

Лекція 1. Особливості моделювання екологічних процесів

1. Задачі навчальної дисципліни та зв'язок з іншими дисциплінами.
2. Понятійний апарат.
3. Особливості моделювання в екології.

1. Задачі навчальної дисципліни та зв'язок з іншими дисциплінами.

Нині, коли на планеті Земля під впливом людини відбулися помітні зміни як живої, так і неживої природи, дедалі більшого значення набуває гармонійна взаємодія суспільства і природного довкілля, оскільки людина отримує від природи все необхідне для життя: енергію, продукти харчування, матеріали та черпає в ній емоційну й естетичну наснагу. Тому вкрай необхідна не лише чітка стратегія охорони природного середовища і посилення контролю за природокористуванням, а й розробка ефективних методів попередження негативного впливу господарської діяльності людини на навколишнє середовище з метою:

- а) раціонального використання природних ресурсів;
- б) профілактики забруднення довкілля промисловими відходами та транспортом;
- в) запобігання знищенню природних утворень;
- г) збереження генофонду рослинного і тваринного світів.

Реалізація цих завдань неможлива без адекватного моделювання і прогнозування стану довкілля.

Основною метою дисципліни «Моделювання процесів оточуючого середовища» є навчання майбутніх спеціалістів-екологів самостійного розроблення математичних моделей, які адекватно описують поточні та прогнозовані стани навколишнього середовища, що виникають за постійної зміни зовнішніх і внутрішніх умов.

Ця дисципліна вивчає, а майбутній фахівець повинен уміти, знати і визначити:

- загальні принципи і можливості моделювання явищ природи;
- використання математичних моделей для ідентифікації об'єктів під час розробки систем автоматичного керування в екології;
- методи розробки адекватного математичного опису екологічних об'єктів дослідження;
- технології розв'язання конкретних екологічних задач за допомогою ЕОМ;
- визначення оптимальних характеристик функціонування об'єктів екологічних досліджень.

Дисципліна «Моделювання процесів оточуючого середовища» тісно пов'язана з такими предметами, як «Загальна екологія», «Вища математика», «Інформатика», «Фізика», «Хімія», «Біологія» та ін.; знання з цієї дисципліни використовуються в курсах «Інформаційні системи в екології», у дипломному проектуванні та під час виконання кваліфікаційних магістерських робіт.

2. Понятійний апарат.

Моделювання та прогнозування стану довкілля являє собою систему понять і методів, націлених на відтворення, аналіз та прогноз розвитку різноманітних природних та техногенних екологічних систем на різних рівнях їх ієрархічної організації – від окремої екосистеми до національних і глобальних екосистем планети Земля. Кількісно обґрунтовуючи методи підвищення екологічної безпеки акваторій і територій та мінімізуючи екологічні ризики, моделювання та прогнозування стану довкілля дозволяє розробляти стратегії підвищення якості навколишнього середовища з урахуванням інтересів теперішніх та майбутніх поколінь, підтримуючи біорізноманітність та багатство природних ресурсів.

Методи моделювання та прогнозування стану довкілля включають постановку задачі згідно з обраною метою, ідентифікацію досліджуваних структур, вибір оптимального методу моделювання, побудову моделі і доведення її адекватності досліджуваному процесу, варіантну реалізацію моделювання, прогноз розвитку подій та контроль за здобутими результатами.

Ефективне управління екологічними ризиками та загрозами неможливе без застосування відповідної моделі досліджуваного процесу, що потребує глибоких знань та сучасних підходів до процесу моделювання стану довкілля, а також володіння основними методами моделювання в екології.

Системний підхід до розгляду екологічних явищ і проблем має бути основою діяльності сучасного еколога, адже лише такий підхід дає можливість робити життєздатні прогнози та рекомендації щодо оптимізації довкілля. У першому розділі також розглядаються основні поняття моделювання і прогнозування стану довкілля, особливості моделювання екологічних явищ та процесів, класифікація моделей та методів прогнозування в екології, що дозволить студентам систематизувати базові знання, здобуті в процесі вивчення суміжних дисциплін.

Далі розглядаються питання моделювання розвитку біологічних складових довкілля, що здебільшого стосуються екології популяцій. Тут увага приділяється двом класам методів моделювання: моделювання за допомогою диференціальних рівнянь та методам, що базуються на екстремальних принципах в біології. Зокрема, у другому розділі вивчаються загальні диференціальні рівняння в біології, які включають класичні рівняння чисельності популяцій, динаміку біоценозу, моделі просторово-неоднорідних ценозів, диференціальні рівняння в теорії епідемій, диференціальні рівняння мірмекології та біохімічних процесів. Далі вивчаються структурні рівняння теорії біологічних спільнот, де розглядаються питання пристосовності, рівноваги і росту в нейтральному і лімітуючому середовищі, парні взаємодії та їх симетрія, пошук рівноважних станів та структура домінування. Особливу увагу приділено критичним точкам біологічних систем як основі для визначення параметрів екологічних ризиків. Розглянуто методи моделювання, що бурхливо розвиваються в останні роки. Це оптимізаційні методи розвитку популяцій, де розглядаються такі цікаві з прикладної точки зору питання, як теорема про максимальний урожай, стійкість спільнот тощо. Застосування варіаційних методів спрямовано на оптимізацію станів екосистем, моделі клітинних автоматів розглянуто на прикладі моделювання динаміки

рослинного покриву землі. Моделі, що ґрунтуються на нейронних мережах, дозволяють ураховувати складну структуру зв'язків між елементами екосистем. У посібнику розглянуто приклад застосування нейронних мереж для моделювання евтрофікації. Вплив окремих організмів на екосистему розглянуто на прикладі так званих «*організмених моделей*».

Свідомість людини наділена обмеженою спроможністю сприймати всесвіт у всьому різноманітті його явищ і зв'язків, саме тому умовний розподіл його на системи забезпечує можливість аналізу процесів, що відбуваються у ньому взагалі і, зокрема, у навколишньому середовищі, що оточує людину. Звичайно під системою розуміють сукупність одного а бо декількох елементів середовища, що взаємодіють між собою та з довкіллям, від якого система відокремлюється фізичними або умовними границями.

Взаємодія елементів системи між собою та з довкіллям відбувається за рахунок силової дії, обміну речовинами, енергією або інформацією.

3. Особливості моделювання в екології

Моделювання є одним з головних засобів пізнання в екології. На цей час тут широко використовуються такі методи, як:

- натурно-експериментальне моделювання;
 - математичне (у тому числі числове) моделювання;
- системне моделювання.

Першими математичними моделями були роботи Д. Вольтерра й Л. Лоткі: математична теорія динаміки популяцій, модель "хижак — жертва" (20-і — 30-і роки ХХ ст.). У 50-і роки Е. Кернер створює так звану "статистичну механіку біологічних асамблей" (для складних біоценозів з великим числом взаємодіючих видів). Надалі у зв'язку з великими труднощами математизації складних біологічних і екологічних об'єктів були взяті на озброєння методи кібернетики (системне моделювання).

Основні фактори, що враховуються при екологічному моделюванні.

Основні фактори, що враховуються при моделюванні екологічних систем, можна підрозділити на такі дві групи:

- а) фактори зовнішнього впливу:
- кліматичні зміни (температура, опади тощо);
 - антропогенне втручання і таке ін.;
- б) внутрішні фактори:
- конкуренція;
 - паразитизм;
 - хижацтво;
 - захворюваність та її поширення;
 - трофічні ланцюги.

При ньому потрібно враховувати, що вплив таких факторів характеризується наявністю:

- ефекту запізнення;
- кумулятивного ефекту;
- граничних ефектів.

Як правило, математичний опис впливу факторів зв'язаний і великою кількістю взаємозалежних змінних, зв'язаних між собою нелінійними співвідношеннями, що сильно ускладнює задачу і вимагає застосування ЕОМ.

Принципи екологічного моделювання.

При побудові моделей екологічних процесів застосовують наступні основні принципи.

1) Принцип системності.

Внаслідок пересиченості екосистем зв'язками екологічні об'єкти являють собою єдину систему. З цієї причини в екології виявилось необхідним злиття методів системного аналізу і математичного моделювання. Це призвело до створення інтегрального методу системного моделювання - вищого етапу в розвитку екологічного моделювання.

Принцип системності полягає в усвідомленні цілісності об'єктів світу, їхньої стійкості і взаємозв'язку зі зовнішнім світом тощо; інший аспект цього принципу — динамічна багатогранність, єдність якості її кількості, теорії та практики.

2) Принцип єдності структурності та ієрархічності.

Фундаментальна риса екосистем — наявність у них складних ієрархічних структур. Звідси випливає вимога єдності структурності й ієрархічності системних екологічних моделей. Відповідно виникає проблема структурування моделі, тобто виділення істотних підсистем і елементів із сукупності всіх зв'язків і компонентів.

Звичайно систему організують найбільш залежні одне від одного елементи (підсистеми). Інші впливають на поведінку системи слабо, а через їхню велику кількість — не узгоджено; отже їх можна розглядати як інтегровані зовнішні чи внутрішні фактори впливу.

3) Принцип багатомодельного опису.

Через динамізм і складність екологічних об'єктів, що виникають у результаті множинності мети антропогенного втручання, на сьогодні немає можливості побудови єдиної теорії сонціоекосистеми в класичному розумінні, тобто як дедуктивної моделі, з якої можна вивести всі можливі наслідки. Тому наука йде по шляху створення множинних взаємодоповнюючих моделей.

4) Принцип єдності формалізованою і неформалізованого опису.

Досвід перших глобальних моделей розвитку світової соціоекосистеми, побудованих за замовленням Римського клубу, показав: єдиного формалізованого (математичного) опису недостатньо для адекватного моделювання соціоекосистеми. Для цього необхідно враховувати неформальні факторії і доповнювати формалізований опис (з позицій Історичного, психологічного та ні. підходів) неформалізованим описом.

5) Принцип визнання фундаментальності екологічних процесів.

Екологічні процеси неможливо звести до простої сукупності біологічних, фізичних, економічних процесів, оскільки всі вони тісно переплетені між собою. У цьому переплетенні виникають нові, екологічні закономірності. Звідси випливає самостійна значимість екологічних цінностей.

6) Принцип єдності теорії та практики.

Благополуччя соціоекосистеми, частиною якої є людина, має для неї найважливіше значення. Тому екологія є не тільки фундаментальною, але і прикладною наукою, що поєднує пізнання екологічних закономірностей із практичним їхнім застосуванням у повсякденній діяльності людини. Ця єдність виражається у вигляді принципу: "Не тільки дивися і думай — роби".

Значення моделювання в екології. За допомогою моделювання одержують можливість оцінювання потенційних наслідків застосування різних стратегій оперативного керування впливу на екосистему, користування природними ресурсами (біотичними й абіотичними), оптимізації екосистем. Моделювання дозволяє глибоко проникнути в сутність явищ, зрозуміти їхню справжню природу.

ЗАВДАННЯ: опрацювати питання для самоперевірки та законспектувати їх у зошит.

Питання для самоперевірки

1. Які задачі ставить перед собою дисципліна «Моделювання процесів оточуючого середовища»?
2. Назвіть зв'язки з іншими дисциплінами.
3. Охарактеризуйте понятійний апарат.
4. Назвіть основні фактори, що враховуються при екологічному моделюванні.
5. Яких принципів дотримуються при екологічному моделюванні?

Лекція 2. Поширення забруднень у навколишньому середовищі

1. Молекулярна дифузія в атмосфері та у водному середовищі
2. Турбулентний перенос забруднювача в атмосфері
3. Дифузія в ґрунті і донних відкладах

1. Молекулярна дифузія в атмосфері та у водному середовищі

Вплив забруднюючих речовин на стан довкілля прямо залежить від їх фізичних і хімічних властивостей та властивостей продуктів їх розпаду (деструкції), а також концентрації тих та інших. Найважливішим параметром, що визначає масштаб поширення забруднення в атмосфері, є тривалість його існування в атмосфері. Виходячи з цього, викиди забруднюючих речовин (або самі забруднюючі речовини) поділяють на такі три типи.

А. Викиди, які викликають забруднення у глобальному масштабі. Сюди відносять забруднюючі речовини з великим терміном існування в атмосфері (вуглекислий газ, фреони, радіонукліди), які здатні поширюватися в навколишньому середовищі незалежно від місця їх викиду.

В. Викиди, які викликають забруднення в регіональному масштабі. Сюди відносять викиди речовин з обмеженим терміном існування в атмосфері (оксиди сірки й азоту, пестициди, важкі метали), які здатні викликати забруднення великого регіону.

С. Викиди, які викликають забруднення у локальному масштабі. Сюди відносять викиди речовин з малим терміном існування в атмосфері — грубодисперсні аерозолі, сірководень, тощо.

Розглянемо окремо механізм розсіювання забруднювача у деяких типових різновидах навколишнього середовища.

Розсіювання речовин в атмосфері та водному середовищі за умови відсутності перемішування фаз внаслідок дії вітру, водних течій, тощо проходить за рахунок явища молекулярної дифузії.

Молекулярна дифузія — це самочинний процес переносу речовин внаслідок хаотичного руху атомів, молекул, іонів, колоїдних частинок у газах, рідинах і твердих речовинах у напрямку зменшення концентрації.

Точні розрахунки переносу забруднювачів від точки викиду можна провести, розв'язавши відповідні рівняння, які можуть бути розв'язані лише при певних граничних умовах.

Якщо джерело викиду забруднювача діє постійно, концентрація забруднювача у викиді стала і дорівнює C_0 , а концентрація C у початковий момент у будь-якій точці, крім точки викиду, дорівнює нулю, то тоді граничні та початкові умови мають такий вигляд:

- 1) $C = 0$ при $t = 0$;
- 2) $C = C_0 = \text{const}$ при $x = 0$ і не залежить від часу.

2. Турбулентний перенос забруднювача в атмосфері

Нерівномірне нагріванням атмосфери викликає її внутрішній рух: тепле і вологе повітря, яке легше холодного і сухого, піднімається вгору, а на його місце надходить холодне повітря.

Вертикально спрямовані потоки нерівномірно нагрітої атмосфери називається конвекцією повітря.

Горизонтально спрямовані потоки називаються адвекцією. Розрізняють адвекцію тепла (потік більш теплого повітря) і адвекцію холоду (потік більш холодного повітря, ніж те, що витісняється).

Конвекція й адвекція разом викликають циркуляцію атмосфери.

Внаслідок обертання Землі меридіанально направлений рух атмосфери викликає появу гігантських вихорів — циклонів і антициклонів. Однак завихрення в атмосфері виникають не тільки з цієї причини, але й унаслідок внутрішнього тертя — в'язкості повітря. Чим вища швидкість руху повітря, тим вища інтенсивність вихорів (так виникають смерчі, торнадо). Такий вихровий рух повітря називається турбулентним.

Турбулентність викликає інтенсивне перемішування повітря, тому, якщо повітря містить забруднюючі речовини, то вони теж перемішуються. Це явище називають турбулентною дифузією. Унаслідок турбулентної дифузії забруднення переносяться не тільки за вітром, але й убік від напрямку вітру (це можна легко спостерігати на прикладі розширення димного сліду з труби).

3. Дифузія в ґрунті та донних відкладах

Ґрунт та донні осади є твердими фазами, тому перемішування у них практично відсутнє. Отже, розсіювання в цих середовищах повинно описуватися рівнянням з використанням молекулярних коефіцієнтів дифузії.

Однак часто в реальній ситуації ґрунти (а донні осади — ніколи) не є істинними твердими фазами, оскільки вони містять воду. Ця вода заповнює пори і тріщини твердих фаз, і в цій рідкій складовій ґрунтів та донних осадів дифузія забруднювачів протікає зі швидкостями, які визначаються коефіцієнтами дифузії у рідинах, які на багато порядків більші, ніж коефіцієнти дифузії у твердій фазі. Тому коефіцієнт дифузії забруднювача, який не реагує з твердою основою в осаді або ґрунті, визначається за іншою формулою.

4. Міжфазний перенос забруднювачів

Водні об'єкти займають величезну площу поверхні Землі, тому перенос забруднювачів із атмосфери у водне середовище і у зворотному напрямку має велике значення для розподілення забруднювачів у навколишньому середовищі. Це явище називають масообміном.

Забруднювач, який переноситься із товщі атмосфери, спочатку дифундує в газову фазу біля поверхні поділу газ-рідина, а потім дифундує в товщу водного середовища. Модель, яка описує цей процес, називають моделлю

нерухомої плівки. Згідно із цією моделлю обидві фази добре перемішуються за рахунок турбулентної дифузії, але з обох сторін поверхні поділу існує тонка плівка, перенос через яку здійснюється тільки за рахунок молекулярної дифузії. Загальна швидкість переносу забруднювача із однієї фази в іншу визначається швидкістю переносу через цю плівку.

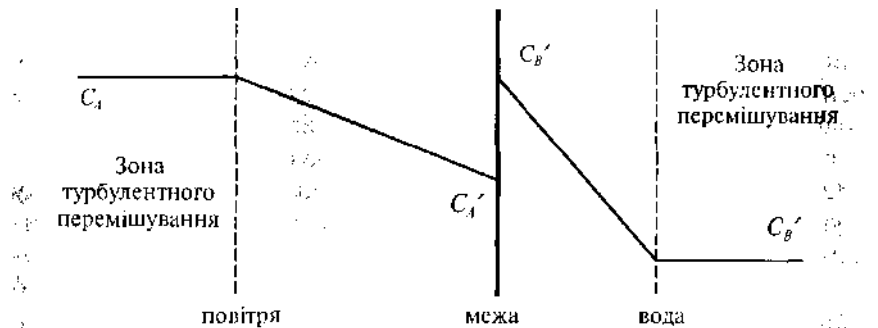


Рис.1. Розподіл концентрації на межі двох середовищ у моделі нерухомої плівки

Запитання для самоперевірки:

1. Яке рівняння застосовують для моделювання переносу забруднюючих речовин у атмосфері?
2. Що таке турбулентна дифузія?
3. Для чого потрібно спрощувати рівняння переносу забруднюючих речовин?
4. Як врахувати ефект вітру при побудові моделі переносу забруднюючих речовин в атмосфері?

Лекція 3. Моделювання гідроекологічних процесів

1. Особливості водних екосистем. Основні завдання гідроекології
2. Математичні моделі водного і гідрохімічного режимів:
 - 2.1. Концептуальна модель водного і гідрохімічного режимів
 - 2.2. Побудова просторової і багатокамерної моделей

1. Особливості водних екосистем. Основні завдання гідроекології

На перших етапах розвитку гідробіології дослідники переважно вивчали структурні і функціональні характеристики окремих організмів (особин) різних видів гідробіонтів, а тепер вони зосередилися на популяційних та біоценологічних дослідженнях, що розглядають надорганізменні форми існування життя з їх структурними і функціональними особливостями (популяції біоценози тощо). На перший план висуваються гідроекологічні проблеми, які не можна розв'язати, оперуючи тільки знаннями про розвиток окремих організмів рослинного і тваринного світу. Оптимальним є визначення змісту сучасної екології, а отже, і гідроекології з огляду на концепції ієрархії рівнів біологічної організації (структури), які формують своєрідний «біологічний спектр»: угруповання, популяція, орган, клітина і ген — основні рівні організації життя на Землі.

Теоретично цей спектр рівнів можна продовжити до нескінченності в обидві сторони. На кожному рівні внаслідок взаємодії з навколишнім середовищем виникають функціональні системи — упорядковані взаємодіючі та взаємозалежні компоненти, які утворюють єдине ціле. Системи, що містять живі компоненти (біосистеми), також мають відповідні ієрархічні рівні. Екологія (гідроекологія) охоплює насамперед, системи, розміщені в тій частині спектра рівнів, яка вища за рівень організму. Важливим наслідком такої ієрархічної організації є те, що в міру об'єднання елементів (компонентів) біосистеми в узагальнені функціональні одиниці у цих нових одиницях (системах) виникають властивості, яких не було в елементах попереднього рівня. Такі якісно нові (емерджентні) властивості екологічного рівня або екологічної одиниці не можна передбачити, виходячи тільки з властивостей компонентів, що формують певний екологічний рівень або екологічну одиницю. Саме такі емерджентні властивості гідроекосистем слід враховувати при математичному моделюванні гідроекологічних процесів (процесів на надорганізменному рівні).

Вивчення і прогнозування стану водних екосистем (рис. 1) є одним з найважливіших завдань сучасних гідроекологічних досліджень, особливо у зв'язку зі значним впливом господарської діяльності людей на навколишнє природне середовище, що змінює стан ландшафтів, забруднює атмосферу і гідросферу, порушує екологічну рівновагу природних систем.



Рис. 1. Фактори впливу на стан водних екосистем

Управління живою природою передбачає пізнання закономірностей функціонування і розвитку надорганізмних систем (популяцій, угруповань, біоценозів, екосистем), законів розвитку популяцій, угруповань, біоценозів, екосистем і біосфери в умовах впливу різноманітних антропогенних і техногенних факторів, що неможливо без кількісного аналізу, кількісних оцінок, методів математичного та імітаційного моделювання. Без цього, а також без прогнозування наслідків впливу на екосистеми і біоценози різноманітних факторів неможливо розв'язати основну проблему сучасної гідроекології: знайти ті форми взаємовідносин між людьми і природою, за яких користь від водних об'єктів була б найбільшою, а шкода, що завдається водним екосистемам, — найменшою, а в ідеалі — відсутньою.

Основні завдання гідроекології

У практиці моделювання основних гідроекологічних процесів і явищ перед дослідниками постають практичні завдання, особливо важливими є ті, що пов'язані з оцінюванням та прогнозуванням якості природних вод і стану водних екосистем. Для їх розв'язання використовують:

— модель водного режиму ріки, водосховища, озера або іншого водного об'єкта з урахуванням їх водності, водообміну та водоспоживання на окремих ділянках водоймища, величини підземного стоку, випаровування з поверхні водного дзеркала;

— модель водно-сольового режиму, що враховує водність, водообмін і водоспоживання водного об'єкта, а також надходження солей зі стічними водами та підземними мінералізованими водами;

— модель розповсюдження та накопичення різних токсичних і радіоактивних речовин за різними компонентами водної екосистеми (вода, дно, біота) з урахуванням процесів фізичної, хімічної та біологічної трансформації цих забруднювачів;

- модель динаміки розчинених у воді кисню та органічних речовин, що легко окислюються (розкладаються) мікроорганізмами (модель РК-БСК);
- модель динаміки біогенних елементів, яка враховує вплив азоту і фосфору на інтенсивність процесів первинної продукції органічної речовини (фотосинтезу) та на процеси евтрофікації і гіперевтрофікації («цвітіння» води) у водосховищах, озерах і лиманах в різні сезони року.

Метою розроблення математичних моделей різних гідрофізичних, гідрохімічних і гідробіологічних процесів, як правило, є розв'язування складнішого завдання — побудови ефективних універсальних імітаційних математичних моделей, за допомогою яких у діалоговому режимі з комп'ютером можна здійснювати числові експерименти з метою вивчення, оцінювання і прогнозування різних можливих ситуацій і умов функціонування водних екосистем та їх впливу на якість природних вод. За допомогою таких імітаційних експериментів (сценаріїв) можна не тільки аналізувати і прогнозувати стан і динаміку досліджуваних явищ, а також здійснювати екологічне та еколого-економічне обґрунтування альтернативних варіантів будівництва й експлуатації різних великих народногосподарських комплексів, насамперед ГЕС, ТЕС і АЕС.

Перед побудовою математичної моделі для опису гідроекологічних процесів необхідно впевнитися в доцільності застосування математичного моделювання при розв'язанні поставленої конкретної задачі. Для цього повинна бути визначена ціль і сформульовані основні завдання, необхідність розв'язання яких зумовлює застосування математичного моделювання. Однак неможливо побудувати універсальну математичну модель, за допомогою якої можна було б розв'язати всі або принаймні більшість задач, що виникають у тій чи іншій галузі знань, зокрема в гідроекології. Тому доцільно будувати (розробляти) математичну або імітаційну модель у такий спосіб, щоб її окремі блоки (компоненти) мали більш-менш універсальну структуру і могли змінювати свій вигляд залежно від конкретної задачі або конкретного типу задач. Для побудови таких, хоча і неуніверсальних, але досить загальних імітаційних математичних моделей найприйнятнішою є методологія, що ґрунтується на побудові багатокамерних багатокомпонентних математичних моделей. При цьому просторова неоднорідність реальних процесів і водного середовища моделюється за допомогою окремих ділянок (камер, компарментів), причому на кожній ділянці (у камері) характеристики середовища і процесів, які у ньому відбуваються, як правило, усереднюються, тобто основні характеристики вважають рівномірно розподіленими в просторі в межах ділянки (камери). Залежно від складності задачі таких камер може бути дві, три, п'ять і більше. Для математичного опису динаміки (зміни в часі) j -го показника в i -й камері використовують апарат теорії звичайних диференціальних рівнянь, алгебраїчні рівняння та інші математичні методи. Якщо необхідно врахувати неоднорідність процесу всередині камери, то залучають також апарат теорії диференціальних рівнянь у частинних похідних.

Сукупність процесів, що визначають стан досліджуваної водної екологічної системи, характеризується певними кількісними показниками, які при моделюванні цих процесів приймають як змінні або сталі величини.

Вибрані змінні і сталі величини (константи) повинні кількісно характеризувати стан і взаємозв'язки різних компонентів водної екосистеми (сталі величини у цьому разі називають параметрами моделі). Для кількісної характеристики абіотичних (неживих) процесів часто використовують концентрації c_{ij} j -ї речовини в i -й камері, а для описання біотичних (біологічних) процесів користуються біомасою B_{ij} або кількістю особин N_{ij} j -го виду гідробіонту в i -й камері. Потім на основі фундаментальних законів фізики, законів збереження речовини, енергії та інших, а також враховуючи основні закони фізико-хімічної кінетики, складають баланс колообігу речовин та енергії у визначеній водній системі. Сукупність (множину) одержаних балансових і кінетичних співвідношень між змінними c_{ij} , B_{ij} ($i = 1, 2, 3, \dots, n$; $j = 1, 2, 3, \dots, m$) і різними сталими (параметрами), як правило, записують у вигляді алгебраїчних, трансцендентних та диференціальних рівнянь. Ці рівняння є основою імітаційної математичної моделі, яка за допомогою програмного забезпечення для ЕОМ дає змогу в діалоговому режимі визначати (обчислювати), прогнозувати, оцінювати, аналізувати і програвати різні варіанти (сценарії) зміни в просторі й часі основних показників (характеристик) стану водних екосистем і якості води залежно від зовнішніх і внутрішніх факторів, що впливають на перебіг різноманітних гідрофізичних, гідрохімічних і гідробіологічних процесів.

Можливості математичного та імітаційного моделювання практично необмежені. Проте у сфері гідроекологічних досліджень застосування імітаційного математичного моделювання ще не надто поширене, хоча в цій галузі в останні роки опубліковано багато теоретичних і прикладних наукових праць, що стосуються екології і гідроекології зокрема.

2. Математичні моделі водного і гідрохімічного режимів ***Концептуальна модель водного і гідрохімічного режимів***

Якість води і стан прісноводних екосистем різних водних об'єктів (річок, водосховищ, лиманів, каналів та ін.) визначають за допомогою різних гідрохімічних, гідробіологічних та гідрофізичних показників. На їх динаміку впливають численні абіотичні і біотичні процеси, що відбуваються внаслідок взаємодії різних компонентів екосистеми із зовнішніми природними факторами і факторами антропогенного походження. Крім цього, на динаміку водного і гідрохімічного режимів чинять вплив внутрішньоводоймні процеси. Зокрема, переважання у водних екосистемах тих чи інших видів гідробіонтів (водних організмів) визначає напрям розвитку гідробіологічних процесів, які істотно впливають на формування якості води в водних об'єктах. Тому математичні та імітаційні моделі формування якості води в водоймищах за умов антропогенного впливу слід будувати (розробляти) з урахуванням взаємодії всіх основних факторів і процесів, що впливають на динаміку показників якості води, зокрема показників гідрохімічного режиму (рис. 1).

За допомогою математичних моделей можна визначати або прогнозувати динаміку кількісних показників (концентрацій) різних речовин (домішок, інгредієнтів), що впливають на водний і гідрохімічний режими водоймищ, на забруднення води токсичними та радіоактивними речовинами.

Під час аналізу умов формування водного і гідрохімічного режимів водоймищ визначають основні фактори, що істотно впливають на зміну концентрації певного інгредієнта. До таких факторів належать (рис. 2):

- зміна річкового стоку або попусків води через греблю ГЕС для водосховищ;
- вплив підземного стоку;
- надходження дренажних вод з гідромеліоративних систем;
- надходження води і забруднювальних речовин з площі водозбору у вигляді промислових і побутових стоків;
- седиментація завислих у воді частинок;
- скаламучування донних відкладів;
- безповоротне водоспоживання;
- трансформація речовин внаслідок фізико-хімічних, радіоактивних і біологічних перетворень;
- випаровування води з поверхні водоймищ та ін.



Рис. 2. Блок-схема факторів впливу на концентрацію забруднювальних речовин у водному середовищі

Для вивчення впливу кожного з цих факторів на водно-сольовий і гідрохімічний режими водних об'єктів необхідно використати основні фізичні, хімічні та біологічні закони, які зумовлюють розповсюдження у воді різних домішок (речовин), і побудувати математичну модель міграції, трансформації та накопичення в окремих компонентах водної екосистеми речовин, що потрапляють у поверхневі води суші з площі водозбору та з атмосферними опадами.

У теорії процеси перенесення речовин і тепла (енергії) описують т. зв. рівнянням конвективної дифузії (гідравлічної дисперсії або турбулентної дифузії). Це рівняння разом з рівняннями гідродинаміки та різними кінетичними рівняннями широко використовують при побудові конкретних математичних моделей процесів перенесення речовин та енергії в атмосфері та гідросфері.

Основними механізмами розповсюдження речовини в рухомому середовищі, зокрема у потоці поверхневих вод, є:

- 1) розчинення і перемішування речовини в потоці води і на його межі;
- 2) захоплення потоком води частинок речовини, що розчинились або перемішались в цьому потоці;
- 3) молекулярна або турбулентна дифузія речовин, спрямована на

вирівнювання концентрації певної речовини в стоячій або рухомій воді. При потраплянні у водойму частинки речовини розсіюються внаслідок молекулярної і турбулентної дифузії як у напрямку руху течії, так і в перпендикулярному до руху. Крім цього, частинки речовини захоплюються течією і розповсюджуються вздовж: потоку зі швидкістю, що дорівнює середній швидкості руху течії. Тому для точного математичного опису цього процесу необхідно знати швидкість руху течії та інтенсивність (коефіцієнт) турбулентної, а в стоячій воді — молекулярної дифузії. Обчислити середню швидкість руху течії можна на основі безпосередніх натурних вимірювань або за допомогою методів гідродинаміки. Значно складнішим є визначення або оцінювання коефіцієнта турбулентної (конвективної) дифузії. Проте і ця задача у разі гідроекологічних досліджень може бути розв'язана, якщо врахувати, що зміна значення коефіцієнта турбулентної дифузії в досить широкому діапазоні (від 10^{-3} до 10^2) мало позначається на кінцевих розрахунках розповсюдження забруднень у водних об'єктах, особливо в тих випадках, коли розглядають перенесення речовини у воді на великі відстані (сотні й тисячі метрів).

Побудова просторової і багатоканальної моделей

Спочатку слід розглянути математичні моделі з розподіленими параметрами, а потім перейти до простіших моделей, які будуть основою імітаційного моделювання. Компоненти (складові) вектора V середньої швидкості течії позначають через V_x, V_y, V_z , а коефіцієнти турбулентної дифузії в поздовжньому напрямку, що збігається з напрямком координатної осі абсцис Ox , в поперечному напрямку, що збігається з напрямком осі ординат Oy , та у вертикальному напрямку, що збігається з напрямком осі аплікат Oz , — відповідно через D_x, D_y і D_z . Отже, згідно із законом Фіка поздовжній потік речовини з концентрацією $c(x, y, z, t)$ визначається виразом $V_x c - D_x \frac{dc}{dx}$,

поперечний потік — $V_y c - D_y \frac{dc}{dy}$, а вертикальний потік — $V_z c - D_z \frac{dc}{dz}$.

Скориставшись законом збереження маси речовини, одержимо рівняння розповсюдження неконсервативних речовин у потоці рідини:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial c}{\partial x} - V_x c \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial c}{\partial y} - V_y c \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial c}{\partial z} - V_z c \right) - \alpha^* c + f(x, y, z, t), \quad (2.1) \end{aligned}$$

де α^* — стала (коефіцієнт) швидкості седиментації, $f(x, y, z, t)$ — член, що описує внутрішні джерела і стоки (неконсервативність, самоочисна здатність, трансформація, сорбція, десорбція та інші кінетичні процеси).

Для знаходження розв'язку рівняння (2.1) необхідно знати початкові й граничні умови, які можна задати в такому вигляді:

$$\begin{aligned} c(x, y, z, t_0) &= c(x, y, z), \\ c(x, y, z, t) \Big|_{x=x_1} &= c_1(y, z, t) \quad \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=x_2} = 0, \quad \frac{\partial c}{\partial n} = 0, \end{aligned}$$

де $x = x_1$ — абсциса вхідного поперечного перерізу потоку (верхній створ); $x = x_2$ — абсциса вихідного поперечного перерізу потоку (нижній, або

замикаючий, створ); n — зовнішня нормаль (перпендикуляр) до горизонтальної поверхні ложа і дзеркала потоку (водосховища, ріки, лиману та ін.).

Якщо на поверхню потоку (дзеркало водоймища) разом з опадами потрапляє досліджувана речовина, то приймають таку умову:

$$\left[V_z c - D_z \frac{\partial c}{\partial z} \right]_{z=0} = c_{\text{оп}} q_{\text{оп}},$$

де $q_{\text{оп}}$ — кількість атмосферних опадів, що випадає на одиницю площі дзеркала водної поверхні; $c_{\text{оп}}$ — концентрація речовини, що міститься в атмосферних опадах.

Якщо забруднювальна речовина (сіль) надходить з дна водоймища, зокрема при інфільтрації підземних вод, то на межі з дном можна обрати одну з таких умов:

$$c(x, y, h_s, t) = c_\phi; \quad \left[V_z c - D_z \frac{\partial c}{\partial z} \right]_{z=h_s} = c_\phi v_\phi, \quad (2.5)$$

де C_ϕ — концентрація солей у підземних водах; v_ϕ — вертикальна складова швидкості фільтрації підземних вод; h_s — глибина водоймища.

Отже, при відомих величинах $V_x, V_y, V_z, D_x, D_y, D_z, \alpha^*, f(x, y, z, t)$ питання про розподіл у просторі й часі речовини, що мігрує у водному середовищі, зводиться до розв'язку рівняння (2.1) з початковими і граничними умовами (2.2)-(2.5). Існує багато аналітичних, чисельно-аналітичних і чисельних методів розв'язування крайових задач типу (2.1)—(2.5), що описують процес масопереносу, зокрема задач масопереносу, які описують міграцію речовин у фільтраційних підземних потоках. Для екологічних досліджень моделювання розповсюдження (міграції) речовин у відкритих потоках (поверхневих водах) за допомогою наведених диференціальних рівнянь не надто ефективно. Хоча на базі цієї моделі і можна створити імітаційну модель формування гідрохімічного режиму в різних водоймах, але її створення пов'язане зі значними математичними (обчислювальними) труднощами. Для інженерних екологічних розрахунків не потрібна детальна інформація про розподіл концентрацій забруднень у кожній точці водоймища. Крім того, точність такої інформації була б невеликою, бо неможливо точно визначити локальні швидкості течії, значення коефіцієнтів турбулентної дифузії та інші величини, що входять в рівняння і граничні умови (2.1)-(2.5).

При побудові імітаційної математичної моделі гідрохімічного і водного режимів, як правило, використовують досить прості математичні методи. Зокрема, для спрощення рівняння (2.1) вдаються до зменшення його вимірності шляхом осереднення шуканих величин (концентрацій, швидкостей тощо) за однією або двома просторовими координатами, а інколи і за всім досліджуваним простором (по всій ділянці). Вертикальне осереднення по координаті z зводить це рівняння до двовимірної «планової» моделі, яку застосовують для дослідження широких, але неглибоких водоймищ (наприклад, водосховищ і лиманів). Осереднення в поперечному напрямку, тобто по координаті y , зводить дане рівняння до двовимірної профільної моделі, яка застосовується для вивчення вузьких і глибоких водоймищ (стратифіковані глибокі і неширокі озера та естуарії тощо). Осереднення величин у

вертикальному і поперечному горизонтальному напрямкам зводить просторову модель до одновимірної нестационарної математичної моделі, яку найчастіше застосовують для визначення характеристик річок і вузьких водосховищ та озер, де відбувається ретельне перемішування речовин (домішок) як по глибині, так і в поперечному горизонтальному напрямку до руху течії. Якщо осереднюються шукані характеристики в часі, одержують стаціонарні моделі, які можна застосовувати на невеликих проміжках часу (порівняно зі швидкістю протікання досліджуваних процесів). Нарешті, якщо осереднення відомих і невідомих величин (характеристик) відбувається по всьому просторі (по всій ділянці водного об'єкта), то можна побудувати нульвимірну, тобто камерну, математичну (імітаційну) модель.

Розроблення імітаційної математичної моделі здійснюють шляхом безпосередньої побудови камерної (нульвимірної) моделі на основі просторового осереднення процесів і складання балансових рівнянь у деякій виділеній області G . Якщо область G досить велика порівняно з масштабами процесів, що в ній відбуваються, і в цій області спостерігається значна неоднорідність розподілу значень досліджуваних показників (наприклад, концентрація радіонуклідів), то в даному випадку вся область (ділянка) G розбивається на підобласті $G^i = 1, 2, 3, \dots, n$ і кожна підобласть G^i приймається за окрему «камеру» (реактор). Зв'язок між цими камерами, як правило, описують через водообмін та масообмін. Унаслідок побудови таких багатокамерних моделей з достатньою для практики точністю можна математично описувати процес розповсюдження і трансформації речовин у просторі й часі, причому в просторі — дискретно, а в часі — неперервно.

Для складання балансових рівнянь і побудови імітаційної математичної моделі гідрохімічного і водного режимів розбивають водний об'єкт на n камер і вводять для кожної i -ї камери $i = 1, 2, 3, \dots, n$ такі змінні й сталі величини:

1) q^i, c^{ij} — загальна витрата або потік води з i -ї камери в $(i + 1)$ -шу камеру і концентрація j -ї речовини (солей, радіонуклідів, токсикантів, біогенів) в i -ї камері;

2) $q^{i-1}, c^{i-1,j}$ — потік (витрата) води з $(i - 1)$ -ї в i -ту камеру і концентрація в $(i - 1)$ -й камері j -ї речовини;

3) q_k^i, c_k^{ij} — потік (витрата) води з k -ї притоки (каналу) в i -ту камеру і концентрація в ній j -ї речовини, причому $k = 1, 2, 3, \dots, n$;

4) $q_{\phi}^i, c_{\phi}^{ij}$ — фільтраційна витрата підземних вод і концентрація в них j -ї речовини (солей);

5) $q_{\text{оп}}^i, c_{\text{оп}}^{ij}$ — кількість (потік) опадів, що випадають на водне дзеркало j -ї камери (ділянки) і концентрація в ній j -ї речовини;

6) $q_{\text{бв}}^i$ — величина (витрата) беззворотного водоспоживання;

7) $q_{\text{вип}}^i$ — величина (потік) випаровування з поверхні водного дзеркала $(i - 1)$ -ї камери;

8) $m_{\text{дн}}^{ij} (c_{\text{дн}}^{ij}, c_{\text{дн}}^j)$ — кількість (потік) j -ї речовини, що надходить у i -ту камеру з дна, в якому міститься дана речовина (сіль) з концентрацією $c_{\text{дн}}^{ij}$;

9) α^{ij}, λ^j — стала (константа) швидкості седиментації і стала (коефіцієнт) хімічного, біологічного або радіоактивного розпаду;

10) $W^i(t), W_0^i$ — об'єм i -ї камери (водної товщі i -ї ділянки водоймища) в

момент часу t і початковий момент $t = t_0$;

11) $F^{ij}(c^{ij}, c_{гб}^{ij}, t)$ — величина (функція), що враховує масообмін j -ї речовини з водним середовищем та гідробіонтами i -ї камери;

12) t — час у добах (або в місяцях, сезонах).

Відповідно до законів збереження маси j -ї речовини та враховуючи закони кінетики перетворення (трансформації) j -ї речовини, записують диференціальне рівняння в такому вигляді:

$$\begin{aligned} \frac{dM^{ij}}{dt} = & q^{i-1}c^{i-1,j} + \sum_{k=1}^{n_i} q_k^i c_k^{ij} + q_\phi^i c_\phi^{ij} + q_{оп}^i c_{оп}^{ij} + m_{дн}^{ij}(c^{ij}, c_{дн}^{ij}, t) - \\ & - (q^i + q_{бв}^i)c^{ij} - (\alpha^{ij} + \lambda^j)W^i c^{ij} - \\ & - F^{ij}(c^{ij}, c_{гб}^{ij}, t), \quad i = 1, 2, 3, \dots, n, \end{aligned} \quad (2.6)$$

де масу j -ї речовини можна виразити через об'єм води і концентрацію в ній цієї речовини:

$$\begin{aligned} M^{ij}(t) = & c^{ij}(t)W^i(t) = c^{ij}(t) \left\{ W_0^i + \right. \\ & \left. + \left(q^{i-1} + \sum_{k=1}^{n_i} q_k^i + q_\phi^i + q_{оп}^i - q^i - q_{бв}^i - q_{вип}^i \right) t \right\} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Враховуючи це співвідношення, рівняння (2.6) записують відносно невідомої концентрації c^{ij} речовини, що забруднює воду i -го водного об'єкта:

$$\begin{aligned} \frac{dc^{ij}}{dt} = & \frac{1}{W^i} \left(q^{i-1}c^{i-1,j} + \sum_{k=1}^{n_i} q_k^i c_k^{ij} + q_\phi^i c_\phi^{ij} + q_{оп}^i c_{оп}^{ij} + m_{дн}^{ij}(c^{ij}, c_{дн}^{ij}, t) - \right. \\ & \left. - \left(q^i + q_{бв}^i + \frac{dW^i}{dt} \right) c^{ij} \right) - (\alpha^{ij} + \lambda^j)c^{ij} - \\ & - f^{ij}(c^{ij}, c_{гб}^{ij}, t), \quad i = 1, 2, 3, \dots, n. \end{aligned} \quad (2.8)$$

До рівняння (2.8) необхідно додати рівняння водного балансу відносно i -ї камери:

$$\frac{dW^i}{dt} = q^{i-1} + q_\phi^i + \sum_{k=1}^{n_i} q_k^i + q_{оп}^i - q^i - q_{бв}^i - q_{вип}^i. \quad (2.9)$$

При сталих величинах q^{i-1} , q_ϕ^i , q_k^i , $q_{оп}^i$, q^i , $q_{бв}^i$, $q_{вип}^i$ після інтегрування (2.9) одержують таке рівняння водного балансу:

$$W^i = W_0^i + \left(q^{i-1} + q_\phi^i + \sum_{k=1}^{n_i} q_k^i + q_{оп}^i - q^i - q_{бв}^i - q_{вип}^i \right) t \quad (2.10)$$

Якщо величини $c^{i-1,j}$, c_ϕ^i , c_k^i , $c_{оп}^{ij}$ також сталі або кусково-сталі, а $m_{дн}^{ij} = f^{ij} = \alpha^{ij} = \lambda^j = 0$, то після інтегрування рівняння (2.8) одержимо формулу для визначення концентрації c^{ij} забруднень у такому вигляді:

$$c^{ij}(t) = c^{ij*} + (c_0^{ij} - c^{ij*}) \left(\frac{W_0^i}{W^i(t)} \right)^{\frac{q_{вип}^i}{q_{вип}^i - q_{бв}^i}}, \quad (2.11)$$

де $q_{вип}^i = q^{i-1} + \sum_{k=1}^{n_i} q_k^i + q_\phi^i + q_{оп}^i$; $q_{вип}^i = q^i + q_{бв}^i + q_{вип}^i$;

c^{ij*} - значення рівноважної концентрації (рівноважної величини), що визначається рівністю

$$c^{ij*} = \frac{q^{i-1}c^{i-1,j} + q_{\Phi}^i c_{\Phi}^{ij} + \sum_{k=1}^{n_i} q_k^i c_k^{ij} + q_{\text{он}}^i c_{\text{он}}^{ij} + m_{\text{дн}}^{ij}}{q^{i-1} + q_{\Phi}^i + \sum_{k=1}^{n_i} q_k^i + q_{\text{он}}^i - q_{\text{вип}}^i}, \quad (2.12)$$

Якщо рівень води в i -й камері (річці, водосховищі або озері) не змінюється або змінюється мало і цією зміною можна знехтувати, то формула визначення концентрації забруднень стає особливо простою.

У такому разі формулу визначення концентрації забруднення записують для неконсервативної речовини ($\alpha^{ij} \neq 0$, $\lambda^j \neq 0$) при $f^{ij}(c^{ij}, c_{\text{гб}}^{ij}, t) = 0$ в такому вигляді:

$$c^{ij}(t) = c_{\beta}^{ij*} + (c_0^{ij} - c_{\beta}^{ij*}) \exp\left(-\frac{1 + \beta^{ij}\tau_0^i}{\tau_0^i} t\right), \quad (2.13)$$

де

$$c_{\beta}^{ij*} = \frac{q^{i-1}c^{i-1,j} + q_{\Phi}^i c_{\Phi}^{ij} + \sum_{k=1}^{n_i} q_k^i c_k^{ij} + q_{\text{он}}^i c_{\text{он}}^{ij} + m_{\text{дн}}^{ij}}{(1 + \beta^{ij}\tau_0^i) \left(q^{i-1} + q_{\Phi}^i + \sum_{k=1}^{n_i} q_k^i + q_{\text{он}}^i - q_{\text{вип}}^i \right)}, \quad (2.14)$$

$$\tau_0^i = \frac{W_0^i}{q^{i-1} + q_{\Phi}^i + \sum_{k=1}^{n_i} q_k^i + q_{\text{он}}^i - q_{\text{вип}}^i}, \quad \beta^{ij} = \alpha^{ij} + \lambda^j. \quad (2.15)$$

Така модель дасть змогу ефективно застосовувати математичне моделювання до прогнозування гідрохімічного і водного режимів різних водних об'єктів, як річок, так і водосховищ.

ЗАВДАННЯ: опрацювати питання та законспектувати їх у зошит.

Лекція 4. Моделі процесів самоочищення води у природі

1. Прості балансові моделі
2. Стохастичні моделі та моделі типу "чорний ящик"
3. Моделі самоочищення води в природі
4. Ієрархічний підхід до керування якістю води.
5. Модель води «AQUATOX»

1. Прості балансові моделі

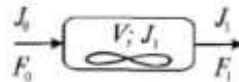
При моделюванні очищення стічних вод розрізняють:

- динамічні прониеси (що залежать від часу явно);
- стаціонарні (усталені) процеси.

Балансові моделі будуються на основі рівняння балансу. Рівняння балансу, по суті, являє собою математичний (формалізований) запис закону збереження речовини.

Як приклад побудови балансової моделі, розглянемо процес додавання інертної речовини (мітки) у реактор за умови неперервної розмішування розчину в реакторі.

Нехай V — об'єм реактора, J_0 — концентрація речовини в розчині, що притікає в реактор; J_1 - концентрація речовини в стічному розчині; F — швидкість притоку і стоку, відповідно (в одиницях об'єм/час).



Оскільки розчин у реакторі перемішується, його можна охарактеризувати одним і тим самим значенням J_1 для кожної точки реактора. Очевидно, що значення концентрації речовини в реакторі збігається з його значенням у стоці (умова ідеального перемішування). У загальному випадку умова балансу запишеться у такому вигляді:

$$\begin{aligned} V \frac{dJ_1}{dt} = & [\text{приріст за рахунок притоку}] - \\ & - [\text{втрати за рахунок витоку}] + \\ & + [\text{приріст за рахунок реакції в реакторі}] - \\ & - [\text{втрати за рахунок реакції в реакторі}]. \end{aligned}$$

Останні два доданки присутні тоді, коли дана речовина є реагентом або ж, навпаки, продуктом реакції, що протікає в реакторі. Якщо речовина - це індикатор (мітка), то вона не бере участі в реакції, отже, останні два доданки дорівнюють нулю. Тоді.

$$V(t) \frac{dJ_1}{dt} = F_0 J_0 - F_1 J_1, \quad (12.22)$$

Якщо об'єм рідини в реакторі сталий (K -const), тоді необхідною умовою є рівність $F_0 = F_1 = F$ і тоді:

$$\frac{dJ_1}{dt} = \frac{F}{V} (J_0 - J_1). \quad (12.23)$$

Це динамічна модель. У стаціонарній моделі:

$$\frac{dJ_1}{dt} = 0 \Rightarrow J_0 = J_1. \quad (12.24)$$

Стаціонарна модель найчастіше не реалістична, адже вона не відбиває коливання J_0 у притоку

2. Стохастичні моделі та моделі типу "чорний ящик"

Один зі способів класифікації математичних моделей базується на ступені їх детермінованості. *Детермінованими* називаються моделі, входи, виходи і параметри яких жорстко зв'язані між собою, тобто заданим значенням параметрів входу відповідає строго визначене значення параметру виходу.

Стохастичні моделі враховують деяку невизначеність взаємозв'язку входу і виходу при заданих значеннях параметрів, тобто одним і тим самим значенням вхідних параметрів можуть відповідати з деякою імовірністю різні значення вихідних параметрів.

При побудові стохастичних моделей використовують методи математичної статистики.

На практиці моделі з елементами стохастичного підходу більш адекватні реальності, оскільки природні явища залежать від величезного числа впливових факторів, які неможливо врахувати детерміновано всі разом. Наприклад, якщо треба розрахувати вплив очисних споруд на стан річки, то в цьому аналізі вирішальне значення має врахування засушливих періодів, коли рівень води в річці найнижчий, а потік води найменший. Саме в такі періоди вплив стічних вод буде максимальним. У цьому випадку розраховують імовірність низької витрати води в річці за статистичними даними попередніх періодів.

Моделі типу «чорний ящик» будуються в рамках припущення про повну відсутність інформації про процеси в системі. У цих моделях зв'язуються значення вхідних і вихідних величин, найчастіше за допомогою формальних причинно-наслідкових зв'язків, що не базуються на якому-небудь фізико-хімічному чи біохімічному механізмі. Часто для побудови таких моделей використовується статистичний підхід (аналіз статистичних даних на предмет кореляції входу і виходу).

3. Моделі самоочищення води в природі

Вода здатна очищатися самостійно від присутніх у ній забруднень внаслідок протікання різних процесів, які в сукупності називаються самоочищенням воли в природі.

Фактори самоочищення поділяють на такі види:

- фізичні;
- хімічні;
- біологічні.

а) Фізичними факторами є: розчинення, осадження, розведення, перемішування, вплив випромінювання.

Наприклад у зоні помірного клімату самоочищення води від забруднення відбувається на 200-300 км нижче за течією від джерела забруднення внаслідок дії УФ променів, що і нищівними для органічних бактерій, спор, вірусів.

б) Хімічні фактори: окислювання органічних і мінеральних забруднень; вони визначаються за БСК (біологічним споживанням кисню). ХСК (хімічним споживанням кисню) або за загальним вмістом органіки.

в) Біологічні фактори: рослинний і тваринний світ, що бере участь самоочищенні. Наприклад, нафтопродукти можуть розкладатися за допомогою деяких бактерій — мікрофлори, при цьому у воді утворюється маса органічних речовин — фенолів, ароматичних сполук, нафтолів. Швидкість біологічного самоочищення залежить від особливостей екосистеми та характеру і сили забруднення. При перевищенні ГДК екосистема гине, а самоочищення припиняється.

Рівняння самоочищення має вигляд:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -kC^N \quad (12.25)$$

де C — концентрація забруднення; k — швидкість реакції на одиницю концентрації речовини; N — порядок реакції.

Реакція має перший порядок ($N = 1$), наприклад, якщо в ній бере участь одна речовина або якщо значний надлишок другого реагенту. Такий порядок має реакція очищення в аеротенках або річках зі структурою потоку ідеального перемішування, коли самоочищення досягається за рахунок поступового розбавлення забрудненої води чистою. Так, для рівнинної річки, площа перерізу якої зростає вниз за течією приблизно за лінійним законом ($S \propto z$) константа $k \sim V_z/z$, де V_z — швидкість течії; її типовим значенням є: $k \sim 10^{-6} \dots 10^{-5} \text{с}^{-1}$. Закон самоочищення при $N=1$ має вигляд експоненти:

$$C = C_0 \exp(-kt).$$

Реакція з $N=2$ йде в аеротенках зі структурою потоку ідеального витіснення. Закон очищення у цьому разі має вигляд гіперболи:

$$C = C_0 / (1 + C_0 kt).$$

4. Ієрархічний підхід до керування якістю води.

Керування якістю води здійснюється на основі прогнозування наслідків оперативного технологічного втручання у ході її очистки. Особливість такого керування полягає в тому, що при відповідному моделюванні пронесу стосовно регіональних водних систем розмаїття форм таких систем і шляхів їхнього використання спричинює множинність моделей, що задовольняють поставленим вимогам. Ці моделі можуть бути як взаємодоповнюючими, так і несумісними (тобто такими, що взаємно виключають одна одну).

Отже, одна із задач при ухваленні керівного рішення полягає у виборі оптимальної моделі з погляду на її вартість та обсяги розв'язуваних проблем.

Для оцінки великого числа альтернативних можливостей використовують принцип ієрархії моделей. Для моделей якості води існує трирівнева ієрархія:

- планувальні моделі;
- проектувальні моделі;
- оперативні моделі.

Планувальні моделі розробляються для оцінки вартості принципових рішень (не включаючи подробиць цих рішень). Це обмежує терміни і вартість таких проектів.

Проектувальні моделі будуються на базі моделей, відібраних із загального числа планувальних, що дають найбільш дешеві рішення. Ці моделі розробляють

більш ретельно, проробляючи дані рішення з аналізом довгострокових перспектив одержання потрібної якості води.

Оперативні моделі будуються на базі проєктувальних моделей, відібраних із загального числа таких моделей. На основі оперативних моделей, що включають докладний аналіз прийнятих рішень, будується стратегія керування якістю води.

5. Модель водних систем «AQUATOX»

AQUATOX є імітаційною моделлю водних систем, що дозволяє прогнозувати поведінку різних забруднюючих, поживних, органічних й хімічних речовин і їх вплив на екосистеми, у тому числі риб, безхребетних і водних рослин. Ця модель є цінним інструментом для екологів, біологів, і всіх, хто займається виконанням екологічних оцінок ризику для водних екосистем.

AQUATOX відрізняється від більшості моделей якості води тим, що є моделлю екосистеми. В той час як інші моделі включають мало біологічних компонентів, або взагалі їх не включають. Вона включає в себе не тільки численні види рослин, безхребетних і риб, а й відображає взаємодію біоти з хімічною / фізичною системами. Як згадувалося вище, AQUATOX це *процес-орієнтована модель*, на відміну від *емпіричної моделі*, які часто засновані на статистичних залежностей. Емпіричні моделі можуть встановити, що кореляції між змінними існують, але не пояснюють чому.

В AQUATOX для моделювання використовуються наступні екологічні компоненти:

- фітопланктон (кілька видів);
- перифітоном і підводна водна рослинність (кілька видів);
- планктонні і донні безхребетні (кілька видів);
- корми, придонні риби (кілька видів);
- поживні речовини і розчинений кисень;
- органічні і неорганічні відкладення;
- токсичні органічні та хімічні речовини (до 2.0 різних хімічних речовин одночасно);
- поверхнево-активні речовини.

В AQUATOX представлені наступні водні екосистеми:

- Озера і ставки (може бути вертикальною стратифікацією);
- Резервуари (може бути вертикальною стратифікацією);
- Річки і струмки;
- Естуарії (на скринінг рівні);
- Експериментальні ставки ("мезокосму")

AQUATOX явно імітує численні біологічні та екологічні процеси та прогнозує в навколишньому середовищі екологічні наслідки різних екологічних стресів.

Біологічні ефекти

- Фотосинтез;
- Споживання продуктів харчування;
- Ріст і розмноження;
- Природну смертність;
- Летальну і сублетальну дозу токсичності органічних речовин, аміаку та низького вмісту розчиненого кисню;

- Трофічні взаємодії;
- Зміни в біологічних популяціях в мінливих умовах навколишнього середовища;

- Відторгнення перифітоном з-за високої швидкості потоку

У навколишньому середовищі

- Кругообіг поживних речовин і кисню;
- Вихід фосфору з анаеробних відкладень;
- Кальцит опадів і видалення фосфору в лужних умовах;
- Розбиття органічних токсикантів у воді, біоти і донних відкладень;
- Токсичні хімічні перетворення

AQUATOX має безліч потенційних застосувань до питань управління водними ресурсами та програмами, включаючи якість води, а також екологічної оцінки ризику водних систем. AQUATOX можуть бути використані для прогнозування екологічної відповіді на пропоновані альтернативи управління.

ЗАВДАННЯ:

- 1) опрацювати питання та законспектувати їх у зошит;
- 2) ознайомитись з роботою програми визначення якості води WASP.