1$ получить решение с заданной точностью, увеличивая интервал до 10 (см. рис. 5).

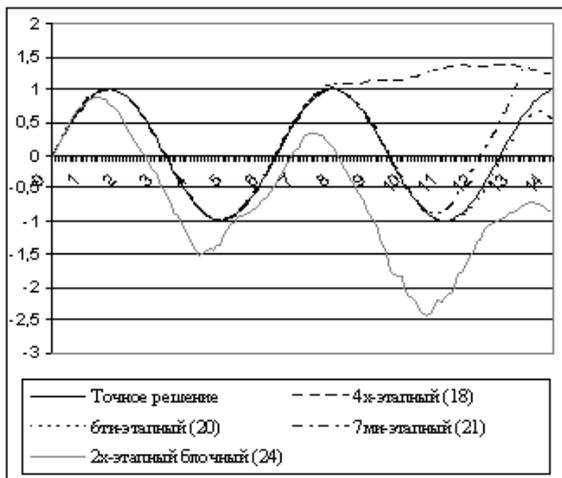


Рисунок 5. – Точное и численное решение функции при шаге $h=0,1$

Кроме того, методы порядков 5 и 6 позволяют получить хорошее решение задачи (25) на интервале $[0, 4]$ при шаге $h=0,5$ (см. рис. 6).

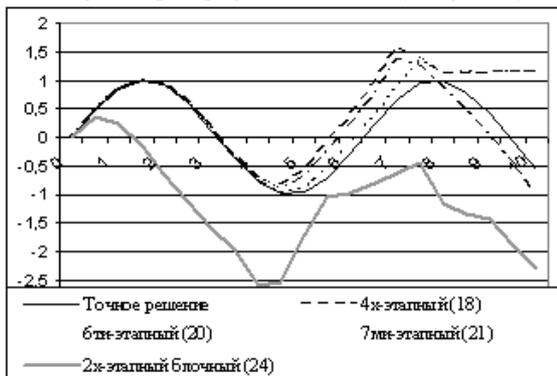


Рисунок 6. – Точное и численное решение функции при шаге $h=0,5$

Использование метода помеченных деревьев позволяет формировать методы типа

Рунге-Кутты высоких порядков. И, хотя, с ростом порядка число уравнений значительно возрастает [2], использование вычислительной техники позволяет автоматизировать вывод условий и снизить затраты времени на генерацию методов.

Литература

1. Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. – М.: Мир, 1999. – 685 с.
2. Хайрер Э., Нерсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. – М.: Мир, 1990. – 512 с.
3. Скворцов Л.М. Экономичная схема реализации неявных методов Рунге-Кутты. // Журнал вычислительной математики и математической физики, 2008, т.48, № 11, С. 2008-2018.
4. Формалев В. Ф., Ревизников Д. Л. Численные методы. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. - 400 с.
5. Фельдман Л.П., Петренко А.И., Дмитриева О.А. Чисельні методи в інформатиці – К. : Вид. група BHV, 2006. – 480 с.
6. Дмитриева О.А. Исследование влияния переменного шага на эффективность численного решения жестких дифференциальных уравнений //Труды конференции «Моделирование и компьютерная графика», Донецк, 7-9 октября 2009.
7. John Butcher. Numerical Method for Ordinary Differential Equations. – John Wiley & Sons Ltd, 2008. – 482 p.
8. Вержбицкий В.М. Численные методы. Математический анализ и обыкновенные дифференциальные уравнения. – М.: «Высшая школа», 2001. – 385 с.
9. P.J. van der Houwen, B.P.Sommeijer. Block Runge-Kutta methods on parallel computers // CWI Centre for Mathematics and Computer Science, Report NM-R8906, March, 1989.
10. P.J. van der Houwen. Block Runge-Kutta methods// CWI Centre for Mathematics and Computer Science, Report NM-R8913, June, 1989.
11. B.P.Sommeijer. Explicit, High-order Runge-Kutta-Nystrom Methods for Parallel Computers// CWI Centre for Mathematics and Computer Science, Report NM-R8814, November, 1988.

Синтез аппроксимирующей функции при неизвестной структуре модели

Иващенко А.Б., Беловодский В.Н.
Донецкий национальный технический университет
alesya_iva@list.ru, v.belovodskiy@gmail.com

Abstract

Ivashchenko A.B., Belovodskiy V.N. "Synthesis of the approximating function in case of the unknown structure of the model". In this paper an effective technique of synthesis of approximating function, especially in case of unknown structure of model is presented. The algorithm stages are described, namely: formation of bank of functions, selection of perspective functions and elimination of the useless one. The paper discusses the features of software implementation and results of the algorithm testing. As a result of the technique analysis its advantages and disadvantages have been identified. Suggestions on improving of the methodology are offered.

Keywords: approximation, the bank of functions, the least squares method, regression, perspective function, elimination.

Введение

Трудно спорить с тем, что регрессионный анализ – классика фундаментальных исследований. С момента разработки К.Гауссом метода наименьших квадратов регрессионный анализ превратился в отдельную науку, а методы аппроксимации стали его логическим продолжением. За эти годы вопросом приближения функций посвящен большой цикл работ отечественных и зарубежных ученых, однако и в настоящее время данное направление по-прежнему остается актуальным.

Одной из основных при анализе экспериментальных объемов информации является задача выявления математической зависимости между переменными.

Особенно сложно определить вид регрессионной модели в случае большого числа переменных, если учесть, как правило, неизвестный характер их влияния на результирующий фактор, с одной стороны, и наличие неустранимой погрешности, – с другой. В силу этих причин, на практике оказывается далеко не простым делом подобрать одновременно «красивую» и удачно описывающую экспериментальные данные модель.

Существует ряд традиционных методов аппроксимации – это различные виды регрессий, сплайновая аппроксимация, методы группового учета аргументов, аппроксимация тригонометрическими функциями (спектральный анализ, БПФ, вейвлеты). Описанию этих подходов посвящен ряд работ [1-4]. Не умаляя их достоинств, заметим, что, пожалуй, в каждом из них используются предварительные предположения о характере зависимости между входными величинами. В

случае же отсутствия представлений о структуре модели, например, при наличии модели типа «черный ящик», весомость разработки методов, позволяющих проводить формирование зависимостей, адекватных структуре исходной информации, резко возрастает.

С этой точки зрения особого внимания, по мнению авторов, заслуживает поход к построению аппроксимирующей зависимостей, предложенный в работах В.О.Эглайса [5, 6]. К числу его привлекательных сторон можно отнести отсутствие требований к наличию исходной информации о структуре модели, широкий диапазон, используемых в процессе аппроксимации степенных функций и, наконец, возможность автоматизированного составления аппроксимирующей зависимостей, которые наиболее адекватно, по некоторому критерию, соответствуют исходной информации.

Целью данной статьи как раз и является описание и реализация метода В.О.Эглайса, выполнение тестовых расчетов, анализ его особенностей.

Метод Эглайса, его описание

Пусть в таблице 1 представлена информация об исследуемой модели.

Таблица 1. – Исходные данные

№п/п	x_1	x_2	...	x_n	y
1					
2					
...					
k					

Здесь x_1, \dots, x_n – параметры объекта (или факторы, независимые переменные); y – отклик (зависимая переменная); k – число экспериментов.

Требуется синтезировать соответствующее уравнение регрессии в виде:

$$y = A_0 + F(A_j, X_i), \quad (1)$$

где A_0 – свободный член (постоянная), A_j – набор коэффициентов уравнения регрессии, X_i – набор параметров объекта.

Суть метода заключается в следующем. Аппроксимирующая функция строится в классе степенных разложений и процесс ее нахождения включает следующие этапы. Первоначально, по заданной степени многочлена, формируется множество базисных функций, затем, из этого множества выбирается заданное количество перспективных функций, после чего, направленным перебором, который В.Эглайс называет элиминацией, осуществляется окончательный подбор функции адекватной исходной информации. Остановимся более подробно на описании указанных этапов.

1. *Формирование банка элементарных функций.* Создается ограниченный банк элементарных функций $\Phi: \{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_l\}$. Здесь $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_l$ – функции параметров объекта, не содержащие неопределенных коэффициентов. Такой банк дает возможность синтезировать большое число разнообразных уравнений в виде

$$y = A_0 + \sum_{i=1}^m A_i f_i(\bar{x}), \quad (2)$$

где $\{f_i(\bar{x})\}$ – набор элементарных функций из банка Φ с коэффициентами, которые вычисляются по методу наименьших квадратов.

В [5] рекомендуется создавать банк Φ с таким расчетом, чтобы элементарные функции, входящие в него, по возможности меньше дублировали друг друга и, в некотором смысле, соответствовали классу исследуемого объекта. Для описания достаточно гладких многомерных зависимостей предлагается использовать банк элементарных функций вида:

$$\varphi_k(\bar{x}) = \prod_{i=1}^n x_i^{\alpha_{k,i}}, \quad (3)$$

где n – число параметров объекта, $\alpha_{k,i}$ – наборы целых чисел, каждый из которых определяет свою элементарную функцию банка.

Чтобы ограничить, в разумных пределах, число функций банка, вводится своего рода ограничитель в виде условия:

$$\sum_{i=1}^n |\alpha_{k,i}| \leq K_n, \quad (4)$$

где K_n – максимально возможная степень для каждого набора параметров.

В работе [5], в частности, рекомендуется выбирать значение K_n так, чтобы общее число функций банка не превышало 400. Следует отметить, что с ростом вычислительных мощностей современных ЭЦВМ и развитием скоростей обработки данных эта граница, при необходимости, может быть значительно увеличена. Обычно, для выбора K_n достаточно множества $\{1, 2, 3, 4, 5\}$.

2. *Отбор из банка «перспективных» функций.* После того, как банк функций сформирован, производится отбор перспективных функций. Для этого, с помощью метода наименьших квадратов, для каждой базовой функции вычисляются коэффициенты элементарного уравнения регрессии:

$$y_i = A_i + B_i \varphi_i(\bar{x}), \quad (5)$$

а также суммарные квадратичные отклонения:

$$s_i = \sum_{j=1}^k (A_i + B_i \varphi_i(\bar{x}_j) - y_j)^2. \quad (6)$$

По их величинам отбирается заданное число функций, обеспечивающих наименьшие значения s_i , которые и формируют множество перспективных функций. Далее, строится функция:

$$y_j^* = A_0 + \sum_{i=1}^p A_i f_i(\bar{x}_j), \quad (7)$$

где p – назначенное количество перспективных функций, $f_i(\bar{x})$ – отобранные перспективные функции, y_j^* – значение отклика, рассчитанное по отобранным перспективным функциям; A_0, A_i – коэффициенты, определенные по методу наименьших квадратов из требования минимума величины:

$$\Delta = \sum_{j=1}^k (y_j^* - y_j)^2. \quad (8)$$

3. *Элиминация и синтез уравнения.* После отбора перспективных функций проводится элиминация (исключение) наименее существенных элементарных функций из набора перспективных. Это необходимо из следующих соображений. Естественно считать, что среди функций, отобранных в регрессионную модель (7), только часть действительно необходима в формируемом уравнении регрессии. Остальные из этого уравнения безболезненно можно исключить.

Пусть отобрано всего p функций. Тогда имеется p вариантов первого исключения одной функции из уравнения регрессии. По методу наименьших квадратов проверяются все

варианты, и исключается функция, дающая минимальное s_i по формуле:

$$\sigma = \sqrt{\frac{\Delta}{k - (p - 1)}}, \quad (9)$$

где k – число точек в таблице, а $(p - 1)$ – количество функций, оставшихся после исключения одной из них на данном шаге элиминации. Далее, переменной p присваивают значение $(p - 1)$ и следующий шаг процесса элиминации повторяется аналогичным образом.

То есть, для определения наименее существенной функции на каждом шаге элиминации проверяются все возможные варианты исключения, и исключается функция, без которой уравнение регрессии в форме (7) дает минимум среднеквадратичного отклонения по формуле (9). Подобным образом последовательно исключаются и все остальные отобранные функции. Выбор окончательного варианта уравнения регрессии проводится по диаграмме элиминации $\sigma = \sigma(p)$, показанной на рисунке 1. Такая схема исключения функций удобна для визуальной оценки степени «важности» исключаемых функций.

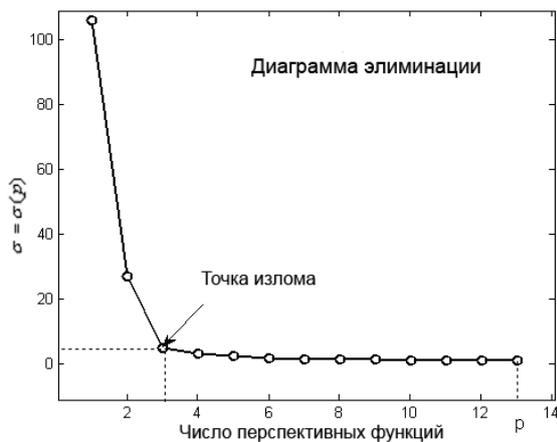


Рисунок 1. – Диаграмма элиминации (зависимость σ от p)

Пока из уравнения регрессии исключаются несущественные функции, величина σ меняется мало. Когда же в наличии остаются только существенные функции, исключение любой из них заметно увеличивает среднеквадратичное отклонение. Таким образом, излом в диаграмме элиминации свидетельствует о получении наиболее предпочтительного уравнения регрессии в смысле точности σ и надежности, которая определяется числом коэффициентов в уравнении регрессии [5].

Точность уравнения регрессии можно также характеризовать относительным аналогом среднего квадрата отклонений σ – коэффициентом корреляции c :

$$c = \left(1 - \frac{\sigma}{\sigma_0}\right) \cdot 100\%, \quad (10)$$

где σ_0 – среднеквадратичное отклонение откликов от среднего:

$$\sigma_0 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^k \left(y_i - \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k y_j\right)^2}{k - 1}}. \quad (11)$$

Использование коэффициента c особенно оправдано в случаях, когда имеется необходимость наглядно продемонстрировать, визуально оценить или сравнить корреляционную зависимость между экспериментальным откликом и откликом, полученным с помощью синтезируемой модели, при варьировании количества членов аппроксимирующей функции.

То есть, в этом случае диаграмма элиминации $c = c(p)$ (приведена на рисунке 2) имеет более универсальный масштаб и позволяет пользователю установить, сколько функций необходимо сохранить в синтезированном уравнении, чтобы получить модель с достаточной или требуемой точностью.

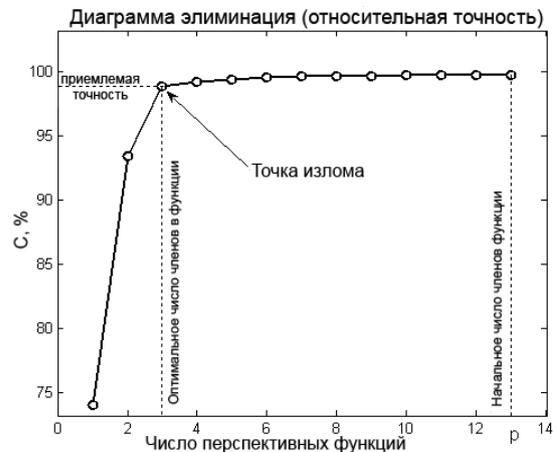


Рисунок 2. – Диаграмма элиминации (относительная точность модели)

Предполагается, что определение точки прекращения процесса элиминации (определение оптимального числа функций в регрессионной модели) производится пользователем визуально, путем оценки одной из указанных выше диаграмм [5].

Особенности программной реализации

Описанная методика синтеза регрессионных уравнений была реализована в среде пакета Matlab. Основной задачей при проектировании программного обеспечения был

анализ особенностей программной реализации отдельных этапов и проверка эффективности метода.

Разработка алгоритма генерации банка начальных функций была осуществлена с использованием комбинаторных соображений на базе перебора вариантов размещений с повторениями из k объектов по n местам. Вкратце идея реализации заключается в следующем. Пусть имеются n различных независимых параметра x_1, x_2, \dots, x_n . Тогда формирование банка неповторяющихся функций вида (3), можно обеспечить путем перебора комбинаций при условии, что задана максимально возможная степень k (для выполнения условия (4)). Первоначально, перебираются все варианты размещений с повторениями из n по $2k+1$. Число $2k+1$ есть сумма количества возможных положительных и отрицательных степеней плюс нулевая степень. Тогда, результатом генерации всех возможных комбинаций размещений с повторениями будет массив:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 2 \\ & & \dots & & \\ 1 & 1 & \dots & & 2k+1 \\ 1 & 1 & \dots & 2 & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 2 & 2 \\ & & \dots & & \\ 1 & 1 & \dots & 2 & 2k+1 \\ 1 & 1 & \dots & 3 & 1 \\ & & \dots & & \\ 2k+1 & 2k+1 & \dots & 2k+1 & 2k \\ 2k+1 & 2k+1 & \dots & 2k+1 & 2k+1 \end{pmatrix}}_{\text{Всего } n \text{ мест}} \quad (12)$$

Используя формулу $\tilde{A}_n^m = n^m$ для вычисления числа размещений с повторениями [7], составленных из n элементов по m , нетрудно заметить, что в нашем случае имеем $(2k+1)^n$ вариантов. Следует отметить, что на данный момент в базовом пакете MatLab отсутствуют специальные функции для генерации вариантов размещений с повторениями, как и в других математических средах моделирования. Тем не менее, на сайте корпорации MathWorks™ [8], в сообществе разработчиков в среде MatLab, можно скачать готовую m -функцию *combinator* для генерации различных множеств и переборов комбинаций [9]. В нашем случае ее следует вызвать со следующими параметрами:

`combinator(2*k+1, n, 'p', 'r')`,

где первый параметр функции – число

элементов множества $\{1, 2, \dots, 2 \cdot k, 2 \cdot k + 1\}$, второй параметр – количество позиций (мест) для формирования необходимых комбинаций (перестановок или размещений), два последних параметра означают вычисление «размещения с повторениями» (permutations with repetition).

Поскольку, в процессе построения регрессионного уравнения, допускается возможность оперирования и с отрицательными степенями, далее, необходимо провести «центрирование» массива, то есть из каждого элемента полученного массива степеней вычесть $(k+1)$. После центрирования получим массив следующих наборов (строк) степеней:

$$\begin{pmatrix} -k & -k & \dots & -k & -k \\ -k & -k & \dots & -k & -k+1 \\ & & \dots & & \\ -k & -k & \dots & -k & k \\ -k & -k & \dots & -k+1 & -k \\ -k & -k & \dots & -k+1 & -k+1 \\ & & \dots & & \\ -k & -k & \dots & -k+1 & k \\ -k & -k & \dots & -k+2 & -k \\ & & \dots & & \\ k & k & \dots & k & k-1 \\ k & k & \dots & k & k \end{pmatrix} \quad (13)$$

В принципе, генерацию степеней на этом можно было бы и закончить. Однако, если точно следовать методике, то необходимо, кроме этого, перебрать строки полученного массива и оставить лишь те, сумма модулей элементов (то есть степеней в будущей функции) которых не превышает k – максимальное значение «общей» степени функции (для удовлетворения условия неравенства(4)). Обратим внимание, что среди сформированных таким способом наборов степеней будет и тот, в котором степени всех параметров равны нулю, то есть строка степеней $(0 \ 0 \ \dots \ 0 \ 0)$. Такая функция будет постоянной для любой точки таблицы и будет равна единице. Учитывая, что мы ищем уравнение в виде (1), такая функция будет дублировать свободный член A_0 , который изначально уже предусмотрен в синтезируемом уравнении регрессии (2). Поэтому, для устранения нежелательного повтора функций, набор, в котором все степени равны нулю, тоже исключается.

Так, например, для числа параметров $n = 2$ и максимально возможной степени $k = 3$ получим банк из 24 элементарных функций. Для наглядности промежуточные результаты алгоритма и вид сгенерированных функций для данного примера приведен ниже (таблица 2).

Таблица 2. – Пример генерации базовых функций для n=2, k=3

№п/п	Шаг 1		Шаг 2		Шаг 3		Шаг 4
Описание	Генерация размещений из $2k+1$ по n		«Центрирование» массива		Отбор строк, сумма модулей элементов которых не выше k		Формирование функций f по сгенерированным наборам степеней α
Операции	$a=\text{combinator}(2*k+1,n,'p','r')$		$a=a-(k+1)$		for $i=1:49$ if $\text{abs}(a(i,1))+\text{abs}(a(i,2))\leq k$ $\alpha(j)=a(i); j=j+1; \text{end};$		for $i=1:49$ $f(i)=x(1)^{\alpha(i,1)}*x(2)^{\alpha(i,2)}$
Результат	$a=$		$a=$		$\alpha=$		$f=$
1	1	1	-3	-3			
2	1	2	-3	-2			
3	1	3	-3	-1			
4	1	4	-3	0	-3	0	x_1^{-3}
5	1	5	-3	1			
6	1	6	-3	2			
7	1	7	-3	3			
8	2	1	-2	-3			
9	2	2	-2	-2			
10	2	3	-2	-1	-2	-1	$x_1^{-2}x_2^{-1}$
11	2	4	-2	0	-2	0	x_1^{-2}
12	2	5	-2	1	-2	1	$x_1^{-2}x_2^1$
13	2	6	-2	2			
14	2	7	-2	3			
15	3	1	-1	-3			
16	3	2	-1	-2	-1	-2	$x_1^{-1}x_2^{-2}$
17	3	3	-1	-1	-1	-1	$x_1^{-1}x_2^{-1}$
18	3	4	-1	0	-1	0	x_1^{-1}
19	3	5	-1	1	-1	1	$x_1^{-1}x_2^1$
20	3	6	-1	2	-1	2	$x_1^{-1}x_2^2$
21	3	7	-1	3			
22	4	1	0	-3	0	-3	x_2^{-3}
23	4	2	0	-2	0	-2	x_2^{-2}
24	4	3	0	-1	0	-1	x_2^{-1}
25	4	4	0	0			
26	4	5	0	1	0	1	x_2^1
27	4	6	0	2	0	2	x_2^2
28	4	7	0	3	0	3	x_2^3
29	5	1	1	-3			
30	5	2	1	-2	1	-2	$x_1^1x_2^{-2}$
31	5	3	1	-1	1	-1	$x_1^1x_2^{-1}$
32	5	4	1	0	1	0	x_1^1
33	5	5	1	1	1	1	$x_1^1x_2^1$
34	5	6	1	2	1	2	$x_1^1x_2^2$
35	5	7	1	3			
36	6	1	2	-3			
37	6	2	2	-2			
38	6	3	2	-1	2	-1	$x_1^2x_2^{-1}$
39	6	4	2	0	2	0	x_1^2
40	6	5	2	1	2	1	$x_1^2x_2^1$
41	6	6	2	2			
42	6	7	2	3			
43	7	1	3	-3			
44	7	2	3	-2			
45	7	3	3	-1			
46	7	4	3	0	3	0	x_1^3
47	7	5	3	1			
48	7	6	3	2			
49	7	7	3	3			

Таким способом, при $n = 2$ и $k = 3$ получается следующий банк функций:

$$\Phi = \left\{ \begin{array}{l} x_1^{-3}, x_1^{-2}x_2^{-1}, x_1^{-2}, x_1^{-2}x_2^1, \\ x_1^{-1}x_2^{-2}, x_1^{-1}x_2^{-1}, x_1^{-1}, \\ x_1^{-1}x_2^1, x_1^{-1}x_2^2, x_2^{-3}, x_2^{-2}, \\ x_2^{-1}, x_2^1, x_2^2, x_2^3, x_1^1x_2^{-2}, \\ x_1^1x_2^{-1}, x_1^1, x_1^1x_2^1, x_1^1x_2^2, \\ x_1^2x_2^{-1}, x_1^2, x_1^2x_2^1, x_1^3 \end{array} \right\}. \quad (13)$$

Обратим внимание, что с целью исключения деления на ноль в процессе вычислений, перед формированием банка функций рекомендуется предусмотреть линейную нормировку аргументов:

$$x^* = \frac{(x_{\max}^* - x_{\min}^*)x + (x_{\min}^*x_{\max} - x_{\max}^*x_{\min})}{x_{\max} - x_{\min}}, \quad (14)$$

где x – натуральное, то есть исходное, значение независимой переменной, x^* – ее нормированное значение, x_{\min} , x_{\max} – соответственно, минимальное и максимальное значение переменной x ; x_{\min}^* , x_{\max}^* – диапазон изменения ее нормированного значения. Здесь предполагается, что $x_{\min}^* > 0$, $x_{\max}^* > 0$.

Избежать ситуации деления на ноль можно также другим способом. Нормировку аргументов можно не проводить, предварительно проверяя входные данные на наличие нулевых элементов и запоминая каким-либо способом аргументы-столбцы, которые их содержат. Затем, описанным выше способом формировать массив наборов степеней и уже из него удалять те наборы, в которых для помеченных переменных присутствует отрицательная степень.

Вычислительные эксперименты, анализ результатов

Для тестирования и верификации изложенного алгоритма использовались тестовые наборы «псевдоэкспериментальных» данных с различным числом точек и различным числом входных параметров. Под этим понималось искусственное задание значений параметров и соответствующих им откликов, аналитический вид зависимости между которыми задан заранее.

С целью наглядного представления эффективности работы программы приведем некоторые тестовые примеры.

Пример 1. Экспериментальные данные заданы функцией

$$y = x^2 + 2x + 5. \quad (15)$$

Численные результаты построения аппроксимирующей зависимости приведены в таблице 3, в которой представлены входные

данные (фактор x и отклик y), а также отклик y_{exp} , полученный в результате синтеза аппроксимирующей функции. Восстановление аппроксимирующей функции для этого примера производилось при условии, что $k = 2$, $p = 3$.

Таблица 3. – Входные данные и результаты аппроксимации для примера 1

№п/п	x	y	y_{exp}
1	1	8	8
2	2	15	15
3	3	26	26
4	4	41	41
5	5	60	60
6	6	83	83
7	7	110	110
8	8	141	141
9	9	176	176
10	10	215	215

На рисунке 3 представлена диаграмма элиминации для данного примера. Излом в точке $p^* = 2$ соответствует оптимальному числу членов в синтезируемой функции.

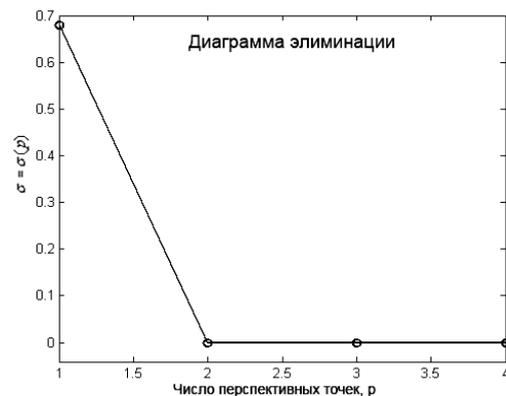


Рисунок 3. – Диаграмма элиминации (для примера 1)

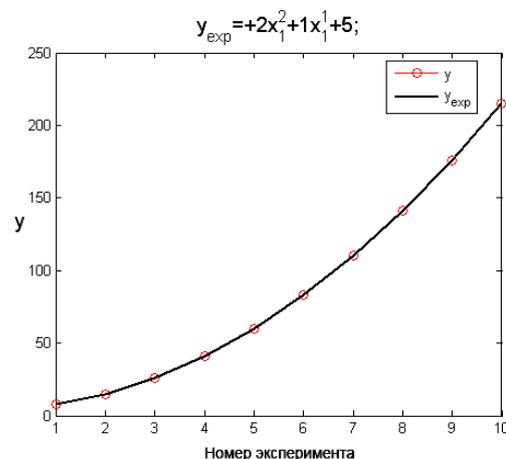


Рисунок 4. – График аппроксимирующей функции и значения отклика в экспериментальных точках для примера 1

Как видно по таблице 3 и из рисунка 4, аппроксимирующая функция, построенная при помощи исследуемой методики, восстановлена правильно.

Пример 2. Экспериментальные данные заданы функцией

$$y = 3x_1^3 + 2x_2^2 + x_1^{-1}x_2^2 + 6x_1x_2 + 7x_2 + 5. \quad (16)$$

Создаем исходный файл, содержащий табличные данные, описываемые зависимостью (16). Задаем параметры синтеза уравнения $k = 3$, $p = 15$. По диаграммам элиминации делаем вывод, что при пяти членах в синтезируемой функции на диаграмме происходит излом (рисунок 5, 6).

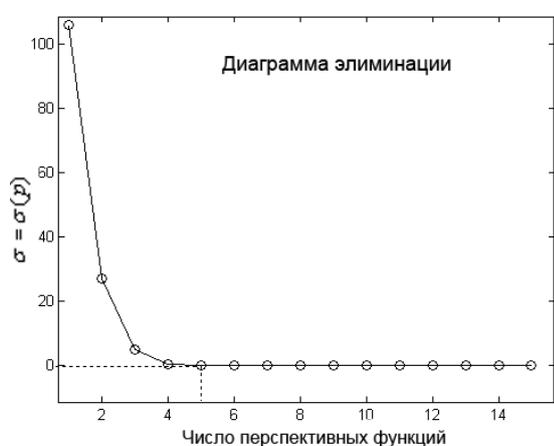


Рисунок 5. – Диаграмма элиминации для примера 2 (абсолютная точность)

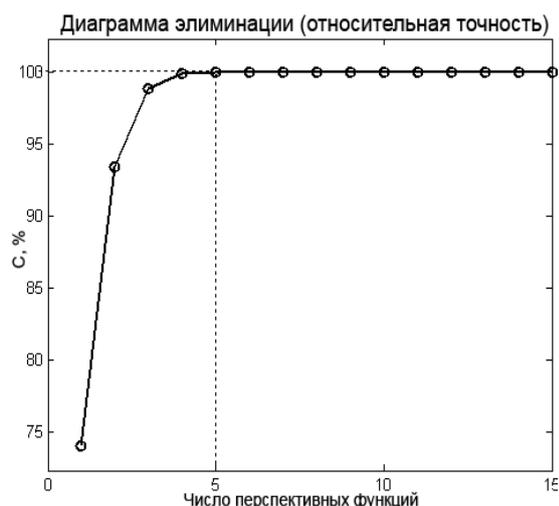


Рисунок 6. – Диаграмма элиминации для примера 2 (относительная точность)

Исходные данные и результаты восстановления откликов представлены в таблице 4.

Таблица 4. – Входные данные и результаты аппроксимации для примера 2

№№	x1	x2	y	y exp
1	2	1	50,5	50,5
2	1	2	46	46
3	2	3	108,5	108,5
4	3	1	113,33	113,33
5	1	2	46	46
6	5	3	510,8	510,8
7	6	1	698,17	698,17
8	7	6	1405,1	1405,1
9	6	7	1060,2	1060,2
10	2	1	50,5	50,5
11	5	5	620	620
12	2	0	29	29
13	-1	1	4	4
14	3	5	269,33	269,33
15	6	1	698,17	698,17
16	4	1	230,25	230,25
17	2	5	186,5	186,5
18	-1	5	32	32
19	2	6	233	233
20	3	7	375,33	375,33
21	1	6	194	194
22	2	2	77	77
23	3	5	269,33	269,33
24	7	0	1034	1034
25	6	-1	612,17	612,17
26	7	3	1200,3	1200,3
27	4	6	464	464
28	3	7	375,33	375,33
29	4	4	357	357
30	5	5	620	620
31	6	4	859,67	859,67
32	7	2	1140,6	1140,6
33	6	5	922,17	922,17
34	2	1	50,5	50,5
35	5	1	419,2	419,2
36	7	3	1200,3	1200,3
37	6	6	989	989
38	7	7	1482	1482
39	4	4	357	357
40	3	5	269,33	269,33
41	4	4	357	357
42	5	2	462,8	462,8
43	6	5	922,17	922,17
44	6	1	698,17	698,17
45	4	1	230,25	230,25
46	2	4	145	145
47	-2	5	-6,5	-6,5
48	2	4	145	145
49	2	2	77	77
50	1	5	148	148
51	2	1	50,5	50,5
52	3	8	435,33	435,33

Такой характер поведения элиминации приводит к окончательному варианту аппроксимирующей функции, полностью совпадающим с изначально заданной в тестовом наборе. На рисунке 7 представлен график аппроксимирующей функции как функции номера экспериментальной точки.

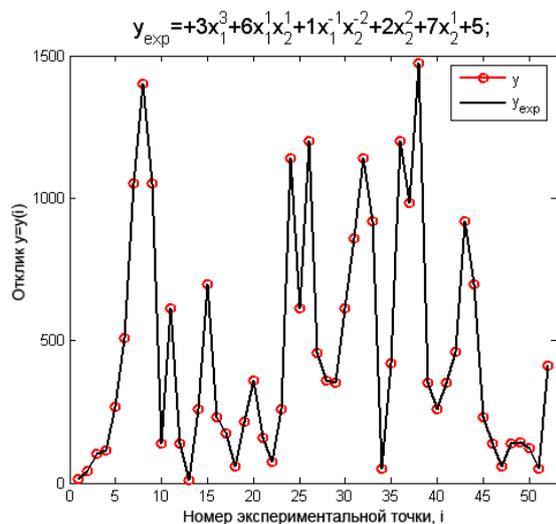


Рисунок 7. – Результаты построения аппроксимирующей зависимости для примера 2

Пример 3. Экспериментальные данные описываются функцией $y = \sin(x)$.

Соответствующие табличные данные и результаты аппроксимации (значения откликов, восстановленных по аппроксимирующей функции) представлены в таблице 5.

В этом случае были подобраны следующие параметры синтеза уравнения $k = 10, p = 10$. После отбора p перспективных функций было получено уравнение в виде:

$$\begin{aligned}
 y_{\text{экр}} = & +0.9996x_1^1 + \\
 & +0.0019623x_1^2 - 0.1709x_1^3 + \\
 & +0.0048954x_1^4 + 0.0049728x_1^5 + \\
 & +0.0014367x_1^6 - 0.00058386x_1^7 + \\
 & +6.2042e-005x_1^8 - 2.2139e-006x_1^9 + \\
 & +1.1862e-009x_1^{10} + 2.0878e-005;
 \end{aligned}
 \tag{17}$$

После построения диаграмм элиминации (рисунки 8, 9) было принято решение об оставлении в аппроксимирующем выражении пяти перспективных функций.

Таблица 5. – Исходные данные и результаты аппроксимации для примера 3

№п/п	x	y	y_экр
1	0,017453	0,017452	0,020252
2	0,034907	0,034899	0,037583
3	0,05236	0,052336	0,054903
4	0,069813	0,069756	0,072208
5	0,087266	0,087156	0,089492
6	0,10472	0,10453	0,10675
7	0,12217	0,12187	0,12398
8	0,13963	0,13917	0,14117
9	0,15708	0,15643	0,15831
10	0,17453	0,17365	0,17541
11	0,19199	0,19081	0,19246
12	0,20944	0,20791	0,20945
13	0,22689	0,22495	0,22638
14	0,24435	0,24192	0,24324
15	0,2618	0,25882	0,26003
16	0,27925	0,27564	0,27674
17	0,29671	0,29237	0,29337
18	0,31416	0,30902	0,30991
19	0,33161	0,32557	0,32636
20	0,34907	0,34202	0,34271
21	0,36652	0,35837	0,35895
22	0,38397	0,37461	0,37509
23	0,40143	0,39073	0,39112
24	0,41888	0,40674	0,40703
25	0,43633	0,42262	0,42281
26	0,45379	0,43837	0,43847
27	0,47124	0,45399	0,454
28	0,48869	0,46947	0,46939
29	0,50615	0,48481	0,48464
30	0,5236	0,5	0,49975
31	0,54105	0,51504	0,5147
...
176	3,0718	0,069756	0,070812
177	3,0892	0,052336	0,053322
178	3,1067	0,034899	0,035815
179	3,1241	0,017452	0,018295
180	3,1416	0,0	0,000768
181	3,159	-0,01745	-0,01676
182	3,1765	-0,0349	-0,03429
...
353	6,161	-0,12187	-0,12078
354	6,1785	-0,10453	-0,10255
355	6,1959	-0,08716	-0,08419
356	6,2134	-0,06976	-0,0657
357	6,2308	-0,05234	-0,04706
358	6,2483	-0,0349	-0,02829
359	6,2657	-0,01745	-0,00938

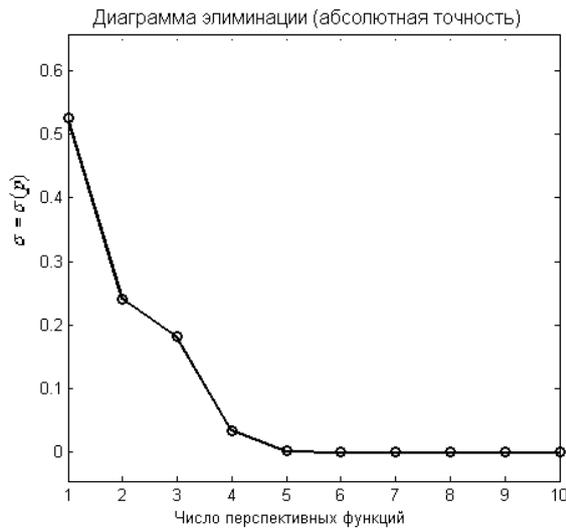


Рисунок 8. – Диаграмма элиминации (абсолютная точность)

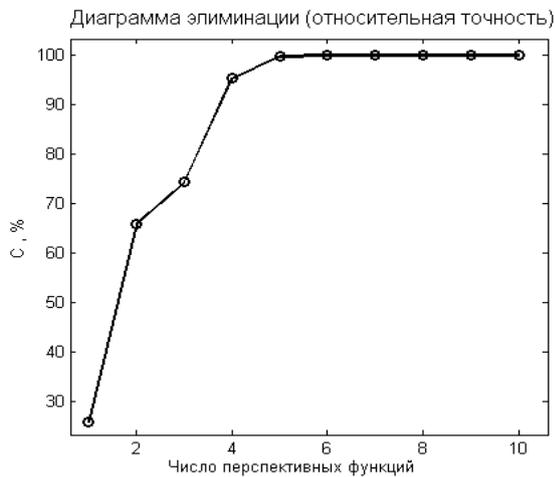


Рисунок 9. – Диаграмма элиминации (относительная точность)

В результате получен следующий окончательный вид аппроксимирующей функции:

$$y_{\text{exp}} = +0.99335x_1^1 - 0.16441x_1^3 + 0.0081094x_1^5 - 0.00021947x_1^7 + 1.6461e-005x_1^9 + 0.0029153 \quad (18)$$

На рисунке 10 построен график функции (18) по исходным точкам. Для сравнения на рисунке 11 представлен график функции, которая получилась бы, если бы на этапе элиминации были удалены также и некоторые существенные функции.

В части интерпретации полученных выражений возникают следующие соображения. Известно, что синус представим в виде степенного ряда:

$$\sin(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \frac{x^9}{9!} - \dots \quad (19)$$

Тогда, из сравнения правых частей выражений (18) и (19) видно, что результат, полученный с помощью рассматриваемого алгоритма, близок к ряду (19) качественно, а это, на наш взгляд, свидетельствует о том, что рассматриваемая методика синтеза аппроксимирующей функции позволяет улавливать структуру модели по экспериментальным данным.

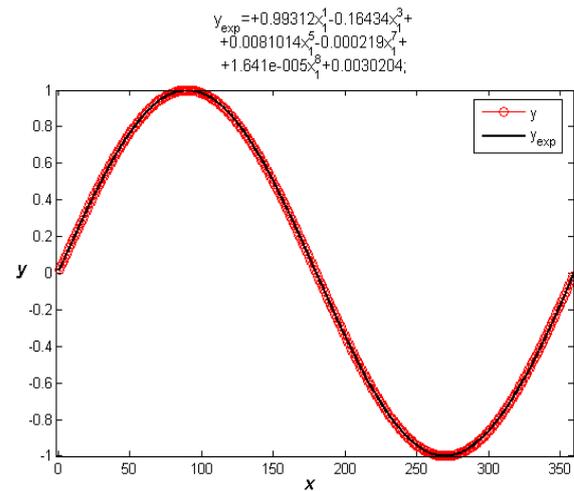


Рисунок 10. – Графики экспериментальной и аппроксимирующей функции

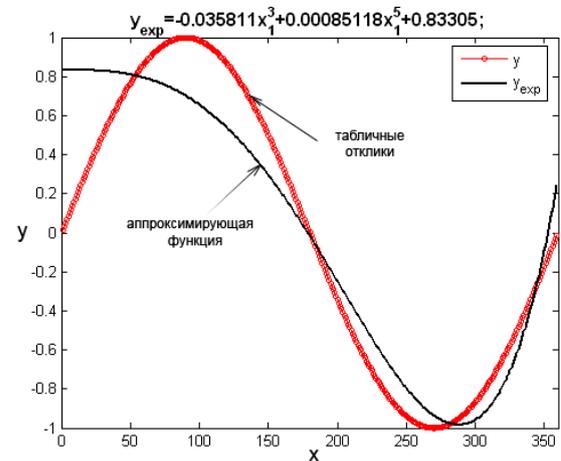


Рисунок 11. – Графики экспериментальной и аппроксимирующей функции с недостаточным числом членов

Полученные результаты, в целом, подтверждают эффективность рассматриваемого подхода и демонстрирует соответствие заявленным требованиям. Испытание алгоритма и эксплуатация его программной разработки дает возможность говорить как о ряде положительных сторон:

универсальности, точности и надежности полученных уравнений, простоте и удобстве пользования методикой, так и о некоторых недостатках. В частности, не во всех случаях алгоритм оправдывает ожидания при восстановлении относительно простых псевдоэкспериментальных зависимостей, в ходе тестирования имели место некоторые сбои, то есть случаи «непопадания» функций, заведомо присутствующих в структуре регрессионной модели, в число перспективных функций. Причины этого, на данный момент, однозначно выяснить не удалось и пока открыты для обсуждения. Наиболее правдоподобной представляется версия, связанная с объемом и количественными особенностями экспериментальных данных.

Кроме этого, тестирование показало, что нормирование исходных данных также, в ряде случаев, может негативно влиять на точность, а, иногда, и на правильность работы программы.

С учетом изложенного представляются целесообразными следующие направления развития данного метода:

– расширение возможности пользователя за счет выбора режима работы алгоритма: с нормировкой или без, или же автоматической проверки входных данных и нормировки их лишь в случае наличия отрицательных;

– обеспечение возможности включения пользователем дополнительных функций из числа базовых в число перспективных, по его усмотрению;

– модификация алгоритма в части совершенствования методики отбора перспективных функций.

Выводы

Рассмотренный метод синтеза аппроксимирующей зависимости экспериментальных данных обладает множеством привлекательных характеристик:

– не требует предварительных знаний о структуре модели;

– данную методику можно считать относительно универсальной, поскольку в качестве базовых функций возможно использование различных по структуре элементарных функций;

– позволяет синтезировать аппроксимирующую функцию из различных комбинаций базовых функций;

– восстанавливаемая модель, в некотором смысле компромиссная, стремится одновременно удовлетворить двум взаимоисключающим оценкам качества модели: критерию точности и показателю эффективности модели, так как позволяет добиться высокой точности и параллельно свести к минимуму число функций-признаков,

необходимых для описания отклика и восстановления адекватной регрессионной модели.

Тестирование алгоритма и экспериментальная эксплуатация его программной реализации позволяют говорить о целом ряде положительных сторон рассмотренного подхода: универсальности, точности и надежности полученных уравнений, простоте и удобстве пользования, а также, небольших затратах машинного времени. И, несмотря на ряд выявленных недостатков, можно говорить о высокой степени эффективности данного метода и его достаточном соответствии заявленным требованиям. А закладываемый в алгоритм автоматический выбор структуры аппроксимирующего уравнения является весьма обнадеживающим элементом в части возможности его эффективного использования в задачах типа «черный ящик», в частности, при реконструкции уравнений и моделировании по временным рядам. Поэтому дальнейшее развитие метода, безусловно, представляет интерес.

Литература

1. Дрейпер Н, Смит Г. Прикладной регрессионный анализ. 3-е изд. – М.: Диалектика, 2007. – 912 с.
2. Коллатц Л., Крабс В. Теория приближений. Чебышевские приближения и их приложения. Перев. с нем. – М.: Наука, 1978. – 271 с.
3. Коровкин П.П. Линейные операторы и теория приближений. – М.: Физматгиз, 1959. – 212 с.
4. Богачев К.Ю. Практикум на ЭВМ. Методы приближения функций. – М.: ЦПИ при мех-мат. фак-те МГУ, 2002. – 192 с.
5. Эглайс В.О. Аппроксимация табличных данных многомерным уравнением регрессии. Вопросы динамики и прочности: Рига, 1981. Вып. 39. – С. 120 – 125.
6. Эглайс В.О. Синтез регрессионной модели объекта на основе табличных данных. // Изв. АН Латв. ССР. Сер. физ. и тех. наук, 1980. – № 4. – С. 109 – 112.
7. Виленкин Н.Я. Комбинаторика. – М.: Наука, 1969. – 323 с.
8. The MathWorks – MatLab and Simulink for technical computing. – <http://www.mathworks.com> (15.03.2010).
9. Matlab Central – File detail. Combinator: Combinations and permutations. – <http://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/24325-combinator-combinations-and-permutations> (15.03.2010).

Розділ 3

Інформаційні технології та автоматизовані системи

Алгоритми пошуку фрагментів зображення для відстежування об'єктів у відеопотоці на паралельній архітектурі CUDA

Ладиженський Ю.В., Середа А.О.
Донецький національний технічний університет,
ly@cs.dgtu.donetsk.ua, aas11@bk.ru

Abstract

Ladyzhensky Y., Sereda A. The image fragments searching algorithms for object tracking in a video stream on CUDA parallel architecture. The new algorithms for searching of arbitrary shape image fragments on the CUDA architecture are proposed. The realization of proposed algorithms on a GPU proved significant speed improvement over the realization on CPU.

Keywords: object tracking in video, image search, template matching, parallel algorithm, CUDA

Вступ

Мета відстежування об'єктів у відеопотоці – отримати множину видимих об'єктів і їх координат у кожному кадрі. Воно використовується в багатьох областях діяльності, зокрема, в системах безпеки та автоматизації аналізу спортивних змагань. Розроблені різні методи та алгоритми відстежування об'єктів.

У [1] об'єкт представлений його зображенням і матрицею, що задає ймовірність приналежності до об'єкту кожного пікселя цього зображення. При відстежуванні відбувається пошук цього зображення в кадрі.

У [2] описано розроблений авторами статті метод відстежування об'єктів у відеопотоці на основі відстежування переміщення фрагментів об'єктів. Кожен фрагмент об'єкту є областю кадру довільного розміру і форми, що містить частину об'єкту або цілий об'єкт. Представлення фрагмента об'єкту схоже з представленням об'єкту в попередньому алгоритмі.

Пошук фрагменту зображення в кадрі може займати багато часу і потребує прискорення. Пошук складається з простих операцій, що повторюються над елементами матриць і може бути ефективно виконаний на паралельній обчислювальній архітектурі. Можливо використовувати паралельну архітектуру загального призначення або архітектури, спеціально розроблені для пошуку фрагментів зображень в кадрі, подібно до описаної у [3].

Поширеними, доступними і достатньо універсальними пристроями, придатними для паралельної обробки великих об'ємів даних, є відеокарти NVIDIA з підтримкою технології CUDA [4]. У даній статті розглянуто нові алгоритми пошуку фрагментів зображень для архітектури CUDA.

Постановка задачі

Нехай фрагмент зображення, який шукають, вписано у прямокутник завширшки W та заввишки H . Нехай F – матриця розміром $H \times W$, що містить пікселі шаблону. Кожен піксель шаблону $f_{y,x}$ ($y = \overline{0, H-1}$, $x = \overline{0, W-1}$) характеризується наступними властивостями: $f_{y,x}^r$, $f_{y,x}^g$, $f_{y,x}^b$ – відповідно червона, зелена та синя компоненти кольору; $f_{y,x}^m \in [0,1]$ – оцінка приналежності пікселя з координатами (x,y) до фрагменту. Значення $f_{y,x}^m$ може бути чисельно не рівним ймовірності, але зі збільшенням ймовірності монотонно зростає.

Назвемо областю пошуку прямокутну область кадру, що містить пікселі шаблону при всіх його можливих положеннях. Нехай її висота дорівнює H_0 , ширина – W_0 , а C – матриця розміром $H_0 \times W_0$, що містить її пікселі. Кожен піксель області пошуку $c_{y,x}$ складається з $c_{y,x}^r$, $c_{y,x}^g$, $c_{y,x}^b$ – відповідно червоної, зеленої та синьої компонент кольору.

Нехай осі системи координат кадру і шаблону спрямовані вправо і вниз, а піксель із координатами $(0,0)$ розташовано в лівому верхньому куту.

Міру різниці між пікселем шаблону $f_{y,x}$ і пікселем області кадру $c_{y',x'}$ визначимо як

$$\|f_{x,y}, c_{y',x'}\| = \left(|f_{x,y}^r - c_{y',x'}^r| + |f_{x,y}^g - c_{y',x'}^g| + |f_{x,y}^b - c_{y',x'}^b| \right) \quad (1)$$

Накладемо шаблон на кадр без повороту так, що піксель шаблону з координатами $(0,0)$ співпаде з пікселем кадру з координатами (x,y) . Міру різниці між шаблоном і областю кадру під ним визначимо як

$$D(x, y) = \sum_{dx=0}^{W-1} \sum_{dy=0}^{H-1} \|f_{dx,dy} - c_{x+dx,y+dy}\|. \quad (2)$$

Нехай $S = \{(x_i, y_i)\}$ – множина всіх можливих координат лівого верхнього пікселя шаблону в системі координат області пошуку, причому $0 \leq x_i \leq W_s$, $0 \leq y_i \leq H_s$, $W_s = W_0 - W + 1$, $H_s = H_0 - H + 1$.

Найкращу позицію шаблону визначимо як $D_{best} = D(x_{best}, y_{best})$ і $(x_{best}, y_{best}) = \arg \min_{(x,y) \in S} D(x, y)$. У методі відстежування

[2] для визначення ймовірності успішного відстежування фрагмента зображення об'єкту необхідно також визначати альтернативну найкращу позицію фрагменту, тобто кращу з позицій, що залишилися у області пошуку, з якої вилучено околицю кращої позиції: $D_{alt} = \min_{(x,y) \in S, \min(|x-x_{best}|, |y-y_{best}|) \geq d} D(x, y)$, де d – константа, що визначає розмір околиці, яка вилучається.

Для визначення (x_{best}, y_{best}) і D_{best} можна використовувати як повний перебір всіх можливих положень шаблону, так і швидкі алгоритми пошуку, засновані на монотонному зменшенні міри різниці між шаблоном і кадром при наближенні до оптимального рішення, такі, як Three-Step Search [3]. Для визначення D_{alt} доцільно використовувати алгоритм повного перебору. Пошук шаблонів повним перебором є

найбільш ресурсоємним етапом відстежування об'єктів у методі [2] і потребує прискорення. Далі розглядається його реалізація на архітектурі CUDA.

Архітектура CUDA

У даній статті розглядаються пристрої з compute compatibility 1.1, як найпоширеніші на момент написання. Спрощена архітектура CUDA [5] наведена на рис. 1.

Для мінімізації обміну даними між пам'яттю пристрою та пам'яттю кожного мультипроцесора, дані, що багато разів використовуються, доцільно читати один раз і поміщати в текстурний кеш або спільну пам'ять. Для завантаження кожного пікселю F і C із пам'яті пристрою мінімальне число раз, а також для усунення необхідності синхронізації і обміну даними між різними мультипроцесорами, доцільно проводити пошук одного шаблону на одному мультипроцесорі, тобто використовувати для цього один блок потоків.

На сучасних пристроях цілочисельні арифметичні операції виконуються приблизно в 4 рази повільніше, ніж операції з плаваючою крапкою [5]. Доцільно зберігати в пам'яті колір пікселів як цілі однобайтні числа, а перед обчисленнями перетворювати їх в дійсні числа.

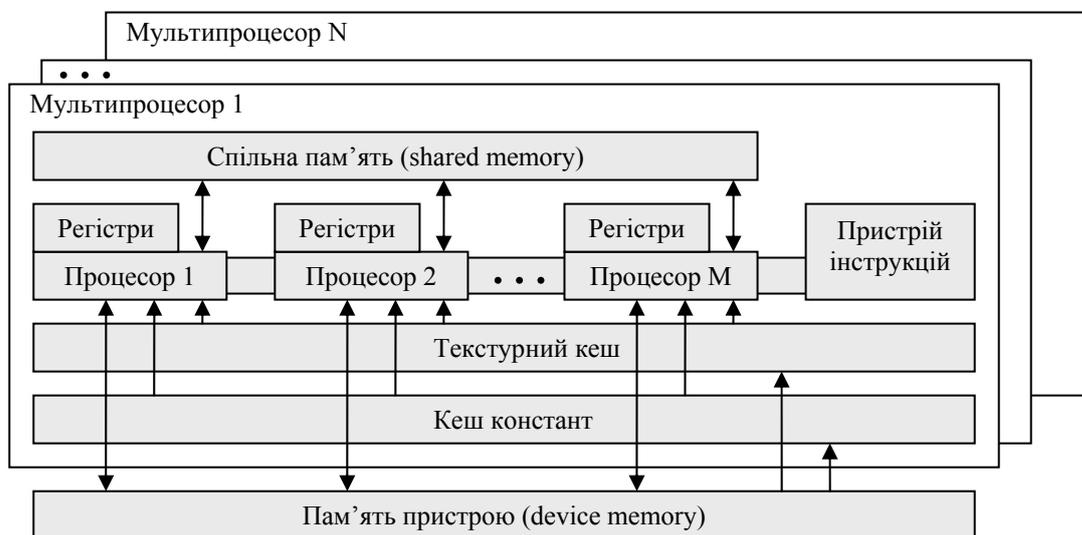


Рисунок 1. – Спрощена архітектура CUDA

При зверненні до пам'яті пристрою без використання текстурного кешу бажано проводити з'єднані (coalesced) запити до пам'яті пристрою. Для цього 16 потоків, що виконуються одночасно, повинні звертатися до 16-ти чотирьохбайтних слів, розташованих в пам'яті послідовно з адреси, кратної 64 (деякі потоки можуть не брати участь).

Необхідність обчислювати D_{alt} спричиняє необхідність зберігати знайдені значення $D(x, y)$ для $(x, y) \in S$. Їх об'єм може бути занадто великий для зберігання в пам'яті мультипроцесора, тому вони зберігаються в пам'яті пристрою. Щоб набувати готові значення (2) в регістрах, кожне значення D повинне обчислюватися одним потоком.

Зручно, щоб група з 16 потоків обчислювала 16 значень D , розташованих в пам'яті послідовно. Якщо потоків менше, ніж $H_s W_s$, то деякі потоки можуть обчислювати і зберігати більше одного значення D .

При запропонованій організації обчислень прискорення пошуку множини шаблонів досягається як за рахунок одночасного пошуку різних шаблонів на різних мультипроцесорах, так і за рахунок одночасного обчислення значень (2) різними потоками для різних позицій шаблону.

Алгоритм пошуку фрагмента

Будемо зберігати фрагмент зображення у буфері Buf у спільній пам'яті розміром S_{max} , а область пошуку – у текстурному кеші. Доступу до пікселів строки фрагменту у Buf

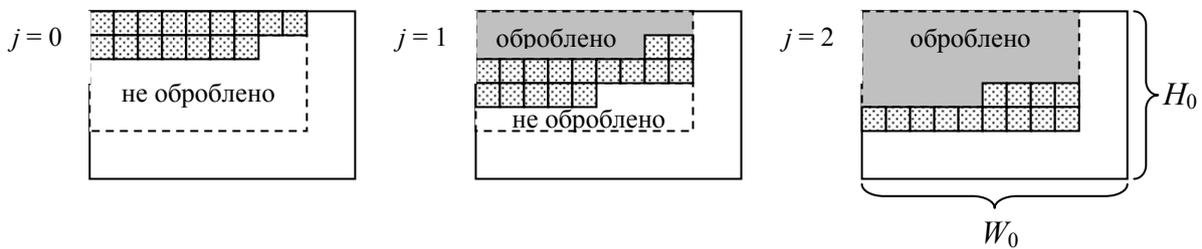


Рисунок 2. – Етапи обробки області пошуку

В процесі обчислення $D(x, y)_{(x, y) \in S^i}$, кожен потік обчислює і зберігає в регістрах значення $(x_{best}^i, y_{best}^i) = \arg \min_{(x, y) \in S^i} D(x, y)$ і

$$D_{best}^i = D(x_{best}^i, y_{best}^i).$$

Після завершення обчислення $D(x, y)_{(x, y) \in S^i}$, а також x_{best}^i, y_{best}^i і D_{best}^i , для $i = \overline{0, M-1}$, визначається такий номер потоку i_{best} , що $\forall_{i \in \{0, M-1\}} (D_{best}^i > D_{best}^{i_{best}}) \vee ((D_{best}^i = D_{best}^{i_{best}}) \wedge (i \geq i_{best}))$.

Потік i_{best} зберігає в змінних в спільній пам'яті значення $x_{best} = x_{best}^{i_{best}}, y_{best} = y_{best}^{i_{best}},$

$$D_{best} = D_{best}^{i_{best}}.$$

Після обчислення D_{best} кожен потік обчислює $D_{alt}^i = \min_{(x, y) \in S_{alt}^i} D(x, y)$, де

$$S_{alt}^i = S^i \setminus \{(x, y) : \min(|x - x_{best}|, |y - y_{best}|) < d\}.$$

При цьому використовуються раніше збережені в пам'яті пристрою значення D . D_{alt} вибирається з $\{D_{alt}^i\}$ так само, як на попередньому кроці

$$D_{best} \text{ з } \{D_{best}^i\}.$$

D_{best} і D_{alt} діляться на норму

$$\sum_{x=0}^{W-1} \sum_{y=0}^{H-1} f_{dx, dy}^m.$$

здійснюватимемо як до елементів одномірного масиву.

Нехай є M потоків і i -й потік ($i = \overline{0, M-1}$) обробляє множину позицій шаблону $S^i = \{(x+i+jM) \bmod W_s, (y+i+jM) \text{div} W_s\}$

для $j = \overline{0, (H_s W_s + M - 1 - i) \text{div} M}$, де div позначає цілочисельне ділення, а mod – залишок від ділення. i -й обчислює і зберігає в пам'яті пристрою $D(x, y)$ для всіх $(x, y) \in S^i$. Елементи масиву D розташовано в пам'яті послідовно по рядках без дір з адреси, кратної 64. На рис. 2 показані три послідовні етапи пошуку шаблону розміром 3×3 пікселя в області пошуку розміром 7×11 пікселів з використанням 16 потоків. Заштрихованими квадратами показані пікселі, з якими на кожному кроці співпадає лівий верхній кут шаблону, а сірим – вже оброблені пікселі.

При $(W \times H > S_{max})$ фрагмент завантажується у Buf цілком. Алгоритм обчислення $x_{best}^i, y_{best}^i, D_{best}^i$ і масиву значень D приведено на рис. 3, де $Fragment$ – масив у пам'яті пристрою, що містить фрагмент.

Якщо $(W \times H > S_{max})$, пропонується розбити фрагмент по рядках на мінімально можливе число частин, площа кожної з яких не перевищує S_{max} (рис. 4). Частини завантажуються у Buf і обробляються по черзі. Спочатку всі потоки обчислюють часткові суми D для першої частини фрагмента, потім – додають до них часткові суми для другої частини, і т.д. Алгоритм обчислення $x_{best}^i, y_{best}^i, D_{best}^i$ і масиву значень D приведено на рис. 5.

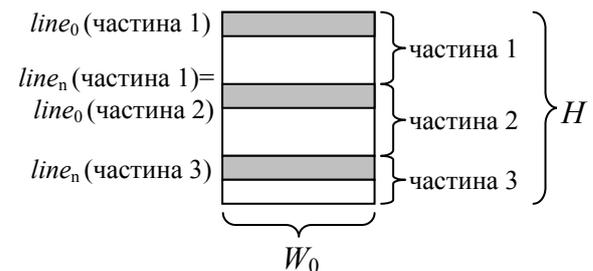


Рисунок 4. – Розбиття фрагменту по рядках

```

завантажити Fragment у Buf;
синхронізація потоків; // дочекатися завершення завантаження
 $D_{best}^i := \infty$ ; // підготовка до обчислень
 $p := i$ ;
поки  $p < W_s H_s$  // цикл по позиціях фрагменту
     $dx := p \bmod W_s$ ;  $dy := p \operatorname{div} W_s$ ; // визначення координат фрагменту
     $s := \sum_{y=0}^{H-1} \sum_{x=0}^{W-1} \|c[dy + y, dx + x], Buf[yW + x]\|$ ; // обчислення  $D(dx, dy)$ 
     $D[p] := s$ ; // збереження результату
    якщо  $s < D_{best}^i$  // перевірка найкращого результату у потоці
    то  $D_{best}^i := s$ ;  $x_{best}^i := dx$ ;  $y_{best}^i := dy$ ;
     $p := p + M$ ; // перехід до наступної групи позицій
обчислити  $x_{best}, y_{best}, D_{best}, D_{dl}$ ;

```

Рисунок 3 – Алгоритм пошуку фрагменту

```

 $D_{best}^i := \infty$ ;
 $line_0 := 0$ ; // перший рядок фрагменту
поки  $line_0 < H$  // цикл по частині фрагменту
     $line_n := \min(H, line_0 + S_{\max} \operatorname{div} W)$ ; // останній рядок фрагменту (не включно)
     $p := i - ((\text{адреса } Fragment + line_0 W) \operatorname{div} 4) \bmod 16$ ; // зсув для забезпечення з'єднаних запитів
    поки  $p < (line_n - line_0)W$  // завантаження частини фрагменту у спільну пам'ять
        якщо  $p \geq 0$ 
        то  $Buf[p] := Fragment[p]$ ; // копіювання даних
         $p := p + M$ ;
    синхронізація потоків; // дочекатися завершення завантаження
     $p := i$ ;
    поки  $p < W_s H_s$  // цикл по позиціях фрагменту
         $dx := p \bmod W_s$ ;  $dy := p \operatorname{div} W_s$ ; // визначення координат фрагменту
        якщо  $line_0 = 0$  // отримання попереднього значення часткової суми
        то  $s := 0$ ;
        інакше  $s := D[p]$ ;
         $s := s + \sum_{y=line_0}^{line_n-1} \sum_{x=0}^{W-1} \|c[dy + y, dx + x], Buf[(y - line_0)W + x]\|$  // обчислення  $D(dx, dy)$ 
         $D[p] := s$ ; // збереження результату
        якщо  $(line_n = H) \wedge (s < D_{best}^i)$  // перевірка найкращого результату у потоці
        то  $D_{best}^i := s$ ;  $x_{best}^i := dx$ ;  $y_{best}^i := dy$ ;
         $p := p + M$ ; // перехід до наступної групи позицій
    синхронізація потоків; // перед повторним використанням Buf
     $line_0 := line_n$ ; // перехід до наступної частини фрагменту
обчислити  $x_{best}, y_{best}, D_{best}, D_{dl}$ ;

```

Рисунок 5. – Алгоритм пошуку великого фрагменту

Алгоритми на рис. 3 і рис. 5 забезпечують повне завантаження всіх потоків при $H_s W_s \equiv 0 \pmod{M}$. Усі звернення до пам'яті пристрою є з'єднаними. Часова складність обох алгоритмів складає

$$O\left(\left\lceil \frac{W_0 H_0}{M} \right\rceil WH\right), \quad (3)$$

але алгоритм на рис. 5 виконує більше допоміжних операцій. Вибір алгоритму на рис. 3

чи рис. 5 здійснюється для кожного фрагменту в залежності від W та H .

Практичні результати

Описані алгоритми реалізовано і протестовано на відеокарті Palit GeForce GTS 250 E-Green.

На рис. 6 показано отриману експериментально залежність середнього часу пошуку фрагменту від W_s , H_s , W та H із використання 128 потоків на кожен фрагмент. Як видно з рис. 6, при $W_s H_s < M$, час пошуку майже не залежить від W_s і H_s , що узгоджується з (3).

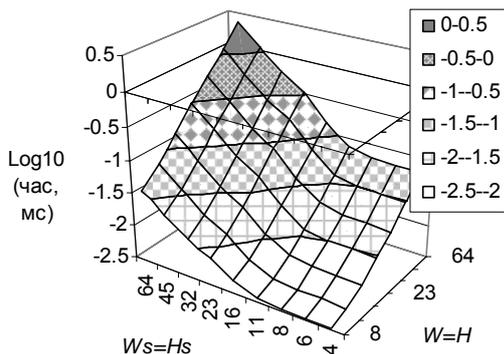


Рисунок 6. – Середній час пошуку фрагмента

Прискорення пошуку на GeForce GTS 250 E-Green порівняно із однопоточною реалізацією повного пошуку на процесорі Athlon X2 5400 наведено на рис. 7.

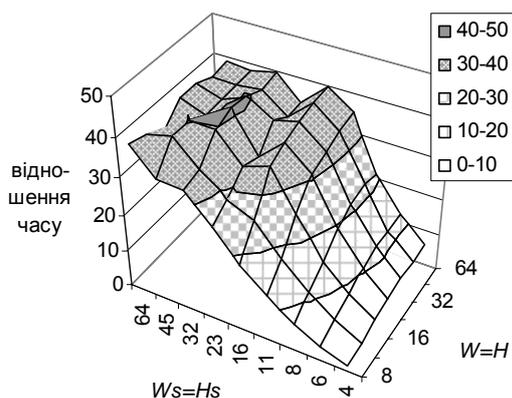


Рисунок 7. – Прискорення пошуку фрагментів на GPU порівняно з CPU

Як видно з рис. 7, використання відеокарти середнього рівня забезпечує прискорення в порівнянні з одним ядром процесора до 40 разів. При цьому знижується завантаження ЦП і він може паралельно проводити інші обчислення. При використанні двох або чотирьох ядер процесора час обробки множин фрагментів скоротиться майже в два або чотири рази; при використанні потужніших

відеокарт, час обчислень на них також скоротиться у декілька разів. На практиці прискорення може бути меншим через накладні витрати підготовку даних у пам'яті пристрою.

Висновки

У статті представлено апаратно-орієнтовані алгоритми пошуку фрагментів зображень для паралельної архітектури CUDA. Вони може бути використані для прискорення відстежування об'єктів у відеопотоці.

Алгоритми реалізовані і досліджені експериментально. В порівнянні з одним ядром процесора Athlon X2 5400 на відеокарті Palit GeForce GTS 250 E-Green досягнуте зменшення часу пошуку множини фрагментів однакового розміру до 40 разів.

Використання пристрою з архітектурою CUDA може стати хорошою альтернативою використанню багатопроцесорних ЕОМ або кластера при відстежуванні об'єктів у відеопотоці.

Подальшого збільшення швидкодії розробленої системи відстежування об'єктів [2] можна досягти за рахунок реалізації на архітектурі CUDA алгоритмів моделювання і віднімання фону, а також розпізнавання об'єктів. Результат віднімання фону в пам'яті пристрою може бути вхідними даними алгоритмів пошуку фрагментів і розпізнавання об'єктів, за рахунок чого можна добитися зменшення трафіку меду пам'яттю комп'ютера і пристрою.

Слід зазначити, що задача має цілочисельну природу, і, якщо на майбутніх CUDA GPU буде реалізовано більш швидкі цілочисельні арифметичні операції, прискорення на GPU у порівнянні із CPU може бути значно більшим.

Література

1. R. Cucchiara, C. Grana, G. Tardini. Track-based and object-based occlusion for people tracking refinement in indoor surveillance. //Proceedings of the ACM 2nd international workshop on Video surveillance & sensor networks 2004, New York, NY, USA, October 15, 2004. – 10 p. (<http://doi.acm.org/10.1145/1026799.1026814>).
2. Ладженський Ю.В., Серета А.О. Відстежування об'єктів у відеопотоці на основі відстежування переміщення фрагментів об'єктів //Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: "Обчислювальна техніка та автоматизація". Випуск 17 (148) – Донецьк: ДонНТУ, 2009. – 215 с.
3. Adaptive Motion Estimation Processor for Autonomous Video Devices. T. Dias, S. Momcilovic, N. Roma, L. Sousa. EURASIP Journal on Embedded Systems, vol. 2007, Article ID 57234, 2007. – 10 p. (<http://www.hindawi.com/GetArticle.aspx?doi=10.1155/2007/57234>).
4. NVIDIA CUDA Programming Guide Version 2.3.1, 2009. – 145 p. (http://developer.download.nvidia.com/compute/cuda/2_3/toolkit/docs/NVIDIA_CUDA_Programming_Guide_2.3.pdf).
5. NVIDIA CUDA C Programming Best Practices Guide CUDA Toolkit 2.3, 2009. – 145 p. (http://developer.download.nvidia.com/compute/cuda/2_3/toolkit/docs/NVIDIA_CUDA_BestPracticesGuide_2.3.pdf).

Фрактальные алгоритмы сжатия, некоторый опыт их сравнения

Бубличенко А.В., Беловодский В.Н.

Донецкий национальный технический университет
alexander@bliqo.com

Abstract

Bublichenko A.V., Belovodskiy V.N. "Fractal Compression Algorithms, Some Experience Comparing Them" The results of computational experiments and comparison analysis of two basic fractal image compression algorithms are described. Their modifications targeting further efficiency improvements are given.

Key words: fractal, image compression algorithm, comparison, modification.

Введение

Идея фрактального метода сжатия изображений была сформулирована в начале 1980-х годов [1] и концептуально заключается в следующем. Для заданного изображения по специальным правилам строится система сжимающих отображений, для которых оно является аттрактором. Тогда, в силу теоремы о неподвижной точке, итерационный процесс, сформированный на базе этих отображений, сходится к своему аттрактору при любом выборе начального изображения. Эффект сжатия достигается за счет того, что вместо исходного изображения для его восстановления необходимо хранить лишь коэффициенты преобразования.

К числу отличительных можно отнести ряд особенностей, обуславливающих интерес к данному методу сжатия на протяжении более двух десятилетий, а именно:

- высокий коэффициент сжатия (т.е. отношение объема исходной информации к объему кода). Так, для изображений, обладающих самоподобием, он достигает 2000;

- независимость качества декодированного изображения от масштаба его просмотра;

- существенная асимметричность, т.е. время кодирования заметно больше времени декодирования.

Одной из главных проблем фрактального метода сжатия изображений остается высокое время кодирования.

Постановка задачи

Привлекательность самой идеи фрактального метода сжатия и его достоинства притягивает исследователей к развитию и совершенствованию алгоритмов его реализующих. Предлагаемые модификации касаются практически всех его сторон. В большинстве опубликованных работ по данной теме предлагаются различные методы, направленные на снижение объема перебора

доменных блоков и, как следствие, – сокращение времени кодирования. Так, в работе [2] затрагивается способ разбиения доменов и предлагается ограничиваться теми, которые окаймляют ранги. В работе [3] используется дискретное косинусоидальное преобразование для классификации всех доменных блоков на некоторое количество классов, в работе [4] для этого применяются R-деревья, а в работе [5] – самоорганизующаяся нейронная сеть. В работах [6] и [7] авторы используют генетический алгоритм для поиска оптимальных доменов. В работе [8] поиск ограничивается посредством меры информационной энтропии доменов. Другой, менее разработанной областью исследований, является применение нелинейных сжимающих отображений (способов аппроксимации ранговых блоков доменными блоками) [2].

Однако, возможно в силу коммерческой составляющей работ данного направления и, как следствие, отсутствия удовлетворительных описаний рассматриваемых алгоритмов, предлагаемые модификации воспринимались, скорее, как результат интуитивных и спонтанных импровизаций, нежели обоснованный итог некоторой серии вычислительных экспериментов. Вместе с тем, каждый исследователь, начинающий путь в этой области, нуждается в наличии тщательного сопоставительного анализа основных алгоритмов. Проведение и последующее изложение такого анализа и является основной целью данной работы.

Сравниваемые алгоритмы

Рассматриваемые алгоритмы подробно описаны в литературе [1], их можно отнести к числу основных. Приведем их краткое описание.

Базовый алгоритм. Условно включает следующие этапы.

Шаг 1. В изображении f выделяют множество доменных блоков. Они могут перекрываться, а величина перекрытия

определяется специально предусмотренным параметром.

Шаг 2. Изображение разбивают на не перекрывающиеся ранговые блоки $\{R_k\}$. Они могут не быть одинакового размера, т.к. используется адаптивное разбиение методом квадрато-дерева с переменным размером блоков. Это позволяет плотно заполнить ранговыми блоками маленького размера части изображения, содержащие мелкие детали.

Шаг 3. Для каждого рангового блока перебирают доменные блоки. При этом предусматривают изменение ориентации доменов (3 варианта вращения, 2 варианта вращения с отражением, 2 варианта отражения и 8-ой вариант – исходная ориентация без изменений). При каждом из вариантов ориентации домен сжимают до размеров рангового блока и вычисляют оптимальные значения коэффициентов a_{ij} и b_{ij} преобразования

$$w_{ij}(d_{xy}) = a_{ij} \cdot d_{xy} + b_{ij}$$

методом наименьших квадратов и по формуле

$$L_{kij} = L(R_k, D'_{ij}) = \left(\sum_{R_k} |w_{ij}(d_{xy}) - r_{xy}| \right) / (256 \cdot N_{R_k})$$

вычисляют нормированное значение параметра $L(R_k, D'_{ij})$, который характеризует соответствие преобразованного сжатого i -го доменного блока $w_{ij}(D'_{ij})$ в его j -ой ориентации ранговому блоку R_k . Здесь $r_{xy} \in R_k$, $d_{xy} \in D'_{ij}$, D'_{ij} – i -ый доменный блок в j -ой ориентации, сжатый до размеров рангового блока, N_{R_k} – количество пикселей в ранговом блоке. На этом шаге алгоритм работает в одном из двух режимах, выбираемом пользователем, – с поиском и без поиска наилучшего домена. В *режиме поиска наилучшего домена* для каждого ранга перебираются *все* домены, и выбирается тот i -ый домен и его j -ая ориентация, значение L_{kij} которого является минимальным среди всех остальных. В *режиме без поиска наилучшего домена* полный перебор доменов останавливают, как только обнаруживается такой i -ый домен и его j -ая ориентация, что его значение L_{kij} не превышает заданной допустимой погрешности (например, $L_{kij} \leq 0.05$). В обоих режимах, если после перебора всех доменных блоков не нашлось таких, значения L_{kij} которых не превышают значение заданной допустимой погрешности, то делается проверка – находится ли рассматриваемый ранговый блок на максимально допустимом уровне разбиения. Если нет, то этот ранговый блок разбивают на меньшие блоки и проводят данный шаг алгоритма для них. Если да, то из всех доменов выбирают тот домен и его вариант ориентации D_{ij} , для которого значение L_{kij} является минимальным среди всех остальных, и считают

рассматриваемый ранговый блок покрытым этим доменом.

Шаг 3 требует наибольших вычислений, т.к. для каждого рангового блока R_k алгоритм перебирает все (или многие, в зависимости от режима работы) доменные блоки и их варианты ориентации, проводя над каждым занимающие много машинного времени попиксельные операции изменения ориентации и нахождения коэффициентов преобразования. Хорошее сжатие зависит от возможности найти хорошее соответствие между доменными и ранговыми блоками без необходимости глубокого разбиения ранговых блоков. Чрезмерно глубокое разбиение рангов приводит к слишком большому их количеству, что ухудшает коэффициент сжатия, а недостаточно глубокое – к плохому качеству закодированного изображения.

FE-алгоритм. Сравнение рангов с доменами в базовом алгоритме требует значительных вычислительных ресурсов. С целью их снижения в FE-алгоритме (Feature Extraction – выделение особенностей) выделяется пять характеристик, описывающих доменные и ранговые блоки. И первоначально, проводится именно их сравнение, что значительно сокращает объем вычислений. Эти характеристики следующие:

а) стандартное отклонение

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_I (p_{x,y} - \mu)^2}{N_I}}$$

где I – сегмент изображения, N_I – количество пикселей в сегменте I , $p_{x,y}$ – значение пикселя в точке (x, y) , μ – среднее значение пикселя в сегменте I ;

б) асимметрия

$$a = \frac{\sum_I (p_{x,y} - \mu)^3}{N_I \cdot \sigma^3};$$

в) межпиксельная контрастность

$$c = \frac{\sum_I (|p_{x,y} - p_{x-1,y}| + |p_{x,y} - p_{x,y-1}|)}{N_I};$$

г) коэффициент бета, характеризующий отличие значений пикселей от значения центрального пикселя

$$\beta = \frac{\sum_{x=1}^{I_w} \sum_{y=1}^{I_H} \left(\omega - \sqrt{\left(x - \frac{I_w}{2}\right)^2 + \left(y - \frac{I_H}{2}\right)^2} \right) \cdot (p_{x,y} - \mu)}{\sum_{x=1}^{I_w} \sum_{y=1}^{I_H} \left(\omega - \sqrt{\left(x - \frac{I_w}{2}\right)^2 + \left(y - \frac{I_H}{2}\right)^2} \right)^2},$$

$$\text{где } \omega = \frac{\sum_{x=1}^{I_w} \sum_{y=1}^{I_H} \sqrt{\left(x - \frac{I_w}{2}\right)^2 + \left(y - \frac{I_H}{2}\right)^2}}{N_I};$$

д) максимальный градиент (g) – максимум из горизонтального (h) и вертикального (v) градиентов

$$h = \frac{\sum_{x=1}^{I_W} \sum_{y=1}^{I_H} \left(x - \frac{I_W}{2}\right) \cdot (p_{x,y} - \mu)}{\sum_{x=1}^{I_W} \sum_{y=1}^{I_H} \left(x - \frac{I_W}{2}\right)^2},$$

$$v = \frac{\sum_{x=1}^{I_W} \sum_{y=1}^{I_H} \left(y - \frac{I_H}{2}\right) \cdot (p_{x,y} - \mu)}{\sum_{x=1}^{I_W} \sum_{y=1}^{I_H} \left(y - \frac{I_H}{2}\right)^2}, \quad g = \max(v, h),$$

где I_W, I_H – соответственно ширина и высота (в пикселях) сегмента изображения.

Сам алгоритм включает следующие этапы.

Шаг 1. Аналогично шагу 1 базового алгоритма.

Шаг 2. Дополняя шаг 2 базового алгоритма, производится вычисление и хранение значений вектора характеристик для каждого доменного блока.

Шаг 3. При обработке рангового блока сначала вычисляют его вектор характеристик, затем вычисляют расстояния между вектором характеристик данного ранга и вектором характеристик каждого домена по формуле

$$d = \sum_{j=1}^5 |f_j^R - f_j^D|,$$

где f_j^R и f_j^D – это j -ые характеристики рангового и доменного блоков соответственно. Для последующего полного сравнения отбирается только заданный q процент доменов (например, $q = 2\%$) с минимальными значениями расстояний между векторами характеристик. Последующие действия аналогичны тем, которые выполняются в шаге 3 базового алгоритма, но с той лишь разницей, что при переборе доменов рассматриваются только выбранные q % и наилучший выбирается из них.

Отметим, что такая процедура отбора доменов является своеобразным фильтром, который существенно ограничивает их перебираемое количество.

Сравнительный анализ, выводы

Для проведения анализа обоих алгоритмов было разработано программное обеспечение на языке C# с использованием Microsoft .NET 2.0. Оно позволяет кодировать и декодировать изображения рассмотренными выше алгоритмами. Пользователь имеет возможность задавать настройки, регулирующие качество кодируемых изображений, кроме этого, предусмотрены также следующие средства анализа: отображение структуры доменов и рангов, как в виде таблицы со

значениями их свойств, так и визуально на изображении; вычисление средней пиксельной ошибки между исходным и закодированным изображением; подсчет количества обработанных и использованных при кодировании рангов и доменов; определение времени кодирования и декодирования.

С использованием этого программного обеспечения была выполнена серия экспериментов, в которых использовалось произвольно выбранное изображение размером 256×256 пикселей, представленное на рис. 1. Исходные данные, параметры настроек и результаты экспериментов приведены в табл. 1. В процессе экспериментов время кодирования в обоих алгоритмах не ограничивалось. Каждый последующий эксперимент отличался от предыдущего более высокими значениями параметров, определяющими качество кодируемого изображения. Опишем некоторые из этих параметров. Так, начальный и максимальный уровни разбиения доменов регулируют их количество и размеры. Коэффициент перекрытия определяет, насколько сильно соседние домены перекрываются (при минимальном значении 0 – они не перекрываются вообще, а при максимальном значении 1 – перекрываются так, что остается непокрытой область шириной ровно в один пиксель). Количество доменов зависит исключительно от этих параметров. Начальный уровень разбиения рангов задает начальное минимальное их количество и максимально возможный их размер, а максимальный уровень разбиения – их максимально допустимое количество и минимально возможный размер. Эти уровни, по сути, являются уровнями разбиения рангов методом квадрато-дерева. Количество рангов по окончании кодирования зависит не только от этих параметров, но и от допустимой погрешности (см. описание алгоритмов). Средняя пиксельная ошибка показывает, насколько декодированное изображение отличается от исходного, и определяется по формуле

$$e = 100 \cdot \left(\sum_{x=1}^{I_W} \sum_{y=1}^{I_H} |p_{xy} - p'_{xy}| \right) / (256 \cdot N_I),$$

где $p_{x,y}$, $p'_{x,y}$ – значение пикселя в точке (x, y) исходного и декодированного изображений соответственно, I_W, I_H – соответственно ширина и высота (в пикселях) изображения, N_I – количество пикселей в изображении.

Отметим, что параметры, определяющие количество доменов, непосредственно влияют на время кодирования и качество декодированного изображения, и не отражаются на коэффициенте сжатия.

Параметры же, регулирующие количество и размер рангов, влияют как на время кодирования и декодирования, так и на качество

декодированного изображения. А окончательное число рангов однозначно определяет коэффициент сжатия.

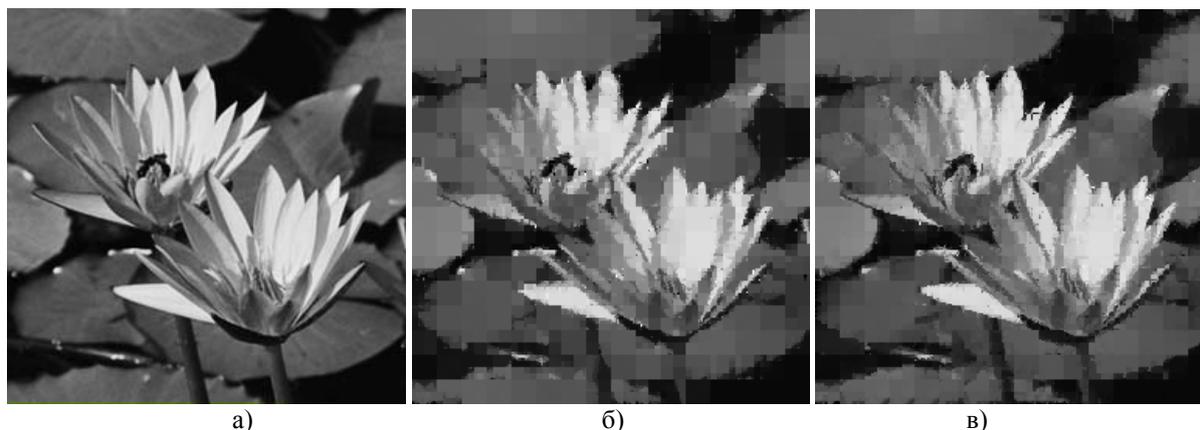


Рисунок 1. – Исходное (а) и декодированные изображения, предварительно закодированные базовым алгоритмом (б) и FE-алгоритмом (в)

Таблица 1. – Результаты экспериментов

Параметры	№ эксперимента			
	1	2	3	4
FE-алгоритм				
Количество доменов	225	841	2977	4562
нач.ур.дом.	3	3	3	3
макс.ур.дом.	3	3	4	4
Козфф. перекрытия доменов	0.5	0.25	0.3	0.25
Количество рангов	1651	1504	1264	1228
Нач. уровень разбиения рангов	4	4	4	4
Макс. уровень разбиения рангов	6	6	6	6
Допуст.погр.	0.05	0.05	0.05	0.05
Искать наилучший домен	–	–	–	–
Ср. пикс. ошибка, %	3.79	3.92	3.73	3.69
Козфф.сжатия	10	11	13	13
Время кодирования, (с)	4.58	12.86	30.25	49.39
Время декодирования, (с)	1.91	1.62	1.41	1.25
Базовый алгоритм				
Количество доменов	225	841	2977	4562
нач.ур.дом.	3	3	3	3
макс.ур.дом.	3	3	4	4
коэф. перекрытия доменов	0.5	0.25	0.3	0.25
Количество рангов	1150	1075	940	928
Нач. уровень разбиения рангов	4	4	4	4
Макс. уровень разбиения рангов	6	6	6	6
Допуст.погр.	0.05	0.05	0.05	0.05
Искать наилучший домен	Нет	Нет	Нет	Нет
Ср. пикс. ошибка, %	4.01	4.18	4.37	4.29
Козфф.сжатия	14	15	17	18
Время кодирования, (с)	154.81	508.69	735.28	1068
Время декодирования, (с)	1.15	1.05	0.97	0.95

Анализ полученных результатов позволяет сделать следующие выводы:

1. FE-алгоритм, по сравнению с базовым, позволяет сжимать изображения в десятки раз меньше время при одинаковых параметрах настроек алгоритмов (см. рис. 2).

2. Различаются средние пиксельные ошибки алгоритмов (см. рис. 3). В зависимости от настроек, различие находится в пределах 5-16%.

3. В результате кодирования базовым алгоритмом во всех случаях достигается в среднем на 30-40% более высокий коэффициент сжатия (см. рис. 4).

4. Визуальное качество декодированного изображения (см. рис. 1) заметно лучше при использовании FE-алгоритма.

5. Время декодирования закодированного изображения при различных настройках кодирования меньше при использовании базового алгоритма во всех экспериментах (см. рис. 5).

Некоторые из этих отличий вполне предсказуемы. Действительно, в FE-алгоритме, вместо сравнения блоков изображения происходит сравнение их векторов характеристик, что безусловно отражается на быстродействии. Различие пиксельных ошибок и коэффициентов сжатия скорее всего объясняется тем, что при использовании FE-алгоритма в результате кодирования получается большее количество рангов и они меньшего размера, что обеспечивает более высокую детализацию изображения, то есть – лучшее визуальное качество. Это подтверждает и рис. 6, на котором представлено закодированное обоими алгоритмами изображение с сеткой рангов. Заметим, что хотя при базовом алгоритме и получается на 5-16% худшее

качество изображения, но при этом, достигается на 30-40% более высокий коэффициент сжатия.

Можно предположить, что причина выявленных различий заключается в том, что в FE-алгоритме при переборе доменов, отобранных по значениям их характеристик, не находится такой, который обеспечивал бы принятую допустимую погрешность соответствия ранговому блоку, в результате чего ранговый блок разбивается на более малые по размеру части. В то же время при кодировании базовым алгоритмом для тех же рангов, вполне возможно, такие домены находятся.

Для проверки этой гипотезы был разработан дополнительный программный модуль, позволяющий подсчитывать число совпадений в обоих алгоритмах при выборе домена, изображение оставалось тем же. Настройки кодирования соответствуют тем, которые использовались в четвертом эксперименте табл. 1, с той лишь разницей, что базовый алгоритм работал в режиме поиска наилучшего домена. Это означает, что при обработке каждого рангового блока осуществлялся перебор всех доменных блоков, без остановки при достижении допустимой погрешности, и выбирался действительно наилучший. Это, на наш взгляд, позволяет провести корректное сравнение.

В результате экспериментов было установлено, что для 99.73 % ранговых блоков FE-алгоритм выбрал другие домены, т.е. – не наилучшие. Таким образом, по крайней мере, для данного изображения можно утверждать, что процедура отбора доменов, принятая в FE-алгоритме, не вполне отражает близость сравниваемых блоков.

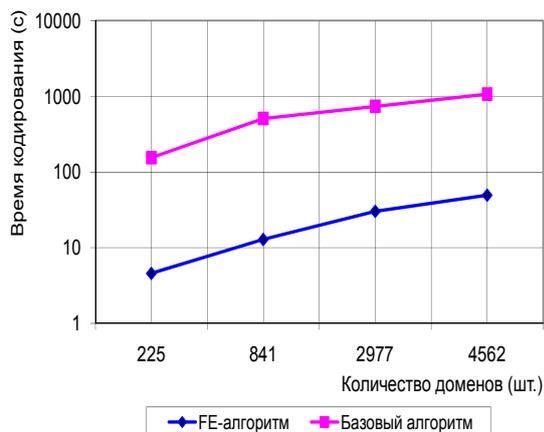


Рисунок 2. – Зависимость времени кодирования от количества доменов

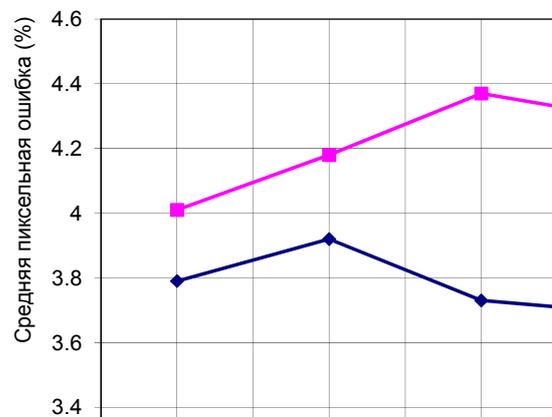


Рисунок 3. – Средняя пиксельная ошибка закодированного изображения при различных настройках (см. табл. 1) кодирования

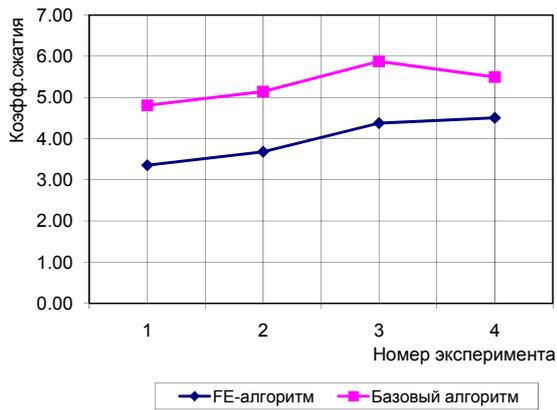


Рисунок 4. – Коэффициент сжатия изображения при различных настройках (см. табл. 1) кодирования

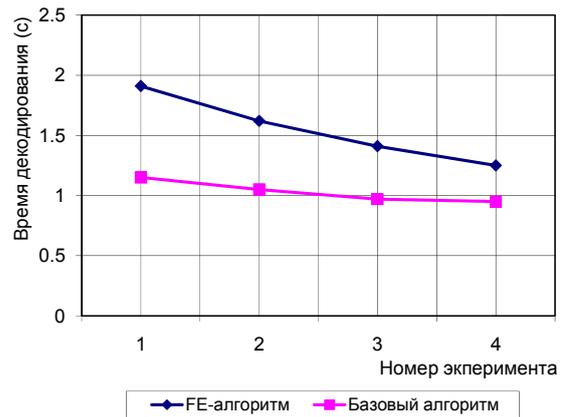
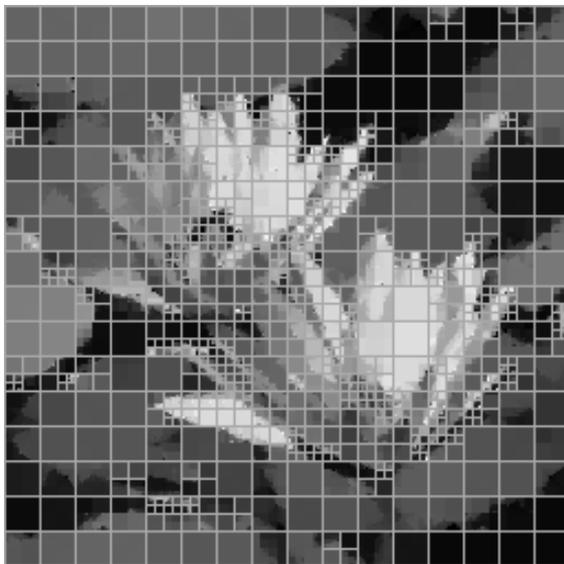
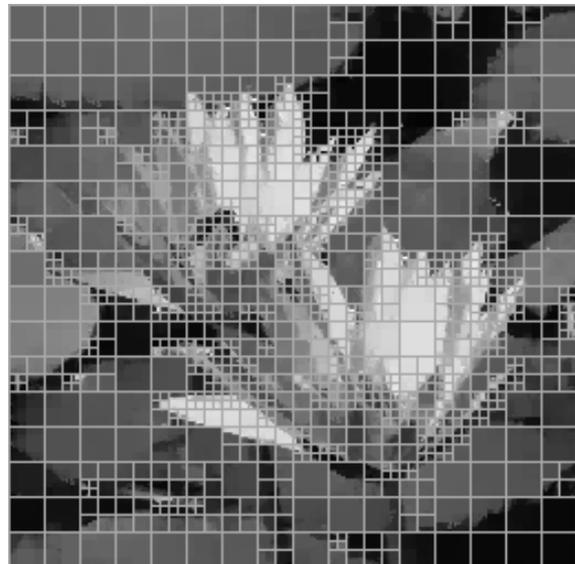


Рисунок 5. – Время декодирования закодированного изображения при различных настройках (см. табл. 1) кодирования



а)



б)

Рисунок 6. – Изображение с сеткой рангов, закодированное базовым алгоритмом (а) и FE-алгоритмом (б) при одинаковых настройках

Предложения, заключения

Сформулируем некоторые соображения, сформировавшиеся в результате проведенных экспериментов.

1. Представляется бесспорным, что эффективность сжатия в немалой степени зависит от начального разбиения исходного изображения. Действительно, невключение удачного домена или его ошибочное отбрасывание сказывается как на степени сжатия, так и на качестве декодирования. Априори представляется правдоподобным, что в обычных, а не специально созданных изображениях различие соседних близких пикселей, в целом, менее разительно, чем в областях, выбираемых случайным образом. По этим соображениям, включение окаймляющих

доменов в первоначально формируемое их множество представляется целесообразным.

2. Идея введения упрощенного набора критериев с целью существенного снижения объема вычислений является привлекательной, но, как показывает эксперимент, в большинстве случаев сравнения доменов с рангами этот набор не позволяет выявить оптимальный домен. Другими словами, данный набор является не вполне адекватным основному критерию. Поэтому представляется целесообразным вместо этого набора использовать непосредственно основной критерий, но применять его к уменьшенным копиям рассматриваемых пар домен-ранг. Это может быть реализовано алгоритмом, который аналогичен базовому, за исключением 2-го и 3-го шагов. На шаге 2 при генерации доменных

блоков для каждого из них строятся его уменьшенные копии. Первая копия имеет размер $k \times k$ пикселей, вторая – $2k \times 2k$ пикселей и т.д. до исходного размера домена, где k выбирается экспериментально. На шаге 3 перед началом обработки очередного рангового блока сначала строятся его уменьшенные копии аналогичным образом. Затем проводится многоуровневый отбор наилучшего доменного блока для данного ранга. На 0-м уровне сравниваются уменьшенные копии размером $k \times k$ пикселей данного ранга и домена. При сравнении запоминаются величина L_{kij} (средняя пиксельная ошибка) и наилучшая ориентация для каждого доменного блока. Для последующего сравнения отбираются только m (например, $m=20$) доменных блоков с наименьшим значением величины L_{kij} . На всех последующих уровнях сравниваются уменьшенные копии соответствующего размера рангового и доменных блоков, но уже только в сохраненной на первом уровне наилучшей ориентации каждого отдельного домена. Этот процесс продолжается до последнего уровня уменьшенных копий рангового блока. На последнем уровне сравнения отбирается только один доменный блок с наименьшей величиной L_{kij} . Преимущество такой модификации алгоритма заключается в сохранении основного критерия сравнения и его применении последовательно к уменьшенным копиям пар ранг-домен, что позволит на первых же уровнях сравнения отбрасывать неоптимальные домены и оставлять только перспективные.

3. Напрашивается также соображение, непосредственно вытекающее из теоретических основ фрактального метода сжатия. Так, из теоремы коллажа [9] следует, что степень отличия аттрактора системы сжимающих отображений от исходного изображения не в последнюю очередь определяется качественными характеристиками формируемых отображений. Их повышения естественно ожидать при переходе от простейших, грубых, линейных моделей, используемых в базовых алгоритмах, к более сложным – нелинейным. В этой связи попытка использования таких моделей нам представляется актуальной.

Литература

1. С. Уэлстид. Фракталы и вейвлеты для сжатия изображений в действии. Учебное пособ. – М.: Триумф, 2003, с. 77-119.
2. А.Н. Авлеева. Фрактальное сжатие изображений. Решение задач сжатия изображений с использованием систем итерированных функций. Магистерская диссертация, ДонНТУ, 2006.
3. Д.С. Ватолин. Использование ДКП для ускорения фрактального сжатия изображений // Программирование №3 1999, с. 51-57.
4. J. Kominek. Algorithm for Fast Fractal Image Compression. Department of Computer Science, University of Waterloo, Canada, 1995.
5. S. Welstead. Self-Organizing Neural Network Domain Classification for Fractal Image Coding. Proc. of the IASTED International Conference “Artificial Intelligence and Soft Computing”. Banff, Canada, 1997, pp. 248-251.
6. L. Vences, I. Rudomin. Genetic Algorithms for Fractal Image and Image Sequence Compression. Manuscript. Institute of Technology, University of Monterrey, 1997.
7. L. Xi, L. Zhang. A Study of Fractal Image Compression Based on an Improved Genetic Algorithm. International Journal of Nonlinear Science. Vol.3, No. 2, 2007, pp. 116-124.
8. M. Hassaballah, M.M. Makky, Youssef B. Mahdy. A Fast Fractal Image Compression Method Based Entropy. Electronic Letters on Computer Vision and Image Analysis 5(1), 2005, pp. 30-40.
9. Р. М. Кроновер. Фракталы и хаос в динамических системах. Основы теории. – М.: Постмаркет, 2000.

Средства компьютерной обработки показателей состояния пациента

Бабков В.С., Семисалов С.Я.

Донецкий национальный технический университет,
Донецкий национальный медицинский университет
victor.babkov@gmail.com

Abstract

Babkov V.S., Semisalov S.Y. "Tools for computer processing measures of patient state" Principles of organization of the computer system are considered for complex research patient state after a craniocerebral injury. Original methods and algorithms of treatment of research results are offered.

Key words: craniocerebral injury, image processing, temperature, mobile device, statistic, patient state.

Введение

Черепно-мозговая травма (ЧМТ) в медицинской практике – источник многочисленных последствий для пациента, которые достаточно сложно поддаются диагностированию на ранней стадии и, в особенности, объективизации, т.к. в общем случае отсутствуют общепринятые нормы и методы расчета показателей, особенно с использованием компьютерных средств диагностики.

В условиях Донецкого областного клинического территориального объединения разработан комплекс средств для общей оценки состояния пациента после ЧМТ на основе множественных критериев.

В качестве оцениваемых параметров в результате анализа были выбраны следующие показатели:

- микроциркуляция (состояние системы кровообращения на уровне капилляров, венул и артериол);
- температурное состояние основания черепа (в частности, позвонков шейного отдела);
- координация движений конечностей (так называемые координатные пробы).

Наиболее распространенными методами исследования состояния микроциркуляции на практике являются биомикроскопия, радионуклидные методы, доплерометрия [1]. Ряд преимуществ бульбарной конъюнктивы как объекта исследования (отсутствие существенных особенностей анатомического характера; беспорядочное расположение сосудов, не имеющее органной специфичности; хорошая контрастируемость на белом фоне склеры; наличие естественной ирригационной системы, позволяющей сводить к минимуму возникающий при микроскопии тепловой эффект на сосуды) делают ее наиболее

перспективной для использования в клинической практике.

С развитием цифровой и аналоговой техники в настоящее время появились широкие возможности визуализации и получения качественных изображений микроциркуляторного русла бульбарной конъюнктивы в электронном и графическом виде. Использование компьютерных технологий фиксации и обработки изображений открывает перспективы количественной оценки статических и динамических характеристик микроциркуляции. Однако среди методов оценки состояния микроциркуляторного русла конъюнктивы в настоящее время наиболее распространенной остается балльная система, основанная на отдельном рассмотрении степени сосудистых, внутри- и внесосудистых изменений с соответствующим присвоением баллов, по которым рассчитываются различные индексы [2].

В свою очередь, создание термограмм (карт распределения температуры) на основе тепловых изображений находит в медицине множество применений. Это связано с тем, что в процессе физиологической деятельности различные органы излучают тепло с различной интенсивностью в нормальном состоянии и при наличии патологий. Фиксация тепловых отклонений может быть использована для диагностирования тех или иных заболеваний. В частности, при исследовании повреждений и заболеваний позвоночника (например, после ЧМТ) важным показателем является температурный режим позвонков. В литературе доказано, что такие факторы как смещение позвоночных дисков, ущемления, воспаления вызывают изменение локальной температурной картины [3].

Также важную теоретическую и практическую проблему представляет количественное описание системы,

обеспечивающей координированные движения конечностей и тела. Известно, что координация движений осуществляется за счет сложного взаимодействия центральной нервной системы, сенсорных систем организма, суставно-связочного аппарата позвоночника и др. Изучение механизмов взаимодействия этих систем позволяет не только описать их количественно, но и использовать полученные результаты в диагностике ряда заболеваний [4]. Для исследования таких показателей, в частности поддержания вертикального положения, соответствующая аппаратура (стабиллометры) широко используются на практике [5], а вот для оценки результатов координатных проб автоматизированных средств получения и обработки данных практически не существует.

Таким образом, разработка средств для оценки ранее перечисленных показателей является актуальной задачей, которая требует для своего решения разработки целого ряда алгоритмов и методов в области анализа изображений, обработки сигналов и т.п.

В данной работе описываются методы решения возникших в процессе разработки комплекса технических и научных задач.

Структурно комплекс исследования состоит из следующих подсистем:

- оценки состояния микроциркуляции бульбарной конъюнктивы;
- ввода и обработки термографических данных;
- анализа координации конечностей (в составе мобильного и стационарного модулей).

Подсистема анализа микроциркуляции

Для исследования бульбарной конъюнктивы и получения видео- и фотоизображений, пригодных для количественной оценки процесса микроциркуляции разработана установка, структура которой показана на рис. 1.



Рисунок 1. – Структура установки для исследования микроциркуляции

Щелевая лампа выполняет функции источника подсветки, который освещает поверхность глазного яблока и позволяет в отраженном свете получить контрастное изображение склеры. Оптическая система обеспечивает увеличение изображения. Цифровой фотоаппарат или камера

обеспечивают фиксацию изображения склеры в виде видеозаписи или одиночного фрагмента. Фото или видеоданные сохраняются на носитель или могут быть непосредственно считаны из памяти устройства в компьютер, на котором будет выполняться программа обработки.

Выходными данными установки и входными для подсистемы являются видеоролики или одиночные изображения распространенных графических форматов. Пример такого изображения показан на рис. 2.

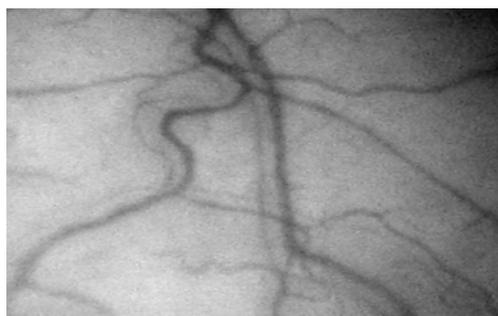


Рисунок 2. – Образец результата съемки поверхности склеры

При проектировании подсистемы была поставлена задача создать двухмодульную структуру (модуль А, модуль В), позволяющую реализовать многопользовательскую работу с системой средствами телемедицины (см. рис. 3) [6].

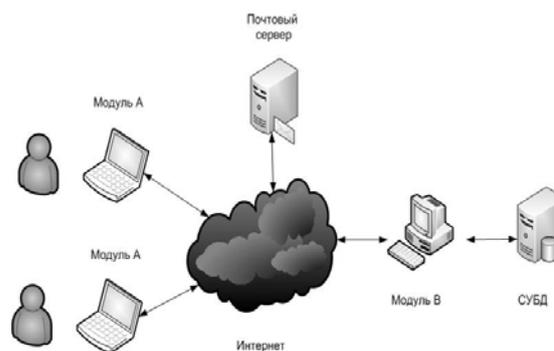


Рисунок 3. – Структура связей между модулями подсистемы

Множество модулей типа «А» устанавливаются в местах проведения исследований. Результаты исследований передаются через публичную сеть Интернет на центральный узел — модуль В. Как средство коммуникации предлагается использовать службу электронной почты и почтовый сервер как хранилище данных. Модуль В имеет связь с СУБД.

Функции модуля А:

- ввод данных в виде видеоролика или одиночного изображения;
 - обеспечение просмотра видео в покадровом режиме с выбором кадра;
 - отображение изображения с наложением мерной сетки и выбор произвольного фрагмента для анализа;
 - ввод сопутствующей информации (метаданных), описывающей объект исследования;
 - экспорт изображения и метаданных в формат, удобный для передачи на удаленную систему;
 - перенос данных на удаленную систему в ручном режиме и посредством средств коммуникации;
 - получение данных от удаленной системы в ручном режиме и посредством средств коммуникации;
 - отображение результатов исследования в табличной форме;
 - печать результатов исследования.
- Функции модуля В:
- ввод данных от модуля А в ручном режиме и посредством средств коммуникации;
 - автоматический анализ изображения и расчет характеризующих индексов;
 - формирование отчета;
 - сохранение отчета в базе данных;
 - экспорт отчета в формат, удобный для передачи на модуль А;
 - перенос данных на модуль А в ручном режиме и посредством средств коммуникации;
 - печать отчета;
 - манипуляции с базой данных.

На этапе обработки изображения и расчета характеризующих индексов, исходя из характера рассчитываемых коэффициентов [1] и характеристик изображения (зашумленность, неравномерная освещенность и т.п.), предложено использование следующих методов обработки [7, 8] (см. табл. 1). Этап расчет коэффициентов заключается в трассировке графа кровеносной сети и расчете интегральных характеристик венул, артериол и капилляров на основе характеристик ребер графа.

Например:

- коэффициент неравномерности калибра сосудов — оценка равномерности диаметра вдоль соответствующего участка;
- коэффициент извитости сосудов - оценка количества изгибов соответствующего участка кровеносной сети на единицу длины;
- коэффициент капилляризации — оценка отсутствия капилляров или занятия ими всей площади;
- коэффициент площади различных структур — оценка отношения количества интересующих объектов к занимаемой площади;

- коэффициент неравномерности кровотока — оценка равномерности оттенка вдоль соответствующего участка кровеносной сети.

Таблица 1. – Методы обработки данных в системе

Этап обработки	Методы обработки
Устранение шума	Фильтрация медианным фильтром
Выравнивание яркости	Метод балансировки изображений [8]
Формирование раstra кровеносной сети	Бинаризация изображения
Топологический анализ	Построение графа кровеносной сети (скелетизация)
Классификация	Разделение по физическим характеристикам участков
Расчет коэффициентов	Оценка топологических характеристик графа кровеносной сети

Для расчета всех коэффициентов применяется весовой подход, при котором минимальное значение коэффициента — 0, а максимальное — 1.

На рис. 4 показан образец результатов исследования (таблица коэффициентов и обработанное изображение).

Подсистема анализа термограмм позвонков

Структура подсистемы анализа температурной карты предложена в [9].

Матрица тепловых датчиков обеспечивает формирование значений напряжений, пропорциональных измеряемой температуре в 36 точках. Блок АЦП обеспечивает преобразование аналогового значения в цифровой код для ввода в микроконтроллер.

Микроконтроллер системы обеспечивает считывание значений цифрового кода из АЦП и формирование пакетов данных для передачи на ПК. Для передачи в контроллер управляющих команд (измерение, сброс, калибровка) и получения данных используется контроллер последовательного интерфейса (COM или USB).

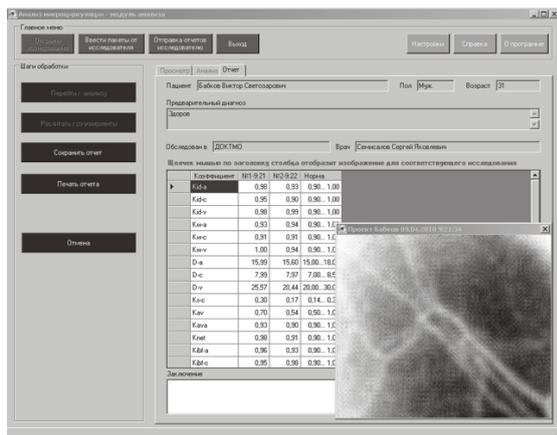


Рисунок 4. – Отчет о результатах исследования микроциркуляции

В задачи подсистемы входит:

- обеспечение ввода данных и вывода команд через последовательный интерфейс;
- обеспечение интерфейса пользователя для задания управляющих команд устройства;
- непрерывное и разовое считывание данных из устройства;
- накопление результатов измерения (статистическая обработка);
- визуализация тепловой карты в режиме реального времени;
- ввод вспомогательных описательных данных (формирование карты исследования для каждого пациента);
- вывод отчетов на печать;
- занесение результатов исследования в базу данных;
- манипуляция с данными в БД.

Для представления результатов предлагается использовать:

- визуальное представление (карта температур);
- сохранение данных в файле в виде графического изображения и сопутствующих данных;
- занесение данных в БД.

Пример визуализации карты температур показан на рис. 5.

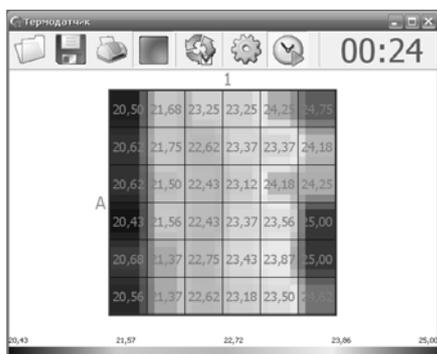


Рисунок 5. – Визуализация карты температур

Подсистема анализа координации

В разрабатываемой системе источником информации о пространственном перемещении конечностей является пара датчиков-акселерометров (LIS3L02AQ – линейный акселерометр с тремя осями измерения), представленных в виде автономных модулей. Значения ускорения с датчиков после преобразования в цифровой код передаются на базовую станцию (персональный компьютер) с использованием беспроводного интерфейса передачи данных (IEEE 802.14), что обеспечивает мобильность и удобство использования системы.

Программное обеспечение, запущенное на базовом компьютере обеспечивает:

- непрерывное считывание данных с автономных датчиков;
- визуализацию пространственного перемещения конечностей для левого, правого каналов и совместно;
- сохранение информации об исследовании в виде файлов проекта и в базе данных для обеспечения возможности дальнейшего анализа и сопоставления результатов для разных пациентов и для одного и того же пациента после воздействия различных нагрузок.

Входные данные в системе подвергаются математической обработке для преобразования значений векторов ускорения по трем осям координат в непосредственно координаты устройства в пространстве, что позволяет фиксировать траекторию перемещения автономного устройства и, соответственно, конечности. Сравнительный анализ траекторий перемещения для нормальных и патологических случаев позволяет оценить коэффициент горизонтального и вертикального отклонения от «нормальной» траектории, коэффициент неравномерности перемещения, степень снижения относительно базовой точки в процессе исследования и другие характеристики. Координаты точек нахождения мобильного устройства в пространстве определяются в момент времени с помощью математического аппарата для описания движения тела по криволинейной траектории. Отсчет положения ведется относительно базовой точки (исходного положения) для однозначности определения положения в пространстве.

Для сопоставления результатов исследований используются следующие параметры:

- коэффициент горизонтального и вертикального отклонения - рассчитываются как отношение среднего отклонения при исследовании к максимальному значению. Под отклонением в данном случае понимается

нормальный вектор, направленный из соответствующей точки эталонной траектории в точку положения устройства в момент времени t ;

- неравномерность перемещения - оценивается как среднеквадратичное отклонение для выборки отклонений от нормы в течение времени перемещения устройства в пространстве;

- степень снижения - определяется как отношение максимального вертикального перемещения относительно базовой точки к начальной высоте устройства над уровнем пола. Следует отметить, что две первые характеристики определяют такой вид нарушения, как дрожание конечностей (нарушение пространственной координации), а третий параметр позволяет оценить степень ослабления конечностей («парез»).

Заключение

Результатом данной работы является разработанный комплекс аппаратных и программных средств для анализа таких показателей, как микроциркуляция бульбарной конъюнктивы, температурная карта позвонков шейного отдела и координационные возможности конечностей в пространстве с целью оценки состояния пациента после ЧМТ. В рамках разработки комплекса исследованы методы обработки соответствующих входных данных и предложены оригинальные подходы к расчету характеристических параметров, в частности оригинальные алгоритмы расчета коэффициентов микроциркуляции и пространственной координации.

Разработанный комплекс обеспечивает высокую степень достоверности и объективности результатов исследования, что имеет большое значение для выявления нарушений как последствий ЧМТ на ранних стадиях.

На основе клинических испытаний определены нормативные показатели соответствующих характеристических коэффициентов для дальнейшего внедрения в клиническую практику.

Литература

1. Константинова Е.Э. Метод количественной оценки изображений бульбарной конъюнктивы в диагностике состояния микроциркуляции при сердечнососудистой патологии. Инструкция по применению / Е.Э. Константинова, Л.А. Иванова. - Министерство здравоохранения Республики Беларусь, рег. № 97-0603. - 1997. - 10 с.

2. Малая Л.Т. Микроциркуляция в кардиологии / Л.Т. Малая, И.Ю. Микляев, П.Г. Кравчун. - Харьков, изд-во «Вища школа», 1977. - 232 с.
3. Maldague X. P. V., Jones T. S., Kaplan H., Marinetti S. and Prystay M. "Chapter 2: Fundamentals of Infrared and Thermal Testing: Part 1. Principles of Infrared and Thermal Testing," in Nondestructive Handbook, Infrared and Thermal Testing, Volume 3, X. Maldague technical ed., P. O. Moore ed., 3rd edition, Columbus, Ohio, ASNT Press. - 2001. - 718 p.
4. Лях Ю.Е., Гурьянов В.Г. Хоменко В.Н., Панченко О.А. Основы компьютерной биostatистики. Анализ информации в биологии, медицине и фармации статистическим пакетом MedStat. – Донецк, 2006. – 214 с.
5. Milliken G.W., Ferra G., Kraiter K.S., Ross C.L. Reach and Posture Hand Preferences During Arboreal Feeding in Sifakas (*Propithecus* sp.): A Test of the Postural Origins Theory of Behavioral Lateralization // J. Comp. Psychol.– 2005. – 119(4) – P. 430.
6. Бабков В.С., Калашникова С.А. Многопользовательская система для автоматической обработки результатов исследования микроциркуляции глаза // Матеріали V-ї науково-технічної конференції студентів, аспірантів та молодих вчених ІКТ-2009 [Електронний збірник на CD]. – Донецьк. – 2009. – С. 81-86.
7. Цисарж В. В. Математические методы компьютерной графики / В. В. Цисарж., Р. И. Марусин. – К.: Факт, 2004. – 464 с.
8. Wei Hong, Xuanqin Mou, Ying Long Lingqiu Jiang A vessel extraction algorithm based on point balance, Proceedings of the 2005 IEEE, Engineering in Medicine and Biology 27th Annual Conference Shanghai, China, September 1-4, 2005. – P. 304 – 307.
9. Бабков В.С., Ромазанов С.А. Проектирование программной системы для обработки и визуализации результатов термографии позвонков // Матеріали V-ї науково-технічної конференції студентів, аспірантів та молодих вчених ІКТ-2009. – Донецьк. – 2009. – С. 412-415.

Розробка імітаційної моделі захисту інформації для автоматизованої системи «Екологічний паспорт регіонів України»

Губенко Н.С., Хімка С.С.

Донецький національний технічний університет,
gubenko@cs.dgtu.donetsk.ua, s.s.himka@gmail.com

Abstract

Khimka S. "Development of a simulation model of information security for the automated system "Environmental Passport of Regions of Ukraine" Analysis of existing methods to evaluate the effectiveness of information security. Study of the protection system for the automated information system "The ecological passport of regions of Ukraine". Study of the probabilistic approach to evaluate the characteristics of effective information security systems. On the basis of this approach, the simulation model.

Key words: *simulation model, assessment of efficiency, vulnerability.*

Вступ

Про важливість впровадження в інформаційні системи засобів захисту написано чимало робіт. Але дотепер не можна виділити універсального методу, який дозволяв би створити оптимальну систему захисту інформації. Це викликано тим, що будь-яка інформаційна система має свої особливості в архітектурі, способах обробки даних, ступенях критичності інформації та багато в чому іншому. До того ж кожна сфера має свої критерії оптимальності. Тому розробка оптимальної системи захисту інформації для певного типу інформаційних систем є на сьогоднішній день актуальною проблемою.

Згідно до нормативних документів [1, 2], ефективність захисту інформації визначається класом захищеності автоматизованої системи (АС). Клас захищеності, у свою чергу, визначає набір механізмів захисту (МЗ), які мають бути реалізовані в АС. Такий підхід не дозволяє враховувати ні якість самих МЗ, констатує лише факт їхньої наявності або відсутності, ні зміни умов функціонування системи захисту інформації (СЗІ).

В останній час науковцями постійно розглядаються альтернативні підходи щодо оцінки ефективності захисту інформації.

Провідним дослідником у цій сфері є Домарев В.В. Його дослідження присвячені проблемам створення комплексних систем захисту інформації. У своїх роботах [3,4] він пропонує системний підхід до рішення зазначеної проблеми. Їм розроблена трьохвимірна матриця, яка описує елементи захисту та зв'язок між ними. Щоб провести оцінку захищеності СЗІ треба мати експертну оцінку за усіма 140 елементами

матриці. Такий підхід є дуже складним у використанні.

Ще один підхід ґрунтується на економічних аспектах. Провідними дослідниками цього питання є Петренко С.А. та Сімонов С.В. В роботах [5, 6] описується методика оцінки СЗІ на основі сукупної вартості володіння. Ця методика базується на визначенні вартості інформаційних ресурсів. Але цей показник дуже складно визначити для некомерційних установ.

У роботі [7] розглянута ймовірнісна модель оцінки ефективності СЗІ, яка ґрунтується на припущенні, що потенційно можливі прояви загроз і розміри потенційно можливих збитків є випадковими подіями, тому вони можуть бути охарактеризовані законами розподілу та типовими характеристиками [8].

Метою даної роботи є аналіз існуючих алгоритмів і методів захисту інформації АС «Екологічний паспорт регіонів України» та створення імітаційної моделі оцінки ефективності СЗІ для удосконалення механізмів та методів захисту зазначеної системи.

Аналіз системи захисту інформації

«Екологічний паспорт регіонів України» – це АС, призначенням якої є збір та обробка екологічної інформації щодо стану навколишнього середовища та природних ресурсів регіонів України для підвищення ефективності управління природоохоронною діяльністю на національному рівні. Тому захисту цієї інформації від погроз порушення конфіденційності та цілісності повинна приділятися певна увага.

Програмний комплекс «Екологічний паспорт регіонів України» може працювати в

двох режимах: у режимі центрального серверу та у режимі локального серверу. Ми будемо розглядати режим центрального серверу. Доступ до центрального серверу здійснюється через мережу Інтернет за адресою <http://ukrecopass.org.ua>.

Структура системи «Екологічний паспорт регіонів України» наведена на рисунку 1.

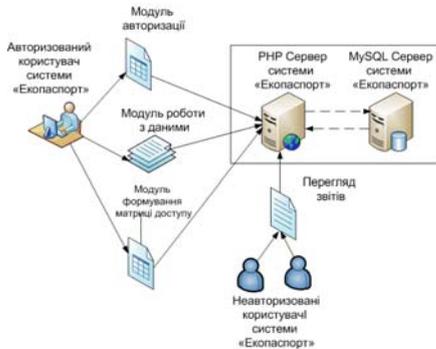


Рисунок 1. – Структура АС «Екологічний паспорт регіонів України»

Функціональні модулі системи розроблено за допомогою мови програмування PHP та бази даних MySQL. Скрипти та база даних зберігаються на віддаленому сервері. Доступ до них здійснюється через протокол *http*. Захист від погрози порушення конфіденційності здійснюється за допомогою традиційної авторизації (введення логіну та паролю). Для регулювання прав доступу використовується дискреційно-рольова модель політики безпеки. Система має три ролі – адміністратор, модератор та незареєстрований користувач. Адміністратор має можливість додавати користувачів з існуючими ролями та за допомогою матриці доступу регулювати їхні права.

Схему поділення АС «Екологічний паспорт регіонів України» на об'єкти захисту наведено на рисунку 2.



Рисунок 2. – Схеми поділення АС «Екологічний паспорт регіонів України» на об'єкти захисту

Аналіз існуючої системи захисту інформації АС «Екологічний паспорт регіонів

України» показав, що вона складається з наступних засобів.

Для об'єкту «Web-сервер» - це спеціальні настройки обмежень на доступ до контейнерів контенту (каталоги і файли на файловій системі, розділи сайту).

Для об'єкту «Сервер додатків» - це механізм управління доступом (дискреційно-рольова модель політики безпеки) та механізм авторизації за допомогою логіну та паролю.

Для об'єкту «База даних» - це механізм авторизації.

Для об'єкту «Користувач» - це антивірусні програми.

Наведений перелік засобів захисту, які використовуються у АС «Екологічний паспорт регіонів України», та досвід її експлуатації показав недосконалість цих засобів.

На основі даних про структуру системи захисту інформації та даних про погрози, які виникають, було розроблено концептуальну модель, яка дозволяє удосконалити існуючу систему захисту інформації.

Опис концептуальної моделі системи захисту інформації

У статті [8] наведено методи і методики, які дозволяють виконувати кількісну оцінку захищеності інформації при використанні СЗІ. Як правило, кількісна захищеність інформації оцінюється певним набором імовірнісних показників, основним з яких є інтегральний показник. Традиційно для обґрунтування методики оцінки захищеності інформації розробляється теоретична модель СЗІ від погроз несанкціонованого доступу (НСД). Таку модель можна представити у вигляді схеми, зображеної на рисунку 3.

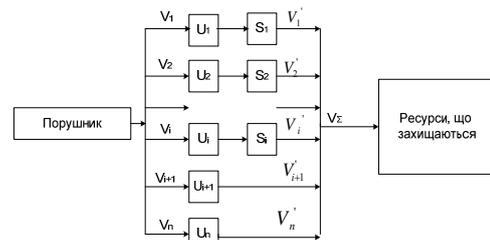


Рисунок 3. – Модель системи захисту інформації від НСД

СЗІ має вигляд мережевої моделі, яка складається з набору засобів захисту S_i . На вхід засобів захисту надходять потоки запитів НСД V_i , які визначаються моделлю порушника на множині потенційних загроз $\{U_i\}$. Завдання засобу захисту - розпізнати загрозу і заблокувати несанкціонований запит.

При функціонуванні системи захисту вхідний потік НСД розріджується з імовірністю

$\lambda_i(t)$ і утворює вихідний потік $V_i(t)$. На рисунку 3 можна побачити, що для деяких вхідних потоків відсутні засоби захисту. Це відображає факт неповного закриття системою захисту всіх можливих каналів прояви загроз.

Кожен засіб (механізм) захисту характеризується ймовірністю пропуску НСД - q і, відповідно, ймовірністю забезпечення захисту (відображення НСД) $p = 1 - q$. Порушник характеризується вектором інтенсивностей $\lambda = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{1,m}\}$ спроб реалізації відповідних загроз $U_1, \dots, U_{1,m}$.

Згідно з [3], для того, щоб реалізувати системний підхід до забезпечення інформаційної безпеки необхідно застосовувати методи моделювання систем і процесів захисту інформації. У моделі мають бути відображені істотні властивості об'єкта або процесу, що моделюються, а також математичний або логічний опис його компонентів.

В роботі [8] описано ймовірну модель системи захисту інформації з використанням теорії масового обслуговування. Отже доцільно використовувати при побудові імітаційної моделі засоби моделювання систем масового обслуговування. До таких засобів можна віднести досить поширену мову імітаційного моделювання GPSS.

Розробка імітаційної моделі системи захисту інформації

Уявімо математичну модель СЗІ, яка наведена на рисунку 3 у вигляді функціональних блоків, які об'єднані в три групи, що відповідають трьом основним об'єктам системи, яка моделюється: «Порушник», «СЗІ» і «Ресурси, які захищаються». Модель СЗІ у вигляді функціональних блоків наведено на рисунку 4.

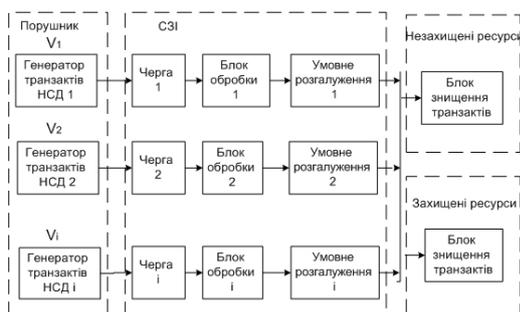


Рисунок 4 – Імітаційна модель СЗІ від НСД

Перший блок - «Порушник» - не має вхідного впливу, його завдання - генерація потоку (потоків) запитів НСД (транзакцій) із заданою інтенсивністю λ .

Блок «СЗІ» імітує процес реагування СЗІ на запити НСД. Функціональні елементи цього блоку імітують черги запитів НСД і затримки на

обслуговування. Основним же завданням функціонування цього блоку є відсіювання запитів НСД з заданою ймовірністю. На виході блоку утворюється розріджений потік запитів НСД, що має інтенсивність λ .

Останній блок моделі - «Ресурси» - не виконує самостійних функцій і використовується в імітаційній моделі для знищення запитів НСД.

Для оцінки ступеня захищеності автоматизованої системи від НСД використовуються наступні показники: ймовірність захисту - $Z(t)$; середній час між пропущеними НСД - T_n ; інтенсивність потоку пропущених НСД - $H(t)$. [8]

Будемо розглядати вірогідність забезпечення захисту як ймовірність відсутності несанкціонованих запитів до інформації на виході засобів захисту. Тоді її значення можна визначити за формулою:

$$Z(t) = 1 - F(t), \quad (1)$$

де $F(t)$ - функція розподілу випадкової величини T_n . Ця величина показує час між двома сусідніми пропусками НСД. Функція $Z(t)$ є інтегральним показником захищеності інформації та показує ймовірність того, що за час t не буде пропущено жодної спроби НСД.

Якщо розглядати сумарний потік НСД як потік, який розподілено за законом Пуассона [8], тоді для обчислень оцінки захищеності можна використовувати формулу:

$$Z(t) = e^{-\sum_{i=1}^n \lambda_i q_i t}. \quad (2)$$

Виходячи з цього, інтенсивність потоку пропущених запитів НСД визначається за формулою:

$$H(t) = \sum_{i=1}^n \lambda_i q_i t. \quad (3)$$

Алгоритм роботи імітаційної моделі має наступний вигляд. Генератор транзакцій генерує з заданою інтенсивністю запит НСД. Запит надходить до черги. Якщо механізм захисту вільний, тоді запит НСД надходить до обслуговування на час $t_{об}$. Після цього він відсіюється або пропускається в систему з заданими ймовірностями, утворюючи потік запитів НСД, які було пропущено.

АС уявляє собою Web-додаток, тому для аналізу погроз НСД можна використовувати статистику вразливостей Web додатків за 2008 рік, яку було зібрано Дмитром Євтеєвим [9]. Під час роботи були промодельовані загрози, які, відповідно до цієї статистики, виникають частіше за все. Значення середньої інтенсивності потоку запитів було прийнято таким, що дорівнює 60 секундам. Для загрози «Межсайтингове виконання скриптів» (Cross-Site Scripting) ймовірність розпізнавання запитів дорівнює 0,77, для загрози «Недостатня авторизація» Insufficient Authorization - 0,14, для SQL-ін'єкція (SQL

injection) - 0,76. Інші вхідні дані для цих загроз однакові. Вони наведені у таблиці 1.

Таблиця 1. – Вхідні параметри моделі

Назва	Значення
Час між запитами НСД	розподіляється за експоненціальним законом розподілу
Середня інтенсивність потоку запитів, λ	60 с
Час обробки запиту	1 с
Час моделювання	100000 с

За допомогою розробленої імітаційної моделі проведено три експерименти. Результати роботи наведено в таблиці 2:

Таблиця 2. – Результати моделювання роботи СЗІ АС «Екопаспорт регіонів України»

Погроза	Інтенсивність потоку пропущених запитів H , с	Середній час між пропусками запитів $T_{\text{проп}}$, с
Межсайтингове виконання скриптів	13,8	260
Недостатня авторизація	51,6	105
SQL-ін'єкція	14,4	254

На рисунку 5 відображена гістограма щільності розподілення $T_{\text{НСД}}$ для загрози Insufficient Authorization. Для інших загроз гістограми щільності мають аналогічний вигляд.

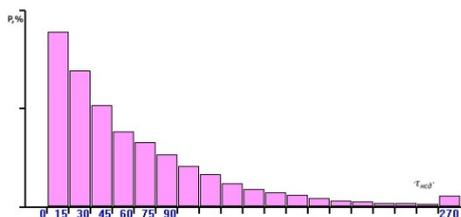


Рисунок 5. – Гістограма щільності розподілення $T_{\text{НСД}}$ для загрози «Недостатня авторизація»

Аналіз отриманих гістограм показує недосконалість існуючої системи захисту з точки зору її уразливості через відсутність посиленних механізмів захисту від НСД.

Нами запропоновано удосконалити засоби захисту АС «Екологічний паспорт регіонів України» за допомогою уведення в кожен об'єкт додаткових функцій інформаційної безпеки.

Для об'єкту «Web-сервер» - це аудит усіх запитів вбудованими в Apache механізмами логування та використання захищеного каналу зв'язку. Для об'єкту «Сервер додатків» - маски для валідації допустимих значень аргументів.

Для об'єкту «База даних» - фіксація аудітної інформації (ім'я користувача та дати зміни).

Висновки

При проведенні досліджень розглянуто структуру, методи та показники ефективності системи захисту АС «Екологічний паспорт регіонів України» і побудована її імітаційна модель з використанням системи GPSS.

Проведено експеримент і отримані експериментальні значення середнього інтервалу часу між сусідніми пропусками запитів НСД та середньої інтенсивності потоку пропущених запитів НСД. Це дало змогу запропонувати низку додаткових заходів для об'єктів захисту системи, яка розглядається.

На наступному етапі для вдосконалення захисту системи передбачається продовжити збір статистичної інформації щодо атак на окремі об'єкти АС «Екологічний паспорт регіонів України». Також планується розробка алгоритму визначення інтенсивності потоку запитів у залежності від імовірності прояви тієї чи іншої загрози.

Література

1. НД ТЗІ 2.5-005-99. Класифікація автоматизованих систем і стандартні функціональні профілі захищеності інформації від несанкціонованого доступу.
2. НД ТЗІ 2.5-004-99. Критерії оцінки захищеності інформації в комп'ютерних системах від несанкціонованого доступу.
3. Домарев В.В. Безопасность информационных технологий. Системный подход / В.В. Домарев – К.: ТИД ДС, 2004. – 992 с.
4. Домарев В.В. Моделирование процессов создания и оценки эффективности систем защиты информации / В.В. Домарев http://www.citforum.ru/security/articles/model_proc (29.09.2009).
5. Петренко С.А. Симонов С.В. Информационная безопасность: экономические аспекты. / С.А. Петренко // Jet Info – 2003. – №10 (125) . С. 3-24.
6. R. Witty, J. Dubiel, J. Girard, J. Graff, A. Hallawell, B. Hildreth, The Price of Information Security. Gartner Research, // Strategic Analysis Report, June 2001. С. 2-15.
7. Герасименко В.А., Малюк А.А. Основы защиты информации / В.А. Герасименко - М.: Известия, 1997.
8. Карпов В.В. Вероятностная модель оценки защищенности средств вычислительной техники / В.В. Карпов // «Программные продукты и системы» – 2003 – № 1. С. 31-36.
9. Д. Євтеєв Статистика уязвимостей Web приложений за 2008 год. <http://www.Securitylab.ru/analytics/368513.php> (29.09.2009).

Беловодский В.Н., Сухоруков М.Ю.

Донецкий национальный технический университет,

belovodskiy@cs.dgtu.donetsk.ua

Abstract

Belovodskiy V.N., Suhorukov M.I. "AnalySys – a program package of numerical analysis of dynamical systems" It is described the software oriented for analysis of some specific problems of dynamical systems. Its structure and some algorithms are described.

Key words: dynamical system, numerical analysis, stability, periodic regime, basin of attraction, Matlab.

Введение

Новые исследования в науке и технике нередко связаны с анализом динамических систем и не обходятся без серьёзных математических расчётов. Традиционное стремление к их облегчению, в настоящее время, базируется на широких возможностях современных пакетов прикладных программ. К числу известных и достаточно распространённых относятся, так называемые, интегрированные системы MathCAD, Matlab, Mathematica, Maple и др. Одной из наиболее развитых, как в математическом отношении, так и в части графического сопровождения, является система Matlab [1]. Это проработанная и проверенная временем система, построена на расширенном представлении и использовании матричных операций и формирует тот фундамент, на базе которого можно создавать инструменты для решения специальных задач анализа динамических систем. К числу таких задач можно отнести вопросы устойчивости и нахождения областей притяжения стационарных режимов, построение фазовых портретов или их фрагментов, реализация последних достижений качественной теории дифференциальных уравнений. Известны пакеты аналогичной направленности [2-4], однако широта рассматриваемой области и постоянно развивающийся математический аппарат оставляют данное направление вполне актуальным.

Разрабатываемое и описываемое ниже приложение Matlab, называемое AnalySys (Analysis of the Systems), направлено на исследование отдельных классов нелинейных систем и является развитием дипломного проекта одного из авторов. К настоящему времени разработан ряд его модулей. При формировании структуры приложения авторы исходили и продолжают исходить, как из стремления автоматизации решения отдельных задач анализа динамических систем, так и потребностей читаемых учебных курсов по

нелинейной динамике.

Целью данной статьи является описание структуры приложения, сформировавшейся к настоящему времени и изложение результатов разработки его отдельных модулей.

Структура приложения

Представлена на рис. 1. Условно приложение включает в себя следующие модули:

1. Базовые системы нелинейной динамики.
2. Линейные динамические системы с периодическими коэффициентами.
3. Произвольные динамические системы.

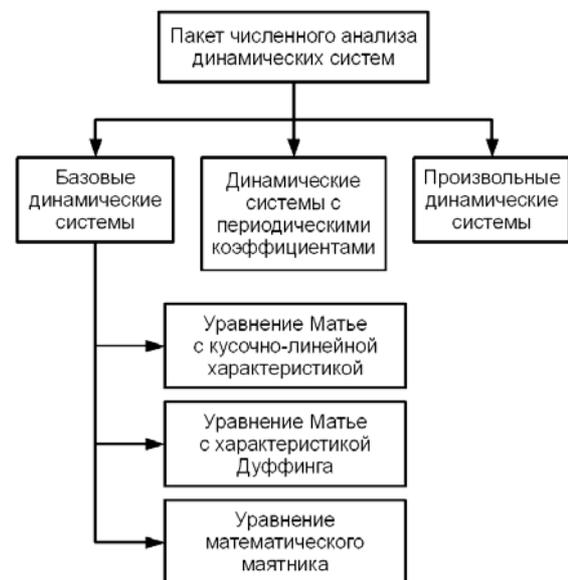


Рисунок 1. – Структура приложения

В первый модуль пока включены уравнения Матье с различными характеристиками восстанавливающих сил. Предусмотрено наличие в них и внешнего возбуждения.

Второй модуль предназначен для анализа

линейных систем с периодическими коэффициентами. Он позволяет проводить численное решение соответствующих систем дифференциальных уравнений, на основе теории Флоке-Ляпунова строить их решения в виде рядов Фурье, определять мультипликаторы системы и на базе этого делать суждения об устойчивости их тривиальных решений.

Третий модуль дает возможность пользователю самостоятельно осуществлять набор систем дифференциальных уравнений и выполнять с ними базовые процедуры, — численное интегрирование и построение фазовых траекторий или их проекций. Кроме этого, модуль позволяет проводить построение областей притяжения периодических режимов.

Модули приложения

Новые явления в поведении нелинейных динамических систем нередко обнаруживаются и изучаются на простейших моделях. Для этого достаточно вспомнить, например, историю открытия и исследования сложных резонансов и хаотических движений. С целью облегчения этого процесса, а также, для обеспечения возможности оперативной демонстрации тех или иных особенностей, в первый модуль включены, ставшие уже классическими, следующие модели: уравнение Матье с плавной и кусочно-линейной характеристикой восстанавливающей силы, допускающем наличие и смешанного возбуждения, а также уравнение, описывающее колебания математического маятника. Второй модуль помогает проводить исследование устойчивости периодических режимов нелинейных систем по первому приближению. Третий модуль позволяет пользователю проводить набор произвольных систем обыкновенных дифференциальных уравнений и выполнять комплекс указанных выше базовых исследований.

Модуль «Базовые системы нелинейной динамики». В этот модуль включены системы, описываемые уравнениями

1. $\ddot{x} + \beta \dot{x} + \omega_0^2 (a - 2\mu \cos \omega_1 t)x + \frac{1}{2}k_1 [(x - \Delta) + |x - \Delta|] + \frac{1}{2}k_2 [(x + 1) - |x + 1|] = p_0 + p \cos(\omega_2 t - \varphi);$
2. $\ddot{x} + \beta \dot{x} + \omega_0^2 (a - 2\mu \cos \omega_1 t)x + \gamma x^2 + \delta x^3 = p_0 + p \cos(\omega_2 t - \varphi);$
3. $\ddot{x} + \beta \dot{x} + \omega_0^2 (a - 2\mu \cos \omega t) \sin x = 0.$

и охватывает круг систем с параметрическим, силовым или смешанным возбуждением. Пользователь имеет возможность:

- устанавливать значения коэффициентов уравнения и задавать начальные условия;
- выбирать режим исследования

(интегрирование и построение фазовых траекторий или их проекций);

- задавать шаг, промежуток интегрирования и выбирать метод решения из числа входящих в обеспечение MATLAB.

Соответствующие диалоговые окна этого модуля представлены на рис. 2.

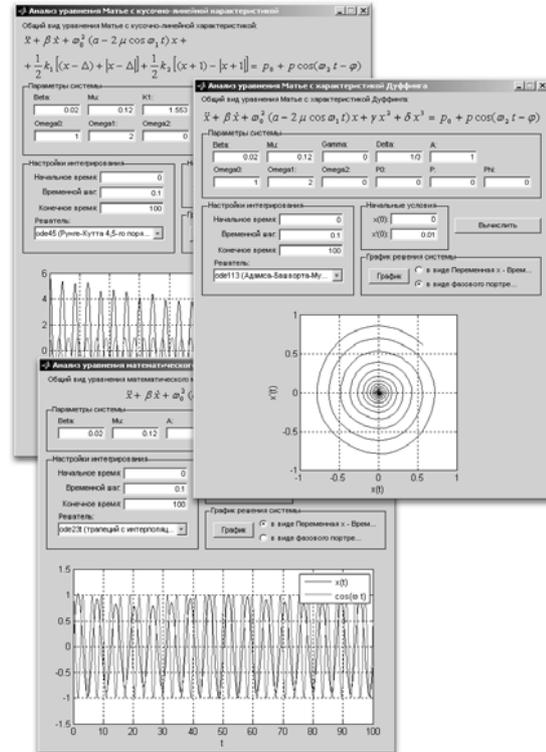


Рисунок 2. — Численный анализ базовых моделей

Модуль «Линейные динамические системы с периодическими коэффициентами». В данном модуле система линейных дифференциальных уравнений задаётся в виде

$$\dot{x} = A(t)x, \quad (1)$$

где $A(t+T) = A(t)$, $A(t) = (a_{ij}(t))_{nn}$, $x = (x_1, \dots, x_n)'$, ' — обозначает операцию транспонирования.

Матрица $X(t)$ порядка $n \times n$, состоящая из линейно независимых решений системы (1) и удовлетворяющая условию

$$X(0) = E,$$

где E , — единичная матрица, называется матрицантом системы. Значение матрицанта в момент $t = T$, т.е. матрица $X(T)$, называется матрицей монодромии системы. Собственные значения ρ_1, \dots, ρ_n матрицы $X(T)$ называются мультипликаторами системы. Они имеют определяющее влияние на характер устойчивости тривиального решения системы. А именно, если все $|\rho_i| < 1$, то оно является асимптотически устойчивым, если, по крайней мере, один из мультипликаторов по модулю

больше единицы, — то неустойчиво. При наличии матрицанта произвольное решение $x(t)$ системы можно представить в виде:

$$x(t) = X(t)x_0,$$

где x_0 , — вектор начальных условий.

В целом модуль предоставляет следующие возможности:

1. ввод коэффициентов матрицы $A(t)$;
2. построение матрицы монодромии $X(T)$;
3. нахождение мультипликаторов системы, их графическое отображение относительно единичной окружности, построение графической зависимости мультипликаторов от одного из указанных параметров системы;
4. вычисление матрицанта, визуализация его отдельных решений;
5. построение матрицанта в виде «ряда», получение матричных коэффициентов A_n, B_n разложения, сравнительный анализ этого разложения с результатом численного нахождения $X(t)$, его визуализация.

Отметим, что порядок рассматриваемой системы ограничивается ресурсами компьютера. Возможности по управлению вычислительным процессом в части выбора шага дискретизации и интегрирующего решателя здесь также сохраняются.

Диалоговые окна пользователя демонстрируются на рис. 3, 4.

Модуль «Произвольные динамические системы». Позволяет выполнять базовые операции (численное интегрирование, построение и визуализация фазовых траекторий или их проекций) над системами дифференциальных уравнений, вводимых пользователем. Модуль разработан на базе пакета TOOLBOX MATDS [2, 3] с адаптацией к пакету AnalySys и переработкой интерфейса. Не были адаптированы такие возможности MATDS как построение отображения Пуанкаре и определение показателей Ляпунова. Диалоговое окно модуля и пример расчета представлены на рис. 5.

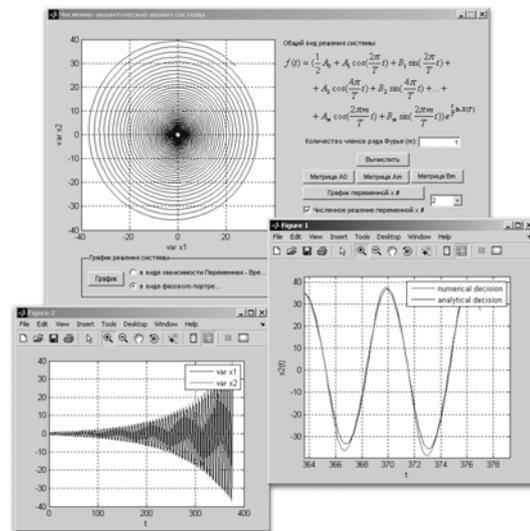


Рисунок 4. – Построение матрицанта, визуализация составляющих его решений

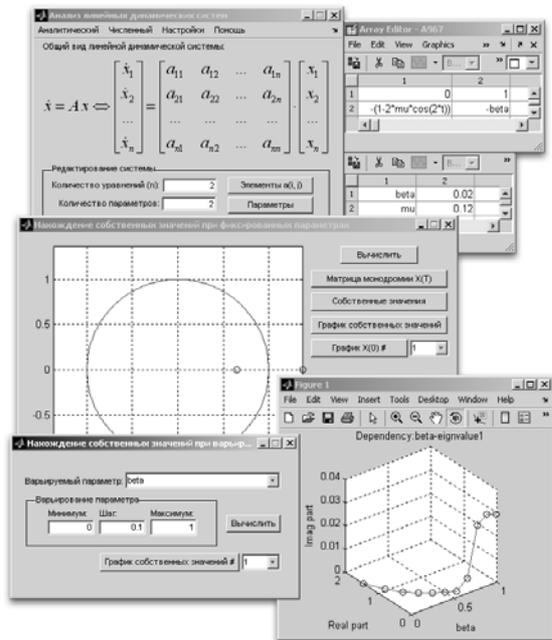


Рисунок 3. – Главное диалоговое окно модуля, расчёты мультипликаторов

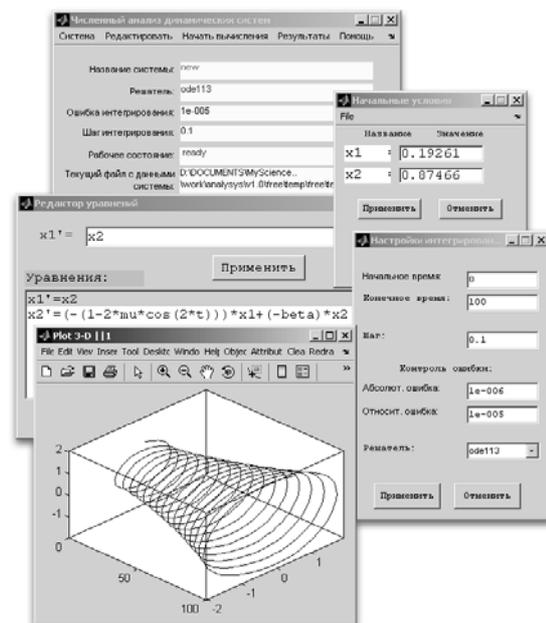


Рисунок 5. – Пример работы модуля

Построение областей притяжения периодических режимов

Построение областей притяжения является одной из важных задач теории динамических систем. Существует ряд подходов в этом направлении, к числу основных можно отнести следующие [6, 7]. Устанавливается спектр периодических режимов при данных соотношениях параметров, выделяются неустойчивые из них и после перехода в исходной системе к «отрицательному» времени с использованием отображения Пуанкаре определяются сепаратрисы, проходящие через неустойчивые неподвижные точки, которые, по существу, и делят пространство начальных условий на ряд зон, — областей притяжения. Другой подход ориентирован на предварительном сведении первоначально неавтономной системы к автономной с использованием метода медленно меняющихся амплитуд (Ван-дер-Поля, усреднения), выделения её неподвижных седловых точек и последующего построения сепаратрисных кривых. Однако следует отметить, что достаточно объемлющая информация о стационарных режимах нередко отсутствует или имеются сомнения в её полноте, а требования в части используемых методов могут оказаться обременительными. Более естественной представляется такая постановка задачи: известен отдельный периодический режим и необходимо определить его область притяжения или, по крайней мере, оценить запас устойчивости. И представляется целесообразной следующая последовательность её решения, ориентированная на использование вычислительной техники.

Проводится анализ устойчивости данного периодического режима в первом приближении. Если режим неустойчив, то исследование, по существу, исчерпано, о чем и формируется соответствующее сообщение. Если же режим устойчив, то в фазовом пространстве задаётся неподвижная точка, соответствующая исследуемому режиму, и зона поиска начальных условий, принадлежащих области притяжения. После этого производится сканирование этой зоны с заданным шагом и численное интегрирование соответствующей системы дифференциальных уравнений. Сходимость численного решения к исследуемому режиму устанавливается по параллельно вычисляемому спектральному составу или по сходимости последовательности контрольных точек, генерируемых отображением Пуанкаре, к неподвижной точке.

Анализ устойчивости может быть выполнен в автоматизированном режиме на базе теории Флоке-Ляпунова путём построения матрицы монодромии и нахождения

мультипликаторов для уравнения в вариациях, а глобальное сканирование зоны поиска в перспективе, может быть заменено более экономными процедурами построения границ с использованием методов интерполяции.

Программа, реализующая сформулированные предложения организована следующим образом.

Задаётся система дифференциальных уравнений и назначается метод её интегрирования, указывается гармонический состав исследуемого режима и его период T . Задаётся промежуток интегрирования $[t_0; t_0 + NT]$, число NP , где $h = \frac{T}{NP}$ — шаг

интегрирования, начальная точка в фазовом пространстве или в его сечении (неподвижная точка), область сканирования в виде прямоугольника, с центром в неподвижной точке, шаг сканирования и допустимые погрешности δ_1 и δ_2 . Первая из них контролирует момент установления режима, вторая, — представляет собой критерий идентичности сравниваемых гармонических составов.

Алгоритм анализа области сканирования работает следующим образом. Производится выбор пробной (начальной) точки из заданной зоны сканирования и выбор метода интегрирования системы дифференциальных уравнений. После чего система уравнений решается заданным методом и с заданным шагом. Параллельно проводится спектральный анализ численного решения на каждом промежутке равным периоду T до тех пор, пока «соседние» разложения по норме будут отличаться не более чем на заданное отклонение δ_1 , т.е. пока не произойдёт завершение переходного процесса при численном решении дифференциального уравнения.

После этого производится сравнение последнего полученного спектрального состава с заданным. Если составы отличаются по норме не более, чем на величину δ_2 , то выбранная начальная точка принадлежит области притяжения заданного режима. В качестве нормы здесь выбран один из вариантов p -нормы, а именно, $p = \infty$, т.е., $\|x\|_\infty = \max_i |x_i|$.

Алгоритм повторяется для следующей начальной точки из зоны сканирования.

После анализа всех точек зоны сканирования они выводятся на фазовую плоскость с пометкой (например, цветом) какой области притяжения принадлежит каждая точка. Так можно получить графическое представление о существующих, для данной динамической системы, областях притяжения.

На рис. 6 в качестве иллюстрации приводятся области притяжения, построенные для резонансных решений уравнения

$$\ddot{x} + k\dot{x} + x^3 = B\cos t$$

при $k = 0,2$, $B = 0,3$ с использованием данного метода. Режимы x_1 и x_3 , помеченные цифрами 1, 3, устойчивы и имеют вид [6]

$$\begin{aligned} x_1 &= 0,067 \sin t - 0,310 \cos t + 0,001 \sin 3t - 0,001 \cos 3t, \\ x_3 &= 0,988 \sin t + 0,684 \cos t + 0,021 \sin 3t - 0,061 \cos 3t, \end{aligned}$$

режим

$$x_2 = 0,671 \sin t - 0,744 \cos t + 0,026 \sin 3t + 0,022 \cos 3t$$

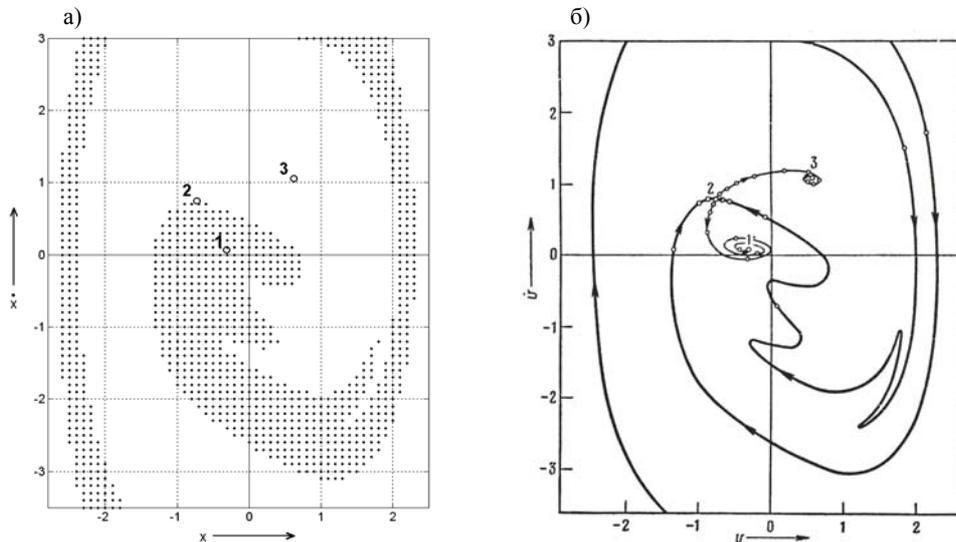


Рисунок 6. – Пример построения области притяжения: а) с использованием предложенной методики; б) заимствованный из [6]

неустойчив. Были приняты следующие настройки программы: метод интегрирования — ode45 (Рунге-Кутта 4-5-го порядка), $T = 2\pi$, $t_0 = 0$, $NT = 120$, $NP = 60$, неподвижная точка — $(-0,311; 0,069)$, область сканирования — $(x = -2,8..2,5; \dot{x} = -3,5..3,0)$, шаг сканирования равный $0,1$, $\delta_1 = \delta_2 = 0,01$. Там же, для сравнения, показана область, заимствованная из [6] и построенная по описанной выше методике, — путём построения сепаратрис с использованием отрицательного времени.

Заключение

К настоящему времени разработан модуль, содержащий комплект типовых моделей нелинейной динамики, а также модули анализа устойчивости, реализующие теорию Флоке-Ляпунова и один из алгоритмов построения областей притяжения. Разработка пакета продолжается. Однако в силу автономности составляющих его частей он активно используется в учебных целях при проведении исследований. Безусловно, авторы заинтересованы в контактах, как с разработчиками аналогичных продуктов, так и с потенциальными потребителями.

Литература

- Steinhaus S. Comparison of mathematical programs for data analysis. — <http://www.scientificweb.com/ncrunch>. — München, Germany, 2004. — 40 p.
- Говорухин В.Н. TOOLBOX MATDS для численного анализа динамических систем. — Труды Второй Всероссийской научной конференции «Проектирование инженерных и научных приложений в среде MATLAB». — М.: ИПУ РАН, 2004, с. 522-525.
- MATDS — MATLAB based program for dynamical systems investigation. — http://www.math.rsu.ru/mexmat/kvm/matds/index_ru.htm.
- Zakrzhevsky M., Ivanov Y., Frolov V. NLO: Universal Software for Global Analysis of Nonlinear Dynamics and Chaos // Proceeding of the 2nd European Nonlinear Oscillations Conference. Prague, 1996. — p. 261-264.
- Якубович В.А., Старжинский В.М. Линейные дифференциальные уравнения с периодическими коэффициентами и их приложения. М.: Наука, 1972. — 720 с.
- Хаяси Т. Нелинейные колебания в физических системах. — М.: Мир, 1968. — 432 с.
- Тондл А. Нелинейные колебания механических систем. — М.: Мир, 1973. — 336 с.

Анализ энергоэффективности зданий на основе автоматизированной системы мониторинга энергопотребления муниципальных объектов

Харитонов А.Ю., Колесниченко Н.В.
Донецкий национальный технический университет,
ka@cs.dgtu.donetsk.ua

Abstract

Kharytonov A., Kolesnichenko N. Buildings energy efficiency analysis on the basis of automated system of municipal objects energy efficiency monitoring. The issue of analysis of the automated system of municipal objects energy efficiency monitoring is considered. Mathematical models of energy efficiency increase on the basis of building thermal balance are examined.

Keywords: energy efficiency, automated system, monitoring, temperature condition, energy meter.

Введение

Потребление энергии на планете в основном сосредоточено в городах, которые используют топливные ресурсы намного быстрее, чем успевает вырабатывать их природа. Бесконтрольное использование существующих запасов ископаемого топлива приводит к энергетическим кризисам, которые периодически потрясают человечество. По некоторым экспертным оценкам, доступной нефти хватит лишь на срок до 2050 года, а газа – на срок до 2090 года. Легкодоступная энергия нефти, газа и угля является на сегодняшний день основополагающей составляющей энергетики современных городов. Города, хотя и занимают не более 2 % площади земной поверхности, однако используют около 75 % планетарных ресурсов энергии. Проблема рационального и эффективного потребления энергоресурсов в городах в последнее время приобретает особую актуальность. На передний план муниципальной политики выходят принципы устойчивого развития, которые направлены на обеспечение максимальной эффективности использования энергии, воды и других природных ресурсов.

В течение 1990-х годов общее потребление энергии в Европе по сравнению с 1996 годом несколько сократилось [1]. Однако с 1999 года наблюдается рост энергопотребления, причем увеличение потребления отмечается во всей Европе (см. рис. 1).

В Украине более 40% энергоресурсов потребляется в зданиях непроизводственного назначения – жилых домах, больницах, школах и т.п. Как правило, пути реформирования жилищно-коммунальной сферы проходят через повышение эффективности использования



Рисунок 1. – Динамика потребления энергии в Европе энергоресурсов в зданиях. Такое положение дел, связанное с высокой энергозатратностью зданий исторически сложилось еще со времен СССР. Убежденность в неисчерпаемых возможностях общества наращивать производство энергии, искусственно заниженные цены на энергоресурсы стали причиной для появления энергозатратных проектов, которые сформировали сложившуюся коммунальную инфраструктуру. При современном уровне хозяйствования со временем проявляются недостатки строительства и эксплуатации жилых, общественных, коммерческих и производственных зданий [2].

Постановка задачи

Один из возможных способов решения проблемы энергосбережения – глобальный учет использования энергии. Однако это возможно только путем создания автоматизированных систем сбора информации об использовании

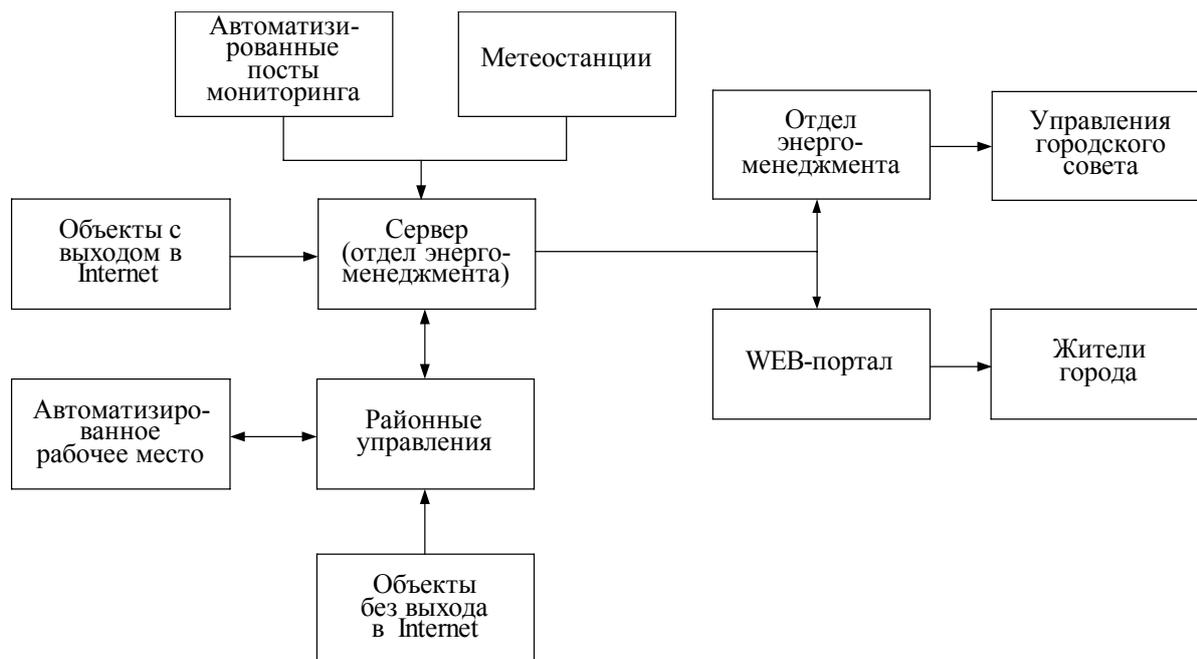


Рисунок 2. – Информационная структура автоматизированной системы

энергии. Такие системы являются основой для последующего анализа и обработки данных. Выполненные проработки структуры такой системы применительно к городу Донецку показали, что автоматизированная система энергоменеджмента должна включать автоматические посты мониторинга энергопотребления и температурного режима в зданиях, систему передачи данных на централизованную базу данных и программные модули, позволяющие проводить анализ поступающей информации. Информационной основой такой системы должна быть централизованная база данных, наполняемая как субъектами мониторинга, так и автоматически, за счет данных, поступающих с автоматизированных постов. Такая информационная система может применяться для проведения энергетических экспресс-обследований объектов (зданий) по методике, при которой учитываются как натуральные показатели энергопотребления, так и хозяйственные данные объектов мониторинга.

На сегодняшний день в городе имеются 524 объекта бюджетной сферы, что составляет около тысячи зданий. Данные объекты являются собственностью различных ведомств. Сбор данных осуществляется на бумажных носителях с помощью служб, ответственных за платежи по энергоносителям. В городе наблюдается полное отсутствие системы, позволяющей комплексно и оперативно анализировать состояние информации об энергопотреблении. Информация напрямую поступает в финансовые службы ведомств, без должной обработки, анализа и оценки ее лицами, принимающими

решение. В результате сложилась система, при которой оперативные управленческие решения принимаются часто без должного обоснования.

Организация системы энергоменеджмента включает в себя семь этапов:

- создание базы данных удельных показателей энерго- и ресурсопотребления;
- составление энергетических паспортов объектов;
- построение стандартизированных графиков ресурсопотребления, определение среднего уровня и выявление отклонений;
- анализ причин отклонений в потреблении энергоресурсов от оптимального уровня;
- проведение энергоаудита на объектах с завышенным энергопотреблением;
- разработка проектов энергосбережения;
- непрерывное поддержание системы энергоменеджмента в работоспособном состоянии и обновление данных.

Информационная структура системы предполагает логическую схему, представленную на рисунке 2.

Автоматизированные рабочие места, созданные при районных учреждениях образования, здравоохранения и подобных ведомствах, позволяют обрабатывать поступающую информацию о состоянии энергопотребления и температурного режима объектов. Введенная и обработанная информация поступает через сеть Internet на сервер системы мониторинга энергоменеджмента, который находится в Донецком городском совете. В случае, если на

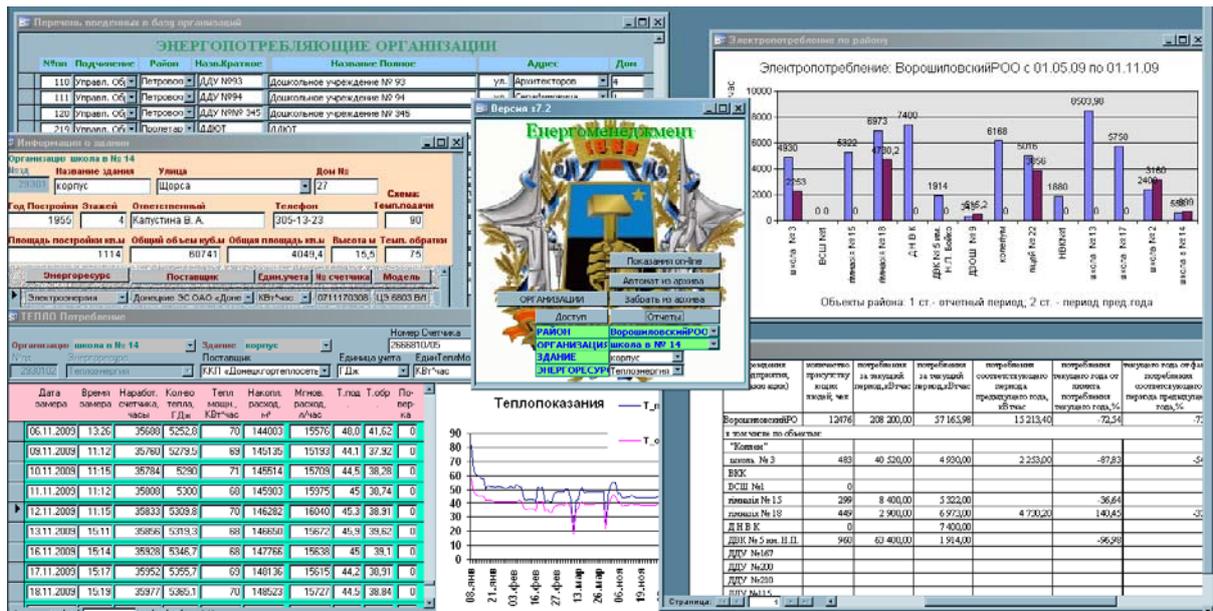


Рисунок 3. – Интерфейс оператора сервера

объекте имеется выход в сеть Internet, то персонал может самостоятельно передавать информацию на сервер, который обслуживает отдел энергоменеджмента, анализируя информацию для принятия решений вышестоящими управлениями городского совета. Сервер работает под управлением СУБД Microsoft Access 2003, под этой же СУБД работают АРМ объектов мониторинга. Интерфейс оператора сервера представлен на рисунке 3. Поскольку непосредственно на ПЭВМ вносящих информацию ответственных лиц подключение к сети Internet отсутствует временно (сбои в работе) или постоянно, то клиент на сервер передает информацию через дополнительный файл, содержащий SQL - связанные таблицы [3]. Дополнительный файл архивируется и посылается по электронной почте в Донецкий городской совет.

В городском совете VBA-макрос последовательно открывает каждое письмо, распаковывает архив, выполняет SQL –запрос [4], обновляющий таблицы сервера данными клиента и помечает данное письмо, как обработанное.

Так же на сервер в автоматическом режиме поступает информация с автоматических постов, расположенных на объектах, а так же с метеостанций. Техническое обеспечение данной системы предполагает наличие следующих средств: температурных датчиков и расходомеров энергоресурсов, по беспроводной сети передающих информацию на промышленные средства сбора данных, мини-ЭВМ, которые собирают данную информацию, телефонных проводных модемов, которые передают данную информацию на сервер. Пост представляет из себя промышленный

компьютер типа eVOX, на который собирается информация со всех счетчиков и датчиков как по проводным, так и по беспроводным каналам связи [5]. Каждый автоматический пост уникален, поскольку различные счетчики коммутируются различными интерфейсами: USB, RS-232, RS-485, optical UART.

Сервер, посредством web-портала, предоставляет информацию о состоянии энергопотребления управлениям городского совета.

Проработанная схема данных, хранимой на сервере, представлена на рисунке 4.

Данная автоматизированная система предназначена для создания информационной основы эффективного энергоменеджмента города. Анализ собираемых данных служит для проведения оценки, в результате которой определяются объекты с наименее эффективным расходом энергоресурсов. Нет необходимости проводить замеры потребления энергии в реальном времени по всему городу, однако необходимо иметь возможность создавать модели, позволяющие проводить оценку потребления энергии на основе использования системных методов. Поэтому предлагаемая автоматизированная система должна иметь математическое обеспечение для моделирования энергопотребления, основанное на использовании:

- имитационных моделей теплообмена в зданиях;
- балансовых уравнений потребления энергии по территориальному или ведомственному признакам;
- модулей обобщения полученных

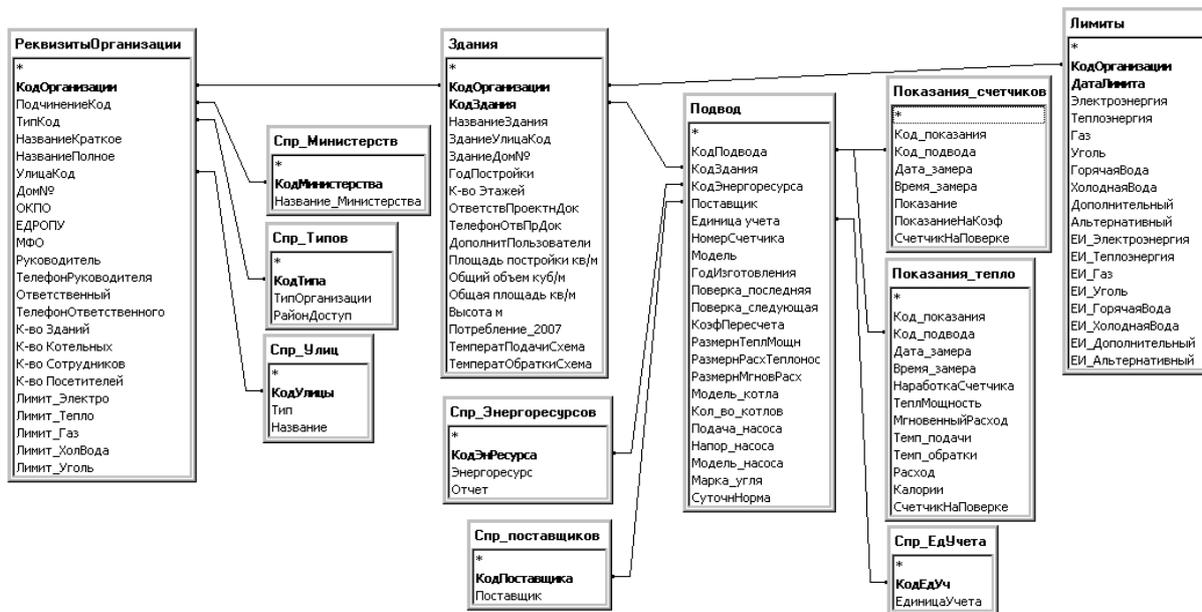


Рисунок 4. – Схема базы данных системы

данных на основе средств графического представления информации.

Математическая модель формирования теплового режима здания, в общем случае, сводится к составлению уравнений теплового баланса, описывающих перенос тепла воздухообменом, внешние климатические воздействия, теплопотери через наружные ограждения за счет теплопроводности и фильтрации, теплопоступления от технологического оборудования и т. д.

Для моделирования теплового режима необходимо проведение натурного эксперимента, в результате которого определяются:

- фактические теплозащитные характеристики наружных ограждений;
 - особенности распределения температуры внутреннего воздуха в помещениях зданий;
 - теплоаккумулирующие характеристики здания;
 - инерционность систем отопления;
 - мощность внутренних тепловыделений.
- Во время наблюдений измеряются:
- температура, влажность, скорость и направление ветра атмосферного воздуха;
 - интенсивность солнечной радиации;
 - температура и влажность внутреннего воздуха в помещениях здания;
 - температура внутренней, наружной поверхностей здания и оборудования;
 - параметры теплоносителя и др.

Задача моделирования теплообмена в зданиях на основании полных данных теплотехнических экспериментов является дорогостоящей и решается практически

исключительно в случае проектирования систем автоматического регулирования. В нашем случае, для автоматической системы мониторинга, необходимо создать модель, использующую параметры, которые могут быть измерены на объекте обслуживающим персоналом. Такая модель не будет полной, однако она должна дать качественную характеристику здания, как энергопотребляющего объекта.

Информационная модель системы

При мониторинге системы отопления здания измеряются параметры, перечисленные ниже.

1) По данным теплового счетчика определяются: мгновенная тепловая нагрузка здания Q , (кВт); потребленная тепловая энергия Q , Гкал, (ГДж); мгновенный массовый расход воды в сети отопления m_w , т/ч, (кг/с); мгновенный объемный расход воды в сети отопления V , м³/ч, (м³/с); количество протекающей воды M_w , т или V , м³; температура воды в подающей линии τ_1 , °С; температура воды в обратной линии τ_2 , °С; время наработки счетчика на момент замера τ , ч.

2) Температура воздуха внутри помещений $t_{вн}$, °С;

3) Температура наружного воздуха $t_{нар}$, °С. Дополнительно могут учитываться погодные условия по данным метеорологической станции:

- скорость ветра W , м/с;
- наличие осадков, мм;
- освещенность.

4) Минимальная информация, которая предоставляется о здании:

- объем здания $V_{зд}$, м³;
- год постройки, назначение.
- расчетный температурный график системы отопления (τ_1, τ_2).

Температура воды в подающей и обратной линии тепловой сети относятся к характеристике потребляемой нагрузки во время замера, поэтому для того, чтобы эти значения были информативными, необходимо измерять мгновенную тепловую нагрузку и мгновенный расход сетевой воды [6].

Модель строится на основании теплового баланса здания, который выражается следующими уравнениями:

$$Q_1 = q_v \cdot V_{зд} \cdot (t_{вн} - t_{нар}), \quad (1)$$

где Q_1 - тепловой поток, который теряется зданием в окружающую среду, кВт (Мкал/ч); q_v - удельная отопительная характеристика здания, Вт/(м³·К); $V_{зд}$ - объем здания по наружному обмеру, м³.

Компенсация этих потерь, осуществляется за счет подачи тепловой энергии из тепловой сети:

$$Q_2 = m_e \cdot c \cdot (\tau_1 - \tau_2), \quad (2)$$

где m_e - расход воды в сети отопления, т/ч (кг/с), c - теплоемкость воды, кДж/кг·К (в рабочем интервале температур изменяется незначительно и может приниматься равной 4,19 кДж/кг·К).

Для передачи тепла непосредственно в помещениях здания используются отопительные приборы (радиаторы, конвекторы). Тепло, передаваемое отопительными приборами, определяется выражением:

$$Q_3 = k \cdot F \cdot \Delta t_{cp}, \quad (3)$$

где k - средний коэффициент теплопередачи от воды, циркулирующей в отопительных приборах к воздуху в помещениях, Вт/(м²·К) или ккал/(ч·м²·К); F - площадь теплообменной поверхности отопительных приборов, установленных в здании, м²; Δt_{cp} - среднелогарифмический температурный напор между отопительными приборами и воздухом помещений.

В стационарном режиме, при отсутствии дополнительных внутренних источников тепловыделения, прогрева помещений за счет солнечной инсоляции и т.д.:

$$Q_1 = Q_2 = Q_3. \quad (4)$$

Поскольку тепловой счетчик фактически фиксирует тепло, отдаваемое отопительными приборами с учетом передачи тепла от труб внутреннего отопительного контура (а оно также может быть учтено в формуле (4)), то в любом режиме:

$$Q_2 = Q_3. \quad (5)$$

Таким образом, определив экспериментально среднюю температуру внутри здания при отсутствии внутренних тепловыделений (лучше всего подходит ночное время при отсутствии осадков и сильного ветра), находится температурный напор от отопительной системы здания и с учетом (5) вычисляется значение комплекса:

$$k \cdot F = \frac{Q_2}{\Delta t_{cp}}. \quad (6)$$

Действительный параметр Φ_o отопительной системы, (который определяет теплоотдачу отопительной системы) определяется в расчетных условиях [2]:

$$\Phi_o = k \cdot F \cdot \left(\frac{t_{вн} - t_o^p}{t_{вн} - t_{нар}} \right)^{0,2}. \quad (7)$$

При этом внутренний отопительный контур должен быть в нормальном состоянии (промыт, отремонтирован, отопительные приборы не должны быть загромождены и т.п., то есть быть в состоянии нормальной эксплуатации). В таком случае Φ_o будет постоянной величиной в любом режиме и при любых температурных условиях. Снижение данной характеристики в дальнейшем будет свидетельствовать о засорении отопительных приборов и необходимости их промывки или ревизии.

Внутренние тепловыделения в здании с определенной степенью точности могут быть определены по следующей формуле:

$$\Delta Q_{мс} = q_v \cdot V_{зд} \cdot (t_{вн} - t'_{вн}), \quad (8)$$

где $t'_{вн}$ - средняя температура в здании, которую создает система отопления без учета внутренних источников тепла.

Произведение $q_v \cdot V$ является отопительной характеристикой здания. Данная характеристика, определенная как:

$$q_v \cdot V_{зд} = \frac{Q_2}{(t'_{вн} - t_{нар})}, \quad (9)$$

должна оставаться в стационарном режиме отопления постоянной величиной. Изменение данного показателя будет свидетельствовать об изменении термического сопротивления конструкции здания, что может быть следствием сильного ветра, намокания ограждений и т.п. Однако, отопительная характеристика здания, рассчитанная только на основании данных теплового счетчика, обычно дает значительный разброс значений. В связи с этим, действительная характеристика определяется как средняя за весь отопительный период.

Зная объем здания, находится удельная отопительная характеристика здания q_v и эта величина сравнивается с нормативным показателем. Однако следует учитывать условность такого сравнения, так как определяющим показателем для данной характеристики является не объем здания, а такие параметры как:

- площадь наружных ограждений здания;
- коэффициент остекления боковых поверхностей;
- характеристика крыши, подвала, стен и пр.

Следующим этапом является определение расчетной отопительной нагрузки здания:

$$Q'_o = q_v \cdot V_{зд} \cdot (t'_{вн} - t'_o), \quad (10)$$

исходя из которой, далее находим параметр Φ'_o отопительной системы в расчетных условиях, который необходим для расчета отопительной нагрузки здания:

$$\Phi'_o = \frac{Q'_o}{\Delta t_{cp}^p}, \quad (11)$$

где Δt_{cp}^p – температурный напор, который должна создать система отопления здания в расчетных условиях.

При сравнении действительного значения Φ_o , определенного по формуле (7) с необходимым расчетным Φ'_o можно сделать некоторые выводы:

1) если $\Phi_o < \Phi'$, то существующей поверхности отопительных приборов недостаточно для полноценной отопительной нагрузки здания, даже если тепловая сеть будет строго выполнять проектный температурный график. При этом, отклонение уже на 10%

является критическим, при котором увеличив расход теплоносителя в допустимых пределах невозможно добиться необходимого увеличения температурного напора. Частными случаями снижения Φ_o могут быть: загрязнение, гидравлическая разветка отопительного контура, загромождение отопительных приборов и т. д.;

2) если $\Phi_o > \Phi'$, отопительная система здания имеет достаточную тепловую мощность для удовлетворения расчетной нагрузки и возможен переход на пониженный температурный график по отношению к проектному, или снижение расхода теплоносителя относительно проектного значения.

Делать вывод о том, что тепловая сеть недодает или дает с избытком тепловую энергию для отопления здания можно лишь на основании анализа температурного графика тепловой сети с учетом индивидуального расхода теплоносителя на заданный объект.

Однако, учитывая специфику работы тепловой сети, отклонение от проектного температурного графика нельзя заранее считать нарушением, и, соответственно, делать вывод о недогреве или перегреве отапливаемых зданий. Так, если действительные характеристики зданий и их отопительных систем отличаются от проектных значений, (а это чаще всего так и происходит, так как системы проектируются с определенным запасом), или они изменились в процессе эксплуатации, возникает необходимость корректировки температурного графика. Температура сетевой воды в подающей линии для всех потребителей примерно одинакова (для удаленных потребителей она снижается из-за тепловых потерь в сети). В то же время температура в обратной линии может существенно отличаться для разных потребителей в зависимости от индивидуальных характеристик их систем отопления. При наладке тепловой сети, нагрузки потребителей корректируются расходами теплоносителя.

На основании определенных выше параметров системы отопления и характеристики здания можно произвести расчет индивидуального температурного графика для каждого здания. Далее, сравнивая действительные значения параметров сетевой воды с полученным индивидуальным графиком, можно делать вывод о дефиците или избытке тепловой энергии, подаваемой из тепловой сети.

Индивидуальный температурный график определяется, согласно следующего алгоритма:

1) определяются характеристики здания и его отопительной системы: $q_v \cdot V_{зд}$ по формуле (9) и Φ_o по формуле (11);

2) определяется текущее значение

отопительной нагрузки при данной температуре наружного воздуха $t_{нар}$:

$$Q_o = q_v \cdot V_{зд} \cdot (t_{вн} - t_{нар}), \quad (12)$$

где $t_{вн}$ – нормативное значение средней температуры в здании;

3) определяется текущее значение комплекса $k \cdot F$:

$$k \cdot F = \Phi_o \cdot \left(\frac{t_{вн} - t_{нар}}{t_{вн} - t_{нар}^p} \right)^{0,2}; \quad (13)$$

4) определяется среднелогарифмический температурный напор:

$$\Delta t_{cp} = \frac{Q_o}{k \cdot F}. \quad (14)$$

Далее необходимо учитывать, что необходимая температура сетевой воды в подающей линии и ее расход – величины взаимосвязанные. В таком случае задача сводится либо к определению необходимого расхода при заданном значении τ_1 , либо к необходимому значению температуры теплоносителя на входе в здание при заданном расходе G_6 .

5а) Если задан расход теплоносителя G_6 , то, решая систему уравнений:

$$\begin{cases} \tau_1 - \tau_2 = \frac{Q_o}{m_6 \cdot c} \\ \Delta t_{cp} = \frac{\tau_1 - \tau_2}{\ln \frac{\tau_1 - t_{вн}}{\tau_2 - t_{вн}}} \end{cases}, \quad (15)$$

получим:

$$\tau_1 = \frac{t_{вн} \cdot \left(1 - \exp\left(\frac{Q_o}{m_6 \cdot c \cdot \Delta t_{cp}}\right) \right) - \frac{Q_o}{m_6 \cdot c} \cdot \exp\left(\frac{Q_o}{m_6 \cdot c \cdot \Delta t_{cp}}\right)}{1 - \exp\left(\frac{Q_o}{m_6 \cdot c \cdot \Delta t_{cp}}\right)}$$

$$\tau_2 = \tau_1 - \frac{Q_o}{m_6 \cdot c}. \quad (16)$$

5б) Если задана температура теплоносителя на входе в здание τ_1 , то из выражения теплового баланса получаем расход:

$$m_6 = \frac{Q_o}{(\tau_1 - \tau_2) \cdot c}, \quad (17)$$

где $\tau_2 = 2 \cdot (t_{вн} + \Delta t_{cp}) - \tau_1$ (с погрешностью не более 2,5%).

Реализация системы и анализ полученных результатов

При помощи данной методики был проведен анализ теплотребления ОШ №98 г. Донецка за три отопительных периода с 2005 по 2008 гг. Анализ проводился следующим образом. Были взяты данные теплосчетчика за данный период, данные температуры внутри школы и данные метеостанции за анализируемый период. С помощью формулы (9), были найдены ежедневные показатели отопительной характеристики здания, и была определена фактическая отопительная характеристика здания по наиболее холодным дням $q_v \cdot V_{зд} = 9200 \text{ ккал}/(\text{ч} \cdot \text{K})$. Расчетная нагрузка отопления из формулы (8) составила 405 Мкал/ч.

Значения характеристики отопительных приборов за отопительные периоды были следующими:

$$2005-2006 \text{ гг.}: \Phi_o = 5710 \text{ ккал}/(\text{ч} \cdot \text{K})$$

$$2006-2007 \text{ гг.}: \Phi_o = 5617 \text{ ккал}/(\text{ч} \cdot \text{K})$$

$$2007-2008 \text{ гг.}: \Phi_o = 5490 \text{ ккал}/(\text{ч} \cdot \text{K}).$$

При этом, учитывая температурный график системы отопления здания школы «95/70» (норма температуры сетевой воды на входе 95°C, на выходе 70°C), необходимая характеристика отопительных приборов должна быть $\Phi'_o = 5870 \text{ ккал}/(\text{ч} \cdot \text{K})$. Как видно, теплоотдачи отопительных приборов не достаточно для удовлетворения необходимой тепловой нагрузки, что указывает на возможность «недогрева» здания при низких температурах наружного воздуха. Причем, чем ниже значение Φ_o , тем большим будет «недогрев».

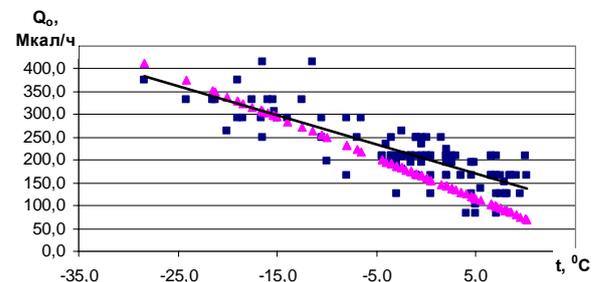


Рисунок 4. – График распределения нагрузки отопления здания в зависимости от температуры наружного воздуха за отопительный период 2005-2006 гг, где \blacktriangle - расчетная тепловая нагрузка здания, \blacksquare - действительная тепловая нагрузка по счетчику

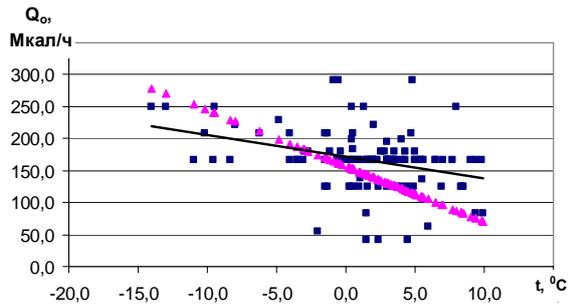


Рисунок 5. – График распределения нагрузки отопления здания в зависимости от температуры наружного воздуха за отопительный период 2006-2007гг, где \blacktriangle - расчетная тепловая нагрузка здания, \blacksquare - действительная тепловая нагрузка по счетчику

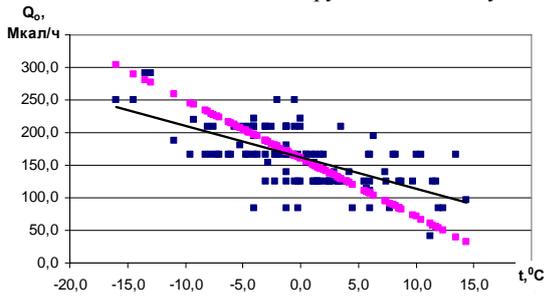


Рисунок 6. – График распределения нагрузки отопления здания в зависимости от температуры наружного воздуха за отопительный период 2007-2008гг, где \blacksquare - расчетная тепловая нагрузка здания, \blacksquare - действительная тепловая нагрузка по счетчику

Выше приведены полученные графики распределения тепловой нагрузки отопления в зависимости от температуры наружного воздуха. Как видно из графиков, центральное

качественное регулирование тепловой нагрузки на котельной не удовлетворяет требуемым нормам, особенно в отопительные периоды 2006-2007 гг. и 2007-2008 гг. Данная проблема может быть связана как с неудовлетворительным регулированием на котельной, характерным для ручного регулирования, так и с возможной гидравлической разверкой тепловой сети. Кроме этого видно, что линия тренда действительных нагрузок пересекается с расчетными нагрузками на рисунке 4 при температуре наружного воздуха $t_o = -16^{\circ}\text{C}$, на рисунке 5 при $t_o = -4^{\circ}\text{C}$, и на рисунке 6 при $t_o = -1^{\circ}\text{C}$. Это связано с тем, что теплоотдача отопительной системы ниже необходимой $\Phi_o < \Phi'_o$, и к тому же постоянно снижается, что свидетельствует об ухудшении состояния отопительной системы здания.

Поэтому, при температурах наружного воздуха ниже, чем t_o , наблюдается недогрев помещений. Отчасти для компенсации подобного явления, при более высоких температурах котельная дает больше тепла, что приводит к перерасходу топлива. В целом, из-за ухудшения состояния отопительной системы здания, средняя температура внутреннего воздуха снизилась от $19,1^{\circ}\text{C}$ в 2005-2006гг., до $18,6^{\circ}\text{C}$ в 2006-2007гг. и до $18,0^{\circ}\text{C}$ в 2007-2008гг.

На примере отопительного периода 2005-2006 гг. (см. рис. 7) можно видеть

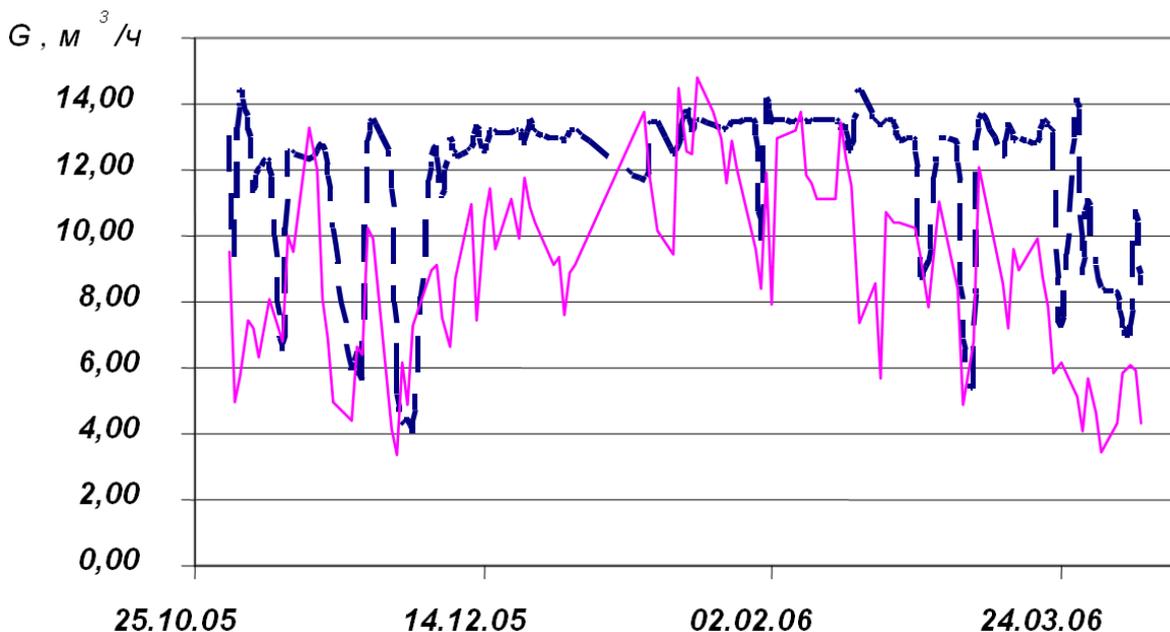


Рисунок 7. – График изменения расхода сетевой воды за отопительный период 2005-2006гг.,

где — действительный расход сетевой воды, — расчетный расход сетевой воды.

потенциал энергосбережения за счет внутреннего регулирования расхода сетевой воды в здании.

Как видно из графика, отклонение действительного расхода сетевой воды от того, который оптимально удовлетворит тепловую нагрузку здания при существующих значениях температуры сетевой воды в подающем трубопроводе, довольно значительно, и указывает на хороший потенциал энергосбережения. Однако в существующих условиях, для подобного регулирования необходима реконструкция теплового ввода здания, чтобы не нарушать гидравлического режима тепловой сети.

Выводы

На основе предлагаемой методики разработано программное обеспечение, позволяющее непрерывно анализировать текущее состояние энергопотребления для зданий объектов бюджетной сферы. Данное программное обеспечение внедрено, производится сбор данных по учреждениям городского образования.

Программа позволяет реализовать вышеописанный алгоритм по каждому зданию, относящемуся к организациям бюджетной сферы. Программное обеспечение разработано для отдела энергоменеджмента главного экономического управления Донецкого городского совета и позволяет:

- проводить формирование и представление обобщенных данных о расходах энергоресурсов;
- выполнять краткосрочный и долгосрочный прогноз ресурсо- и энергопотребления города;

- осуществлять контроль за составлением плана эффективного потребления ресурсов;
- осуществлять информационную поддержку при обосновании мероприятий по энергосбережению;
- создавать оптимальные механизмы распределения лимитов на потребление энергоресурсов объектами бюджетной сферы;
- обеспечивать процесс подготовки договоров на приобретение энергии для всех объектов коммунальной энергетики;
- выполнять обоснование ежегодного энергетического плана для города и формирование отчета о его выполнении.

Литература

1. OECD/IEA (Organization for Economic Cooperation and Development/International Energy Agency), 2005b. World Energy Outlook 2005.
2. Харитонов А.Ю. К вопросу создания эффективных автоматизированных систем для получения энергии / А.Ю. Харитонов // Наук. труды Донецкого Национального технического университета. – 2008. – № 9. – С. 292 – 295.
3. Белянин М.В. Создание баз данных в Access 2007 : Ваша первая база данных в Access. М.: ИТ. Пресс, 2008. – 281 с.
4. Винтер Р. Microsoft Access 97: Справочник. – СПб.: Питер, 1998. – 416 с.
5. Парк Джон, Маккей Стив. Сбор данных в системах контроля и управления. Группа ИДТ, 2006. – 504 с.
6. В.Е. Козин, Т.А. Левина и др. Теплоснабжение: Уч. пос. для студентов вузов. – М.: Всп. шк., 1980. – 408 с.

Розділ 4

До 90-річчя Донецького національного технічного університету



КАФЕДРА КОМПЬЮТЕРНЫХ СИСТЕМ МОНИТОРИНГА: ЛЮДИ, ФАКТЫ, СОБЫТИЯ

Кафедра компьютерных системы мониторинга факультета компьютерных наук и технологий ДонНТУ в 2011 году отметила восьмую годовщину своей деятельности. Восемь лет по сравнению с 90-летием ДонНТУ – это мало, но, бесспорно, это факт становления кафедры и этап в оценке успешности её развития.

Создание новой кафедры, особенно кафедры по направлению компьютерных наук – это непростая задача. Поэтому организационный процесс от момента выхода



Зав. кафедрой КСМ Аверин Г.В.

приказа о создании кафедры (февраль 2003 г.) до начала её практической деятельности, как структуры факультета вычислительной техники и информатики (ФВТИ), занял более, чем полгода.

Заведующим кафедры с начала её образования и по сегодняшний день является д.т.н., проф. Аверин Г.В. Идея создания кафедры возникла после лицензирования по заданию руководства университета в 2000 году специальности “Компьютерный эколого-экономический мониторинг” (КЭМ) направления подготовки “Компьютерные науки”. В течение нескольких лет небольшая группа сотрудников факультета геотехнологий и управления производством (ФГТУ) из четырех человек – трех аспирантов (Голубевой Л.Г., Хоруженко А.С., Звягинцевой А.В.) и их научного руководителя Аверина Г.В. при помощи всего коллектива ФГТУ создали базу для развития новой специальности. Качественный скачок роста произошел в 2003



Первые аспиранты кафедры Л.Голубева, А.Хоруженко, А.Звягинцева, 2003 год

году, когда из четырех вышеназванных сотрудников ФГТУ и трех опытных преподавателей, доцентов кафедры прикладной математики и информатики ФВТИ (к.т.н. Н.Е. Губенко, к.ф.-м.н. А.Е.Серика и к.т.н. В.Н. Беловодского), был организован научно-педагогический коллектив будущей кафедры. Перед малочисленным коллективом стала задача в сжатые сроки создать материально-техническую базу, разработать новые курсы и методическое обеспечение для проведения учебного процесса, а также подготовиться к аккредитации специальности и осуществить первый выпуск специалистов. За два года эта задача была решена.

Научно-педагогический состав кафедры КСМ на сентябрь 2009 года:



Новый 2007-й год на кафедре КСМ

Аверин Геннадий Викторович, профессор, д.т.н., зав. кафедры

Губенко Наталья Евгеньевна, доцент, к.т.н.

Беловодский Валерий Николаевич, доцент, к.т.н.

Серик Александр Евгеньевич, доцент, к.ф.-м.н.

Звягинцева Анна Викторовна, доцент, к.т.н.

Климко Григорий Тимофеевич, доцент, к.ф.-м.н.

Хоруженко Андрей Сергеевич, ассистент

Голубева Лина Геннадиевна, ассистент

Павлий Виталий Александрович, ассистент

Харитонов Антон Юрьевич, ассистент

Киселева Ольга Владимировна, ассистент

Иващенко Алеся Борисовна, ассистент

Сухоруков Максим Юрьевич, ассистент

Родригес Антон Эдгарович, ассистент

Кафедра КСМ – это 13 преподавателей и аспирантов, в том числе 1 доктор наук и 4 кандидата наук. Это одна из самых молодых выпускающих кафедр университета – средний

возраст преподавательского состава составляет около 40 лет. При создании кафедры благодаря поддержке администрации университета были введены в эксплуатацию два компьютерных класса, в которых могут проводиться занятия по всем базовым дисциплинам, а также телевизионная аудитория для чтения лекций и проведения научных конференций.

Первый набор студентов на специальность КЭМ был осуществлён ещё в 2000-м году на ФГТУ, а первый выпуск бакалавров торжественно состоялся в 2004-м уже на ФВТИ. За



Первые бакалавры специальности КЭМ, 2004 год.

период деятельности кафедры КСМ проведена аккредитация специальности КЭМ, сделан первый выпуск специалистов (2005 год, 35 человек). В 2005 году была лицензирована магистратура, в 2006 году проведена аккредитация магистратуры, а в январе 2007 года осуществлен первый выпуск магистров по специальности КЭМ (8 человек).

В 2006 году на кафедре создана новая специализация в рамках направления подготовки «Компьютерные науки» – «Программирование медиасистем и компьютерный дизайн» (ПКД). Данное направление за последнее десятилетие возникло на стыке информационных технологий и изобразительного искусства. В сентябре 2006-го года был произведен первый приём 15 студентов на очную форму обучения по специализации ПКД. Двумя годами позже организован прием на очно-заочную форму обучения. В результате набрана группа студентов в количестве 20-ти выпускников техникумов.



Пожелания кафедре от первых выпускников

На сентябрь 2010 года на кафедре КСМ обучались 170 студентов 1-6 курсов групп КЭМ и ПКД очного и очно-заочного отделений. Среди них 146 студентов обучались по программе бакалавра, 15 – по программе магистра и 9 по программе специалиста. За весь период своего существования кафедрой подготовлено 103 специалиста и 32 магистра, легко трудоустроившихся на постоянно растущем рынке информационных технологий.

С процессом становления кафедры в университете оформилось новое научное направление мониторинга объектов и систем. Данная область деятельности связана с созда-



Торжественное вручение дипломов первому выпуску специалистов специальности КЭМ, 2005 г.



Магистры КЭМ-7м, выпуск 2008

нием в прикладных областях автоматизированных средств наблюдения и информационно-аналитических систем, а также разработкой специального программного обеспечения.



Женский коллектив кафедры КСМ, март 2008 года

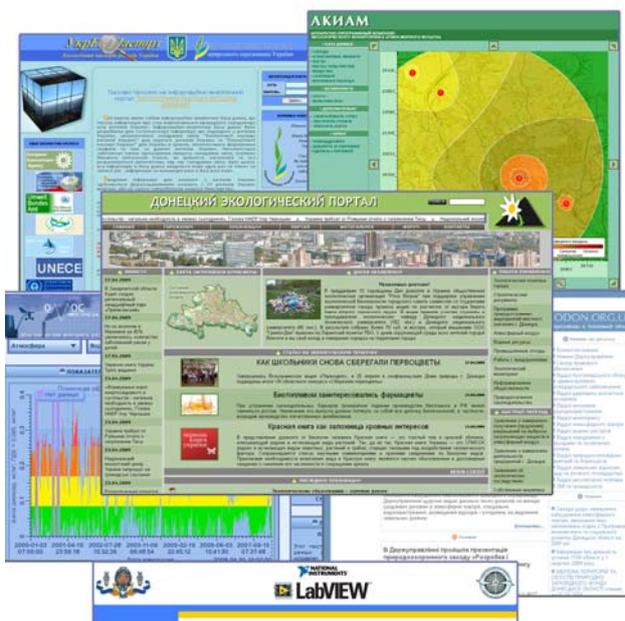
Компьютерные науки общепризнанно считаются областью, где доля мужчин является подавляющей. Однако пример кафедры КСМ 2008 года указывает на то, что эта закономерность не является всеобщей. В это время характерная для демографии формула Менделя (0,51+0,49) была применима и к кафедре КСМ. Не исключено, что быстрый прогресс педагогических коллективов на этапе их становления определяется женским началом, как основополагающим источником всех процессов развития. Но в 2009-м году традиции компьютерных наук возобладали над законами демографии. И только будущее покажет, пошло ли это на пользу кафедре.

Научная деятельность кафедры и подготовка кадров

Научные направления кафедры сформировались в основном в результате выполнения НИР и ОКР и соответствуют профилю подготовки специалистов по компьютерным наукам. Приоритетными направлениями являются следующие области научной деятельности.

1. Разработка и внедрение систем мониторинга, автоматизированных систем и интернет-технологий, а также программных продуктов, связанных с обработкой и передачей информации в области охраны окружающей среды, энерго- и ресурсосбережения, регионального социально-экономического развития и т.д.
2. Научные основы системного анализа сложных систем и интеллектуальный анализ данных, экологическая и стратегическая оценка, теория опасности и риска.
3. Моделирование нелинейных динамических систем.
4. Информационная безопасность.

В рамках первого направления сотрудниками кафедры созданы автоматизированные системы экологического мониторинга города Донецк (АКИАМ, www.akiam.org.ua) и Донецкой области (ОМОС, www.omos.org.ua), ведутся работы по созданию автоматизированной системы энергоменеджмента объектов бюджетной сферы города Донецк (www.donenergo.org.ua). В настоящее время кафедра КСМ обеспечивает научное сопровождение работ по разработке государственной системы экологического мониторинга Украины. Научным руководителем данных работ является проф. Аверин Г.В., ответственным исполнителем – ассистент кафедры Павлий В.А. Кафедрой разрабатываются также газоаналитические системы, модули

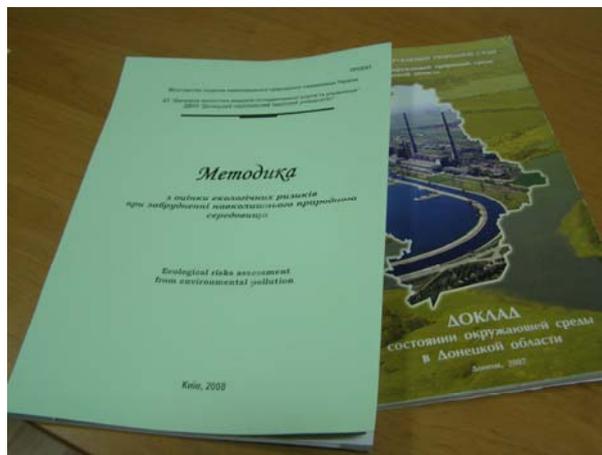


передачи данных, системы отображения информации и т.д. В развитие учебной специализации кафедры ведется освоение атмосферной моделирующей системы WRF (Weather Research & Forecasting) и формирование региональной прогностической системы на базе автоматизированных метеостанций типа Vantage Pro (руководитель – доц. Беловодский В.Н.). В 2009 году кафедрой КСМ разработан газоанализатор нового технического уровня для контроля загрязнения атмосферного воздуха диоксидом азота, формальдегидом, сероводородом, озоном и аммиаком. Газоанализатор позволяет также осуществлять контроль метеорологических параметров. Руководителем этого направления является проф. Аверин Г.В.,

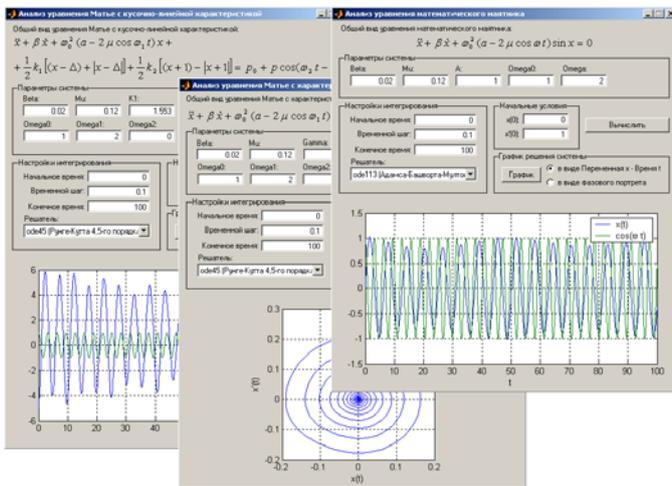


ответственным исполнителем – инж. Варзар Р.Л. В рамках второго направления кафедра ведет аналитическую деятельность, связанную с исследованием и оценкой развития эколого-экономических систем. В этой области ежегодно выпускаются аналитические и обзорные доклады, создан ряд программных продуктов и информационно-аналитических баз данных, а

также Web-ресурсов для информирования общественности (www.ukrecopass.org.ua, www.omos.org.ua, donecoportal.org.ua, www.doneco.org.ua, www.ecodon.org.ua, www.makportal.org.ua и т.д.). Кафедра участвует в разработке программ оздоровления атмосферного воздуха городов Донецкой области, проводит оценку природных и техногенных объектов городов с использованием геоинформационных систем и технологий. Важным результатом выполненной работы является подготовленный совместно с Агентством UNEP/GRID “Доклад о состоянии окружающей среды в Донецкой области” (исп. от ДонНТУ проф. Аверин Г.В., доц. Звягинцева А.В.), представленный в 2007 году в Белграде на пленарном заседании 6-ой конференции Министров окружающей среды стран Европы. В 2010 году Доклад совместно с UNEP переработан и издан на английском языке. В 2008-2009 годах выполнен ряд интересных исследований по определению перечня экологических индикаторов для оценки развития эколого-экономических систем и анализа социально-экономического развития Донецкой области и регионов Украины (руководитель – доц. Звягинцева А.В.). Совместно с



Государственной экологической академией Минприроды Украины (г. Киев) разработан проект документа национального уровня “Методика оценки экологических рисков при загрязнении окружающей природной среды”. Внедрение методики предполагается в 2011-2012 годах при участии двух Министерств – Минприроды Украины и Минздрава Украины. В рамках выполнения работ государственного уровня создана электронная версия экологического паспорта регионов Украины (www.ukrecopass.org.ua, ответственные исполнители – ассистенты Хоруженко А.С. и Павлий В.А.), а также ведется разработка алгоритмов анализа развития социально-экономических систем. Руководителями этого направления являются профессор Аверин Г.В. и доцент Звягинцева А.В. Понимая важность данного направления, коллектив кафедры уделяет внимание теоретическим аспектам данной научной проблематики, в рамках которой опубликован ряд статей, готовится к изданию монография, ведется разработка крупных информационных баз данных, а также совершенствуются методы интеллектуального анализа данных для исследования процессов развития сложных систем.

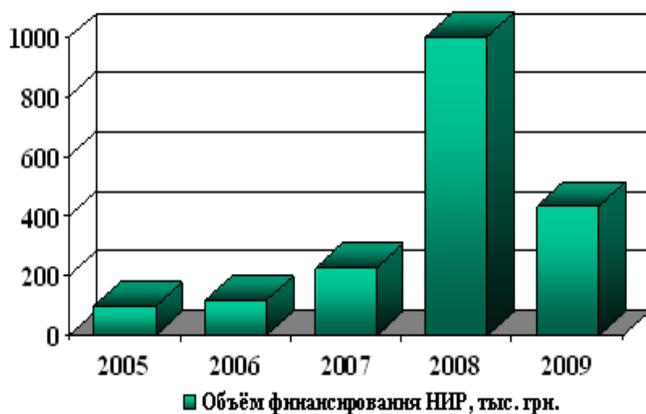


В рамках третьего направления проводится анализ отдельных классов нелинейных систем, ведется разработка инструментальных средств их исследования. Опубликован цикл работ, посвященных существованию и устойчивости стационарных движений механических систем с параметрическим возбуждением, вскрыт ряд особенностей в их поведении. Руководителем этого направления является доцент Беловодский В.Н.

В области информационной безопасности ведутся исследования, которые направлены на поиск перспективных методов защиты информационных ресурсов корпоративных сетей, ориентированных на использование в государственных системах мониторинга. Проводится анализ возможных угроз и уязвимостей этих систем, а также моделей возможных традиционных и нетрадиционных атак на проектируемые системы. Вокруг этого направления объединены магистры и молодые преподаватели кафедры. Руководителем работ является доцент Губенко Н.Е.

Последнее время на кафедре ежегодно выполняется 4–5 хозрасчетных тем, связанных с информационными технологиями в области охраны окружающей среды, энергосбережения и оценки воздействий на природную среду. За 2004-2007 годы кафедрой был выполнен объем хозрасчетной научной тематики на сумму 500 тыс. грн. В 2008 объем выполненных научных работ по 8 хозрасчетным темам достиг 900 тыс. грн., а в 2009 – 430 тыс. грн. В 2010 году объем выполненной хозтематики составил 420 тыс. грн.

Существующий объём НИОКР позволил существенно развить материально-техническую базу и вывести работу с аспирантами и магистрами на качественно новый уровень.



В настоящее время на кафедре подготовлено четверо молодых ученых, которые в 2007-2009 годах выполняли хозрасчетную тематику: доц. Звягинцева А.В. (четыре темы, объем финансирования 360 тыс. грн.), асс. Харитонов А.Ю. (2 темы – 200 тыс. грн.), асс. Павлий (1 тема – 120 тыс. грн.), асс. Хоруженко А.С. (1 тема – 80 тыс. грн.). Полученный кафедрой опыт дает возможность ставить перед аспирантами и магистрами реальные научно-технические задачи.

В 2010 году кафедрой впервые выигран международный конкурс в рамках проекта CRDF-2009 по проблемам изменения климата и энергетики. Проект “Поиск синоптических шаблонов изменчивости и изменений климата с помощью интеллектуального анализа данных и высокопроизводительных вычислений” связан с самыми современными исследованиями в области глобальной климатологии. Значительный вклад в подготовку проекта внес аспирант Родригес А.Э. Финансирование проекта ведется Фондом гражданских исследований и развития (CRDF).

Девиз кафедры – “Nominus, dum docent, discunt” (“Обучая, учимся”). Следовательно, основная задача кафедры КСМ – не только подготовка специалистов и магистров высокого качества, но и прежде всего рост профессионализма всего преподавательского состава.

С момента создания на кафедре действует аспирантура по трем специальностям, а именно: 05.13.06 “Информационные технологии”, 01.05.02 “Математическое моделирование и вычислительные методы”, 21.06.01 “Экологическая безопасность”.



Проф. Аверин Г.В. в кругу своих учеников, март 2009 г.

На декабрь 2010 года на кафедре обучалось 4 аспиранта и 3 соискателя научной степени. Основные принципы научной подготовки аспирантов – самостоятельное ведение научной тематики с конкретным практическим результатом и обеспечение высокого качества представляемых диссертационных работ.



Первая защита кандидатской диссертации по кафедре КСМ состоялась в 2006 году. Диссертацию защитила Звягинцева А.В. В 2010 году ассистент Павлий В.А. подал к рассмотрению кандидатскую диссертацию в специализированный совет. В соответствии с перспективным планом защит кандидатских диссертаций аспирантами в 2011 году предполагается защита 1 кандидатской диссертации, в 2012 – двух, в 2013–2015 – четырех.

Кафедра имеет стабильно высокий рейтинг в университете по результатам выполнения научной работы. За последние четыре года сотрудниками кафедры подготовлено и выпущено в свет 9 монографий. Еще две планируется выпустить в 2011 году. Ежегодно преподавателями публикуется от 20 до 25 статей в ведущих научных журналах, подается для регистрации 2-3 изобретения. Сотрудники кафедры принимают участие в международных выставках, а также во всеукраинских и международных конференциях.



Монографии, изданные кафедрой КСМ

Студенческая научная работа

Кафедра КСМ регулярно проводит внутрикафедральные конференции и семинары.

В исследованиях и проектных разработках активное участие принимают студенты. Начиная



Май, 2005,
I Международная научная конференция «КМІПТ»

с 2005 года, ежегодно проводится конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Компьютерный мониторинг и информационные технологии».

Студенты кафедры КСМ с момента её основания регулярно выступают с результатами своих исследований на международных и всеукраинских конференциях (Донецк, Киев, Варшава, Люблин, Севастополь, Харьков, Винница), ежегодно принимают участие в конкурсах студенческих научных работ и занимают призовые места.



Регистрация участников IV научной конференции «КМІПТ-2008», 8 корпус ДонНТУ

В 2005 году под руководством заведующего кафедры проф. Аверина Г.В. по заказу Донецкого городского совета группой студентов в составе четырёх человек был разработан сценарий и создан мультипликационный фильм «Ежик и город» длительностью около 10 минут. Этот занимательный и поучительный мультфильм был выпущен на DVD и предназначен для развития экологического сознания детей дошкольного и младшего школьного возраста. Все исполнители работы после окончания в 2006 году университета практически сразу заняли руководящие должности в ведущих IT-компаниях Донецка, Харькова и Киева.



В 2008 году магистр специальности КЭМ А. Бубличенко (руководитель доц. Беловодский В.Н.) стал первым украинским студентом, прошедшим практику в штаб-квартире фирмы Microsoft в США. В настоящее время он работает в канадском представительстве фирмы Microsoft.



Киев, КТД, май 2004. VII Международная научно-практическая конференция



Подготовка студенческой научной работы на конкурс 2009 года



Международные связи

Международная деятельность на кафедре ведется по двум направлениям: установление научных контактов с зарубежными партнерами и непрерывное образование преподавателей путем прохождения стажировок в ведущих зарубежных университетах. За последние пять лет ряд преподавателей прошли стажировку в соответствии с направлением подготовки студентов. Этим путем решается одна из основных задач высшей школы, связанная с формированием престижа преподавателя за счет совершенствования знаний предметной области. Так, проф. Аверин Г.В. повышал квалификацию в Дрезденском техническом университете (Германия, 2003 год), в Министерстве охраны окружающей среды Венгрии (2008 год, Будапешт), в университете Фуджи и Шанхайском университете (Китай, 2008 г.).

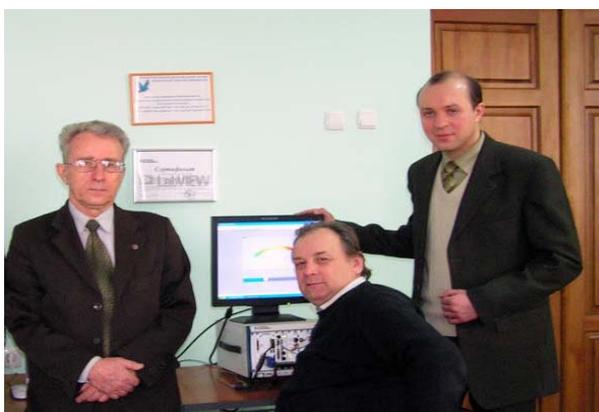
Переговоры делегации МОН Украины и представителей городских властей г. Шанхая, Китай



Обсуждение программы сотрудничества в области мониторинга окружающей среды. Венгерское отделение ЮНЭП, июнь 2008



Стажировка доц. Беловодского В.Н., Рига, сентябрь 2006 г.



На снимке – Федосов В.П., зав. каф. ПТОР (теоретических основ радиотехники), Цветков Ф. А. – администратор авторизованного учебного центра НИ (г. Таганрог), Харитонов А.Ю. (г. Донецк)

В 2006 году доцентом Беловодским В.Н. пройдена стажировка в области нелинейной динамики и технической диагностики в Институте механики Рижского технического университета. В свое время в этом институте в 1979-1982 гг. прошла его учеба в аспирантуре. На фотографии Беловодский В.Н. с коллективом лаборатории нелинейных эффектов вибрационных систем, которая возглавляется д.т.н. Семеном Цифанским.

В январе 2008 года аспирантом Харитоновым А.Ю. пройдена стажировка в Южно-русском региональном центре технологий National Instruments (г. Таганрог). В 2008 году им был успешно сдан экзамен. Харитонов А.Ю. стал первым и единственным на данный момент сертифицированным разработчиком программ на LabVIEW на территории Украины.

Кафедра имеет соглашения о научно-техническом сотрудничестве с Программой охраны окружающей природной среды ООН (UMEP), Программой ENVSEC (Окружающая среда и безопасность), Московским государственным университетом инженерной экологии (МГУИЭ) и т.д.

Перспективы развития кафедры

Будущее кафедры тесно связано с задачами, которые коллектив ставит перед собой и может решить. Перед коллективом кафедры КСМ на ближайшие пять лет стоят важные задачи. Они охватывают все сферы её деятельности.

В области совершенствования образования предстоят радикальные изменения процесса подготовки специалистов в связи с введением двухциклового обучения в формате “бакалавр-магистр”, принятием утвержденного МОН в 2010 году нового отраслевого стандарта высшего образования по направлению подготовки 6.050101 «Компьютерные науки», а также формирование молодого педагогического коллектива, способного вести учебный процесс в соответствии с современными требованиями, объединенный с научной деятельностью.

Организационная и научная работа кафедры будет направлена на лицензирование магистратуры по специальности “Информационные системы проектирования”, качественное повышение уровня магистратуры, привлечение в магистратуру иностранных студентов, расширение аспирантуры и открытие докторантуры.

В связи с утверждением в 2010 году новой образовательно-профессиональной программы (ОПП) по направлению “Компьютерные науки” ведется переработка учебных планов для студентов специальности КЭМ и специализации. По заданию Научно-методической комиссии по направлению “Компьютерные науки” МОН Украины кафедрой ведется разработка учебно-методических пособий по двум обязательным дисциплинам, вводимым новой ОПП.

Развитие материально-технической базы направлено на модернизацию двух действующих компьютерных классов, создание специализированной лаборатории мониторинга для студентов КЭМ, мультимедийной лаборатории для студентов ПКД и первой в Украине лаборатории параллельных вычислений на основе применения кластеров на видеопроцессорах.

Предполагается дальнейшее развитие образовательного процесса в рамках договора сотрудничества с «ІС-Україна», способствующего улучшению качества преподавания и организации учебного процесса на основе применения современных программных продуктов.

В свою очередь, развитие научной деятельности на кафедре предусматривает увеличение финансирования по выполняемой научной тематике до 1 млн. грн. в год, создание интернет-портала и регионального банка экологических данных.

В области международных связей основная деятельность будет направлена на выполнение совместных проектов с Агентством UNEP/GRID ООН, фондом CRDF, программой ENVSEC и реализацию договоров о сотрудничестве с университетами Китая (университет Фуджи и Шанхайский университет).

Большинство материалов данного сборника подготовлено по результатам научной работы преподавателей и аспирантов кафедры КСМ. Этот сборник является первым тематическим выпуском научных трудов факультета компьютерных наук и технологий, посвященным междисциплинарным исследованиям.

Издание сборника приурочено к 90-летию Донецкого национального технического университета – старейшего ВУЗа Донбасса.

доц. Звягинцева А.В.
асс. Хоруженко А.С.

НАУКОВИЙ ЖУРНАЛ

**Системний аналіз та інформаційні технології
у науках про природу та суспільство**

1/2011

(мовою оригіналу)

Свідоцтво про державну реєстрацію друкованого засобу масової інформації: серія КВ №17409-6179 Р від 05.01.2011.

Міністерство освіти і науки України
ДВНЗ «Донецький національний технічний університет»



ФАКУЛЬТЕТ КОМП'ЮТЕРНИХ НАУК І ТЕХНОЛОГІЙ

83001 , м. Донецьк, вул. Артема, 58, 4 корпус

Контактні телефони: +38062 301-08-04,

+38062 302-81-30, +38062 301-08-51



