

УДК 51-7

## **Задача Коши в частных производных, как математическая модель определения пороговых концентраций катионов металлов в поверхностных водах, используемых для питьевого водоснабжения**

С.В. Новикова<sup>1</sup>, Ю.А. Тунакова<sup>1</sup>, В.С. Валиев<sup>2</sup>, Г.Н. Габдрахманова<sup>1</sup>

Казанский национальный исследовательский технический университет  
им. А.Н. Туполева-КАИ<sup>1</sup>

Институт проблем экологии и недропользования Академии наук Республики  
Татарстан<sup>2</sup>

*Аннотация:* В статье рассматривается метод построения математической дифференциальной модели типа Коши для определения пороговых содержаний катионов металлов в воде в зоне водозабора с целью обеспечения безопасного уровня канцерогенного риска при потреблении питьевой воды, приготавливаемой из вод поверхностных источников водоснабжения.

*Ключевые слова:* модель Коши, загрязнение питьевой воды, риск, пороговые концентрации катионов металлов.

### **1. Введение**

Реализуемая в настоящее время в нашей стране система нормирования содержания отдельных компонентов в питьевой воде, основанная на использовании предельно допустимых концентраций (ПДК), имеет основной недостаток - неизменность для всех территорий. Наиболее перспективным для определения региональных пороговых содержаний компонентов в настоящее время является использование теории риска и современных методов математического моделирования [1-3]. Такой подход требует поэтапного решения двух основных задач:

- создания новых математических моделей, устанавливающих связь между концентрациями катионов металлов в питьевой воде и уровнем канцерогенного риска для населения или другим пороговым значением (прямые модели);
- создание моделей, позволяющих рассчитать максимальный уровень концентрации катионов для заданного порогового значения (обратные модели).

Первая из двух поставленных задач решается классическим методом регрессионного анализа на основе ряда экспериментальных наблюдений и не

представляет большой сложности. Однако вторая задача в процессе моделирования приводит к необходимости решения сложных нелинейных уравнений относительно аргумента, при этом наличие аналитического решения таких уравнений в общем случае не гарантировано [4].

Выходом из данной ситуации может служить преобразование нелинейных уравнений в многомерную оптимизационную задачу минимизации суммы квадратичных форм, которая, в свою очередь, будет сведена к решению дифференциальных уравнений в частных производных с заданными начальными условиями – задаче Коши.

## 2. Материалы и методы

Решение первой поставленной задачи построения моделей зависимости уровня риска населению от концентрации катионов металлов в воде водозабора получено на основе кортежей экспериментальных измерений содержания катионов металлов в 12 точках в зоне водозабора «Волжский», проводимого в рамках специального мониторингового исследования, и результатов определения концентраций катионов металлов в пробах воды в конечной точке потребления, отобранных в зонах исследования, питающихся водой из данного водозабора.

На основе имеющихся кортежей было построено 5 регрессионных нелинейных парных моделей, связывающих между собой концентрации катионов металлов в воде водозабора и в питьевой водопроводной воде, не оказывающих канцерогенный эффект (железо, медь и цинк), и концентрации катионов хрома и свинца, имеющих канцерогенный потенциал. Данные модели не являются предметом настоящего исследования, и способы их построения и проверки адекватности были описаны в работах [5-6]. Приведем здесь лишь результаты моделирования:

1. Модель для катионов хрома (VI):

$$Риск_{Cr} = 0,0000552 + \frac{-0,0000581}{1 + \exp\left(\frac{(Cr_{вод} - 0,01991)}{0,01179}\right)} \quad (1)$$

$Риск_{Cr}$ - уровень канцерогенного риска в отношении катионов хрома, рассчитанный исходя из концентрации катионов хрома в пробах питьевой воды;  $Cr_{вод}$  – содержание катионов хрома в поверхностной воде, в зоне водозабора «Волжский».

2. Модель для катионов свинца (II):

$$Риск_{Pb} = 0,33188 * Pb_{вод}^3 - 0,03161 * Pb_{вод}^2 + 0,001152 * Pb_{вод} + 5,26E - 06 \quad (2)$$

Здесь  $Риск_{Pb}$ - уровень канцерогенного риска в отношении катионов свинца, рассчитанный исходя из концентрации катионов свинца в питьевой водопроводной воде;  $Pb_{вод}$  – концентрация катионов свинца в поверхностной воде в зоне водозабора.

3. Модель для катионов железа (II):

$$Fe_{кв} = 0,106 - \frac{82,206}{1 + \exp\left(\frac{(Fe_{вод} + 5,60324)}{0,70613}\right)} \quad (3)$$

$Fe_{кв}$ - концентрация катионов железа в питьевой воде;  $Fe_{вод}$  – содержание железа в поверхностной воде в зоне водозабора.

4. Модель для катионов меди (II):

$$Cu_{кв} = 0,00231 - \frac{0,00074}{1 + \exp\left(\frac{(Cu_{вод} - 0,07054)}{0,0123}\right)} \quad (4)$$

Здесь  $Cu_{кв}$ - концентрация катионов меди в питьевой воде;  $Cu_{вод}$  – концентрация катионов меди в поверхностной воде в зоне водозабора.

5. Модель для катионов цинка (II):

$$Zn_{кв} = 0,0352 - \frac{0,0216}{1 + \exp\left(\frac{(Zn_{вод} - 0,04627)}{0,02424}\right)} \quad (5)$$

$Zn_{кв}$ - концентрация катионов цинка в питьевой водопроводной воде, в конечной точке потребления;  $Zn_{вод}$  – концентрация катионов цинка в воде, в зоне водозабора.

Для решения основной задачи, а именно определения максимальных концентраций катионов металлов в воде из расчета непревышения приемлемого уровня риска для здоровья населения, были приняты следующие положения:

- в качестве приемлемых (пороговых) концентраций катионов металлов в питьевой водопроводной воде были приняты значения нижнего квартиля ранжированного ряда значений:
  - для катионов железа - 0,087 мг/л;
  - для катионов меди – 0,002 мг/л;
  - для катионов цинка - 0,019 мг/л;
- в качестве приемлемых уровней канцерогенных рисков были приняты рекомендации ВОЗ:
  - $1 \times 10^{-5}$  для катионов хрома и свинца.

Таким образом, были сформированы 5 нелинейных уравнения относительно содержания катионов металлов в воде водозабора:

$$0,00001 = 0,0000552 + \frac{-0,0000581}{1 + \exp\left(\frac{(Cr_{вод} - 0,01991)}{0,01179}\right)} \quad (6)$$

$$0,000001 = 0,33188 * Pb_{вод}^3 - 0,03161 * Pb_{вод}^2 + 0,001152 * Pb_{вод} + 5,26E-06 \quad (7)$$

$$0,087 = 0,106 - \frac{82,206}{1 + \exp\left(\frac{(\text{Fe}_{\text{вод}} + 5,60324)}{0,70613}\right)} \quad (8)$$

$$0,002 = 0,00231 - \frac{0,00074}{1 + \exp\left(\frac{(\text{Cu}_{\text{вод}} - 0,07054)}{0,0123}\right)} \quad (9)$$

$$0,019 = 0,0352 - \frac{0,0216}{1 + \exp\left(\frac{(\text{Zn}_{\text{вод}} - 0,04627)}{0,02424}\right)} \quad (10)$$

Данные уравнения относятся к классу так называемых обратных задач [6], и могут быть преобразованы к многомерной оптимизационной задаче следующего вида:

$$\begin{aligned} F(Ir) = & \left( 0,0000452 - \frac{0,0000581}{1 + \exp\left(\frac{(\text{Cr}_{\text{вод}} - 0,01991)}{0,01179}\right)} \right)^2 + \\ & + \left( 0,33188 * \text{Pb}_{\text{вод}}^3 - 0,03161 * \text{Pb}_{\text{вод}}^2 + 0,001152 * \text{Pb}_{\text{вод}} - 0,000005 \right)^2 + \\ & + \left( 0,019 - \frac{82,206}{1 + \exp\left(\frac{(\text{Fe}_{\text{вод}} + 5,60324)}{0,70613}\right)} \right)^2 + \left( 0,00031 - \frac{0,00074}{1 + \exp\left(\frac{(\text{Cu}_{\text{вод}} - 0,07054)}{0,0123}\right)} \right)^2 + \\ & + \left( 0,0162 - \frac{0,0216}{1 + \exp\left(\frac{(\text{Zn}_{\text{вод}} - 0,04627)}{0,02424}\right)} \right)^2 \Rightarrow_{Ir} \min \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь  $Ir = (\text{Cr}_{\text{вод}}, \text{Pb}_{\text{вод}}, \text{Fe}_{\text{вод}}, \text{Cu}_{\text{вод}}, \text{Zn}_{\text{вод}})$  – вектор искомых концентраций катионов металлов в воде водозабора.

Задача (11) может быть представлена как система дифференциальных уравнений в частных производных:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial F(Ir)}{\partial Cr_{вод}} &= 0 \\ \frac{\partial F(Ir)}{\partial Pb_{вод}} &= 0 \\ \frac{\partial F(Ir)}{\partial Fe_{вод}} &= 0 \\ \frac{\partial F(Ir)}{\partial Cu_{вод}} &= 0 \\ \frac{\partial F(Ir)}{\partial Zn_{вод}} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

Для обеспечения единственности решения системы (12) в качестве начальных условий были добавлены решения прямых задач (1)-(5) для минимальных измеренных значений аргументов:

- $Cr_{вод}=0,0006$ ;
- $Pb_{вод}= 0,037$ ;
- $Fe_{вод}=0,016$ ;
- $Cu_{вод}=0,0007$ ;
- $Zn_{вод}=0$ .

В результате была получена начальная точка для поиска решения системы (12):

$$F(0,0006; 0,037; 0,016; 0,0007; 0)= 0,000103 \quad (13)$$

Таким образом, задача Коши вида (12)-(13), где функция F задается выражением (11), представляет собой модель для расчета безопасных с точки зрения риска для здоровья населения концентраций катионов металлов в воде водозабора.

### 3. Результаты и выводы

В результате решения задачи (12)-(13) были получены следующие значения максимально допустимых концентраций катионов металлов в воде водозабора, гарантирующие безопасность для населения, потребляющего питьевую воду, приготавливаемую из его поверхностных вод:

- $Cr_{вод}^*=0,0051$  мг/л
- $Pb_{вод}^*=0,005$  мг/л
- $Fe_{вод}^*=0,31$  мг/л
- $Cu_{вод}^*=0,0745$  мг/л
- $Zn_{вод}^*=0,019$  мг/л

При этом точное значение достигаемого в питьевой воде пороговое значение составляет:

- $Риск_{Cr}=9,99E-06$

- $R_{искрб} = 1,0266E-05$
- $F_{е_{кв}} = 0,087$  мг/л
- $C_{и_{кв}} = 0,0019$  мг/л
- $Z_{п_{кв}} = 0,0187$  мг/л

Таким образом, применение для решения проблемы нормирования катионов металлов в воде водозабора при помощи модели типа Коши (12)-(13) является эффективным и целесообразным. Полученные практические результаты расчетов могут использоваться в качестве основания для принятия управленческих решений по обеспечению требуемого качества поверхностных вод, поставляемых для приготовления вод питьевого качества.

## Литература

1. Тунакова Ю.А., Новикова С.В., Галимова А.Р. Способы оценки воздействия потребляемых питьевых вод на здоровье детского населения и обоснование способов повышения их качества // *Известия Самарского научного центра Российской академии наук*. 2016. Т. 18. № 5 (3). С. 500-504.
2. Тунакова Ю.А., Файзуллин Р.И., Валиев В.С., Галимова А.Р. Оценка риска здоровью детского населения при потреблении водопроводной воды с учетом ее вторичного загрязнения // *Гигиена и санитария*, 2015. № 8 (8-15). С. 72-76.
3. Тунакова Ю.А., Файзуллин Р.И., Валиев В.С. Расчет вероятности поступления металлов в организм с потребляемой питьевой водой // *Гигиена и санитария*, № 5 (5-15). 2015. С. 62-65.
4. Kostin V.A., Valitova N.L. Coefficients of equilibrium equations in solving a problem of reconstructing deformation curves for slightly conical thin-walled structures // *Russian Aeronautics*. 2007. Т. 50. № 3. С. 243-247.
5. Тунакова Ю.А., Новикова С.В., Файзуллин Р.И., Габдрахманова Г.Н., Кузнецова О.Н. Определение безопасных для человека концентраций катионов металлов в поверхностных источниках питьевого водоснабжения на примере г. Казани // *Вестник Казанского технологического университета*. 2017. Т. 20, № 8. С. 115-120.
6. Тунакова Ю.А., Шагидуллина Р.А., Новикова С.В., Валиев В.С. Методология определения нормативов качества для приоритетных загрязняющих веществ в различных средах // *Безопасность жизнедеятельности*. 2014. № 7. С. 26-29.
7. Костин В.А., Снегуренко А.П. Теория и практика решения обратных задач прочности летательных аппаратов. Учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности 130100 "Самолето- и вертолетостроение"; Министерство образования и науки Российской Федерации, Казанский государственный технический университет им. А. Н. Туполева. Казань, 2004. 365 с.

MSC 35Q92

## **The Cauchy problem in partial derivatives, as a mathematical model for determining threshold concentrations of metal cations in surface waters for drinking water supply**

S.V. Novikova<sup>1</sup>, Yu.A. Tunakova<sup>1</sup>, V.S. Valiev<sup>2</sup>, G.N. Gabdrahmanova<sup>1</sup>

Kazan National Research Technical University  
named after A. N. Tupolev - KAI<sup>1</sup>

Institute of Problems of Ecology and Subsoil Resources of the  
Academy of Sciences of Tatarstan<sup>2</sup>

*Abstract:* The method of constructing a mathematical differential model of Cauchy type for determining the threshold contents of metal cations in a water intake is considered. The goal is to ensure a safe level of cancerogenic risk when drinking water is consumed, which is prepared from surface water sources.

*Keywords:* Cauchy model, drinking water pollution, risk, threshold concentrations of metal cations.

### **References**

1. Tunakova Yu.A., Novikova S.V., Galimova A.R. Sposoby otsenki vozdeystviya potrebyayemykh pit'yevykh vod na zdorov'ye detskogo naseleniya i obosnovaniye sposobov povysheniya ikh kachestva [Methods for assessing the impact of drinking water on children's health and justifying ways to improve their quality] // Izvestiya Samarskogo nauchnogo tsentra Rossiyskoy akademii nauk [Proceedings of the Samara Scientific Center of the Russian Academy of Sciences], Vol. 18, No. 5 (3), 2016. P. 500-504
2. Tunakova Yu.A., Fayzullin R.I., Valiev V.S., Galimova A.R. Otsenka riska zdorov'yu detskogo naseleniya pri potreblenii vodoprovodnoy vody s uchetom yeye vtorichnogo zagryazneniya [Health risk assessment of the child population in the consumption of tap water its secondary pollution]// Gigiena i sanitariya [Hygiene and sanitation]. 2015. Issue 8 (8-15). P. 72-76.
3. Tunakova Yu.A., Fayzullin R.I., Valiev V.S. Raschet veroyatnosti postupleniya metallov v organizm s potrebyayemoy pit'yevoy vodoy [Calculation of the probability of metals input into an organism with drinking potable waters] // Gigiena i sanitariya [Hygiene and sanitation], 2015. Issue 5 (5-15). P. 62- 65.

4. Kostin V.A., Valitova N.L. Coefficients of equilibrium equations in solving a problem of reconstructing deformation curves for slightly conical thin-walled structures // Russian Aeronautics. 2007. Vol. 50. No. 3. P. 243-247.
5. Tunakova Yu.A., Novikova S.V., Faizullin R.I., Gabdrahmanova G.N., Kuznecova O.N. Opredeleniye bezopasnykh dlya cheloveka kontsentratsiy kationov metallov v poverkhnostnykh istochnikakh pit'yevogo vodosnabzheniya na primere g.Kazani [Determination of metal cations safe concentrations for people in surface sources of drinking water supply using the example of Kazan]// Vestnik Kazanskogo tekhnologicheskogo universiteta [Herald of Kazan Technological University]. 2017. V.20, No. 8. P.115-120.
6. Tunakova Yu.A., Shagidullina R.A., Novikova S.V., Valiev V.S. Metodologiya opredeleniya normativov kachestva dlya prioritnykh zagryaznyayushchikh veshchestv v razlichnykh sredakh [Methodology of Definition Specifications of Quality for Priority Polluting Substances in Various Environments] // Bezopasnost' zhiznedeyatel'nosti [Life Safety]. 2014. Issue 7. P. 26-29.
7. Kostin V.A., Snegurenko A.P. Teoriya i praktika resheniya obratnykh zadach prochnosti letatel'nykh apparatov [Theory and practice for solving the inverse problems of the strength of aircraft]: The textbook for university students studying in specialty 130100 "Airplane and helicopter construction". Kazan, Publishing of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation, Kazan State Technical University named after A.N. Tupolev, 2004. 365 p.